



XXX
CONGRESO ANUAL de la
Sociedad Nuclear Mexicana

4 - 7 AGOSTO | 2019 | Monterrey, Nuevo León



Sociedad Nuclear Mexicana

Suplemento

Aplicaciones pacíficas de la **energía nuclear** en beneficio de México

Ingenierías

ISSN 1405-0676

85

Fusión - Fisión Nuclear

- ① Solución Bateman
- ① Termohidráulica del reactor
- ① Reactores modulares pequeños
- ① Código Montecarlo como código de transporte

Suplemento en línea “Aplicaciones pacíficas de la energía nuclear en beneficio de México”

EDITORES

Max Salvador Hernández
Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica
Grupo de Investigación en Fusión

Roberto Carlos Lopez Solis
Instituto Nacional de Investigadores Nucleares

DIRECTORIO REVISTA INGENIERIAS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

Mtro. Rogelio G. Garza Rivera
Rector

Dr. Santos Guzmán López
Secretario General

Mtra. Emilia Edith Vásquez Farías
Secretario Académico

Dr. Celso José Garza Acuña
Secretario de Extensión y Cultura

Lic. Antonio Ramos Revillas
Director de Editorial Universitaria

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

Dr. Jaime A. Castillo Elizondo
Director

Dr. Juan Antonio Aguilar Garib
Editor responsable

M.C. Cyntia Ocañas Galván

Dr. Jesús G. Puente Córdova
Redacción

Gregoria Torres Garay
Tipografía y formación

M.A. José Luis Martínez Mendoza
Diseño

Ing. Cosme D. Cavazos Martínez
Webmaster

René de la Fuente Franco
Impresor

Arantxa Rodríguez Morales, Daniela Alejandra Gutiérrez Dimas,

Javier Ruiz Véliz, José Gerardo Garza Guerra,

Leonardo Treviño Arrambide, Mariana Olivares Ramos

Auxiliares

Contenido

Octubre-Diciembre de 2019, Año XXII, No. 85

1-20 Implementation of a thermal-hydraulic module in AZKIND for steady-state coupled calculations

Andrés Rodríguez Hernández, Daniel Ramos Velázquez and Armando, Gómez Torres

21-32 Study on the effect of the burning cycle length on a breed and burn reactor

Roberto Carlos Lopez-Solis

33-44 Comparación de los resultados de los códigos ORIGEN y SNF aplicados a un combustible BWR 8x8

José-Luis Montes-Tadeo, Eduardo Martínez Caballero,
Raúl Perusquía, Rogelio Castillo Durán

45-50 Generación y quemado de actínidos menores en flujo rápido de neutrones

J. Ramón Ramírez Sánchez, Javier Palacios H., Gustavo Alonso V., Eduardo Martínez C.

51-62 Implementación del método de descomposición en dominios en AZTRAN

Julián A. Duran González, Edmundo del Valle Gallegos

63-76 Neutronic study of the NuScale core with different accident tolerant fuels

Sadiel Pino-Medina and Juan-Luis François

77-88 Cálculo de actividad del combustible de un BWR

José-Luis Montes-Tadeo, Javier Ortiz Villafuerte, Raúl Perusquía, José Luis Hernández Martínez

89-102 Uso del ácido fítico para la inmovilización de actínidos

Almazán Torres M.G., Ordoñez Regil E., Tovar Valdín G., Cruz González J. G.

103-112 Evaluación de riesgos por actividad gamma ambiental en suelos mediante espectrometría in situ

Anahid Zharazan López Espinosa, Carlos Ríos Martínez; Daniel Hernández Ramírez, Fernando Mireles García

113-124 Diseño y construcción de una fuente de iones por medio de un reactor de plasma

Arón Hernández Trinidad, G. H. I. Maury Cuna, M. C. García Castañeda

125- 134 Rayos X provenientes de equipos odontológicos inducen cambios en la viabilidad celular, expresión de Hsp70 y caspasa-8 en leucocitos humanos

Jennifer Ortiz Letechipia, David Alejandro García López, Consuelo Letechipia de León, Héctor René Vega Carrillo, Sergio Hugo Sánchez Rodríguez.

135-140 Influencia de la temperatura en la producción de TiO₂ como adsorbente en el generador ⁹⁹Mo/^{99m}Tc

Frida G. Guadarrama Avilés, Verónica E. Badillo Almaraz

141-152 Evaluación del efecto dosimétrico debido a la reducción de tejido en pacientes con cáncer cervicouterino

María Guadalupe Valdez Arteaga, Fernando Mireles García, Carlos Ríos Martínez, J. Ignacio Dávila Rangel, José Luis Pinedo Vega, Sonia Azucena Saucedo Anaya

153- 166 Estudio estructural del ZrSiO₄ expuesto a altas dosis de radiación gamma

Escalante Gutiérrez D.C., Ortiz Landeros J., Ordoñez Regil E. y Almazán Torres M.G.

167-178 Dinámica de la solidificación de material fundido en el fondo de la vasija de un reactor durante un accidente severo

Marco A. Polo, Heriberto Sánchez Mora, Sergio Quezada García, Javier Ortiz Villafuerte

179-194 Modelo promedio volumétrico de temperaturas para un reactor nuclear de sales fundidas

Zaira I. Jiménez-Balbuena, Gilberto Espinosa-Paredes, Alejandría D. Pérez-Valseca y Alejandro Vázquez-Rodríguez

195-210 Transferencia simultánea de calor y cantidad de movimiento en el núcleo de un reactor nuclear rápido enfriado con sodio

Luis Ángel Larios-Ramírez, Alejandría D. Pérez-Valseca, Alejandro Vázquez-Rodríguez y Gilberto Espinosa-Paredes

211-222 Acoplamiento y simulación de difusión neutrónica y termo-fluido en el reactor ELFR

Heriberto Sánchez Mora, Juan Luis François Lacouture, Sergio Quezada García, Marco A. Polo, Raimon Pericas

223-234 Término fuente durante la pérdida de potencia externa de un reactor de agua en ebullición

Rodolfo Amador García, Eduardo Martínez Caballero, Rogelio Castillo Durán, Jorge Viais Juárez y Javier Ortiz Villafuerte

235-248 Reactores modulares pequeños una opción para México

G. Mendoza, X. López

249-262 Análisis de la expansión del sistema eléctrico mexicano con reactores nucleares avanzados

Emilio Javier Yañez, Juan Luis François y Cecilia Martín del Campo

263-276 Plataforma de cálculo numérico y de diseño gráfico con aplicaciones en fusión

M. Salvador, R. M. Chávez, A. Aguilera, L.R. Hernández, A. Acosta, M. García, F. Sánchez, A. Aguilera

277-288 Diseño D-shaped para las bobinas toroidales en dispositivos de confinamiento magnético de fusión

M. Salvador, L. R. Hernández, J. González, S. Martínez, E. Chapa, G. M. Voryobov

289-300 Consideraciones generales sobre la cámara de vacío del Tokamak “T”

M. Salvador, L. R. Hernández, D.I. Sánchez, M.A Villarreal, J. González, S. Martínez, M. García, J.A. Guevara, E. Chapa, G.M. Vorobyov

301- 310 Dependencia de la fracción de neutrones retardados con la biblioteca ENDF-B7 y JEFF 3.1.1 en una celda BWR

Alejandro Campos Muñoz, Vicente Xolocostli Munguía, Armando Miguel Gómez Torres

311-328 Desarrollo de un algoritmo de cálculo simbólico para la resolución de las ecuaciones de decaimiento y transmutación de Bateman

Carlos Antonio Cruz López, Juan Luis François Lacouture

329-344 Simulación de arreglos nucleares experimentales críticos con el código Serpent

Dan Adrian Alba Montiel y Carlos Filio López

345-360 Desarrollo de un módulo de quemado para el código de transporte de neutrones “Gemma”

Hirepan Palomares Chávez y Gustavo Alonso Vargas, Samuel Vargas Escamilla, Guillermo Ibarra Reyes

361-374 Validation exercise of the domestic code AZNHEX through implementation of macroscopic neutron cross-sections generated by SERPENT

Lucero Arriaga-Ramírez, Roberto Lopez-Solis, Armando Gómez-Torres, Edmundo del-Valle-Gallegos

375-388 Desarrollo de códigos SPH para el estudio de transferencia de calor en el núcleo de reactores nucleares

Felipe de Jesús Pahuamba Valdez y Dra. Estela Mayoral Villa, Dr. Carlos Enrique Alvarado Rodríguez, Dr. Armando Miguel Gómez Torres, Dr. Edmundo del Valle Gallegos

389-398 Síntesis de fitatos de circonio para recuperar uranio en solución

Ordoñez Regil E., Almazán Torres M.G., Escalante Gutiérrez D.C., Ortiz Landeros J

399-414 Adsorción de U (VI) en caolinita

Ana Karen Cuevas Jaramillo, J. Ignacio Dávila Rangel, Hugo López del Río, Liliana Miranda Castro

415-422 Adsorción de uranio (VI) en clinoptilolita

Iván Rodríguez Acosta, J. Ignacio Dávila Rangel, Hugo López del Río

423- 432 Concentración de uranio en muestras de agua para su medida por espectrometría alfa

César A. Arévalo B., María G. Flores R., Hugo López del R. J. Ignacio Dávila R., Fernando Mireles G., José L. Pinedo V., Carlos Ríos M., Sonia A. Saucedo A

433-444 Simulación de un haz de electrones mediante el método partícula en celda y Monte Carlo

Lizárraga-Rubio Víctor Manuel, Ibarra-Armenta José Guadalupe y Valerio-Lizárraga Crithian Alfonso

445-460 Desarrollo de la fuente de pre-ionización por RF a 2.45 GHz para el Tokamak esférico: TEA-T

M. Salvador, A. Acosta, J. González, J. A. Guevara, G.M. Vorobyov

Implementation of a thermal-hydraulic module in AZKIND for steady-state coupled calculations

Andrés Rodríguez Hernández, Daniel Ramos Velázquez and Armando Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Ocoyoacac, México
1; ramos.velazquez.daniel@live.com; armando.gomez@inin.gob.mx

Miguel Ceceñas Falcón
Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias
Reforma 113, Palmira, Morelos. C.P. 62490
mcf@ineel.mx

Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas
Av. IPN s/n, Col. Lindavista, México, D. F., 07738
evalle@esfm.ipn.mx

Abstract

Up to the late 90s, the core models in TH system codes generally consisted of “Point Kinetics” (PK) models or 1D neutronic models, which were coupled to an average fluid-dynamic channel of the core region and a corresponding average heat-structure/fuel rod model. In most codes, the PK model was correlated to several parallel coolant channels and corresponding fuel rod models describing parts of the reactor core. These simplified neutronic models for core analysis can be expanded to full 3D models and coupled to TH and heat-structure models in the core region. Several strategies are nowadays implemented and under development to consider the thermal-hydraulic (TH) feedback. To get efficient coupling schemes, usually, the TH model can also be implemented using high-performance computing (HPC). In the case of AZKIND, a simplified coupling between the neutron kinetics (NK) model and a TH model was implemented for steady-state reactor core simulations with NK-TH feedback, for which NEMTAB formatted data introduce feedback effects as the TH variables are used to update nuclear data (cross sections). A brief description of the coupling together with a qualitative demonstration of the coupling is presented in this paper.

1. INTRODUCTION

The interest for multi-physics calculations started already more than three decades ago, and the result is a continuous improvement of the features and the performances of such calculations. As an example of the key role of these activities, several benchmarks have been defined in the

field of thermal-hydraulic and neutronic coupling with increasing success in terms of participation and of modeling level. Several ambitious projects are also launched such as NURESIM [1] in Europe, and in the United States, the Numerical Nuclear Reactor [2] and the Virtual Environment for Reactor Applications [3] to develop powerful simulation platforms for reactor multi-physics analysis. The main objectives are to enhance the prediction capability of computing to provide modern tools for nuclear engineering. Both safety and design subjects are concerned since the trend is now to use best-estimate approaches as much as possible in conjunction with sensitivity and uncertainty analysis. Nevertheless, to achieve industrial applications, validation of multi-physics simulation remains as an important issue since there are only a very few plant data representative of LWR transients. The following paragraphs encompass the important aspects of coupling neutron kinetic codes with thermal-hydraulic codes.

The simulation of NPPs and assessment of accident conditions requires 3D modeling of the reactor core to ensure a realistic description of physical phenomena, by utilizing accurate coupled (NK-TH) calculations for safety margins evaluation. The core models in TH system codes generally consist of “point kinetics” (PK) models [4] or 1D/2D/3D neutron-kinetics (NK) models. The research evolution of both neutron-kinetics and thermal-hydraulics can be seen in [5, 6, 7, 8, 9 y 10]; and many other developments around the world.

As summarized from reference [6], there are certain requirements to the NK-TH coupled codes that ought to be revised. The objective of these requirements is to provide accurate solutions in a reasonable amount of CPU time. These requirements are met by the development and implementation of six basic components of the coupling methodologies:

1. ways of coupling;
2. approach of the coupling;
3. spatial mesh overlays;
4. coupled time-step algorithms;
5. coupling numerics; and,
6. coupled convergence schemes.

These principles of the coupled simulations include issues associated with the development and use of appropriate neutron cross-section libraries for coupled code achieving a steady state or transient modeling of the reactor core. The six basic components were taken into account and implemented in AZKIND code for steady state (as initial approach) accordingly with the specific features of both, the neutron kinetics (NK) model and the thermal-hydraulic (TH) model.

2. AZKIND NEUTRON KINETICS MODEL

The computer code AZtlan KInetics in Neutron Diffusion, AZKIND, is part of the neutronic codes selected for their implementation in the AZTLAN Platform [11]. The original code known as NRKin3D was a master's degree project [12]. In this section, a brief description of the numerical models implemented in the code is presented.

2.1. Neutron Kinetics equations in multi-groups

The multi-group diffusion equations for G energy groups and I_p delayed neutron precursors are as follows [13]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v^g} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\vec{r}, t) &= \nabla \cdot D^g \nabla \phi^g(\vec{r}, t) - \Sigma_R^g(\vec{r}, t) \phi^g(\vec{r}, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, t) \phi^{g'}(\vec{r}, t) \\ &+ (1 - \beta) \chi^g \sum_{g'=1}^G v^{g'}(\vec{r}, t) \Sigma_f^{g'}(\vec{r}, t) \phi^{g'}(\vec{r}, t) + \sum_{i=1}^{I_p} \chi_i^g \lambda_i C_i(\vec{r}, t); \end{aligned} \quad (1)$$

$g = 1, \dots, G; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T];$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C_i(\vec{r}, t) &= \beta_i \sum_{g=1}^G v^g(\vec{r}, t) \Sigma_f^g(\vec{r}, t) \phi^g(\vec{r}, t) - \lambda_i C_i(\vec{r}, t); \end{aligned} \quad (2)$$

$i = 1, \dots, I_p; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T];$

Where each one of the parameters involved have the customized meaning and use in nuclear reactor physics.

2.1.1. Spatial discretization

The spatial discretization of equations (1) and (2) is closely linked to the discretization of the reactor volume Ω . Thus, by representing the flux of neutrons and the concentration of precursors in terms of a spatial base as a linear combination of functions u_k and v_m defined over Ω , it is possible to write:

$$\begin{aligned} \phi^g(\vec{r}, t) &\equiv \sum_{k=1}^{N_f} u_k(\vec{r}) \phi_k^g(t); \quad g = 1, \dots, G; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T]; \\ C_i(\vec{r}, t) &\equiv \sum_{m=1}^{N_p} v_m(\vec{r}) C_i^m(t); \quad i = 1, \dots, I_p; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T]; \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{v^g} \mathbf{M}_f \frac{d}{dt} \phi^g(t) &= -\mathbf{K}^g \phi^g(t) - \sum_{g=1}^G \mathbf{S}^{g' \rightarrow g} \phi^{g'}(t) \\ &+ (1 - \beta) \chi^g \sum_{g=1}^G \mathbf{F}^{gg'}(t) \phi^{g'}(t) + \sum_{i=1}^{I_p} \mathbf{F}^{gi}(t) C_i(t), \\ g &= 1, \dots, G; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T]; \end{aligned} \tag{4}$$

Substituting expressions (3) and (4), into (1) and (2), and applying the Galerkin process for spatial discretization, as described in [12], the resulting algebraic system of equations can be expressed in matrix notation as follows:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v^g} \mathbf{M}_f \frac{d}{dt} \phi^g(t) &= -\mathbf{K}^g \phi^g(t) - \sum_{g=1}^G \mathbf{S}^{g' \rightarrow g} \phi^{g'}(t) \\ &+ (1 - \beta) \chi^g \sum_{g=1}^G \mathbf{F}^{gg'}(t) \phi^{g'}(t) + \sum_{i=1}^{I_p} \mathbf{F}^{gi}(t) C_i(t), \\ g &= 1, \dots, G; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T]; \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_p \frac{d}{dt} C_i(t) &= \sum_{g=1}^G \mathbf{P}^{ig'}(t) \phi^{g'}(t) - \lambda_i \mathbf{M}_p C_i(t), \\ i &= 1, \dots, I_p; \quad \forall (\vec{r}, t) \in \Omega \times (0, T]; \end{aligned} \tag{6}$$

where

$$\phi^g(t) = [\phi_1^g(t), \dots, \phi_{N_f}^g(t)]^T \quad \text{and} \quad C_i(t) = [C_i^1(t), \dots, C_i^{N_p}(t)]^T$$

All the matrix components are described with detail in [12].

Figure 1 shows a three-dimensional domain Ω with volume V of a reactor partitioned with a specific 3D-mesh, and the Figure 2 is the representation of local cell Ω_e of volume V_e from the reactor core that could be in the inner part of the region Ω or be in the boundary cells of the partitioned reactor. The solution of the neutron kinetics equations must satisfy continuity conditions for contiguous cells Ω_e , and boundary conditions, because for inner cells there may be adjoin neighboring cells or at least one of its faces is part of the boundary of the solution domain Ω .

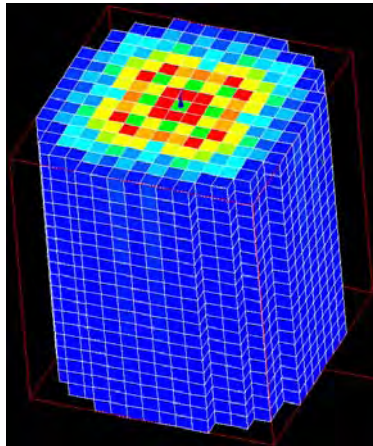


Figure 1. Discretization of reactor volume Ω

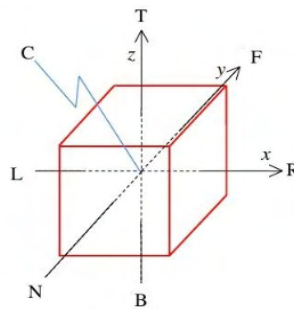


Figure 2. Local node Ω_e .

A particular nodal finite element (NFE) is characterized by the fact that for each cell (node) the function unknowns to be determined are the (00) Legendre moment (average) of the unknown function over each face of the node and the (000) Legendre moment over the cell volume.

Figure 1 shows a physical domain Ω represented graphically after generating an xyz mesh. For each node in the mesh Figure 2 shows a cuboid-type cell with directions through the faces: (x) Right, Left; (y) Near, Far; (z) Top, Bottom; and C for the average of the function over the cell volume. Taking into consideration the general form to build up nodal schemes [14], the moments of a function (at edges and cell) over a node like the one shown in Figure 2 can be written for the nodal finite element method RTN-0 (Raviart-Thomas-Nédélec of index zero).

In the NFE method RTN-0, the normalized zero order Legendre polynomials, defined over the unit cell $\Omega_{ijk} = [-1,+1] \times [-1,+1] \times [-1,+1]$ and correlated to each physical cell $\Omega_h = \Omega_{ijk} = [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}] \times [z_k, z_{k+1}]$, are used to calculate the elements of the matrices in Eqs. (5) and (6).

The matrix elements are quantified introducing the following nodal base functions [14]:

$$\begin{aligned} u_L^{00}(x, y, z) &= -\frac{1}{2}(P_{100} - P_{200}); & u_R^{00}(x, y, z) &= +\frac{1}{2}(P_{100} + P_{200}); \\ u_N^{00}(x, y, z) &= -\frac{1}{2}(P_{010} - P_{020}); & u_F^{00}(x, y, z) &= +\frac{1}{2}(P_{010} + P_{020}); \\ u_B^{00}(x, y, z) &= -\frac{1}{2}(P_{001} - P_{002}); & u_T^{00}(x, y, z) &= +\frac{1}{2}(P_{001} + P_{002}); \\ u_C^{000}(x, y, z) &= P_{000} - P_{200} - P_{020} - P_{002}; \end{aligned}$$

where

$$P_{lpq}(x, y, z) = P_l(x)P_p(y)P_q(z)$$

$P_q(z)$ being the Legendre polynomial of degree q .

An extensive discussion on nodal diffusion methods can be found in reference [15] for space discretization using simplification approaches for calculating the moments over a node.

2.2. Reactor power distribution

Once the computer model solves the reactor kinetics equations (1) and (2) is able to provide the neutron flux profile, the next objective is to know the power distribution in the reactor configuration. It is necessary to be aware that the neutron flux is by itself the shape of the power distribution in multiplicative materials. The numerical methods presented in the previous section to solve the diffusion equations produce an algorithm capable to obtain the neutron flux profile for a reactor steady state. This neutron flux is normalized to the unity has the following property over the domain Ω of volume V :

$$\|\phi\| = 1$$

To determine the real average neutron flux in the reactor core, ϕ_C , it is necessary to specify the magnitude of the fluxes. For instance, a flux normalization factor ϕ_{norm} can be introduced such that,

$$\phi_C = \phi_{norm} \phi \quad \left[\frac{\text{neutrons}}{\text{cm}^2 \cdot \text{seg}} \right]. \quad (7)$$

Theoretically, it would be best to determine the flux level which resulted in a critical reactor (eigenvalue $\lambda_0=1$). This could be accomplished by the coupling of the NK with the TH model of the whole reactor. In practice, however, the scaling factor ϕ_{norm} is determined such that the total generated thermal power corresponds to some user-specified value $P_{th,tot}$. Before showing how this is done, the relation between the fluxes and the generated thermal power is described. For a given discretization of the xy -plane with pieces of area $\Delta a = \Delta x \cdot \Delta y$, the thermal power $P_{th,tot}$ can be expressed as follows:

$$P_{th,tot} = \sum_{\Delta a} \int_{z_b}^{z_t} q_f'''(z) da \cdot dz, \quad dV = da \cdot dz; \quad (8)$$

where, q_f''' is the volumetric heat generation rate in the fuel in units of [W/cm³]; dV is a differential fuel volume; and the limits z_b and z_t refer to the coordinates of the bottom and top of the reactor core, respectively. For a given area Δa , the volumetric heat generation rate $q_f'''(z)$ in an elevation z may be written in terms of the fluxes as:

$$q_f'''(z) = \phi_{norm} E_{fiss} \sum_{g=1}^G \Sigma_f^{g'}(z) \phi^{g'}(z); \quad (9)$$

where ϕ_{norm} is a dimensionless factor, E_{fiss} is the energy released by a nuclear fission reaction in [MeV/fission], and the sum over g' is the volumetric fission rate in [fissions/(cm³·s)]. Thus, Eq. (8) is written as:

$$P_{th,tot} = \phi_{norm} E_{fiss} \sum_{\Delta a} \int_{z_b}^{z_t} \sum_{g=1}^G \Sigma_f^{g'}(z) \phi^{g'}(z) da \cdot dz. \quad (10)$$

In a more general way, for a reactor volume V composed by the union of sub-volumes V_e (see Figure 2), the total thermal power can be expressed as:

$$P_{th,tot} = \phi_{norm} E_{fiss} \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{g=1}^G \Sigma_{f,e}^{g'} \phi_e^{g'} V_e. \quad (11)$$

Therefore, using the reference total reactor thermal power specified by the user, the flux normalization factor is:

$$\phi_{norm} = P_{th,tot} \left[\sum_{e=1}^{N_e} \sum_{g=1}^G \kappa_{f,e}^{g'} \phi_e^{g'} V_e \right]^{-1}; \quad (12)$$

where the factors “kappa-fission” are:

$$\kappa_{f,e}^{g'} = E_{fiss} \Sigma_{f,e}^{g'}.$$

With the flux normalization factor ϕ_{norm} calculated as above, the actual thermal power distributions in the reactor core can be calculated using the current neutron flux in the reactor core (eq. 3.16), $\phi_c^e = \phi_{norm} \phi^e$. Nevertheless, it is necessary to introduce the value of E_{fiss} . This value is used as the average energy released of ~ 200 MeV, based on the energies released by the fission of the U235 nuclei [16].

In summary, once the NK model is used to generate the neutron flux distribution in the reactor core, the expression (11) can be used to calculate the thermal power being generated along all the nodes in a thermal-hydraulic channel of area Δa and height H . This thermal power can be the axial power profile needed by the TH model to produce the thermal-hydraulic state corresponding to the generated thermal power.

3. THERMAL-HYDRAULIC MODEL

The description contained in this section is based on a work published by [4] about a TH model developed for boiling water reactors, where, for the steady-state reactor core condition the TH model needs pre-calculated axial power profiles as input data; and for transient reactor core conditions, the TH model uses a point kinetics approach to calculate the power distribution for each channel.

The treatment of neutron kinetics in ref. [4] has been improved for its implementation in AZKIND, by coupling a 3D solution of the neutron diffusion equations with an arrangement of TH channels in parallel. Each channel independently contemplates three regions at reactor core nominal power conditions: (a) one phase, (b) subcooled boiling, and (c) bulk boiling.

The objective was to implement a detailed model of a nuclear reactor core, which is later disturbed to simulate NK-TH coupling. These perturbations are obtained when the power generated in a group of channels changes and thus affecting the TH state of each channel. The aggregate of channels is performed so that there are no channels of the same group in diametrically opposite positions.

To perform the numerical implementation of TH the model, the arrangement of channels is obtained by grouping the total core assemblies into an appropriate number of thermal-hydraulic channels. The basic element in the TH model is based on a generic channel, that needs operational data like flow area, channel power, axial power profile, and channel inlet subcooling, among other parameters. Each channel is associated with several core fuel assemblies and an axial power profile.

Although the neutron model is a two-dimensional model for the radial power profile in each z-plane, information related to the axial power distribution is considered for each channel. It is assumed that this steady-state profile is invariant over time and is used to weight the axial averages of macroscopic cross sections and void fractions.

The TH model comprises the solution of the mass, momentum, and energy conservation equations in the three regions contemplated by the channel: (a) one phase, (b) subcooled boiling, and (c) bulk boiling. The system receives heat through a non-uniform source whose profile is defined axially plane-by-plane. This axial use of the power profile allows the inclusion of a wide range of axial profiles, from relatively flat to profiles with their peak value at some axial point in each channel in the reactor core.

For a very detailed description of heat transfer equations refer to [4].

4. CROSS-SECTIONS CALCULATIONS FOR COUPLED SCHEMES

The calculation and updating of nuclear and kinetic parameters are of vital importance in NK-TH coupled systems because the feedback between NK and TH conditions is truly seen when for each convergence cycle the state variables of the nuclear system are also updated. Thus, the initial reactor thermal power can be calculated and used for the first calculation of TH conditions, meaning that the first feedback from NK model to TH model is given. This new TH conditions, calculated in the Cycle₁, are then used for calculating a new data set of XS at the beginning of the Cycle₂; then, the NK model is run to update the reactor power. This is the feedback from TH model to NK model.

In a coupled NK-TH system is of great advantage that at the beginning of each cycle, the reactor system conditions calculated at the end of the previous cycle can be used as the initial conditions for calculations in the present cycle.

The use of previous conditions as initial conditions for the next cycle are seeing as part of the NK-TH feedback. This feedback results in faster convergence in both models, the TH model and the NK model. More precisely, before starting at any intermediate Cycle_i the NK model should be loaded or maintained with the physical nuclear conditions achieved at the end of the previous Cycle_{i-1}; and similarly, for calculations with the TH model.

The main feedback coming from re-calculations of the nuclear and kinetic parameters must be made using a data bank of these parameters constructed for a wide range of values for a selected set of thermal-hydraulic variables and conditions. For example, the nuclear data bank should be generated by an appropriate range of values for fuel temperature, coolant temperature, coolant density, etc.

The selection of reactor system variables and their range of values must allow calculation of nuclear and kinetic parameters by means of numerical interpolations.

The nuclear data bank is generated with the SERPENT code [17] for AZKIND nuclear reactor simulations using a branching methodology by combination of the different thermal-hydraulic and the nuclear fuel variables, providing upper and lower limits for the values of these variables, and considering different points of nuclear fuel utilization.

The points of fuel utilization are known as fuel burnup points or fuel burnup steps. Reference [18] contains a methodology to generate the nuclear data bank in a format named NEMTAB.

NEMTAB formatted data tables have as many data blocks as fuel burnup points are given as part of the input data. Each data block corresponding to a burnup point contains one set of values for each nuclear parameter.

For a specific nuclear parameter XS the nuclear data were generated for a range of values of the different reactor system variables like coolant density and temperature and fuel temperature. In consequence, when a NK-TH coupled model is running, at the beginning of each convergence cycle the present conditions of the nuclear system variables are provided to the NEMTAB module in AZKIND to get the corresponding XS data using linear multivariate interpolation. The interpolated variables in AZKIND are the macroscopic cross sections (absorption, removal, scattering, fission, etc.) and the kinetic parameters (diffusion coefficient, decay constants, neutron velocities, etc.) using NEMTAB formatted tables in which the entry data are nuclear fuel burnup, coolant density and temperature, and fuel temperature.

5. COUPLING APPROACH

The coupling scheme in AZKIND was built up as an integration algorithm for which the TH code was implemented as a subroutine in the NK code, where the TH model is called in sequential execution, then TH sends the results to the NEMTAB model for interpolation to get updated XS that are then sent to the NK model. The main code asks for convergence, and the cycle is repeated until convergence is met.

The TH model of reference [4] was modified to be implemented in AZKIND, as follows:

- Only the TH steady state source code was used,

- All the input data used by the TH model were extracted and put in an input file,
- The axial profile codification in the TH model was deleted from the input file and the source code modified to receive axial power profiles generated by the NK model for 3D calculations of NK-TH feedback,
- The grouping of fuel assemblies was maintained for generating a reduced number of TH channels, but grouping is now automated, counting the total fuel assemblies.

The main difference with the original TH model is that the NK model recursively computes the axial power profile for each channel, and this thermal power is the updated heat source for TH model. Therefore, a “new” thermal-hydraulic condition is generated, and it is used by the NEMTAB model to update the nuclear data to generate new thermal power profiles with the NK model.

The process is iterative, and it stops when the convergence is met. Convergence is achieved when updated conditions do not change in both NK and TH models.

5.1. NK-TH iterative loop

Figure 3 is a schematic description of the NK-TH feedback model. The main code reads the input to get the reference total core thermal power, nuclear core geometry and data for spatial 3D partitions, running options and numerical criteria for neutronics solver (*mgcs* or *bicgstab*) convergence.

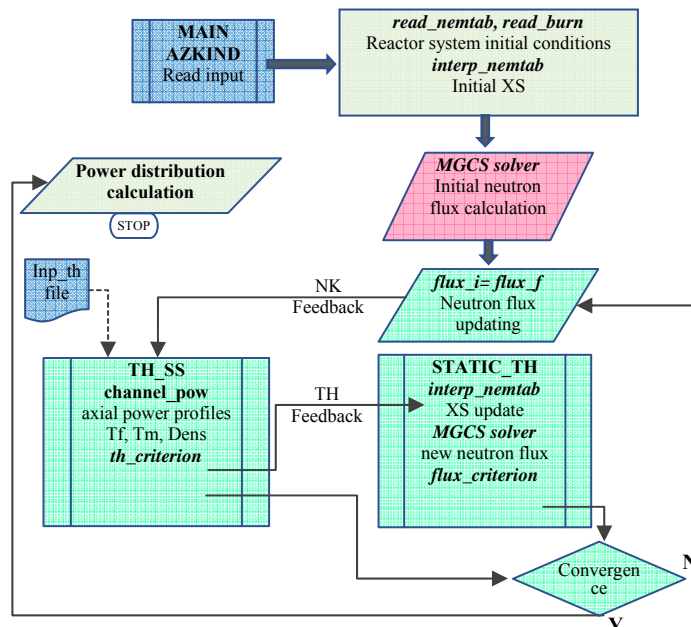


Figure 3. Outline of the NK_TH feedback model in AZKIND.

The NEMTAB tables are read as well as reactor core initial conditions for which the initial XS are computed in the interpolation subroutine. Then, with all this information the numerical solver *mgcs* computes the initial neutron flux; fuel assemblies (FA) map is read and the grouping into channels is performed; the initial neutron flux is converted to 3D nodal thermal power, the thermal power contribution from FA in each channel is calculated resulting in the axial power profile per channel.

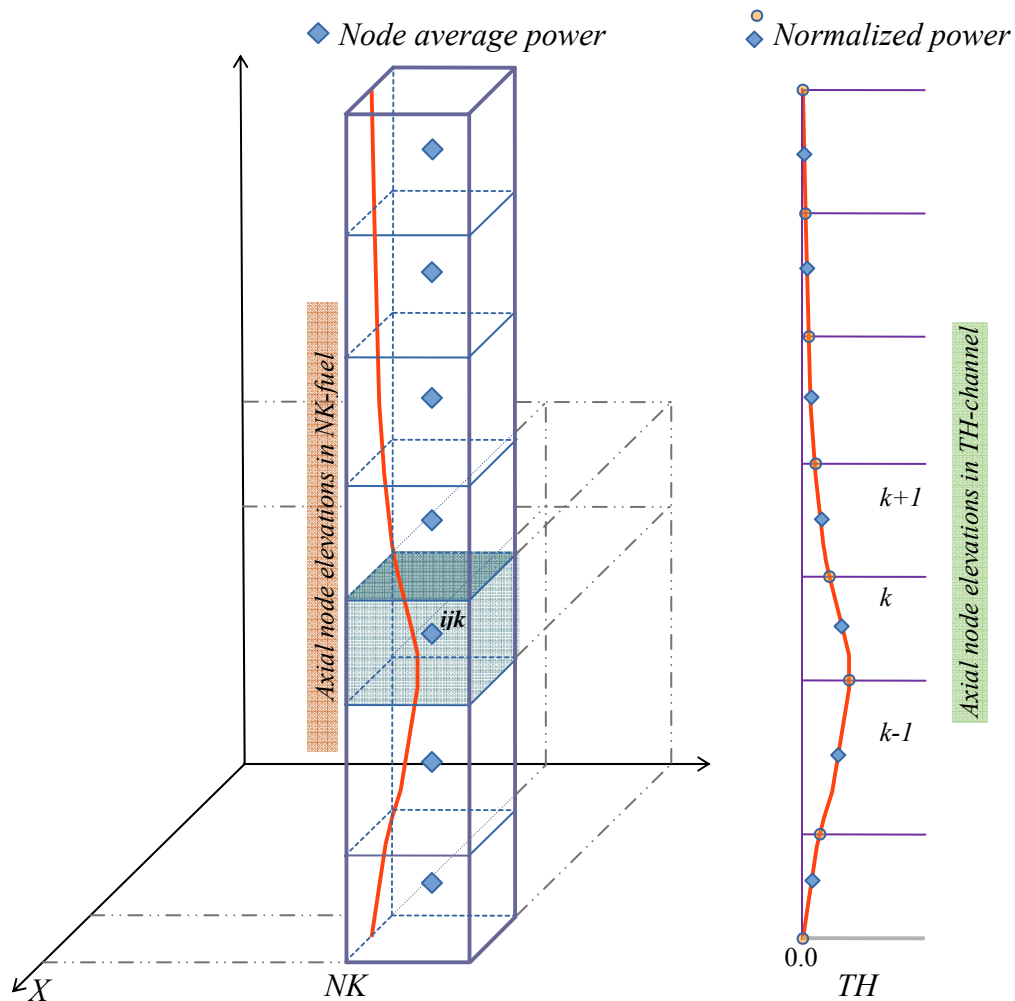


Figure 4. Nodal power profile converted to normalized channel axial thermal power.

These axial profiles are then passed to TH_SS module as axial channel thermal power, and using a simple numerical approach are converted to normalized axial power per channel. See (Figure 4).

The cell average (nodal) power for each node is used to calculate average values of power at the interface of each node and at the lower end and upper end of the TH channels. Then, the normalized axial profile is obtained by dividing each point value by the total channel thermal power. This normalized axial power is employed by an algorithm in the TH model to calculate the state variables for each node along the channel from bottom to top node.

5.2. Convergence criteria

The variables fuel temperature (T_f) and coolant density ($Dens$) are used in the convergence loop (Figure 3) to evaluate for each channel, the difference between the current calculation and the previous one for each node:

$$diff_T_f(m, z) = \frac{T_{f_{curr}}(m, z) - T_{f_{prev}}(m, z)}{T_{f_{curr}}(m, z)} ; \quad (13)$$

$$diff_Dens(m, z) = \frac{Dens_{curr}(m, z) - Dens_{prev}(m, z)}{Dens_{curr}(m, z)} ; \quad (14)$$

for each channel $m=1, \dots, numchan$, in all the node axial positions z .

Then, for each channel the maximum value of the relative difference of temperatures and densities are evaluated along the axial positions, the thermal-hydraulic criterion was assumed to be the maximum in all the channels for the two variables:

$$th_{criter} = \max \{ \maxval [\maxdif_{T_f}(m)], \maxval [\maxdif_Dens(m)] \} \quad (15)$$

The convergence of the NK model is measured through the neutron multiplication factor k calculated with the current neutron flux and the previous flux in the whole core:

$$nk_{criter} = diff_k = \frac{k_{curr} - k_{prev}(m, z)}{k_{curr}(m, z)} ; \quad (16)$$

6. VERIFICATION OF COUPLING

This demonstration case is a simulation of a BWR for which the core design parameters and main operational data are given in the following table:

Number of fuel assemblies	444
Number of control rods	109
Power level	2027 MWth
Core coolant flow	61.5 Mlb/hr
Pressure (upper plenum)	1050 psia
Inlet enthalpy	526.8 (Btu/lb)

The core configuration contains fuel assemblies with fresh fuel and irradiated fuel as shown below:

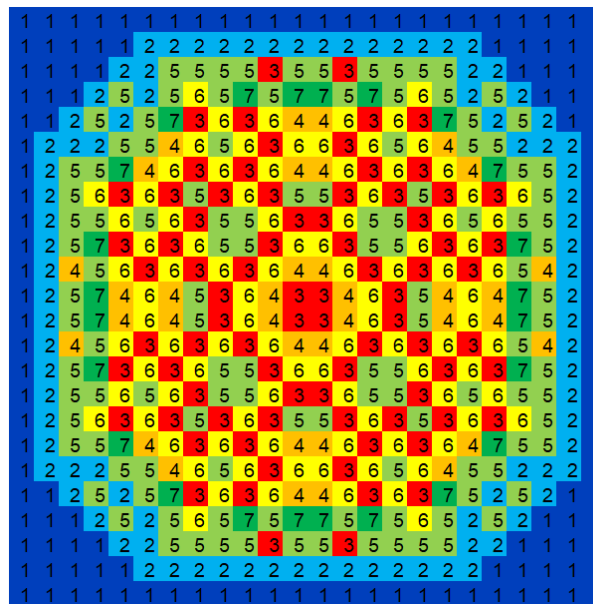


Figure 5. BWR core map of fuel assemblies.

The identifier “1” represents water media and the numbers “2” to “7” mean six different design of fuel assemblies, including fresh and irradiated fuel. One input data for this simulation is a table containing the degree of fuel burnup in units of MWd/MT as shown in the following figure:

42.80 43.00 41.72 41.03 40.90 39.54 41.346 41.34 39.555 40.91 41.04 41.76 43.05 42.77
 44.08 38.92 14.45 14.99 14.75 13.815 30.25 16.84 16.83 30.28 13.80 14.75 14.99 4.44 38.92 44.11
 39.07 17.09 37.17 16.65 0.00 16.08 0.00 16.91 0.00 0.00 16.90 0.00 16.06 0.00 16.64 37.16 17.10 39.07
 42.67 17.07 39.21 17.45 0.00 31.72 0.00 33.41 0.00 26.30 26.30 0.00 33.47 0.00 31.73 0.00 17.44 39.18 17.07 42.72
 42.82 38.83 37.15 17.46 17.60 23.88 0.00 16.45 0.00 27.59 0.00 0.00 27.64 0.00 16.45 0.00 23.88 17.61 17.46 37.17 38.86
 42.84
 42.99 14.48 16.63 0.00 23.93 0.00 27.53 0.00 32.98 0.00 25.82 25.81 0.00 33.02 0.00 27.57 0.00 23.92 0.00 16.63 14.47 42.99
 41.64 14.98 0.00 31.66 0.00 27.60 16.66 31.96 0.00 32.79 17.25 17.24 32.85 0.00 31.99 16.66 27.61 0.00 31.69 0.00 14.98
 41.64
 41.11 14.76 16.11 0.00 16.49 0.00 31.97 17.44 17.37 0.00 29.49 29.51 0.00 17.36 17.43 32.01 0.00 16.49 0.00 16.11 14.75
 41.12
 40.92 13.80 0.00 33.42 0.00 33.01 0.00 17.40 17.49 27.95 0.00 0.00 28.00 17.49 17.39 0.00 33.06 0.00 33.46 0.00 13.79 40.93
 39.48 29.70 16.89 0.00 27.62 0.00 32.67 0.00 28.01 0.00 26.68 26.68 0.00 28.01 0.00 32.68 0.00 27.63 0.00 16.89 29.72 39.49
 41.27 16.84 0.00 26.45 0.00 25.84 17.20 29.31 0.00 26.69 27.34 27.36 26.71 0.00 29.35 17.21 25.84 0.00 26.44 0.00 16.85
 41.28
 41.22 16.85 0.00 26.47 0.00 25.85 17.21 29.31 0.00 26.68 27.33 27.35 26.69 0.00 29.34 17.22 25.84 0.00 26.46 0.00 16.86
 41.24
 39.49 29.71 16.90 0.00 27.59 0.00 32.60 0.00 27.97 0.00 26.63 26.65 0.00 27.98 0.00 32.60 0.00 27.60 0.00 16.91 29.71 39.48
 40.95 13.80 0.00 33.42 0.00 33.01 0.00 17.43 17.52 27.97 0.00 0.00 27.96 17.51 17.43 0.00 33.01 0.00 33.44 0.00 13.82 40.93
 41.09 14.77 16.14 0.00 16.52 0.00 31.93 17.44 17.37 0.00 29.50 29.51 0.00 17.37 17.43 31.97 0.00 16.52 0.00 16.13 14.77
 41.12
 41.61 14.99 0.00 31.62 0.00 27.59 16.68 31.94 0.00 32.81 17.27 17.26 32.87 0.00 31.97 16.68 27.62 0.00 31.66 0.00 14.98
 41.66
 42.97 14.50 16.62 0.00 23.93 0.00 27.54 0.00 32.96 0.00 25.80 25.81 0.00 32.96 0.00 27.55 0.00 23.93 0.00 16.65 14.49 42.99
 42.76 38.81 37.13 17.46 17.62 23.87 0.00 16.45 0.00 27.60 0.00 0.00 27.63 0.00 16.47 0.00 23.87 17.61 17.46 37.16 38.85
 42.80
 42.65 17.08 39.20 17.46 0.00 31.68 0.00 33.40 0.00 26.30 26.30 0.00 33.45 0.00 31.71 0.00 17.46 39.21 17.08 42.67
 39.09 17.11 37.12 16.65 0.00 16.08 0.00 16.93 0.00 0.00 16.93 0.00 16.09 0.00 16.67 37.12 17.12 39.08
 44.05 38.94 14.45 15.02 14.77 13.82 30.26 16.87 16.86 30.28 13.82 14.78 15.02 14.46 38.91 44.05
 42.73 42.97 41.711 41.02 40.90 39.50 41.32 41.33 39.52 40.89 41.02 41.76 43.05 42.80

Figure 6. Map of average fuel burnup of the assemblies in the reactor core.

All the fuel assemblies are composed by different materials along the axial length (e.g., fuel enrichment) and for each material, a nemtab file is generated with the help of SERPENT code assigning several fuel burnup points. The number of burnup values is the same number of data blocks generated for each material. The information contained in a data block corresponds to branching tables with data for the nuclear parameters and neutron kinetics. These branchings are generated with a range of values of coolant density, coolant temperature, and fuel temperature.

6.1. NK-TH feedback results

The base case is the initial execution of the NK module (standalone) and it is characterized by having a maximum power approximately at the center of the core (node 11 of Figure 7), and the thermal power falls smoothly both upwards and downwards.

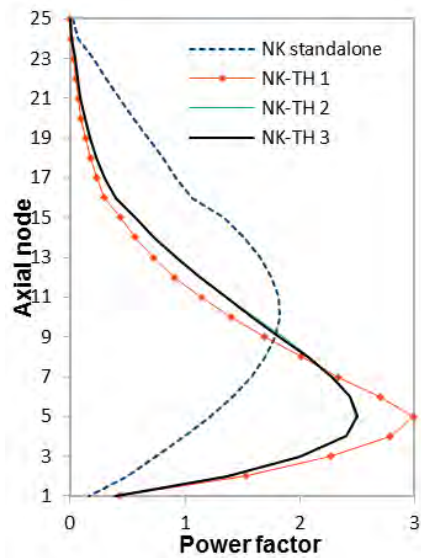


Figure 7. Axial power profiles during convergence.

In the case of a BWR, the thermal power increases in the regions of higher coolant density, this region is below the saturation boiling point, since the condensed phase and a lower coolant temperature favor neutron moderation. In Figure 7 the base power profile (NK standalone) is the input profile for which the initial TH module is started. The power profile resulting from the first feedback (NK-TH 1), shows the effect of the thermal-hydraulic conditions, mainly the moderator density.

The curves NK-TH 2 and NK-TH 3 are the successive NK-TH feedback cycles. The feedback cycles 4, 5 and 6 are not plotted because their curves are almost the same as the curve NK-TH 3. However, in numerical terms, the convergence meets the corresponding numerical criteria up to the 6th feedback cycle as shown in Figure 8.

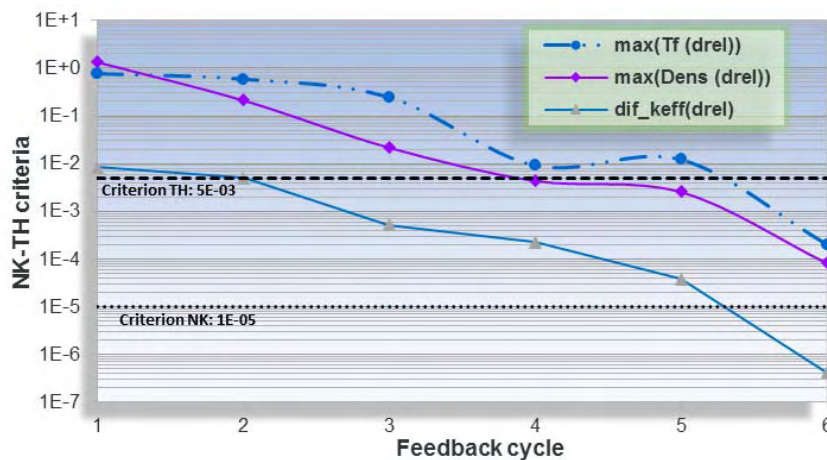


Figure 8. NK and TH convergence behavior

The 3D mesh generated with HEX codification was exported from AZKIND to SALOME in the MED files format for 3D visualization. The following figures were generated with SALOME for the simulation of the nuclear reactor steady state.

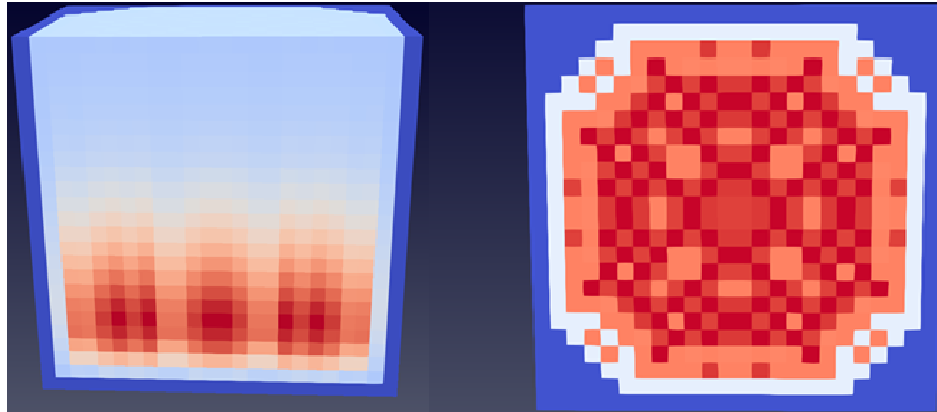


Figure 9. Profile of fuel temperature distributions, radial and axial views (K).

This figure shows the axial temperature distribution (left) with a cut plane in the center of the reactor core. In this part of the figure it can see the highest temperature in the first axial third of the height of the reactor. The figure on the right is a cut plane of radial temperature distribution at the height where the highest temperatures are in the nuclear fuel, where it can be seen that the central part is not the hottest, as well as that the lowest temperatures are in the periphery of the reactor core surrounded by coolant.

Finally, the distribution of the void fractions in the reactor core coolant is shown in the following figure. It is observed that the coolant enters at the lower part of the core in liquid phase, that is, with 0% of voids. As the refrigerant rises, the void fractions increase, reaching values above 70%.

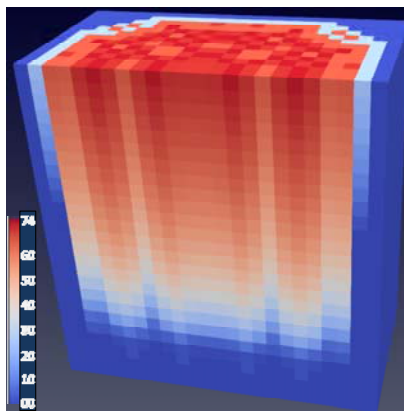


Figure 10. Axial distribution of void fractions in the reactor core (%).

7. CONCLUSIONS

The coupled NK-TH model in AZKIND was developed with a TH model modified for a straightforward interaction with the NK model, which calculates the 3D power distributions used by the TH model as the heat sources. Although the NK model has the capability to solve time-dependent neutron diffusion equations, the TH model implemented solves only steady-state reactor conditions. The demonstration case shows the effect of introducing the TH feedback in the NK calculation and vice-versa, besides the smooth convergence boosted by the cyclic feedback between the two models. The demonstration case was prepared with data from a cycle fuel load of a commercial BWR providing also the fuel assemblies' individual burnup and nominal operational data.

A pending development in AZKIND is the solution of time-dependent simulations, to analyze reactor core transients related to disturbing conditions in reactor neutronic power or reactivities induced by thermal-hydraulic variations. Likewise, the TH model must be modified to simulate no boiling conditions as it occurs in PWR reactors.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the financial support from the National Strategic Project No. 212602 (AZTLAN Platform) as part of the Sectorial Fund for Energetic Sustainability CONACYT-SENER.

REFERENCES

1. Chauliac, C., "Overview on the Collaborative Project NURISP", Presentation at the NURESIM General Seminar, Madrid, Nov. 27 28, (2008).
2. Weber D. P., et al. High-Fidelity Light Water Reactor Analysis with the Numerical Nuclear Reactor. Nuclear Science and Engineering 155, 395–408 (2007).
3. USA/DOE. CASL: The Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors. Web page <<https://www.casl.gov>>.
4. Ceceñas-Falcon M., Campos R. Modelo Acoplado de Canales en Paralelo y Cinética Neutrónica en Dos dimensiones. International Joint Meeting Cancun 2004 LAS/ANS-SNM-SMSR. Cancun, Mexico. 2004.
5. Solís J, Avramova M., Ivanov K. Temporal adaptive algorithm for TRAC-BF1/NEM/COBRA-TF coupled calculations in BWR safety analysis. Annals of Nuclear Energy 29 (2002) 2127–2141.
6. Ivanov K., Avramova M. Challenges in coupled thermal–hydraulics and neutronics simulations for LWR safety analysis. Annals of Nuclear Energy 34 (2007) 501–513.
7. Gómez-Torres A. M. Further Developments of Multiphysics and Multiscale Methodologies for Coupled Nuclear Reactor Simulations. (Ph.D. Thesis). Technical University of Munich, Germany. 2011.

8. Gómez-Torres A. et al. DYNSUB: A high fidelity coupled code system for the evaluation of local safety parameters – Part I: Development, implementation and verification. *Annals of Nuclear Energy* 48 (2012) 108–122.
9. Gómez-Torres A. M., et al. DYNSUB: A high fidelity coupled code system for the evaluation of local safety parameters – Part II: Comparison of different temporal schemes. *Annals of Nuclear Energy* 48 (2012) 123–129.
10. Calleja M. Coupling of COBAYA3/SUBCHANFLOW inside the NURESIM platform and validation using selected benchmarks. *Annals of Nuclear Energy* 71 (2014) 145–158.
11. Gómez-Torres A.M., et al. Mexican platform for analysis and design of nuclear reactors. In *Proceedings of the International Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP. 2015.*
12. Rodríguez-Hernández A. Solution of the Nuclear Reactor Kinetics Equations in 3D using the Nodal Method RTN-0. (MSc thesis in Spanish language). National Polytechnic Institute, ESFM. México, 2002.
13. Duderstadt J. J., Hamilton L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. Ed. John Wiley and Sons, New York. 1976.
14. Hennart J. P. A general family of nodal schemes. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 1 (7), 264–287. 1986.
15. Grossman L. M., Hennart . P. Nodal Diffusion Methods for spacetime neutron kinetics. *J. Progress in Nuclear Energy* 49, 181–216. 2007.
16. Weismann, Joel (ed.). *Elements of Nuclear Reactor Design*. Elsevier Scientific Publishing Company. 1977.
17. Leppanen J. Development of a new Monte Carlo Reactor Physics Code. (Ph.D. Thesis). Helsinki University of Technology, Finland. 2007.
18. Barrera-Chávez M. A. Generation of Cross-Sections Library using SERPENT code, for simulations of BWRs. (MSc thesis, in Spanish language). National Polytechnic Institute, ESFM. México, 2017.

Study on the effect of the burning cycle length on a breed and burn reactor

Roberto Carlos Lopez-Solis*

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

Carretera Mexico-Toluca s/n, La Marquesa, C.P. 52750 Ocoyoacac, Edo. de México, Mexico
rcarlos.lope@gmail.com

Juan Luis Francois

National Autonomous University of Mexico

Paseo Cuauhnáhuac 8532, 62550 Jiutepec, Morelos, México
juan.luis.francois@gmail.com

Abstract

In the present paper a study on the performance of a Breed and Burn (B&B) Reactor is presented. This work is a continuation of a previous work with a somewhat similar core but different fuel management strategy, in this study the objective is to evaluate the performance of this new fuel management strategy in order to corroborate if is compatible with this core design. The core in question consists in 20 axial layers 10 cm thick each. The core can be divided into two main zones: the ignition zone which consists in 9 layers of enriched uranium (with enrichments that vary from 8.0 to 12.0 %at in ^{235}U); and the blanket zone that consists in 21 layers of depleted fuel (0.35%at in ^{235}U). The fuel management strategy followed here is similar to the one proposed for the CANDLE reactor, in which after a certain amount of burnup time the core is stopped for refueling, in the refueling process five layers from the most burnt side are taken out of the core and five fresh depleted layers are added in the opposite side. The objective is that as the ignition zone is burnt the adjacent zones in the blanket zone receive enough neutrons to allow transmutation of ^{238}U into ^{239}Pu , once the all the ignition zone is taken out of the core, the fissions will be maintained with the fissile fuel breed in the blanket zone. The code used was the German code KANEXT, which is a deterministic code with burn capabilities suitable for these cases, for validation of the KANEXT model the code stochastic code SERPENT was used. The main parameters to consider were the reactivity of the core during the burnup cycles and the discharged burnup of the discarded elements. It was found that the use of fuel cycles with length of 10 years resulted in positive results on the tracked parameters.

1. INTRODUCTION

The Breen&Burn nuclear reactor is one of the options for producing high quantities of energy at relatively low cost, either economic and resourcefully. Some of the advantages of this kind of reactor are the following: lack of need of reprocessing facilities as the bred fuel is burned *in situ*

inside the core and, as it can use natural, or even depleted uranium (DU) as fertile fuel; with this, the mining, enrichment, and spent fuel storage needs are all considerably reduced. Given the mentioned advantages, the search for making this type of reactors a reality is an appealing idea [1].

In a previous work [2] the Breed and Burn (B&B) Reactor concept was adapted from a reference core taken from an OECD/NEA Benchmark on Fast Reactors [3]. The 1000 MWt core consisted in an ignition zone with a length of 90 cm with 5 different enriched areas with enrichments no higher than 12 %at in ^{235}U ; and a blanket zone of 160 cm length containing depleted uranium with 0.35 %at in ^{235}U , for a total of 250 cm length of the core. In this study, no stopping or refueling of the core is taken into consideration but is operated undisturbed for 45 years. The results showed that the fission zone moves axially from one end of the core to the other as time passes by, as it was expected.

The current work is an update of that previous work, in which the fuel management is an adaptation of the “Multi-channel Once-Through-Then-Out” (MOTTO) cycle thought for the “Constant Axial shape of Neutron flux, nuclide densities and power shape During Life of Energy producing” (CANDLE) core concept [4], in which part of the burnt fuel is taken out of the core. The objective of the work presented here is to evaluate the feasibility of this fuel management strategy in this type of reactor.

The paper will go as follows: in Section 2 the simulated core is described as well as the proposed fuel cycle lengths, Section 3 includes a description of both KANEXT [5] and SERPENT [6] codes, Section 4 show the results of the validation of the model as well as the simulation of the code with the different fuel cycle lengths, and the conclusions are given in Section 5.

2. DESCRIPTION OF THE REFERENCE CORE

The main geometric characteristics of the fuel assembly and the core layout were taken from a OECD/NEA Benchmark on Fast Reactors [3], adapting the core length and the reflector to the B&B Reactor needs. The power of the core was selected to allow enough fuel breeding to fulfill the B&B regime without exceeding the burnup limit expected for this kind of reactors. Table I show the main characteristic of the core geometry.

As mentioned before, the core consists in two regions: ignition zone and blanket. The ignition zone is divided into 9 axial layers of 10 cm thick each, its fuel consists in metallic fuel with 5% in volume of Zr, the enrichments vary from 8.0 to 12.0 %at in ^{235}U depending on the layer; the blanket zone is divided into 11 layers identical to the ones in the ignition zone except in the enrichment of the fuel which is 0.35 %at in ^{235}U . Table II show the enrichments for each section and Table III show their atomic density.

The fuel zones are surrounded by three rings of radial reflector, consisting in solid hexagonal HT9 SS blocks with the same size as the fuel assemblies. Besides that, two axial reflector layers of 50 cm height are added in both extremes of the core for better neutron economy. The atomic densities of the reflector and the coolant used in this study are given in Table IV.

Table I. Main characteristics of the core

Core Power	2000 MW
Full Length	200 cm
Fuel in active/blanket zone	Metallic enriched / Depleted U
Material in reflector blocks	HT-9 Stainless Steel
Material in clad and wrapping wall	HT-9 Stainless Steel
Assembly/Block pitch	16.2471 cm
Fuel pins in assembly	271
Fuel pin radius	0.3236 cm
Fuel cladding thickness	0.06207 cm
Fuel pin pitch	0.8966 cm
Wrapper inner wall face to face distance	15.0191 cm
Wrapper outer wall face to face distance	15.8123 cm

Figure 1 shows the cross section of a fuel assembly, a SS block and any given axial layer.

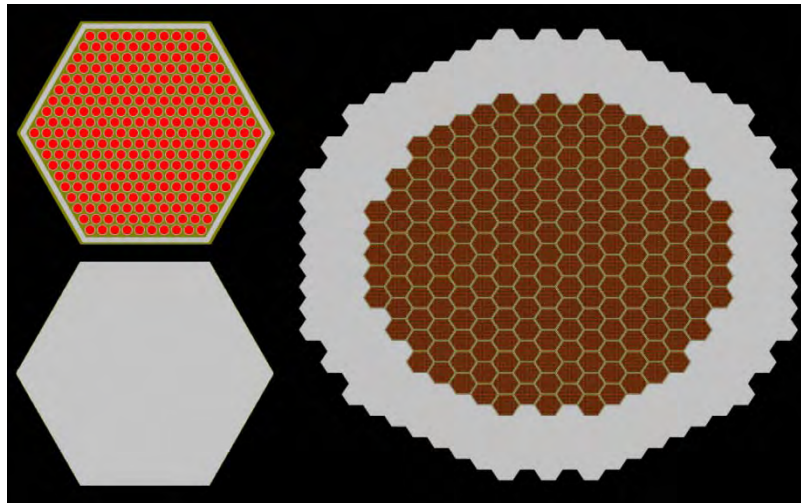


Figure 1. Fuel (top left) and reflector (bottom left) assemblies and axial layer (right) layout

Table II. Description of the materials inside the core

Zone	Length	Material	Zone	Length	Material
Axial Ref.	50 cm	HT-9 SS	Ignition 6	10 cm	11.0 % ²³⁵ U
Ignition 1	10 cm	8.0 % ²³⁵ U	Ignition 7	10 cm	11.0 % ²³⁵ U
Ignition 2	10 cm	9.0 % ²³⁵ U	Ignition 8	10 cm	12.0 % ²³⁵ U
Ignition 3	10 cm	9.0 % ²³⁵ U	Ignition 9	10 cm	12.0 % ²³⁵ U
Ignition 4	10 cm	10.0 % ²³⁵ U	Blanket 1-11	10 cm	0.35 % ²³⁵ U
Ignition 5	10 cm	10.0 % ²³⁵ U	Coolant	N/A	Sodium

Table III. Atomic densities (in at/b-cm) in fuel materials in the core

	²³⁵ U	²³⁸ U	Zr
Blanket	1.604005E-04	4.566832E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 1	3.669836E-03	4.220312E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 2	4.129087E-03	4.174965E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 3	4.129087E-03	4.174965E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 4	4.588453E-03	4.129608E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 5	4.588453E-03	4.129608E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 6	5.047936E-03	4.084238E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 7	5.047936E-03	4.084238E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 8	5.507534E-03	4.038858E-02	2.145544E-03
Ignition Zone 9	5.507534E-03	4.038858E-02	2.145544E-03

Table IV. Atomic densities (in at/b-cm) in no-fuel materials in the core

	HT-9 SS	Coolant
Fe	6.971499E-02	
Ni	4.298442E-04	
Cr	1.036600E-02	
Mn	4.592099E-04	
Mo	4.900210E-04	
Na		2.227200E-02

3. DESCRIPTION OF THE CODES

In this section a brief but concise description of both used neutronics codes will be given, more emphasis will be given to the code KANEXT since information about the code SERPENT is widely available.

3.1. The SERPENT Code

SERPENT [5] is a three-dimensional continuous-energy Monte Carlo reactor physics code with burnup capability. It is being developed at VTT Technical Research Centre of Finland since 2004. According to the developers, SERPENT main capabilities are listed below:

- Spatial homogenization and group constant generation for deterministic reactor calculations.
- Fuel cycle studies involving detailed assembly-level burnup calculations.
- Validation of deterministic lattice transport codes.
- Full-core modeling of research reactors, SMRs, and other closely coupled systems.
- Coupled multi-physics applications.
- Educational purposes and demonstration of reactor physics phenomena.

For fuel depletion analysis, by default, SERPENT solves the Bateman's depletion equation according to the Chebyshev Rational Approximation Method (CRAM), which is based on the predictor midpoint step technique [7]. SERPENT also uses a methodology to better represent the changes due to material composition variation. This code uses a predictor-corrector method with linear interpolation based on Euler's method [8].

3.2. The KANEXT Code

The code KANEXT (which stands for KARlsruhe Neutronic EXtendable Tool) [5] is a modular code for deterministic reactor calculations including reshuffling and depletion. KANEXT consists mainly of one kernel and several modules:

- The kernel routines contain the main program and a set of interface routines to control the flow of data between the modules, and within each of them.
- Modules are programs to perform specific calculations. A module can call other modules (including itself), and can then be called a 'procedure'. Modules and procedures are available for performing various tasks. In KANEXT, users can create their own modules for specific calculations.

A flow diagram of how the modules interact with each other within the VABUSH sequence in a complete job is given in Figure 2. The main modules relevant for our investigations are the following:

- The module BURNUP was developed from the code ORIGEN. The local (implemented in Germany) improvements of the code KORIGEN are fully adopted. In addition, ordering of library data is improved. Compatibility with KORIGEN is obtained with available auxiliary modules.
- The module DXBURN is a module for group collapsing, both for few-group core simulations (33 energy groups in this work) and for the determination of one-group data for burn-up calculations. The buckling iteration method applied in KANEXT stems directly from the fast reactor development in the 70's in Germany and has given good results since.

- The NDCALC module calculates mixture compositions and geometry data for reactor zones. A number of data blocks are provided for cross section calculation and evaluation purposes. The module was initially developed for parametric investigations of tight lattice (hexagonal geometry) light water reactors. For this reason, the main input specifications are based on moderator-to-fuel ratio and on pin-cell and fuel specification data. During further R&D projects, a number of extensions were implemented, especially for other coolants like sodium, lead, lead/bismuth, helium, CO₂ and polyethylene.
- The module GRUCAL calculates isotopic and mixture dependent macroscopic cross sections based on microscopic cross sections library of 350 energy groups. Resonance self-shielding is done by the Bondarenko method by means of the narrow resonance approximation, which is appropriate for fast reactor applications. Self-shielded group constants from fine-flux calculations can be delivered by the so-called secondary input option, which then will substitute the narrow resonance cross sections. It has to be noted that after the burnup calculation a new self-shielding treatment is carried out for the new cycle in GRUCAL, including new number densities and their impact on the self-shielding. Heterogeneity corrections, like Dancoff approximation for infinite lattices of Wigner-Seitz cells or smeared cells, can be defined. KANEXT is compatible with several existing microscopic cross section libraries and formats such as JEFF3.1, 3.1.1 or ENDF/B 7.0.
- The VAPROC module generates the binary input files for the VARIANT code. The cross section file with COMPXS format is created by calling the module GCMPXS. The geometry file GEODST and, if needed, the fixed source file FIXSRC, are written according to the VAPROC input definition. After the pre-processing the VARIANT code is launched. The main purpose is to organize the burnup and fuel management calculations, using the coupled code VARIANT for systems with hexagonal fuel assemblies and the burnup capability of KANEXT.

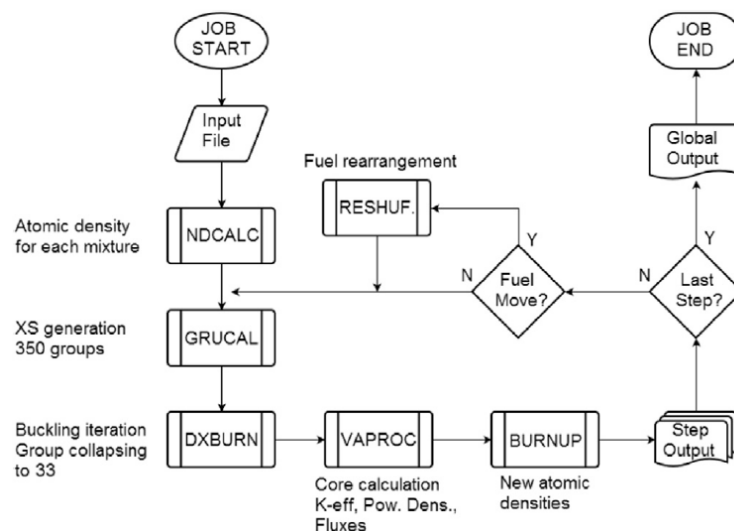


Figure 2. Flow diagram of the main modules in KANEXT

4. RESULTS AND DISCUSSION

4.1. Methodology

The objective of this study is to breed and burn of fissile fuel, which involves not only neutron transport calculations but also burnup calculations. The calculations for stochastic codes, such as MCNP [9] or Serpent [6], are very computationally intense and take a lot of time, the deterministic codes on the other hand are friendlier regarding the computation time and hardware requirements, for this reason the KANEXT code was chosen for these calculation.

In order to use the KANEXT code with confidence a verification of the model must be carried out. For this goal, the same model is simulated on the SERPENT code version 2.1.29 at the Beginning of Cycle (BOC) conditions, and the results of both codes are compared.

Once the model is verified, it can be used for the objective of this work. Different cycle lengths are tested and after each cycle five layers from the burned region are taken out of the core and five fresh blanket layers are added in the opposite side. The following criteria are due to be met during the core performance:

- The k_{eff} value must be above 1.0 but not uncontrollably high.
- Burnup of the discharged fuel must not exceed 400 GWd/T.
- Total life of the core must reach at least 40 years.

The 400 GWd/T criteria obey a burnup limit proposed, is compliant with the average discharge burnup in the CANDU reactors [10].

4.2. Validation of the KANEXT Code

For the SERPENT simulation, 750,000 neutrons are followed per cycle, and the number of cycles used is 100 inactive and 400 active. For the KANEXT simulation, the spherical harmonics (SP3) method is used. For both codes the JEFF 3.1.1 cross section library is used.

Table V shows the k_{eff} comparison between codes, a net difference of 196 pcm was found between the codes, which is a good comparison considering that both codes work with completely different methodologies.

Table V. Comparison of k_{eff} in KANEXT and SERPENT

Code	k_{eff}	Std. Dev.
KANEXT	0.99821	N/A
SERPENT (analog)	0.99632	8 pcm
SERPENT (implicit)	0.99625	3 pcm

Figure 3 shows the axial power distribution through the whole length of the core, the same tendency is shown by both curves and no appreciable differences are observed.

Based on the comparison made, the KANEXT model can be trustingly used for our analysis.

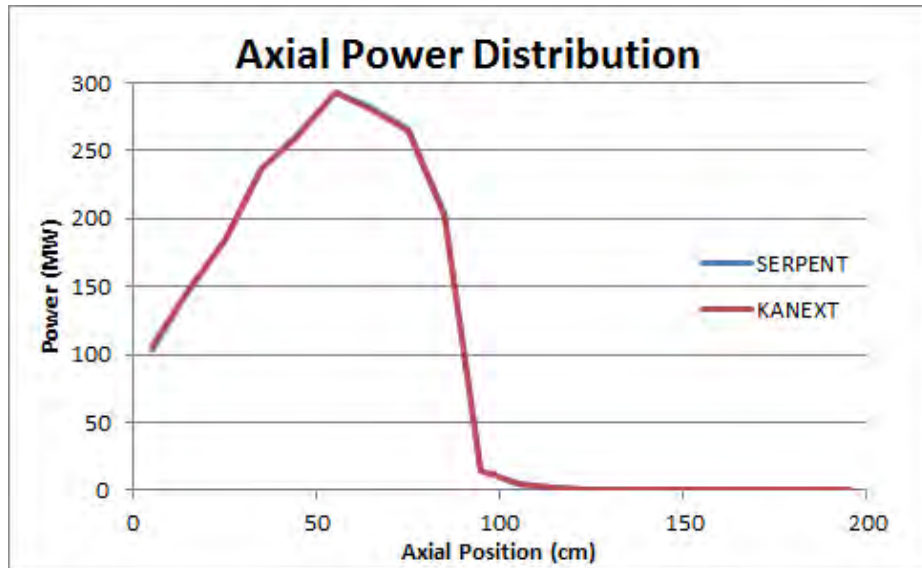


Figure 3. Comparison of Axial Power Profiles at BOC with KANEXT and SERPENT

4.3. Fuel Cycle Length Comparison

Three fuel cycle lengths were tested: 6, 10 and 15 years. Figure 4 shows the k_{eff} evolution for the three options.

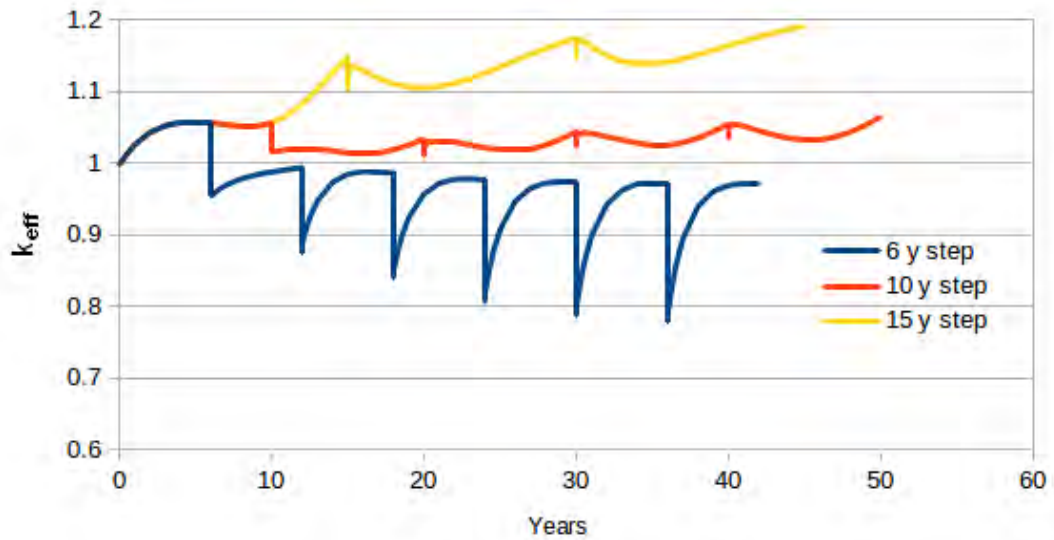


Figure 4. k_{eff} evolution for the three cases

For the case with cycles of 6 years, it can be seen that not enough fissile fuel is bred in the blanket zones adjacent to the ignition zones, so keff values are always lower than 1.0, even when it can also be seen that fuel breeding and burning is taking place and keff goes up after every refueling, but not enough.

For the cycles of 10 years, keff is always above 1.0 but without increasing too much to be difficult to control. It can also be seen that immediately after every refueling the keff goes down and very soon reaches a value similar to the one before, except for the first refueling which means that after 10 years the five layers, which are taken out, still have a good amount of fissile material. Nevertheless, the overall performance of this case is good.

The case with cycles of 15 years long the keff reaches high values (up to 1.20) at the end of the core life which could be difficult to control. As in the case of 10 years length, immediately after the refueling the keff value goes down but soon it reaches a value in the same order as before the refueling. After the refueling, the tendency is to go slightly down (same as in the case of 10 years but more pronounced) and then up, this can be explained in two stages: in the first stage, after the refueling, the breeding is more dominant over the fissions which causes a negative tendency in the keff plot; in a second stage, once enough fissile fuel is bred the keff tends to go up due to the increasing of fissions.

Regarding the discharge burnup in the two cases where the core was supercritical all the core life, the highest discharge burnup in the case with cycles of 15 years is 516.20 GWd/T, which exceeds by far the burnup limit goal. Table VI shows the discharge burnup of the of the first five layers after each cycle for the case with 10 years length, as can be seen the highest burnup also exceeds the burnup limit goal by 16.5%, which is not that excessive.

Table VI. Discharge burnup (GWd/T) after each core stop, in the case of 10 years length

	Cycle 1	Cycle 2	Cycle 3	Cycle 4	Cycle 5
Layer 1	137.8	386.0	457.7	465.5	466.1
Layer 2	178.4	410.0	447.5	450.0	451.7
Layer 3	211.9	430.5	430.9	431.0	433.1
Layer 4	241.9	437.2	415.7	416.3	418.9
Layer 5	255.6	385.7	410.2	414.4	419.0

It is important to note that after the second refueling (12 years in the 6 years cycle, 20 years in the 15 years cycle and 30 years in the 15 years cycle) all the ignition zone fuel is already taken out and the core runs with originally depleted fuel only.

5. CONCLUSIONS

The evaluation of the core evolution with different cycle lengths showed that it is not easy to balance the cycle length, the reactivity and the discharge burnup. From the cases here analyzed, the one with 10 years length is the one which better complies the goals set, since the core was supercritical for its complete life without being so supercritical that could be hard to control and without exceeding excessively the discharge burnup limit goal set.

The operation of a reactor on the B&B regime has the great advantage that breed and burn its own fissile fuel completely *in-situ* without the need of reprocessing. In the case of the 10 years length cycles, the core ran for 30 years with fuel that was originally blanket.

It is desirable, to carry on further works aimed to find cycle-lengths where the burnup discharges tend to be reduced to more conservative values. Additionally, these reactors have the potential to use the Th or Th/U fuel cycles; this is another area that deserves future studies.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors acknowledge the support of the National Autonomous University of Mexico through the project PAPIIT-IN115517, and for facilitating the use of the MIZTLI supercomputer under the LANCAD-UNAM-DGTIC-253 project.

REFERENCES

1. Roberto Lopez-Solis and Juan Luis Francois-Lacouture, “The breed and burn nuclear reactor: A chronological, conceptual, and technological review”, *International Journal of Energy Research*, Vol. **42**, 13p, (2017).
2. Roberto Lopez-Solis and Juan Luis Francois-Lacouture, “Implementation of the Breed&Burn Concept on a Sodium Fast Reactor”, *Proceedings of the XXX Annual Conference of the Mexican Nuclear Society*, Mérida, Yucatán, 2-5 de July, (2018).
3. D. Blanchet, L. Buiron, S. Nicolas, T. Kim, T. Taiwo, *AEN WPRS Sodium Fast Reactor Core Definitions (version 1.5 revision 10)*, OECD Nuclear Energy Agency, (2017).
4. Hiroshi Sekimoto and A. Nagata, “Performance Optimization of the CANDLE Reactor for Nuclear Energy Sustainability”, *Energy Conversion and Management*, Vol. **51**, p. 1788-1791, (2010).
5. M. Becker, S. Van Criekingen and C. Broeders, *KANEXT – A Tool for Nuclear Reactor Calculations: Description of the Export Version*, Karlsruhe Institute of Technology, Institute for Neutron Physics and Reactor Technology, Karlsruhe, Germany. (2011).
6. J. Leppänen, *Serpent – A Continuous-Energy Monte Carlo Reactor Physics Burn Up Calculation Code*, VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland. (2013).
7. Davide Chersola, Guglielmo Lomonaco, Riccardo Marotta, Guido Mazzinic. “Comparison between SERPENT and MONTEBURNS codes applied to burnup

- calculations of a GFR-like configuration”. *Nuclear Engineering and Design*. Vol. **273**, p. 542–554 (2014).
8. Pusa, M., Leppänen, J. “Computing the matrix exponential in burnup calculations”, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. **164**, 11p (2010).
 9. C.J. Werner (editor), *MCNP User’s Manual - Code Version 6.2*, LA-UR-17-29981, (2017).
 10. Hiroki Osato, Jun Nishiyama and Toru Obara, “Study on the CANDLE Burning Fast Reactor with Initial Core Using Plutonium from LWR Spent Fuel”, *Proceedings of the 5th International Symposium on Innovative Nuclear Energy Systems INES-5*, Tokio, Japan, October 31 – November 2, (2016).

Comparación de los resultados de los códigos ORIGEN y SNF aplicados a un combustible BWR 8x8

*José-Luis Montes-Tadeo, Eduardo Martínez Caballero,
Raúl Perusquía, Rogelio Castillo Durán
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera Federal México Toluca, La Marquesa s/n,
Ocoyoacac, Estado de México C.P. 52750*

joseluis.montes@inin.gob.mx; eduardo.martinez@inin.gob.mx;
raul.perusquia@inin.gob.mx; rogelio.castillo@inin.gob.mx

Resumen

En el presente trabajo se muestra una comparación preliminar de los resultados que se obtienen al aplicar el código ORIGEN para conocer los parámetros de un combustible gastado tipo 8x8 en un reactor BWR, contra los correspondientes obtenidos con el código SNF. Los parámetros comparados son la actividad del ensamble de combustible, su calor de decaimiento, así como la concentración de los actínidos y productos de fisión del mismo. Estos parámetros se calcularon en diferentes puntos temporales de enfriamiento, de manera tal que el intervalo total de enfriamiento es de 60 años. El ensamble de combustible pertenece al sub-lote que se descarga al final de la operación del ciclo inicial del reactor. El material combustible del ensamble es UO_2 con un enriquecimiento promedio inicial en U-235 de 1.76 w/%. De manera selecta este ensamble contiene algunas varillas con Gd_2O_3 como veneno quemable. El número total de varillas en las celdas de combustible es 64, 62 de éstas contienen material combustible, las dos restantes son barras de agua. El ensamble de combustible alcanza un quemado de 13,390 MWd/t. Los resultados que se generan con los dos códigos presentan un comportamiento estadísticamente muy similar si los comparamos considerando un total de 60 años de enfriamiento. El promedio de las diferencias entre los dos códigos en el cálculo de la concentración total (g/t) de los productos de fisión es menor al caso de los actínidos. Para la actividad global y calor de decaimiento, el promedio de las diferencias relativas (%) es de 2.9 y 4.0 respectivamente.

1. INTRODUCCIÓN

El reactor BWR analizado ha estado operando de manera ininterrumpida por tres décadas. A través de este tiempo de operación se ha estado generando una cantidad importante de combustible gastado. Las condiciones en que se retira desde núcleo del reactor conllevan diferentes aspectos que permiten caracterizarlos, éstos tienen que ver con el contenido isotópico, su capacidad de alcanzar su estado crítico, el calor de decaimiento que genera, así como los requerimientos de blindaje y su recuperabilidad. En el presente trabajo se abordan algunos de estos aspectos del combustible gastado. A saber, la estimación del contenido

isotópico, la actividad del combustible, así como su calor de decaimiento. Se realiza una comparación de los resultados que se generan con los códigos ORIGEN [1,2] y SNF [3].

La aplicación del código ORIGEN está documentada en diversos trabajos, por ejemplo, en [4] se utiliza para validar las predicciones de los inventarios isotópicos del combustible gastado que realiza el código de física de celdas Polaris. En [5], se ha usado el código ORIGEN como parte de un módulo de análisis de datos del combustible gastado para auxiliar en el análisis en tiempo real de las mediciones rutinarias de seguridad que se realizan antes de realizar la carga en los contenedores de almacenamiento seco. En [6], se usa en los cálculos de radiotoxicidad y composición del combustible nuclear gastado, conjuntamente con el código MCNP. En [7], se describe un proceso de validación de los cálculos de quemado del sistema SCALE al cual pertenece el código ORIGEN, usando mediciones de concentraciones de nucleídos en muestras de combustible gastado de la central TMI-1. Por su parte el código SNF comienza a ser utilizado con propósitos similares al código ORIGEN, como puede notarse en [8], en donde se utiliza para auxiliar en la estimación del contenido isotópico y actividad del combustible nuclear gastado con base en la información de los simuladores del manejo del combustible dentro del núcleo del reactor. Dentro de esta referencia se describe un procedimiento basado en el historial de agotamiento individualizado de cada ensamble de combustible, lo que permite abrir la posibilidad de optimizar las cargas de los contenedores desde el punto de vista de criticidad, calor de decaimiento y fuentes de emisión.

En la siguiente sección se describe la metodología utilizada para analizar el combustible que mayor quemado al finalizar la operación del primer ciclo de un reactor BWR, posteriormente se presentan los principales resultados obtenidos y finalmente algunas conclusiones que se derivan de todo lo anterior.

2. METODOLOGÍA

Para realizar la comparación de los resultados entre el código ORIGEN y el código SNF, se ha elegido un ensamble de tipo 8x8. Este ensamble se cargó al iniciar la operación de un reactor BWR, operando con una potencia nominal de 1931 MWth.

Las características iniciales del ensamble de combustible que se utilizó para realizar los cálculos con los dos códigos se muestran en la Tabla I.

Tabla I. Parámetros del combustible BWR 8x8

Parámetro	Ensamble BWR-8x8
MWd/t, EOC	13,390
U-235 %/w	1.76
Gd ₂ O ₃ %/w	0.0968
Longitud del ciclo, días	938

2.1 Cálculos con el código ORIGEN.

El Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) cuenta con el sistema de códigos de cómputo SCALE VI (de sus siglas en inglés Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation) desarrollado en el Oak Ridge National Laboratory (ORNL); como parte de este paquete se encuentra el código ORIGEN-ARP (de sus siglas en inglés Oak Ridge Isotope GENERation, Automatic Rapid Processing) que es empleado para realizar cálculos de quemado, decaimiento radiactivo, entre otros, de combustible nuclear de reactores de potencia [1].

ORIGEN-S usa el método exponencial de matrices para resolver el sistema acoplado, lineal, de ecuaciones diferenciales de primer orden con coeficientes constantes y puede ser llamado desde un módulo de control (ARP), o puede ser ejecutado como un programa independiente. El objetivo principal de ORIGEN-ARP es hacer posible, cálculos de combustible nuclear ya sea quemado o decaimiento, entre otros; usa secciones eficaces con espectros de energía en multi-grupos proveniente de la biblioteca de datos nucleares ENDF/B [2].

2.2 Cálculos con el código SNF.

El código SNF calcula las concentraciones isotópicas, términos fuente radiactivos, y el calor de decaimiento del combustible LWR gastado. Usa de manera ventajosa los resultados del simulador tridimensional SIMULATE5. De hecho, forma parte del sistema CMS (Core Management System) de Studsvik. La forma en que estos programas se relacionan se muestra en la Figura 1.

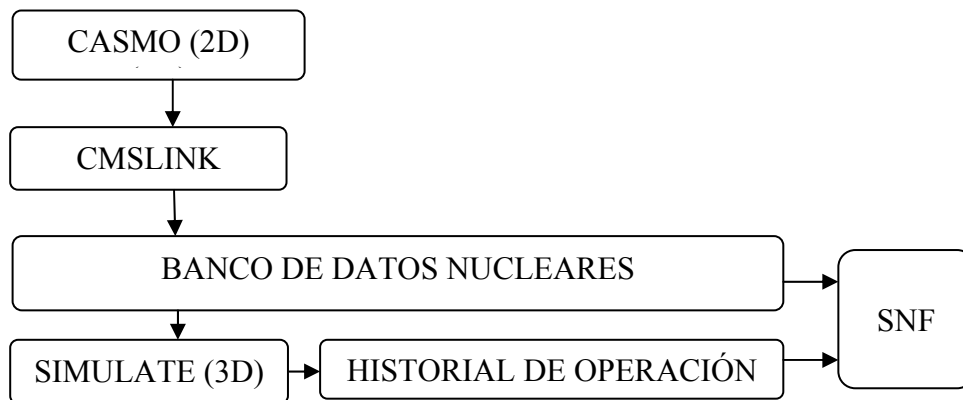


Figura 1. Sistema de simulación CMS/SNF

Se usa la versión v1.6.1 que maneja 357 isótopos, usa la biblioteca ENDF/B-VII de datos nucleares y del espectro de radiación gamma. Esta versión de SNF no considera, en general; los isótopos que tienen vida media más pequeña que unos pocos días. Una de las bondades notables en el código SNF es que toma en cuenta los efectos espectrales derivados de la operación, por ejemplo; el efecto de la historia del quemado de la barra de control sobre las concentraciones

isotópicas así como las heterogeneidades a nivel celda de ensamblaje combustible en dos dimensiones de CASMO y de tres dimensiones en SIMULTE a nivel núcleo del reactor a diferencia de ORIGEN que es esencialmente un código de cero dimensiones.

3. RESULTADOS

Los principales resultados de comparación son la concentración (g/t), está dividida en la que corresponde a 66 actínidos y la correspondiente a 285 productos de fisión; la tasa de decaimiento radiactivo (Bq/t) y el calor de decaimiento (W/t). El tiempo total de enfriamiento es de 60 años, contado a partir de que el reactor alcanza su primera criticidad.

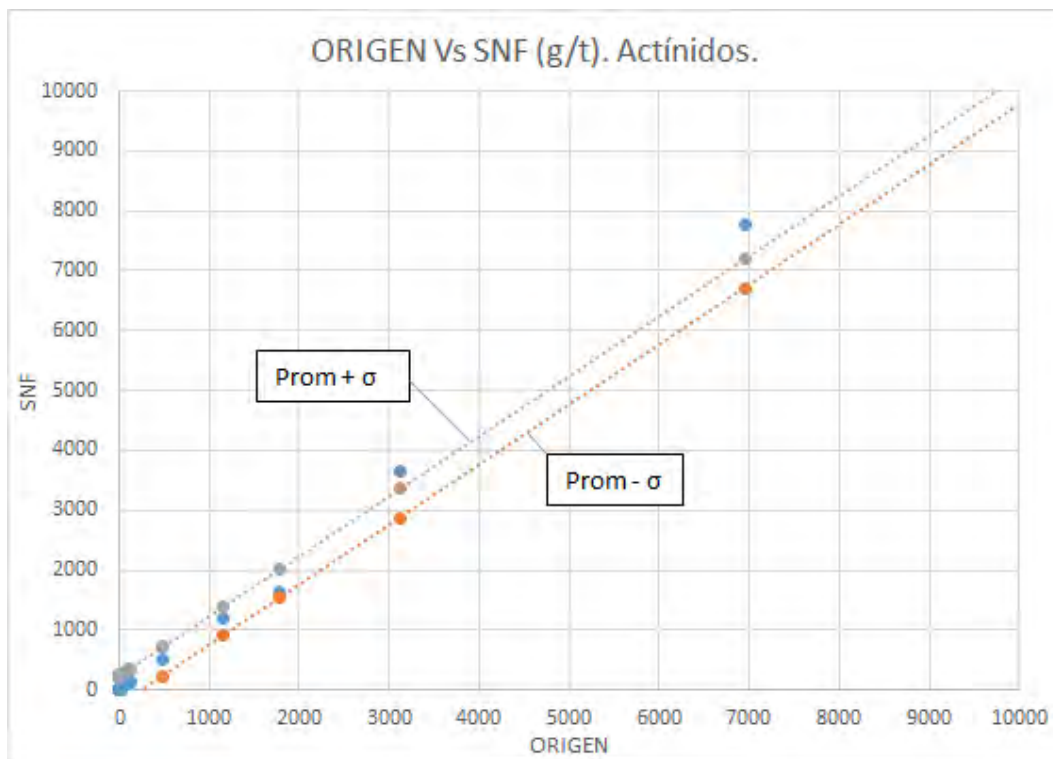


Figura 2. Concentración (g/t), actínidos.

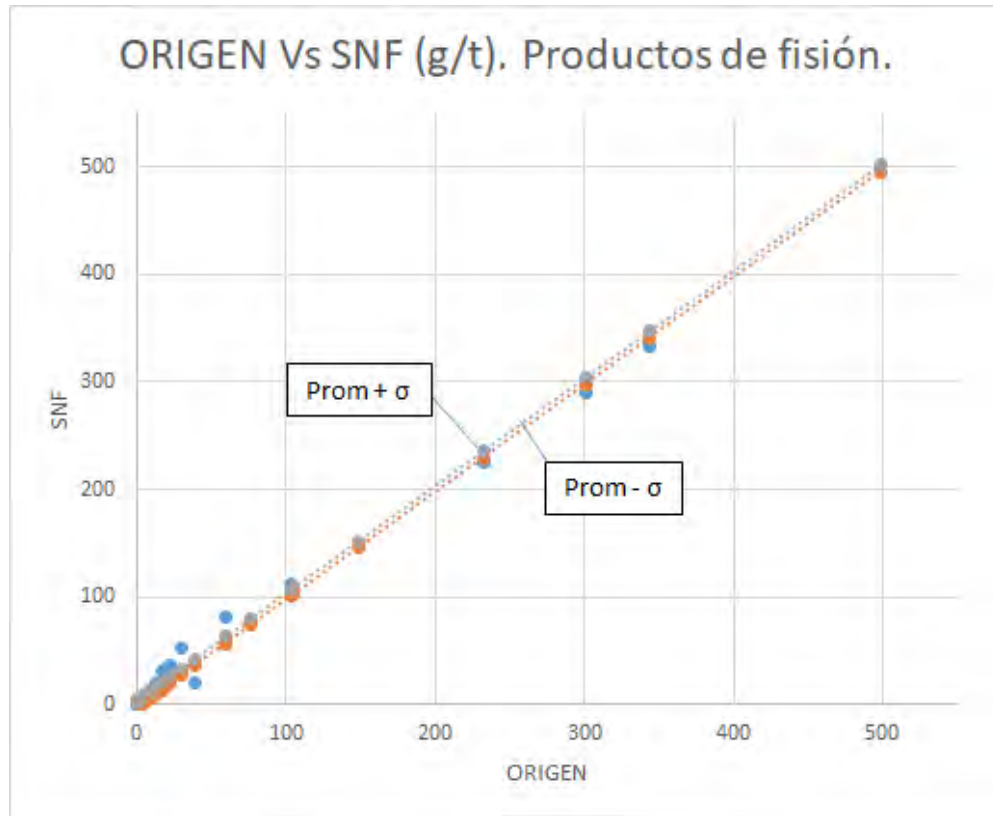


Figura 3. Concentración (g/t), productos de fisión.

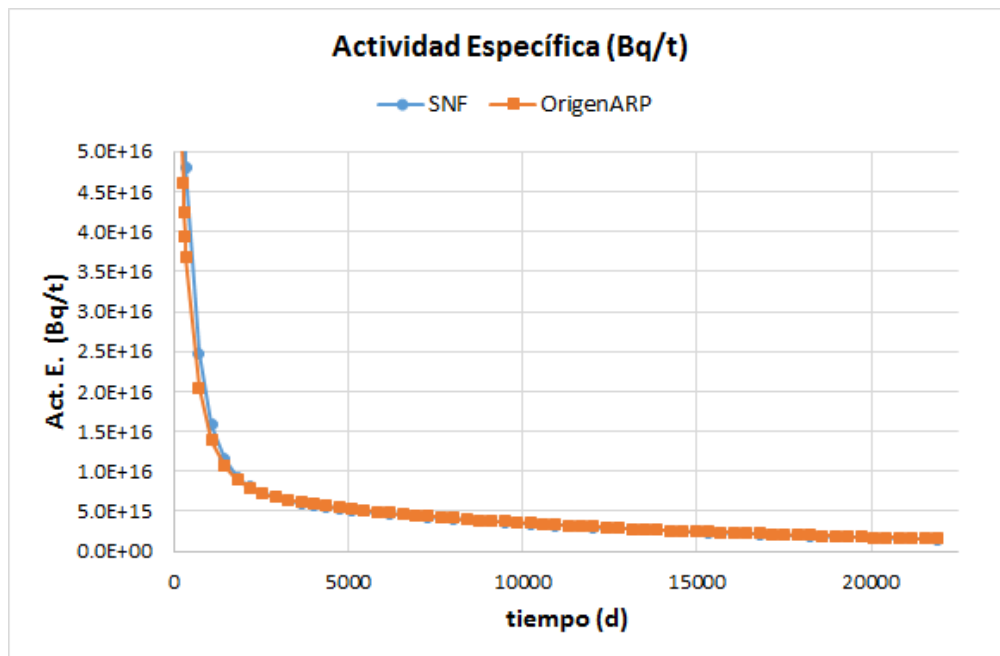


Figura 4. Actividad Específica (Bq/t) del ensamble de combustible.

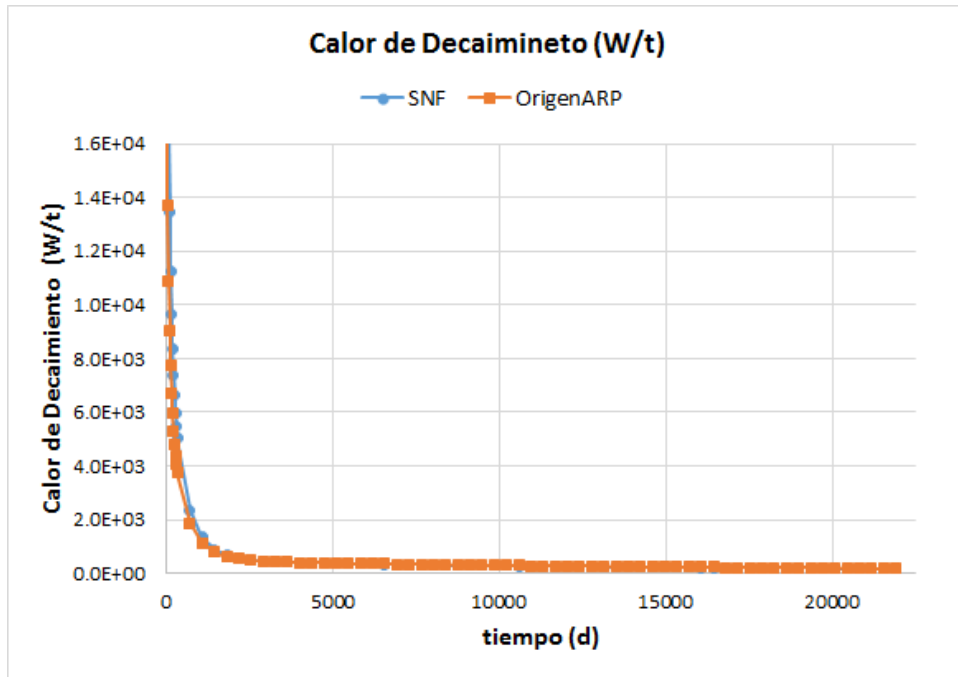


Figura 5. Calor de decaimiento (W/t) del ensamble de combustible.

El promedio de las diferencias en el cálculo de la concentración total (g/t) de los productos de fisión (Figura 3) es menor con relación al mismo para el caso de los actínidos (Figura 2), 0.74 g/t y 2.98 g/t respectivamente. Para la actividad (Figura 4) y calor de decaimiento (Figura 5), el promedio de las diferencias relativas (%) es de 2.9% y 4.0% respectivamente. Sin embargo, cuando se examina en detalle y se comparan resultados entre ORIGEN y SNF éstos difieren en forma muy dispar. Como se muestra en la Tabla II, las diferencias relativas de las concentraciones calculadas por ORIGEN y SNF en el tiempo en que se da por terminado el primer ciclo de operación correspondiente al ensamble de combustible descargado más quemado.

TABLA II. Diferencias relativas de concentración de Transuránicos y Uránicos entre ORIGEN y SNF al EOC del ensamble descargado más quemado

	ISÓTOPO	% (ORIGEN -SNF)/SNF
1	u234	2.12%
2	u235	-10.44%
3	u236	9.16%
4	u237	-38.17%
5	u238	0.13%
6	u239	-37.26%
7	np237	-8.42%

8	np238	-42.14%
9	np239	-37.26%
10	np240	-77.97%
11	pu236	-75.32%
12	pu238	-15.06%
13	pu239	-14.28%
14	pu240	-4.00%
15	pu241	-5.57%
16	pu242	-6.48%
17	pu243	-47.50%
18	am241	68.06%
19	am242m	65.07%
20	am242	-5.83%
21	am243	-27.47%
22	am244	-69.02%
23	cm242	8.33%
24	cm243	-20.87%
25	cm244	-59.71%
26	cm245	-82.98%
27	cm246	-84.49%
28	u235+pu239+pu241	-11.41%

En la Tabla III se presentan las diferencias relativas de las concentraciones reportadas por ORIGEN y SNF de los 65 isótopos radioactivos principales presentes al terminar el primer ciclo de operación correspondiente al ensamble combustible descargado con el mayor quemado. Estos 65 isótopos, son base para el cálculo denominado “término fuente” y son requeridos por códigos relacionados con el análisis de accidentes severos como el código MAAP5 [12]. Parte de los isótopos son generados por una compleja sucesión de eventos que pueden incluir absorción neutrónica y decaimientos radiactivos.

TABLA III. Diferencias relativas de la concentración de productos de Fisión y Actínidos entre ORIGEN y SNF al EOC del ensamble descargado más quemado

		Promedio Pesado por Concentración->	Diferencia Relativa -3.16%	Dif.Rel. Abs. 3.59%
		Promedio DifRel ->	-10.99%	24.87%
			%(Ori-SFN)/SNF	%Abs(Ori-SFN)/SNF
	VidaMedia	Isótopo	Dif. Relativa%	Dif. Rel. Absoluta%
1	24360 año	Pu-239	-14.276%	14.276%

XXX Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana
Aplicaciones pacíficas de la energía nuclear en beneficio de México
 Monterrey, Nuevo León, del 4 al 7 de agosto de 2019

2	6760	año	Pu-240	-4.004%	4.004%
3	458	año	Am-241	68.056%	68.056%
4	30	año	Cs-137	0.736%	0.736%
5	28.8	año	Sr-90	3.457%	3.457%
6	18.1	año	Cm-244	-59.713%	59.713%
7	13.2	año	Pu-241	-5.571%	5.571%
8	10.72	año	Kr-85	4.360%	4.360%
9	2.1	año	Cs-134	-22.593%	22.593%
10	1.01	año	Ru-106	-27.028%	27.028%
11	285	día	Ce-144	-30.024%	30.024%
12	163	día	Cm-242	8.332%	8.332%
13	109	día	Te-127m	26.061%	26.061%
14	65	día	Zr-95	-41.970%	41.970%
15	59	día	Y-91	-41.315%	41.315%
16	50.6	día	Sr-89	-40.433%	40.433%
17	39.5	día	Ru-103	-39.982%	39.982%
18	35	día	Nb-95	-45.359%	45.359%
19	34	día	Te-129m	-23.428%	23.428%
20	32.5	día	Ce-141	-38.547%	38.547%
21	18.66	día	Rb-86	-46.604%	46.604%
22	13.7	día	Pr-143	-34.944%	34.944%
23	13	día	Cs-136	-27.786%	27.786%
24	12.8	día	Ba-140	-33.405%	33.405%
25	11.92	día	Xe-131m	-51.116%	51.116%
26	11.1	día	Nd-147	-32.320%	32.320%
27	8.05	día	I-131	-31.573%	31.573%
28	5.27	día	Xe-133	-31.878%	31.878%
29	3.9	día	Sb-127	-32.818%	32.818%
30	3.33	día	Pu-238	-15.060%	15.060%
31	3.25	día	Te-132	-30.423%	30.423%
32	2.79	día	Mo-99	-31.382%	31.382%
34	2.35	día	Np-239	-37.264%	37.264%
35	2.3	día	Xe-133m	-30.554%	30.554%
36	1.68	día	La-140	-33.858%	33.858%
37	1.5	día	Rh-105	-32.340%	32.340%
38	1.37	día	Ce-143	-30.609%	30.609%
39	20.8	hr	I-133	-31.300%	31.300%
40	17	hr	Zr-97	N.A.	N.A.

41	10.1 hr	Y-93	4.430%	4.430%
42	9.7 hr	Sr-91	-30.167%	30.167%
43	9.3 hr	Te-127	-26.703%	26.703%
44	9.2 hr	Xe-135	-19.702%	19.702%
45	6.7 hr	I-135	-31.451%	31.451%
46	6.0 hr	Tc-99m	-31.217%	31.217%
47	4.48 hr	Kr-85m	-27.886%	27.886%
48	4.43 hr	Ru-105	-34.020%	34.020%
49	4.3 hr	Sb-129	-40.786%	40.786%
50	3.9 hr	La-141	-31.966%	31.966%
51	3.53 hr	Y-92	-30.619%	30.619%
52	2.84 hr	Kr-88	-30.225%	30.225%
53	2.7 hr	Sr-92	-30.613%	30.613%
54	2.3 hr	I-132	-32.205%	32.205%
55	1.37 hr	Kr-87	-29.888%	29.888%
56	1.4 hr	La-142	-31.638%	31.638%
57	1.38 hr	Ba-139	-31.701%	31.701%
58	1.25 hr	Te-131m	-33.662%	33.662%
59	1.11 hr	Te-129	-32.055%	32.055%
60	52.5 min	I-134	-31.946%	31.946%
61	42.0 min	Te-134	-27.893%	27.893%
62	17.8 min	Rb-88	-30.205%	30.205%
63	17 min	Xe-138	-29.568%	29.568%
64	15.8 min	Xe-135m	-29.115%	29.115%
65	15 min	Rb-89	-30.137%	30.137%

3.1 Discusión de Resultados

Los resultados, considerando el período de 60 años, generados por los dos programas ORIGEN y SNF, presentan estadísticamente un comportamiento similar a nivel global, principalmente para valores posteriores a un tiempo de 3 días de enfriamiento. No obstante, se esperan diferencias puesto que los modelos de simulación tienen bases y filosofías de cálculo distintos, principalmente en dicho intervalo de tiempo. En particular, el código ORIGEN usa valores representativos en cero dimensiones (0D) para los parámetros de la operación del ensamble de combustible. Mientras, SNF, utiliza resultados en tres dimensiones (3D) que provienen de la simulación detallada de la operación del reactor.

En la Tabla II se observa que el isótopo mayoritario presente en el ensamble, el U-238, reportado por ambos códigos coinciden prácticamente (-0.13%) pero ORIGEN subestima

respecto al código SNF en lo concerniente a las concentraciones de los isótopos fisiles más importantes: U-235 (-10.44%), Pu-239 (-14.28%) y Pu-241 (-5.57%), Agrupando los anteriores isótopos fisiles, la subestimación relativa de ORIGEN alcanza el 11.41%. Estas diferencias se atribuyen a que el sistema CMS/SNF trata con detalle las heterogeneidades tanto a nivel del ensamble combustible (CASMO 2D) como del núcleo del reactor (SIMULATE 3D). Esto repercute fuertemente en el proceso de conversión del U-238 en plutonios fisiles, que al consumirse por fisiones contribuyen en la producción de energía influyendo fuerte y complejamente en el remanente de U-235 y en las concentraciones isotópicas de plutonio alcanzados al final del ciclo (EOC). Es conveniente resaltar que el sistema CASMO/SIMULATE/SNF realiza cálculos estáticos del seguimiento de ciclos con modelos neutrónicos, termo-hidráulicos y de inventario isotópico que son reconocidos como “estado del arte”.

En cuanto a las bondades que tiene el código ORIGEN se debe resaltar que éste puede tratar hasta 2232 diferentes isótopos mientras que SNF sólo 285 isótopos de ellos 66 actínidos, el resto básicamente corresponde a productos de fisión, lo que influye en que ORIGEN sea más confiable en los cálculos relacionados con los productos de fisión tales como; el calor de decaimiento y la actividad total. SNF prescinde preferentemente de los isótopos generados en la fisión que son estables o cuyas vidas medias sean relativamente cortas reteniendo solo aquellos que son de mayor interés en lo asociado a la liberación de productos de fisión. Esto tiene como consecuencia que al comparar ORIGEN y SNF a través del tiempo el calor de decaimiento y la actividad totales (Figuras 4 y 5) difieran en los primeros días de enfriamiento para después disminuir ésta paulatinamente hasta un punto en el que la diferencia se puede explicar debido a que el sistema CMS/SNF trata con detalle las heterogeneidades como anteriormente se mencionó.

Las diferencias observadas en la TABLA III, diferencias relativas de la concentración de productos de Fisión y Actínidos entre ORIGEN y SNF al EOC del ensamble descargado más quemado, son a veces notable, en promedio las diferencias relativas en valor absoluto son del orden del 25% y cuando se pesan por la importancia que da su concentración alcanzada esta diferencia total baja a menos del 4%, nuevamente atribuible al trato detallado de las heterogeneidades por el sistema CMS/SNF.

4. CONCLUSIONES

Como se mencionó en la sección anterior, la Tabla III presenta los promedios de las diferencias relativas y de las diferencias relativas absolutas pesadas ponderadamente por las concentraciones de cada isótopo tal que isótopos que presentan grandes discrepancias pero concentraciones menores una parte por millón no pesan ante los isótopos como los uranios y plutonios que son más del 99% del peso del ensamble combustible.

Sin embargo hay isótopos que aún en pequeñas cantidades tiene alta actividad específica pero en general sus vidas medias son relativamente bajas tal que en pocos días o a lo más meses su importancia como contribuyentes a la actividad total disminuye notablemente. Lo anterior

explica porque en los primeros 3 a 4 días los resultados reportados por Origen y SNF difieren sustancialmente. A plazos mayores la diferencia se puede atribuir a los actínidos con un número atómico mayor a 92. SNF reporta una diferencia del orden del 12% que se puede atribuir a que el sistema CMS del que forma parte SNF si considera heterogeneidades de distribución de materiales del combustible (dos dimensiones a nivel celda y tres dimensiones a nivel Núcleo) que potencialmente debe realizar cálculos más realistas que el código Origen que es un código de cero dimensiones.

En el presente trabajo sólo se analizó un solo ensamble combustible, si bien es el que presenta el mayor grado de quemado y de ahí su importancia, pero es obvio que no es posible dar los resultados encontrados como concluyentes y es necesario realizar un análisis más profundo y de mayor amplitud; confrontado contra datos experimentales. Con base al análisis de los resultados preliminares presentados se observó que ORIGEN subestima los valores globales de actividad y de calor de decaimiento que presenta los combustibles gastados al ser descargados.

Es pertinente mencionar que la ejecución del código ORIGEN requiere sólo segundos mientras que CMS/SNF tarda horas y requiere de la formación de modelos de simulación muy elaborados que a su vez necesitan información detallada del seguimiento operativo del núcleo del reactor. En conclusión los resultados de ORIGEN y CMS/SNF se complementan y son un soporte para el análisis del combustible gastado de reactores de potencia de agua en ebullición (BWR).

Los resultados que proporcionan tanto ORIGEN como SNF son de importancia fundamental para generar el llamado Término Fuente radiactivo, que es esencial para diversos estudios y aplicaciones como son, su disposición en silos secos y/o disposición final, análisis de accidentes, incluyendo los accidentes severos, y estudios de reprocesamiento de combustible gastado.

AGRADECIMIENTOS

Los autores reconocen el apoyo de SENER-CONACYT, a través de su Fondo de Sustentabilidad Energética, al proyecto FSE-2103-04-213519 y al Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares a través del proyecto SN-002

REFERENCIAS

1. ORNL "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations", ORNL/TM-2005/39, Version 6, January 2009.
2. I. C. Gauld, O. W. Hermann, R. M. Westfall, "ORIGEN-S: SCALE System Module to Calculate Fuel Depletion, Actinide Transmutation, Fission Product Buildup and Decay, and Associated Radiation Source Terms", Nuclear Science and Technology Division, ORNL/TM-2005/39, Version 6, Volumen II, Sect. F7, (January 2009).

3. T. Simeonov, G. Anton, J. D. Rhodes, A. Becker. SNF User's Manual. Studsvik, SSP-11/328 REV3. June 11, 2011.
4. I. C. Gauld, U. Mertyurek. "Validation of BWR spent nuclear fuel isotopic predictions with applications to burnup credit". *Nuclear Engineering and Design*. **345**, p. 110-124 (2019).
5. S. Vaccaro, I. C. Gauld, J. Hu, P. De Baere, J. Peterson, P. Schwalbach, A. Smejkal, A. Tomanin, A. Sjöland, S. Tobin, D. Wiarda. "Advancing the Fork detector for quantitative spent nuclear fuel verification". *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. **888**, p. 202-217 (2018).
6. R. Plukienė, A. Plukis, L. Juodis, V. Remeikis, O. Šalkauskas, D. Ridikas, W. Gudowski. "Transmutation considerations of LWR and RBMK spent nuclear fuel by the fusion-fission hybrid system", *Nuclear Engineering and Design*, **330**, p. 241-249 (2018).
7. I. C. Gauld, J. M. Giaquinto, J. S. Delashmitt, J. Hu, G. Ilas, T. J. Haverlock, C. Romano, "Re-evaluation of spent nuclear fuel assay data for the Three Mile Island unit 1 reactor and application to code validation", *Annals of Nuclear Energy*, **87, Part 2**, p. 267-281 (2016).
8. D. Rochman, A. Vasiliev, H. Ferroukhi, M. Pecchia. "Consistent criticality and radiation studies of Swiss spent nuclear fuel: The CS2M approach." *Journal of Hazardous Materials*. **357**, p. 384-392 (2018).
9. J. D. Rhodes, R.M. Ferrer, J. Hykes, D. Kropaczek. CASMO5. A fuel Assembly Burnup Program. User's Manual. Proprietary SSP-07/431 Rev 9. Studsvik. 2015.
10. S. Vanevenhoven, T. Bahadir, J.D. Rhodes. SIMULATE5. Advanced Three-Dimensional Multigroup Reactor Analysis Code. User's Manual. SSP-1/438 Rev 5. Studsvik. 2015.
11. T. Bahadir, R. M. Ferrer, J. D. Rhodes. CMSLINK5. User's Manual. SSP-10/437 Rev 5. Studsvik. 2015.
12. Fausky & Associates, inc., "BWR MARK II Users Guide Modular Accident Analysis Program (MAAP)", Electric Power Research Institute (November 2008).

Generación y Quemado de Actínidos Menores en Flujo Rápido de Neutrones

J. Ramón Ramírez Sánchez, Javier Palacios H., Gustavo Alonso V., Eduardo Martínez C.
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera Mexico Toluca Km 36.5, Ocoyoacac Edo. De Mexico.
ramón.ramirez@inin.gob.mx, Javier.palacios@inin.gob.mx, Gustavo.alonso@inin.gob.mx,
Eduardo.martinez@inin.gob.mx

Resumen

El principal problema del combustible nuclear gastado, es la radiación que emite por periodos de tiempo muy largos. Esta radiación se debe a que el combustible contiene isótopos radiactivos de diferentes elementos formados durante la irradiación del combustible, entre ellos se encuentran los actínidos menores, que se forman por captura neutrónica de los elementos que constituyen el combustible ya sea de uranio o plutonio. Estos radionúclidos causantes del campo de radiación del combustible gastado, pueden ser transmutados en isótopos estables ó físiiles si se someten a una posterior irradiación con neutrones rápidos. Este trabajo, evalúa por cálculo la cantidad de actínidos menores generada en el combustible nuclear y la cantidad que podría ser destruida en una posterior irradiación en la cual los actínidos menores se incorporan en combustible fresco. Los resultados muestran que el combustible de uranio en un reactor rápido genera muy pocos actínidos y que en el quemado de los mismos es menos eficiente que el combustible de plutonio.

Palabras Clave: Plutonio, Combustible nuclear, Actinides, Reactor

Abstract

The main problem of spent nuclear fuel is the radiation it emits for very long periods of time. This radiation is due to the fact that the fuel contains radioactive isotopes of different elements formed during the irradiation of the fuel, among them are the minor actinides, which are formed by neutron capture of the elements that constitute the fuel, either uranium or plutonium. These radionuclides causing the radiation field of spent fuel can be transmuted into stable or fissile isotopes if they undergo subsequent irradiation with rapid or thermal neutrons. This work evaluates by calculation, the amount of minor actinides generated in nuclear fuel and the amount that could be destroyed in a subsequent irradiation in which minor actinides are incorporated into fresh fuel. The results show that uranium fuel in a fast reactor generates very few actinides and that in burning them it is less efficient than plutonium fuel.

Keywords Plutonium, Nuclear fuel, Actinides, Reactor

1. INTRODUCCIÓN

Existe en el mundo un gran interés por cerrar el ciclo de combustible, con el fin de aprovechar la energía remanente en el plutonio generado en los combustibles de uranio sometidos a irradiación en los reactores térmicos de agua ligera, esto ha dado lugar al desarrollo del combustible de plutonio y uranio llamado MOX^[1], utilizando este concepto de combustible MOX es posible aprovechar la energía contenida en el plutonio, que ya ha sido ampliamente utilizado en los reactores de agua ligera y también en los conceptos de reactores rápidos. Haciendo uso de esta experiencia se propone aquí un ensamble de combustible MOX del tipo utilizado en los actuales reactores rápidos para realizar cálculos de generación de actínidos y de su destrucción reciclando los actínidos menores en combustible nuevo.

Como herramienta de cálculo se utiliza un código de Monte Carlo llamado MCNP6, este código es de propósito general y energía continua, dependiente del tiempo y acoplamiento neutrón/fotón/electrón utilizado como código de transporte. El intervalo de energías para neutrones es de: 10^{-11} Mev a 20 Mev, y el intervalo para fotones y electrones es de: 1 kev a 1000 Mev y tiene como característica estándar, el cálculo de eigenvalores (k_{eff}) para sistemas físiles.

2. DESARROLLO

Se diseña primero la barra de combustible MOX utilizando pastillas cerámicas de óxidos mixtos con concentraciones de plutonio del orden del 20%, el plutonio utilizado es plutonio proveniente del combustible gastado de reactores de agua ligera, una vez definida la barra de combustible se define un arreglo para el ensamble, dicho arreglo es triangular, lo que nos lleva a definir un ensamble del tipo hexagonal conteniendo 127 barras en su interior y de datos de la literatura se le asigna una potencia de 4 MW y una longitud activa de 80 cm. Con esta información fue posible diseñar un concepto de ensamble combustible encapsulado en un canal de flujo de forma hexagonal^[2]. La Figura 1 muestra una sección transversal de la barra de combustible nuclear. El agujero central de la pastilla de combustible se debe a una previsión para la salida de gases de fisión de la pastilla hacia el pleno superior de la barra combustible, el material combustible es cerámico de UO₂-PuO₂ con una densidad de 10.4 g/cm³ y el material de encamisado es de acero inoxidable 316 de bajo carbón. El gap contiene He-4 a una presión de 2 bars con el fin de compensar la presión externa sobre la barra

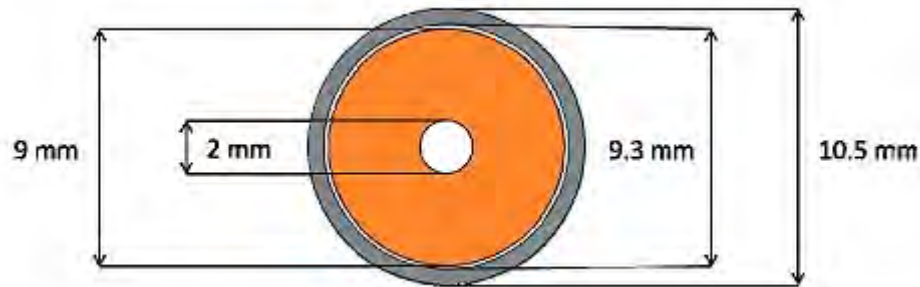


Figura 1 Corte Transversal de Barra Combustible

Una vez obtenida la barra de combustible, es posible armar un ensamble de arreglo triangular en el interior de un canal hexagonal, como el utilizado en los ensambles de combustible de reactores rápidos^[3], obteniendo así el ensamble necesario para conceptualizar el núcleo completo. La Figura 2 muestra el corte transversal del concepto de ensamble, que en total tiene un arreglo triangular de 127 barras de combustible.

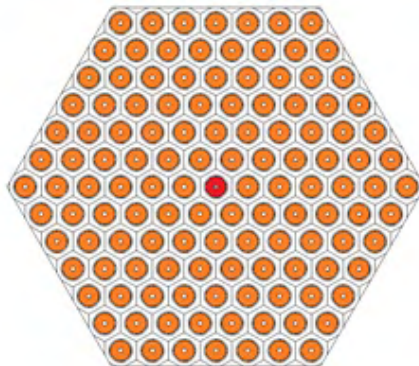


Figura 2 Ensamble de combustible nuclear con 127 Barras

Utilizando el código de cómputo MCNP6 se modelaron las barras de combustible y el ensamble completo, de lo que sería en principio un ensamble de combustible para reactor rápido, esto se consigue evitando moderar los neutrones en el reactor, por lo que se incluye al sodio como refrigerante. Con la geometría propuesta y habiendo definido el combustible como UO₂ cerámico ó Oxido mixto de uranio plutonio, utilizando plutonio grado reactor, se realizaron corridas del Código MCNP6 para diferentes pasos de quemado y utilizando combustibles de plutonio y uranio enriquecido, los resultados se muestran en la sección 3 de este trabajo. Los parámetros utilizados para el cálculo neutrónico del ensamble de combustible se dan en la Tabla I

Tabla I Parámetros del Ensamble de Combustible

Potencia por Ensamble	4.0 MWth
Ensamble de Combustible	Hexagonal
Número de barras	127
Longitud Activa	80 cm
Pitch de barra	14 mm
Diámetro externo de Barra	10.5 mm
Diámetro externo de Pastilla	9 mm
Diámetro interno de Pastilla	2 mm
Gap	0.75 mm
Espesor de Encamisado	0.5 mm
Material de Encamisado	SS-316L
Material Combustible	MOX, Reactor Grade Pu
Concentración de Pu	23 %
Concentración de Uranio Físil	0.25 % from uranium tails
Densidad de Combustible	10.4 g/cm ³
Espesor del Canal Hexagonal	2 mm

El vector de composiciones de Actínidos menores se obtuvo de cálculos de quemado de combustibles de uranio enriquecido, utilizando el Código CASMO 4^[5], Tabla II.

Tabla II Concentraciones de Actínidos Menores

Isótopo	Np-237	Am-241	Am-243	Cm-244
% Peso	61.59	6.47	25.11	6.83

El vector de composiciones de los isótopos de plutonio fue tomado del documento Technical Series Report - 415 del IAEA, este corresponde a un quemado de 43000 Mwd/TU^[4], Tabla III.

Tabla III Concentraciones de plutonio grado reactor

Isótopo	Pu-238	Pu-239	Pu-240	Pu-241	Pu-242
% Peso	1.6	60.13	24.5	8.8	5.0

RESULTADOS

Los resultados del cálculo neutrónico y quemado del ensamble, se obtuvieron considerando primero, que el combustible es uranio enriquecido al 25% de ²³⁵U para determinar su comportamiento en flujo rápido, en este caso se introdujo en el cálculo solamente el uranio enriquecido para determinar las cantidades de actínidos resultantes de la irradiación, (Tabla IV). Con el mismo modelo se calculó un segundo caso incluyendo un 6% de actínidos menores con la composición mostrada en la Tabla II, para evaluar la cantidad de actínidos quemados durante la irradiación,

**Tabla IV Resultados para el combustible de Uranio Enriquecido (gramos)
 Dos casos, uranio enriquecido y uranio enriquecido más 6% de actínidos**

UOX	25% U físil		25% U físil+6%Ac	
	0 GWd/TU	66.48 GWd/TU	0 GWd/TU	66.48 GWd/TU
U-235	15360	11460	14080	11140
U-238	38800	37310	38410	37200
Pu-238	0	1.773	0	129.8
Pu-239	0	1024	0	849.5
Pu-240	0	28.30	0	44.72
Pu-241	0	0.5081	0	0.768
Pu-242	0	0.006	0	5.751
Np-237	0	26.43	964.8	819.8
Am-241	0	0	249.2	202.9
Am-243	0	0	2364	2013
Cm244	0	0	262	480
TOTAL	Actínidos M.	26.43	3840	3514

El segundo proceso de cálculo fue similar al anterior, en las mismas condiciones de quemado, esto es a 66.48 Mwd/TU solo cambiando el uranio enriquecido por Plutonio de grado reactor con concentraciones de 22% y composición como la descrita en la Tabla III, los resultados se muestran en la Tabla V.

**Tabla V Resultados para Combustible de Plutonio Grado Reactor (gramos)
 Dos casos plutonio grado reactor y plutonio más 6% de actínidos menores**

MOX	22% Pu		22%Pu+6%A	
	0 GWd/TU	66.48 GWd/TU	0	66.48 GWd/TU
U-235	118.4	80.66	265.3	184.8
U-238	39920	37940	37100	35320
Pu-238	189.3	146	181.4	499
Pu-239	8868	7525	8515	7271
Pu-240	3317	3451	3178	3285
Pu-241	1174	857	1125	824
Pu-242	579	582	555	562.6
Np-237		11.64	2001.0	1507.0
Am-241		99.5	210.2	249.4
Am-243		34.46	815.4	663.4

Cm244		4.32	221.9	306.8
TOTAL de	Actínidos M.	149.92	3248.5	2733.8

3. CONCLUSIONES

Para el caso del combustible de uranio la cantidad de actínidos generada en el combustible fresco es solo de 26 gramos del Np-237, mientras que; para el plutonio grado reactor, es de 150 gramos con la principal contribución de los americios 241 y 243, lo que hace sentido ya que provienen de las capturas en los isótopos del plutonio.

Para el caso de quemado de actínidos, con respecto a la cantidad inicial agregada al combustible, en el combustible de uranio se quemaron 326 gramos de actínidos, (8.5%), mientras que en el caso del combustible de plutonio se quemaron 514 gramos (16%), en particular el Np-237.

Estos resultados permiten concluir que usar el combustible de plutonio para la transmutación de los actínidos menores lleva algunas ventajas sobre el combustible de uranio enriquecido y sería el más deseable a ser usado si el propósito principal es reciclar el combustible gastado en reactores rápidos por medio de la transmutación y quemado de actínidos menores.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, el apoyo proporcionado para la elaboración de este trabajo y participación en el congreso de la Sociedad Nuclear Mexicana realizado en la 2019.

REFERENCIAS

- 1.- **Waltae Alan E. and Reynolds Albert B. Fast Breeder Reactors. New York Pergamon, (1981).**
- 2.- World Nuclear Association /information-library/current-and-future-generation/fast-neutron-reactors.aspx, <http://www.world-nuclear.org>. mayo (2018).
- 3.- G. Grasso, C. Petrovicha, K. Mikityukb, D. Mattiolia, F. Mannic, D. Gugiu, “Demonstrating the Effectiveness of the European IFR Concept: the Alfred Core Design”, *IAEA-CN-199/312, Conference Paper IAEA*, March (2013)
- 4.- International Atomic Energy Agency, “Status and Advances in MOX Fuel Technology”, *IAEA Technical Report Series 415*, Vienna (2003).
- 5.- **J. Ramon Ramirez S., Raúl Pineda A., Gustavo Alonso, Javier Palacios H. Eduardo Martinez, “Minor Actinides Incineration in a Sodium Fast Reactor Subassembly”, *PHYSOR 2018: Reactor Physics paving the way towards more efficient systems, Cancun, Mexico, April 22-26, (2018)***

Implementación del método de descomposición en dominios en AZTRAN

Julian A. Duran Gonzalez, Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas
Av. Luis Enrique Erro s/n, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco, Delegación
Gustavo A. Madero, C.P. 07738, Ciudad de México; México.
redfield1290@gmail.com; edmundo.delvalle@gmail.com

Armando M. Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México Toluca-La Marquesa s/n, Ocoyoacac, Estado de México, C.P. 52750
armando.gomez@inin.gob.mx

Resumen

En el presente trabajo se describe la implementación del método de descomposición en dominios al código de transporte de neutrones AZTRAN (AZtilan TRANsport). El código es una herramienta desarrollada para la Plataforma AZTLAN, el cual está escrito en Fortran 90 para el análisis neutrónico de reactores nucleares. AZTRAN resuelve numéricamente la ecuación de transporte con dependencia en tiempo con geometría cartesiana en ordenadas discretas. La arquitectura de las computadoras en la actualidad permite que los códigos se ejecuten en paralelo usando sus componentes como los procesadores o los GPUs con el fin de reducir el tiempo de cómputo. Es debido a esto que se ha hecho un esfuerzo en paralelizar códigos que resuelven modelos físicos como la ecuación de calor o difusión, en los cuales se ha podido implementar el método de descomposición en dominios. El método consiste en descomponer el dominio espacial en subdominios, los cuales van a ser distribuidos en procesadores con el fin de que cada proceso resuelva en simultáneo el subdominio y al final de aproximar el flujo en cada subdominio se actualizan las fronteras. Este método fue implementado en la versión bidimensional estacionaria del código AZTRAN utilizando la interfaz de paso de mensaje (MPI), en la cual se simuló el Benchmark C5G7-2D en estado estacionario, el cual presentó resultados alentadores que motivan a realizar una versión completamente paralelizada tridimensional.

1. INTRODUCCIÓN

En el proyecto AZTLAN Platform [1][2], el cual está en desarrollo, las herramientas para análisis el neutrónico están actualizándose constantemente. Tal es el caso del código AZTRAN [3][4], que resuelve numéricamente la ecuación de transporte (1) con dependencia en tiempo y en geometría cartesiana, discretizando sus 7 variables independientes con los siguientes métodos:

variable espacial (\vec{r}): método nodal RTN-0 (Raviart-Thomas-Nédélec)

variable energía (E): método de multigrupos

variable ángulo ($\hat{\Omega}$): método de ordenadas discretas S_N

variable tiempo (t): método θ

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) + \hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) = S(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \quad (1)$$

donde $\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ es el flujo angular, $v(E)$ es la velocidad de los neutrones, $\Sigma_t(\vec{r}, E, t)$ es la sección eficaz macroscópica total, y $S(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ es la fuente de neutrones por precursores de neutrones retardados, fisiones y dispersiones. Para resolver la ecuación, el flujo neutrónico es obtenido usando el método de iteración de fuente y el factor de multiplicación efectiva se resuelve con el método de las potencias.

Actualmente las computadoras tienen una capacidad de cómputo considerable, por lo que hay un interés en las simulaciones numéricas en paralelizar sus códigos para reducir considerablemente el tiempo de cómputo. De hecho, hay casos de códigos neutrónicos que utilizan la técnica de ordenadas discretas como por ejemplo DENOVO [5], PARTISN [6], y PENTRAN [7] que han sido paralelizados. Los desarrollos más comunes para paralelizar las variables espaciales son el método Koch-Baker-Alcouffe (KBA) [8] y el método de Descomposición en Dominios (DDM) [9][10]. Para este trabajo se optó por implementar el segundo.

En AZTRAN se implementó una versión paralelizada por grupo de energía [11], con el problema de que la versión limita los procesos al número de grupos de energía del problema. Para poder hacer mayor uso de los recursos computacionales se implementó el método DDM en la versión bidimensional estacionaria del código mediante la utilización de la herramienta de interfaz de paso de mensajes (MPI) [12], con lo cual se obtuvo una reducción de tiempo admisible.

2. MÉTODO DE DESCOMPOSICIÓN EN DOMINIOS

En los últimos años, se ha prestado mucha atención en los métodos de descomposición en dominios ya que permiten obtener la solución de ecuaciones diferenciales parciales que se basan en una partición del dominio del problema físico. En general el método consiste en dividir el dominio en pequeños subdominios los cuales pueden ser asignados a diferentes procesadores e ir iterando para coordinar la solución entre subdominios adyacentes los cuales van a necesitar comunicarse. Dado que los subdominios se pueden manejar independientemente, estos métodos

son muy atractivos para la computación en paralelo.

Hay dos formas de trabajar la descomposición en dominios: con particiones con traslape y sin traslape. En el primero cada subdominio puede traslaparse con sus vecinos y en el segundo los subdominios sólo se intersectan en las fronteras; en la Figura 1 se muestra los dominios.

Dominios con Traslape vs sin Traslape

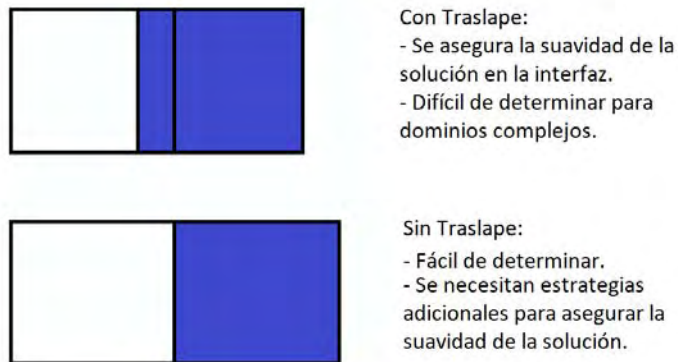


Figura 1. Dominios con traslape vs sin traslape

En la Figura 2 se muestra un ejemplo de nuestro caso de interés.

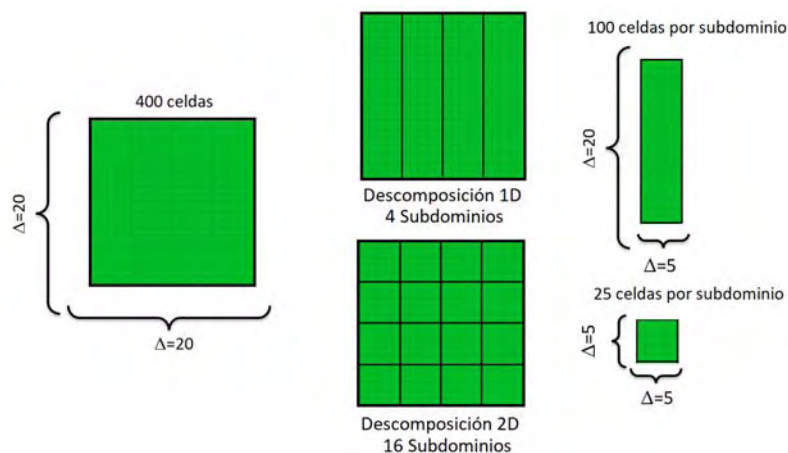


Figura 2. Tipo de descomposición problema bidimensional

2.1. Implementación del DDM en AZTRAN

Para la implementación en el código AZTRAN se seleccionó una descomposición 2D con dominio sin traslape. Además, se dispuso que los subdominios sean balanceados, esto quiere decir que cada proceso tiene el mismo número de celdas. Si el problema no presentara un dominio balanceado se tendría que hacer un refinamiento interno en el archivo de entrada lo que significa aumentar la partición espacial, todo esto poder balancearlo. En la Figura 3 se presenta la forma en que se distribuye los subdominios en 16 procesos en AZTRAN.

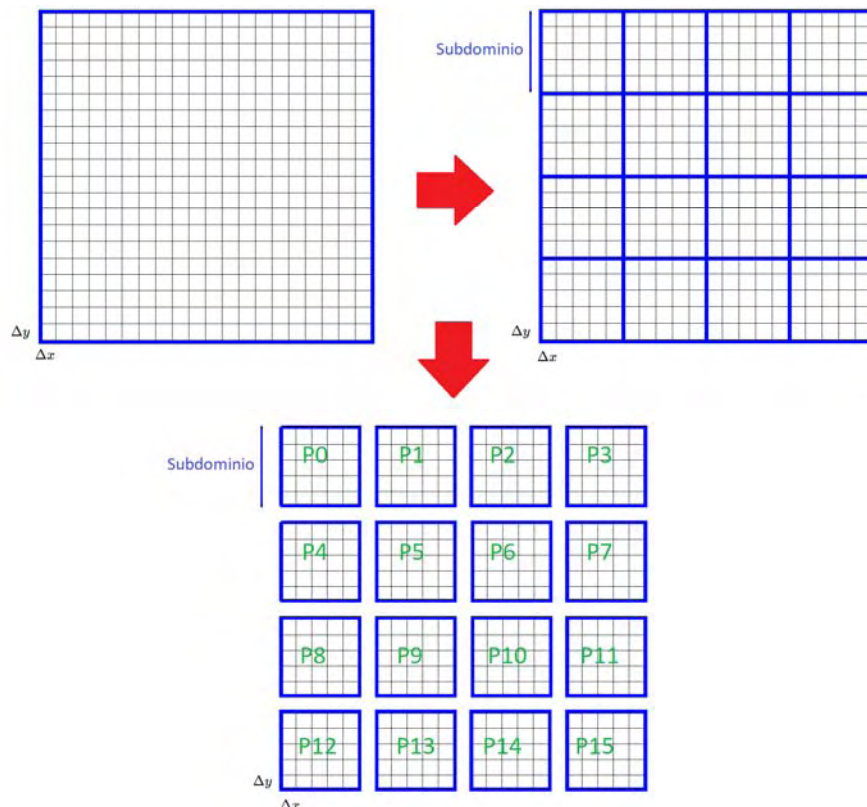


Figura 3. Descomposición de Dominio en AZTRAN

Para la implementación del DDM en AZTRAN se utilizó la interfaz de paso de mensajes (MPI). Para empezar, es necesario la creación de una topología cartesiana virtual que permite la partición del dominio en los procesadores, la biblioteca MPI proporciona las herramientas para la creación de una topología. La topología cartesiana es generada con la función `MPI_CART_CREATE()` la cual crea una nueva comunicación con la topología dada; la función `MPI_CART_COORDS()` devuelve las coordenadas del comunicador cartesiano con el cual se puede construir el dominio de cada subdominio y finalmente con la función `MPI_CART_SHIFT()` se puede conocer los subdominios vecinos de cada procesador.

Ya con los subdominios asignados en los procesos, el problema del flujo neutrónico es resuelto con el método de iteración de fuente y al resolver los subdominios en paralelo se procede a actualizar las fronteras de los subdominios usando la función `MPI_SENDRECV()` con la cual en una sola llamada se mandan los valores de la frontera de un subdominio y lo recibe el proceso que contiene al subdominio vecino. Cabe resaltar que la comunicación depende de la dirección angular. En la Figura 4 se muestra cómo se comunican los subdominios para cada dirección angular en un problema bidimensional donde $\hat{\Omega} = (\mu, \eta)$.

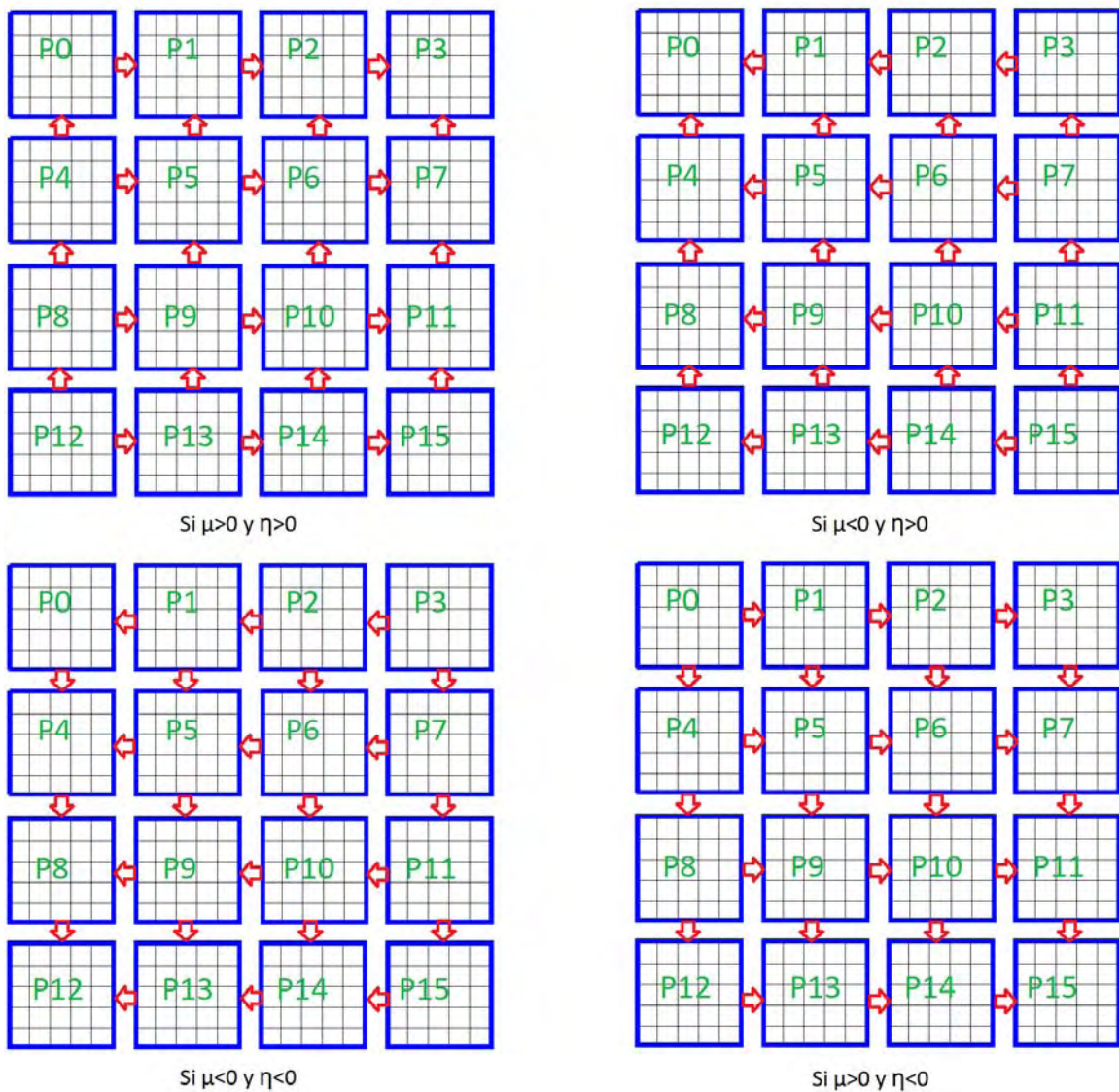


Figura 4. Comunicación de subdominios

3. RESULTADOS

Para la verificación se consideró el Benchmark C5G7-2D el cual es un problema adecuado para esta metodología debido a su complejidad por tamaño, diseño y heterogeneidad. Este problema de 7 grupos de energía es modelado con un cuarto de núcleo con simetría, las dimensiones generales son 64.26 x 64.26 cm, cada ensamble es de 21.42 x 21.42 cm, las condiciones de frontera aplicadas son reflexivas en la parte superior e izquierda, mientras en la derecha e inferior se aplican condiciones de vacío. Cada ensamble de combustible está compuesto por una celda de 17x17. En la Figura 5 se muestra la configuración del problema y una descripción detallada del Benchmark junto a sus secciones eficaces pueden ser encontradas en la referencia [13].

El equipo utilizado para realizar las simulaciones cuenta con una familia de procesadores Intel® Xeon® CPU E5-2699 v3 @2.30GHz x 72.

En la Tabla I se muestran los resultados obtenidos por AZTRAN con una tolerancia de 1.0E-08 para las iteraciones internas y 1.0E-07 para las externas, los cuales se comparan con PARTISN en el trabajo [14].

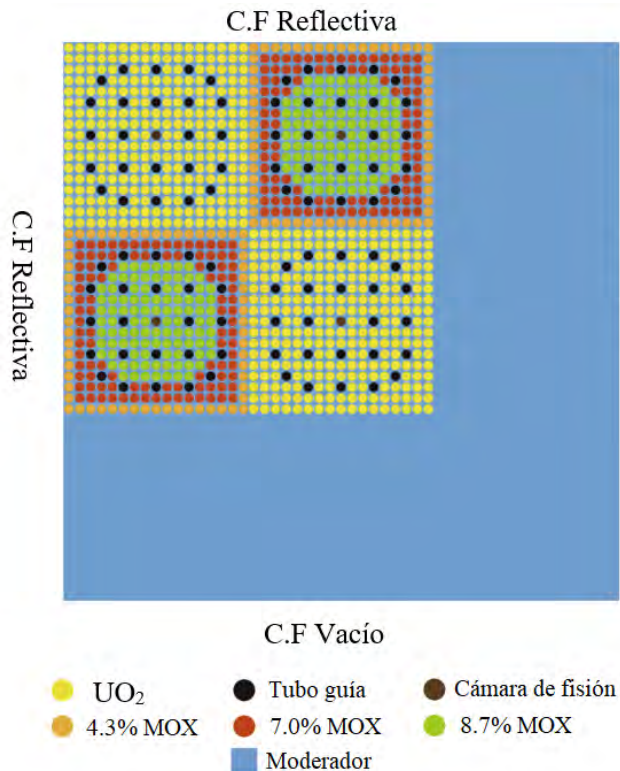


Figura 5. Modelo Benchmark C5G7-2D

Tabla I. Factores de multiplicación efectiva C5G7-2D

Ordenada Discreta	k_{eff} (AZTRAN)	k_{eff} (PARTISN)	Diferencia pcm
S_2	1.18654	---	
S_4	1.18473	1.18459	-12 pcm
S_6	1.18480	1.18468	-10 pcm
S_8	1.18501	1.18477	-20 pcm
S_{12}	1.18556	1.18556	0 pcm
S_{16}	1.18598	1.18599	1 pcm

$$pcm = \frac{k_{ref} - k_{AZTRAN}}{k_{ref}} \times 10^5 \quad (2)$$

Para resolver el problema con DDM se les asignó a los procesadores diferentes configuraciones de subdominios para poder observar el comportamiento de cómo es acelerado el problema, en la Figura 6 se muestran las configuraciones propuestas.

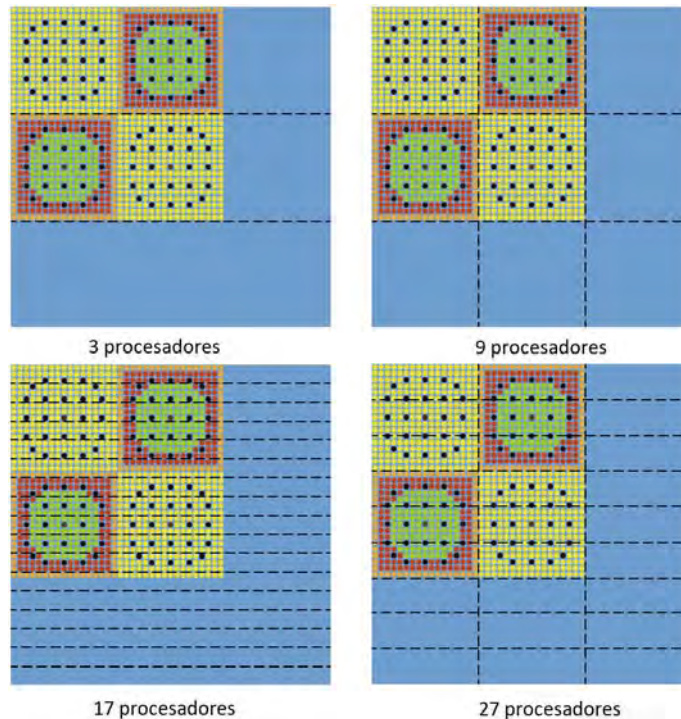


Figura 6. Configuración de subdominios propuestos

Aplicando estas configuraciones se obtuvieron la Tabla II y III que muestran los resultados de los tiempos de cómputo, y así como el número de iteraciones internas totales.

Tabla II. Tiempos de cómputo sin refinamiento

Número de procesadores	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{12}	S_{16}
1	441 s	1626 s	5091 s	5816 s	19110 s	35649 s
3	334 s	1066 s	3713 s	3813 s	13733 s	22676 s
9	258 s	722 s	2313 s	2473 s	10556 s	13317 s
17	359 s	996 s	2816 s	3326 s	13153 s	18697 s
27	431 s	1235 s	3385 s	4058 s	11958 s	25300 s

Tabla III. Tiempos de iteraciones internas totales sin refinamiento

Número de procesadores	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{12}	S_{16}
1	14946	15201	15163	15183	15146	15140
3	24059	24377	24388	24394	24404	24069
9	25572	26197	25841	26194	25874	25806
17	30142	29967	30001	29387	30047	29538
27	28193	28492	28493	28495	28500	28680

En las Tablas IV y V se muestran resultados, los cuales se obtuvieron aplicando un incremento en el refinamiento espacial en el archivo de entrada.

Tabla IV. Tiempos de cómputo con un refinamiento (2x2)

Número de procesadores	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{12}	S_{16}
1	2545 s	6884 s	16050 s	26434 s	54957 s	130127 s
3	1678 s	4544 s	15989 s	19783 s	33533 s	88810 s
9	1096 s	2973 s	9826 s	13645 s	32186 s	52444 s
17	1448 s	4014 s	11976 s	17497 s	39445 s	71441 s
27	1783 s	4950 s	12674 s	21665 s	47494 s	79774 s

Tabla V. Tiempos de iteraciones internas totales con un refinamiento(2x2)

Número de procesadores	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{12}	S_{16}
1	14630	15154	15180	15123	15132	14578
3	23794	24379	24397	23467	24407	24414
9	25657	26193	26196	26193	25878	25890
17	30125	30017	30044	30038	30060	30072
27	28319	28511	27872	28512	28516	28517

En las Tablas II y IV se observa que hay un ahorro de tiempo plausible respecto al cálculo con un procesador, y además al aumentar el número de procesadores no lleva necesariamente a mayor aceleración y eso se debe a que existe mayor comunicación.

Finalmente, en las Tablas III y V se puede notar que el número de iteraciones internas totales se incrementa al realizar una descomposición en dominios, y esto es consecuencia de que al tener mayores subdominios se necesitan más iteraciones para converger, ya que al inicio del proceso iterativo se empieza con un valor inicial pero solo unos cuantos subdominios son resueltos bien ya que son los que están cerca de la frontera donde se conoce el valor del flujo, así que se necesitan iteraciones extras para que se actualicen los otros subdominios alejados de las fronteras.

Para poder cuantificar la aceleración del método se define el “speedup” en la ecuación (3), el cual está dado como el cociente del tiempo obtenido en serie entre el tiempo resultante en paralelo.

$$S_p = \frac{T_s}{T_p} \tag{3}$$

En la Figura 7 se muestra el “speedup” obtenido para cada refinamiento y aproximación angular, en el cual se puede observar que el mayor ahorro se obtiene con la configuración con 9 procesadores, ya que se tiene una distribución ideal, además ya se ha documentado que la descomposición 2D tiene mayor aceleración que la 1D.

También se aprecia que al aumentar la aproximación angular se tiene un mayor “speedup”. Esto se debe a que antes de actualizar las fronteras de los subdominios, el algoritmo puede trabajar más tiempo en paralelo antes de que exista la comunicación entre procesadores.

Finalmente se puede apreciar que en los refinamientos 2x2 sus comportamientos son erráticos y es probable que al aumentar el mallado espacial, se debe seleccionar otra configuración de subdominios con la cual se pueda obtener mejor “speedup”.

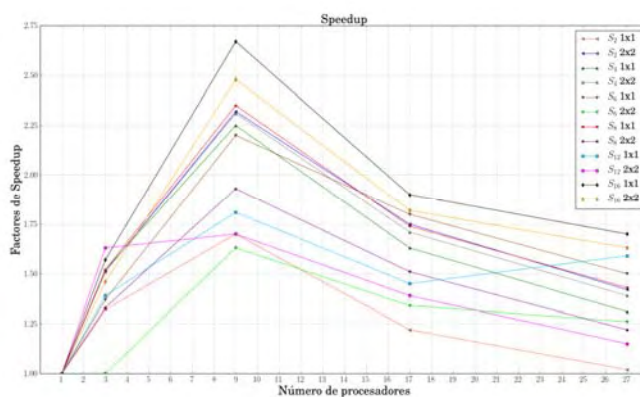


Figura 7. Speedup obtenido para cada configuración

4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se presentó la implementación del método de descomposición en dominios al código AZTRAN, obteniendo resultados alentadores. Al realizar las pruebas se encontró que el método existe mayor “speedup” al aumentar la aproximación angular, además el método está muy ligado a la discretización espacial con lo cual al aumentar el dominio espacial se puede hacer uso de mayores recursos computacionales, aunque como se muestra en el trabajo se necesita realizar una descomposición 2D balanceada para obtener el mayor ahorro.

No obstante, se pueden implementar mejoras para obtener un mayor “speedup” como es el caso de implementar una versión paralela de rebalance de malla gruesa, con el cual se reduciría el número de iteraciones internas. También se optaría por implementar una versión híbrida con openMP para paralelizar la variable de energía con lo que finalmente se implementaría una versión tridimensional paralela.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACYT-SENER.

El primer autor agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca que está siendo otorgada para la realización de sus estudios de doctorado.

REFERENCIAS

1. “AZTLAN Platform”, <http://www.aztlanplatform.mx> (2019).
2. Gómez Torres, A. M., Puente Espel, F., del Valle Gallegos, E., François, J. L., Martín-del-Campo, C. and Espinosa-Paredes, G. (2015). AZTLAN: Mexican Platform for Analysis and Design of Nuclear Reactors. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France. May 03-06. Paper 15493.
3. Duran Gonzalez, Julian Arturo. *Implementación de la Cinética en el Código de Transporte Tridimensional AZTRAN*, tesis maestría, Instituto Politécnico Nacional, ESFM, cdmx (2017).
4. Duran Gonzalez Julian A., del Valle Gallegos Edmundo, Gómez Torres Armando M., “Implementación de la Cinética en el Código de Transporte AZTRAN”, *Memorias XXVIII Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana*, 18 al 21 de junio de 2017.
5. Evans Thomas, Stafford Alissa, Clarno Kevin, “Denovo—A New Three-Dimensional Parallel Discrete Ordinates Code in SCALE”, *Nuclear technology*, **171**, p. 171-200 (2010).
6. R Alcouffe, R. S. Baker, J. A. Dahl, A. Turner, “PARTISN Code Abstract”, *Physor 2000 International Topical Meeting, Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium*, Pittsburgh, USA, (2000).

7. T. Courau and G. Sjoden, “3D Neutron Transport and HPC: A PWR Full Core Calculation Using PENTRAN SN Code and IBM BLUEGENE/P Computers,” *Progress in Nuclear Science and Technology*, **2**, 628–633 (2011).
8. K. Koch, R. Baker, R. Alcouffe, “Solution of the first-order form of the 3-D discrete ordinates equation on a massively parallel processor”, *Transactions of the American Nuclear Society* **65** (1992) 198–199.
9. E. MASIELLO, B. MARTIN, and J.-M. DO, “Domain Decomposition and CMFD Acceleration Applied to Discrete-Ordinate Methods for the Solution of the Neutron Transport Equation in XYZ Geometries,” *Proc. Int. Conf. Mathematics and Computational Methods (M&C2011)*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8–12, 2011.
10. R. LENAIN et al., “Domain Decomposition Method for 2D and 3D Transport Calculations Using Hybrid MPI/OpenMP Parallelism,” *Proc. Int. Conf. Mathematics and Computational Methods (M&C2015)*, Nashville, Tennessee, April 19–23, 2015.
11. Duran Gonzalez Julian A., del Valle Gallegos Edmundo, Gómez Torres Armando M., “Paralelización, en Grupos de Energía y Direcciones Angulares en el Código AZTRAN usando MPI”, *Memorias XXIX Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana*, 2 al 5 de julio de 2018.
12. Gropp, W., E. Lusk, and A. Skjellum, *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface*, Cambridge, Massachusetts: MIT Press, (1994).
13. “Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenization”, www.oecd-nea.org/science/docs/2003/nsc-doc2003-16.pdf (2003).
14. R Alcouffe, R. S. Baker, J. A. Dahl, A. Turner, “PARTISN Results for the C5G7 MOX Benchmark Problems”, *Physor 2002 International Conference on the New Frontiers of Nuclear Technology: Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing*, Seoul, Korea, (2002).

Neutronic study of the NuScale core with different accident tolerant fuels

Sadiel Pino-Medina and Juan-Luis François

*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería,
Departamento de Sistemas Energéticos. Av. Universidad 3000, C.U., 04510 Ciudad de México
pinosadiel@gmail.com; jlfl@fi-b.unam.mx*

Abstract

The modular design flexibility of small nuclear reactors goes beyond offering a baseload always available in the power grid, it considers the possibility of providing clean water, heat, and many more applications to meet the greatest needs around the world with a smarter, safer and simplified design. Joining to this, safety is a concept that has recently drawn attention in the Small Modular Reactors, among which the NuScale stands out, in particular. This reactor offers a unique integral design with enrichment below 5%, a thermal power of 160 MW and 24-month operating cycles, also guaranteeing safe shutdown by redundant passive systems. In this work the core of the NuScale reactor is simulated with the Serpent Monte Carlo code, with the objective of analyzing important steady state core parameters and making a comparison between different accident tolerant fuels, such as ceramic fuels (UO_2 , U_3Si_2) and metallic fuels ($U-10Zr$). The results predict the behavior of the core through k_{eff} and ppm of boron vs fuel burnup, the Doppler, moderator density and temperature coefficients, the radial and axial distribution of power and the neutron spectrum of each of the studied fuels. The results show no significant differences in the core performance for the studied fuels according to the analyzed neutronic parameters.

1. INTRODUCTION

The safe, reliable and economical operation of nuclear power reactors has always been a priority for the nuclear industry. Continuous improvement of technology, including advanced materials and nuclear fuels, remains critical to the success of the industry. The objective of the development of accident tolerant fuels is to identify technologies and alternative fuel systems to further enhance safety, competitiveness and economics of the commercial nuclear energy.

The interest in the development of reactors of low power capacity is reflected in the number of small modular reactors (SMR) that are under development and the numerous innovative concepts that are being investigated for electricity generation and for non-electrical applications. In recent years, the NuScale reactor [1] has been highlighted, presenting a compact design with natural flow circulation systems and unique passive safety systems, which

guarantee high levels of safety and reliability of the plant. The light water nuclear reactors (LWR) currently in operation are based on fuel systems composed of uranium dioxide (UO_2) with a coating of a zirconium-based alloy. The fuel oxide-zircalloy system has been optimized for several decades and performs well in normal operation and in transients.

After the Japan earthquake in 2011, and the events that followed at the Fukushima nuclear power plant, the global interest in development of accident-tolerant fuels with a better performance against core exposure events has considerably increased [2][3]. The accident tolerant fuels (ATF) are defined as fuels that can tolerate a serious accident in the reactor core for a longer period of time than the current fuel system, while maintaining or improving the fuel efficiency during normal operation and operational transients. Any new fuel concept should be evaluated with respect to the current design, operational, economic and safety requirements to assess safety compliance with operational and economic constraints [2].

A NuScale plant consists of 12 independent modules, each capable of producing a net electrical power of 45 MWe. Each module includes a pressurized light water reactor that operates under primary flow conditions of natural circulation. Each reactor is housed inside its own high-pressure containment vessel that is submerged under water in a concrete pool lined with stainless steel [4] [5]. The core of this reactor is designed to use UO_2 (enrichment <5 wt% U_{235}/U) as fuel as well as the LWR.

In this work, the use of other fuels such as U-10Zr and U_3Si_2 in the reactor core is evaluated. The results obtained compare the use of these fuels through the reactivity coefficients and the burning of the fuel during an equilibrium cycle [6]. This paper is organized as follows: Section two gives a general description of the studied reactor and section three shows how the NuScale core model was set up in the Serpent code and shows the composition of the fuels studied in the equilibrium cycle. Section four presents the results of the neutron spectrum, the neutron multiplication factor, the boron reactivity coefficient and the boron control, as well as the temperature and density coefficients of the moderator, the Doppler coefficient, the axial and radial power distribution in the core and the shutdown margin.

2. THE NUSCALE REACTOR

The integrated reactor pressure vessel contains the core, a helical coil steam generator, and a pressurizer. The core consists of an array of reduced height LWR fuel assemblies and control rod clusters at standard enrichments. The main characteristics of this reactor are summarized in Table I.

There are essential features of the NuScale plant, which make this reactor different from many other small nuclear plants being developed today. The first is its compact size; the unit can be entirely prefabricated off site and shipped by rail, truck or barge. The core is cooled entirely by

natural circulation. Water is heated in the core to produce a low-density fluid that travels upward through the hot leg riser [4].

The design relies on well-established light water reactor technology. The NuScale plant can be licensed within the existing LWR regulatory framework. The NuScale design is the only SMR that utilizes a compact movable modular containment, in contrast to a traditional cast in-place concrete design [1].

TABLE I. Summarized Technical Data [6].

Reactor thermal output	160 MW(th)
Power plant output, net	45 MW(e)
Power plant efficiency, gross	>30.0%
Primary Coolant material	Light water
Moderator material, if applicable	Light water
Active core height	2.0 m
Outside diameter	2.83m
Vessel height	20.0m
Fuel material	UO ₂ Ceramic Pellets
Fuel element type	17 x 17
Cladding material	Zircaloy-4
Lattice geometry	Square Array
Enrichment of reloaded fuel in equilibrium core	< 4.95 Weight %
Fuel cycle length	24 Months
Average discharge fuel burn-up	> 30 MWd/kg
Burnable absorber	Gadolinia
Mode of reactivity control	Control Rods, Boric Acid
Mode of reactor shut down	Control rods
Reactor operating pressure	12.76 MPa
Working medium	Steam

3. MODEL DESCRIPTION

The study model was developed using the Monte Carlo Serpent code [7], in which the geometry and materials of the reactor are defined up to the detail of the fuel pins and control rods, according to the information in Table II and Figures 1 and 2. The JEFF 3.1 cross sections library was used for the calculation with a population of 10,000 neutrons 150 active cycles and 30 inactive cycles ensuring an acceptable standard deviation for the calculation.

TABLE II. NuScale Core Design Parameters.[6]

Parameter	Value
Cladding outside diameter (cm)	0.94996
Cladding inside diameter (cm)	0.82804
Cladding thickness (cm)	0.06096
Pellet-cladding diametral gap (cm)	0.01651
Fuel pellet diameter (cm)	0.81153
B ₄ C outside diameter (cm)	0.84582
Control rod outside diameter (cm)	0.96774

The core configuration consists of 37 fuel assemblies and 16 control rods. The NuScale fuel assembly is a 17x17 design with approximately half the fuel length of the typical PWR fuel. The fuel by design is uranium dioxide (UO₂) with gadolinium oxide (Gd₂O₃) as absorbent, mixed homogeneously in selected locations. The fuel rods are pressurized with helium and the fuel assembly model is shown in Figure 3.

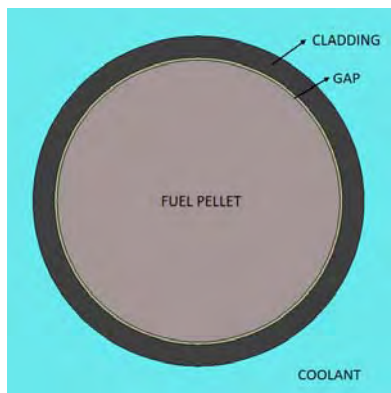


Figure 1. NuScale Fuel Pin.

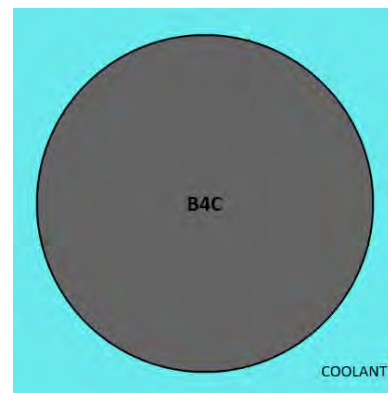


Figure 2. NuScale Control Rod Pin.

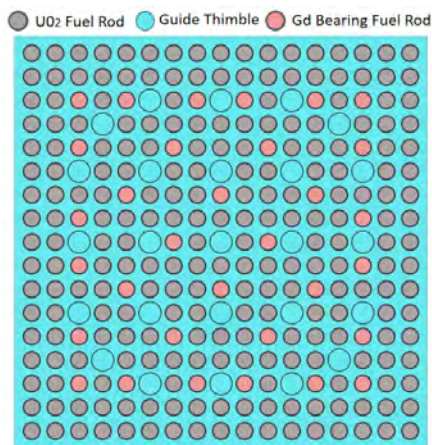


Figure 3. Geometrical Configuration of NuScale UO₂ Assembly.

The core is surrounded by a stainless steel heavy neutron reflector which improves fuel utilization by reducing the leakage of neutrons radially from the core. The reflector also provides the core envelope and directs the flow through the core. This reflector is also included in the model by completing its three-dimensional design, which radial and axial views are shown in Figure 4 and Figure 5, respectively.

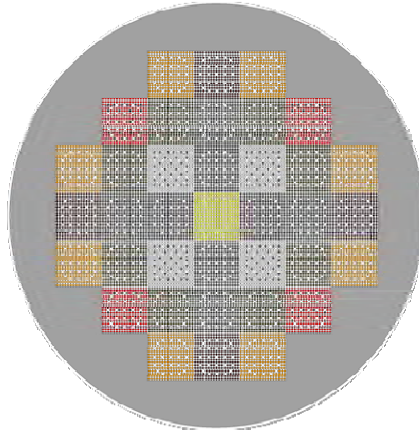


Figure 4. NuScale Model in Serpent (Radial View).

To compare the use of the different fuels in the model of this reactor, it was necessary to define the enrichment percentage of the U-10Zr and U_3Si_2 fuels to guarantee cycle initial conditions equivalent to the UO_2 , as shown in Table III. This reactor uses three types of fuels depending on their composition and enrichment: Type 1 is medium enrichment, type 2 is the highest enrichment and contains Gadolinium (Gd_2O_3) as a burnable absorber to control the excess reactivity at the beginning of the cycle. The type 3 fuel is the one with the lowest enrichment of approximately 2.6% wt% $^{235}U/U$ and it is located in the center of the reactor.

TABLE III. Fuels Properties.

	Density g/cm^3	Melting Point $^{\circ}C$	Thermal Conductivity $Wm^{-1}K^{-1}$	Enrichment wt% ^{235}U
UO_2	10	2750	~4	Type 1- 4.05 Type 2- 4.55 Type 3- 2.60
U_3Si_2	11.56	1650	48	Type 1- 3.49 Type 2- 4.10 Type 3- 2.10
10Zr-U	16	1160	34	Type 1- 4.44 Type 2- 4.92 Type 3- 2.68

3.1. The Equilibrium Cycle

In this reactor, the operation period is two years, and the fuel burnup is 12 GWd/MTU. The fuel is reshuffled using the strategy of locating the fresh fuel in the periphery. The configuration of the assemblies is shown in Figure 6.

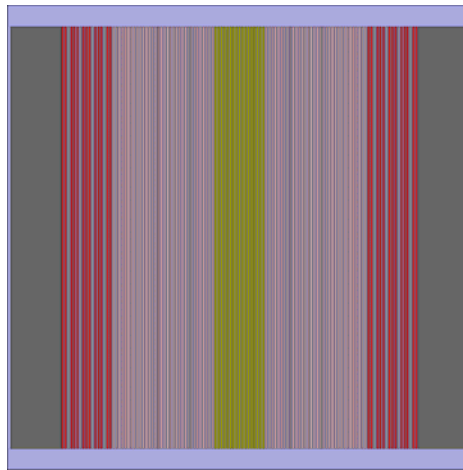


Figure 5. NuScale Model in Serpent (Axial View).

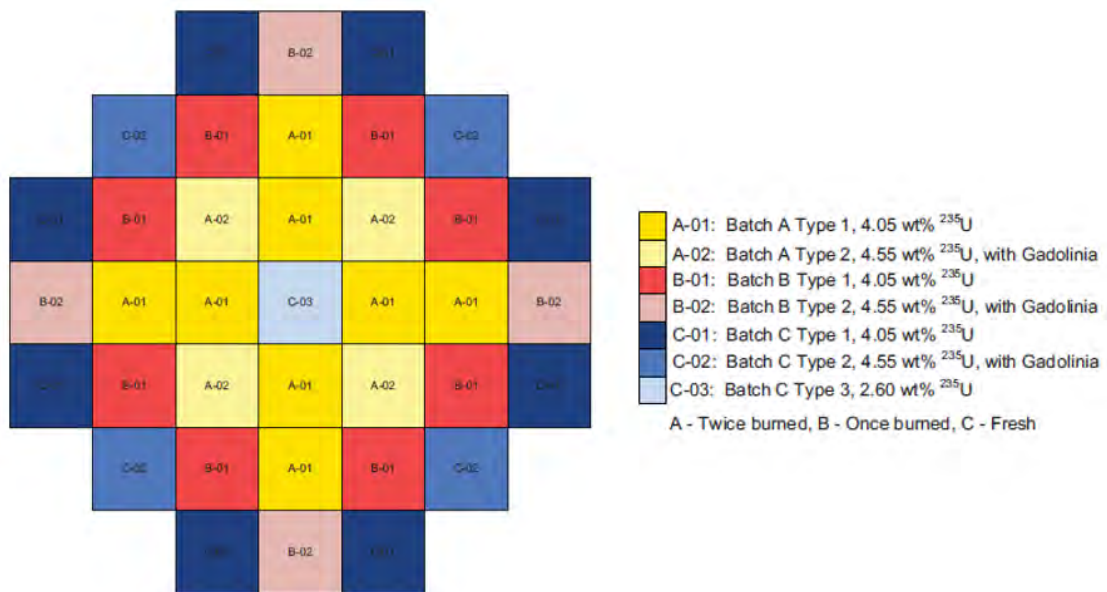


Figure 6. Loading Pattern for the Reference Equilibrium Cycle [6].

The atomic composition, the density, the gadolinium concentration and the enrichment for each fuel assembly type used in the simulation is summarized in Table IV.

TABLE IV. Atomic Number Densities and Fuel Rod Specification.

UO ₂ FUELS ASSEMBLY			
	Type 1	Type 2	Type 3
UO ₂ density (g/cc)	10.5	10.0	10.5
²³⁵ U enrichment (wt% ²³⁵ U/U)	4.05	4.55	2.6
Gd ₂ O ₃ Concentration (wt%)		10	
Atomic number density (#/barn-cm)			
²³⁵ U	9.6040E-04	9.2482E-04	6.1656E-04
²³⁸ U	2.2465E-02	1.9156E-02	2.2805E-02
¹⁶ O	4.6852E-02	4.9818E-02	4.6844E-02
U ₃ Si ₂ FUELS ASSEMBLY			
	Type 1	Type 2	Type 3
U ₃ Si ₂ density (g/cc)	11.56	11.27	11.56
²³⁵ U enrichment (wt% ²³⁵ U/U)	3.49	4.10	2.10
Gd ₂ O ₃ Concentration (wt%)		10	
Atomic number density (#/barn-cm)			
²³⁵ U	1.0087E-03	1.0324E-03	6.5389E-04
²³⁸ U	2.6011E-02	2.2652E-02	2.6405E-02
Si	1.8082E-02	1.5830E-02	1.8079E-02
10Zr-U FUELS ASSEMBLY			
	Type 1	Type 2	Type 3
10Zr-U density (g/cc)	16	15.35	16
²³⁵ U enrichment (wt% ²³⁵ U/U)	4.44	4.92	2.68
Gd ₂ O ₃ Concentration (wt%)		10	
Atomic number density (#/barn-cm)			
²³⁵ U	1.8186E-03	2.0176E-03	1.0999E-03
²³⁸ U	3.4801E-02	3.4611E-02	3.5481E-02
Zr (wt%)	10	10	10

4. RESULTS AND DISCUSSION

4.1. Neutron Spectrum

As it can be seen in Figure 7, the neutron spectrum of the U₃Si₂ fuel overlaps the UO₂ fuel spectrum. This explains that the neutronic behavior is very similar in both fuel types, as can be exemplified in the boron concentration throughout the burnup cycle. On the other hand, the spectrum of the metallic fuel 10Zr-U shows a neutrons energy hardening mainly because of the

lack of moderation of the matrix (Zr), making this fuel less “efficient” in the thermal fissions range.

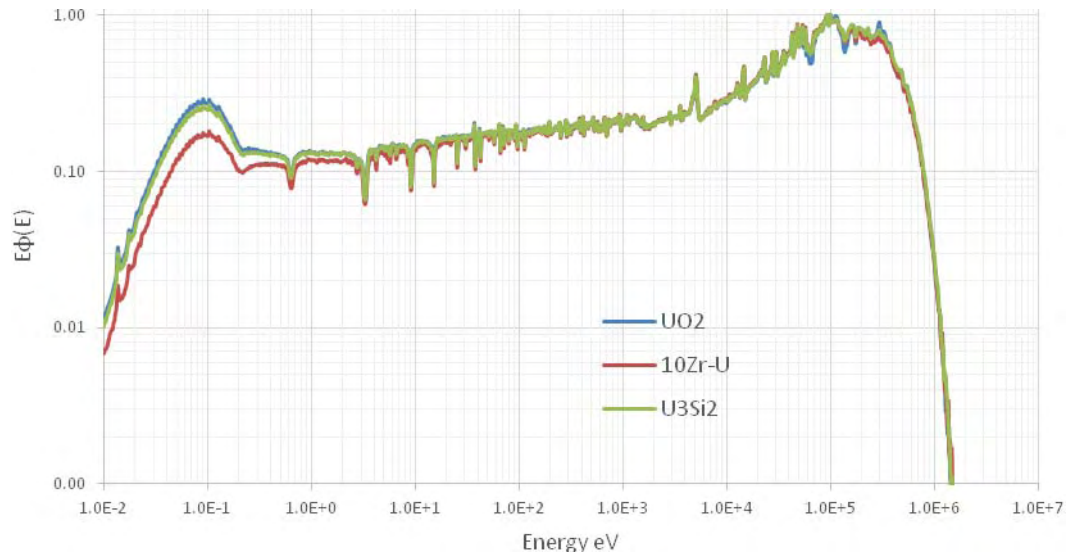


Figure 7. Neutron Spectrum.

4.2. Soluble boron

This type of reactor uses a mixture of water and boron as coolant, which, together with the gadolinium mixed in the fuel, controls the excess of reactivity at the beginning of cycle. By design, a concentration of 1235 ppm of soluble boron is established in the NuScale core, but this can be extended up to 2000 ppm, guaranteeing negative moderator reactivity coefficients and criticality conditions in the reactor. As the fuel burns, the reactivity tends to decrease, taking the reactor to levels of subcriticality.

It is necessary to control the concentration levels of soluble boron to maintain the reactor at criticality levels throughout the cycle. The graph on Figure 8 shows the levels of criticality through the neutron multiplication factor (k_{eff}) without the presence of boron in the coolant and with the boron throughout the cycle.

The boron concentration for each burnup step and for each fuel type are shown in the graph of Figure 9. The 10Zr-U fuel needs a higher concentration of boron at the beginning of the cycle to maintain the levels of criticality in the reactor. It is clear from Table V that the reactivity worth of the boron is considerably lower in the core with the 10Zr-U fuel due to its harder neutron spectrum. In the three studied fuels, the boron reactivity coefficient remains negative throughout the cycle.

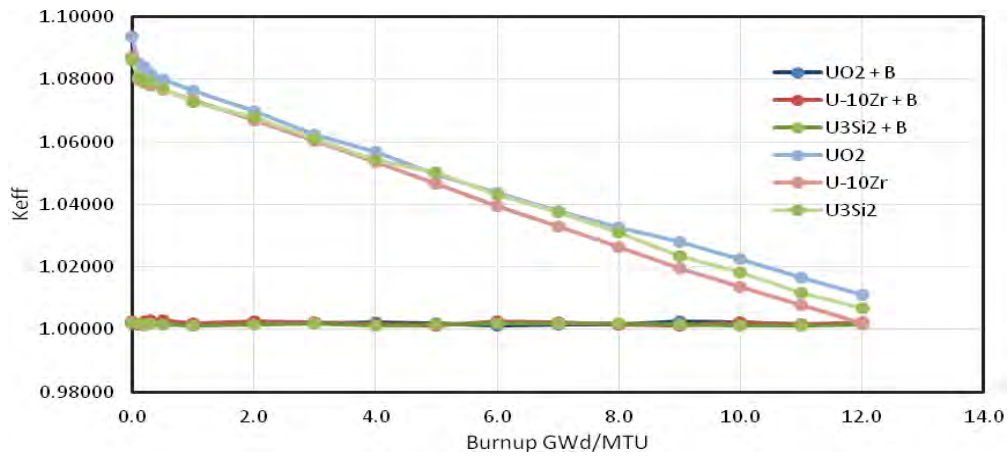


Figure 8. Neutron Multiplication Factor vs. Burnup.

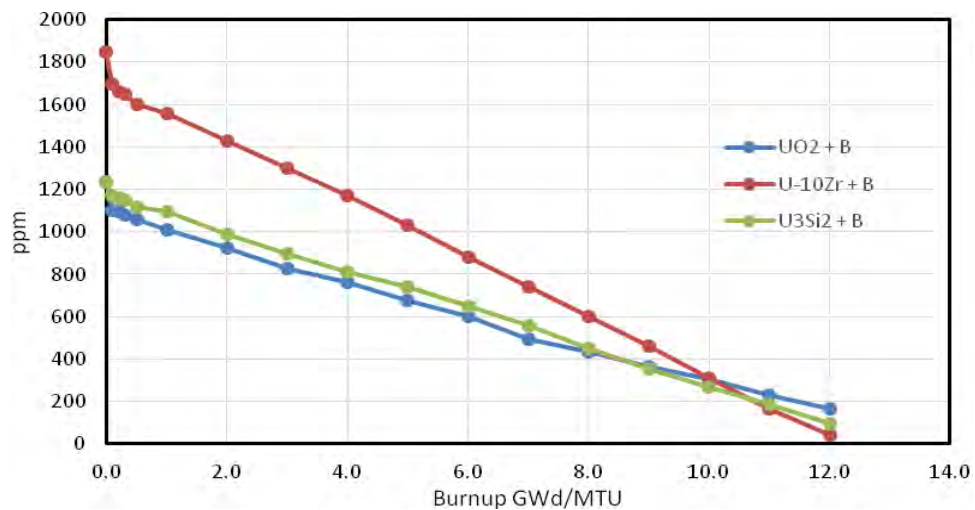


Figure 9. Boron Concentration vs Burnup.

TABLE V. Reactivity Boron Coefficient (pcm/ppm).

Core Reactor	Beginning of Cycle (BOC)	Medium of Cycle (MOC)	End of Cycle (EOC)
NuScale UO ₂	-10.04	-7.94	-9.72
NuScale U ₃ Si ₂	-6.58	-7.84	-7.70
NuScale 10Zr-U	-4.08	-3.98	-3.70

4.3. Reactivity Coefficients

The reactivity coefficients were monitored to evaluate their behavior through the equilibrium cycle and to determine the influence of the new fuels. All reactivity coefficients were calculated under the normal reactor operating conditions described by the equilibrium cycle

4.3.1. Moderator Temperature Coefficient

In Figure 10, the temperature coefficient of the moderator was plotted at the beginning of cycle, in the temperature range of 297 K to 523 K, taking as reference the working temperature of the reactor of 573 K.

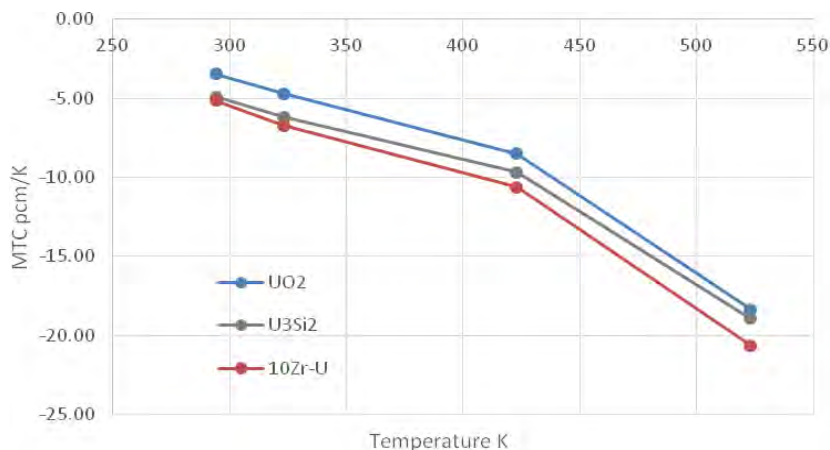


Figure 10. Moderator Temperature Coefficient (MTC).

For the UO₂ core, the coefficient tends to be more negative with the increase in temperature, as common in this type of reactor. In the case of metallic and ceramic fuels it can be seen in the graph that the behavior is very similar, with the moderator temperature coefficient being more negative in the new fuels studied, a factor that benefits this type of fuel in LWR reactors.

4.3.2. Moderator Density Coefficient

The calculation of the moderator density reactivity coefficient was set considering a density decrease at 20%. As shown in the graph of Figure 11, the studied fuels show a similar behavior. The coefficient ranges from -170 to -260 pcm per percentage variation of the moderator density, with a tendency to become more negative along the burnup.

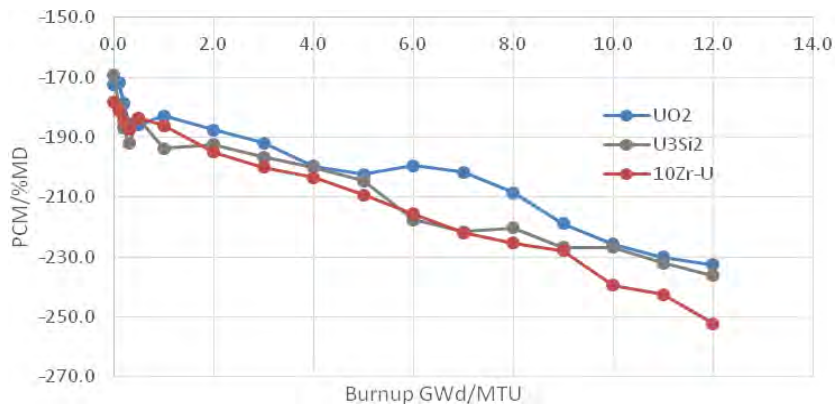


Figure 11. Moderator Density Coefficient.

4.3.3. Doppler Temperature Coefficient

The Doppler coefficient was calculated by varying the fuel temperature between 1000 K and 3000 K, taking as reference the operating temperature 900 K. The three fuels present a similar behavior, maintaining the coefficient negative in the studied temperature range and tends to become less negative with the increase of the fuel temperature; this result is shown in the graphs of Figure 12.

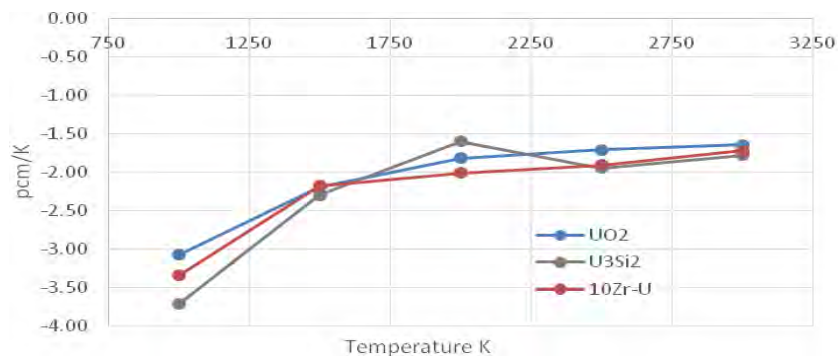


Figure 12. Doppler Temperature Coefficient (pcm/K).

4.4. Radial Power Distribution

The graphs of Figure 13 show the relative radial power distribution at the beginning of cycle. The use of the new fuels does not introduce significant radial power peaks, considering a tolerable maximum of 1.5. The three analyzed fuels show a cosine profile in the radial power

distribution reaching the power peaks in a range of 1.26 to 1.36, showing the proper arrangement of the fuel in the equilibrium core.

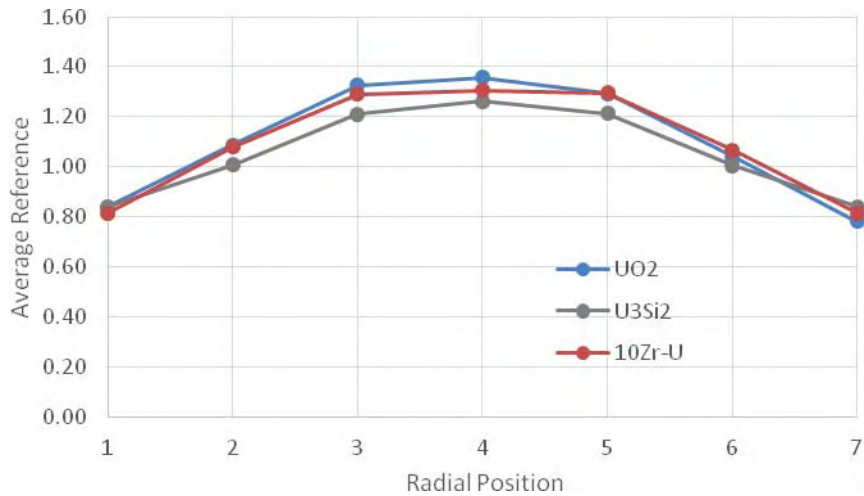


Figure 13. Relative Radial Power Distribution at Beginning of Cycle.

At the end of the cycle a flattening of the radial power distribution, as a result of the fuel burnup, can be appreciated in Figure 14, reaching a maximum power peak of 1.1 for the 10Zr-U and the U_3Si_2 fuel.

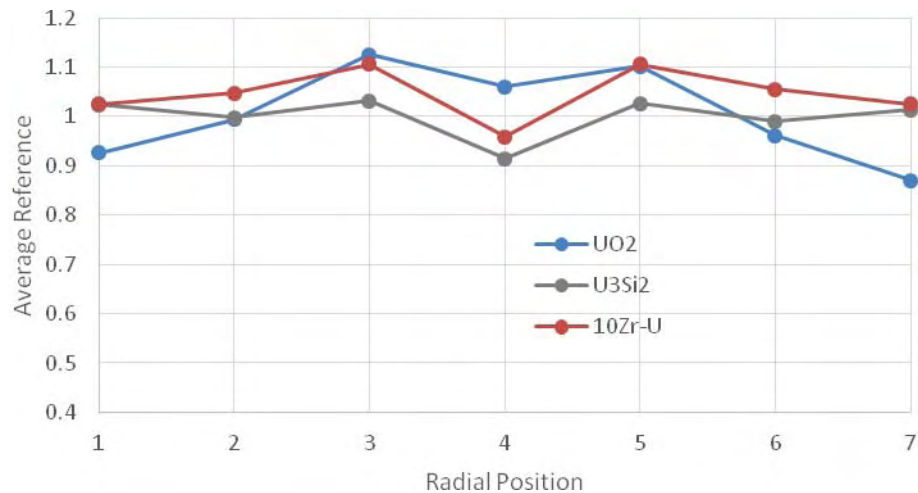


Figure 14. Relative Radial Power Distribution at End of Cycle.

4.5. Shutdown Margin

Shutdown margin is the instantaneous amount of reactivity by which a reactor is subcritical or would be subcritical from its present condition assuming all control rods are fully inserted except for the single rod with the highest integral worth, which is assumed to be fully withdrawn.

The use of the new fuels in the NuScale reactor guarantees a shutdown margin above 1% $\Delta K/K$ of reactivity. In this case the effective neutron multiplication factor of the core was calculated when the control rod of higher value (rod closest to the center in elements type A-01, Figure 6) is not inserted in the core at cold zero power conditions; the results are shown in Table VI.

TABLE VI. K_{eff} with the Control Rod of the Highest Reactivity Out.

Fuel	KEFF		SDM (% $\Delta K/K$)	
	BOC	EOC	BOC	EOC
UO ₂	0.85444 ± 20pcm	0.86130 ± 20pcm	16.4	17.3
10Zr-U	0.87346 ± 26pcm	0.86921 ± 24pcm	15.0	15.1
U ₃ Si ₂	0.85331 ± 24pcm	0.84440 ± 35pcm	16.8	17.6

It can be noticed that the use of the 10Zr-U fuel reduces the shutdown margin compared to the UO₂ fuel, this is because the effectiveness of the control rods is lower, as a result of a harder neutron spectrum in the core with this fuel.

5. CONCLUSIONS

A model of the NuScale reactor core was setup in the Monte Carlo Serpent code, calculating the parameters and coefficients of the equilibrium cycle for the UO₂ fuel “standard” design, and for the metallic 10Zr-U fuel and for the ceramic U₃Si₂ fuel.

The results of this modeling show that the reactor can work with the U₃Si₂ fuel without any change in the core design of the UO₂ fuel-based core, with the advantage of increasing the tolerance to accidents due to the use of this type of fuel and other advanced materials as cladding. Furthermore, calculations show that with a lower uranium-235 enrichment, the same results are achieved by using the U₃Si₂ fuel, reducing enrichment costs.

The 10Zr-U fuel is presented as another alternative to this type of reactor, with the advantages offered by metallic fuels such as high heat transfer. In this type of fuel, although the required enrichment levels are higher than those of the UO₂ fuel, the levels of uranium enrichment are kept below 5%.

ACKNOWLEDGMENTS

To the National Council of Science and Technology (CONACYT) for providing economic support to S. Pino-Medina for the accomplishment of this work that is part of his master's research. To UNAM for its support through the project PAPIIT-IN115517.

REFERENCES

1. J. N. REYES, Jr., "*NuSCALE Plant Safety in Response to Extreme Events*", NuScale Power Inc. (2011).
2. NUCLEAR ENERGY AGENCY. "*State-of-the-Art Report on Light Water Reactor Accident-Tolerant Fuels*", Nuclear Science: **No. 7317** (2018).
3. NUCLEAR ENERGY AGENCY. "*State-of-the-art Report on Innovative Fuels for Advanced Nuclear Systems*", Nuclear Science: **No. 6895** (2014).
4. NUSCALE POWER INC., "*NuScale Power Modular and Scalable Reactor (NuScale)*", Status report **106** (2011).
5. IAEA. "*Status of Small and Medium Sized Reactor Designs*", HYPERLINK "<http://aris.iaea.org>" <http://aris.iaea.org> (2011).
6. NUSCALE POWER LLC., "*NuScale Standard Plant Design Certification Application*", PART 2 - TIER 2 (2016).
7. J. LEPPÄNEN et al., "*The Serpent Monte Carlo code: status, development and applications in 2013*", *Annals of Nuclear Energy*, **82**, p. 142 (2015).

Cálculo de actividad del combustible de un BWR

José-Luis Montes-Tadeo, Javier Ortiz Villafuerte, Raúl Perusquía, José Luis Hernández Martínez

*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Ocoyoacac, Estado de México
México CP 52750*

*joseluis.montes@inin.gob.mx}; javier.ortiz@inin.gob.mx; raul.perusquia@inin.gob.mx;
joseluis.hernandez@inin.gob.mx*

Resumen

En este trabajo se calcula la actividad específica de una carga de combustible consistente de tres diferentes tipos de ensambles. Cada uno de los lotes de combustible se distingue por su enriquecimiento en U-235. Al finalizar cada uno de los ciclos de operación se reemplaza una porción del núcleo, extrayendo alrededor de la cuarta parte de éste con base en su exposición o quemado; de manera que se renueva esa porción con combustible fresco. La carga en análisis fue reemplazándose a través de los siguientes cinco ciclos de operación. En el presente trabajo se presentan los resultados del cálculo de la actividad específica de los sub-lotes que se fueron extrayendo a lo largo de cinco ciclos de operación de un BWR. Se tomaron siete valores temporales de referencia. Los primeros corresponden a las fechas de fin de ciclo, y el último corresponde a una predicción de un periodo para inicio de clausura de la planta, asumiendo un tiempo de vida útil de 60 años de operación. La actividad específica reportada en este trabajo corresponde a 357 isótopos contenidos en cada uno de los ensambles de combustible descargados.

1. INTRODUCCIÓN

La operación ininterrumpida de un reactor nuclear de potencia del tipo BWR (del inglés, Boiling Water Reactor) conlleva como consecuencia la acumulación de una cantidad de ensambles gastados de diferente diseño. Un ensamble de combustible, que para fines de generación de energía eléctrica se introduce al núcleo en este tipo de reactores nucleares, es un conjunto o haz de varillas llamadas elementos de combustible que se disponen en un arreglo cuadrangular sujetas estructuralmente por rejillas separadoras. Estos ensambles de combustible, al agotarse su contenido en U-235, son enviados a la alberca de combustible (ACG), en donde son resguardados de manera segura. Bajo esta condición, no obstante, son motivo de estudio con fines distintos como pueden ser, por ejemplo; estudios de criticidad, como alternativa para diferentes ciclos de combustible, almacenamiento de combustible gastado, transporte, desmantelamiento de la central, disposición geológica y diseño tanto de reactores como de combustibles avanzados, etc.

En el presente trabajo, se utiliza el código SNF (del inglés, Spent Nuclear Fuel) [1], el cual forma parte del sistema CMS (del inglés, Core Management System), con la finalidad de

estimar la tasa de decaimiento radiactivo o actividad nuclear que presentaría una carga de 444 ensamblés de combustible cargados para iniciar la operación de un BWR/5. Se presenta la evolución de la actividad a través de un período de enfriamiento de alrededor de 60 años. Se establecen como referencia las fechas de inicio de la descarga de cada uno de los sub-lotes (de la carga inicial) a lo largo de cinco ciclos de operación del reactor. Adicionalmente se usan dos puntos temporales de referencia uno en 2019 y el otro en 2049 para simular 60 años de enfriamiento.

Se ha comenzado a publicar la aplicación del código SNF [2], este código requiere los resultados que generan los códigos CASMO5 [3] y SIMULATE5 [4]. Estos resultados que requiere el código SNF deben basarse en la simulación del seguimiento operativo del reactor BWR/5. Los códigos CASMO5 y SIMULATE5 representan el estado del arte en la simulación en estado estacionario de los reactores de potencia de agua ligera o LWR (del inglés, Light Water Reactor) y permiten conocer el desempeño operativo en detalle (en tres dimensiones, 3D) de los ensamblés de combustible dentro del núcleo del reactor. A continuación, se describe la metodología utilizada, los principales resultados se presentan posteriormente y finalmente las conclusiones que se derivan de éstos.

2. METODOLOGÍA

Los cálculos que se han realizado con el sistema CMS se inician con el cálculo de los parámetros nucleares de los segmentos axiales, o celdas de combustible, que forman los ensamblés, los cuales conforman la carga del primer ciclo así como los correspondientes a las recargas de los siguientes cuatro ciclos subsecuentes, tales que, cumplan con las restricciones de seguridad impuestas, así como, las necesidades de generación de energía requeridas y las condiciones de operación establecidas. Esto es, como primera etapa se realiza cálculos para generar el llamado banco de datos nucleares. En el caso del sistema CMS, los bancos de datos se generan con los programas CASMO5 y CMSLINK [5], archivos *.lib. Posteriormente, usando como datos de entrada tanto los bancos de datos y la información de la operación del reactor se forma el modelo de simulación del código SIMULATE5. La información generada por SIMULATE5 en formato binario se deposita en los archivos tipo *.res, ésta la utiliza el código SNF. Este proceso se muestra en la Figura 1.

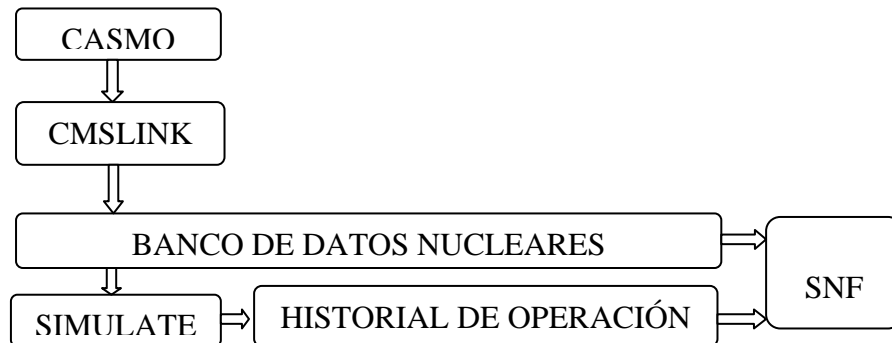


Figura 1. Sistema de simulación CMS/SNF

Se puede establecer una interrelación entre la información del núcleo del reactor y de la alberca del combustible gastado, como puede notarse en la Figura 2. En esta figura, CI indica carga inicial del reactor.

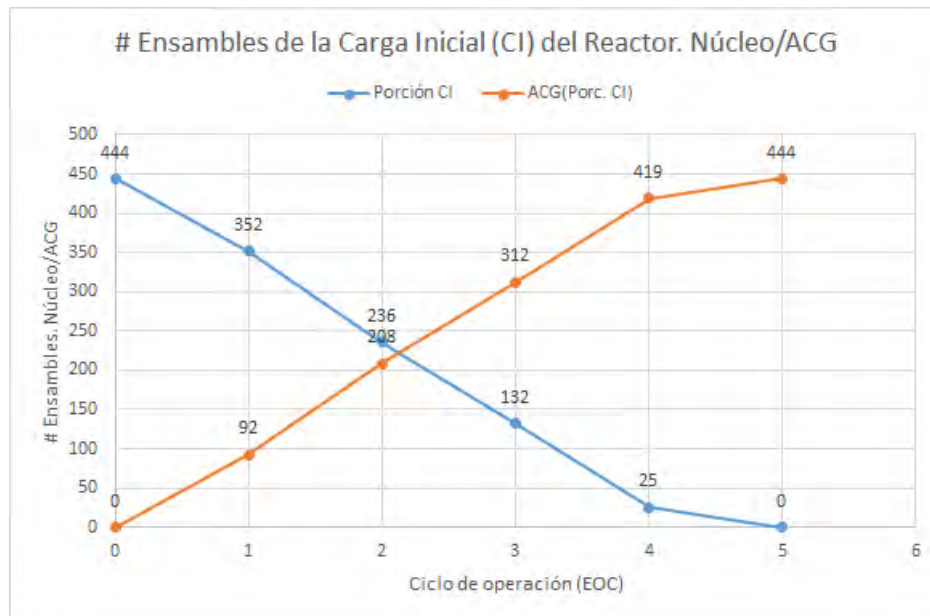


Figura 2. Cantidad de ensamblajes de combustible de la carga inicial. Transferencia desde el núcleo del reactor hacia la alberca de combustible gastado (ACG)

Como puede notarse en la figura 2, el número de los ensamblajes provenientes de la carga inicial de combustible, en la ACG se irá incrementando en cada final de ciclo (EOC, del inglés, End Of Cycle) y a la vez por su propia naturaleza irá disminuyendo la actividad de los combustibles en la alberca con el transcurrir del tiempo. Este comportamiento se presenta en la siguiente sección. Además, se presenta la actividad específica de cada ensamblaje, de cada uno de los 357 isótopos cuya información genera el código SNF junto con otro tipo de resultados.

3. RESULTADOS

Los resultados que se presentan se dividen en tres partes. En la primera parte se presenta la actividad específica (Bq/t) de cada uno de los sub-lotes de descarga que sale de cada uno de los primeros cinco ciclos de operación del reactor, EOC-n, n=1,...,5; con dos puntos temporales de enfriamiento adicionales, uno en el año de 2019 y el otro en 2049. En la siguiente parte se presenta la actividad de los diez principales isótopos en cada uno de los puntos de enfriamiento. Finalmente, en la tercera parte se presentan los resultados del sub-lote de descarga más quemado.

3.1 Actividad de los sub-lotes de descarga.

En esta sección se presenta la actividad específica (Bq/t) de cada uno de los sub-lotes de descarga de los primeros cinco ciclos de operación del reactor. Se presenta también la actividad específica total en la alberca de combustible gastado que proviene de la carga inicial del reactor.

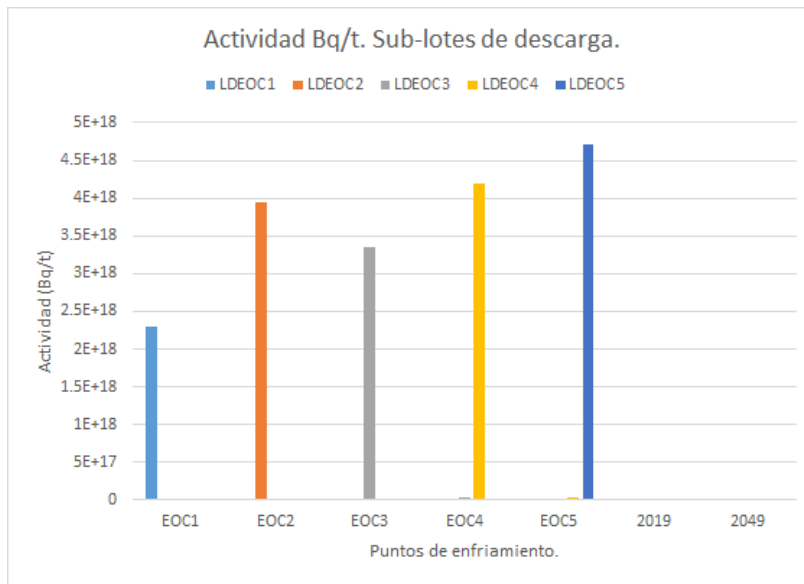


Figura 3. Actividad específica (Bq/t) de cada uno de los sub-lotes de combustible gastado

En cada uno de los sub-lotes puede notarse que la actividad en el momento de la descarga presenta un valor significativo. Para los siguientes puntos de enfriamiento la actividad disminuye sustancialmente, esto es un efecto por los órdenes de magnitud en los que disminuye este importante parámetro del combustible. Con la idea de visualizar esta situación, se presenta en la siguiente Figura 4, el comportamiento de la actividad del primer sub-lote de combustible gastado a partir del punto EOC2. Notándose, que el 98 % del total de las magnitudes de los siete puntos de referencia lo representa el valor correspondiente al punto EOC1.

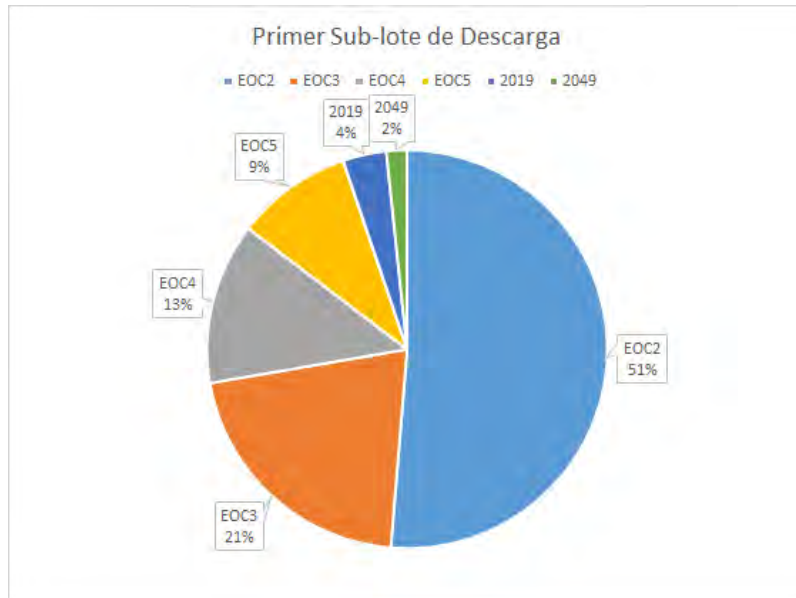


Figura 4. Actividad específica (Bq/t) del primer sub-lote de combustible gastado descargado, a partir de EOC2

En la Figura 5, se presenta la actividad específica (Bq/t) total en la ACG debida a los ensambles que se descargan en los primeros ciclos de operación y que pertenecen a la carga inicial del reactor.

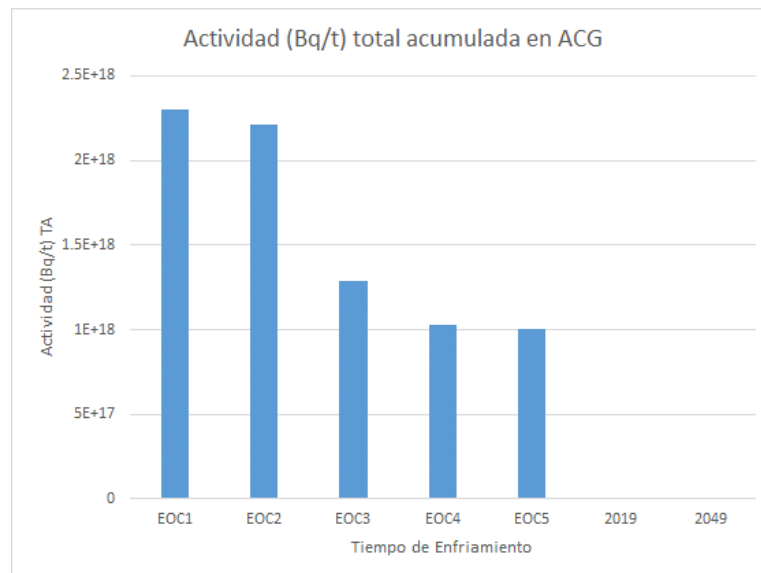


Figura 5. Actividad específica (Bq/t) total acumulada en la alberca de combustible gastado.

3.2 Actividad de los diez principales isótopos.

Con la finalidad de ilustrar el comportamiento, que es semejante para cada uno de los sub-lotes de descarga, se presenta el caso del sub-lote de descarga del ciclo inicial. Las figuras 6 a 12 ilustran la distribución de la actividad específica (Bq/t) de los diez isótopos con mayor valor.

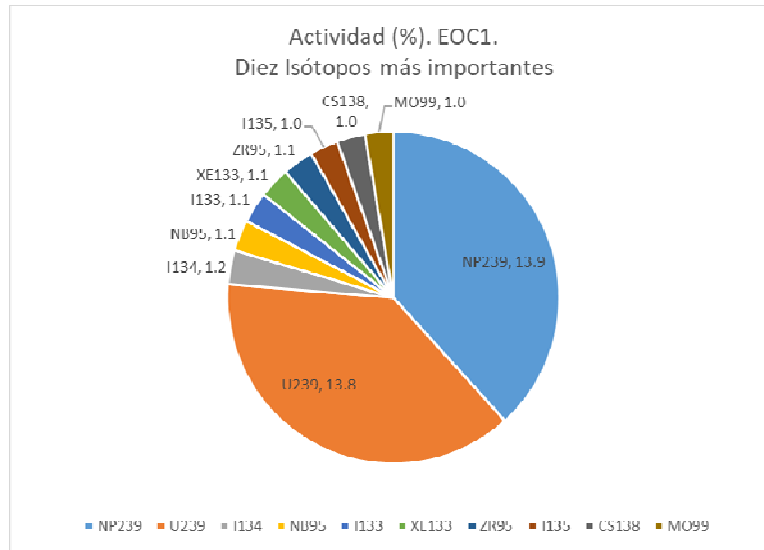


Figura 6. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). EOC1

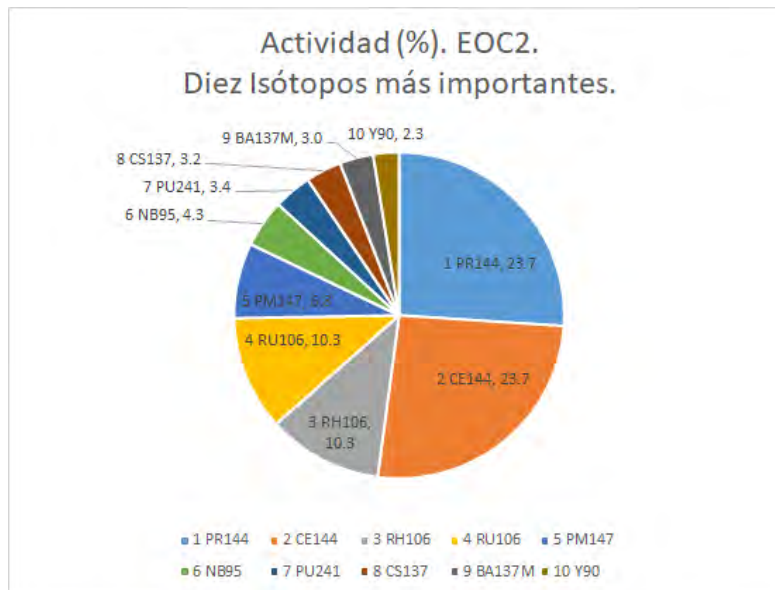


Figura 7. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). EOC2

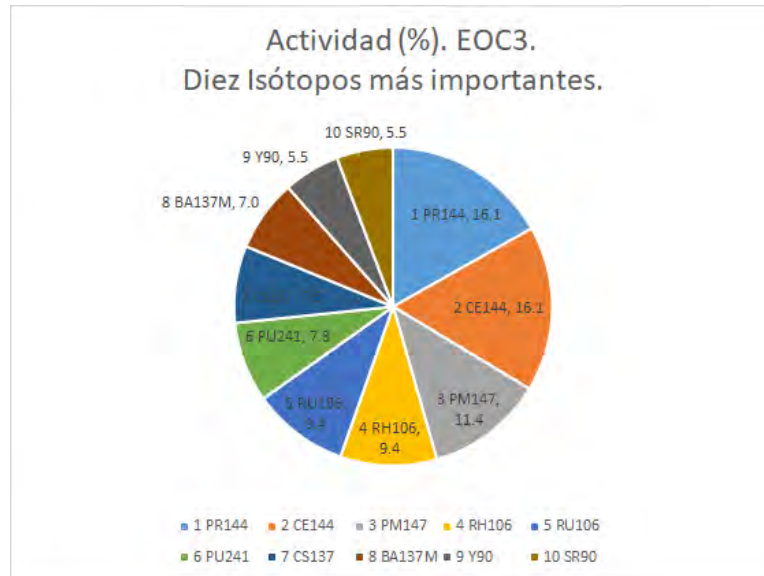


Figura 8. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). EOC3

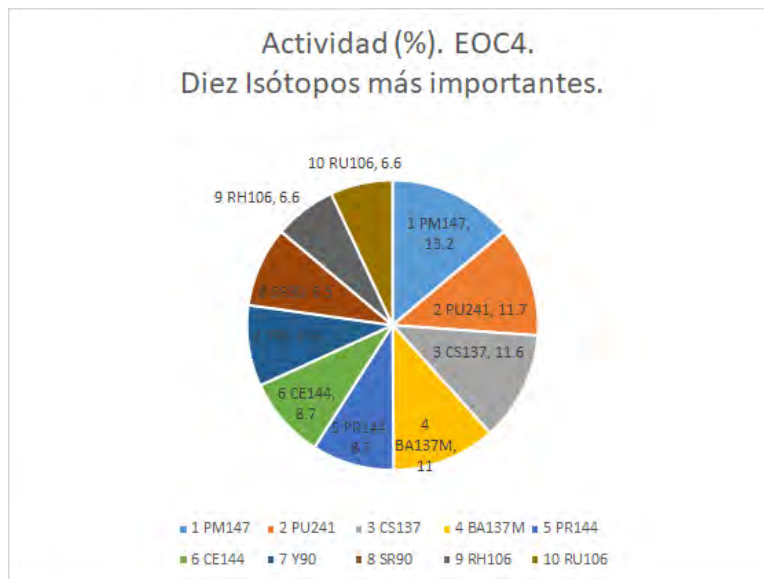


Figura 9. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). EOC4

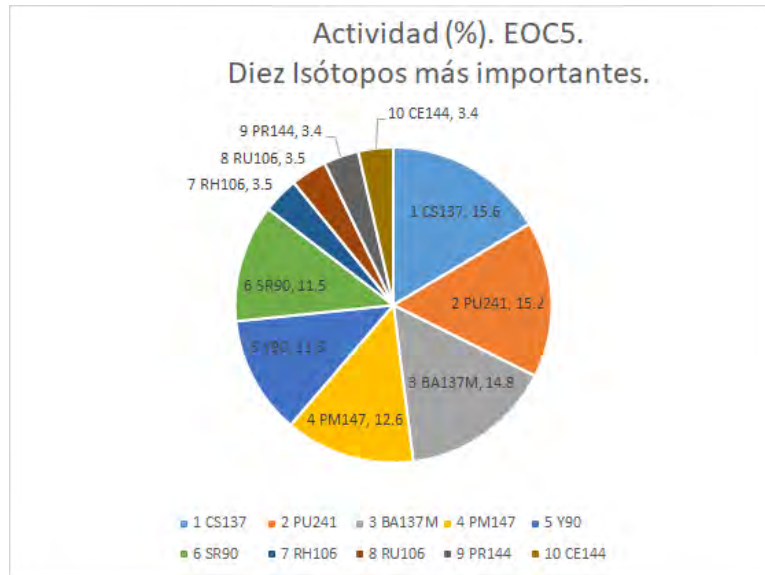


Figura 10. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). EOC5

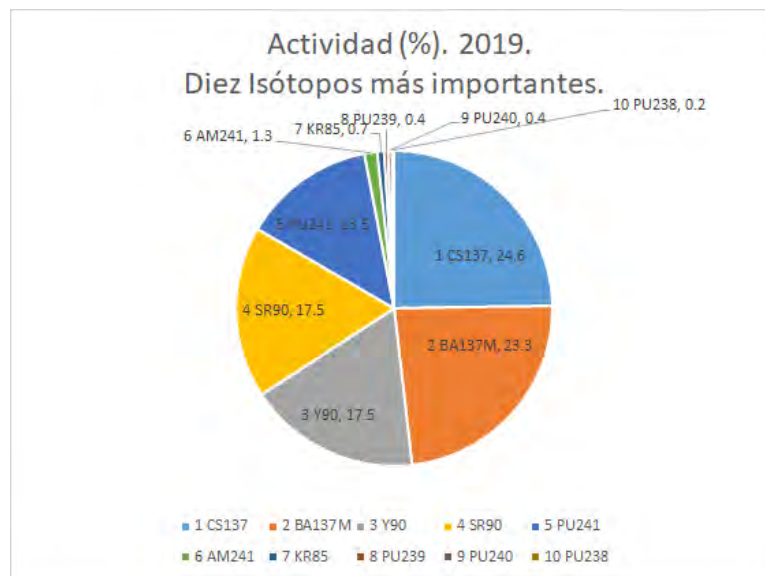


Figura 11. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). 2019

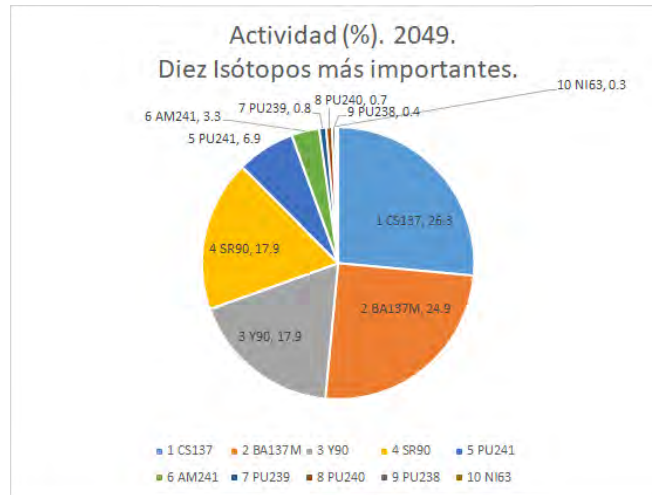


Figura 12. Distribución de los diez isótopos con mayor actividad (%). 2049

Se puede notar como avanza el isótopo Cs-137 hacia la primera posición conforme el tiempo de enfriamiento aumenta.

3.3 Actividad del sub-lote más quemado.

En esta parte se muestra la actividad específica (Bq/t) del sub-lote de descarga más quemado, el cual corresponde al sub-lote que sale en el punto EOC4. En la Figura 13 se presenta la actividad (Bq) para cada uno de los 107 ensambles de combustible del sub-lote que se descarga al terminar la operación del ciclo cuatro.

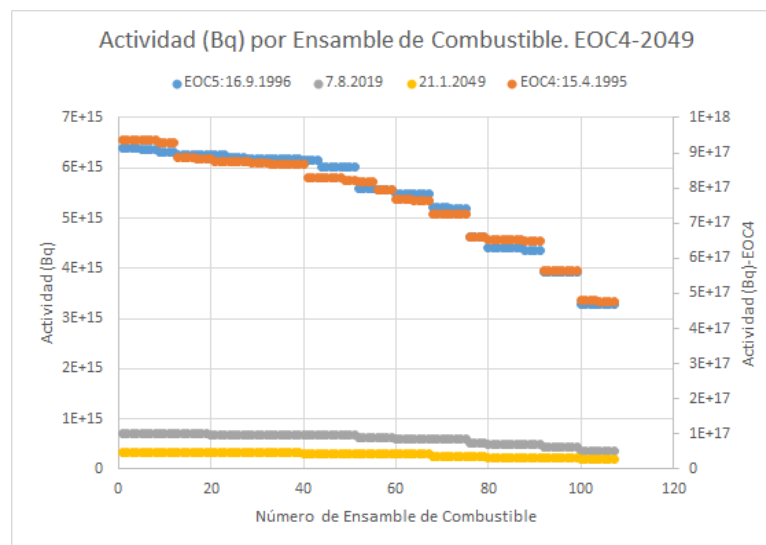


Figura 13. Actividad (Bq) de cada ensamble, de EOC4 a Ene-2049.

Para este mismo sub-lote, se muestra en la Figura 14 la actividad específica (Bq/t) de cada uno de los isótopos (357) que puede analizar el código SNF. En el eje de abscisas se tiene orden en función del número másico.

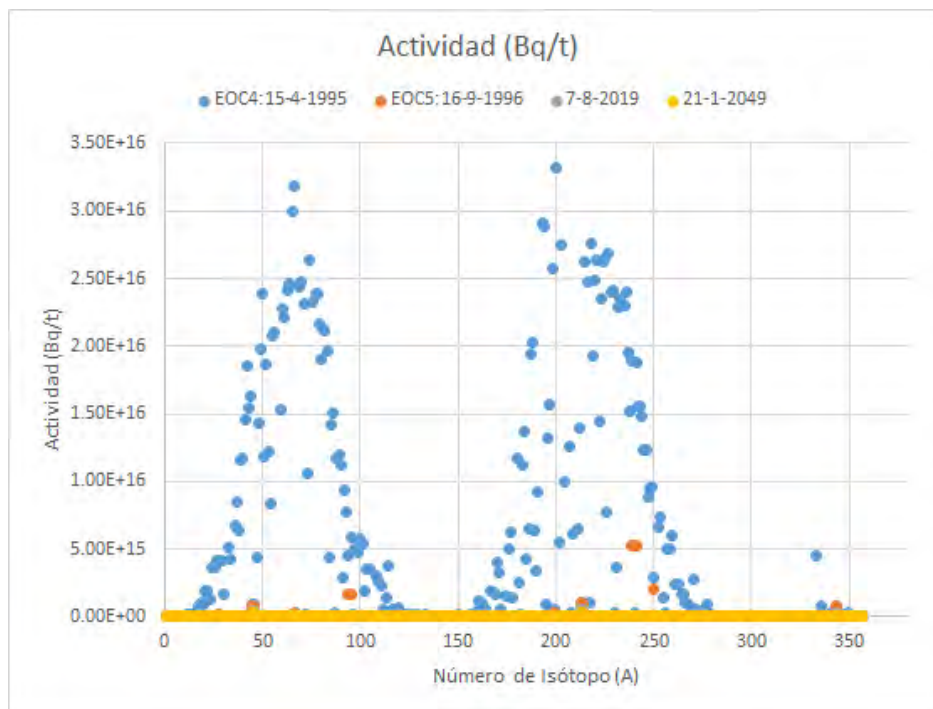


Figura 14. Actividad específica (Bq/t) de cada isótopo, desde EOC4 a Ene-2049.

4. CONCLUSIONES

La actividad específica o tasa de decaimiento radiactivo por unidad de masa, asociada a los ensambles de combustible de una carga inicial de un reactor de potencia de agua en ebullición (BWR) se ha mostrado a través de un tiempo de enfriamiento, que va desde el momento en que termina cada uno de los primeros cinco ciclos de operación hasta un punto probable del desmantelamiento del reactor, esto es; asumiendo un período de operación de 60 años. Se ha mostrado parte de la versatilidad de que es capaz el código SNF para presentar este parámetro del combustible gastado, la potencialidad de este código aún sigue explorándose. Los resultados mostrados dan una perspectiva del estado que guarda la carga inicial del reactor Uno en la alberca de combustible gastado.

AGRADECIMIENTOS

Los autores reconocen el apoyo de SENER-CONACYT, a través de su Fondo de Sustentabilidad Energética, al proyecto FSE-2103-04-213519, en el cual se enmarca este trabajo y forma parte de los entregables del mismo.

REFERENCIAS

19. T. Simeonov, G. Anton, J. D. Rhodes, A. Becker. SNF User's Manual. Studsvik, SSP-11/328 REV3. June 11, 2011.
20. D. Rochman, A. Vasiliev, H. Ferroukhi, M. Pecchia. "Consistent criticality and radiation studies of Swiss spent nuclear fuel: The CS2M approach." *Journal of Hazardous Materials*. **357**, p. 384-392 (2018).
21. J. D. Rhodes, R.M. Ferrer, J. Hykes, D. Kropaczek. CASMO5. A fuel Assembly Burnup Program. User's Manual. Proprietary SSP-07/431 Rev 9. Studsvik. 2015.
22. S. Vanevenhoven, T. Bahadir, J.D. Rhodes. SIMULATE5. Advanced Three-Dimensional Multigroup Reactor Analysis Code. User's Manual. SSP-1/438 Rev 5. Studsvik. 2015.
23. T. Bahadir, R. M. Ferrer, J. D. Rhodes. CMSLINK5. User's Manual. SSP-10/437 Rev 5. Studsvik. 2015.

Uso del ácido fítico para la inmovilización de actínidos

Almazán Torres M.G., Ordoñez Regil E., Tovar Valdín G., Cruz González J. G.
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Departamento de Química
Carretera México-Toluca, s/n, La marquesa, Ocoyoacac C.P. 52750
eduardo.ordonez@inin.gob.mx ; guadalupe.almazan@inin.gob.mx

Resumen

La energía nuclear continúa siendo una alternativa viable para la generación de electricidad en México y en el mundo, debido a la nula emisión de gases de efecto invernadero. No obstante, el impacto radiológico asociado con la presencia de una instalación nuclear sigue siendo una preocupación latente. La descarga de efluentes radiactivos de las instalaciones nucleares se realiza siempre bajo control y tratamiento previo para eliminar la radiactividad excesiva. Ante una eventual fuga de elementos radiactivos, particularmente algunos actínidos, se debe contar además con métodos de descontaminación apropiados para evitar su concentración y dispersión en el ambiente. Este estudio plantea el uso del ácido fítico como reactivo específico para la inmovilización de actínidos como el uranio y el plutonio. El objetivo es obtener datos termodinámicos que permitan desarrollar un método, viable y de bajo costo, para la remediación de efluentes contaminados. Para ello se requiere entre otras cosas, conocer y entender las interacciones del ácido fítico con cationes, específicamente con algunos actínidos, bajo ciertas condiciones experimentales.

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los métodos que se han propuesto para limitar la movilización de los actínidos en agua y suelo, consiste en transformarlos de formas potencialmente móviles a formas termodinámicamente estables. Para lograr dicha transformación se agrega un reactivo específico para generar un precipitado que favorezca la formación de fases insolubles termodinámicamente estables [1].

Recientes estudios han sugerido que el ácido fítico (IP6), un compuesto natural organofosforado, puede ser aplicado en forma soluble para la recuperación de sedimentos contaminados, cuando se somete a diversas reacciones que eventualmente dan lugar a la precipitación de metales [2]. El ácido mio-inositol-hexafórico (IP6), conocido como ácido fítico, es un ácido orgánico que se encuentra presente en forma natural en cereales, nueces, legumbres y semillas. El ácido fítico en solución puede ser ionizado sucesivamente y quedar cargado negativamente en un amplia gama de pH, lo que le confiere una elevada capacidad para

formar complejos con metales pesados, que bajo ciertas condiciones pueden precipitar [3]. Debido a estas características, el ácido fítico ha sido considerado como un buen candidato para la inmovilización de elementos radiactivos en efluentes contaminados [4].

El uranio ha estado presente en la corteza terrestre desde su origen, encontrándose distribuido de manera heterogénea, contribuyendo así a la dispersión de la radiactividad natural en los diferentes medios, solo que su concentración y distribución en el ambiente depende del medio en el que se encuentra [5]. Bajo condiciones ambientales oxidantes el uranio se encuentra en su forma hexavalente como ión uranilo (UO_2^{2+}).

El europio, que se presenta por lo general en su estado trivalente, ha servido como modelo para entender el comportamiento de algunos actínidos trivalentes de alta actividad como el Curio, Americio y Plutonio [6].

Las propiedades de complejación del ácido fítico frente actínidos y otros metales están estrechamente relacionadas con su comportamiento en solución a partir de sus propiedades ácido-base en diferentes medios acuosos [7]. El estudio de sus propiedades ácido-base es por tanto fundamental para entender los procesos relacionados con éste ácido orgánico. Así pues, en el presente estudio se evalúan las propiedades ácido-base del ligando fitato en medio 0.1 M de NaClO_4 , y se establecen las condiciones para la preparación de complejos fitato-uranio (VI) y fitato-europio (III) estables, que puedan ser fácilmente concentrados y recuperados.

2. METODOLOGÍA

2.1. Estudios de las propiedades ácido-base del ácido fítico y su interacción con cationes

2.1.1. Preparación de soluciones

Para los diferentes experimentos se prepararon diferentes soluciones usando reactivos grado analítico y agua desionizada, hervida y con burbujeo de nitrógeno para la eliminación de carbonatos.

Se preparó una solución 0.1 M de NaClO_4 a partir de sales de perclorato de sodio, las cuales fueron disueltas en agua desionizada, hervida y en una atmósfera de N_2 . Para los experimentos de titulación se preparó una solución 0.1 M de NaOH a partir de una solución concentrada. De esta solución se tomó una alícuota y se diluyó con agua desionizada, hervida y con burbujeo de nitrógeno para la eliminación de los carbonatos. Esta solución fue valorada por triplicado con ftalato ácido de potasio, el cual se secó previamente durante 2 horas a una temperatura de 70°C .

La solución de uranio fue preparada a partir de cristales de nitrato de uranilo hexahidratado, $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Uranylnitrat-6-hydrat, grado analítico Merk). En un vaso de precipitado se pesaron 1.25 g de los cristales y se disolvieron con 4 mL de ácido perclórico concentrado (12 M de HClO_4) (Perchloric acid, 69-72 wt% J.T. Baker), la disolución se mantuvo en calentamiento

durante una hora en la campana de extracción. Este procedimiento se repitió dos veces más hasta la evaporación total del nitrato. El concentrado fue aforado a 25 mL con agua desionizada, para obtener una solución 0.1 M de $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2$. Finalmente, la solución fue ajustada a pH 2 con ácido perclórico para evitar la hidrólisis del catión.

La solución de europio (III) fue preparada a partir de cristales de nitrato de europio pentahidratado, $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. El procedimiento para preparar esta solución fue el siguiente: los cristales fueron disueltos con un poco de agua desionizada y 1 mL de HClO_4 . Después se calentó hasta llegar a su evaporación y que solo quedara el concentrado, el cual es de aspecto aceitoso. Este procedimiento se repitió dos veces más. Finalmente el concentrado, se diluyó con agua desionizada hasta un volumen de 50 mL en un matraz aforado.

Finalmente, para la preparación de las soluciones de trabajo se tomaron alícuotas de ácido fítico (mio-inositol hexaphosphoric acid, 40-50 wt% solución acuosa, BOC Sciences) y de la solución de europio (III), y se diluyeron en 30 ml de la solución 0.1 M de NaClO_4 .

2.1.2. Estudio potenciométrico

Para el estudio de las propiedades ácido-base del ácido fítico, así como su interacción con los cationes, el uranio (VI) y el europio (III), se realizaron diferentes titulaciones potenciométricas.

Las curvas de titulación potenciométrica fueron realizadas en un titulador automático, Radiometer Titrab 90 adjunto a una autobureta ABU901. El equipo se programó considerando adiciones de NaOH de 1 o 2 μL hasta un volumen de 20 mL y un criterio de estabilidad 0.024 unidad de pH/min, mismo que se cumplió en un tiempo promedio de 15-20 minutos. Cabe mencionar que el potenciómetro fue calibrado a tres estándares (4, 7 y 10) obteniendo una sensibilidad promedio de 95.6 a 98%.

a) Titulación potenciométrica del ácido fítico

Se efectuaron titulaciones potenciométricas de soluciones de ácido fítico de concentraciones 0.001 M, 0.002 M y 0.005 M en medio 0.1 M de NaClO_4 (30 mL), con una solución 0.1 M de NaOH . Las titulaciones se efectuaron en una celda de doble camisa de 50 mL de capacidad, manteniendo la temperatura a $25 \pm 0.2^\circ\text{C}$ mediante un baño termostático, agitación magnética suave y constante; y bajo una atmosfera inerte de N_2 para evitar la presencia de CO_2 . Para llevar la solución a un equilibrio de $\text{pH} = 2 \pm 0.2$ se dejó agitar durante 15 min.

b) Titulación potenciométrica del sistema fitato-uranio (VI)

Para evaluar la interacción entre el ácido fítico y el uranio (VI), se realizaron tres titulaciones potenciométricas de soluciones de ácido fítico-uranio (VI) con concentraciones 2:1, 1:1 y 1:2, en medio 0.1 M de NaClO_4 . Las titulaciones potenciométricas se realizaron con 30 mL de esta solución empleando celdas de vidrio de doble camisa, usando un baño termostático para

mantener el proceso a 25°C, con una agitación magnética suave y constante, y bajo una atmósfera inerte de N₂ para evitar la presencia de CO₂. Las soluciones fueron tituladas con una solución 0.1 M de NaOH, usando el titulador automático Radiometer TitrLab 90 descrito anteriormente.

c) Titulación del sistema potenciométrica fitato-europio (III)

Las soluciones de trabajo fueron tituladas con la solución estándar 0.1 M de NaOH en un titulador automático TritabLab 90, usando un baño termostático para mantener el proceso a la temperatura de 25°C. Se realizaron varias titulaciones de soluciones de ácido fítico-europio (III) con concentraciones molares: 1:1, 1:2, 1:3, 1:4, 2:1, 3:1, 4:1 en medio 0.1 M de NaClO₄.

2.2. Preparación de complejos de ácido fítico con los cationes

Los complejos fitato-uranio (VI) y fitato-europio (III) fueron preparados mezclando soluciones de ácido fítico y del catión (uranio o europio). En tubos de polipropileno (15 mL) se adicionó la solución de ácido fítico y se ajustó el pH (entre 4 y 10) usando una solución concentrada de NaOH. Los tubos se mantuvieron en agitación durante 24 horas. Posteriormente se adicionó en cada tubo la solución de uranio o de europio. Los tubos se mantuvieron en reposo y a temperatura de 25°C, inicialmente durante siete días. El control de pH se realizó durante todo el proceso, obteniéndose registros del valor de pH de las soluciones antes del contacto con el catión, al contacto con el catión y el pH al final del proceso. Asimismo se hicieron registros sobre la formación de precipitados en todos los sistemas.

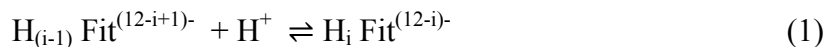
3. DISCUSIÓN Y RESULTADOS

3.1. Estudio potenciométrico

3.1.1. Ácido fítico

Las curvas de titulación potenciométrica del ácido fítico a concentraciones 0.002 M y 0.005 M en medio 0.1 M de NaClO₄ son comparadas en la figura 1. Ambas curvas revelan tres regiones protonadas, evidenciando la presencia de hidrógenos ionizables. En general para las dos curvas, la disociación ocurre en el intervalo de pH 2 a 6, pH 6 a 10 y pH 10 a 12, observándose en los puntos de inflexión.

Los datos obtenidos a partir de las titulaciones potenciométricas fueron tratados con el programa computacional SUPERQUAD, con el fin de refinar las constantes de protonación del ácido fítico. El ácido fítico presenta doce protones que pueden ser disociados sucesivamente como sigue:



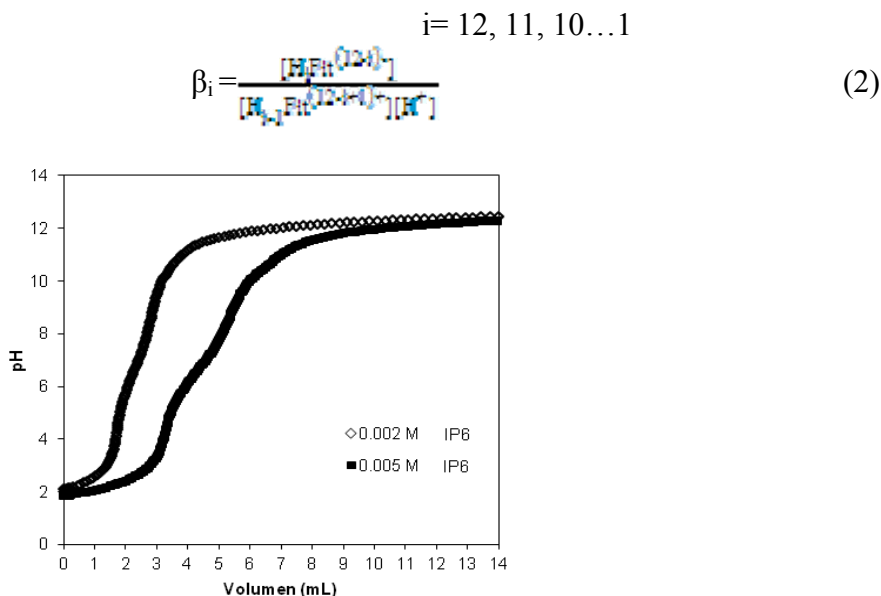


Figura 1. Titulación potenciométrica de soluciones (□) 0.002 M y (♦) 0.005 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

En la tabla 1 se presentan las constantes de protonación del ácido fítico a las diferentes concentraciones en medio 0.1 M de NaClO₄ a 25°C. Se observa que los valores obtenidos a las diferentes concentraciones de ácido fítico son cercanos y siguen la misma tendencia ($\log \beta_1 > \log \beta_2 > \log \beta_3 > \log \beta_4 > \log \beta_5 > \log \beta_6$). Li y colaboradores [8] determinaron las constantes de protonación del ácido fítico usando la misma sal de fondo, pero a valores de fuerza iónica altos (0.15 M, 1 M y 3 M de NaClO₄), observando una tendencia peculiar en el caso de las primeras 3 constantes: $\log \beta_1 > \log \beta_2 < \log \beta_3$. La misma tendencia fue observada en medio 5 M, 3 M, 1 M, 0.5 M y 0.1 M de NaCl [9]. Una tendencia similar a la obtenida en este estudio ($\log \beta_1 > \log \beta_2 > \log \beta_3$) fue observada en medio 0.1 M, 0.5 M, 3.0 M de KCl, 0.1 M, 0.5 M, 1 M y 3 M de LiCl [9], en medio 0.1 M de KCl (De Carli, 2006) y en medio 0.1 M, 0.5 M y 1.0 M de CsCl [10]. Cabe mencionar que en la mayoría de los estudios que se han publicado, los autores reportan solamente las primeras 7 y en algunos casos 8 constantes de protonación para el ácido fítico. Esto podría ser explicado por la interacción del ácido fítico con el contraion de la sal de fondo a valores de pH bajos.

Tabla 1. Constantes de protonación del ácido fítico en 0.1 M de NaClO₄ a 25 ° C

IP6	Log β_1	Log β_2	Log β_3	Log β_4	Log β_5	Log β_6	Log β_7
0.002 M	10.728	9.061	6.887	6.545	5.078	5.078	3.368
0.005 M	11.776	9.878	7.182	7.122	4.265	4.265	-
media	11.25±0.7	9.47±0.6	7.03±0.2	6.83±0.4	4.67±0.6	4.67±0.7	3.4±0.01

3.1.2. Sistema fitato-uranio (VI)

La reacción del ácido fítico con el ion uranilo o uranio (VI) es inmediata, al ponerlos en contacto se observó la formación de un precipitado color amarillo. La figura 2 compara las curvas de titulación del ácido fítico en presencia del ion uranilo en diferentes concentraciones equimolares. Las curvas de titulación son similares a las observadas en la titulación del ácido fítico sin el catión, revelando tres regiones protonadas en las mismas regiones de pH. Este resultado indica que no todo el ácido fítico ha reaccionado con el ión uranilo.

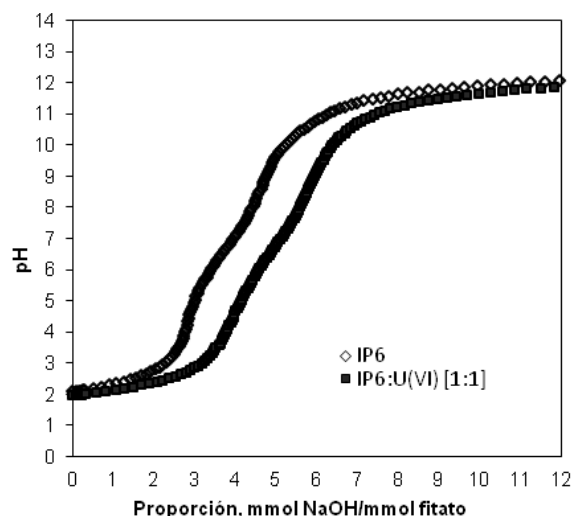


Figura 2. Curva de titulación de 0.002 M de ácido fítico en (◇) ausencia y en (■) presencia de uranio (VI) a temperatura de 25°C, fuerza iónica constante 0.1 de NaClO₄.

La figura 3 compara las curvas de titulación potenciométrica del sistema fitato-uranio (VI) en concentraciones molares 1:1, 2:1 y 1:2. En esta figura se observa que cuando existe una mayor concentración del ligando fitato, la curva de titulación presenta los puntos de inflexión característicos de la disociación del ácido fítico. Este resultado demuestra que el ácido fítico en exceso interacciona débilmente con el uranio y no llega a precipitar, muy probablemente debido a la competencia entre las moléculas de ligando fitato, las cuales sólo llegan a solvatar al ión uranilo. Es por ello que el ácido fítico reacciona totalmente al ser titulado con el hidróxido de sodio. Al contrario, cuando hay un exceso de uranio (VI) los puntos de inflexión casi no se aprecian, lo que muestra claramente que todo o la mayor parte del ácido fítico reacciona con el ion uranilo y precipita. De acuerdo con el estudio potenciométrico, el ligando fitato y el ión uranilo reaccionan completamente, formando complejos sólidos, cuando se combinan en una relación molar 1:2 siendo la más adecuada para la recuperación de uranio de efluentes contaminados.

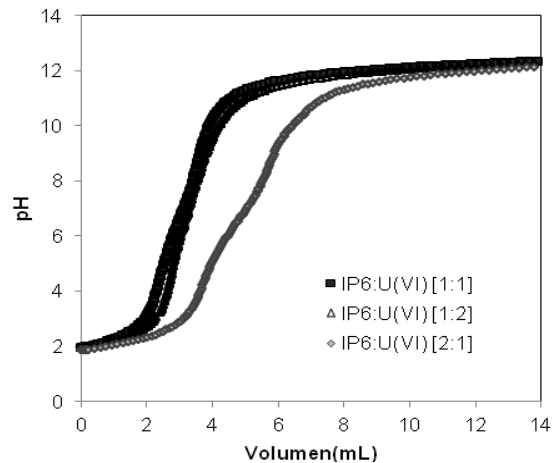


Figura 3. Curvas de titulación potenciométrica del sistema fitato-uranio (VI) en una relación: (■) 1:1, (◇) 2:1 y (Δ) 1:2 a una concentración mínima de 0.002 M en medio 0.1 M de NaClO₄ a 25°C, titulada con 0.1 M de NaOH

3.1.3. Sistema fitato-europio (III)

En la Tabla 2 se resumen las concentraciones molares de ácido fítico y europio (III) usadas en los experimentos de titulación potenciométrica. En las figuras 4 a 9 se comparan las curvas de titulación del ácido fítico y del sistema fitato-europio para las diferentes relaciones molares usadas. En todos los casos se observó la formación de un precipitado blanco al contacto de la solución de ácido fítico con el catión. En los sistemas con exceso de ligando fitato (figuras 4 a 6), la curva de titulación es similar a la curva obtenida para el ácido fítico solo. Bajo estas condiciones la interacción del ácido fítico con el catión es mínima, lo que explica la escasa formación de precipitado.

Tabla 2. Concentraciones molares usadas en la titulación del sistema IP6-Eu (III).

Concentración (M)		Relación IP6:Eu(III)	Precipitación
IP6	Eu(III)		
0.004	0.001	4:1	Poca
0.003	0.001	3:1	Poca
0.002	0.001	2:1	Poca
0.001	0.001	1:1	Poca
0.001	0.002	1:2	Poca
0.001	0.003	1:3	Abundante
0.001	0.004	1:4	Abundante

En los sistemas con exceso de catión se observa un comportamiento distinto (figuras 7 a 9). La pendiente de la curva de titulación del sistema fitato-europio a una relación molar 1:2, esta menos inclinada que la observada en la curva del ácido fítico solo. Con el aumento de la concentración del catión (1:3, 1:4), la curva de titulación del sistema fitato-europio está por abajo de la curva de titulación del ácido fítico solo, lo que sugiere una alta interacción del ligando fitato con el ion europio. Cabe señalar que en estas condiciones se observó una mayor cantidad de precipitado.

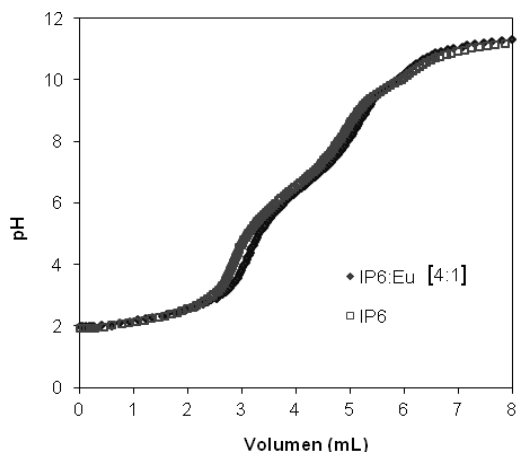


Figura 4. Titulación potenciométrica de soluciones (♦) 0.004 M-0.001M fitato-europio (III) y (□) 0.004 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

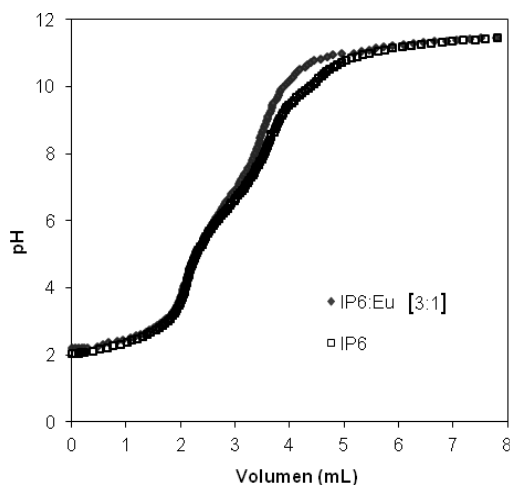


Figura 5. Titulación potenciométrica de soluciones (♦) 0.003 M-0.001M fitato-europio (III) y (□) 0.003 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

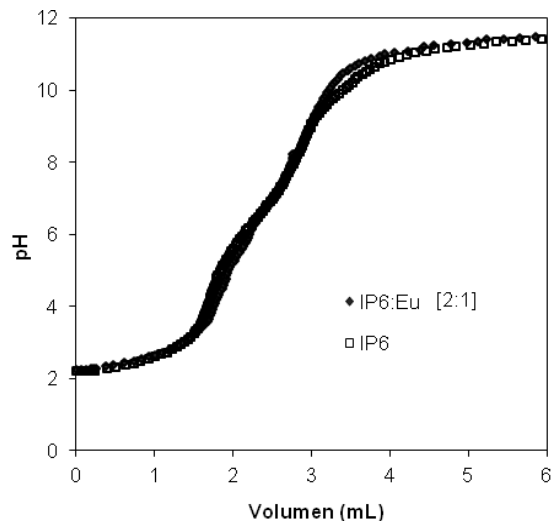


Figura 6. Titulación potenciométrica de soluciones (◆) 0.002 M-0.001M fitato-europio (III) y (□) 0.002 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

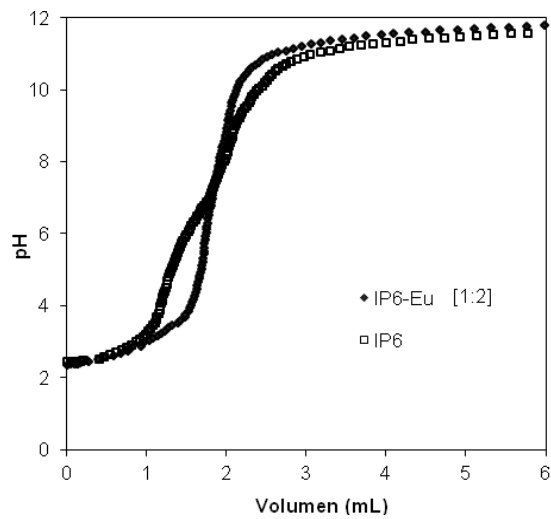


Figura 7. Titulación potenciométrica de soluciones (◆) 0.001 M-0.002M fitatoeuropio(III) y (□) 0.001 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

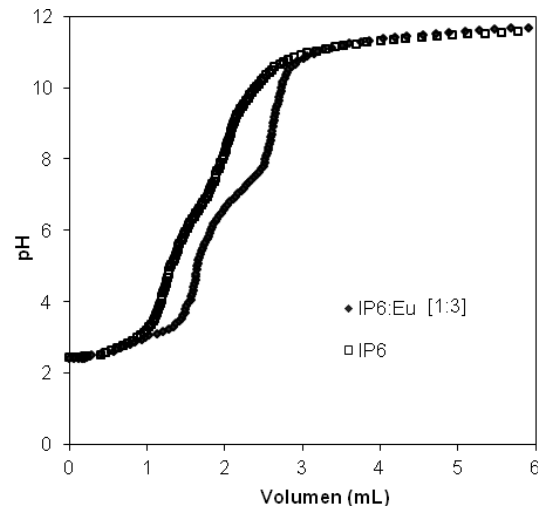


Figura 8. Titulación potenciométrica de soluciones (♦) 0.001 M-0.003M fitato-europio (III) y (□) 0.001 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

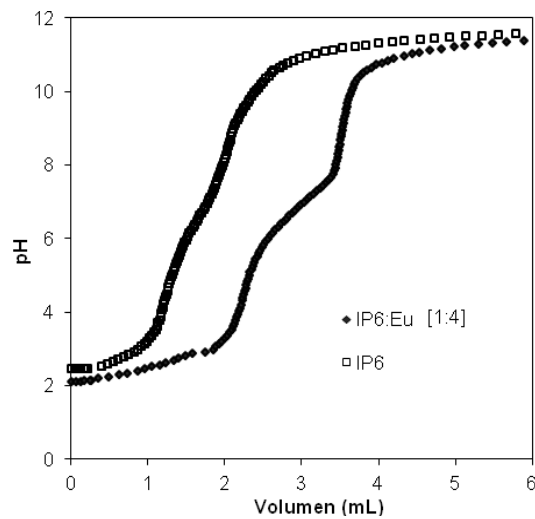


Figura 9. Titulación potenciométrica de soluciones (♦) 0.001 M-0.004M fitato-europio (III) y (□) 0.001 M de ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, titulado con 0.1 M de NaOH.

3.2. Preparación de complejos

3.2.1. Complejos fitato-uranio (VI)

Se sabe que el ácido fítico es altamente complejante del ion U(VI), lo que conduce a la formación de complejos fitato-uranio. De acuerdo con el estudio potenciométrico realizado previamente, el ácido fítico reacciona en un rango de pH comprendido entre 2 y 11. Por lo que, para estudiar la interacción del ácido fítico con U(VI), se realizaron experimentos a pH cercanos a los puntos de inflexión observados en las curva de titulación del ácido fítico.

Las condiciones experimentales para la preparación de los complejos fitato-uranio (VI) se resumen en la tabla 3. En la mayoría de los tubos se observó la formación inmediata de un precipitado color amarillo al adicionar la solución de uranio. Para todos los valores de pH estudiados se observó la ausencia de precipitado en el sistema con exceso de ligando fitato (relación molar 2:1). Este resultado es totalmente congruente con lo observado en el estudio potenciométrico. Siendo el ácido fítico el reactivo limitante, se fue incrementando la concentración de uranio con el fin de estimar la cantidad máxima de uranio que precipitó con el ácido fítico. El porcentaje de uranio (VI) en el precipitado se determinó a partir de su cuantificación por la técnica de centelleo líquido usando la siguiente relación:

$$\%U(VI)_{pp} = \frac{[U(VI)]_{pp}}{[U(VI)]_{inicial}} \cdot 100 \quad (3)$$

La concentración de uranio inicial, $[U(VI)]_{inicial}$, se determinó en una solución estándar de uranio (VI) preparada en condiciones similares sin el ácido fítico. La concentración de uranio final, $[U(VI)]_{final}$, se midió en el sobrenadante después de siete días de interacción. La incertidumbre asociada en la determinación del porcentaje de uranio en el precipitado fue de 5%, de acuerdo a los experimentos de reproducibilidad efectuados.

Tabla 3. Condiciones para la preparación de complejos fitato-uranio (VI)

pH (±0.3)	Relación IP6 :U(VI)	% U(VI) en el precipitado	Observaciones
3.0	2:1	<2	Ausencia de precipitado
	1:1	28.2	Precipitado escaso
	1:2	71.09	Precipitado abundante
4.0	2:1	<2	Ausencia de precipitado
	1:1	31.1	Poco precipitado
	1:2	87.8	Precipitado abundante
	1:3	71.8	Precipitado abundante
5.5	1:4	64.0	Precipitado abundante
	2:1	<2	Ausencia de precipitado
	1:1	89.6	Precipitado abundante

	1:2	94.7	Precipitado abundante
	1:4	83.7	Precipitado abundante
	1:8	64.2	Precipitado
7.0	2:1	0.0	Ausencia de precipitado
	1:1	10	Poco precipitado
	1:2	26.3	Poco precipitado
	1:4	81.5	Precipitado abundante
8.5	2:1	0.0	Ausencia de precipitado
	1:1	5.6	Escaso precipitado
	1:2	38.5	Poco precipitado
	1:5	28.9	Poco precipitado
	1:10	7.2	Escaso precipitado

3.2.2. Complejos fitato-europio (III)

Considerando los resultados obtenidos en el estudio potenciométrico, se eligió preparar los complejos fitato-europio (III) usando una relación de concentración 1:3, y variando el pH entre 4 y 10. Las condiciones experimentales para la preparación de los complejos fitato-europio se resumen en la tabla 4. En todos los tubos se observó la formación inmediata de un precipitado color blanco, resultado de la interacción del ácido fítico con el europio (III). Después de siete días de interacción, el volumen del precipitado aumento considerablemente.

El porcentaje de europio (III) en el precipitado se determinó a partir de su cuantificación por la técnica de fluorescencia usando la ecuación (3). La concentración de europio inicial, $[Eu(III)]_{inicial}$, se determinó en una solución estándar de europio (III) preparada en condiciones similares, sin el ácido fítico. La concentración de europio final, $[Eu(III)]_{final}$, se midió en el sobrenadante después de siete días de interacción. Para validar el método de cuantificación se trazó una recta de calibración obteniéndose un factor de correlación de 0.98.

Tabla 4. Condiciones experimentales para la preparación de complejos fitato-europio (III).

pH (± 0.3)	Relación IP6 :Eu(III)	% Eu (III) en el precipitado	Precipitación
4.0	1:3	92.2	Abundante precipitado
6.0	1:3	90.2	Abundante precipitado
8.0	1:3	92.1	Abundante precipitado
10.0	1:3	82.3	Poco abundante

Después de siete días de interacción, el porcentaje de Eu (III) que precipitó con el ácido fítico fue en promedio del 91% para valores de pH de 4 a 8 (Tabla 2). A pH 10 el porcentaje fue del 82%. La diferencia en el porcentaje puede ser debido a diferentes factores, como el error experimental, que se puede subsanar con nuevas réplicas. Otro factor podría ser la especiación del ion europio en solución, ya que a pH 10 la especie hidroxilada (EuOH)²⁺ es predominante. En esas condiciones los complejos formados pueden ser de diferente naturaleza y quizá menos estables.

4. CONCLUSIONES

La curva de titulación potenciométrica del ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄, a 25°C, presenta tres regiones protonadas en un intervalo de pH 2 a 12 encontrándose totalmente desprotonado a pH 13.

Las primeras constantes de protonación del ácido fítico en medio 0.1 M de NaClO₄ a 25°C, fueron determinadas con los datos potenciométricos, y refinadas con el programa SUPERQUAD. Estas constantes tienen una tendencia en orden decreciente ($\log \beta_1 > \log \beta_2 > \log \beta_3 > \log \beta_4 > \log \beta_5 > \log \beta_6$), similar a las que se reporta en la bibliografía aunque en diferente medio y fuerza iónica.

El estudio potenciométrico del sistema ácido fítico-uranio (VI) a diferentes concentraciones molares (2:1, 1:1 y 1:2) reveló que cuando hay un exceso de ácido fítico la curva de titulación potenciométrica es similar a la obtenida en ausencia de uranio (VI), además no se observa la formación de precipitado. Por el contrario, cuando hay exceso de uranio (VI) los puntos de inflexión observados en la curva de titulación del ácido fítico son apenas perceptibles, debido a que gran parte del ácido fítico precipita con el uranio (VI) durante su titulación.

La interacción del ácido fítico con el europio tuvo un comportamiento diferente. El estudio potenciométrico del sistema fitato-europio (III) se realizó a diferentes relaciones molares, observándose en todos los casos diferencias en las curvas de titulación. En los sistemas con exceso de ligando fitato, la interacción con el catión fue mínima, observándose escaso precipitado. Al contrario, los sistemas con exceso de ion europio existe una alta interacción y se observa la formación de una gran cantidad de precipitado. Se prepararon complejos fitato-europio (III) a pH 4, 6, 8 y 10 y concentración molar 1:3. En estas condiciones, excepto a pH 10, la interacción del ligando fitato con el ion europio fue alta, obteniéndose grandes cantidades de precipitado.

Tomando en cuenta los resultados del estudio potenciométrico se sintetizaron complejos fitato-uranio [1:2] y fitato-europio [1:3] con buenos porcentajes de recuperación.

El estudio aporta nuevos datos sobre la interacción del ácido fítico con cationes divalentes y trivalentes de interés nuclear, a partir de los cuales se establecen las bases para el desarrollo de métodos efectivos para la recuperación de efluentes contaminados.

REFERENCIAS

- [1] Betts, K. (1997). Phytic acid immobilizes radionuclides. *American Chemical Society* , 31(6), 263.
- [2] Burriel Martí, F., Lucena Conde, F., Arribas Jimeno, S., & Hernández Méndez, J. (1985). *Química Analítica Cuantitativa*. España: Thomson Editores.
- [3] Seaman, J. C., Hutchison, J. M., Jackson, B. P., & Vulava, V. M. (2003). In situ Treatment of Metals in Contaminated Soils with Phytate. *Environ*, 153-161.
- [4] Jensen, M.P., K.L. Nash, L.R. Morss, E.H. Appelman, and M.A. Schmit, 1996. Immobilization of actinides in geomeia by phosphate precipitation. *Humic and fulvic acids: Isolation, structure and environmental role*. ACS Symp. Ser. 651:272–285.
- [5] Osmond J.K., Cowart J.B. “Natural Uranium and Thorium Series Disequilibrium: New Approaches to Geochemical Problems”. *Nuclear Science Applications*, 1(1982)303-352.
- [6] Grabowski, P. & Bem, H., 2012. Uranium isotopes as a tracer of groundwater transport studies. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, pp. 1043-1048.
- [7] Finck N., Drot R., Lagarde G., Mercier-Bion F., Catalette H. and Simoni E. “Temperature effects on the interaction mechanisms between U(VI) and Eu(III) and ZrP_2O_7 : experiment and modeling”. *Radiochim. Acta* 96, (2008) 11-21.
- [8] Li, N., Wahlberg, O., Puigdomenech, I., & Öhman, L. (1989). Equilibria between phytate and protons in 3 M $NaClO_4$ medium. *Acta Chem. Scand*, 331-339.
- [9] De Stefano, C., Milea, D., Pettignano, A., & Sammartano, S. (2003). Speciation of phytate ion in aqueous solution. Alkali metal complex formation in different ionic media. *Anal Bioanal Chem*, 1030-1040.
- [10] De Carli, L., Rosso, N. D., Schnitzler, E., & Carneiro, P. I. (2006). Estudo da Estabilidade do complexo ácido fítico e o íon Ni(II). *Ciência e Tecnologia em Alimentos*, 19-26.

Evaluación de riesgos por actividad gamma ambiental en suelos mediante espectrometría *in situ*.

Anahid Zharazan López Espinosa y Carlos Ríos Martínez
Universidad Autónoma de Zacatecas
Unidad Académica de Estudios Nucleares
Calle Cipres No. 10, La Peñuela 98060 Zacatecas, Zac.
Zhara_23@hotmail.com; criosmtz@hotmail.com

Daniel Hernández Ramírez y Fernando Mireles García
Universidad Autónoma de Zacatecas
Unidad Académica de Estudios Nucleares
Calle Cipres No. 10, La Peñuela 98060 Zacatecas, Zac.
ninib44@hotmail.com; fmireles@uaz.edu.mx

Resumen

*El conocimiento de la radiación ambiental es esencial para establecer la calidad del medio ambiente. A través de la espectrometría gamma *in situ* es posible determinar la existencia de los emisores gamma (naturales y artificiales) distribuidos en suelos; los espectros de radiación gamma natural se conforman de varios fotopicos, y en el caso de las series radioactivas naturales, permite la determinación de los progenitores de ^{238}U y ^{232}Th , para el caso del ^{137}Cs y ^{40}K se determinan de manera directa con sus energías características. Esto se hace con la finalidad de conocer los emisores gamma presentes en el suelo, además de hacer una evaluación de posibles riesgos radiológicos. Los resultados de este trabajo se han evaluado y validado con los reportados en la literatura.*

Una estadística inadecuada o una inapropiada elección de parámetros de manipulación de espectros reduce la calidad de los resultados obtenidos por el sistema de espectrometría gamma por lo que es importante establecer metodologías y factores adecuados de edición y conversión.

*Se realizaron mediciones *in situ* y se tomaron muestras para mediciones en laboratorio en las localidades de Tabasco, Loreto, Pinos y Fresnillo del estado de Zacatecas. El muestreo se hizo para determinar el perfil de actividades hasta una profundidad de 25 cm. Los espectros gamma fueron adquiridos con un sistema espectrométrico basado en un cristal de germanio.*

*Las mediciones *in situ* mostraron consistencia con las mediciones de laboratorio. La actividad específica determinada de los radionúclidos en estudio está en el orden de los valores reportados en la literatura y los factores de riesgo encontrados están en el orden de los valores de los niveles normales. Se determinó presencia de ^{137}Cs en algunos espectros *in situ*, confirmada por las determinadas en laboratorio.*

1. INTRODUCCIÓN

El fenómeno de la radiactividad fue descubierto casualmente por el físico francés Antoine Henri Becquerel en 1896 mientras realizaba estudios de fluorescencia y fosforescencia, al observar que las sales de uranio podían ennegrecer una placa fotográfica al ser expuestas al sol, hecho que se atribuía a la fosforescencia del cristal. Los días siguientes no hubo sol y dejó en un cajón la placa con la sal de uranio. Cuando sacó la placa esta estaba velada, no podía deberse a la fosforescencia ya que no había sido expuesta al sol, la única explicación era que la sal de uranio emitía una radiación muy penetrante. Dos años más tarde los Esposos Curie dedujeron que el fenómeno descubierto por Bequerel era un proceso espontáneo asociado a los átomos e independiente de su estado químico.

En 1902 Ernest Rutherford junto con Frederick Soddy publican en el "Philosophical Magazine" la primera descripción del fenómeno de la radiactividad y el enunciado de la teoría de la desintegración radiactiva. Esta ley afirma que no es posible frenar ni acelerar este proceso y que la transmutación de elementos sigue periodos definidos. Sugirieron que el ritmo con que una sustancia radiactiva emitía partículas radiactivas disminuía exponencialmente con el tiempo [1].

A través de la espectrometría gamma *in situ* es posible determinar la existencia de los emisores gamma (naturales y artificiales) distribuidos en suelos y en el caso de las series radioactivas naturales, permite la determinación de los progenitores de ^{238}U y ^{232}Th . Para los radioisótopos ^{40}K y ^{137}Cs se utilizan sus energías características [2].

En la década de los 40 el mundo se encuentra inmerso en un conflicto bélico, la segunda guerra mundial, Robert Openheimer y colegas dentro del proyecto Manhattan inician pruebas para la construcción de las primeras armas nucleares. El 16 de julio de 1945, la primera bomba de fisión es detonada en Nuevo México, el 6 y el 9 de agosto se lanzan dos bombas sobre las ciudades de Hiroshima y Nagasaki. Al término del conflicto la postura respecto al uso de armamento nuclear es variado, algunos países desaprueban el uso de armamento nuclear, sin embargo, otros lo aprueban y construyen armas nucleares. Al paso del tiempo la demanda energética es mayor y surge la necesidad de probar energías alternativas, la construcción de reactores nucleares proporciona una opción idónea para la producción de electricidad. Sin embargo, tras el accidente de la central nuclear de Chérbobil en 1986, el de Fukushima en el 2011, y los ensayos nucleares en todo el mundo surge la importancia del estudio y control para establecer técnicas de determinación y cuantificación como programas de vigilancia [3].

Por lo que la espectrometría de radiación gamma es una herramienta idónea para áreas como vigilancia radiológica de medio ambiente, control radiológico y caracterización de materiales.

2. OBJETIVO

Determinar la actividad gamma ambiental en suelos mediante espectrometría *in situ* y de laboratorio utilizando factores adecuados de conversión, para la medición *in situ* se estarán utilizando factores propuestos por el reporte ICRU 53 [4], mientras que para las mediciones de laboratorio se hizo una corrección de tiempo considerando el tiempo de envasado y el tiempo de conteo de las muestras.

3. MATERIALES Y METODOS

3.1. Calibración y descripción del sistema de medición.

Las mediciones *in situ* y de laboratorio se realizaron en 4 regiones del estado de Zacatecas, en cada región se eligieron 2 sitios para las mediciones y toma de muestras, dando un total de 8 mediciones *in situ*, de los cuales 6 son terrenos planos y no cultivados y otros 2 cercanos a áreas de cultivo, recolectándose muestras de suelo a una profundidad de 25 cm dividida en estratos de 5 cm para mediciones en laboratorio. Las determinaciones de Actividad gamma se realizaron con un sistema de espectrometría basado en un cristal de germanio Canberra GeRe-3522 montado en un criostato portátil BIG MAC 7. Se utiliza una tarjeta AccuSpec para la adquisición de los espectros de rayos gamma usando el software Genie 3.4 para la determinar las actividades de interés [5].

Para las mediciones tanto *in situ* como de laboratorio se utilizó el sistema de Espectrometría Gamma (GeRe3522) de la Unidad de Estudios Nucleares de la Universidad Autónoma de Zacatecas; el sistema de detección se acopla a instrumentos electrónicos y el software analizador.

Un detector de Germanio, acoplado a un Dewar de 7 lt
Preamplificador
Fuente de alto voltaje
Amplificador
Gabinete NIM-BIN
Tarjeta ADC/MCA
Computadora (software Genie 3.4)

La calibración del sistema en relación con la eficiencia y energía se realiza utilizando fuentes de referencia cuyas actividades están debidamente certificadas, llamadas fuentes patrón.

En las mediciones de laboratorio se calibró el equipo en eficiencia y energía utilizando las líneas existentes del estándar multinúclido en geometría marinelli. Las líneas existentes del multinúclido son ^{241}Am (59.5 KeV), ^{137}Cs (661.6 KeV) y ^{60}Co (1773.23 y 1332.51 KeV). Para la calibración en eficiencia se utilizó una fuente de europio 152 con las siguientes

especificaciones: 1.036 μ Ci, 38.33kBq Al 15/noviembre/2015. Se coloca la Fuente de europio a distintos ángulos y se hace una regresión lineal de donde se obtiene la siguiente expresión:

$$Y = A + Bx + \frac{C}{x} + \frac{D}{x^2} \quad (1)$$

A= 0.0153856

B = -7.18744×10^{-6}

C=13.0498

D=-582.663

x = energía del radionuclido

Para la calibración in situ se hace una extrapolación de la de laboratorio.

Se realizaron mediciones *in situ* con un tiempo de medición de 7200 segundos, tiempo requerido para obtener un error relativo menor al 2% para el pico del ^{40}K , recomendación ICRU 53 [4].

Y se tomaron muestras para mediciones en laboratorio, con un perfil de 25 cm divididos en estratos de 5 cm, las localidades de muestreo fueron: Tabasco, Loreto, Pinos y Fresnillo del estado de Zacatecas. Convencionalmente, el ^{238}U se determina a partir de los fotopicos de sus descendientes ^{214}Pb con energías de 295.2 y 351.9 KeV y ^{214}Bi con la energía 609.3 y 1123 KeV. Igualmente, el ^{232}Th se determina por la medición de los fotopicos 583 y 860.56 KeV del ^{208}Tl , así como los fotopicos 911 y 969.1 keV del ^{228}Ac ; bajo la consideración de la existencia de equilibrio secular entre los isótopos padres y sus descendientes. El ^{137}Cs y ^{40}K se obtienen en forma directa con los fotopicos de energías 661.6 y 1460.8 KeV, respectivamente. Las muestras de suelo fueron llevadas al laboratorio de la Unidad Académica de Estudios Nucleares, allí se eliminó el exceso de humedad de cada muestra, después fueron tamizadas y llevadas a una estufa para secarlas a 90°C por 2 horas; las muestras secas se pesaron y envasaron en recipientes marinelli con capacidad de 500 gr. El conteo para cada muestra tuvo duración de 40000 segundos [6].

3.2. Localización y Descripción General de los Sitios de Medición.

El primer sitio de medición fue en la localidad de Santiago el Chique situado en el municipio de Tabasco, con una longitud (-102054'7.0992'') y latitud (210 59' 25.173'') con un tipo de suelo de riolita – ignimbrita; el segundo sitio fue en Presa grande de San Marcos situada en el municipio de Loreto con una longitud (-1010 55'17.7378'') y latitud (220 16'14.3688), el suelo que lo conforma es riolita; El tercer sitio fue en el Obraje situado en Pinos con una longitud (-1010 36'24.313'') y una latitud (220 10' 57.0894'') con un tipo de suelo de arena -limo, y por último se midió en Lázaro Cárdenas (Rancho Grande) Fresnillo con una longitud (-102057'55.0794''), latitud (230 28'9.8688'') y el tipo de suelo es aluvion.

3.2.1. Expresiones matemáticas para el cálculo de actividad.

La expresión utilizada para determinar la actividad in situ es la siguiente:

$$\frac{N_f}{A_m} = \frac{N_f}{N_0} \cdot \frac{N_0}{\varphi} \cdot \frac{\varphi}{A_m} \quad (2)$$

Donde: N_f es la razón de conteo bajo el fotopico de energía característica del radionúclido medido (cps).

φ : Es el flujo de rayos gamma de energía característica en el detector por unidad de área y segundo (cm^2s^{-1}) de un determinado radionúclido.

A_m : Actividad de la muestra; actividad por unidad de masa (Bq/Kg).

N_0 : Razón de conteo bajo el fotopico de energía característica del radionúclido (cps) de un haz de rayos gamma que inciden sobre el detector paralelo a su eje de simetría.

Calculo de: N_0/φ

Para encontrar este valor se realiza un ajuste lineal según la expresión:

$$\ln\left(\frac{N_f}{\varphi}\right) = a - b \ln^*(E) \quad (3)$$

Para obtener el coeficiente a se realiza un ajuste de polinomio de tercer grado y para obtener el coeficiente b se consideran las características del cristal (longitud L 66 mm y diámetro D 60.5mm) y ϵ_d (35%) eficiencia del detector. Entonces las expresiones para calcular a y b son:

$\left(\frac{N_f}{N_0}\right)$ Este parámetro depende tanto de las características del detector como de la geometría de la fuente. Para cada una de las citadas energías y ángulo polar θ se determina la componente $\frac{\epsilon_d \cos^2\theta}{\varphi}$

la componente φ que es el flujo primario de fotones gamma de energía E que parten del suelo hasta el detector, depende de la geometría de la fuente, que en frecuentes circunstancias se desconoce, este parámetro puede alcanzar valores mínimos del orden de 0.39, mientras que para energías elevadas y distancias próximas a 1 m, éste se sitúa en torno a la unidad para todos los ángulos considerados. Y por lo tanto $\left(\frac{N_f}{N_0}\right)$ tiende a uno.

Fotones por unidad de actividad:

Los radionúclidos distribuidos homogéneamente en suelos a un metro de altura sobre el suelo se obtiene del reporte ICRU 53 [4].

Tabla I. Energías y factores ICRU 53 para la determinación de actividad

Radioisotopo	Energía (KeV)	$\frac{\varphi}{A_m} (\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Bq}^{-1} \text{Kg})$
Pb 212	238.6	1.73×10^{-3}
Pb 214	351.9	1.71×10^{-3}
Pb 214	295.2	0.828×10^{-3}
Tl-208	583	1.76×10^{-3}
Bi 214	609	2.75×10^{-3}
Cs 137	661.6	0.78×10^{-3}
Ac 228	911	2.06×10^{-3}
Ac 228	969.1	1.28×10^{-3}
Bi 214	1123	1.22×10^{-3}
K 40	1460.8	0.97×10^{-3}
Bi 214	1765	1.62×10^{-3}
Tl-208	2615	4.42×10^{-3}

Para mediciones de laboratorio la expresión para el cálculo de actividad es:

$$A = \left(\frac{N_m}{\epsilon \cdot \varphi} - \frac{N_f}{\varphi} \right) / m \quad (4)$$

Donde:

N_m = número de cuentas totales detectadas en el fotopico.

N_f = número de cuentas detectadas por el fondo.

ϵ = eficiencia del detector a dicha energía.

$\varphi(E)$ = probabilidad de fotones con energía E.

t = tiempo de conteo.

La expresión utilizada para calcular la dosis es [7]:

$$D = 0.462C_{4n+2} + 0.64C_{4n} + 0.0417C_K \quad (5)$$

En donde C_{4n+2} es la contribución en actividad para los radioisótopos descendientes de la serie del uranio descritos anteriormente, C_{4n} es la contribución para los radioisótopos descendientes de la serie del torio y C_K corresponde a la contribución del potasio.

4. RESULTADOS

Las mediciones in situ mostraron consistencia con las mediciones de laboratorio. La actividad específica determinada de los radionúclidos en estudio está en el orden de los valores reportados en la literatura [7]. Los factores encontrados están en el orden de los niveles normales. Se determinó presencia de ¹³⁷Cs en algunos espectros in situ, confirmada por las determinaciones en laboratorio.

Tabla 2. Resultados in situ de actividad y Dosis

Espectro	Serie 4n+2	Serie 4n	40 K	137 Cs	4n+2	4n	40 K
Sitio de medición	Actividad (Bq/Kg)	Actividad (Bq/Kg)	Actividad (Bq/Kg)	Actividad (Bq/Kg)	Dosis (nGy/hr)	Dosis (nGy/hr)	Dosis (nGy/hr)
Chique 1	24.09	14.55	796.31	-----	42.99	43.95	33.21
Chique 2	22.45	16.77	963.27	-----	40.24	50.64	40.17
Loreto	16.67	14.22	601.5	2.05	33.09	42.23	24.68
Obraje 1	22.55	15.36	649	-----	40.77	46.4	27.06
Obraje 2	20.02	12.19	560.4	1.35	35.51	36.81	23.37
Hancón 1	25.7	13.94	871.6	-----	47.59	42.09	36.35
Hancón 2	22.5	10.38	784	1.72	40.65	31.36	32.69
Promedio	21.9	13.92	746.58	1.71	40.12	41.92	31.07

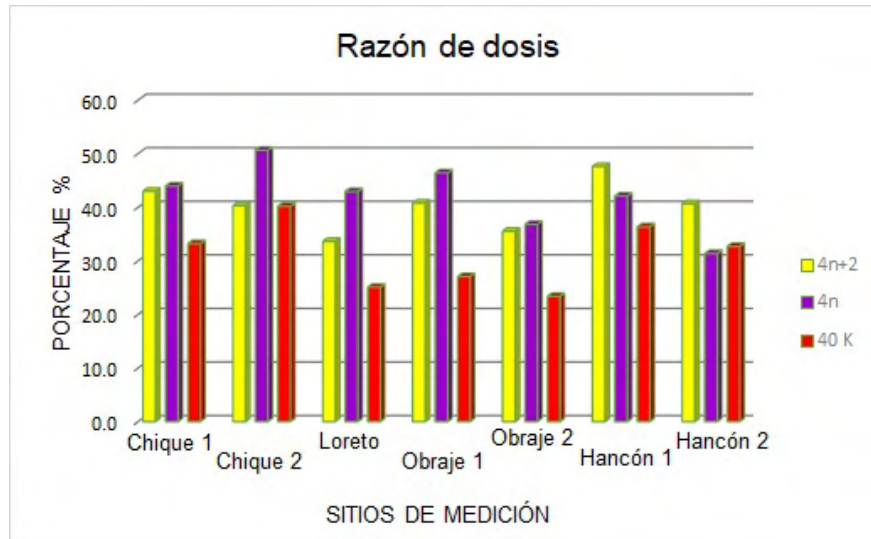


Figura 1. Razón de dosis in situ para los sitios de medición

4.1. Resultados para las mediciones de laboratorio.

Para las mediciones de laboratorio se tomaron muestras de un perfil de 25cm divididos en estratos de 5cm, se envaso en recipientes marinelli con un peso aproximado de 500 gramos para posteriormente realizar el análisis estadístico de espectros.

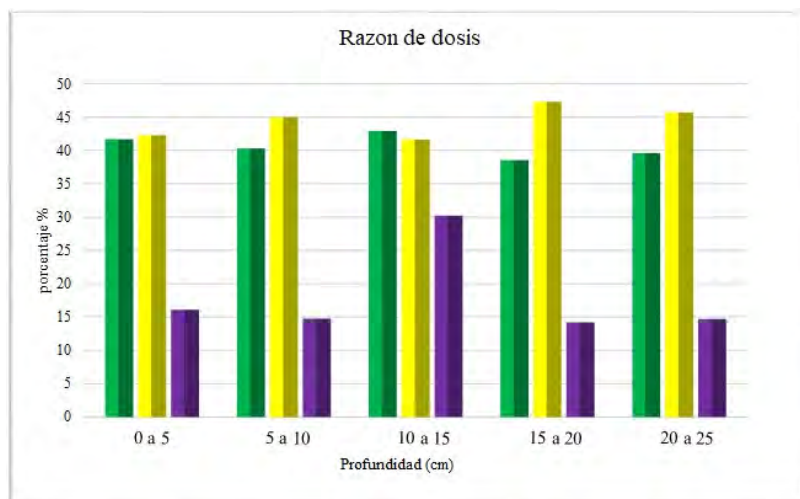


Figura 2. Razón de dosis para las mediciones de laboratorio municipio de Loreto Zacatecas.



Figura 3. Razón de dosis para las mediciones de laboratorio municipio de Loreto Zacatecas.

5. CONCLUSIONES

La congruencia de los resultados obtenidos en este trabajo nos indica que tienen un buen grado de confiabilidad y es una técnica idónea para caracterizar radionúclidos presentes en el entorno.

Las actividades medidas en la unidad académica de estudios nucleares (UAEN) debidas a la serie $4n+2$ caen en un rango de: 14- 60 Bq/kg, para la serie $4n$ 11-50 Bq/kg y para el 40K 600-966 Bq/kg.

El rango de valores para actividad reportados por UNSCEAR* (2000) está en el orden de: 25-1650 Bq/kg para el potasio, 6-250 Bq/kg para la serie $4n+2$ y 2-210 Bq/kg para la serie $4n$; por lo tanto los resultados que se obtuvieron en este trabajo son congruentes con los reportados en la literatura y caen en el rango de los valores reportados por UNSCEAR (2000).

El reporte de UNSCEAR (2000) presenta una razón de dosis debida a la radiación natural en exteriores en el rango de 18-93 nGy/hr. Por lo tanto, concluimos que no existen riesgos radiológicos en los sitios de medición.

La baja concentración del ^{137}Cs minimiza su contribución al riesgo radiológico.

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), A los doctores Carlos Ríos, Fernando Mireles, Ignacio Dávila, José Luis Pinedo, a La doctora Sonia Saucedo y el maestro Daniel Hernández por su ayuda y colaboración.

REFERENCIAS

1. Atam P. Arya, *Fundamental of nuclear physic*, Boston, (1966).
2. Tsoulfanidis, *Measurement And Detection Of Radiation*, Taylor & Francis Group, USA, (1995).
3. Cember H, *Introduction to health Physics*, McGraw-Hill, USA, (1996).
4. ICRU Report 53, *Gamma-Ray Spectrometry in the Environment*, *International Comisión on Radiation Units and Measurements*, USA, (1994).
5. R. Margarita Rivera B., Carlos Ríos M., Fernando Mireles G., Sonia Saucedo A., Ignacio Dávila R., José L. Pinedo, Daniel Hernández. y Flavio Nava M, *Mapeo preliminar in situ de emisores gamma en el estado de Zacatecas* (2012).
6. Flavio Nava Maldonado., Carlos Ríos Martínez., Fernando Mireles García., & J. Ignacio Dávila Rangel. *Mapeo in situ de emisores Gamma; Fase II: Calibración área neta in situ-actividad específica*. Universidad Autónoma de Zacatecas (2012)
7. UNSCEAR. *Sources and effects of Ionizing Radiation. Report to the General Assembly* (2000).

Diseño y construcción de una fuente de iones por medio de un reactor de plasma

Arón Hernández Trinidad ^(a), G. H. I. Maury Cuna ^{(a)*}, M. C. García Castañeda ^(b)

*(a) División de Ciencias e Ingenierías, Dpto. de Física, Universidad de Guanajuato
Loma del Bosque 103, Lomas del Campestre CP 37150, León, Gto., México*

*(b) CONACyT – Universidad de Guanajuato, Loma del Bosque 103, Lomas del Campestre,
37150, León, Gto., México*

**israel.maury@ugto.mx*

Resumen

Las fuentes de iones tienen muchas aplicaciones en la industria, la medicina y la ciencia, particularmente en los aceleradores de partículas; por tal motivo, el desarrollo de estos dispositivos es de gran interés. Es por ello que se propuso diseñar una fuente de iones, a partir de un reactor de plasma. El prototipo consta de tres cámaras, en la primera se producen iones dando lugar a la generación de un plasma. Posteriormente, se encuentra la cámara de extracción, conformada por un electrodo con potencial negativo que produce un campo electrostático que acelera los iones positivos que se encuentran dentro del plasma. Finalmente, se encuentra la cámara de detección, donde una placa mide la cantidad de iones que chocan con ella, dicha medición se obtiene a partir de la corriente eléctrica que es detectada por esta misma. Para formar el plasma, se requiere ionizar el gas que se encuentra dentro de la cámara de producción a bajas presiones; esta ionización se logra mediante un campo de radiofrecuencia (RF) que excita a los electrones libres del gas, y éstos al tener la suficiente energía rompen los enlaces de las moléculas, éste se ioniza y se forma el plasma. Para el diseño mecánico de la fuente de iones se utilizó el software Inventor Autodesk. Se especificaron las componentes, materiales y estructura de esta. Las simulaciones del campo electromagnético de RF del dispositivo fue mediante el software COMSOL Multiphysics®. En este trabajo, se reporta el diseño, mecánico y electromagnético, de un prototipo de una fuente de iones.

1. INTRODUCCIÓN

Una fuente de iones es un dispositivo que produce un haz de partículas cargadas eléctricamente, consistente de iones. Hoy en día, el uso de fuente de iones es muy importante en términos de aplicaciones, en campos como la radiobiología, la medicina, zonas espaciales y en los aceleradores de partículas. Esencialmente, la fuente es un generador de plasma equipado con un conjunto de rejillas que permiten extraer los iones. Existen diversos componentes que integran a tal dispositivo como: una cámara de descarga donde se produce el plasma, un conjunto de rejillas cargadas eléctricamente, y un neutralizador, entre otros.

En los aceleradores de partículas, la tecnología para crear la fuente de iones dependerá fuertemente del tipo de partícula que se pretende generar: electrones, protones o iones pesados; partículas con mayor masa que el electrón o protón. Es sabido que los aceleradores incrementan

la energía de partículas cargadas y las confinan en haces bien definidos. Los iones producidos en la fuente, tienen usos diferentes dependiendo de la aplicación que se le quiera dar. Por ejemplo, en la radioterapia se hace uso de aceleradores lineales como fuentes de rayos X, los cuales pueden afectar los tejidos sanos colindantes donde se encuentra el daño. Los haces de iones, en cambio, tienen la característica de depositar su energía en un punto específico sin dañar algún tejido sano colindante. Efectivamente, dicha tecnología es de un alto costo, pero los beneficios en la salud del ser humano son notables.

En México, el desarrollo de este tipo de dispositivos representa un área de oportunidad para contribuir con el crecimiento científico y tecnológico del país. Lo que pretende este trabajo, es dar a conocer de una manera sencilla y simple, la creación de una fuente de iones como instrumento básico en experimentos prácticos que beneficien a la ciencia en México.

2. MARCO TEÓRICO

El estudio del plasma data del siglo XIX, cuando Humphry Davy desarrolló la descarga de arco eléctrico en estado estable usando corriente directa. Por su parte, Michael Faraday, en 1830 construyó un tubo de descarga eléctrica de alto voltaje con corriente directa y dio inicio al estudio del material, obtenido después de dicha descarga [1]. En 1879, William Crookes identificó esta sustancia y la definió como el cuarto estado de la materia [2]. Sin embargo, el término plasma fue introducido por el físico inglés Irving Langmuir en 1928, quien lo describió como un gas ionizado. En la actualidad, el plasma está definido como un gas parcialmente ionizado que se encuentra compuesto por una mezcla de electrones, fotones, iones, átomos, neutrones y radiación electromagnética con una cuasi-neutralidad eléctrica y sensibilidad a campos magnéticos y eléctricos [3]. La ionización puede producirse por otros métodos: la fuerza del campo electromagnético o por medio de un generador de microondas que es acompañado por la disociación molecular [4].

Una de las primeras aplicaciones del plasma fue en 1960, en la polimerización de estireno a partir de monómeros introducidos en una cámara donde se generaba el plasma. En el siglo XX, el plasma se usó en la fusión nuclear con fines militares; pero hoy en día se utiliza para generar energía eléctrica, donde los átomos de hidrogeno son ionizados para generar el plasma, y este es sometido a fuertes campos magnéticos al punto de que se forme helio, de este modo se liberan grandes cantidades de energía, sin embargo esta no es la única aplicación que tiene el plasma también se utiliza en recubrimientos de materiales, la propulsión por plasma, el generador magneto hidrodinámico, y como fuente de iones, por mencionar algunas [5].

En el caso de los aceleradores de partículas, las fuentes de iones requieren una región de producción de plasma y de extracción de iones. La condición del plasma y la producción del ion resultante se ven afectadas por los diferentes procesos que se utilizan en la generación del plasma: el calentamiento de las partículas, el confinamiento del plasma, las colisiones, entre otras. Además, se tiene presente la ingeniería del dispositivo como los efectos térmicos sobre los ánodos, cátodos y trampas de iones de la fuente. También, se considera la erosión del

material dentro del dispositivo. Con todas estas consideraciones se logra una confiable y estable producción de haz de partículas (iones) que minimice el consumo de energía en la fuente [6].

2.1. Fuente de Iones

La fuente de iones es el dispositivo que se encarga de inyectar iones de diferentes elementos a un acelerador de partículas, cada ion tiene diferentes usos en la medicina, como recubrimientos para mejorar la biocompatibilidad de los materiales, radioterapia por protones o iones pesados, diagnósticos por radioisótopos y la producción de radiofármacos.

Existen dos tipos de plasma: caliente y frío. Este último se caracteriza por la temperatura de sus partículas pesadas (partículas con mayor masa como helio, carbono u otros iones; a diferencia de los protones y electrones) cercana a la temperatura ambiente de 25° a 100°C [7]. Una de las formas de obtener este estado de la materia (plasma frío), es por medio de un reactor de plasmas por inducción electromagnética. El plasma es producido por medio de una bobina que se encuentra enrollada en el exterior de la cámara que contiene el gas a ionizar [8]. Esta bobina crea un campo magnético, según la Ley de inducción de Faraday, que expresa la inducción de un campo eléctrico cuando un campo magnético varía con en el tiempo. De este modo lograremos un movimiento de electrones en el interior de la cámara y se lograra la ionización del gas [9]. A este dispositivo, se le conoce como reactor de plasma de tipo inductivo. Sin embargo, no es la única forma de generar plasma, otro dispositivo idéntico es el reactor de plasma de tipo capacitivo que hace uso de un campo eléctrico o de radiofrecuencia para generar la ionización del gas. Si bien, un ejemplo de éste es el duo-plasmatrón, un dispositivo donde existen dos regiones: una para formar el plasma y otra para la extracción de iones. Por medio de un cátodo y un ánodo existirá una diferencia de potencial y debido a ello, los electrones y los iones positivos serán separados, pudiendo seleccionar la especie de iones según su requerimiento y depositarlos en otra cámara.

En el caso de México, ha habido un avance limitado en el diseño y construcción de los aceleradores de partículas [10]. Sin embargo, esto representa una oportunidad para consolidar y trabajar en esta área, con el propósito de beneficiar al país.

En este trabajo, se pretende realizar la configuración más simple, de una cámara de descarga donde se producirá el plasma. El método consiste en producir iones en la cámara sometiendo a un gas (argón, helio, entre otros), a un campo de radiofrecuencia (RF). Posteriormente, un electrodo con potencial negativo acelerará los iones presentes y los conducirá a una placa que estará midiendo la corriente eléctrica, y así saber el número de iones que llegan al detector. Como se puede observar, es una forma sencilla y a la vez ingeniosa de generar un haz de iones.

2.1.1. Diseño de la cámara de producción de iones

Para realizar los diseños de la fuente de iones, se hizo uso del programa Inventor Profesional 2019. La primera cámara, es donde se produce el plasma y se encuentra compuesta por dos placas de aluminio de 90 mm de diámetro, cada una con 10 mm de grosor y unidas con un tubo de vidrio de 50 mm de diámetro por 50 mm de largo, cada unión tiene su respectivo empaque. La placa que se localiza en el extremo izquierdo, tiene dos conexiones: brida NW16 y NW10; encargadas de controlar la entrada del gas y el vacío que se produce dentro. Se espera que el vacío sea alrededor de 10^{-2} mbar. En la Figura 1, se muestra el diseño mecánico del reactor de plasma (primera cámara), se puede observar que, en su extremo derecho, tiene un orificio de la medida de una brida NW25 para la extracción de los iones (segunda cámara).

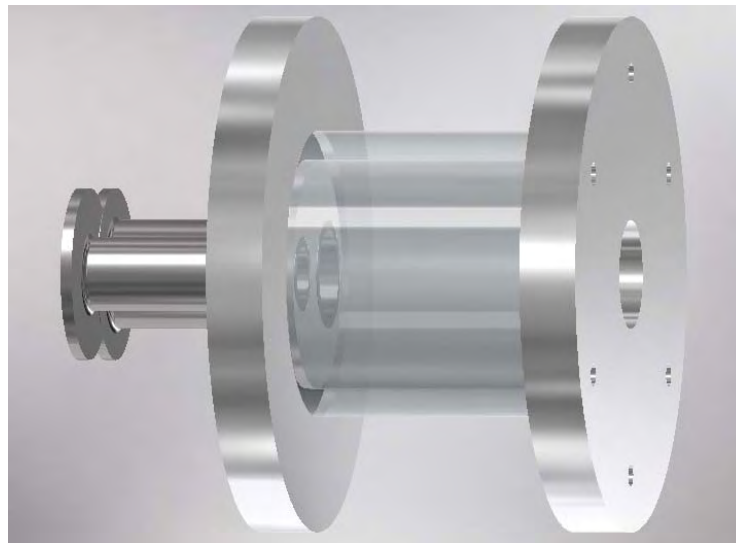


Figura 1. Reactor de plasma con conexiones de entrada y salida.

2.1.2. Diseño de la cámara de extracción y detección de los iones.

Esta cámara se encuentra unida mediante un tubo de vidrio, con las mismas dimensiones que se usa en el reactor de plasma. Como se muestra en la Figura 2, la placa de aluminio del extremo izquierdo es el electrodo encargado de acelerar los iones, éste se conectará a una fuente de voltaje, aplicándose un potencial negativo para atraer los iones positivos.

El electrodo tiene una forma cónica, que ayuda a que las partículas se concentren en la región de la placa de detección. El electrodo y el reactor de plasma se unirán mediante un empaque aislante para que al ser unidas las placas no se unifiquen en un solo electrodo. Los pernos que se utilizan para la unión son pernos aislantes para que no se perjudique la unión.

La placa de detección tiene las mismas medidas que las placas anteriores y de igual material. En dicha placa, se encuentra un tubo que a su extremo hay una placa rectangular a la altura del

orificio del cono, donde los iones que al ser acelerados forman el haz, éstos chocarán con esta placa rectangular y se detectará la corriente que pasa por la placa.

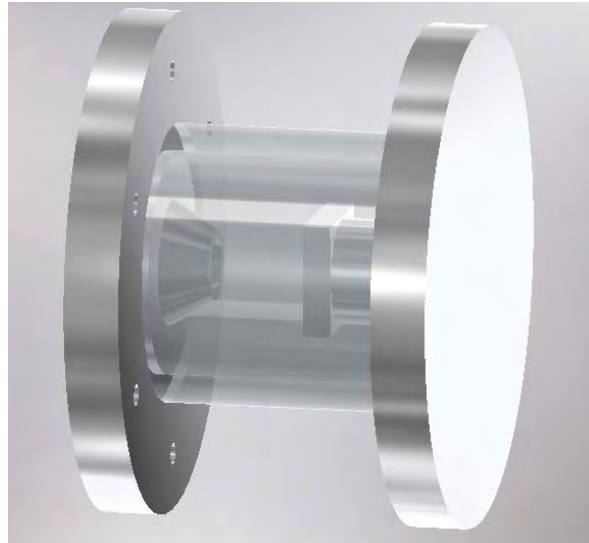


Figura 2. Cámara de extracción y detección de iones.

2.1.3. Prototipo ensamblado.

Al tener los componentes de la fuente de iones, se procede a ensamblar las piezas para obtener la vista completa del prototipo. En la Figura 3, se muestra la fuente de iones con sus piezas (cámaras) ensambladas.

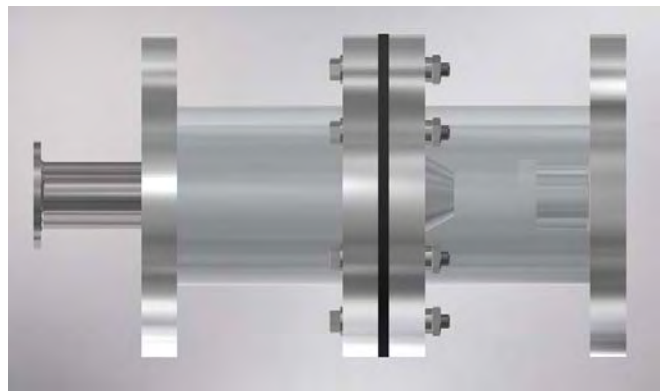


Figura 3. Fuente de iones.

Esta forma del prototipo se escogió por la facilidad de extracción de los iones, ya que la cantidad de corriente dado un voltaje aplicado está relacionado con los efectos de la carga espacial de la ecuación de Child-Langmuir:

$$P = \frac{I}{V^{3/2}} \quad (1)$$

Donde la I es la corriente total del haz de iones y V el voltaje aplicado y P es conocida como la perveancia. La perveancia es usada en haces de partículas cargadas e indica el efecto de la carga espacial sobre el movimiento del haz. Sin embargo, la ley de Child-Langmuir para aperturas redondas, la corriente de extracción de iones que puede ser extraída viene dada analíticamente de acuerdo a la siguiente expresión:

$$I = \frac{4\pi\epsilon_0}{9} S^2 \sqrt{\frac{2q}{m}} V^{3/2} \quad (2)$$

Donde ϵ_0 es la constante dieléctrica de valor $8.8541878176 \times 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N}\cdot\text{m}^2)$, q la carga de la partícula y m su masa. Además, S es la razón a/d , donde a es el radio de la abertura de salida y d es el espacio de extracción entre producción de iones y el electrodo de aceleración. De aquí, se obtiene la relación correspondiente:

$$P = \frac{4\pi\epsilon_0}{9} \sqrt{\frac{2q}{m}} \frac{A}{d^2} \quad (3)$$

Donde A es el área de emisión. Como se observa en la Ecuación (3), la distancia entre el reactor y el electrodo de aceleración debe ser pequeña para tener una salida mayor de iones. Cabe mencionar, que esta es la razón del porqué se escogió esta forma de extracción.

2.2. Simulaciones de la Fuente de Iones

Al analizar el reactor de plasma, primeramente, se simuló el potencial eléctrico y campo eléctrico que se encontraría entre las placas. Una de las placas se aterrizó, mientras que la otra se le agregó un potencial que varía con el tiempo, en la Figura 4 se observan los resultados de la simulación. En la Figura 5, se puede apreciar las curvas de nivel del potencial eléctrico.

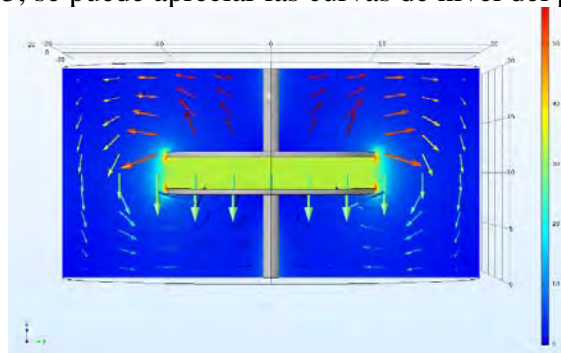


Figura 4. Potencial eléctrico (V) y flechas del campo eléctrico.

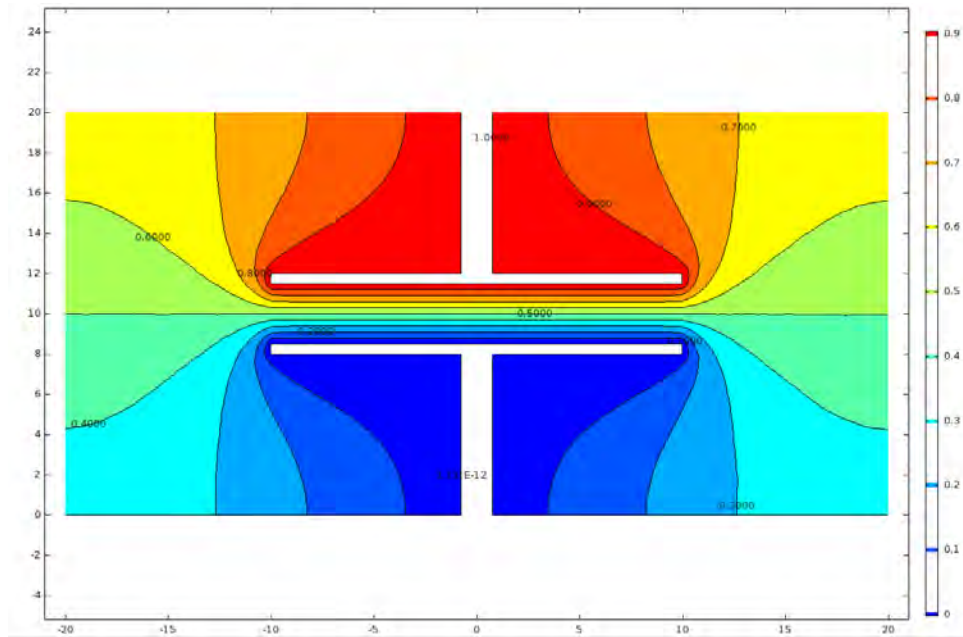


Figura 5. Curvas de nivel del potencial eléctrico.

La capacitancia de un capacitor de placas paralelas viene dada por la ecuación:

$$C = \epsilon \frac{A}{d} \quad (4)$$

Donde A es el área de la placa, d la distancia entre ellas y ϵ la permitividad eléctrica absoluta. Como se observa en la Ecuación (4), a menor distancia entre las placas, mayor capacitancia y el campo eléctrico es más intenso. Es por tal motivo, se eligió que el espacio entre placas sea de 50mm. La energía eléctrica depende del voltaje y la carga, como la carga depende de la capacitancia, entonces se puede modular la energía eléctrica total, controlando estos dos parámetros. La energía eléctrica máxima total que se ha registrado es de potencia 10^{-6} J.

Asimismo, se ha simulado la temperatura que habrá dentro del reactor que sube alrededor de 300 K con una potencia de 10 W y un vacío de 0.06 torr aproximadamente. Lo que se busca, en la siguiente cámara, es la relación que haya entre el potencial negativo y la corriente eléctrica que detectará la placa, para ello se realiza una gráfica con las características anteriores y observar la relación entre dichos parámetros, esto se presenta en la Figura 6. Es importante reconocer que la abertura de salida de los iones debe ser pequeña y puede modificarse para obtener mejores resultados, de hecho, es fundamental hacer análisis de las trayectorias de las partículas.

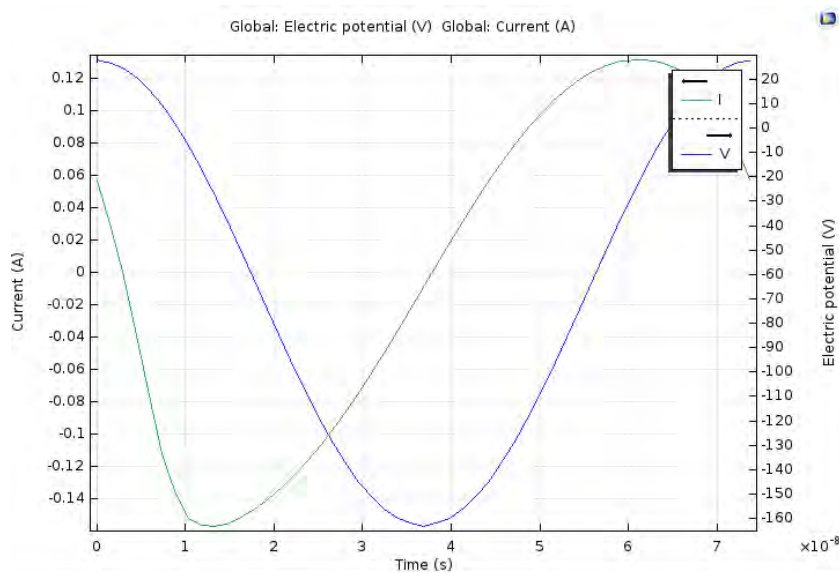


Figura 6. Gráfica del potencial respecto a la corriente.

Posteriormente, se simuló las trayectorias de los iones en la cámara de extracción. El electrodo estuvo sometido a un potencial negativo que varía de 0 a 180 V. En la Figura 7, se puede apreciar la trayectoria de las partículas en un tiempo dado. Para verificar mejor la dispersión del haz, se aumentó la distancia de la trayectoria de las partículas y en la Figura 8, se observa con más detalle esta dispersión.

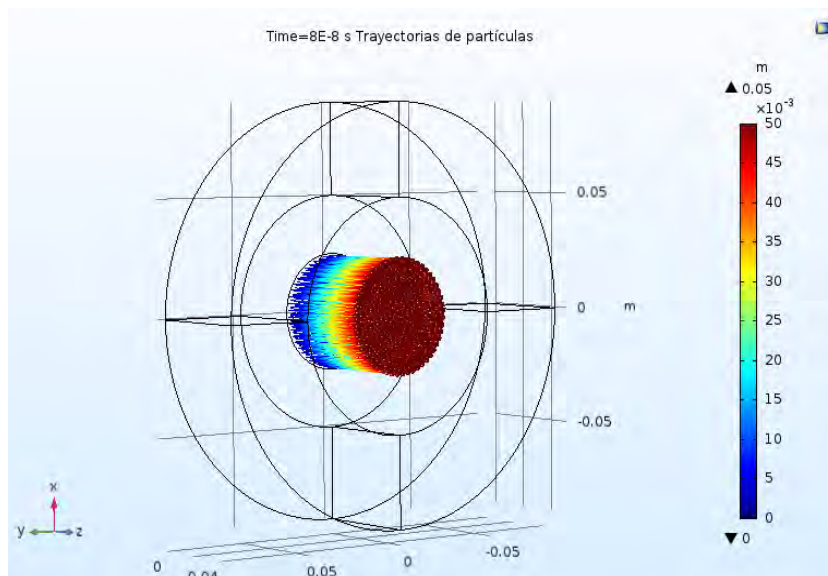


Figura 7. Trayectoria de partículas en la cámara de extracción.

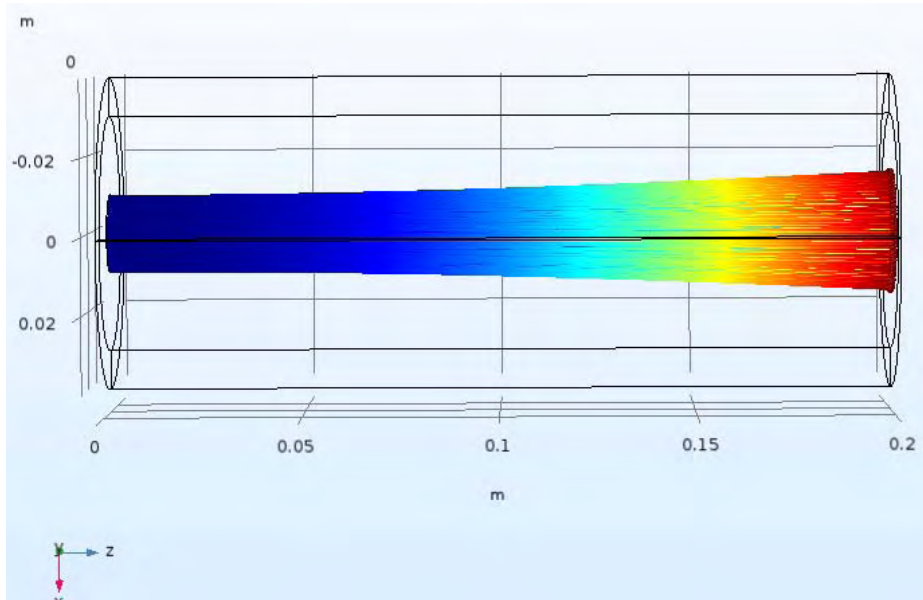


Figura 8. Dispersión del haz a medida que avanza en el tiempo y espacio.

Además, se realizó un mapa de Poincaré para analizar el haz en tres cortes transversales, cuando sale de la cámara de generación del plasma, a la mitad de la trayectoria y por último en la placa detectora. En la Figura 9, se observa puntos de color rojo, representando al haz saliendo de la primera cámara, los de color azul es a la mitad de la trayectoria y, por último, los puntos de color negro es el haz cuando llega a la placa detectora; se puede apreciar la dispersión del haz en la cámara de extracción.

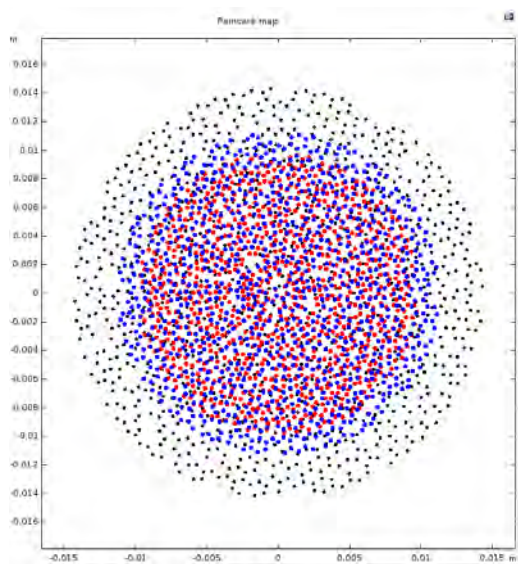


Figura 9. Mapa de Poincaré del haz de iones

3. CRITERIOS DE ACEPTACIÓN

La fuente de iones que se ha expuesto es un prototipo sencillo para conocer los fundamentos básicos de su funcionalidad y el aporte que tiene a varias áreas. Esta sencilla fuente, es un trabajo pionero para que en un futuro sea modificado y mejorado, logrando así una mayor precisión.

En la Universidad de Guanajuato, se construirá un acelerador lineal de radiofrecuencia mexicano de 5 MeV con una fuente de electrones. Sin embargo, hacer uso de una fuente de iones por la extensa aplicación que existe en la industria, medicina y ciencia, es la finalidad. Por tal motivo, este trabajo es pionero en este rubro, ya que se pretende mejorar e incluso cuando se tenga su mejoramiento, ser usado en este acelerador lineal.

Este producto de investigación no solo sirve para realizar la fuente de iones, sino que el reactor de plasma puede ser usado para otros fines, es decir, tiene un valor agregado con experimentos que requieran de la generación de un plasma para llevarse a cabo. Sin lugar a duda, es un trabajo que conlleva esfuerzo, trabajo en equipo, diversas áreas de aplicación, innovación, y desarrollo de ingeniería, temas relevantes para la independencia tecnológica y científica del país.

4. CONCLUSIONES

Como se ha expuesto, existen varios parámetros para realizar una fuente de iones. La forma en que se produce el plasma y la forma en que se extraen los iones varía en diferentes aplicaciones, pero la forma básica que se ha presentado en este trabajo permite, mediante un prototipo sencillo, generar un haz de iones que puede ser aplicado a diferentes áreas como la ingeniería, física y química, por mencionar algunas.

Diseñar, simular los procesos y la dependencia de los parámetros involucrados ayuda en la generación de un esquema experimental optimizado. Se sabe que tanto en el trabajo teórico como el experimental existen errores, pero se minimizan para lograr un prototipo confiable.

En este trabajo se expuso una fuente de iones simple, que logra el objetivo de conocer los fundamentos básicos, así como la física detrás de ella. La aplicación es muy amplia, desde grabados en superficie como modificaciones a fármacos: radiofármacos. Sin lugar a duda, resulta un tema relevante en la innovación y tecnología. Sin embargo, en México el estudio sobre esta línea es aún emergente, por lo que se pretende explorar y trabajar como pioneros en este campo. Hablando con objetividad, existe aún mucho trabajo futuro por hacer, pero se lleva un buen comienzo y con la finalidad de aportar en el ámbito científico y como beneficio de México.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a los asesores de este proyecto que se está realizando en la Universidad de Guanajuato, a los doctores María Concepción García Castañeda y Humberto Maury Cuna por su colaboración y estima. Asimismo, a la beca proporcionada por CONACyT durante mi estancia en la maestría y al Proyecto de Infraestructura 295720 de CONACyT. De igual manera, a mi familia y amigos; a los que están y a los que ya no.

REFERENCIAS

1. Roth J. R., *Industrial Plasma Engineering*, Institute of Physics Publishing, London, UK (1995).
2. <http://cds.cern.ch/record/398432/files/p619.pdf> (1985).
3. García M., Montero J., Marlon C., Sarmiento P., “Plasma: Una tecnología de gran potencial para la industria y la ciencia”, *Ingenius*, **1**, p. 66-72 (2010).
4. Rahman A., “Ion Sources for Use in Research and Low Energy Accelerators”, *International Journal of Instrumentation Science*, **1**, p. 63-77 (2012).
5. Brenes S. G., “Plasma: Energía para el futuro...”, *Investiga.TEC*, **19**, p. 6 (2014).
6. <https://cds.cern.ch/record/603056/files/CERN-2006-002.pdf> (2006).
7. Gordillo F., “Plasmas Fríos”, *Investigación y Ciencia*, **381**, p. 70-79 (2008)
8. Miranda J. M., Sebastián J., Sierra M., Margineda J., *Ingeniería de Microondas: Técnicas Experimentales*, Prentice Hall, Madrid, España (2002).
9. Feynman R., *Lectures on Physics 2: Mainly Electromagnetic and Matter*, Addison – Wesley Publishing Company, Inc., California, USA (1964).
10. De la Paz M., *Experiencia Mexicana en Aceleradores de Partículas: Investigación y Beneficios en la Sociedad Mexicana*, Siglo XXI Editores, Ciudad de México, México (2004).

Rayos X provenientes de equipos odontológicos inducen cambios en la viabilidad celular, expresión de Hsp70 y caspasa-8 en leucocitos humanos

Jennifer Ortiz Letechipia, David Alejandro García López, Consuelo Letechipia de León, Héctor Rene Vega Carrillo, Sergio Hugo Sánchez Rodríguez.

Universidad Autónoma de Zacatecas

Avenida preparatoria S/N. Col. Agronómica. 98066. Zacatecas, Zac. México.

jenniferoletechipia@live.com.mx; davidrockerdagal@gmail.com; crenchelo@gmail.com; ferminetron@yahoo.com; smdck@hotmail.com

Resumen

Los leucocitos son células radiosensibles que responden al daño celular por radiación ionizante. Los rayos X son utilizados comúnmente en consultorios odontológicos con fines de diagnóstico, donde el personal ocupacionalmente expuesto recibe una dosis de exposición de los mismos ocasionando un daño estocástico que comúnmente no es considerado, pero es acumulable. Por lo anterior, se ha reportado una relación entre la leucopenia y la exposición a la radiación ionizante, de tal manera que los leucocitos han sido utilizados como modelo biológico para exposición a radiaciones ionizantes. El daño celular se ha visto que se manifiesta a través de la expresión de bioindicadores como las proteínas Hsp, o con la muerte celular, proceso que debe ser estudiado para ver el grado de tolerancia homeostática a los diferentes grados de radiación. El objetivo del presente trabajo fue evaluar la viabilidad, expresión de Hsp70 y caspasa-8 en leucocitos humanos expuestos a rayos X provenientes de equipos odontológicos. Material y métodos: Leucocitos de pacientes humanos sanos presentes en sangre total fueron expuestos a dosis diferentes de rayos X (2.28 ± 0.05 , 4.56 ± 0.09 mGy, 9.12 ± 0.18 y 13.69 ± 0.27 mGy). Posteriormente, se evaluó la viabilidad celular mediante un frotis sanguíneo de cada una de las muestras y se les aplicó la tinción Wright. Seguido a esto se procedió a identificar las proteínas Hsp70 y caspasa-8 por la técnica de Western-blot. Resultados: Se observó una disminución en la viabilidad celular de 97.5% a 39.5% para las diferentes dosis de exposición. El comportamiento de la sobreexpresión de la proteína Hsp70 y caspasa-8 fue similar, de tal manera que para la tercera dosis la expresión incrementó y para la dosis más alta la sobreexpresión disminuye para cada una. Conclusiones: El porcentaje de muerte celular fue dependiente de la dosis de exposición. Los datos obtenidos determinan que la proteína Hsp70 es un bioindicador de estrés celular, mientras que la caspasa-8 es un bioindicador del proceso de muerte celular por apoptosis. El daño celular de los leucocitos expuestos a rayos X provenientes de equipos odontológicos, provee información relevante para implementar mecanismos de protección en el área de seguridad radiológica.

1. INTRODUCCIÓN

Los efectos a largo plazo asociados con la exposición a la radiación ionizante de dosis bajas son los principales factores de riesgo en el área de diagnóstico. Los profesionales de la radiación de estos centros siempre están expuestos a un daño celular potencial, ocasionado por dicha exposición. Varios estudios han sugerido que el riesgo de daño en los trabajadores expuestos a dosis de radiación más bajas que el límite fue mayor que el de sus compañeros no expuestos. Principalmente las células hematopoyéticas se consideran las más sensibles a la radiación, y entre ellas, los linfocitos muestran la mayor respuesta a la radiación de dosis baja (especialmente a los rayos X) [1, 2]. Es común que se presente linfopenia como uno de los primeros síntomas a la exposición de radiación, además se presentan alteraciones en su metabolismo debido a cambios en la conformación de la membrana, su permeabilidad y actividad enzimática [3], por ende, la función de la célula cambia como resultado de los daños post-radiación. La facilidad de obtención, la gran cantidad de células que podemos obtener y su alta radiosensibilidad, hace de los leucocitos un modelo experimental idóneo para estudiar.

Por otra parte, las proteínas de estrés calórico (Hsp), pertenecen a una familia altamente conservadas a través de la evolución. En condiciones normales ayudan al plegamiento de proteínas, en los procesos de transporte a través de membranas, así como a su integración a diversos organelos. Una proteína importante es la Hsp70 la cual actúa como chaperona y juega un rol en la homeostasis de proteínas en la célula [4]. Durante diversos procesos de estrés celular como choque térmico, exposición a metales pesados, a especies reactivas de oxígeno, a radiación (ionizante y no ionizante) [5], entre otros, estas proteínas se sobre expresan para recuperar la homeostasis celular al renaturalizar proteínas o al inducir su destrucción cuando son dañadas [6]. Además, se ha encontrado una relación directa a la dosis de radiación ionizante y la expresión de la proteína Hsp70 en células tumorales [7] y en células sanguíneas inmunológicas [8].

Sin embargo, la apoptosis es caracterizada por una serie de cambios morfológicos que incluyen la contracción celular, condensación de cromatina, fragmentación de ADN, presencia de vacuolas en la membrana, fragmentación del ADN y formación de cuerpos apoptóticos [9-11]. Para la regulación y ejecución de este proceso están presentes las caspasas, proteínas implicadas también en procesos de maduración proteica, por lo que errores en los procesos mediados por estas, son algunos de los principales responsables en el desarrollo de tumores y enfermedades autoinmunes [12]. Una de las funciones de caspasa-8 es iniciar la cascada de la apoptosis, en donde se recluta y procesa su procaspasa-8, generando dos fragmentos catalíticos que la conforman, a su vez esta conduce a la activación de otras proteínas para formar la cascada que culmina el proceso apoptótico [13].

Se considera que las fuentes de rayos X de diagnóstico funcionan con una radiación de energía más baja (alrededor de 100 keV) con una transferencia de energía lineal más alta [14] que otros

dispositivos terapéuticos, sin embargo estas fuentes tienen un riesgo aceptable de daño debido a las dosis bajas (en el orden de 0.1 mGy a 400 mGy) [15]. Por esta razón, es de gran interés estudiar los efectos de los rayos X sobre los leucocitos ya que estos son los principalmente afectados por la exposición a la radiación ionizante, se ha observado en diversos estudios clínicos una disminución de estos en el personal ocupacionalmente expuesto [1, 16]. Además, se ha investigado la relación entre la expresión de Hsp70 y caspasa-8 con la apoptosis en células expuestas a rayos X, en donde Hsp70 participa la recuperación de estas [7, 8], y la caspasa-8 como proteasa mediadora de la apoptosis, inducida por la radiación [17].

El objetivo de este trabajo fue estudiar las proteínas Hsp70 y caspasa-8 como bioindicadores de daño celular en el proceso apoptótico en leucocitos humanos expuestos a diferentes dosis de rayos X odontológicos.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1 Obtención de las Muestras

Se seleccionaron 4 donadores de edades entre 19-24 años, sin historial de radioterapia, ni consumo de alcohol, tabaco, medicamentos, sin presentar síntomas y signos de enfermedad, evaluado esto previamente con un estudio general de salud, de los cuales se obtuvieron muestras de sangre venosa periférica (venopunción antebraquial), aproximadamente 5 ml con 50 μ L de heparina.

2.2. Exposición de Leucocitos

La exposición de las muestras se realizaron con una fuente de rayos X marca Corix® de la empresa CORAMEX, S.A. cuyas condiciones de operación fueron tomadas con base al distribuidor (70 plus-USV) las dosis de exposición fueron calculadas y se establecieron para 5, 10, 20 y 30 disparos respectivamente para cada muestra y el duplicado, excepto los controles.

2.2.1. Determinación de la Dosis Absorbida

La dosis absorbida fue determinada usando TLD's (detectores termoluminiscentes), que se depositaron en viales de cono. Los TLD-100 fueron expuestos en grupos de cuatro, para cada diferente cantidad de disparos del equipo de rayos X. Un lote de TLDs 100 se usó para medir la radiación de fondo. El procedimiento se repitió con un monitor de estado sólido RaySafe modelo ThinX RAD que se activa cuando el equipo de rayos X se dispara. El mismo número de disparos usados para exponer los TLDs se usaron con el equipo RaySafe.

2.2.2. Cálculo de la Dosis Absorbida

Las respuestas de los TLDs expuestos se promediaron y se corrigieron con la respuesta promedio de los TLDs usados para medir el fondo. Estos valores se correlacionaron con las lecturas del monitor

RaySafe y se obtuvo una correlación ($r^2 = 0.9987$) entre la respuesta de los TLDs en nanoCoulombs. La dosis en función de los disparos se muestra en la *Tabla I*.

Tabla I. Dosis absorbida en función de los disparos

Numero de disparos	Dosis absorbida (mGy)
0	0
5	2.28 ± 0.05
10	4.56 ± 0.09
20	9.12 ± 0.18
30	13.69 ± 0.27

2.3. Evaluación de la viabilidad celular

Para la evaluación de la viabilidad celular, se realizaron frotis sanguíneos en portaobjetos y se procedió a teñirlas con colorante de Wright (WR0505 de la casa comercial Golden Bell®). Una vez realizado lo anterior, se observaron los frotis sanguíneos en un microscopio óptico con objetivo de inmersión y se realizó un conteo de 100 leucocitos para el control y las distintas dosis de exposición [11].

2.4. Determinación de Proteínas

2.4.1. Lisis celular

Cada muestra después de 40 min post-tratamiento fue lavada con solución PBS 1X y homogenizada en tubos Eppendorf con 500 μ L de buffer de lisis que contiene: Triton X-100 al 1%, NaCl 140 mM, EDTA 1 mM, Tris-HCl 10 mM pH 7.6 e inhibidor de proteasas 1 mM, PMSF (Sigma Chemical Co, St Louis MO, USA, P-7626), realizando inversiones sucesivas. El lisado celular se centrifugó por 10 minutos a 14,000 r.p.m. y el sobrenadante se recuperó para determinar la concentración de proteínas totales.

2.4.2. Cuantificación de proteínas y PAGE-SDS al 7.5%

La cuantificación de proteína se realizó mediante la técnica descrita por Bradford en 1976. Para cada muestra 20 μ g de proteína fueron caracterizados en geles de poliacrilamida (PAGE-SDS al 7.5%) de acuerdo a la técnica descrita por Laemmli en 1970 [18].

2.4.3. Western Blot e Inmunodetección

Las proteínas en los geles de poliacrilamida-SDS se transfirieron a papel de nitrocelulosa (Amersham Biosciences Laboratories, Buckinghamshire, England, RPN303C), tal como describió Towbin en 1979 [19]. El papel con las proteínas fue bloqueado con solución amortiguadora (PBS-Caseína al 3%) durante 12 horas, los papeles fueron incubados con anticuerpos monoclonales para identificar las proteínas Hsp70 (SC-24 Santa Cruz Biotechnology®) y caspasa-8 en dilución 1:1000 en solución bloqueadora, por 1 hora. Posteriormente se realizaron 5 lavados intercalados con PBS y PBS-Tween. Se procedió a incubar durante 1 hora con el segundo anticuerpo anti ratón y anti conejo para caspasa-8 IgG-HRP conjugado a peroxidasa (SC-2005 Lot F0412 Santa Cruz Biotechnology®). Al finalizar se realizaron 10 lavados intercalados con PBS y PBS-Tween. La unión antígeno-anticuerpo fue observada mediante colorimetría empleando una solución de Diaminobencidina al 0.1% activada con peróxido de hidrógeno, de tal manera que la sobre expresión de la proteína pudiera ser identificada.

3. RESULTADOS

3.1. Evaluación de la viabilidad celular

Se evaluó la viabilidad de los leucocitos expuestos a rayos X para cada una de las muestras, se observó una disminución en el porcentaje promedio de células vivas de 97.5% a 39.5% y un aumento en el porcentaje de células muertas de 2.5% a 60.5% respecto a las diferentes dosis de exposición, donde la última dosis (13.69 mGy) presentó mayor porcentaje de células muertas como lo representa la figura 1.

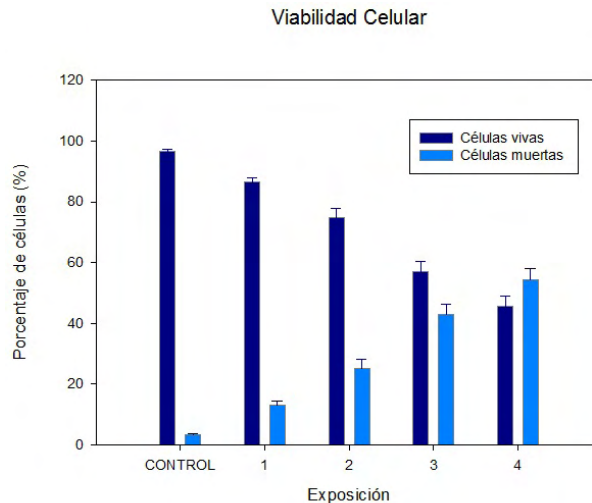


Figura 1. Viabilidad de Leucocitos humanos expuestos a rayos-X a diferentes dosis.

3.2. Expresión de Proteínas

3.2.1. Expresión de Hsp70 en leucocitos humanos expuestos por rayos X

Se obtuvo una expresión basal de Hsp70 para el control y para las primeras dosis (2.28 ± 0.05 y 4.56 ± 0.09 mGy), en la tercera dosis la expresión se incrementó (9.12 ± 0.18 mGy), por otro lado para la dosis más alta (13.69 ± 0.27 mGy) la expresión disminuyó ver Figura 2.

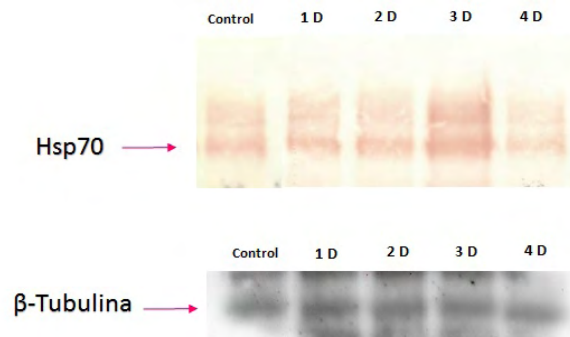


Figura 2. Expresión de Hsp70 en Leucocitos humanos expuestos a rayos-X.

3.2.2. Expresión de Caspasa-8 en leucocitos humanos expuestos por rayos X

Se obtuvo una expresión basal de caspasa-8 para el control, para las primeras dosis (2.28 ± 0.05 y 4.56 ± 0.09 mGy) la expresión se modificó, en la tercera dosis la expresión se incrementó (9.12 ± 0.18 mGy), por otro lado para la dosis más alta (13.69 ± 0.27 mGy) la expresión disminuyó ver Figura 3.



Figura 3. Expresión de Caspasa-8 en Leucocitos humanos expuestos a rayos-X.

4. DISCUSIÓN

La viabilidad celular de los leucocitos expuestos a rayos X para cada una de las muestras, disminuyó respecto a la cantidad de dosis recibida, ocasionando un aumento en el porcentaje de células muertas, presentando así para la última dosis un porcentaje mayor de células muertas, posiblemente esto es resultado del daño celular producido, lo anterior es similar a los resultados obtenidos por [16] donde disminuye el número de células sanguíneas en POES expuestos a rayos X.

El comportamiento en la sobre expresión de Hsp70 es un bioindicador de estrés celular por radiación ionizante como lo reporta [8], de tal manera que los datos generados en el trabajo demuestran este hecho por exposición rayos X. Por lo anterior se observó un incremento de esta proteína exponencialmente para la primera, segunda y tercera dosis y una disminución para la cuarta dosis, este comportamiento posiblemente se puede deber a que el daño celular para esa dosis fue letal y por consiguiente su mecanismo de respuesta no fue el óptimo. Datos reportados por [20] coinciden con esta explicación pero con otro modelo biológico como células C3H 10T1/2 cuando fueron expuestas a rayos gamma de 7.5 Gy, además con el trabajo reportado [21] en células de carcinoma expuestas a 10 Gy en gammas.

Al observar que con el incremento de dosis de irradiación la viabilidad celular disminuyó, se procedió a medir la expresión de caspasa-8 para determinar si esta muerte es por apoptosis, esta proteína modificó su expresión para las primeras dosis (2.28 ± 0.05 y 4.56 ± 0.09 mGy), en la tercera dosis se incrementó (9.12 ± 0.18 mGy) y para la dosis más alta (13.69 ± 0.27 mGy) la expresión decayó, estos resultados coinciden con los reportados por [17], donde la caspasa-8 incrementa su expresión por inducción de la radiación en diversos tipos celulares y también por [22] en células de glioma expuestas a 2.3 Gy de rayos gamma.

5. CONCLUSIONES

El porcentaje de muerte celular es dependiente del incremento a la dosis de exposición por rayos X, debido al daño celular producido en las diferentes células sanguíneas.

Los datos obtenidos determinan que la proteína Hsp70 es un bioindicador de estrés celular, mientras que la caspasa-8 es un bioindicador del proceso de muerte celular por apoptosis. El daño celular de los leucocitos expuestos a rayos X provenientes de equipos odontológicos, provee información relevante para implementar mecanismos de protección en el área de seguridad radiológica.

Se observa muerte celular conforme aumenta la dosis de exposición, debido a esto la expresión de caspasa-8, nos indica que los leucocitos posiblemente mueren por un proceso apoptótico, sin embargo esta no es suficiente para determinar si el proceso de apoptosis se activó, por

consiguiente, esto se corroborará con la evaluación morfológica de las células sometidas a estos campos de radiación.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. en C. Sergio Hugo Sánchez Rodríguez y su equipo de trabajo del laboratorio de biología celular y neurobiología en la Unidad Académica de Ciencias Biológicas, Universidad Autónoma de Zacatecas.

Al Dr. en C. Eduardo Medrano Cortes, del departamento de Radiología en la Unidad Académica de Odontología, Universidad Autónoma de Zacatecas.

REFERENCIAS

1. DavudianTalab, A., Z. Farzanegan, and F. Mahmoudi, Effects of Occupational Exposure on Blood Cells of Radiographers Working in Diagnostic Radiology Department of Khuzestan Province. *Iranian Journal of Medical Physics*, 2018. **15**(2): p. 66-70.
2. Brengues, M., et al., T lymphocytes to predict radiation-induced late effects in normal tissues. *Expert Review of Molecular Diagnostics*, 2017. **17**(2): p. 119-127.
3. Feinendegen, L.E. and J.M. Cuttler, Biological Effects From Low Doses and Dose Rates of Ionizing Radiation: Science in the Service of Protecting Humans, a Synopsis. *Health Physics*, 2018. **114**(6): p. 623-626.
4. Mayer, M.P., Hsp70 chaperone dynamics and molecular mechanism. *Trends in Biochemical Sciences*, 2013. **38**(10): p. 507-514.
5. Eriksson, D. and T. Stigbrand, Radiation-induced cell death mechanisms. 2010. **31**: p. 363-72.
6. Sarkar, S. and S. Roy, A MINI REVIEW ON HEAT SHOCK PROTEINS (HSPS): SPECIAL EMPHASIS ON HEAT SHOCK PROTEIN70 (HSP70). Vol. 9. 2017. 129-138.
7. Murakami, N., et al., Role of membrane Hsp70 in radiation sensitivity of tumor cells. *Radiation Oncology*, 2015. **10**(1): p. 1-13.
8. Multhoff, G., et al., The role of heat shock protein 70 (Hsp70) in radiation-induced immunomodulation. *Cancer Letters*, 2015. **368**(2): p. 179-184.
9. Wolnicka-Głubisz, A., et al., Apoptosis in leukocytes induced by UVA in the presence of 8-methoxypsoralen, chlorpromazine or 4,6,4'-trimethylangelicin. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, 2002. **68**(2): p. 65-72.
10. Kessel, D., Apoptosis, Paraptosis and Autophagy: Death and Survival Pathways Associated with Photodynamic Therapy. *Photochemistry and Photobiology*, 2019. **95**(1): p. 119-125.
11. Shidham, V.B. and V.K. Swami, Evaluation of Apoptotic Leukocytes in Peripheral Blood Smears. *Archives of Pathology & Laboratory Medicine*, 2000. **124**(9): p. 1291-1294.
12. McArthur, K. and B.T. Kile, Apoptotic Caspases: Multiple or Mistaken Identities? *Trends in Cell Biology*, 2018. **28**(6): p. 475-493.
13. Tummers, B. and D.R. Green, Caspase-8: regulating life and death. *Immunological Reviews*, 2017. **277**(1): p. 76-89.

14. Hall, J., et al., Ionizing radiation biomarkers in epidemiological studies – An update. *Mutation, Research/Reviews in Mutation Research*, 2017. **771**: p. 59-84.
15. Truong, K., et al., The effect of well-characterized, very low-dose x-ray radiation on fibroblasts. *PLoS ONE*, 2018. **13**(1): p. 1-16.
16. Faraj, K. and S. Mohammed, Effects of chronic exposure of X-ray on hematological parameters in human blood. *Comparative Clinical Pathology*, 2018. **27**(1): p. 31-36.
17. Rahmanian, N., S.J. Hosseinimehr, and A. Khalaj, The paradox role of caspase cascade in ionizing radiation therapy. *Journal of Biomedical Science*, 2016. **23**: p. 1-13.
18. He, F., Laemmli-SDS-PAGE. *Bio-protocol*, 2011. **1**(11): p. e80.
19. Towbin, H., T. Staehelin, and J. Gordon, Electrophoretic transfer of proteins from polyacrylamide gels to nitrocellulose sheets: procedure and some applications. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1979. **76**(9): p. 4350-4354.
20. Calini, V., C. Urani, and M. Camatini, Overexpression of HSP70 is induced by ionizing radiation in C3H 10T1/2 cells and protects from DNA damage. *Toxicology in Vitro*, 2003. **17**(5): p. 561-566.
21. Gehrman, M., et al., Dual function of membrane-bound heat shock protein 70 (Hsp70), Bag-4, and Hsp40: protection against radiation-induced effects and target structure for natural killer cells. *Cell Death And Differentiation*, 2004. **12**: p. 38.
22. Afshar, G., et al., Radiation-Induced Caspase-8 Mediates p53-Independent Apoptosis in Glioma Cells. *Cancer Research*, 2006. **66**(8): p. 4223-4232.

Influencia de la temperatura en la producción de TiO_2 como adsorbente en el generador $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$

Frida G. Guadarrama Avilés y Verónica E. Badillo Almaraz*

Facultad de Ciencias; Universidad Autónoma del Estado de México
Campus El Cerrillo, Piedras Blancas, Carr. Toluca-Ixtlahuaca km. 15.5, Edo. de México
fridagret@gmail.com

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carr. México-Toluca S/N, La Marquesa Ocoyoacac,
52750 Edo de México
veronica.badillo@inin.gob.mx

Resumen

En este trabajo de investigación se propone la preparación y evaluación de los nanomateriales TiO_2 , para ser utilizados como matrices adsorbentes en la separación de radionúclidos y proporcionar una tecnología de optimización del generador más utilizado $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ en la ruta de producción del ^{99}Mo por la vía de activación neutrónica en el reactor Triga Mark III del ININ. La preparación de nanomateriales de TiO_2 como matrices del generador de radionúclidos $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ se llevó a cabo por el método sol-gel usando alcóxidos como precursores, poniendo especial énfasis en la temperatura de preparación del sólido y cómo influye en el área superficial resultante y muy particularmente en las características de adsorción del radionúclido padre $^{99}\text{Mo}(\text{VI})$. La caracterización de los sólidos se realizó utilizando Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) y la capacidad de retención de $\text{Mo}(\text{VI})$ en los óxidos se determinó mediante el método de equilibrio de batch utilizando la técnica de trazadores radioactivos y mediante la saturación del sólido con iones MoO_4^{2-} . Los resultados indicaron que la temperatura de secado del TiO_2 es un factor importante en la afinidad de retención del $\text{Mo}(\text{VI})$ en el desarrollo del sistema generador $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ en la ruta de producción del ^{99}Mo por la vía de activación neutrónica, y es sin duda, un paso importante para producir en grado clínico el $^{99\text{m}}\text{Tc}$.

1. INTRODUCCIÓN

En México, el 80 % de los radiofármacos utilizados en diagnósticos médicos contienen $^{99\text{m}}\text{Tc}$; y éstos son empleados en el diagnóstico de padecimientos óseos, hepatobiliares, cerebrales, cardíacos, renales, pulmonares, procesos infecciosos ocultos, etc. Este se produce comercialmente por decaimiento radioactivo del ^{99}Mo , producto de fisión del ^{235}U . Los generadores están constituidos por un soporte de alúmina, de limitada capacidad de fijación en masa (2-20 mg Mo/g), en donde el ^{99}Mo de elevada actividad específica ($\sim 103 \text{ TBq/g}$), es adsorbido y el $^{99\text{m}}\text{Tc}$ es eluido mediante una

solución salina. Sin embargo, la capacidad actual de producción de ^{99}Mo se redujo a un número limitado de instalaciones nucleares en todo el mundo [1] lo que ha causado una interrupción en la producción de este radioisótopo fundamental para la fabricación de generadores de $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$, provocando una escasez mundial e impulsando las investigaciones para producir ^{99}Mo a través de otras vías. Con el fin de reducir la dependencia de importación del producto de fisión ^{99}Mo , se han propuesto una serie de alternativas para la producción de este radionúclido, tales como la activación neutrónica del ^{98}Mo en un reactor nuclear, la cual es una de las tecnologías disponibles a corto plazo [2] y el desarrollo en paralelo de nuevos materiales con capacidades de retención del radionúclido padre ^{99}Mo superiores a las que ofrecen sólidos comercialmente disponibles. En México, el único reactor nuclear disponible para este tipo de aplicaciones se encuentra en el ININ (Reactor TRIGA Mark III). No obstante, el principal impedimento para su utilización en los generadores existentes a base de alúmina es la actividad específica del ^{99}Mo que se obtiene, ya que es relativamente baja (0.35-3.5 Ci/g) lo que a su vez produciría una elución de $^{99\text{m}}\text{Tc}$ con baja concentración radioactiva, por lo que se requeriría una gran cantidad de alúmina. Aunque la preparación de generadores $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ que usan alúmina como adsorbente sigue siendo el principal procedimiento comercial, en los últimos años se han desarrollado y estudiado varios adsorbentes alternativos con mayor capacidad para Mo, como compuestos de óxidos metálicos, hidroxiapatita y compuesto de zirconio polimérico (PZC) [3, 4] para ser utilizados como matrices adsorbentes en la preparación de generadores $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ en la ruta de producción del ^{99}Mo por la vía de activación neutrónica debido a sus propiedades fisicoquímicas en comparación con los adsorbentes clásicos [5]. El objetivo general de este trabajo es demostrar la utilidad potencial de los óxidos metálicos como un adsorbente alternativo, en la preparación del generador $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ para obtener el grado clínico $^{99\text{m}}\text{Tc}$.

2. SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOMATERIALES

Se prepararon xerogeles de TiO_2 , por el método sol-gel usando alcóxidos como precursores a diferentes temperaturas de secado, 105°C, 115°C y 220°C [6]. La superficie específica de los óxidos se midió por adsorción de N_2 (mezcla de gases 30% N_2/He) por el método BET (N_2). Las muestras primero se desgasifican a 378 K durante 2 h para eliminar impurezas. La morfología de los sólidos resultantes se estudió por Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) en un microscopio electrónico de barrido JEOL-JSM 6610LV.

2.1. Capacidad de Retención

La capacidad de retención de Mo en los óxidos de TiO_2 , se estudió en una solución de NaCl al 0.9% y se determinó mediante el método de equilibrio de batch en función de la concentración creciente de Mo(VI) y en función del pH de la solución. Una masa de 0.1g de TiO_2 , se coloca en tubos de policarbonato de 50 mL y se dispersa por agitación en un volumen de 25 mL de solución salina de NaCl 0.9%. Las suspensiones se someten a agitación continua a 8 rpm durante 24 h. Una vez que la suspensión se encuentra al equilibrio, se utilizan concentraciones crecientes de Mo(VI) en la solución manteniendo el pH de la solución constante. La afinidad de los sólidos por Mo(VI) se obtiene usando la técnica de radiotrazadores; las suspensiones se marcan con 40 μCi de una solución conteniendo el radiotrazador de ^{99}Mo . La actividad gamma de la fase líquida para el Mo se mide por

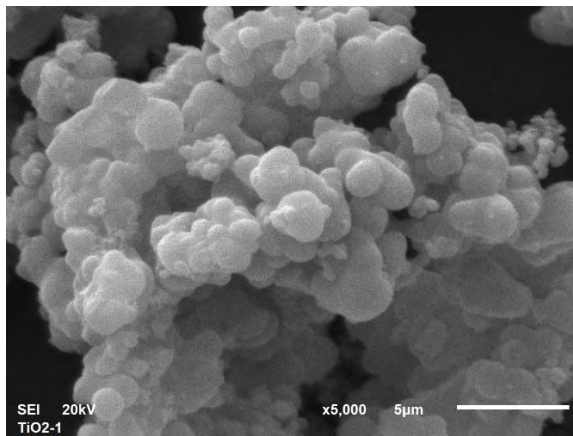
espectrometría gamma en un detector de Ge(Hp) acoplado a un analizador multicanal, midiendo las cuentas por minuto a un pico de 181.1 keV correspondiente a ^{99}Mo en alícuotas de 1 mL.

3. RESULTADOS

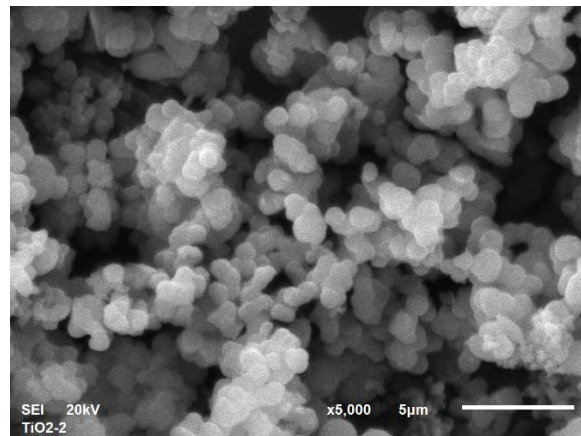
La superficie específica de los óxidos se obtuvo utilizando el modelo BET (Brunauer, Emmet y Teller) el cual describe la adsorción física de un gas, generalmente Nitrógeno en la superficie de un sólido llenando toda la superficie disponible formando capas múltiples [7,8]. La determinación del área superficial de los óxidos se llevó a cabo en un equipo multitareas RIG-100 utilizando el método de un solo punto. Esta técnica consiste en colocar una pequeña cantidad de muestra en un porta muestras de cuarzo donde el sólido es calentado mediante una cinta calefactora a 105°C para desgasificarlo con un flujo de N_2/He al 30% (30 cc/min) durante 2 horas. Los resultados se muestran en la Tabla 1.

Temperatura de secado (°C)	Superficie específica (m^2/g)
TiO ₂ 105	409
TiO ₂ 115	480
TiO ₂ 220	143

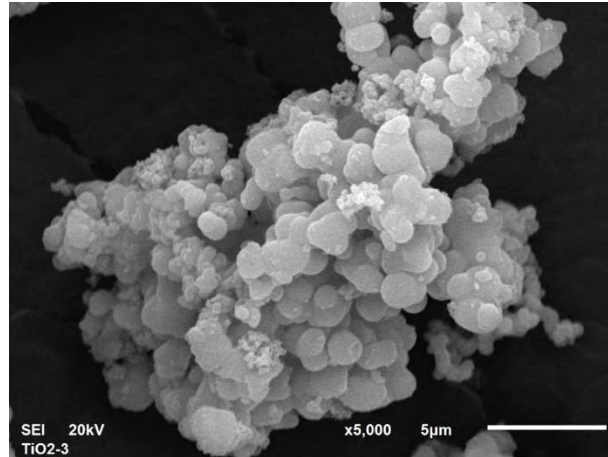
En la Figura 1 se muestran las micrografías de las distintas preparaciones de xerogeles; se observan partículas aglomeradas bastante uniformes en tamaño y forma. El tamaño promedio de las partículas para el TiO₂ a 105°C fue de 0.76 μm Figura 1a, para el TiO₂ a 115°C fue de 0.58 μm Figura 1b y para el TiO₂ a 220°C fue de 0.33 μm Figura 1c.



a)



b)



c)

Figura 1. Micrografías MEB a) TiO_2 a 105°C , b) TiO_2 a 115°C y c) TiO_2 a 220°C

En la Figura 2 se muestran los resultados de la afinidad del Mo en los óxidos metálicos preparados en función de la concentración de Mo(VI) en la solución. Para ambas preparaciones los coeficientes de distribución (K_d) del Mo(VI) disminuyen a medida que aumenta la concentración de este elemento en la solución y se observa el TiO_2 a 115°C muestra una mejor afinidad por el Mo.

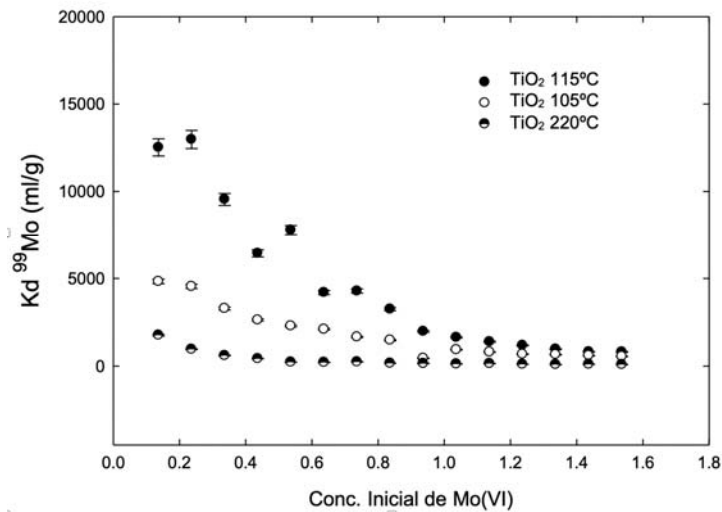


Figura 2. Coeficiente de distribución K_d de ^{99}Mo en función de la concentración

La Figura 3 muestra el porcentaje de retención de Mo(VI) en función de la concentración de Mo(VI) en la solución. Se observa que la cantidad de Mo(VI) retenido por el óxido TiO_2 a 115°C es mayor al TiO_2 a 105°C y 220°C .

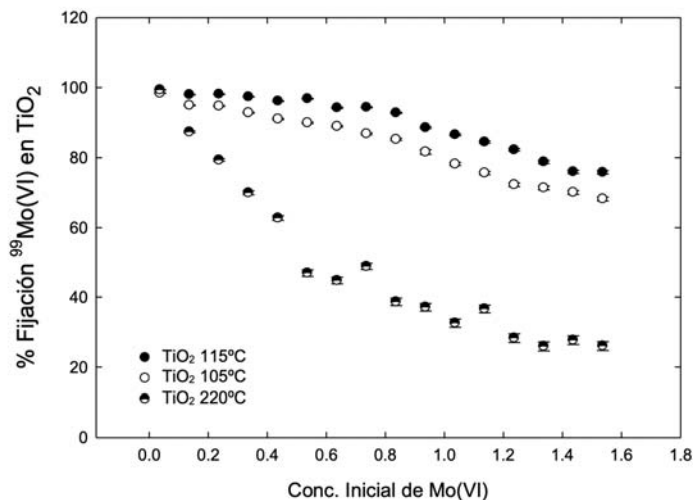


Figura 3. Porcentajes de retención del ^{99}Mo en función de la concentración de Mo(VI)

4. CONCLUSIONES

El objetivo general del presente trabajo es demostrar la utilidad potencial de los óxidos TiO_2 como un adsorbente alternativo, en la preparación del generador $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ para obtener en grado clínico $^{99\text{m}}\text{Tc}$ y observar cómo afecta la temperatura en la preparación de éstos materiales. Se analizó la influencia que ejerce la concentración de Mo(VI) de la solución sobre el porcentaje de retención de Mo(VI) en los óxidos metálicos simples de TiO_2 . Esta investigación demuestra que la temperatura influye positivamente en los óxidos de TiO_2 , pues al secarlos a mayor temperatura, son adsorbentes más efectivos para la fijación de molibdeno debido a características de superficie, por ejemplo, la presencia de grupos hidroxilo, su capacidad y porcentajes de retención y que podría ser una opción atractiva para la preparación de generadores $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ en la ruta de producción del ^{99}Mo por la vía de activación neutrónica en el reactor Triga Mark III del ININ. Estos hallazgos además proporcionan información para optimizar aún más el proceso de adsorción del Mo(VI) en óxidos metálicos simples de TiO_2 por lo que se deberá realizar mejoras en la síntesis de dichos nanomateriales para lograr aumentar la capacidad de fijación de $^{99}\text{Mo(VI)}$ y poder ser útiles en la preparación de generadores basados en ^{99}Mo de baja actividad específica via reacción nuclear $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) ^{99}\text{Mo}$.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al equipo técnico del Reactor Triga Mark III del ININ (México) por su asistencia en la producción, al Laboratorio de Análisis por Activación por la medición radioquímica del radionúclido ^{99}Mo y al Dr Raúl Pérez por su asistencia en la preparación de los óxidos.

REFERENCIAS

1. James R. Ballinger (2010). ^{99}Mo shortage in nuclear medicine: crisis or challenge? *J Label Compd Radiopharm* 53:167–168.
2. Maroor Raghavan Ambikalmajan Pillai, Ashutosh Dash, F.F (Russ) Knapp Jr. (2013). Sustained availability of $^{99\text{m}}\text{Tc}$: possible paths forward. *J Nucl Med* 54:313–323
3. J.J. Pinajian (1966). A technetium-99m generator using hydrous zirconium oxide, *Int. J. App. Rad. Isot.*, 17, p. 664-670.
4. S. Meloni, A. Brandone (1964). A new technetium-99m generator using manganese dioxide”, *Inter. J. App. Rad. Iso.* 19.
5. Rubel Chakravarty, Ashutosh Dash (2014). Nanomaterial-based adsorbents: the prospect of developing new generation radionuclide generators to meet future research and clinical demands. *J Radioanal Nucl Chem.*, 299:741-757.
6. R. Pérez-Hernández, A. Gómez-Cortés, J. Arenas-Alatorre, S. Rojas, R. Mariscal, J.L.G.
7. S. Brunauer, P.H. Emmet and E. Teller. (1938). *J. AM. Chem. Soc.* 60:309
8. Manual de usuario de Equipo multitareas RIG-100 In-Situ Research Company.

Evaluación del efecto dosimétrico debido a la reducción de tejido en pacientes con cáncer cervicouterino

María Guadalupe Valdez Arteaga, Fernando Mireles García, Carlos Ríos Martínez, J. Ignacio Dávila Rangel, José Luis Pinedo Vega, Sonia Azucena Saucedo Anaya
Unidad Académica de Estudios Nucleares, Universidad Autónoma de Zacatecas
Ciprés 10, Fracc. La Peñuela, Zacatecas, Zac., 98068, MEXICO.
mguadalupe_44@hotmail.com; fmireles@uaz.edu.mx; criosmtz@hotmail.com;
idavilara@gmail.com; jlpv85@hotmail.com; chena@hotmail.de

Eric Reyes Rivera
UNEME de Oncología, Servicios de Salud de Zacatecas
Av. Barones # 3, Guadalupe, Zac., 98612, MEXICO.
eric_rr_1985@yahoo.com.mx

Resumen

Durante el transcurso del tratamiento de pacientes con Cáncer cervicouterino (Ca Cu) existe la posibilidad de que se produzcan cambios anatómicos por reducción de tejido debido a pérdida de peso que puedan alterar la entrega de la dosis al volumen objetivo y dar dosis mayores a los Órganos de Riesgo (OAR). En este estudio evaluamos el efecto dosimétrico en el volumen objetivo y OAR debido a la reducción del tejido abdominal en pacientes con Ca Cu tratados con Tomoterapia Helicoidal usando un fantoma. Se realizó el proceso de simulación de radioterapia del fantoma y 4 bolus de 0.5 cm para imitar el efecto de pérdida de tejido. Se traspusieron las estructuras de una paciente de Ca Cu al fantoma y se realizó el plan de tratamiento con una dosis convencional de 50 Gy en 25 sesiones. El plan fue aceptado cumpliendo con la dosis de prescripción en el 95% del volumen del PTV obteniendo un gradiente del 8.7%. Con las imágenes de MVCT se realizó un análisis comparativo en el software Planned Adaptive, donde se encontró que la dosis promedio del Volumen de Planeación del Tratamiento (PTV) aumentó en un rango de 1.17 a 5.8 %. Además de que la dosis en el 60% de volumen para el recto y el 35% de volumen para la vejiga aumentaron en un rango de 1.2 a 4.5% y de 1.2 a 4.8%, respectivamente; mientras que la cabeza femoral derecha tuvo un aumento que fue desde 0.6 a 4% e Izquierda de 1.2 a 5.2%. Por otro lado, encontramos que la dosis a piel es sobreestimada por el sistema de planeación. Considerando que la dosis promedio del PTV aumentó más del 5% cuando el tejido se redujo 2 cm y teniendo en cuenta la tolerancia del ICRU 24 podemos concluir que la re simulación del paciente debería tomarse en cuenta a partir de esta reducción de tejido; sin embargo, también se debe considerar el aumento de la dosis a los órganos de riesgo. Este estudio proporciona una estimación de dosimetría para que el personal de radioterapia justifique si es necesaria una adaptación de la dosis o seguir con el mismo tratamiento cuando se produce un cambio anatómico producido por la reducción de tejido.

1. INTRODUCCIÓN

Los avances tecnológicos en radioterapia en las últimas décadas han mejorado significativamente el tratamiento del cáncer. Las técnicas de Radioterapia Guiada por Imagen (IGRT) y Radioterapia de Intensidad Modulada (IMRT) son las modalidades más modernas para dar tratamientos de radioterapia externa. Su mayor conformación de la dosis al volumen objetivo y la restricción de dosis a los Órganos de Riesgo (OAR), favorecen a una mayor exactitud y precisión en los tratamientos [1, 2, 3, 4]. Basados en estos conceptos, la mayoría de los departamentos de radioterapia en países de primer mundo practican la IMRT para una mejor cobertura y control tumoral.

La Tomoterapia Helicoidal (TH) es una nueva técnica de radioterapia que permite la planificación, la verificación y la administración del tratamiento. El equipo de TH combina un acelerador lineal, un colimador multiláminas binario que permite modular el haz de radiación, que cambia de forma para adaptarse al tumor y un sistema para la obtención de imágenes de Tomografía computarizada de Mega Voltaje (MVCT), esto integrado a un gantry circular que rota 360° al mismo tiempo que la camilla del paciente se desplaza a través del anillo del gantry, por lo que la radiación se recibe siguiendo una trayectoria helicoidal y de manera continua. Con cada rotación, el haz se dirige hacia un plano ligeramente diferente irradiando una sección distinta del tumor [5, 6].

Las imágenes de MVCT que se obtienen en TH facilitan la verificación continua de posibles cambios anatómicos, en la posición del paciente, en la localización o morfología del tumor, o por los movimientos fisiológicos, permitiendo ajustes en la planificación durante el tratamiento para suministrar la dosis adecuada al tejido tumoral y evitar los órganos de riesgo [6, 7]. Esto permite que tengamos una combinación de técnicas de radioterapia de intensidad modulada guiada por imagen, que hace que los tratamientos tengan mayor exactitud y por tanto disminuyan la incidencia de efectos adversos. Sin embargo, es difícil controlar los cambios anatómicos que los pacientes muestran a lo largo del curso de su tratamiento, lo cual puede crear el riesgo de perder la conformación de la dosis en el volumen objetivo y aumentar la dosis a OAR [8, 9, 10].

Existen varios estudios de radioterapia adaptativa que reportan los efectos dosimétricos por la pérdida de peso y cambios anatómicos debido a las variaciones tumorales durante la radioterapia en pacientes con cáncer en cabeza y cuello [8,11, 12, 13]. Otro grupo de estudios son los de Ca en pelvis como Ca de páncreas [14], Ca de próstata [9, 10, 15], Ca Cu [1, 2, 3, 4, 7], entre otros; que se enfocan en la dosis que recibe el volumen objetivo debido al movimiento y gas intestinal o el producido por el llenado de órganos como vejiga y recto. Sin embargo, existen pocos estudios, que toman en cuenta la reducción de tejido debido a la pérdida de peso en la zona de pelvis, que aunque la anatomía ósea no cambia, esto puede afectar directamente la dosimetría en la zona de tratamiento [15, 9]. Históricamente, en tratamientos 3D-CRT la regla era que si la Distancia de la Fuente a la Superficie (DFS) se desviaba más de 1 cm, el plan de tratamiento se reevaluaba porque podrían ocurrir cambios significativos en la distribución de la dosis. En algunos casos, si la DFS se desviaba sustancialmente, el paciente se re simulaba y re planificaba o simplemente se re-escalaban las Unidades Monitor (UM) para corregir la dosis administrada siempre y cuando fueran campos no

segmentados [14, 15, 16]. Por otro lado, es más complejo realizar una simple corrección de UM en tratamientos de IMRT como TH, por lo que resulta más práctico obtener márgenes de referencia en las variaciones dosimétricas en el volumen tumoral que nos indiquen cuándo es recomendable re simular y re planear el tratamiento del paciente [17].

El objetivo de este estudio es evaluar los efectos dosimétricos en el volumen objetivo y OAR debido a la reducción del tejido abdominal en pacientes con Ca Cu usando un fantoma.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Este trabajo se realizó en la UNEME de Oncología de la Secretaría de Salud de Zacatecas, con el acelerador lineal Tomotherapy HD. Se utilizó el Cheese phantom, para simular la zona de tratamiento de una paciente con Ca Cu y para simular el efecto de pérdida de tejido se utilizaron 4 bolus de 0.5 cm de grosor. Además usamos películas radiocrómicas EBT3 para medir la dosis en la superficie del fantoma.

2.1. Calibración de Película Radiocrómica (PRC) EBT3

Para calibrar se usó una hoja de película radiocrómica EBT3 de una caja (No. de lote 06131702), se escaneo en un escáner Vidar Dosimetry Pro Advantage RED con una resolución de 71.25-285 DPI (Dots Per Inch) para registrar su densidad óptica de fondo, posteriormente se cortó en cuadros de 5 cm x 5 cm obteniendo 20 cortes marcando cada uno para su identificación, siguiendo las recomendaciones del TG-55 de la AAPM [18]. Las películas fueron calibradas en el acelerador lineal Tomotherapy HD en la UNEME de Oncología, para lo cual se obtuvo una imagen en un tomógrafo Brighth Speed Elite de General Electric, donde se colocaron 5 cm de agua sólida por encima de la película y 10 cm por debajo; además de colocar una cámara de ionización marca Standard Imaging, modelo Exradin AISL (con un factor de calibración de $5.738E+08 \pm 0.051 E+08$ trazable al Laboratorio Secundario de Calibración Dosimétrica (LSCD) del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares), 0.5 cm por debajo de la película. Posteriormente con la imagen obtenida se crearon 19 planes de tratamiento en el sistema de planeación VoLo para entregar diferentes dosis de radiación en un rango de 20 a 800 cGy, las cuales fueron verificadas con la cámara de ionización; 24 horas después de la irradiación, las películas se escanearon de manera similar a la condición en la lectura de fondo y luego se extrajo la Densidad Óptica Neta (DON) mediante el software Film Analyzer.

2.2. Planeación del Tratamiento

Para la planeación del tratamiento se tomó una imagen del fantoma, al cual se le colocaron 4 bolus para simular tejido abdominal, en un tomógrafo Brighth Speed Elite de General Electric de 16 cortes, utilizando un tamaño de cortes de 2.5 mm, 120 kV y 240 mA. Una vez obtenida la imagen, se le traspusieron los contornos del volumen objetivo o PTV (Planning Target Volume), vejiga, recto y cabezas femorales de la tomografía de una paciente de Ca Cu epidermoide estadio IIB con tumor maligno de exocérvix de 5cm, utilizando el software Mim maestro, como se observa en la Figura 1-

A. Posteriormente se realizó el plan de tratamiento utilizando el sistema de planeación VoLo, con dosis de prescripción de 50 Gy en 25 sesiones. Además de que se le asignaron las mismas características y restricciones de dosis que se utilizaron en el plan de tratamiento de la paciente a PTV y OAR. Para analizar el efecto de reducción de tejido se siguió el procedimiento habitual en tratamiento de IGRT. Se dieron 5 tratamientos y en cada uno se obtuvo un escaneo completo del fantoma (Fig. 1 B, C, D, E y F). El primer tratamiento fue con los 4 bolus tal y como se realizó el plan de tratamiento. Además se colocó una PRC de 5 cm x 5 cm en el centro de la superficie del bolus para medir la dosis en piel. En los próximos tratamientos se siguió el mismo procedimiento, disminuyendo 0.5 cm de bolus y colocando la PRC en el centro para medir el cambio en la dosis hasta quedar el fantoma solo; de esta manera logramos tener el efecto de un total de 2 cm de reducción de tejido. No se tomó en cuenta el movimiento del PTV debido al volumen de llenado de vejiga y recto, ni los cambios en la morfología del tumor durante el curso del tratamiento; por lo cual solo se presenta la variación de la dosis a piel, PTV, vejiga, recto y cabezas femorales por el efecto de la reducción del tejido.

Con las imágenes de MVCT verificamos el posicionamiento del fantoma a la hora del tratamiento y lo corregimos. Además las utilizamos para realizar una evaluación dosimétrica por lo cambios anatómicos en el software “Planned Adaptive” del equipo Tomotherapy, el cual utiliza los datos del plan de tratamiento para calcular la distribución de la dosis en las imágenes de MVCT.

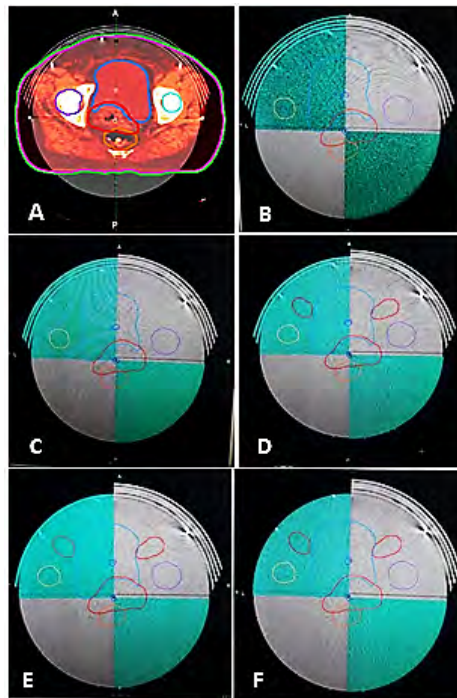


Figura 1. Imágenes (A) Traspaso de PTV y organos de riesgo a fantoma, (B) Sin cambios anatomicos, (C) Perdida de 0.5 cm de tejido, (D) Perdida de 1.0 cm de tejido, (E) Perdida de 1.5 cm de tejido y (F) Perdida de 2.0 cm de tejido.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El resultado de las dosis con las que se calibraron las PRC y las cuales se verificaron con la cámara de ionización fueron 20.445 ± 0.182 , 30.136 ± 0.269 , 40.483 ± 0.361 , 50.619 ± 0.452 , 61.155 ± 0.546 , 81.460 ± 0.727 , 101.838 ± 0.909 , 153.154 ± 1.367 , 204.484 ± 1.825 , 255.707 ± 2.282 , 306.284 ± 2.734 , 357.75 ± 3.193 , 409.072 ± 3.651 , 459.293 ± 4.099 , 510.642 ± 4.557 , 612.548 ± 5.467 , 714.388 ± 6.376 y 817.267 ± 7.294 cGy. La DO neta medida correspondiente a cada PRC determinado a partir de las lecturas de píxeles a diferentes valores de dosis se muestra en la Figura 2. Los datos de las curvas se ajustaron con un polinomio de tercer grado obteniendo un buen coeficiente de correlación ($R^2 = 0.9992$). La ecuación 1 muestra la función de calibración.

$$Y = -(7.9160 \pm 7.1224) + (0.0240 \pm 0.0041)X - (3.3175E - 07 \pm 5.691E - 07)X^2 + (1.1629E - 10 \pm 2.1938E - 11)X^3 \quad (1)$$

Donde Y indica la dosis absorbida en cGy y X representa el promedio de la DO neta. La ecuación 1 nos permitió obtener la dosis absorbida a partir de la respuesta de las películas radiocrómicas. La Tabla 1 muestra las dosis medida en piel con PRC al ir disminuyendo el tejido de 0.5 cm a 2 cm y comparada con la obtenida en el sistema de planeación de tratamiento. La incertidumbre se calculó, como Devic *et al.*, el cual indica que para calcular la incertidumbre de la dosis de una sola medición con PRC, se hace a partir de la incertidumbre medida de la Densidad Óptica [18]. Además se observa que desde el inicio del tratamiento, cuando aun no se ha presentado ningún cambio (normal), la dosis a piel en el fantoma medida con PRC, es 11.58% menor a la dosis calculada por el sistema de planeación, lo que nos indica que existe una sobrestimación de la dosis a piel por el sistema de planeación tal y como lo mencionan Avanzo et al. [19] y Ramsey et al. [20] que reportan una sobreestimación de la dosis medida con PRC de 13.5% en tratamientos de cabeza y cuello y con dosímetros Termoluminiscentes (TLDs) en un rango de 3% a 13% utilizando un fantoma de cabeza y cuello, respectivamente. Esto podría deberse a la extrema variación de densidad en las imágenes de CT en la superficie, ya que el sistema de planeación le asigna a cada voxel una determinada densidad que utiliza para calcular la dosis. Además de la falta de equilibrio electrónico en esta zona. Sin embargo, se requiere realizar un análisis más detallado de este efecto.

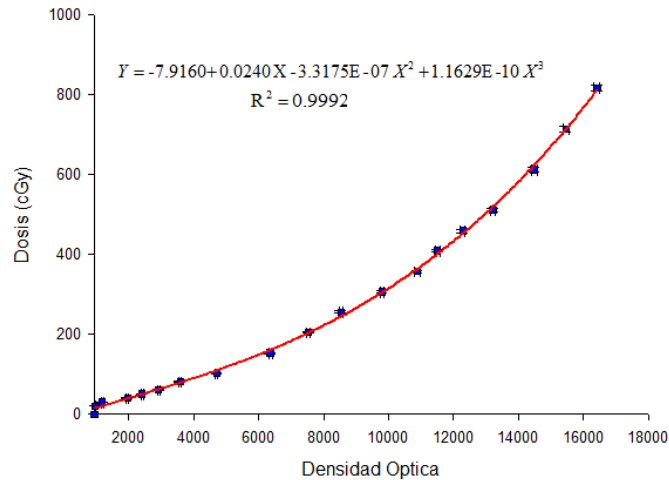


Figura 2. Curva de calibración de las PRC

Tabla I. Dosis a piel medida con PRC comparada con el sistema de planeación VoLo

Método de cálculo	Grosor del bolus	Dosis a piel (Gy)	Diferencia (%) VS Sistema Planeación
Sistema de planeación	Dosis Planeada	0.607 ± 0.012	0
Película Radiocrómica	Normal	0.544 ± 0.056	-11.581
	- 0.5 cm	0.578 ± 0.060	-5.017
	- 1.0 cm	0.571 ± 0.058	-6.305
	- 1.5 cm	0.585 ± 0.063	-3.761
	- 2.0 cm	0.614 ± 0.054	-1.140

El plan de tratamiento del fantoma se aprobó una vez que el PTV cumplió con los parámetros para IMRT obteniendo que el 95% del PTV recibió la dosis de prescripción (50 Gy) dejando dosis máxima de 54.34 Gy equivalente a un punto de dosis máximo de 8.7% dentro del PTV. Los órganos de riesgo cumplieron con las restricciones del QUANTEC [21] las cuales se muestran en la Tabla 3, donde se observa que el plan quedó con un buen margen de dosis respecto a las restricciones establecidas.

El software Planned Adaptive nos permitió comparar las dosis de prescripción del plan de tratamiento y las administradas al fantoma, obteniendo los Histogramas de Dosis Vs Volumen (DVH) del PTV, vejiga y recto, donde se observan en las Figuras 3, 4 y 5 un cambio a medida que el volumen del fantoma va reduciendo. Esto muestra que la dosis administrada al PTV, cabezas femorales, vejiga y recto aumenta dependiendo de la disminución de tejido (0-2 cm) lo que es causada por la reducción de la atenuación del haz.

Para comprender este cambio dosimétrico con mayor detalle, se realizó una evaluación de las dosis máximas, mínimas y promedio de los DVHs del PTV como se muestra en la Tabla 2, donde se

muestra que el incremento en las dosis promedio del PTV es de 1.17% y 5.85% cuando se reduce tejido de 0.5 y 2 cm, respectivamente. La relación entre el incremento de las dosis y la reducción de tejido muestra ser lineal. El ICRU 24 menciona que el límite de tolerancia para entregar la dosis al blanco es del 5%, por lo que siguiendo este parámetro se puede observar que la dosis supera el límite a partir de los 2 cm de pérdida de tejido, similar a lo reportado para cáncer de próstata [9,15]. Esto, lo atribuimos a que al reducir el volumen y la masa del tejido la cantidad de energía media absorbida se reduce.

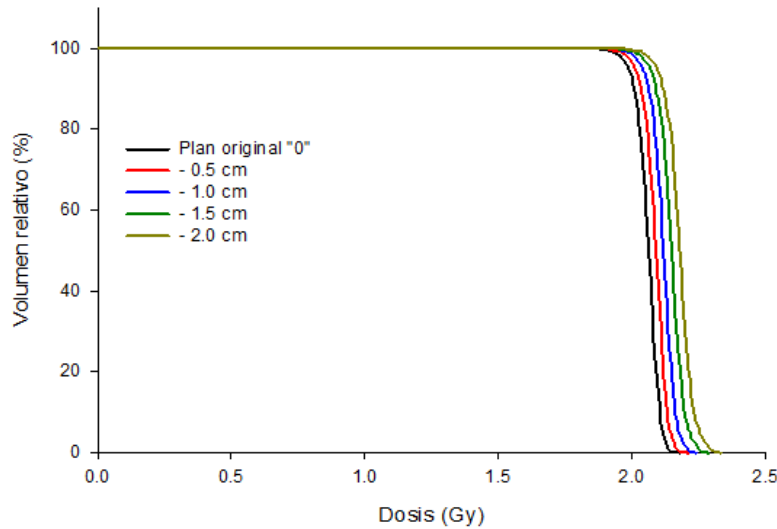


Figura 3. Variación del DVH de PTV en función de la reducción de tejido

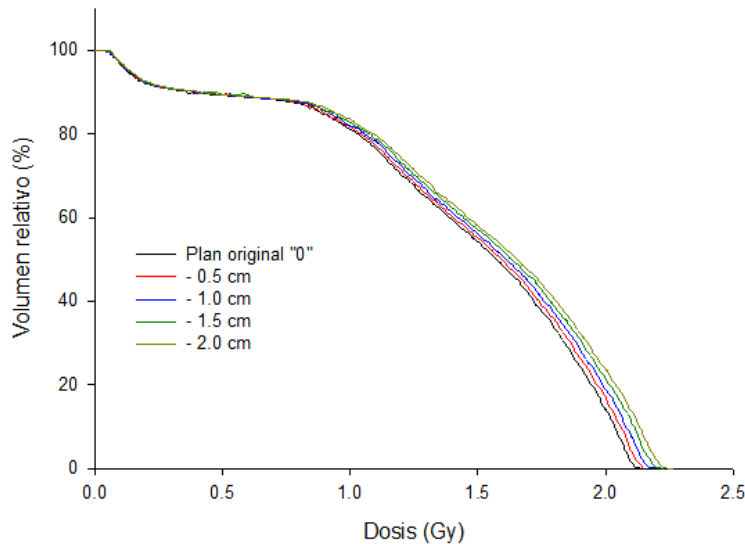


Figura 4. Variación del DVH de Recto en función de la reducción de tejido

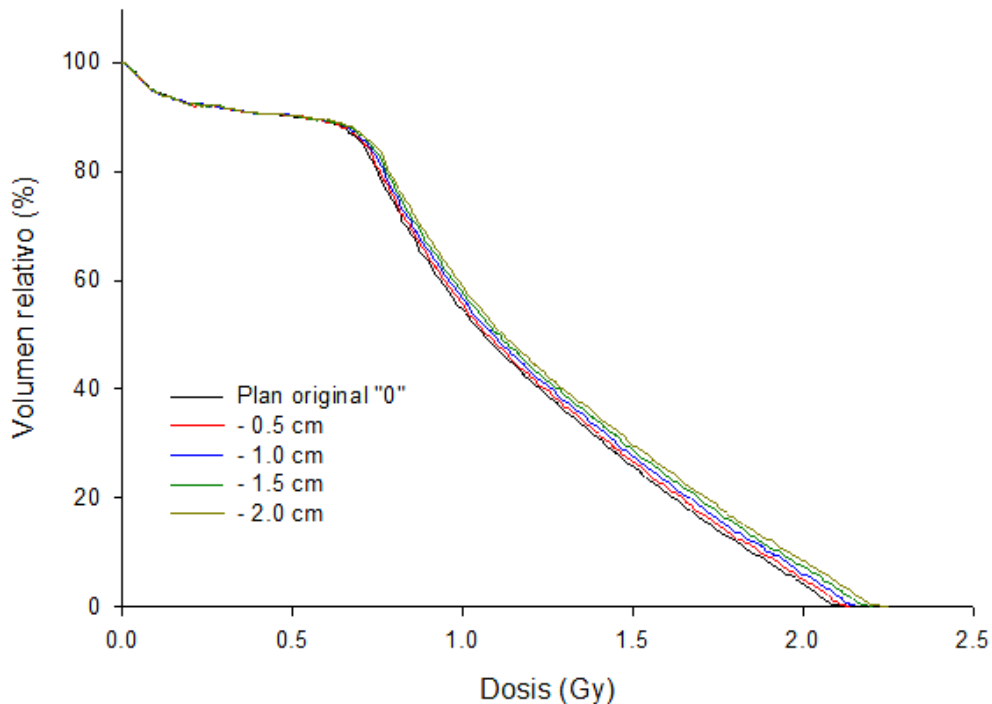


Figura 5. Variación del DVH de Vejiga en función de la reducción de tejido

En cuanto a las dosis de los OAR, se extendió el cálculo al número total de sesiones para compararse con las del plan de tratamiento y para evaluar la dosis a los órganos de riesgo se tomaron en cuenta las restricciones del QUANTEC [21], donde nos indica que para recto evaluemos la dosis en el 60% y para vejiga en el 35% de su volumen, así como las dosis máximas en las cabezas femorales, como se muestra en la Tabla 3. Podemos ver que cuando la pérdida de tejido es igual a 2 cm, existe la posibilidad de que la dosis rectal y de vejiga aumente más del 4%, en el 60% y 35% de su volumen respectivamente. Esto se lo podemos atribuir a la variación en la distribución de dosis debido a la pérdida de tejido. Por otro lado, las variaciones de dosis máxima para las cabezas femorales izquierda y derecha ascienden a un promedio de 4%. Cabe mencionar que no estamos considerando otra influencia importante para la variación en la dosis de radiación que pueden recibir la vejiga y recto, como lo es el cambio de volumen diario que podemos tener. En las Figuras 3 y 4, observamos que las dosis comienzan a variar a partir del 85% del volumen en vejiga y recto. Esto puede deberse a que la variación de la dosis es mayor en el PTV. Sin embargo, debemos de tener en cuenta que no todos los planes de tratamiento quedan con buen margen en las restricciones de los OAR ya que esto depende del estadio de la enfermedad entre otros factores como lo es el volumen de vejiga y recto a la hora de la TC de simulación de tratamiento, en donde en muchas ocasiones las restricciones de dosis a vejiga, recto y cabezas femorales quedan al límite de lo recomendado por lo que cualquier influencia en la dosimetría como lo es la pérdida de peso del paciente puede hacer que

estos OAR reciban dosis mayores no planeadas a las establecidas, pudiendo agravar los efectos adversos de la RT.

Tabla II. Variación del porcentaje de la dosis máxima, mínima y promedio del PTV con respecto a la reducción de tejido (0.5-2cm).

	Dosis Maxima (%)	Dosis Minima (%)	Dosis Promedio (%)
Plan original	100.0	100.0	100.0
0.5	101.46	101.79	101.17
1.0	102.89	103.70	102.60
1.5	104.95	104.66	104.25
2.0	107.08	105.15	105.85

Tabla III. Restricciones del QUANTEC y valores de dosis obtenidos en este trabajo.

OAR	Valores del QUANTEC		Valores de dosis (Gy) obtenidos en este trabajo					
	Volumen (%)	Dosis (Gy)	Planeada	Obtenida con Planned Adaptive				
				Normal	- 0.5 cm	- 1.0 cm	- 1.5 cm	- 2.0 cm
Vejiga	35	45	34.18	34.35	34.77	35.20	35.50	36.08
Recto	60	40	35.70	35.85	36.30	36.75	37.03	37.53
Fémur Der.	Dosis Máx.	50	42.24	42.8	43.05	43.63	44.30	44.58
Fémur Izq.	Dosis Máx.	50	37.33	37.6	38.05	38.5	39.05	39.65

4. CONCLUSIONES

Se investigaron las variaciones de las dosis causadas por la pérdida de peso de los pacientes de Ca Cu en tratamientos de Tomoterapia Helicoidal utilizando un fantoma. Se encontró que la dosis promedio del PTV aumentó en un rango de 1.17 a 5.8 %. Además de que la dosis en el 60% de volumen para el recto y el 35% de volumen para la vejiga aumentaron en un rango de 1.2 a 4.5% y de 1.2 a 4.8% respectivamente, mientras que la cabeza femoral derecha tuvo un aumento que fue desde 0.6 a 4% e Izquierda de 1.2 a 5.2 %.

La dosis a piel es sobrestimada por el sistema de planeación dándonos un promedio de -11.58% de diferencia.

Teniendo en cuenta la tolerancia del 5% del ICRU 24 en la entrega de dosis y que la dosis promedio del PTV aumentó más del 5% cuando el tejido se redujo 2 cm, podemos concluir que la re simulación del paciente o la adaptación del plan de tratamiento debería tomarse en cuenta a partir de esta reducción de tejido. Además de considerar el aumento de la dosis a los órganos de riesgo ya que

puede resultar en una sobredosis no planeada de estos órganos, pudiendo agravar los efectos adversos de la RT.

El análisis dosimétrico presentado en este estudio es una herramienta eficaz para que el personal de radioterapia justifique si es necesaria una adaptación de la dosis o seguir con el mismo tratamiento en pacientes con Ca Cu cuando se produce una reducción de tejido por pérdida de peso en la zona abdominal durante el tratamiento en equipos de Tomoterapia.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la UNEME de Oncología de la Secretaría de Salud de Zacatecas por las facilidades para desarrollar este trabajo. El primer autor agradece al CONACYT por la beca para estudios de doctorado y a la Universidad Autónoma de Zacatecas por el apoyo en la obtención de material para la investigación.

REFERENCIAS

1. Sun R, Mazon R, Chargari C, Barillot I, "CTV to PTV in cervical cancer: From static margins to adaptive radiotherapy", *Cancer/Radiotherapy*, **20**, p. 622–628 (2016).
2. Bahandari V, Abhinav M, Omprakash G, Raghuram S, Priyusha B, Krishnlal G and Kanchan S, "The association of uterine motion with bladder volume during radiotherapy in gynecological malignancies", *Journal of Cancer Metastasis and Treatment*, **2**, p. 139-143 (2016).
3. Jadon R, Pembroke A, Hanna L, Palaniappan N, Evans M, Cleves E and Staffurth J, "A Systematic Review of Organ Motion and Image-guided Strategies in External Beam Radiotherapy for Cervical Cancer", *Clinical Oncology*, **26**, p. 185-196 (2014).
4. Huh S, Park W and Han Y, "Interfractional variation in position of the uterus during radical radiotherapy for cervical cancer", *Radiotherapy and Oncology*, **71**, p. 73–79 (2004).
5. Mackie T, "History of tomotherapy", *Physics in Medicine and Biology*, **51**, p. 427-453 (2006).
6. Yadav P, Tolajannahalli R, Rong Y and Paliwal B, "The effect and stability of MVCT images on adaptive Tomotherapy", *Journal of Applied Clinical Medical Physics*, **11**, p. 4-14 (2010).
7. Maemoto H, Toita T, Ariga T, Heianna J, Yamashiro T and Murayama S, "Predictive factors of uterine movement during definitive radiotherapy for cervical cancer", *Journal of Radiation Research*, **58**, p. 397–404 (2017).
8. Veresezan O, Troussier I, Lacout A, Kreps S, Maillard S, Toulemonde A, Marcy P Huguet F, Thariat J, "Adaptive radiation therapy in head and neck cancer for clinical practice: state of the art and practical challenges", *Japanese Journal of Radiology*, **35**, p. 43-52 (2016).
9. Pair M, Du W, Rojas H, Kanke J, Mc Guire S, Lee A, Kuban A, and Kudchadker R, "Dosimetric effects of weight loss or gain during volumetric modulated arc therapy and intensity-modulated radiation therapy for prostate cancer", *Medical Dosimetry*, **38**, p. 251-254 (2013).

10. Chowa J, Jiange R, “Comparison of dosimetric variation between prostate IMRT and VMAT due to patient’s weight loss: Patient and phantom study”, *Reports of Practical Oncology and Radiotherapy*, **18**, p. 272–278 (2013).
11. Schwartz D, Garden A, Shah S, Chronowski G, Sejpal S, Rosenthal D, Chen Y, Zhang Y, Zhang L, Wong P, Garcia J, Ang K, Dong L, “Adaptive radiotherapy for head and neck cancer—Dosimetric results from a prospective clinical trial” *Radiotherapy and Oncology*, **106**, p. 80-84 (2013).
12. Brouwer Ch, Steenbakkers R, Langendijk J, Sijtsema N, “Identifying patients who may benefit from adaptive radiotherapy: Does the literature on anatomic and dosimetric changes in head and neck organs at risk during radiotherapy provide information to help? Review study” *Radiotherapy and Oncology*, **115**, p. 285-294 (2015).
13. Noble D, Yeap P, Seah S, Harrison K, Shelley L, Romanchikova M, Bates A, Zheng Y, Barnett G, Benson R, Jefferies S, Thomas S, Jena R, Burneti N, “Anatomical change during radiotherapy for head and neck cancer, and its effect on delivered dose to the spinal cord”, *Radiotherapy and Oncology*, **130**, p.32–38 (2019).
14. Van der Horst, A. Houweling, G. van Tienhoven, J. Visser, Arjan Bel, “Dosimetric effects of anatomical changes during fractionated photon radiation therapy in pancreatic cancer patients”, *Radiation Oncology Physics*, **18**, p. 142-151 (2017).
15. Chow J, Jiang R, “Dosimetry estimation on variations of patient size in prostate volumetric-modulated arc therapy”, *Medical Dosimetry*, **38**, p. 42-47 (2013).
16. Devic S, Seuntjens J, Abdel-Rahman W, Evans M, Olivares M, Podgorsak E, Vuong T, and Soares C, “Accurate skin dose measurements using radiochromic film in clinical applications” *Medical Physics*, **33**, p. 1116- 1124 (2006).
17. Casanova V, Pasquino M, Russo G, Grosso P, Cante D, Sciacero P, Girelli G, La Porta M, Tofani S, “Dosimetric characterization and use of GAFCHROMIC EBT3 film for IMRT dose verification” *Journal of Applied Clinical Medical Physics*, **14** , p. 158-171 (2013).
18. Niroomand-Rad A, Blackwell CH R, Gall K P, Galvin J M, Meigooni A S, Nath Ravinder, Rodgers J E, Soares CH G, “Radiochromic Film Dosimetry: Recommendations of AAPM Radiation Therapy Committed Task Group No. 55” *Medical Physics*, **25**, p. 2093-2115 (1998).
19. Avanzo M, Drigo A, Ren Kaiser S, Roggio A, Sartor G, Chiovati P, Franchin G, Mascarin M and Capra E, “Dose to skin in helical tomotherapy: Results of in vivo measurements with radiochromic Films” *Physica Medica*, **29**, p. 304-311 (2013).
20. Ramsey CR, Seibert RM, Robison B, Mitchell M, “Helical Tomotherapy superficial dose measurements” *Med Phys*, **34**, p. 3286-3293 (2007).
21. Mantz C, “Intensity Modulated and Conformal Radiotherapy: Treatment Planning Guidelines”, 21st Century Oncology. www.21stcenturyoncology.com (2010).

Estudio estructural del $ZrSiO_4$ expuesto a altas dosis de radiación gamma

Escalante Gutiérrez D.C., Ortiz Landeros J.*
Instituto Politécnico Nacional

Departamento de Ingeniería en Metalurgia y Materiales, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, UPALM, Av. IPN s/n, CP 07738, Ciudad de México, México.

descalanteg27@gmail.com, jortizla@ipn.mx

Ordoñez Regil E. y Almazán Torres M.G.

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Departamento de Química

Carretera México-Toluca, s/n, La marquesa, Ocoyoacac C.P. 52750
eduardo.ordonez@inin.gov.mx ; guadalupe.almazan@inin.gov.mx

Resumen

El confinamiento final de los residuos radiactivos de alto nivel, en almacenes geológicos profundos (AGP), es un tema de investigación a nivel internacional principalmente en países que cuenten con reactores nucleares. El principal riesgo del resguardo de los residuos radiactivos en el AGP, es la infiltración de aguas subterráneas, que pueden provocar la degradación de los contenedores y lixiviar los residuos radiactivos, a través de las diferentes barreras. Es por ello que el estudio de materiales para ser utilizados como barreras de ingeniería ha cobrado gran relevancia, ya que se prevé que una de las funciones de dichos materiales es capturar los elementos radiactivos y asegurar que no se dispersen fuera de los sitios de almacenamiento. Sin embargo, otro punto a considerar en la selección del material de construcción de la barrera, es la interacción que tendrá con las radiaciones remanentes emitidas por los combustibles nucleares gastados. El éxito de esta alternativa, radica en seleccionar materiales con una gran estabilidad física, química y mecánica. Estudios previos han propuesto al zircón para la construcción de las barreras de ingeniería, debido a que este ha demostrado tener la capacidad de capturar radionúclidos en su superficie. Pocos estudios han considerado que el zircón también estará expuesto a radiaciones remanentes, las cuales podrían tener efectos importantes en su estabilidad física y por lo tanto en su desempeño. Es por ello que este trabajo, exponen los avances del estudio de la estabilidad del silicato de zirconio (zircón) al estar expuesto a altas dosis de radiación gamma. La experimentación se realizó en un irradiador industrial con una fuente de ^{60}Co en un rango de dosis de 10 a 30 MGy. Previo a la irradiación del zircón, se identificaron los lantánidos presentes mediante la técnica de análisis por activación neutrónica. Posteriormente las muestras de zircón irradiado y sin irradiar fueron caracterizadas por diferentes técnicas instrumentales, tales como, difracción de rayos X (DRX) donde se obtuvieron los patrones de difracción, se

evaluaron los cambios en los parámetros de red y se identificaron fases secundarias. Se identificaron los cambios en las bandas de adsorción de los enlaces químicos como consecuencia de la exposición a la radiación mediante la Espectroscopia Raman y Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR). Finalmente, se observaron ligeros cambios en las energías de enlace del material de estudio por medio de la Espectroscopia Fotoelectrónica de rayos X (XPS).

1. INTRODUCCIÓN

El zircón pertenece al grupo espacial I41/amd y $Z=4$, cuya estructura ideal consiste en cadenas alternadas que comparten bordes de los tetraedros de SiO_4 con dodecaedros triangulares de ZrO_8 extendidos en paralelo en el eje cristalográfico c . El zircón natural comúnmente contiene U, Th y otras tierras raras, sin embargo cuando el ZrSiO_4 es sometido a condiciones críticas como decaimiento radiactivo de las series de ^{238}U , ^{235}U y ^{232}Th , altas temperaturas, presiones elevadas y radiación ionizante, la estructura del zircón puede ser altamente dañada. Como resultado, el zircón de origen natural es comúnmente encontrado en un estado metamórfico (un estado aperiódico) [1].

Los desórdenes en la estructura del zircón son provocados mediante dos principales procesos: 1) la formación de cascadas por desplazamientos atómicos, provocados por procesos de decaimiento alfa de los elementos radiactivos ($^{238}\text{U} \rightarrow ^{206}\text{Pb}$, $^{235}\text{U} \rightarrow ^{207}\text{Pb}$ y $^{232}\text{Th} \rightarrow ^{208}\text{Pb}$); y 2) La formación de puntos de defectos debido al impacto de las partículas alfa o beta y la exposición a radiación gamma, esta última provoca inducción de defectos que modifican bruscamente la estructura cristalina del zircón. Los principales tipos de defectos son los llamados Frenkel (vacancias-pares de átomos intersticiales) y los defectos por difusión de átomos intersticiales o también llamados defectos Schottky, principalmente en las vacancias de O, Zr y átomos de Si [2].

Los efectos de la radiación sobre la fase cristalina del zircón, podrían tener importantes implicaciones en sus aplicaciones, entre ellas las barreras de contención del almacenamiento definitivo de los residuos radiactivos, provenientes del combustible nuclear gastado, los cuales provocan la deformación del material y disminución de la dureza. Dichos efectos pueden ser vistos como cambios sistemáticos en sus propiedades físicas, por lo que este estudio está enfocado en los cambios estructurales que pudieran ocurrir al estar expuesto a radiación gamma, proveniente de los ensambles de combustible nuclear gastado y sus implicaciones en el desempeño al ser propuesto como un material para la construcción de las barreras de ingeniería para almacenamiento definitivo de los residuos radiactivos [1].

2. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

La extracción del zircón a partir de arena de mar se realizó de acuerdo a la metodología propuesta por García-Rosales, *et.al.* 2004, la cual consistió en colocar 100 gramos (g) de arena de zircón con 30 mililitros (mL) ácido fluorhídrico y 70 mL de agua desmineralizada, esta suspensión fue calentada en un baño de arena por 48 horas (h). El sólido remanente fue lavado y filtrado con agua

desionizada. El sólido pre-tratado, se hizo reaccionar con 100 mL de una solución de NaOH (1:1 p/v), seguido de un lavado con 200 mL de agua desionizada a 80 °C, posteriormente el sólido fue nuevamente filtrado y secado a 950°C por 8 horas. El ZrSiO₄ obtenido, fue molido en un mortero de ágata y tamizado a malla 300 de la ASTM (American Society for Testing and Materials) [3].

2.1. Análisis por activación neutrónica

Para la determinación de los lantánidos presentes en el ZrSiO₄ obtenido, se colocó 1 g de zircón, en contenedores de vidrio para su análisis, posteriormente las muestras fueron irradiadas junto con patrones respectivos (lantánidos) en el Reactor Nuclear Triga Mark III del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ). Las muestras fueron irradiadas durante 5, 10, 20 y 25 días en el Sistema de Irradiación Fijo de Cápsulas (SIFCA). Se detectó la radiactividad a los 5 días de decaimiento, con un flujo neutrónico de 1.68x10¹² neutrones/s/cm², la cuantificación fue medida con un detector de germanio hiperpuro acoplado a un multicanal durante 5 minutos, el experimento se realizó por duplicado.

2.2. Irradiación gamma del ZrSiO₄

Se colocaron 3 lotes de 15 gramos de ZrSiO₄ en contenedores de aluminio, los cuales fueron expuestos a radiación gamma con una fuente de ⁶⁰Co, en un irradiador industrial AECL (Atomic Energy of Canada Limited) modelo JS-6500 del ININ, la velocidad de dosis de exposición de campo ocupado por las muestras se evaluó con dosímetros L8-C1 (Nordion[®]) de acrílico rojo, las dosis de exposición fueron a 5, 10 y 30 MGy.

2.3. Caracterización estructural y microestructural

2.3.1 Difracción de rayos X

La identificación de la fase obtenida se evaluó mediante un difractómetro de rayos X D8 Discover, usando una fuente de radiación de Cu K_α (λ=1.540 Å) y 20 mA. El difractograma fue obtenido en un intervalo de 4° a 70° y en un ángulo 2θ. La determinación de los parámetros de red, se utilizó el software FullProf, en la sección “Metodo Rietveld”, tomando como base los parámetros de red y grupo espacial reportados en la tarjeta PDF-01-076-0865.

2.3.2 Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier

Los espectros infrarrojos, se obtuvieron utilizando un espectrómetro PEKIN-ELMER modelo 1600-FTIR, se operó en un intervalo de número de onda de 4000 a 400 cm⁻¹, la preparación de las muestras se realizó con bromuro de potasio (KBr) grado infrarrojo el cual fue homogenizado junto con la muestra de ZrSiO₄ en un mortero de ágata, para la posterior obtención de pastillas por prensado. Se analizó el número de onda e intensidades para la identificación de los enlaces característicos y predominantes.

2.3.3 Espectroscopia Raman

Los espectros Raman se realizaron en un equipo Horiba Jobin Yvon modelo Labram HR 800 equipado con un microscopio confocal Olympus modelo BX41, como fuente de irradiación, se empleó un láser de 663 nm, además el análisis fue empleado un objetivo 50X, se utilizó un filtro D06 con un arreglo de 400 μm . Con el propósito de disminuir la señal del ruido de los espectros se utilizaron alrededor de 150 adquisiciones con un tiempo de exposición de 2 segundos, el espectro se realizó en un rango espectral de 100 a 1500 cm^{-1} y finalmente los espectros fueron calibrados usando la línea de silicio ubicada a 521 cm^{-1} .

2.3.4 Espectroscopia fotoelectrónica de rayos X

La composición elemental y las energías de enlace de los elementos presentes en las muestras, se obtuvieron en un espectrofotómetro modelo K-alpha de Thermo Scientific, que emplea una fuente de Al K α (1486 eV), a un paso de energía de 25 eV y un tamaño de paso de 0.03 eV, para la compensación de carga de las muestras estuvieron bajo un flujo de argón, además se realizó una calibración del espectro con respecto a la señal de C 1s a 285 eV.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Irradiación gamma del ZrSiO₄

3.1.1. Análisis por activación neutrónica

Mediante análisis por activación neutrónica se identificaron los radioelementos (Tabla 1), presentes en la estructura del ZrSiO₄ que pudieran favorecer el fenómeno de adsorción de energía del ZrSiO₄ como material termoluminiscente. Cabe destacar la presencia de uranio en 235 ± 40 ppm y europio 215 ± 21 ppm en mayor concentración favorece al proceso de metamictización de la estructura cristalina por decaimiento alfa del uranio.

Tabla 1. Análisis elemental de las muestras por la técnica de activación neutrónica

Elementos	Muestra ZrSiO ₄	
	1 ppm	2 ppm
Uranio	235 \pm 40	200 \pm 40
Yterbio	160 \pm 25	140 \pm 25
Samario	20 \pm 2	10 \pm 1.5
Terbio	2.17 \pm 0.40	4.20 \pm 0.50
Europio	215 \pm 21	271 \pm 25
Lantano	15 \pm 2	9 \pm 1
Lutecio	14 \pm 3	13 \pm 3
Cerio	60 \pm 12	57 \pm 9
Gadolinio	22 \pm 5	19 \pm 4

3.2 Caracterización estructural y microestructural

3.2.1 Difracción de rayos X

Se identificó que el material extraído a partir de arena de mar, corresponde a la fase de silicato de zirconio ($ZrSiO_4$), según lo reportado en la tarjeta PDF 01-076-0865. El $ZrSiO_4$ obtenido es de origen natural, presenta una estructura tetragonal centrada en el cuerpo y grupo espacial $D_{4h}19 I4_1/amd$. En los patrones de difracción de rayos X mostrados en la Figura 1, se observa que el plano preferencial en la muestra sin irradiar (0MGy) es (200), el cual es conservado cuando es irradiado a dosis de 5, 10 y 30 MGy. Sin embargo, también se observa reflexiones correspondientes a la fase monoclinica del ZrO_2 , esta presencia se debe a que existe un arreglo cristalográfico no uniforme de la estructura del $ZrSiO_4$ que ha sufrido un proceso de metamictización, es decir sufre un reacomodo de los átomos, que provocan regiones ricas en dodecaedros de ZrO_2 y zonas de los tetraedros de SiO_2 en las muestras expuestas a 10 y 30 MGy, durante la exposición a la radiación [4-7].

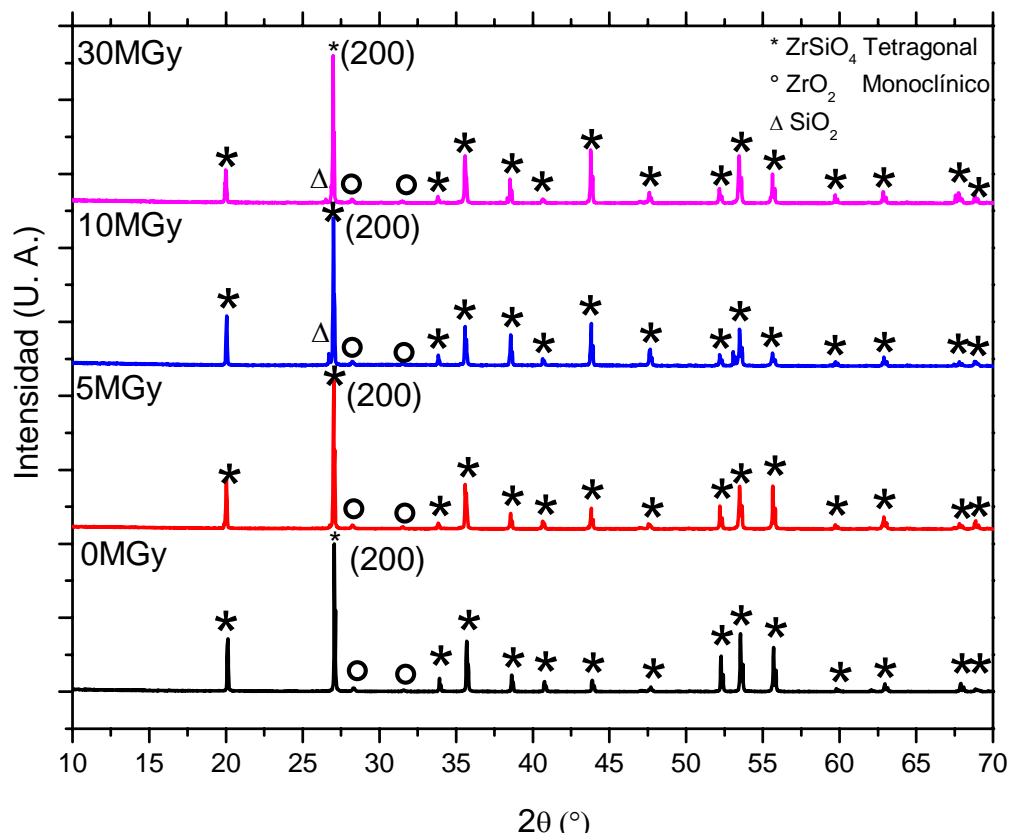


Figura 1. Patrón de difracción del $ZrSiO_4$ expuesto a dosis de 5, 10, y 30 MGy

3.2.2 Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier

El análisis por espectroscopia infrarroja de las muestras irradiadas (5, 10 y 30 MGy), mostraron algunas diferencias con respecto a las muestras sin irradiar (0 MGy), se puede observar en la Figura 2, que la forma del espectro difiere, sin embargo presentan los mismos enlaces. Se muestra un pico con hombros en 3550, 3479 y 3418 cm^{-1} , los cuales son atribuidos a la frecuencia de alargamiento de los enlaces intermoleculares O-H, en contraste con las muestras irradiadas a 5, 10 y 30 MGy, donde presentan señal en 3444 cm^{-1} [8, 9].

En 2969, 2920 y 2852 cm^{-1} las señales de menor intensidad son debidas a los enlaces correspondientes a vibraciones moleculares de O-H, para todas las muestras de estudio. La señal asignada al estiramiento asimétrico del CO_2 se observó en mayor intensidad al ZrSiO_4 sin irradiar y el ZrSiO_4 a 10MGy, la señal es débil para las muestras irradiadas a 5MGy y 30MGy en 2363 y 2335 cm^{-1} [10, 11]. El enlace en 1788 y 1512 cm^{-1} es atribuido al enlace de SiO_2 por descomposición del ZrSiO_4 , la señal en 1635 cm^{-1} es debida a las vibraciones por deformación de modo o tipo tijera del enlace H-O-H [12,13].

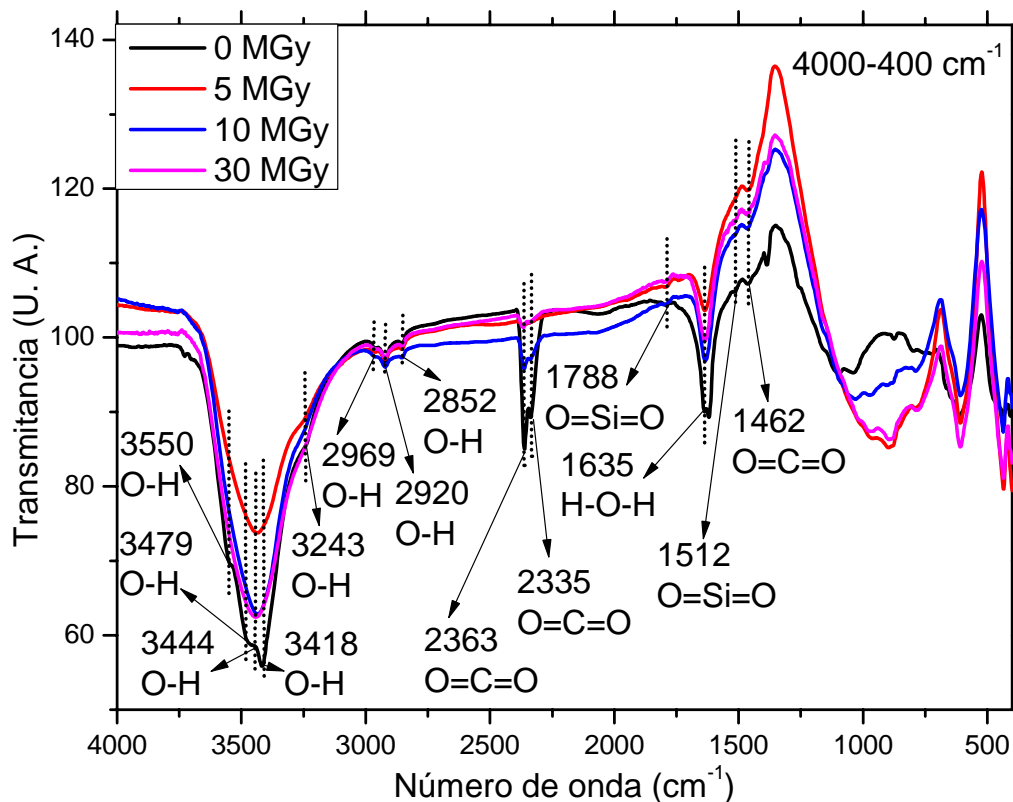


Figura 2. Espectro infrarrojo del ZrSiO_4 en el intervalo 4000-400 cm^{-1}

Los enlaces en el intervalo de 1500 a 400 cm^{-1} mostrado en la Figura 3, se observó una desviación de la señal debida a los carbonatos producidos por contaminación del CO_2 atmosférico en 1388 cm^{-1} ,

1351 cm^{-1} , el enlace de flexión del C-H en 1258 cm^{-1} indica la presencia de materia orgánica en el sólido después del secado de la muestra sin irradiar [8].

En el intervalo de 1200 a 700 cm^{-1} , se observa una banda ancha de mayor intensidad en las muestras irradiadas a 5MGy y 30MGy, mientras que en 0MGy y 10MGy la señal del espectro es débil, los enlaces en este intervalo corresponden a los enlaces O=Si=O en 1169 cm^{-1} , seguido de un estiramiento vibracional asimétrico del enlace Si-O-Si en 1099 y 1039 cm^{-1} , la banda en 887 cm^{-1} corresponde a los enlaces de CO₂, en 799 cm^{-1} correspondientes a los enlaces Si-O y Zr-O [9, 14, 15]. Las bandas de adsorción en 655 cm^{-1} , 608 cm^{-1} y 439 cm^{-1} corresponden al enlace O=Si=O, mientras que en las bandas en 689 y 671 cm^{-1} fueron asignadas a la translación de enlaces O-H y finalmente se observa un enlace de Zr-O en la banda a 558 cm^{-1} [12, 15-17].

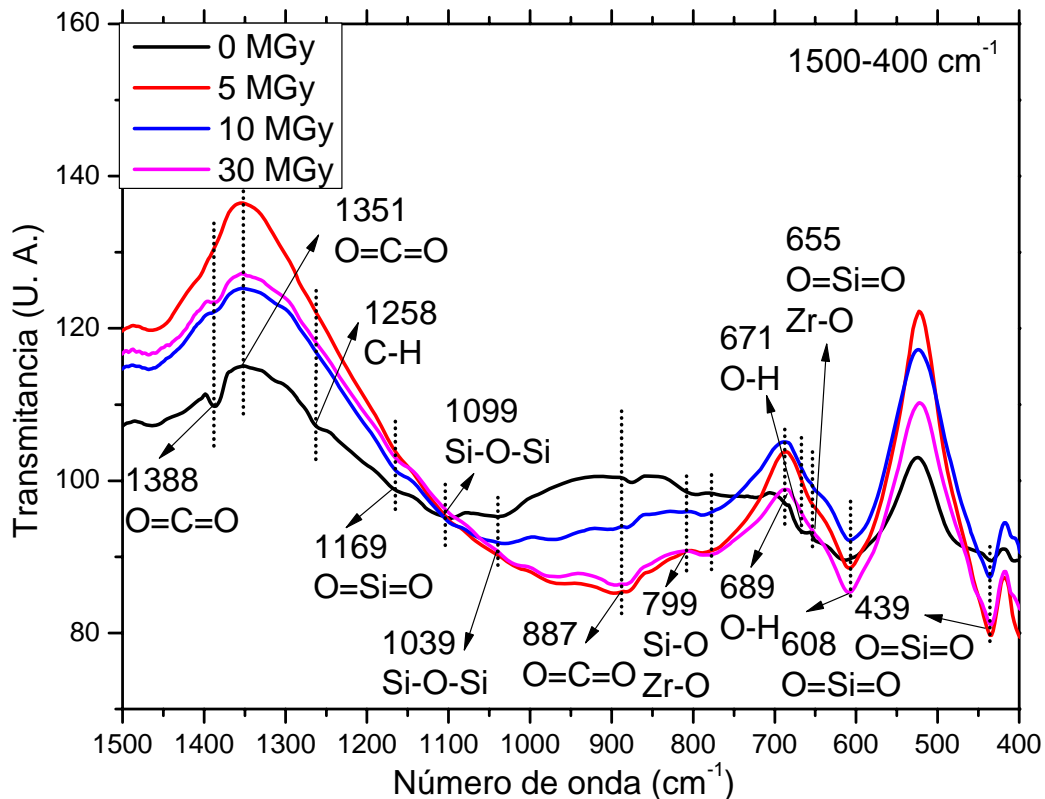


Figura 3. Espectro infrarrojo del ZrSiO₄ en el intervalo 1500-400 cm^{-1}

3.2.3 Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier

Los modos activos y simetrías en Raman, son doce para estructuras tipo zircón (ZrSiO₄), con grupo espacial I4₁/amd (D_{4h}¹⁹), descritos como $\Gamma = (1A_{1g} | 4B_{1g} | B_{2g} | 5E_g)$, los cuales siete modos internos los cuales corresponden a las vibraciones entre los tetraedros de SiO₄ y cinco modos externos causados por las vibraciones entre Zr⁺⁴ y el tetraedro SiO₄, estos son detallados en la Tabla

2 y Figura 4 [1, 18-20].

Tabla 2. Modos activos y simetrías para el $ZrSiO_4$

Modos internos
Vibraciones del tetraedro SiO_4
<ul style="list-style-type: none"> • ν_1 (<i>Estiramiento simétrico A_{1g}</i>) • ν_2 (<i>2 - Doblamiento simétrico A_{1g} y B_{2g}</i>) • ν_3 (<i>2 - Estiramiento antisimétrico B_{1g} y E_g</i>) • ν_4 (<i>2 - Doblamiento antisimétrico B_{1g} y E_g</i>)
Modos externos
Vibraciones entre Zr^{4+} y el tetraedro SiO_4
<ul style="list-style-type: none"> • 1 - <i>Modo rotacional (E_g)</i> • 4 - <i>Modos transicionales ($2B_{1g} + 2E_g$)</i>

Por otra parte, la muestra sin irradiar en la Figura 4, presenta un segunda fase correspondiente a ZrO_2 monoclinico (grupo espacial C_2^{h5} ($P2_1/c$); $Z=4$), tal como fue observado mediante DRX. Las señales en 1277 cm^{-1} son debido al balanceo simétrico de los enlaces $=C-H$, 1367 y 1402 cm^{-1} que corresponden a una flexión por formación del enlace C-H estos últimos atribuidos a la contaminación por CO_2 atmosférico [21].

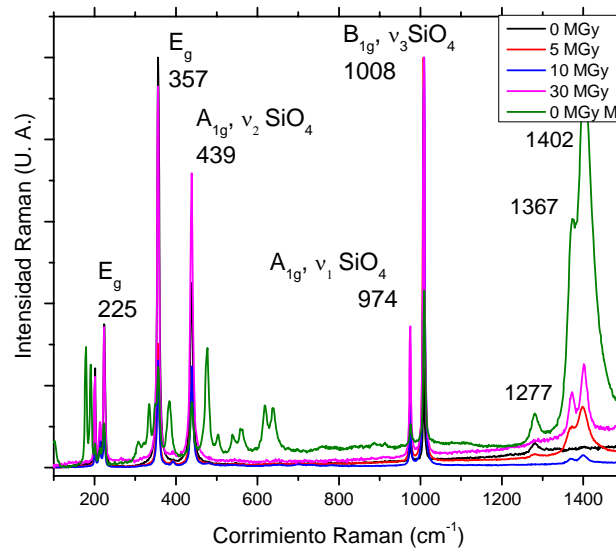


Figura 4. Espectro Raman del $ZrSiO_4$ irradiado y sin irradiar

La segunda fase encontrada en la muestra sin irradiar es atribuida a la inducción de energía por activación de los lantánidos encontrados en el análisis por activación neutrónica, creando desplazamientos atómicos que descomponen de manera incipiente al zircón en fracciones de ZrO_2 , SiO_2 y $ZrSiO_4$, como fueron también revelados en los patrones de difracción de rayos X.

Por otra parte, en la también se observa una fase secundaria correspondiente al ZrO_2 monoclinico, en este cerámico existen 18 modos vibraciones en Raman descritos como $\Gamma = 9A_g(R) + 9B_g(R) + 8A_g(IR \parallel b) + 7B_g(E \perp b)$, tal como se muestra en la Figura 5 [22, 23].

Se observaron comportamientos similares en las muestras irradiadas a 5MGy, 10MGy y 30MGy (Figura 5), que sugieren un reordenamiento de la estructura, el cual es reflejado en el incremento de la anchura media de los picos, la disminución de la intensidad Raman total en los modos internos ν_3 [SiO_4] en 1008 cm^{-1} y $A_{1g} \nu_1$ [SiO_4] a 974 cm^{-1} y la simetría de las bandas cambia cuando hay una re-estructuración, este fenómeno es conocido como daño por metamictización [24].

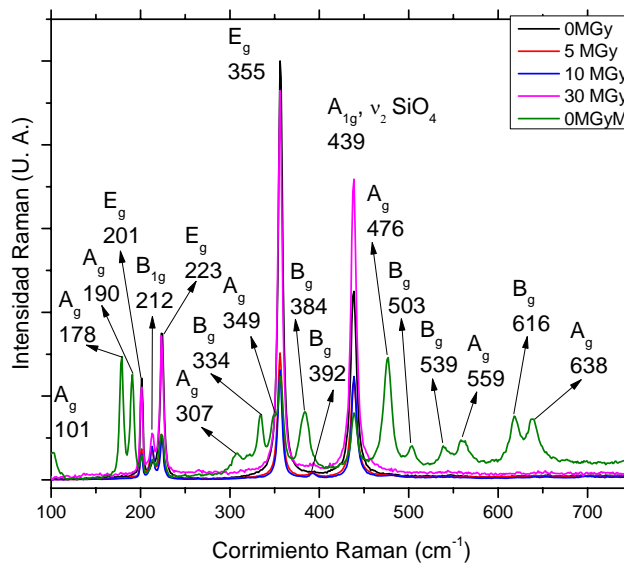


Figura 5. Espectro Raman del $ZrSiO_4$ irradiado y sin irradiar ($100\text{-}750 \text{ cm}^{-1}$)

3.2.4 Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X

La evaluación de las curvas obtenidas por XPS de las regiones en O1s (538-526 eV), Si2p (108-98 eV) y Zr3d (191-178 eV), permitió identificar los tipos de enlace químicos presentes en la superficie del $ZrSiO_4$ sin irradiar y expuesto a diferentes dosis de radiación gamma (5, 10 y 30 MGy).

Los efectos de la radiación inducen desordenes atómicos que probablemente se manifiestan en el orbital O1s, son menos observables en Si2p y también en la banda de valencia de Zr3d, provocando cambios en la forma de las líneas de XPS, los cuales son causados por la formación de defectos; lo

cual incrementa la covalencia de los enlaces interatómicos cerca de las vacancias de oxígeno. Por lo que, se realizaron ensayos por deconvolución fijando la anchura media del pico (FWHM) para el orbital O1s de 1.4 a 2.9, el orbital Si2p de 1.7 a 2.4 y el orbital Zr3d en el intervalo 1.4 a 2.0 según lo reportado [2, 25].

El análisis por deconvolución del orbital Zr3d mostrado en la Figura 6, ilustra que el principal estado energético, corresponde al doblete en $3d_{3/2}$ (184 ± 1 eV) y $3d_{5/2}$ (182 ± 1 eV), que se mantiene en la muestra sin irradiar y expuesta a diferentes dosis de radiación gamma (5, 10 y 30 MGy) característico de los enlaces del $ZrSiO_4$, sin embargo a 10MGy refleja una segunda fase correspondiente al ZrO_2 monoclinico en $3d_{3/2}$ y $3d_{5/2}$ en 186 ± 1 eV.

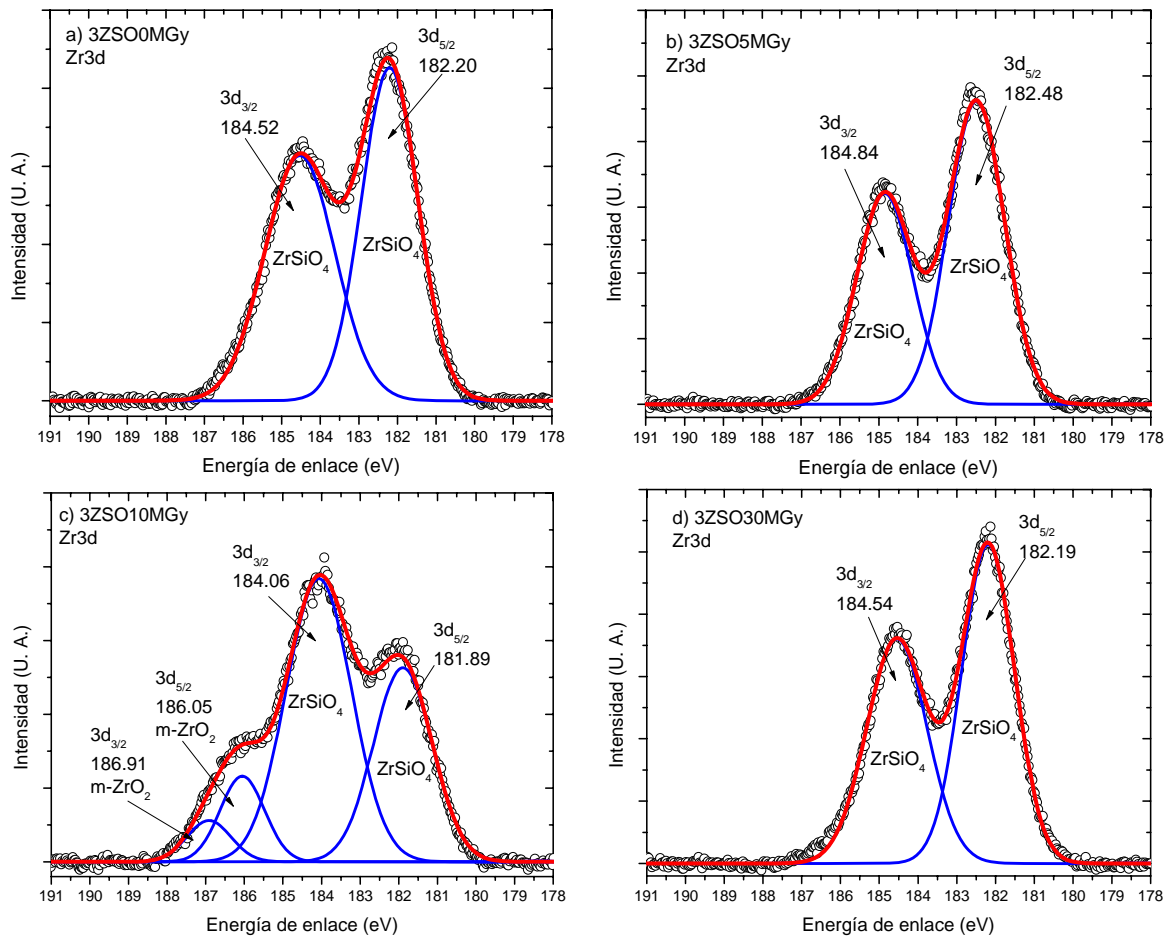


Figura 6. Deconvolución de los estados energéticos para el orbital Zr3d del $ZrSiO_4$

4. CONCLUSIONES

Mediante DRX se identificó que el material extraído a partir de arena de mar corresponde a la fase de ortosilicato de zirconio o zircón ($ZrSiO_4$) lo cual fue corroborado por las diferentes técnicas de caracterización estructural empleadas tales como, FTIR, XPS y espectroscopia Raman.

Se identificó una fase secundaria correspondiente al ZrO_2 monoclinico, esta fracción es atribuido a un proceso de metamictización debido decaimiento alfa de los isotopos de U y Eu contenidos como dopantes en la estructura, potencializando el efecto cuando es sometido a radiación gamma.

Las pruebas de caracterización realizados al $ZrSiO_4$ revelaron que durante el proceso de exposición a la radiación gamma, generalmente coexisten tres fases encadenadas ($ZrSiO_4$, dodecaedros de ZrO_2 monoclinico y tetraedros de SiO_2 , que a mayor dosis de radiación (30 MGy), son reordenadas conservando la estructura del $ZrSiO_4$ cuando aún no ha sido irradiado, este comportamiento fue observado en las técnicas de DRX y XPS y espectroscopia Raman.

El $ZrSiO_4$ expuesto a diferentes dosis de radiación gamma, podría ser propuesto como material para la construcción de las barreras de ingeniería ya que no se observan alteraciones drásticas que alteren su estructura o propiedades físicas.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Dra. Suilma Maricela Fernández Valverde por su apoyo en la discusión de resultados. Por su apoyo experimental al Dr. Pedro Ramón González Martínez y al M. en C. Héctor Carrasco Ábrego y a los técnicos del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

REFERENCIAS

1. M. Zhang , E. K. H. Salje, I. Farnan, A. Graeme-Barber, P. Daniel, R. C. Erwing, A. M. Clark y H. Leroux, “Metamictization of zircon: Raman spectroscopic study”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **12** , p. 1915–1925 (2000).
2. T. V. Shchapova, S. L. Votyakov, M. V. Kuznetsov y A. L. Ivanovskii, “Effect of radiation defects on the electronic structure of zircon by X-Ray photoelectron spectroscopy data”, *Journal of Structural Chemistry*, **51**, p. 657-662 (2010).
3. G. García, E. Ordóñez, R. Drot y M. Pérez, “Purificación y caracterización del zircón y su posible uso en el confinamiento de desechos radiactivos”, *Informacion Tecnológica*, **15**, p. 39-45 (2004)
4. A. Kaiser, M. Lobert y r. Telle, “The thermal stability of zircon ($ZrSiO_4$)”, *Journal of the European Ceramic Society*, **28**, p. 2199-2211 (2008).
5. S. Ellsworth, A. Navrotsky y R. C. Ewing, “Energetics of radiation damage in natural zircon ($ZrSiO_4$)”, *Physics and Chemistry of Minerals*, **21**, p. 140-149 (1994).

6. A. Wittmann, T. Kenkmann, R. T. Schmitt y D. Stöffler, “Shock-metamorphosed zircon in terrestrial impact craters”, *Meteoritics & Planetary Science*, **41**, p. 433-454 (2006).
7. J. A. Woodhead, G. R. Rossman y L. T. Silver, “The metamictization of zircon: Radiation dose-dependent structural characteristic”, *American Mineralogist*, **76**, p. 74-82 (1991).
8. M. I. Arregoitia, R. García-Alamilla, J. M. Hernández-Enríquez, J. G. Sandoval-Robles y F. Paraguay-Delgado, “Síntesis y caracterización de óxido de circonio modificado con ión fosfato”, *Superficies y Vacío*, **26**, p. 13-17 (2013).
9. G. Socrates, *Infrared and Raman characteristic group frequencies: Tables and charts*, John Wiley & Sons Ltd., Londres, Inglaterra (2001).
10. L. Fernández-Carrasco y T. Vázquez, “Aplicación de la espectroscopía infrarroja al estudio de cemento aluminoso”, *Materiales de construcción*, **46**, p. 54-65 (1996).
11. R. M. Silverstein, G. C. Bassler y T. C. Morrill, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, John Wiley and Sons, New York, USA (1981).
12. E. Ordoñez-Regil, A. Contreras-Ramirez, S. M. Fernández-Valverde, P. R. González-Martínez y H. Carrasco-Ábrego, “Crystal growth and thermoluminescence response of $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ at high gamma radiation doses”, *Journal of Nuclear Materials*, **443**, p. 417-423 (2013).
13. M. Zhang y E. K. H. Salje, “Infrared spectroscopic analysis of zircon: Radiation damage and the metamict state”, *Journal of physics: Condensed Matter*, **13**, p. 3057-3071 (2001).
14. L. Nasdala, A. Beran, E. Libowitzky y D. Wolf, “The incorporation of hydroxyl groups and molecular water in natural zircon (ZrSiO_4)”, *American Journal of Science*, **301**, p. 831-857 (2001).
15. E. Rodríguez-Castellón, A. Jiménez-López, P. Maireles-Torres, D. J. Jones, J. Rozière, M. Trombetta, G. Busca, M. Lenarda y L. Storaro, “Textural and structural properties and surface acidity characterization of mesoporous silica-zirconia molecular sieves”, *Journal of Solid State Chemistry*, **175**, p. 159-169 (2003).
16. J. E. Mejía, J. O. Bolaños y J. E. Rodríguez, “Uso de la espectroscopia IR para estudiar la transformación térmica que experimenta una arcilla caolinítica”, *Escuela de Ingeniería de Antioquia*, **18**, p. 91-103 (2012).
17. A. Gucsik, M. Zhang, C. Koeberl, E. K. H. Salje, S. Redfern y J. Pruneda, “Infrared and Raman spectra of ZrSiO_4 experimentally shocked at high pressure”, *Minerogical Magazine*, **68**, p. 801-811 (2004).
18. Y. W. Long, L. Yang, Y. Yu, F. Y. Li y Y. X. Lu, “High-pressure Raman scattering study on zircon- to scheelite-type structural phase transitions of RCrO_4 ”, *Journal of Applied Physics*, **103**, p. 093542 (2008).
19. T. Geisler, B. E. Burakov, V. Zirlin, L. Nikolaeva y P. Pöml, “A Raman spectroscopic study of high-uranium zircon from the Chernobyl (lava)”, *European Journal of Mineralogy*, **17**, p. 883–894 (2005).
20. A. M. Grüneberger, C. Schmidt, S. Jahn, D. Rhede, A. Loges y M. Wilke, “Interpretation of Raman spectra of the zircon-hafnon solid solution”, *European Journal of Mineralogy*, **28**, p. 721-733 (2016).
21. I. H. Boyaci, H. T. Temiz, H. E. Genis, E. A. Soykut, N. N. Yazgan, B. Güven, R. S. Uysal, A. G. Bozburt, O. Torun y F. C. Durak, “Dispersive and FT-Raman spectroscopic methods in food analysis”, *Royal Society of Chemistry*, **5**, p. 56606-56624 (2015).

22. S. Jayakumar, P. A. Ananthapasmanabhan, K. Purumal, T. K. Thiyagarajan, S. C. Mirshra, L. T. Su, A. L. Y. Tok y J. Guo, "Characterization of nano-crystalline ZrO_2 synthesized via reactive plasma processing", *Materials Science and Engineering: B*, **176**, p. 894-899 (2011).
23. V. G. Keramidas y W. B. White, "Raman scattering study of the crystallization and phase transformations of ZrO_2 ", *Journal of The American Ceramic Society*, **57**, p. 22-24 (1974).
24. V. Presser y C. Glotzbach, "Metamictization in zircon: Raman investigation following a Rietveld approach. Part II: Sampling depth implication and experimental data", *Journal of Raman Spectroscopy*, p. 499-508 (2009).
25. M. J. Guittet, J. P. Crocombette y M. Gautier-Soyer, "Bonding and XPS chemical shifts in $ZrSiO_4$ versus SiO_2 and ZrO_2 : Charge transfer and electrostatic effects", *Physical Review B*, **63**, p. 125117 (2001).

Dinámica de la solidificación de material fundido en el fondo de la vasija de un reactor durante un accidente severo

Marco A. Polo^A

UAM - Cuajimalpa

Vasco de Quiroga 4871, Contadero, 05370 Ciudad de México, CDMX

^Aplabarríos@hotmail.com

Heriberto Sánchez Mora^B, **Sergio Quezada García**^C

^{A B C}UNAM Facultad de Ingeniería

Av. Universidad No. 3000, C.U., CDMX, 04510

^Bheribertosanchez7@hotmail.com; ^Csequga@gmail.com

Javier Ortiz Villafuerte^D

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

Carretera Federal México a Toluca La Marquesa s/n,

Ocoyoacac Estado de México C.P. 52750

^Djavier.ortiz@inin.gob.mx

Resumen

Durante un accidente severo, en un reactor nuclear, se funde el núcleo del reactor debido al calor de decaimiento. Este material fundido se relocaliza en el pleno inferior de la vasija, específicamente en el fondo de ésta. El material fundido tiene que ser refrigerado para así mantener la integridad de la estructura del fondo de la vasija, esta refrigeración se lleva a cabo debido al agua residual localizada en el fondo de la vasija. El efecto de refrigeración depende principalmente de tres procesos de transferencia de calor: 1) remoción de calor entre las superficies del lecho de escombros y el agua residual que la rodea; 2) la remoción de calor del lecho de escombros por el agua residual que ingresa a través de los poros del lecho; y 3) la remoción de calor por el agua que posiblemente penetra entre la pared del fondo de la vasija. En este trabajo se analiza el tercer proceso, así se presenta el desarrollo de un modelo matemático en una dimensión para simular los procesos de la transferencia de masa y energía durante la refrigeración del material fundido acumulado en el fondo de la vasija.

1. INTRODUCCIÓN

Los Accidentes Severos (AS) en las Plantas de Potencia Nuclear (PPN) son eventos poco probables pero con consecuencias graves, como el mostrado recientemente por el accidente ocurrido en abril de 2011 en las PPNs japonesas de Fukushima, donde todos los sistemas de protección fallaron durante el accidente. Bajo la situación de pérdida total de energía eléctrica (SBO), es posible que no

funcionen los sistemas de remoción de calor residual, esto provoca la evaporación del refrigerante y la acumulación de vapor dentro de la vasija de presión (RPV). Durante el descubrimiento de la región activa del núcleo, como resultado de la interacción refrigerante-combustible, inicialmente se genera hidrógeno, el cual es un gas incondensable, finalmente el núcleo se funde y es convertido en un lecho de partículas profundo en el fondo de la vasija.

Por otro lado, en un reactor de agua ligera (LWR), los Sistemas de Refrigeración de Emergencia (ECCS) son diseñados para proporcionar refrigeración para diferentes accidentes postulados incluyendo el Accidente de Base de Diseño de Pérdida de Refrigerante (LOCA). Sí se asume que los sistemas ECCS no funcionan, el núcleo sería refrigerado inadecuadamente y podría fundirse. El material del núcleo fundido formará un lecho de partículas constituido por escombros del núcleo en el fondo de la vasija o en la cavidad del reactor.

En este trabajo se analiza el proceso de remoción de calor y refrigeración del material fundido acumulado en el fondo de la vasija por el agua que posiblemente penetra entre la pared del fondo de la vasija y el material fundido. Se presenta el desarrollo de un modelo matemático en una dimensión para simular los procesos de la transferencia de masa y energía durante la refrigeración del material fundido acumulado en el fondo de la vasija.

El objetivo de la siguiente sección es presentar los principales eventos durante la progresión de un accidente severo, desde el inicio de la oxidación hasta su relocalización en el fondo de la vasija del reactor.

2. PROGRESIÓN DE LA FUNDICIÓN DEL NÚCLEO

Los AS en las PPN pueden ser ocasionados por eventos internos o externos, con la característica común de la falta de refrigerante debido a la falla de los sistemas de refrigeración del reactor, los cuales proporcionan una adecuada remoción del calor residual del núcleo, y por múltiples disfunciones generadas por falla de los equipo y/o error humano, incluyendo el fracaso de los procedimientos de seguridad (Xingwei et al., 2013). La pérdida de los sistemas de refrigeración conduce a la inadecuada refrigeración del núcleo y como resultado de la interacción refrigerante-combustible el núcleo podría dañarse y finalmente fundirse. Esto excede el Accidente de Base de Diseño (DBA) suficientemente como para causar falla en las estructuras y sistemas que son necesarios para asegurar la refrigeración apropiada del núcleo del reactor por medios normales (Kawahara et al., 2013).

La evolución del accidente puede verse en los cinco niveles de seguridad (OIEA, 2010), de los cuales al cuarto nivel se le denomina Gestión de Accidentes (GA) Durante este nivel se debe hacer frente a los Accidentes Severos que rebasen los DBA, así como asegurar que las emisiones radioactivas se mantengan tan bajas como sea posible.

Durante la fase temprana de un AS, la configuración de las varillas del núcleo permanece prácticamente intacta, mientras que la fase tardía se caracteriza por la pérdida gradual de la configuración original hasta presentarse la redistribución significativa y acumulación del material cerámico fundido en la región del núcleo, donde puede formar un lecho de partículas poroso, una alberca de material fundido y la formación de una cavidad. El material fundido se acumula en la región central, por encima de una corteza de material metálico solidificado (Reinke et al., 2006). Cuando la corteza falle el material será relocalizado al fondo de la vasija. La geometría exacta y el

proceso en los cuales el lecho de partículas de escombros del núcleo sería formado dependen de la secuencia del accidente y del diseño del reactor (Kawahara et al., 2013).

Frente a un accidente severo, la primera respuesta es mantener el núcleo del reactor refrigerado por cualquier medio disponible, dado que tal acción tiene efectos que pueden ser decisivos en la progresión del accidente, es necesario entender totalmente la progresión de daño al núcleo, (Espinosa-Paredes et al., 2012). Por ejemplo, si el agua de refrigeración del núcleo de emergencia entra a la vasija durante la fase inicial del proceso de fundición (re-inundación temprana) sólo habrá fragmentación limitada. A medida que aumente el retraso en el establecimiento de este flujo de agua (re-inundación tardía) mayor será la cantidad de los materiales fundidos y fragilizados. Por otro lado, en el núcleo se podrían formar configuraciones que no pueden ser refrigeradas, esto generará un mayor calentamiento del material hasta que finalmente caiga fundido al fondo de la vasija (Hofmann et al., 1989).

En los diferentes intervalos de temperatura hay diferentes daños al núcleo como se observa en la **Figura 1**. En el primer intervalo, el cual va de 1200°C a 1400°C, ocurre un daño local al núcleo y se forman bloques que probablemente puedan ser refrigerados. En el segundo rango que ocurre de 1760 °C a 2000 °C, ocurre un daño extendido en el núcleo lo que genera una mayor formación de masa fundida y regiones que ya no podrán ser enfriadas. Finalmente, en el rango que va de 2600 °C a 2850 °C, se tiene el colapso total de todos los materiales y la destrucción total de todas las regiones centrales las cuales se encuentran a altas temperaturas (Hofmann et al., 1989; Hofmann, 1999).

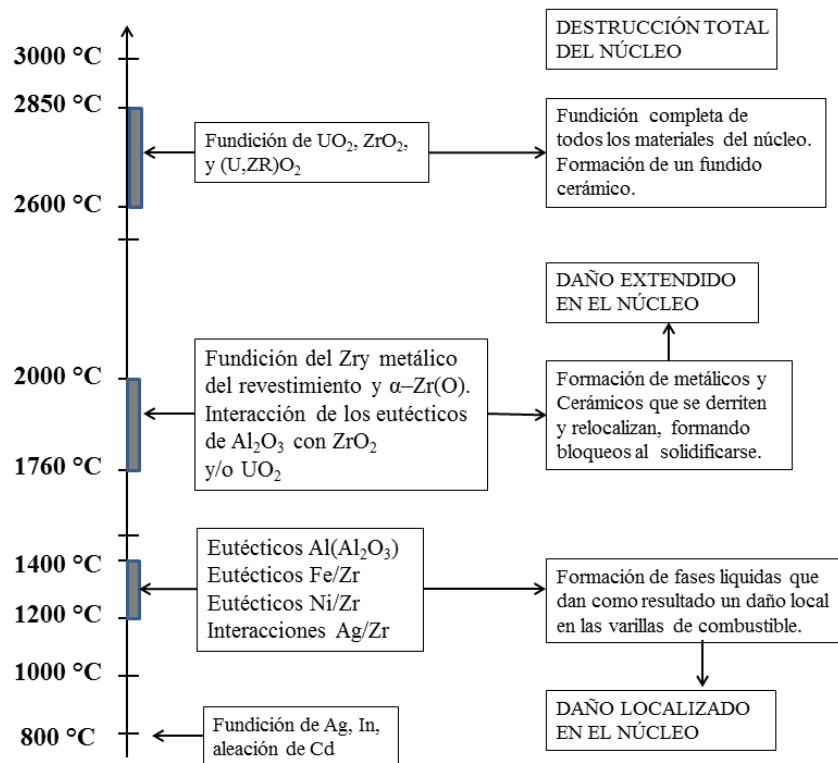


Figura 1: Posibles consecuencias que ocurren en el núcleo de un reactor nuclear LWR dañado durante un accidente severo (Hofmann et al., 1989; Hofmann, 1999).

El efecto de refrigeración, en estos casos, depende de tres procesos de transferencia de calor principalmente: 1) remoción de calor entre las superficies del lecho de escombros y el agua residual que la rodea; 2) la remoción de calor del lecho de escombros por el agua residual que ingresa a través de los poros del lecho; y 3) la remoción de calor por el agua que posiblemente penetra entre la pared del fondo de la vasija y el lecho de escombros, como se muestra en la **Figura 2**. En este trabajo se analiza el tercer proceso, así se presenta el desarrollo de un modelo matemático en una dimensión para simular y analizar los procesos de la transferencia de masa y energía durante la refrigeración del material fundido acumulado en el fondo de la vasija.

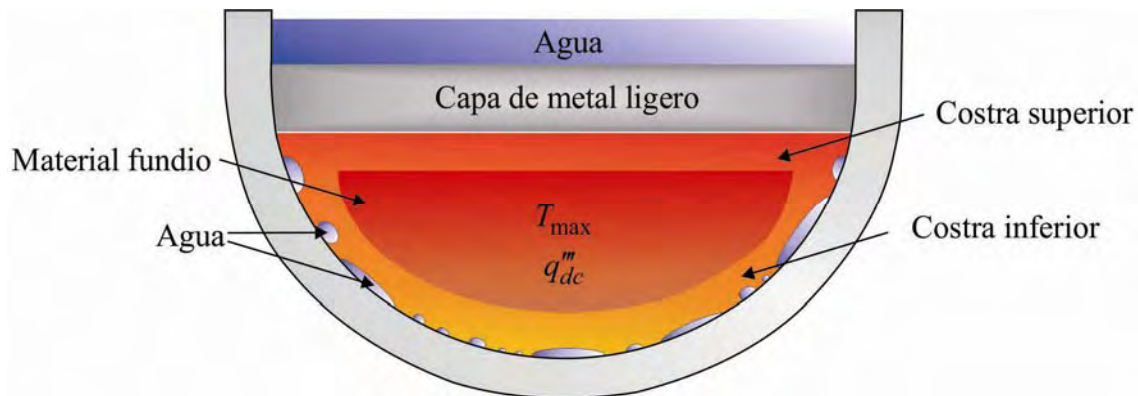


Figura 2. Pequeña fracción de agua atrapada en el fondo de la vasija.

3. MODELO MATEMÁTICO

El modelo matemático desarrollado incluye: un modelo de la alberca de material fundido y el agua remanente; y un modelo el cual considera el caso en que quedarán atrapadas pequeñas fracciones de agua entre el material fundido y el fondo de la vasija del reactor, como lo muestra la **Figura 2**. Esta masa de agua, entre el material fundido y el fondo de la vasija, al ser calentada por el calor de decaimiento, cambia de fase produciéndose vapor. Este vapor genera una presión lo suficientemente fuerte para levantar el material fundido formando una cavidad por la cual circula agua-vapor que mantiene parcialmente refrigerado el material fundido y retrasa el progreso del AS. Para tener una aproximación del resultado se hace solo la solución para la corteza que crece en el fondo de la vasija.

El modelo matemático en una dimensión describe la transferencia de calor desde la alberca de material fundido con generación interna de calor hacia la corteza que lo rodea. Se considera que la alberca de material fundido es una mezcla homogénea y tiene la misma composición del material solidificado que forma la corteza, en consecuencia comparten las mismas propiedades termo-físicas.

a) *Material fundido y costra*

El modelo matemático para el crecimiento de la costra considera la transferencia de calor de la parte

inferior del material fundido hacia el agua que está atrapada en el fondo de la vasija, como se muestra en la **Figura 2**. Para la conducción de calor en la costra se considera,

$$\rho_s C p_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{k_s}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + q_{dc}''', \quad R_v - \delta(t) < r < R_v, \quad (1)$$

donde ρ es la densidad, Cp es la capacidad calorífica, t es la variable temporal, r es la componente radial, δ es el espesor de la costra, R_v es el radio interior de la vasija, T es la temperatura, k es la conductividad térmica, q_{dc}''' es la generación de calor por decaimiento y el subíndice s representa las propiedades asociadas a la costra. La Ec. 1 está sujeta a las siguientes condiciones de frontera,

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=R_v} = h_w (T_s(r, t) - T_{ws}), \quad r = R_v, \quad (2)$$

$$T_s(r, t) = T_m, \quad r = R_v - \delta(t) \quad (3)$$

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=R_v - \delta(t)} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial r} \Big|_{r=R_v - \delta(t)} = \rho_s \lambda_{sl} \frac{d\delta}{dt} \quad (4)$$

La Ec. 2 considera la transferencia de calor por convección entre la costra y el agua en el fondo de la vasija. h_w es el coeficiente convectivo entre la mezcla de vapor-agua, T_{ws} es la temperatura del agua. La Ec. 3 hace alusión a la temperatura en la interface entre el material fundido y la costra la cual es la temperatura de cambio de fase, T_m , el subíndice m asocia las propiedades al material fundido. La Ec. 4 modela el crecimiento de la costra, donde λ_{sl} es la energía de cambio de fase del material fundido de líquido a sólido y el subíndice l representa la parte líquida de la interface.

Mediante un balance de energía, el segundo término de la Ec. 4 es igual,

$$k_l \frac{\partial T_l}{\partial r} \Big|_{r=R_v - \delta(t)} = q_{dc}''' d\delta(t) \quad (5)$$

Bajo la consideración en la que temperatura en el material fundido es igual a la temperatura de cambio de fase, el término convectivo es despreciado en la Ec. 5. Por lo que, sustituyendo la Ec. 5 en la Ec. 4 la condición de frontera es;

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=R_v - \delta(t)} - q_{dc}''' d\delta(t) = \rho_s \lambda_{sl} \frac{d\delta}{dt} \quad (6)$$

La condición inicial para la Ec. 1 está dada por,

$$T_s(r, 0) = T_m \quad R_v - \delta(t) < r < R_v \quad (7)$$

La Figura 3 muestra un esquema de las Ecs. 1-7.

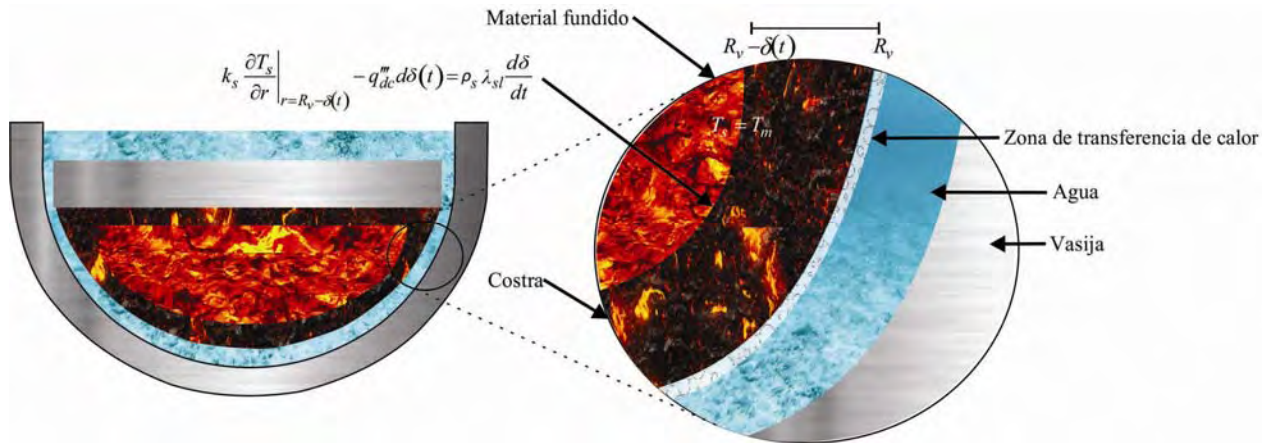


Figura 3. Diagrama esquemático de la vasija con material fundido.

b) *Interacción Corteza inferior-Gap-Vasija*

Si se asume que el calor proveniente de la superficie exterior de la corteza inferior, mencionado en la Ec. 2, se transfiere al agua que ingresa al *gap* en función del régimen de ebullición, radiación y por conducción del vapor. Este flujo de calor está dado por:

$$q_{gap} = h_w \left(T_s \Big|_{r=R_v} - T_{ws} \right) \quad (8)$$

donde h_w es calculado como,

$$\frac{1}{h_w} = \frac{\delta}{2k_s} + \frac{1}{h_{gap}} + \frac{\delta_{ves}}{2k_{ves}} \quad (9)$$

donde h_{gap} es el coeficiente de transferencia de calor desde la superficie exterior de la corteza inferior con el fluido, δ_{ves} es el espesor de la vasija y k_{ves} es la conductividad térmica de la vasija. El primer término de la Ec. 9 es la resistencia térmica de la corteza inferior; el segundo término considera los mecanismos de radiación, conducción del vapor y el régimen de ebullición; finalmente, el tercer término es la resistencia térmica de la pared de la vasija. Para calcular el coeficiente h_{gap} se considera que la transferencia de calor depende de la temperatura en exceso de la pared calentada como se muestra en la **Figura 4**. Este coeficiente es calculado de la siguiente manera.

$$h_{gap} = \varepsilon_{stw} \sigma_{stw} \frac{(T_s|_{r=Rv}^4 - T_{ves}^4)}{T_s|_{r=Rv} - T_{ves}} + \frac{k_{stw}}{\delta_{gap}} \quad (10)$$

donde T_{ves} es la temperatura de la vasija, ε emisividad, σ es la tensión superficial, δ_{gap} es el espesor de la capa de agua entre la vasija y la costra y el subíndice stw asocia las propiedades al vapor o agua dependiendo el régimen de ebullición.

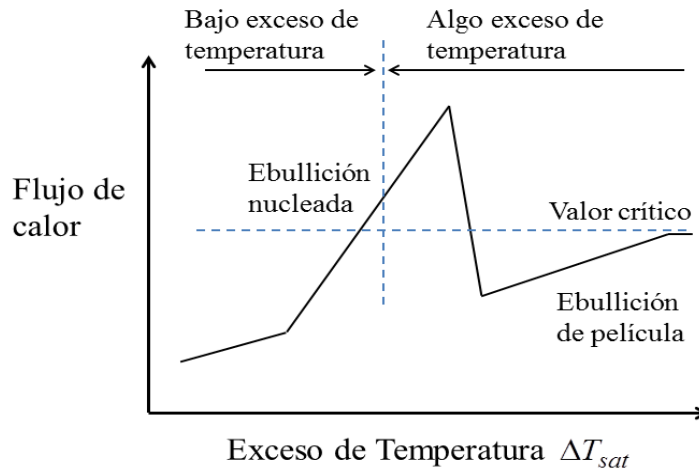


Figura 4. Transferencia de calor en función de la temperatura en exceso y del régimen de ebullición.

Para la transferencia de calor en los distintos regímenes de ebullición se usa la correlación propuesta por Kutateladze (1952):

$$Nu = C \left(\frac{k_w \Delta T_{sat}}{\rho_{st} h_{lg} \nu_w} \right)^{n1} \left(\frac{PL_L}{\sigma_w} \right)^{n2} \quad (11)$$

donde ΔT_{sat} es la temperatura en exceso, ν viscosidad cinemática, P presión del sistema, L_L se calcula a partir de $L_L = [\sigma / \{g(\rho_l - \rho_v)\}]$, h_{lg} es la entalpía de cambio de fase del agua (líquido a gas) y el subíndice w está asociado a las propiedades al agua. Para condiciones de baja temperatura en exceso, la constante numérica C y el número del exponente $n1$ son obtenidos de los datos de Fujita et al. (1988), a una presión de 0.1 MPa, número del exponente $n2$ es obtenido de los datos de Schmidt et al. (1988), a una presión de 10 MPa los valores son:

$$C = 1.1, \quad n1 = 0.3, \quad n2 = 0.32$$

Para condiciones de alta temperatura en exceso, la constante C y el número del exponente $n1$ son obtenidos de los datos de Henry y Hammersley (1996):

- Ebullición nucleada $C = 2.2, \quad n1 = -0.1, \quad n2 = 0.32$
- Ebullición de transición: $C = 1.2 \times 10^{14}, \quad n1 = -0.1, \quad n2 = 0.32$

Para $n2$ se utiliza el mismo valor de 0.32 de los datos de Schmidt et al. (1988), porque no hay datos para alta temperatura en exceso y alta presión. Cuando se tiene ebullición de película, el coeficiente de transferencia de calor es evaluado con la correlación de Berenson (1961):

$$h_{gap} = 0.425 \left[\frac{k_{st}^3 g (\rho_w - \rho_{st}) h_{lg}}{v_{st} (T_s|_{r=R_v} - T_{sat}) \sqrt{\sigma_w / g} (\rho_w - \rho_{st})} \right]^{1/4} \quad (12)$$

donde:

$$\Delta h_{st} = h_{lg} + 0.5 C p_{st} (T_s|_{x=R_v} - T_{sat}) \quad (13)$$

donde g representa la aceleración de gravedad y T_{sat} la temperatura de saturación del agua. La temperatura del fondo de la vasija, T_v , se considera constante, ya que al estar en contacto con el vapor de agua en la cavidad su valor está por cerca de la misma temperatura del vapor circundante.

c) Refrigeración permitida por la sección transversal superior del gap

Se considera que la remoción de calor a través de la superficie caliente está restringida por el régimen de ebullición, es decir, la cantidad de agua cerca de la pared calentada, y la capacidad de refrigeración que permite la parte superior final del *gap*. En la parte superior final del *gap* la refrigeración está restringida por la cantidad de agua que puede penetrar, debido al fenómeno de flujo contra corriente de vapor y agua (CCFL) que se presenta en esta parte del *gap* (Murase et al., 2001), como se muestra en la **Figura 5**.

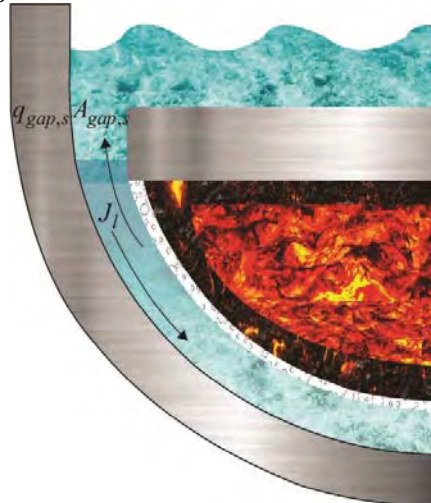


Figura 5. Fenómeno que se presenta durante la refrigeración del gap.

La tasa de transferencia de calor total a través del extremo superior del *gap* ($q_{gap,sup}A_{gap,sup}$) es obtenida del balance de masa y energía, descrito por,

$$q_{gap,sup}A_{gap,sup} = \delta_{gap}J_{st}h_{lg}A_{gap,sup} \quad (14)$$

$$\rho_{st}J_{st} = \rho_wJ_w \quad (15)$$

Donde $q_{gap,sup}$ es el flujo de calor en la parte superior del *gap*, $A_{gap,sup}$ área de la sección transversal superior del *gap*, J es la velocidad superficial. En este trabajo se considera que la transferencia de calor depende de la temperatura en exceso de la pared calentada y del régimen de ebullición. Por otro lado, también se considera el fenómeno de contracorriente de líquido y vapor, para esto, se utiliza la correlación de Kutateadze (1952) para considerar el CCFL:

$$q_{gap,sup}A_{gap,sup} = \left[\frac{1.2}{1 + \left(\frac{\rho_{st}}{\rho_w} \right)} \right]^2 \rho_{st}h_{lg} \left[\frac{g\sigma_{stw}(\rho_w - \rho_{st})}{\rho_{st}^2} \right]^{1/4} A_{gap,sup} \quad (16)$$

4. SOLUCIÓN NUMÉRICA Y RESULTADOS

Con la consideración del modelado para la dinámica de crecimiento de la costra inferior del material fundido en el fondo de la vasija de un reactor nuclear, se empleó para la solución de la Ec. 1 el método diferencias finitas discretizado a 24 nodos radiales, donde la distancia entre nodos radiales varía en función del crecimiento de la costra proporcionando una condición de frontera móvil. Una vez discretizada la Ec. 1, se emplea el algoritmo de Thomas para la solución del sistema de ecuaciones. Para la solución de la Ec. 6 se utilizó el método de Euler con un paso de integración temporal de $\Delta t=0.6s$.

El método de solución fue implementado en Python 2.7.14, con ayuda de las librerías de OpenGL se obtuvieron resultados gráficos que facilitan la interpretación del crecimiento de la costra del material fundido. En la Figura 6 se muestra el campo de temperaturas en la vasija.

4.1. Parámetros y propiedades físicas

Para las simulaciones numéricas de la refrigeración del material fundido acumulado en el fondo de la vasija durante un accidente severo, los valores de los parámetros y propiedades físicas usados, son presentados en la siguiente tabla.

Tabla 1. Parámetros usados en la simulación numérica.

Descripción	Parámetro	Valor
Radio interno de la vasija	R_v	2.3 m
Presión del agua en el <i>gap</i>	P	0.3701 MPa
Calor de decaimiento del material fundido	q_{dc}'''	8.5 kW/m ³
Temperatura inicial de la vasija	T_v	430.15 K

Temperatura inicial del agua	T_w	428.15 K
Temperatura de fundición	T_m	2840.15 K
Espesor del <i>gap</i> de agua	δ_{gap}	0.001 m
Número de nodos de la costra	n	24

4.2. Resultados de las simulaciones numéricas

En la Figura 6 se muestra la dinámica de crecimiento de la corteza mediante el perfil de temperaturas generado por la refrigeración proporcionada por el agua remanente, donde se observa las regiones que se encuentran a temperatura de solidificación del material y la región a temperatura de fusión. En la Figura 6a, el material relocalizado se encuentra casi en su totalidad fundido y comienza la refrigeración por el agua remanente; mientras que en la Figura 6b después al tiempo 76323.9 segundos el material se encuentra parcialmente solidificado y se observa una distribución de temperaturas; en la Figura 6c, se observa que el espesor de la corteza ha aumentado después de 156432.0 segundos. En las Figuras 6d y 6e sigue el procedimiento de crecimiento de la costra; finalmente, en la Figura 6f, después de 1056360.0 segundos (alrededor de 12 días) el material fundido se ha solidificado totalmente.

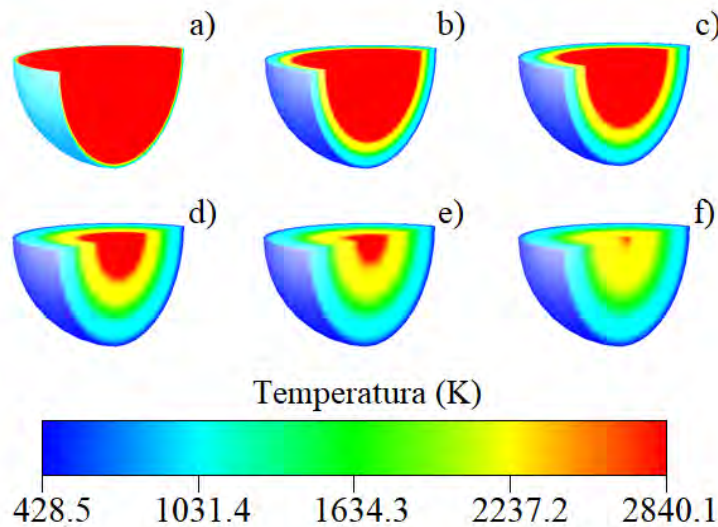


Figura 6. Perfil de temperatura de la vasija con material fundido.

a) Tiempo=3025.9 s, b) Tiempo=76323.9 s, c) Tiempo=156432.0 s, d) Tiempo 473754.0 s, e) Tiempo=732086.0 s y f) Tiempo=1056360.0 s.

En la Figura 7 se muestra el crecimiento del espesor de la costra.

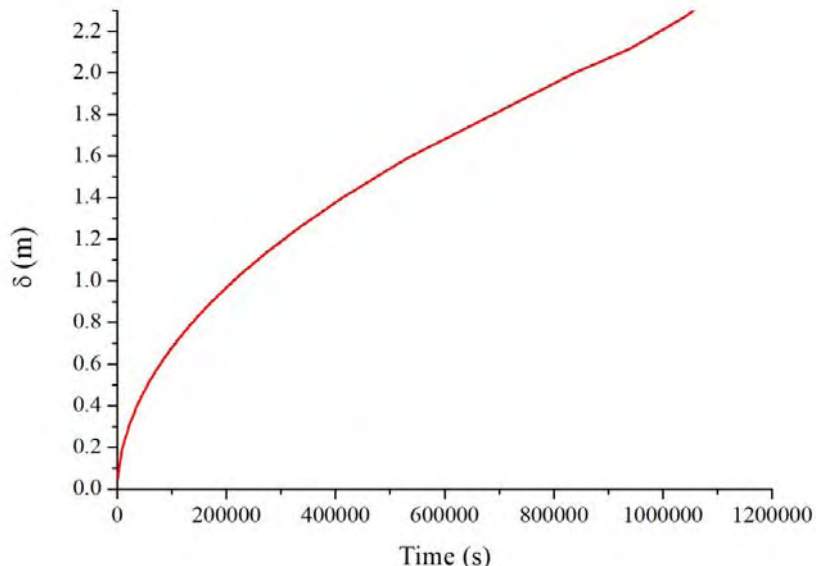


Figura 7. Crecimiento del espesor de la costra.

5. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos por la simulación muestran que la solidificación de la costra toma alrededor de 12 días, solo considerando la transferencia de calor al vapor de agua localizada en el fondo de la vasija y a la recirculación de la misma, como lo muestra la **Figura 6**. Por otro lado, la **Figura 7** muestra que el crecimiento de la costra inicialmente es más rápido y se reduce su pendiente a medida que el tiempo avanza. Esto se atribuye a que al inicio la transferencia de calor del material fundido al agua en el fondo de la vasija, debido a su cercanía, es más grande dado que el espesor de la costra no opone resistencia térmica y aumenta a medida que crece la costra.

Como trabajo futuro se tiene en mente en contemplar la costra superior de la vasija y una dinámica bidimensional en el pleno inferior.

REFERENCIAS

1. Berenson P.J, "Film Boiling Heat Transfer from a Horizontal Surface". *Journal of Heat Transfer* 83C, p. 351 (1961).
2. Cengel, Y., Boles, M., "Termodinámica". *Mc Graw Hill*, México, (2003). D.F.: McGraw-Hill Interamericana
3. Espinosa-Paredes G., Camargo-Camargo R., Nuñez-Carrera A., "Severe Accident Simulation of the Laguna Verde Nuclear Power Plant. *Science and Technology of Nuclear Installations* (2012).
4. Fujita Y., Ohta H., Uchida S., Nishikawa K., "Nucleate boiling heat transfer and critical heat flux in narrow space between rectangular surfaces". *International Journal of Heat and Mass Transfer* 31 (2). p. 229-230 (1988).

5. Henry R.E., Hammersley R.J., “Quenching of Mellow Surfaces in a Narrow Annular Gap”. 5th Int. Conf. *Simulation Methods in Nuclear Engineering*, Montreal, Canada, September. 1996.
6. Hofmann P., “Current knowledge on core degradation phenomena, a review”. *J. Nucl. Mater.* 270, 194–211 (1999).
7. Hofmann P., Hagen S., Schanz G., Skokan A., “Chemical Interactions of Reactor Core Material Up to Very High Temperatures”. *Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe KFK—4485 20(12)*, 75 p. (1989).
8. Kawahara K., Ishiwatari Y., Liu M., “Development of simple success criteria regarding alternative water injection for emergency response to long-term station blackout of BWR”. *Journal of Nuclear Science and Technology* 50(2), pp. 201–211 (2013).
9. Kutateladze S.S., “Heattransfer in Condensation and Boiling”. *U.S. AEC Rep., AEC-tr-3770* (1952).
10. Murase M., Kohriyama T., Kawabe Y., Yoshida Y., Okano Y., “Heat Transfer Models in Narrow Gap. Proceedings of ICONE 9”, *9th International Conference on Nuclear Engineering*, April 8-12 2001, Nice, France
11. OIEA, “Seguridad de los Reactores de Investigación”, Requisitos de seguridad, N° NS-R-4.
12. Okano Y., Kohriyama K., Yoshida Y., Murase M., “Modeling of debris cooling with annular gap in the lower RPV and verification based on ALPHA experiments”. *Nucl. Eng. Des.*, 223, p. 145–158 (2003).
13. Reinke N, Tilman Drath, Thilo v. Berlepsch, Hermann E. Unger, Marco K. Koch. “Formation, characterisation and cooling of debris Scenario discussion with emphasis on TMI-2”. *Nuclear Engineering and Design* 236, pp. 1955–1964 (2006).
14. Schmidt H., et al., “Experiments on heat removal in a gap between debris crust and RPV wall,” *1st European-Japanese Two-Phase Flow Group Meeting*, Portoroz, June 1–5, 1998.
15. Steinbrenner U., Reineke H.H., “Turbulent buoyancy convection heat transfer with internal heat sources”. *Proc. Inter. Heat Transfer Conf, 6th*, Toronto. Vol. 2, p. 305-310 (1978).
16. Whitaker S., 1999a. “The method of volume averaging”. *Kluwer Academic Publishers, The Netherlands*.
17. Whitaker S., 1999b. “Theory and Applications of Transport Porous Media: The Method of Volume Averaging”. *Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands*.
18. Wright, R.W., “Core melt progression: status of current understanding and principal uncertainties. In: Rogers, J.T. (Ed.)”, *Heat and Mass Transfer in Severe Nuclear Reactor Accidents*. Begell House, New York (1996).
19. Xingwei Shi, Xinrong Cao, Zhengzhi Liu, “Oxidation behavior analysis of cladding during severe accidents with combined codes for Qinshan Phase II Nuclear Power Plant”. *Annals of Nuclear Energy* 58, pp. 246–254 (2013).
20. Yun J.I., Suh K.Y., Kang C.S., “Heat and fission product transport in molten core material pool with crust”. *Nuclear Engineering and Design* 235, p. 2171–2181 (2005).

Modelo promedio volumétrico de temperaturas para un reactor nuclear de sales fundidas

Zaira I. Jiménez-Balbuena, Gilberto Espinosa-Paredes, Alejandría D. Pérez-Valseca y Alejandro Vázquez-Rodríguez

Área de Ingeniería en Recursos Energéticos, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa
San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, 09340, México.

zai_ijb579@hotmail.com; gepe@xanum.uam.mx; alejandria.peval@gmail.com;

vara@xanum.uam.mx

Resumen

En este trabajo, se utiliza el método de promedio volumétrico con la finalidad de plantear un modelo que describa el comportamiento de la temperatura en un reactor nuclear de sales fundidas de IV generación (MSR). Se plantea inicialmente un modelo de no equilibrio térmico de dos ecuaciones considerando dos fases dentro del reactor. Posteriormente, se reduce a uno de equilibrio térmico de una sola ecuación para fines prácticos. El objetivo de este trabajo es plantear un modelo matemático para entender y predecir el comportamiento de la temperatura dentro del núcleo de los MSRs. Con el modelo de una ecuación se obtuvo un perfil de temperatura dentro del núcleo del reactor, en la cual se observa que la temperatura máxima se presenta en el centro, debido a que se considera que las sales no se encuentran en movimiento. La temperatura máxima obtenida es tres grados más alta que la reportada en la literatura para el reactor de referencia, así mismo, la temperatura promedio de la sal se encuentra dos grados por encima de la temperatura de referencia.

1. INTRODUCCIÓN

Actualmente, alrededor del 15% de la energía eléctrica producida en el mundo se genera mediante energía nuclear, lo que reduce significativamente el impacto ambiental y ofrece una mayor diversidad de generación de electricidad que mejora la seguridad energética [1]. Como consecuencia a estos beneficios, se busca comprender cada vez más el funcionamiento de todas aquellas tecnologías utilizadas en la generación de energía nuclear, para esto se han desarrollado modelos que describen y predicen el comportamiento.

Una de las tecnologías innovadoras en el área de energía nuclear son los reactores nucleares de sales fundidas (MSR, por sus siglas en inglés). Esta tecnología se caracteriza por utilizar una mezcla de sales fundidas, en la cual, se disuelve el combustible también en forma de sal. Se pueden usar a muy baja presión debido a su alta temperatura de ebullición y a su baja presión de vapor [1], lo que los convierte en una gran opción debido a la baja tasa de generación de accidentes.

Sin embargo, actualmente no se cuenta con gran información acerca del funcionamiento de esta tecnología, por lo que es importante estudiar el comportamiento de este tipo de reactores. Uno de los principales estudios de interés resulta ser la transferencia de calor, el cual es necesario para estudiar el perfil de temperaturas de los MSR.

Por lo anterior, este trabajo tiene como finalidad plantear un modelo mediante el método de promedio volumétrico [2], con el cual sea posible conocer el comportamiento de la temperatura del reactor bajo ciertas consideraciones.

El modelo que se presenta a continuación es un modelo de no equilibrio térmico y su reducción a una ecuación [3] para estudiar el comportamiento de la temperatura del núcleo reactor. Debido a las diferentes propiedades de las mezclas de sales, se puede establecer un criterio válido y fundamentado para la elección éstas, basado en la eficiencia de las mismas para la transferencia de calor.

NOMENCLATURA

Fase β	Tetrafluoruro de Uranio (UF_4)
Fase σ	Mezcla de Fluoruro de Litio con Fluoruro de Berilio ($LiF-BeF_2$)
Φ_β	Fuente de calor en fase β [kJ]
Q_0	Calor liberado debido al cambio de fase [kJ]
ρ	Densidad de la fase [kg / m^3]
C_p	Calor específico [$kJ / kg \cdot K$]
T	Temperatura de la Fase [K]
k	Conductividad térmica [$W / m \cdot K$]
$A_{\beta\sigma}$	Área en la interface $\beta - \sigma$ [m^2]
ε	Porosidad [-]
V	Volumen Total [m^3]
$\underline{n}_{\beta\sigma}$	Vector normal unitario en la interface $\beta - \sigma$, apuntando de fase β a fase σ
$\langle T_\beta \rangle^\beta$	Promedio intrínseco de la temperatura Fase β [K]
$T_\beta^{\%}$	Desviaciones espaciales de la temperatura en la Fase β [K]
$\langle T_\sigma \rangle^\sigma$	Promedio intrínseco de la temperatura en la Fase σ [K]
$T_\sigma^{\%}$	Desviaciones espaciales de la temperatura Fase σ [K]
a_v	Área por unidad de volumen [$1 / m$]

h	Coeficiente de transferencia de calor $\left[W / m^2 \cdot K \right]$
$\underline{b}_{\beta\beta}$	Vector de Cerradura, campo que mapea $\nabla\langle T_{\beta} \rangle^{\beta}$ en $\mathcal{T}_{\beta}^{\circ} [m]$
$\underline{b}_{\beta\sigma}$	Vector de Cerradura, campo que mapea $\nabla\langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$ en $\mathcal{T}_{\beta}^{\circ} [m]$
s_{β}	Campo escalar que mapea $\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$ en $\mathcal{T}_{\beta}^{\circ} [-]$
$\underline{b}_{\sigma\beta}$	Vector de Cerradura, campo que mapea $\nabla\langle T_{\beta} \rangle^{\beta}$ en $\mathcal{T}_{\sigma}^{\circ} [m]$
$\underline{b}_{\sigma\sigma}$	Vector de Cerradura, campo que mapea $\nabla\langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$ en $\mathcal{T}_{\sigma}^{\circ} [m]$
s_{σ}	Campo escalar que mapea $\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$ en $\mathcal{T}_{\sigma}^{\circ} [-]$
$\underline{\underline{K}}_{\beta\beta}$	Tensor de conductividad térmica efectiva fase β $[W / m \cdot K]$
$\underline{\underline{K}}_{\sigma\sigma}$	Tensor de conductividad térmica efectiva fase σ $[W / m \cdot K]$
$\underline{\underline{K}}_{\beta\sigma}$	Tensor de conductividad térmica de coeficiente cruzado $[W / m \cdot K]$
$\underline{\underline{K}}_{\sigma\beta}$	Tensor de conductividad térmica de coeficiente cruzado $[W / m \cdot K]$
$\underline{\underline{K}}_{eff}$	Tensor de conductividad térmica efectiva $[W / m \cdot K]$
$(\rho Cp)_{eff}$	Capacidad de calor volumétrico efectivo de la mezcla $\left[kJ / m^3 \cdot K \right]$

2. REACTOR NUCLEAR DE SALES FUNDIDAS

Los reactores nucleares de sales fundidas son reactores de IV generación que utilizan una mezcla de sales como combustible. Estas sales, son químicamente estables e inertes y pueden disolver la mayoría de los materiales nucleares como el uranio y el torio. En este tipo de reactores, la sal combustible fluye alrededor del núcleo produciendo una reacción de fisión en cadena que permite la transferencia de calor. Hasta el momento existen varios modelos de este tipo de reactores los cuales pueden ser tanto de espectro rápido como de espectro térmico. Dentro de los reactores de espectro rápido se encuentra el reactor rápido de sales fundidas (MSFR, por sus siglas en inglés), el cual es utilizado como referencia en este trabajo.

Para el análisis se toma como referencia el reactor presentado en el trabajo de Igor Pioro [4]. El cual es un reactor de 3 GWth/1300 MWe, con un volumen total de sal de combustible de 18 m³, operado a una temperatura de entrada de 650 °C, una temperatura media de 700°C y una temperatura máxima de la sal de combustible de 750°C.

En este sistema la sal combustible–refrigerante basada en flúor fluye hacia arriba desde la parte inferior del núcleo hasta la salida en la parte superior del cilindro. La sal líquida retorna a la entrada en un tiempo de entre 3 y 4 segundos distribuyendo el total de la sal combustible entre el núcleo y la parte externa del circuito de combustible equitativamente. Por debajo y por encima de los reflectores

axiales centrales se puede encontrar, el núcleo, el cual está rodeado por una manta fértil como se muestra en la Figura 1.

El núcleo del MSFR es un cilindro compacto de 2.25 m de alto y 2.25 m de diámetro, rodeado axialmente por reflectores de acero, y radialmente por una manta fértil, una capa de carburo de boro y un reflector, donde las reacciones nucleares ocurren dentro de la sal de flúor líquido que actúa como combustible y como refrigerante. Una vista esquemática del núcleo puede observarse en la Figura 2.

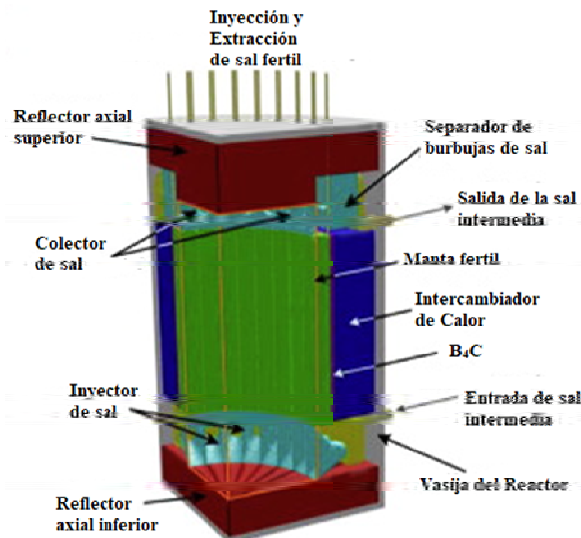


Figura 1. Diagrama esquemático de un MSFR [6].

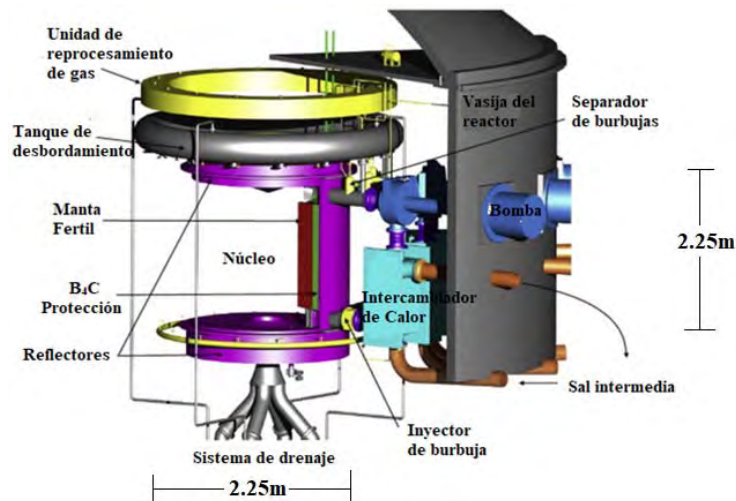


Figura 2. Núcleo de un MSFR [4].

3. METODOLOGÍA

La metodología a seguir en este trabajo se basa en el promedio volumétrico, que comúnmente se aplica a medios porosos [2]. En forma resumida, primero se realiza el planteamiento del sistema, se definen las simplificaciones y suposiciones, después se plantean las ecuaciones puntuales para cada fase. Específicamente los pasos principales de la metodología considerados en este trabajo son:

1. Descripción del sistema.
2. Suposiciones del sistema.
3. Método de Promedio Volumétrico:
 - Planteamiento de ecuaciones para cada fase
 - Condiciones de frontera
 - Promedio de ecuaciones puntuales
 - Obtención del Modelo no cerrado mediante la descomposición de Gray
 - Ecuación de las desviaciones (simplificada)
 - Propuesta de solución formal
 - Obtención del modelo cerrado

3.1. Descripción del Sistema

Para este trabajo se ha considerado un reactor nuclear de sales fundidas de IV generación, en el cual todas las sales fundidas representan el dominio y la fundición de las sales dentro del núcleo se ha tomado como volumen de promediado. En este reactor se tiene como combustible Tetrafluoruro de Uranio (UF_4) y como mezcla de sales para disolver el combustible Fluoruro de Litio con Fluoruro de Berilio ($LiF-BeF_2$). Las cuales son consideradas como fases para fines prácticos en el promedio volumétrico. El análisis se realiza durante la fundición de las sales, es decir, la mezcla no se encuentra en movimiento. Las fases del sistema son:

- Fase β : Tetrafluoruro de Uranio (UF_4)
- Fase σ : Mezcla de Fluoruro de Litio con Fluoruro de Berilio ($LiF-BeF_2$)

Cabe mencionar que se cuenta con una fuente de calor para que se pueda llevar a cabo la fundición de las sales dentro del sistema y también con liberación de calor debido al cambio de fase que se da dentro del reactor, la cual para fines de este trabajo se considera constante.

- Φ_β : Fuente de calor en fase β
- Q_0 : Calor liberado debido al cambio de fase

3.2. Suposiciones del Sistema

Para el sistema estudiado las consideraciones a realizar han sido las siguientes:

- Medio Poroso
 1. Rígido
 2. Homogéneo
- Fuente de calor se localiza en la fase β
- La fuente de calor se ha considerado constante para fines prácticos
- Se desprecia convección ya que en el momento en el que se realiza el estudio las sales apenas comienzan a fundirse y aún no se encuentran en movimiento.
- Se considera que las sales son un fluido incompresible, lo que implica que la densidad es constante.
- Para el cambio de fase se considera un $(-Q_0)$ para la fase β y un (Q_0) para la fase σ debido a que uno cede calor al otro, sin efectos de acumulación interfacial.

3.3. Método de Promediado Volumétrico

Para este caso el método de promedio volumétrico se aplicó para un modelo de no equilibrio térmico de dos ecuaciones, una para la fase β y otra para la fase σ . Posteriormente el modelo de dos ecuaciones se reduce un modelo de equilibrio térmico de una sola ecuación basado en ciertas consideraciones para fines prácticos de la solución numérica.

Las ecuaciones puntuales consideradas para cada una de las fases parten de la ecuación microscópica para la transferencia de calor. Para ambos casos se ha despreciado la convección debido a que el análisis se lleva a cabo cuando las sales comienzan a fundirse, lo que implica que estas no se encuentran en movimiento.

Ecuación puntual fase β

$$(\rho C_p)_\beta \frac{\partial T_\beta}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{k}_\beta \nabla T_\beta) = \Phi_\beta - Q_0 \quad (1)$$

Ecuación puntual fase σ

$$(\rho C_p)_\sigma \frac{\partial T_\sigma}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{k}_\sigma \nabla T_\sigma) = Q_0 \quad (2)$$

donde T es la temperatura, ρ es la densidad, C_p es la capacidad calorífica, Φ_β es la fuente calor de origen nuclear, Q_0 es el calor durante el cambio de fase.

Para este sistema se han considerado dos condiciones de frontera:

- No resistencia a la transferencia de calor
- Continuidad de flux

Lo que indica que la transferencia de calor se lleva a cabo sin resistencia en la interface $\beta - \sigma$ y que la temperatura y el componente normal del flux de calor son continuos en esta misma.

$$\text{CF1} \quad T_\beta = T_\sigma \quad \text{en} \quad A_{\beta\sigma} \quad (3)$$

$$\text{CF2} \quad -\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \underline{\nabla} T_\beta = -\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \underline{\nabla} T_\sigma \quad \text{en} \quad A_{\beta\sigma} \quad (4)$$

Aquí $\underline{n}_{\beta\sigma}$ es el vector normal unitario en la interface $\beta - \sigma$, apuntando de la fase β a la fase σ .

Las ecuaciones locales gobernantes en cada fase dadas por las Ecs. (1) y (2), son promediadas superficialmente (promedio de fase). Durante el proceso de promediar se intercambia el operador integral por el operador diferencial aplicando el teorema del promediado espacial, matemáticamente hablando, se basa en la Ley de divergencia de Gauss. Considerando un medio poroso rígido (es decir no existe transferencia de masa interfacial y la porosidad es constante), lo que da como resultado las siguientes ecuaciones promedio para cada fase.

Ecuación promedio para fase β

$$\varepsilon_\beta (\rho C_p)_\beta \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[k_\beta \left(\varepsilon_\beta \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} T_\beta dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \underline{\nabla} T_\beta dA = \Phi_\beta - Q_0 \quad (5)$$

Ecuación promedio para fase σ

$$\varepsilon_\sigma (\rho C_p)_\sigma \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[k_\sigma \left(\varepsilon_\sigma \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} T_\sigma dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \underline{\nabla} T_\sigma dA = Q_0 \quad (6)$$

Es importante apuntar y tomando como ejemplo la fase β , que el promedio fase o superficial $\langle T_\beta \rangle$ se relaciona con el promedio intrínseco $\langle T_\beta \rangle^\beta$ a través de la siguiente relación:

$$\langle T_\beta \rangle = \varepsilon_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta \quad (7)$$

4. MODELO DE CERRADURAS

Se puede observar que las ecuaciones promediadas [Ecs. (5) y (6)] incluyen temperaturas locales (T_β y T_σ) en los términos de integrales. Entonces, se lleva a cabo la descomposición de Gray [1], en la cual se descompone la variable local en un término promedio intrínseco ($\langle T_\beta \rangle^\beta$) y en un término de desviaciones espaciales (T_β^β) alrededor del promedio. Para la fase β como para la fase σ de la siguiente manera:

$$\text{Fase } \beta: \quad T_\beta = \langle T_\beta \rangle^\beta + T_\beta^\beta \quad (8)$$

$$\text{Fase } \sigma: \quad T_\sigma = \langle T_\sigma \rangle^\sigma + T_\sigma^\sigma \quad (9)$$

También se considera la siguiente expresión de flujo interfacial obtenida por Quintard y Whitaker [3]:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \underline{\nabla} T_\beta dA = -a_v h (\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma) \quad (10)$$

donde $a_v h$ es un coeficiente efectivo de la transferencia de calor. Entonces, al sustituir la descomposición de Gray Ecs. (8) y (9) y la de flujo interfacial de Quintard y Whitaker Ec. (10) en las Ecs. (5) y (6) estas pueden reescribirse como:

Fase β

$$\varepsilon_\beta (\rho C_p)_\beta \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[k_\beta \left(\varepsilon_\beta \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} T_\beta^\beta dA \right) \right] + a_v h (\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma) = \Phi_\beta - Q_0 \quad (11)$$

Fase σ

$$\varepsilon_\sigma (\rho C_p)_\sigma \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[k_\sigma \left(\varepsilon_\sigma \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} T_\sigma^\sigma dA \right) \right] - a_v h (\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma) = Q_0 \quad (12)$$

Es importante apuntar que $\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} dA$ y $\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} dA$ son nulos debido a que el sistema es rígido.

4.1 Ecuación de las desviaciones espaciales

Las ecuaciones de las desviaciones espaciales para los términos que aparecen en las ecuaciones (11) y (12), se construyen restando las ecuaciones locales (1) y (2) de las ecuaciones promedio correspondientes:

Fase β

$$\underline{\nabla} \cdot \left[k_{\beta} \left(\varepsilon_{\beta} \underline{\nabla} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \overset{\circ}{T}_{\beta} dA \right) \right] + a_v h \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right) = 0 \quad (13)$$

Fase σ

$$\underline{\nabla} \cdot \left[k_{\sigma} \left(\varepsilon_{\sigma} \underline{\nabla} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} \overset{\circ}{T}_{\sigma} dA \right) \right] - a_v h \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right) \quad (14)$$

Por otra parte, se pueden aplicar la descomposición espacial en las condiciones de frontera:

$$\text{CF1: } \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} = \overset{\circ}{T}_{\sigma} - \overset{\circ}{T}_{\beta} \quad (15)$$

$$\text{CF2: } -\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \underline{\nabla} \overset{\circ}{T}_{\beta} = -\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\sigma} \underline{\nabla} \overset{\circ}{T}_{\sigma} + \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla (k_{\beta} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - k_{\sigma} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}) \quad (16)$$

Un análisis de las Ecs. (13)-(16) nos indican que los términos fuentes (términos que generan perturbaciones microscópicas dentro del sistema) son:

- $\nabla \langle T_{\beta} \rangle^{\beta}$
- $\nabla \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$
- $\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$

4.2 Propuesta de solución formal

Considerando las tres fuentes localizadas en la sección anterior se proponen dos soluciones formales, una para cada una de las desviaciones de la temperatura en cada fase. Donde las \underline{b} representan vectores como variables de cerradura y las s escalares, las cuales nos hacen posible cerrar el modelo, pues permiten contar con el mismo número de ecuaciones que de incógnitas.

$$\dot{T}_\beta^0 = \underline{b}_{\beta\beta} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta + \underline{b}_{\beta\sigma} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + s_\beta \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \quad (17)$$

$$\dot{T}_\sigma^0 = \underline{b}_{\sigma\beta} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta + \underline{b}_{\sigma\sigma} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + s_\sigma \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \quad (18)$$

Las soluciones formales obtenidas se sustituyen tanto en las ecuaciones de las desviaciones para cada fase como en las condiciones a la frontera, con la finalidad de obtener los órdenes de magnitud de los tensores y los escalares propuestos en las soluciones formales, ya que, posteriormente esto permitirá simplificar el modelo cerrado obtenido.

4.3 Modelo cerrado

Para la obtención del modelo cerrado las soluciones formales (17) y (18) se sustituyen en los modelos no cerrados de cada fase respectivamente expresados en las ecuaciones (11) y (12), posteriormente se simplifican por medio de órdenes de magnitud, lo que resulta en un modelo de dos ecuaciones de no equilibrio térmico.

Fase β

$$\varepsilon_\beta (\rho C_p)_\beta \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[k_\beta \left(\varepsilon_\beta \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \underline{b}_{\beta\beta} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \underline{b}_{\beta\sigma} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma dA \right) \right] + a_v h \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) = \Phi_\beta - Q_0 \quad (19)$$

Fase σ

$$\varepsilon_\sigma (\rho C_p)_\sigma \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[k_\sigma \left(\varepsilon_\sigma \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} \underline{b}_{\sigma\beta} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\sigma\beta} \underline{b}_{\sigma\sigma} \cdot \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma dA \right) \right] + a_v h \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) = Q_0 \quad (20)$$

Para fines prácticos se definen los siguientes tensores de conductividad térmica:

$$\underline{\underline{K}}_{\beta\beta} = (\varepsilon_{\beta} k_{\beta}) \underline{\underline{I}} + \frac{k_{\beta}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} b_{\beta\beta} dA \quad (21)$$

$$\underline{\underline{K}}_{\sigma\sigma} = (\varepsilon_{\sigma} k_{\sigma}) \underline{\underline{I}} + \frac{k_{\sigma}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\sigma\beta} b_{\sigma\sigma} dA \quad (22)$$

$$\underline{\underline{K}}_{\beta\sigma} = \frac{k_{\beta}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} b_{\beta\sigma} dA \quad (23)$$

$$\underline{\underline{K}}_{\sigma\beta} = \frac{k_{\sigma}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\sigma\beta} b_{\sigma\beta} dA \quad (24)$$

5. MODELO DE DOS ECUACIONES DE NO EQUILIBRIO TÉRMICO

Sustituyendo la definición de los tensores de conductividad térmica dados por las Ecs. (21-24), las ecuaciones promedio para cada fase son las siguientes:

Fase β

$$\varepsilon_{\beta} (\rho C_p)_{\beta} \frac{\partial \langle T_{\beta} \rangle^{\beta}}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[\underline{\underline{K}}_{\beta\beta} \cdot \underline{\nabla} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} + \underline{\underline{K}}_{\beta\sigma} \cdot \underline{\nabla} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right] + a_v h \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right) = \Phi_{\beta} - Q_0 \quad (25)$$

Fase σ

$$\varepsilon_{\sigma} (\rho C_p)_{\sigma} \frac{\partial \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}}{\partial t} - \underline{\nabla} \cdot \left[\underline{\underline{K}}_{\sigma\beta} \cdot \underline{\nabla} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} + \underline{\underline{K}}_{\sigma\sigma} \cdot \underline{\nabla} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right] - a_v h \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right) = Q_0 \quad (26)$$

Estas dos ecuaciones constituyen el modelo de no equilibrio térmico.

6. MODELO DE UNA ECUACIONES DE EQUILIBRIO TÉRMICO

Sumando las ecuaciones de cada una de las fases dadas por las Ecs. (25) y (26) y considerando que $\underline{\underline{K}}_{\beta\sigma} \approx -\underline{\underline{K}}_{\sigma\beta}$, obtenemos el modelo de una ecuación:

$$\varepsilon_{\beta}(\rho C_p)_{\beta} \frac{\partial \langle T_{\beta} \rangle^{\beta}}{\partial t} + \varepsilon_{\sigma}(\rho C_p)_{\sigma} \frac{\partial \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\underline{\underline{K}}_{\beta\beta} \cdot \nabla \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} + \underline{\underline{K}}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right] = \Phi_{\beta} \quad (27)$$

Considerando equilibrio térmico $\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} = \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} = \langle T \rangle$, finalmente obtenemos:

$$(\rho C_p)_{eff} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\underline{\underline{K}}_{eff} \cdot \nabla \langle T \rangle \right] = \Phi_{\beta} \quad (28)$$

donde

$$(\rho C_p)_{eff} = \varepsilon_{\beta}(\rho C_p)_{\beta} + \varepsilon_{\sigma}(\rho C_p)_{\sigma} \quad (29)$$

$$\underline{\underline{K}}_{eff} = \underline{\underline{K}}_{\beta\beta} + \underline{\underline{K}}_{\sigma\sigma} \quad (30)$$

Haciendo la consideración del equilibrio térmico al sustituir las ecuaciones (21) y (22) la Ec. (30) puede reescribirse como:

$$\underline{\underline{K}}_{eff} = (\varepsilon_{\beta} k_{\beta}) \underline{\underline{I}} + \frac{k_{\beta}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} b_{\beta\beta} dA + (\varepsilon_{\sigma} k_{\sigma}) \underline{\underline{I}} + \frac{k_{\sigma}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\sigma\beta} b_{\sigma\sigma} dA \quad (31)$$

7. SOLUCIÓN DEL MODELO

En la sección anterior se presenta el desarrollo para obtención del modelo de una ecuación que permita obtener la temperatura en el MSFR. El modelo está dado por las Ecs. (28-39), y por las condiciones de frontera dadas por la Ec. (32), en donde se establecen que la temperatura en los bordes del reactor es igual a la temperatura de entrada de la sal al núcleo. En este caso se considera un geometría rectangular que simula el núcleo del reactor (Figura. 2).

$$T_{\beta} = T_{\sigma} = T_{entrada} \text{ en } x = 0, 2.25, \quad y = 0, 2.25 \quad (32)$$

Para fines de este trabajo, la Ec. (28) se resuelve en estado estacionario, considerando un término fuente constante. Las propiedades de cada fase se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Propiedades de las fases [1].

Propiedad	Fase β	Fase σ
$k \left[\frac{W}{m^{\circ}C} \right]$	1.96	22.72
$\rho \left[\frac{kg}{cm^3} \right]$	$6.7 \cdot 10^{-3}$	$2.64 \cdot 10^{-3}$
$Cp \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$	290.368	1563.144
$T_f [K]$	1309	1121.15
ε	0.225	0.775

El modelo se resuelve en Matlab, utilizando el PDE Toolbox, esta herramienta resuelve la ecuación utilizando diferencias finitas como método de solución.

8. . RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos, como se mencionó, la ecuación se resuelve en estado estacionario, obteniendo la temperatura de la mezcla a partir de los coeficientes efectivos de ambas fases.

En la Figura 3, se presenta la distribución de temperatura en el núcleo del reactor, considerando que la temperatura en la frontera del reactor es la temperatura a la que entra la sal al núcleo.

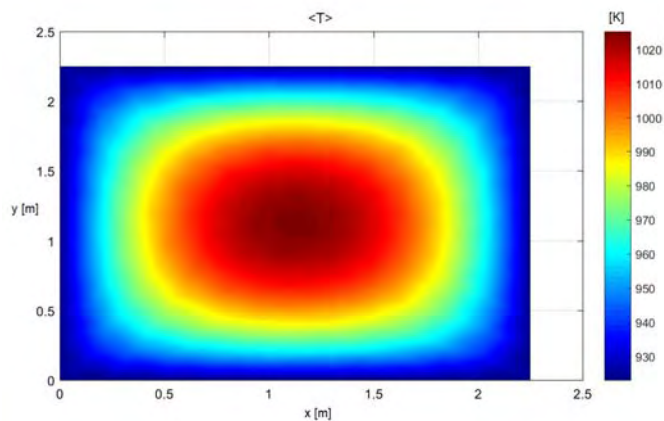


Figura 3. Distribución de temperatura dentro del núcleo del MSFR.

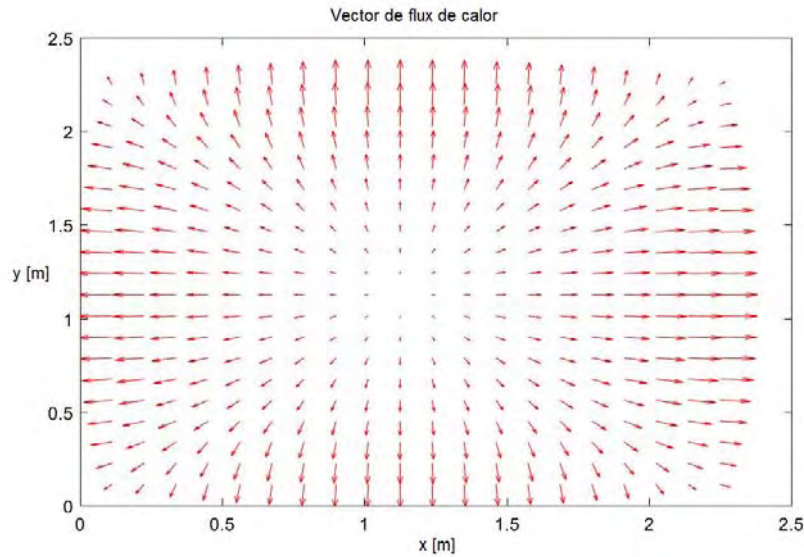


Figura 4. Vectores de flux de calor dentro del núcleo del MSFR.

Como se puede observar, la temperatura máxima se encuentra en el centro del núcleo, esta es de 1026.9 K, esta temperatura es promedio de las dos sales, no así promedio de todo el reactor. La temperatura de referencia es la temperatura máxima de la sal, reportada en diseño [4], la cual es de 1023.15 K (750°C), teniendo una diferencia de tres grados con la obtenida en este trabajo.

La temperatura promedio del núcleo es de 975.1 K, y la reportada en diseño es de 973.15K, teniendo una diferencia de dos grados.

En la Figura 4, se presentan los vectores de flux de calor, como se observa, parten del centro (zona más caliente) hacia lo extremos (zona menos caliente), como en este trabajo se consideró que la sal no está en movimiento, se nota una distribución uniforme de los vectores. Si se considerara que se encuentra en movimiento, la magnitud y dirección de algunos de estos se verían afectadas, así como la distribución de temperatura.

9. CONCLUSIONES

Se derivaron las ecuaciones de temperatura para un reactor de sales fundidas (MSR) partiendo de las ecuaciones locales e instantáneas. El método de promedio volumétrico se aplicó sistemáticamente en la mezcla de sales. Se identificaron y se proponen soluciones matemáticas de las variables de cerradura para proponer un sistema cerrado de ecuaciones promedio. Partiendo del modelo de dos ecuaciones promedio que describe efectos de no equilibrio térmico, se obtuvo una ecuación en equilibrio térmico en términos de propiedades efectivas.

El modelo de una ecuación permite conocer la temperatura promediada de las sales en el reactor, los resultados obtenidos muestran que la temperatura máxima obtenida es muy cercana a la temperatura

reportada en la literatura, teniendo una diferencia de tres grados. De la misma manera, la temperatura promedio del núcleo tiene una diferencia de dos grados respecto a la de la literatura.

Este modelo puede predecir el comportamiento del reactor bajo diversas condiciones, entre ellas el utilizar diferentes mezclas de sales, lo cual se propone como trabajo futuro, así como considerar las sales en movimiento, de forma que se obtenga un perfil de temperaturas más preciso en cada sección del núcleo.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el financiamiento otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) a través de una beca en la UAM. Además, los autores agradecen el apoyo económico recibido del proyecto estratégico No. 212602 del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética, CONACyT-SENER. En forma especial la Ing. Zaira agradece al Dr. Francisco Valdés Parada por el curso de modelación matemática aplicada a la ingeniería en posgrado de energía y medio ambiente, en el cual se abordó el tema de promedio volumétrico.

REFERENCIAS

1. Dolan, T., *Molten Salt Reactors and Thorium Energy*, Elsevier, Reino Unido (2017).
2. Whitaker, S., *The method of volume averaging*, Springer Science & Business Media, California, USA (2013).
3. Quintard, M., & Whitaker, S., "Transport in ordered and disordered porous media: volume-averaged equations, closure problems, and comparison with experiment". *Chemical Engineering Science*, **48**, pp. 2537-2564.(1993)
4. Piro, I., *Handbook of Generation IV Nuclear Reactors*, Elsevier, Cambridge, Inglaterra (2016).
5. Brovchenko, M., Heuer, D., Merle-Lucotte, E., Allibert, M., Capellan, N., Ghetta, V., Laureau, A., 2012. "Preliminary safety calculations to improve the design of Molten Salt Fast Reactor". *In: Proc. Int. Conf. PHYSOR*, Knoxville, Tennessee, USA, April 15–20, (2012).
6. Delpech, S., Merle-Lucotte, E., Heuer, D., Allibert, M., Ghetta, V., Le-Brun, C., & Picard, G. (2009). Reactor physic and reprocessing scheme for innovative molten salt reactor system. *Journal of fluorine chemistry*, **130**(1), pp. 11-17 (2009).

Transferencia simultánea de calor y cantidad de movimiento en el núcleo de un reactor nuclear rápido enfriado con sodio

Luis Ángel Larios-Ramírez, Alejandría D. Pérez-Valseca, Alejandro Vázquez-Rodríguez y Gilberto Espinosa-Paredes.

Área de Ingeniería en Recursos Energéticos, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, 09340, México.
luis_l281094@hotmail.com; alejandria.peval@gmail.com; vara@xanum.uam.mx;
gepe@xanum.uam.mx

Resumen

El objetivo de este trabajo, es realizar un análisis de la transferencia de calor y cantidad de movimiento en el núcleo de un SFR, aplicando distintas metodologías para aproximar los modelos. Se analizan dos casos, el Caso I es una aproximación utilizando la metodología de canal promedio, para obtener un canal representativo del núcleo, y el Caso II es tomar un arreglo de barras respetando la geometría del núcleo (hexagonal). Se desarrolla un modelo de transferencia de calor para la barra de combustible, un modelo de transferencia de calor por convección natural para el gap, el cual incluye un modelo de transferencia de cantidad de movimiento, un modelo de transferencia de calor para el encamisado y un modelo de transferencia de calor y cantidad de movimiento para el fluido refrigerante. Todos estos modelos se acoplan en la herramienta computacional Comsol Multiphysics, la cual permite resolver las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales mediante el método del elemento finito. Todos los modelos se resuelven en estado estacionario en 3D. Además, se considera una distribución axial de potencia para la barra de combustible y se considera flujo turbulento $\kappa \epsilon$ para el fluido refrigerante. Se presentan los perfiles de temperatura para las secciones del combustible, gap, encamisado y refrigerante, así como los campos de velocidad para el gap y el refrigerante y los perfiles de coeficiente de transferencia de calor dentro del gap, así como las temperaturas y velocidades promedio en las interfaces de cada sección. El valor promedio de temperatura del refrigerante para el Caso I es de 817.87 K y para para el Caso II es de 816 K, ambos valores son muy cercanos al valor de diseño, el cual es de 818 K. Para las temperaturas del combustible, gap y encamisado se obtuvieron resultados similares, en donde, para ambos casos, se obtienen temperaturas cercanas a las de diseño.

1.- INTRODUCCIÓN

Actualmente, las actividades de investigación y desarrollo de los reactores nucleares incluyen muchos temas prioritarios, los cuales requieren ser estudiados para asegurar el buen funcionamiento y seguridad, así como mejoras de las tecnologías existentes y futuras. Dentro de estos temas se encuentra la termo hidráulica del reactor, la cual es de gran importancia en el diseño del reactor. Como consecuencia de la investigación en esta área, se han desarrollado diversos códigos que permiten simular los procesos termo hidráulicos del reactor, cada uno con sus propias características y limitaciones, algunos ejemplos son[1]: el código TRIO-U, el cual es un código CFD en 3D desarrollado en Francia, cuya desventaja es el tiempo de computación, el código

COBRA IV se usa ampliamente para PWR, su precisión computacional y convergencia han sido reconocidos por muchos investigadores, algunos investigadores han realizado cambios a este código para realizar cálculos en reactores rápidos enfriados con metales líquidos, SUPERENERGY II es un código de análisis de subcanal, utilizado en Estados Unidos y desarrollado por Pacific Northwest Laboratory [2], sin embargo, este código no modela los fenómenos físicos dentro de las barras de combustible y tiene limitaciones respecto a las configuraciones del mismo. La mayoría de los códigos han sido desarrollados para reactores térmicos, pero también han sido modificados para ser utilizados en reactores rápidos enfriados con metales líquidos.

Dentro del análisis termo hidráulico en los reactores enfriados con metales líquidos (LMFR, por sus siglas en inglés), se han presentado diversos análisis, el más utilizado es el que se basa en la metodología de canal promedio. En este análisis, la temperatura, presión y velocidad en un canal se promedian. Las distribuciones de flujo y temperatura en el núcleo se obtienen modelando y resolviendo los balances de masa, cantidad de movimiento y energía del canal promedio [3]. De acuerdo con la literatura especializada, las aproximaciones de los modelos para describir los procesos de transferencia de calor en el combustible y refrigerante en el núcleo del reactor incluyen modelos reducidos, unidimensionales y análisis de dinámica de fluidos computacionales (CFD).

Actualmente, existen diversos códigos que simulan los procesos termo hidráulicos, basados en el análisis de canal promedio. Uno de los códigos termo hidráulicos más completos es el CATHARE 2 [4] utilizado por la Comisión de Energía Atómica de Francia, fue desarrollado originalmente para estudios de seguridad de reactores de agua a presión, pero ha sido recientemente ampliado a reactores enfriados por sodio.

SIM-SFR es un código utilizado por el Instituto Tecnológico de Karlsruhe (KIT), con el cual se realiza un análisis de transferencia de calor para una barra de combustible pico y para la barra promedio del núcleo resolviendo los modelos en forma paralela. Ha sido utilizado para modelar sistemas SFR como el Superphoenix [5] y sistemas LFR como el ELSY [6] y el LEADER [7].

El código TRACE es el último de una serie de códigos de sistema de mejor estimación desarrollados por la Comisión Regulatoria Nuclear de los Estados Unidos. Este código permite analizar el comportamiento termo hidráulico-neutrónico de estado estacionario y transitorio en reactores de agua ligera, sin embargo, se ha modificado para aplicaciones en sistemas enfriados con metales líquidos [8].

El código MATRA-LMR, se desarrolló específicamente para el análisis LMFR, por el Instituto de Investigación en energía Atómica de Corea. MATRA es un código de análisis termo hidráulico, basado en el enfoque de subcanales para calcular la entalpía y la distribución de flujo en los elementos del ensamble de varillas de combustible nuclear, para el estado estacionario, así como estados transitorios [9].

El objetivo de este trabajo es analizar la transferencia de calor y cantidad de movimiento en el núcleo de un reactor nuclear enfriado con sodio (SFR, por sus siglas en inglés) utilizado dos

aproximaciones. En la primera aproximación se aplica la metodología de canal promedio, con la cual, se obtiene un canal que representa todo el núcleo, en este caso se estima la cantidad de fluido que se tiene por barra. La segunda aproximación es un arreglo representativo de la geometría del núcleo, en el cual se integran un arreglo de 4 barras de combustible y en el centro del arreglo fluye el fluido refrigerante. Dichos modelos se implementan dentro del software Comsol Multiphysics.

Al utilizar Comsol Multiphysics se puede tener un modelo matemático más preciso para los modelos de transferencia de calor y cantidad de movimiento dentro de cada sección de la barra de combustible, es decir, se tomaron en cuenta los fenómenos físicos que ocurren dentro de la barra de combustible que otros modelos no presentan, por ejemplo la convección natural dentro del gap y el flujo turbulento que se presenta en el fluido refrigerante o el cambio de la potencia de la barra en función de la longitud de la misma.

Se decidió utilizar este software ya que permite resolver ecuaciones diferenciales en una o tres dimensiones espaciales y en una dimensión temporal si así lo requiere la simulación numérica. Para la simulación de la barra se utilizaron diferentes módulos de transferencia de calor, los cuales acoplan la transferencia de calor no isotérmica para simular la convección natural en el gap y flujo turbulento $\kappa \varepsilon$ en el fluido refrigerante, modelando también la transferencia de cantidad de movimiento.

2.- CASOS MODELADOS

En esta sección, se presentan las dos aproximaciones utilizadas para el análisis (casos modelados). Como se mencionó, la primera es aplicando la metodología de canal promedio, estimando la cantidad de fluido que se tiene por barra. La segunda aproximación es un arreglo representativo de la geometría del núcleo, en el cual se integran un arreglo de 4 barras de combustible y en el centro del arreglo fluye el fluido refrigerante. Para la simulación se considera como referencia un SFR, cuyas características principales se presentan en la en la Tabla 1.

Tabla 1. Características principales del SFR [10].

Nombre	Valor	Unidad	Descripción
r_a	0.1257	cm	radio de anulo
r_f	0.4742	cm	radio de la barra de combustible
r_g	0.4893	cm	radio del gap
r_c	0.5419	cm	radio del encamisado
r_h	0.63095	cm	radio hidráulico
L_{pin}	1.00566	m	Longitud de pin activo
P	3600000000	W	Potencia del reactor
m_0	0.15477	kg/s	Flujo másico a la entrada del canal promedio

T_f	1500	K	Temperatura de diseño del combustible
T_c	743	K	Temperatura de diseño del encamisado
T_{ref}	818	K	Temperatura de diseño del refrigerante

En ambos casos se toma en cuenta cada una de las secciones de la barra de combustible (combustible, gap y encamisado), así como el refrigerante. Las propiedades del helio y del sodio fueron tomadas de las funciones dadas en la librería de Comsol Multiphysics, y para el caso del combustible (MOX) se agregaron las propiedades en funciones de la temperatura de acuerdo al trabajo de Carbajo et al [11].

2.1. Caso I. Canal Promedio

Partiendo de la metodología de canal promedio [3], se modela una barra de combustible considerando la sección de combustible, gas y encamisado, así como la estimación del refrigerante correspondiente a dicha barra, el cual se modela alrededor de la barra.

Para estimar el refrigerante correspondiente a la barra de combustible, se considera el refrigerante que pasa entre tres barras adyacentes, considerando el área rayada de la Fig. 1a como el área de flujo. Este flujo estimado es distribuido alrededor de la barra, teniendo una capa equivalente de la misma geometría que la barra. En la Fig. 1b, se muestra un corte transversal del canal promedio, en donde se observan cada una de las secciones, es importante señalar que la zona I (ánulo de la barra) no ha sido considerada en los modelos de este trabajo, debido a la complejidad de ejecución del modelo completo. la zona II corresponde al combustible y es donde se encuentra el término fuente, la zona III es la zona del gap, la cual contiene helio, esta zona se modela con convección libre. La zona IV corresponde al encamisado, en donde se modela conducción y por ultimo tenemos la zona V, donde se encuentra el refrigerante, la cual se modela con transferencia de calor y momento.

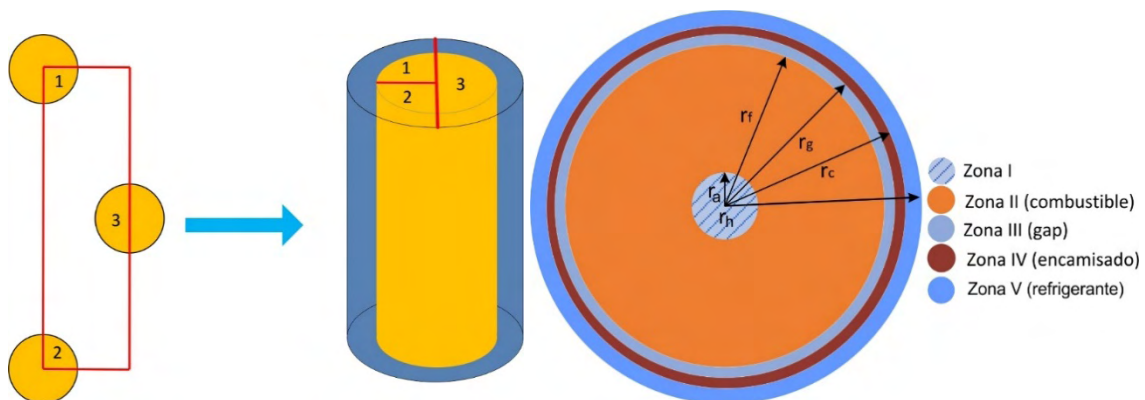


Figura 1. a) Estimación del área de flujo; b) Corte transversal del canal promedio.

2.2. Caso II. Arreglo de Barras

En este caso, se considera un arreglo basado en la geometría del núcleo, en la cual se toma secciones equivalentes a cuatro barras, de forma que sumadas den una barra, y el flujo contenido entre ellas es el refrigerante equivalente a la barra. De esta forma se será posible comparar ambos casos, ya que se modela una barra y su refrigerante equivalente.

En la Fig. 2 se presenta el arreglo de barras de combustible modelado en Comsol Multiphysics. En este caso, de manera similar al Caso I, se modelan las secciones del combustible, gap y encamisado en la barra, pero el refrigerante mantiene la geometría real del sistema.

3. MODELACIÓN MATEMÁTICA

A continuación, se presentan los modelos matemáticos considerados para cada una de las secciones, indicando las ecuaciones que gobiernan de acuerdo al fenómeno predominante, así como las condiciones a la frontera correspondientes. Estos modelos se programaron en Comsol Multiphysics, recordando que el transporte de energía se lleva a cabo mediante diversos mecanismos: convección, conducción y radiación térmica [12] y que la transferencia de calor por convección natural sobre una superficie depende de la configuración geométrica, así como de su orientación [13].

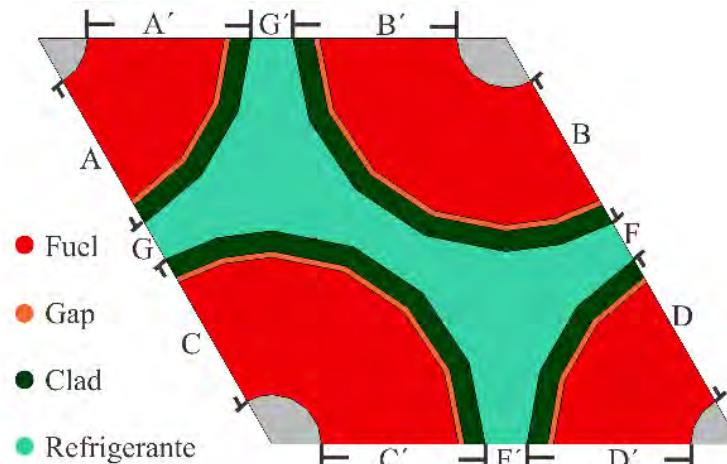


Figura 2. Arreglo de 4 barras de combustible.

Para ambos casos, los modelos aplicados para cada sección son los mismos, incluyendo la sección del refrigerante. Las condiciones a la frontera entre el combustible y gap, el gap y encamisado, y encamisado y refrigerante también son las mismas, la principal diferencia radica en la geometría y en las condiciones a la frontera aplicadas en el arreglo de cuatro barras.

3.1 Modelo matemático para el combustible.

Para la mayoría de los problemas ingenieriles la ecuación de energía calorífica resulta conveniente para operar en transmisión de calor [2]. En la sección del combustible (sección II), la conducción es el principal fenómeno, el cual se describe a partir de la Ec. (1).

$$-k_f \nabla^2 T = \phi(z) \quad (1)$$

donde k_f [$W / m \cdot K$] es la conductividad térmica del combustible, T [K] es la temperatura del combustible y $P(z)$ [MW / m^3] es el término fuente de la barra de combustible, en este caso, el término fuente es una relación entre la potencia de la barra y el volumen del combustible, es decir, la potencia por unidad de volumen. En este caso, la potencia tiene una distribución axial, la cual está en función de la longitud de la barra, para este trabajo se utiliza la distribución promedio obtenida del trabajo de Aufiero [14]. La función de distribución de potencia (Fig. 3) se implementó en Comsol mediante una función de interpolación. La principal condición a la frontera es continuidad del flux de calor entre el combustible y el gap:

$$n \cdot q_f'' = n \cdot q_g'' \quad (2)$$

En donde q'' [W / m^2] es el flux de calor, el subíndice f corresponde al combustible y g corresponde al gap.

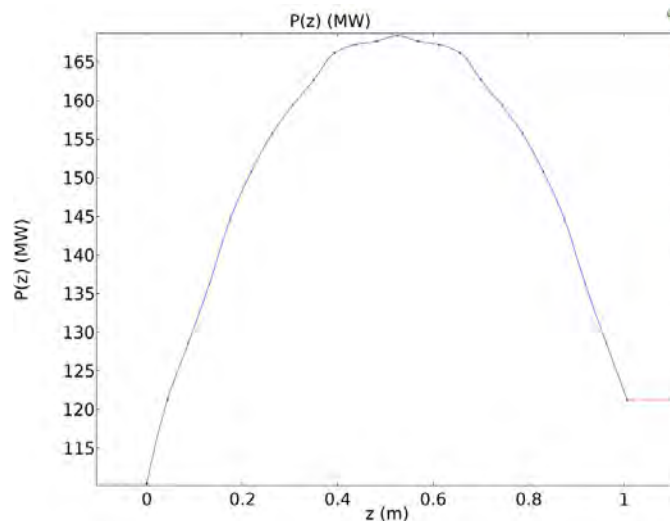


Figura 3. Función de distribución de potencia axial.

3.2 Modelo matemático para el gap

El siguiente modelo presentado es el de la sección III (gap), la cual corresponde a la zona del helio. En esta sección se considera convección libre para flujo no isotérmico. La ecuación de transferencia de calor en estado estacionario con mecanismos de transporte de calor por conducción y convección está dada por:

$$\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T - k_H \nabla^2 T = 0 \quad (3)$$

En donde \mathbf{v} es el vector velocidad del helio, T [K] es la temperatura del helio, k_H [W / m * K] es la conductividad térmica, ρ [kg / m³] es la densidad y C_p es el calor específico [J / kg * K] del helio.

La ecuación de balance de cantidad de movimiento, Ec. (4) considera estado estacionario y se desprecian los efectos convectivos, ya que se considera flujo laminar debido a que es un fenómeno de convección natural.

$$-\Delta P - \rho g + \mu \nabla^2 \mathbf{v} = 0 \quad (4)$$

donde ΔP [Pa / m] es la diferencia de presiones, g es la gravedad [m / s²], μ [Pa * s] es la viscosidad del helio.

Para este modelo, se aplica la aproximación de Boussinesq, la cual está dada por:

$$\mu \nabla^2 \mathbf{v} = \Delta P - \rho g \beta (T - T_\infty) \quad (5)$$

donde β [1 / K] es el coeficiente de expansión volumétrico, T es la temperatura de pared, y T_∞ es la temperatura del fluido.

Las condiciones a la frontera para cantidad de movimiento consideran que la velocidad es igual a cero en las paredes del gap y de encamisado (Ecs. 6-7).

$$\mathbf{v} = 0 \quad \text{en} \quad r = r_c \quad (6)$$

$$\mathbf{v} = 0 \quad \text{en} \quad r = r_g \quad (7)$$

Las condiciones a la frontera para transferencia de calor consideran la ley de enfriamiento de Newton en ambas paredes del gap:

$$q_f'' = h(T_f - T_\infty) \quad (8)$$

$$q_g'' = h(T_c - T_\infty) \quad (9)$$

donde h $[W/m^2 * K]$ es el coeficiente de transferencia de calor, el cual es calculado directamente por Comsol a partir del número de Grashoff.

3.3 Modelo matemático para el encamisado

El encamisado es el revestimiento de la barra de combustible, el cual es un metal, por esta razón se considera la conducción como principal mecanismo de transferencia de calor, entonces, para esta región se aplica la Ec. (1), y la condición a la frontera es la continuidad de flux entre el gap y el encamisado, la cual tiene una forma similar a la Ec. (2).

3.4 Modelo matemático para el refrigerante

Dentro del refrigerante, ocurren dos fenómenos físicos principales: la transferencia de calor y la transferencia de cantidad de movimiento. La Ec. (10) representa el balance de cantidad de movimiento para el metal líquido, y en el caso de la transferencia de calor se considera la Ec. (3), ya que se están considerando los efectos convectivos y conductivos.

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot (P\mathbf{I}) + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (10)$$

Para el modelo de cantidad de movimiento, las condiciones a la frontera están dadas por

$$m = m_0 \quad \text{en} \quad z = 0 \quad (11)$$

$$P = P_{atm} \quad \text{en} \quad z = L_{pin} \quad (12)$$

La Ec. (11) indica que se conoce el flujo másico de refrigerante a la entrada en $[kg/s]$, y la Ec. (12) indica que la presión a la salida de la barra es igual a la presión atmosférica.

Las condiciones de frontera para la transferencia de calor son:

$$q_{ref}'' = h(T - T_\infty) \quad (13)$$

$$T_{in} = 668.15K \quad \text{en} \quad z = 0 \quad (14)$$

$$q_{ref}'' = 0 \quad \text{en} \quad z = L_{pin} \quad (15)$$

La Ec. (13) es ley de enfriamiento de Newton, que relaciona la temperatura del refrigerante con la temperatura de pared (encamisado), la Ec. (14) es el valor de la temperatura del refrigerante a la entrada del canal y la Ec. (15) indica que el flux de calor a la salida del canal es nulo.

Las condiciones a la frontera para transferencia de calor y cantidad de movimiento en el refrigerante del Caso I aplican también para el Caso II, además, para éste último se considera el flujo periódico, lo cual fue posible debido a la geometría.

3.5 Condiciones a la frontera adicionales del Caso II.

Como se mencionó, en los ambos casos existen similitudes en los modelos aplicados, es decir ambos comparten una barra de combustible con los diferentes elementos que la componen, por esta razón los modelos para las secciones del combustible, gap y encamisado son las mismas.

La diferencia entre ambos casos radica en la geometría, por lo que el arreglo de cuatro barras (Caso II) requiere que se añadan las siguientes condiciones a la frontera para la transferencia de calor.

Se considera simetría axial, radial y azimutal en la frontera geométrica externa del combustible, gap y encamisado, la Ec. (16) describe dicha condición a la frontera, donde n es el vector normal a la superficie y las superficies $A, B, C, D, A', B', C', D'$ son las fronteras geométricas (Fig. 2), en este caso A es simétrico con A' , B con B' , C con C' y D con D' .

$$-n \cdot q_f'' = 0 \quad (16)$$

Dentro del modelo de cantidad de movimiento, se añade la condición a la frontera llamada condición de flujo periódico, aplicada a las superficies F, G, F', G' (ver Fig. 2), donde F es periódica con F' y G con G' .

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_i, P_0 = P_i, K_0 = K_i, \varepsilon_0 = \varepsilon_i \quad (17)$$

donde \mathbf{v} [m/s] es la velocidad, P [Pa] es la presión, K [J] es la energía cinética y ε [J] es la cantidad de energía cinética disipada.

4. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

En esta sección se presentan los experimentos numéricos realizados en donde se resuelven los modelos para cada caso. Las geometrías se modelaron en Comsol Multiphysics, implementando los modelos y condiciones a la frontera descritos en la sección anterior. De esta forma es posible resolver las ecuaciones en tres dimensiones, obteniendo los perfiles de temperatura, perfiles de velocidad, perfiles de coeficiente de transferencia de calor en el gap y temperaturas promedio en cada sección de la barra de combustible.

4.1 Caso I

En la Fig. 4, se presenta el perfil axial de temperatura del combustible, como se observa en la gráfica, la temperatura mantiene una forma similar al perfil axial de potencia (Fig.3) obteniendo una temperatura máxima de 1520 K aproximadamente en la longitud central de la barra. La temperatura promedio del combustible es de 1457.3 K.

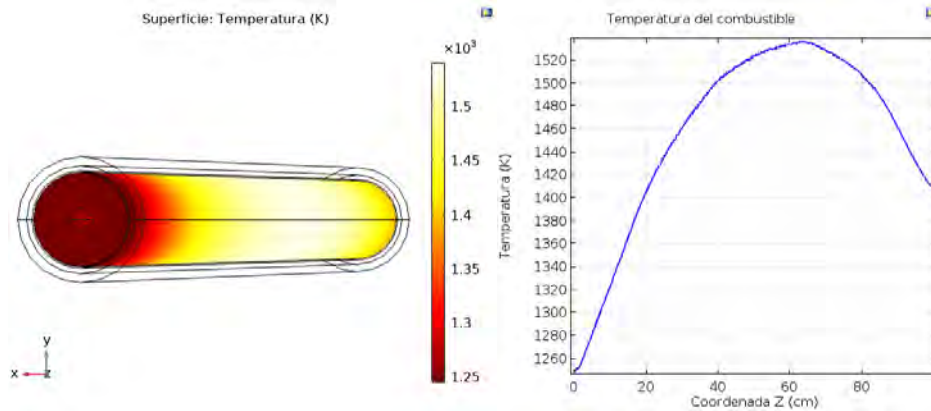


Figura 4. Perfil axial de temperatura en el combustible.

El perfil de temperatura del gap se muestra en la Fig. 5, como se mencionó se consideró convección libre, además, la transferencia de calor depende principalmente de la velocidad del fluido y esta a su vez depende de la flotabilidad o fuerza de empuje. La mayor temperatura es de 1200 K, de la misma forma que en el combustible, se obtiene en el centro de la longitud de la barra. La temperatura promedio de esta sección es de 1130.8 K. Comparando la temperatura del combustible y del gap, se tiene una diferencia de 300 K. El valor máximo del coeficiente de transferencia de calor para esta sección es de $31 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$.

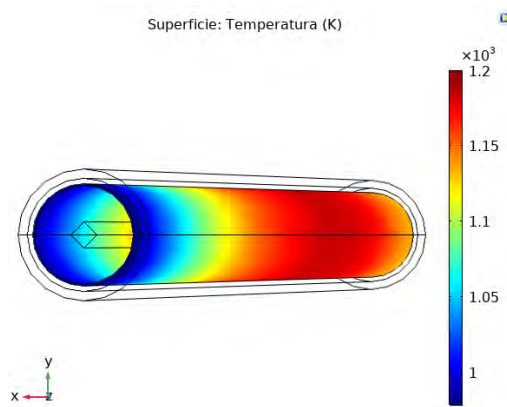


Figura 5. Perfil axial de temperatura en el gap.

Para la sección del encamisado, en la Fig. 6 se presenta el perfil de temperatura, valor máximo de temperatura es de 840 K y se presenta en la parte más alta de la barra de combustible, en esta sección aún se percibe la influencia de la distribución de potencia axial en la temperatura. El valor promedio de la temperatura en esta sección es de 756.71 K.

Para el caso del refrigerante, se presentan los perfiles de velocidad y de temperatura. En la Fig. 7 se observa el perfil axial de velocidad, así como cortes transversales de la velocidad en diferentes longitudes de la barra, el fluido que está en contacto con el encamisado tiene la menor velocidad, y conforme se aleja del contacto la velocidad aumenta, teniendo un valor máximo de 14 m/s. Para calcular el número de Reynolds se utiliza la velocidad promedio, la cual es de 10.14 m/s.

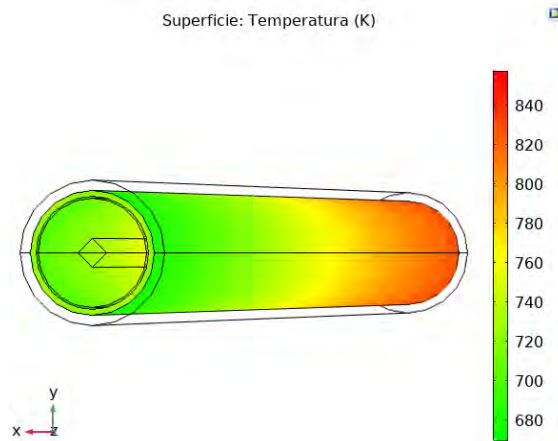


Figura 6. Perfil de Temperatura en el encamisado.

Para resolver el modelo de transferencia de calor, se considera que el coeficiente convectivo tiene un valor de $149,800 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$, el cual fue calculado a partir del número de Reynolds, Nusselt y Prandtl. Como se observa en la Fig. 7, el perfil de temperatura es ascendente en toda la barra, es decir, la temperatura a la salida de la barra es la más alta, con un valor de 817.8 K, en esta sección ya no se observa la influencia del perfil axial de potencia. Entre el encamisado y el refrigerante se observa una diferencia aproximada de 20 K

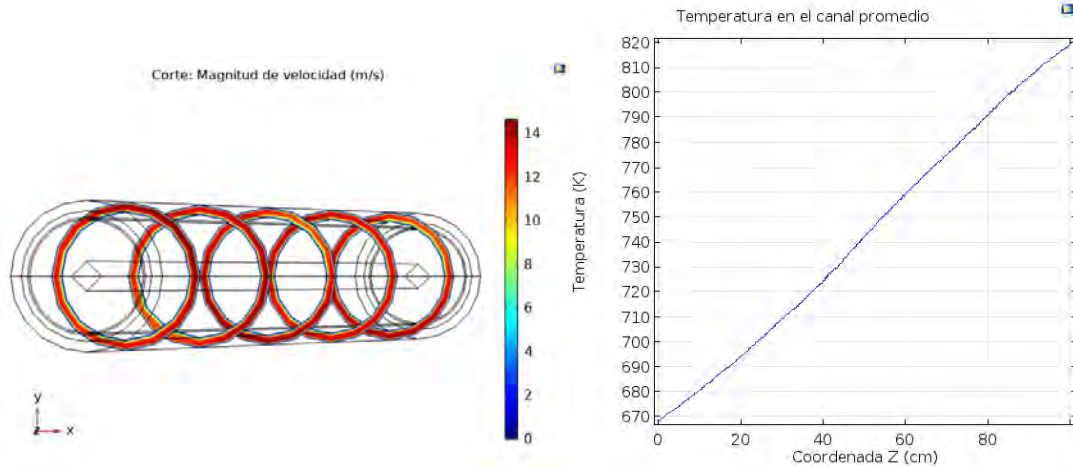


Figura 7. Perfil de velocidad y temperatura de sodio

4.2 Caso II

En el arreglo de cuatro barras, se tomó una sección de un ensamble del combustible, respetando la distribución de las barras y la geometría del núcleo. Como se observa en la Fig. 2, se tienen dos fracciones de la barra, equivalentes cada una a $2/6$ de una barra y dos más a $1/6$, las cuales, sumadas dan el equivalente a tener una barra.

En la Fig. 8, se presentan los perfiles la temperatura del combustible en función de la longitud, la gráfica de la izquierda corresponde a $2/6$ de la barra y la de la derecha a $1/6$. En ambos casos es posible observar que el perfil de temperatura tiene la misma forma que el perfil axial de potencia (Fig. 3). El valor máximo de temperatura para $2/6$ de barra es 1320 K y para $1/6$ de barra es de 1070 K, en promedio se obtiene un valor de 1195 K.

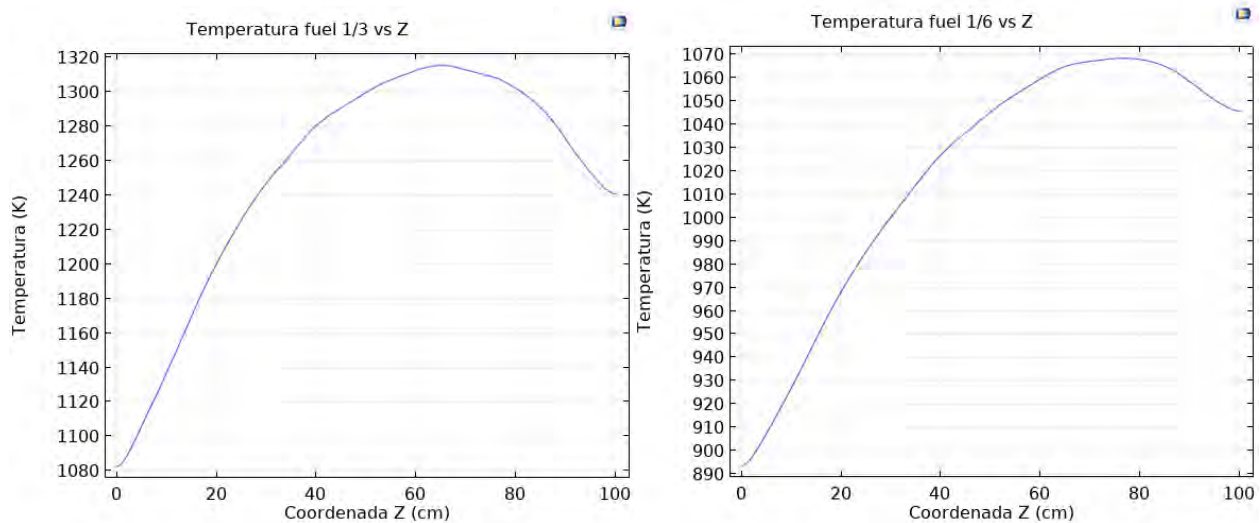


Figura 8. Perfil axial de temperatura del combustible.

En el caso del gap, se obtuvieron los perfiles de temperatura, cantidad de movimiento y del coeficiente de transferencia de calor. En la Fig. 9 se presentan los perfiles de temperatura, el valor promedio de la barra de 2/6 es de 1018.6 K y 890.17 K para 1/6 de barra.

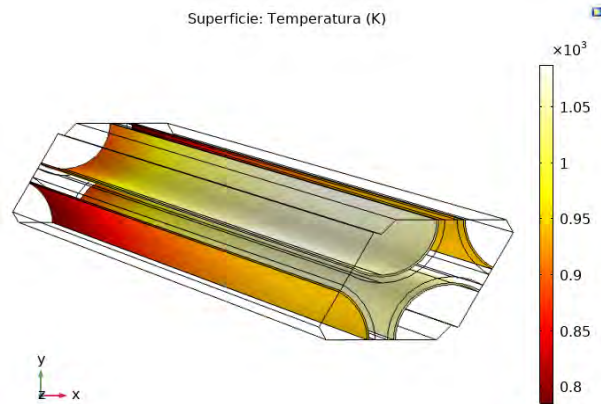


Figura 9. Perfil de temperatura en el gap.

En la Fig. 10 (lado izquierdo) se presenta el perfil radial de la velocidad del helio, cuyo valor promedio es $9.75e-7$ m/s, al tener la velocidad es posible calcular el coeficiente de transferencia de calor, el cual se presenta en el lado derecho de la Fig. 10. El valor máximo obtenido es de 28.5 $W/m^2 \cdot K$, el cual es un valor cercano al obtenido al valor calculado en el Caso I.

Para el caso del encamisado, en la Fig. 11 se muestran los perfiles de temperatura para ambos segmentos de la barra, como se observa la mayor temperatura (840 K) se obtiene para 2/6 de la barra y para 1/6 es de 830 K, en promedio la temperatura máxima es de 835 K.

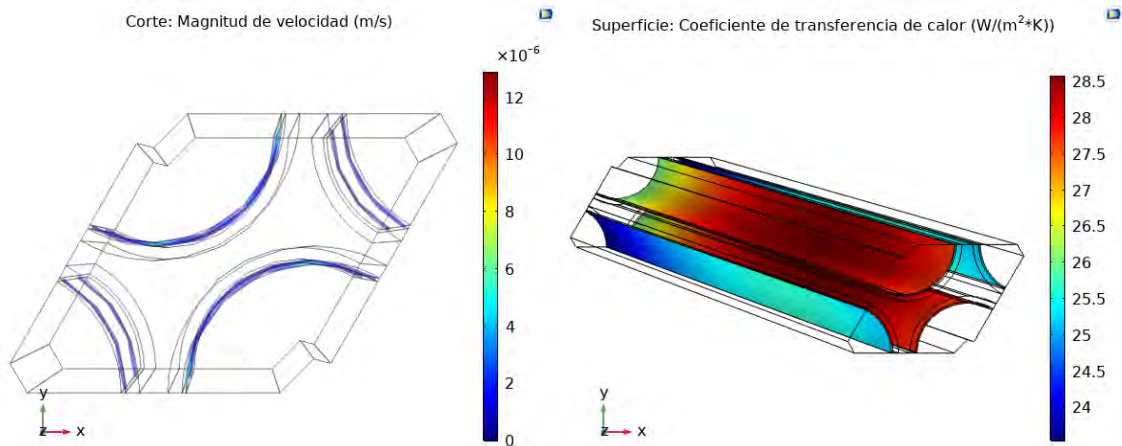


Figura 10. Perfil radial de velocidad en el gap y de coeficiente de transferencia de calor.

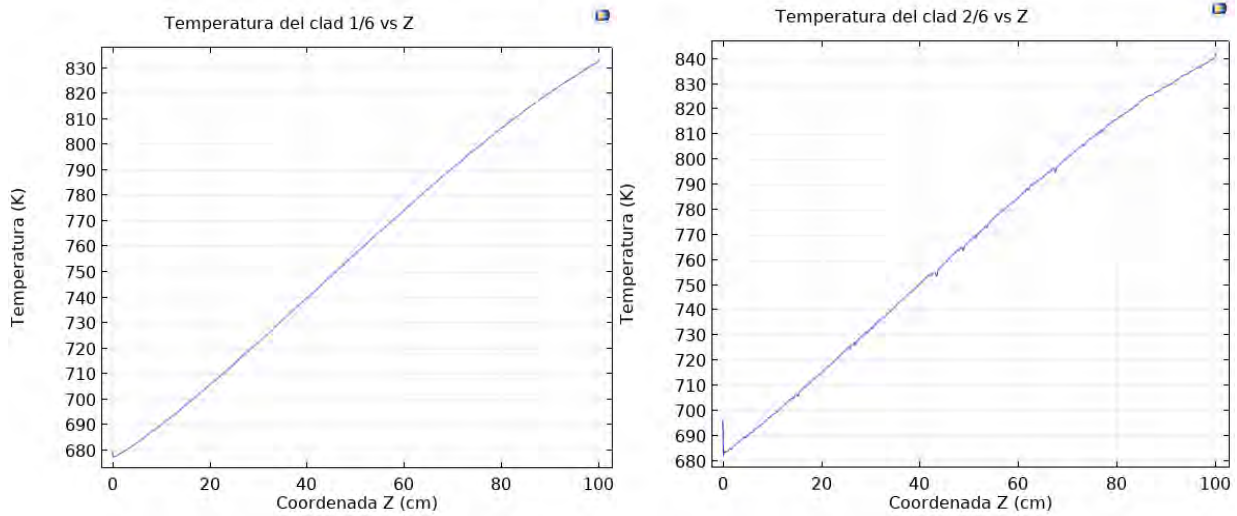


Figura 11. Perfil de temperatura en el encamisado.

Para el análisis del refrigerante se presentan perfiles de velocidad y de temperatura. El perfil de velocidad se presenta en la Fig. 12 (izquierda), como se mencionó, este se obtuvo a partir de un modelo en flujo turbulento $\kappa\varepsilon$. En el perfil radial se puede observar que los valores menores de velocidad se encuentran cerca de la pared y conforme nos acercamos al centro el perfil crece alcanzando la velocidad máxima, la cual es de 5.5 m/s. El valor promedio es de 5.155 m/s.

A partir de la velocidad promedio se obtuvo el número de Reynolds, y con el número de Prandtl y Nusselt se obtuvo el coeficiente de transferencia de calor, el cual tiene un valor de $179780 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$.

El perfil de temperatura del refrigerante se presenta en la Fig. 12 (derecha), la temperatura más alta se obtiene a la salida del canal, la cual es de 820 K, este valor es cercano a la temperatura de diseño del reactor ya que el valor reportado es de 818.15 K.

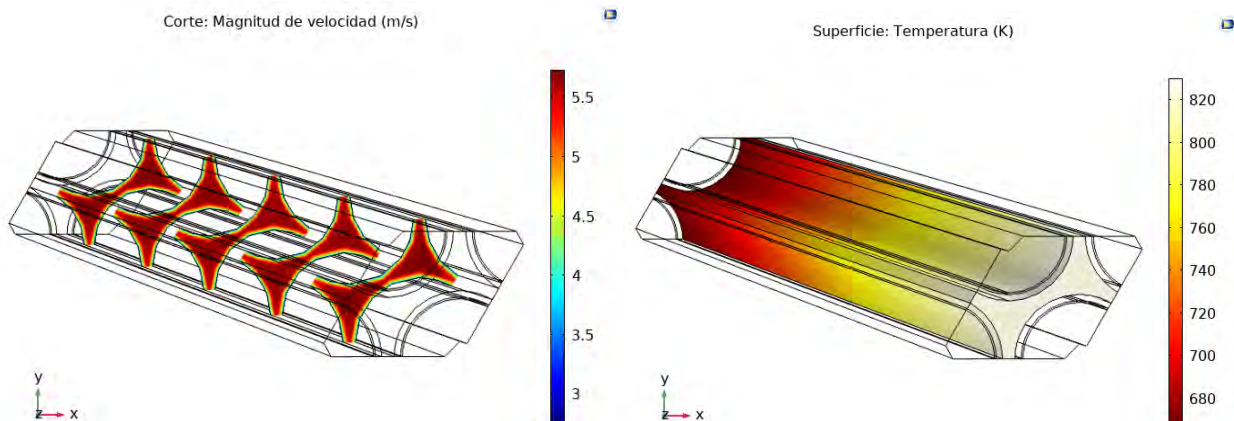


Figura 12. Perfil radial de velocidad y temperatura de sodio.

5. CONCLUSIONES

El propósito de este trabajo fue incursionar en el modelado matemático del termo fluido y combustible para reactores de IV generación. Se utilizaron dos aproximaciones (Casos) para obtener los perfiles de temperatura en casa sección de la barra de combustible y en el refrigerante, la primera es basada en la metodología de canal promedio (Caso I) y la segunda es considerando un arreglo basado en la geometría original del núcleo.

A partir de estos casos de estudio y de los modelos de balance de masa, energía y cantidad de movimiento, los cuales fueron programados en Comsol Multiphysics, se obtuvieron los siguientes resultados principales:

- Para el refrigerante, en el Caso I se obtuvo una temperatura promedio a la salida de 817.87 K y para el Caso II de 816 K, los cuales son valores muy cercanos al valor de diseño, el cual es de 818 K.
- La temperatura promedio obtenida en la sección del encamisado para el Caso I es 756.71 K y para el Caso II es de 757.26 K, la temperatura de diseño es de 743 K.
- La temperatura promedio obtenida en la sección del gap para el caso I es de 1130.8 K y para el caso II es de 975.91 K.
- La temperatura promedio obtenida en la sección del combustible para el caso I es de 1457.3 K y para el caso II es de 1195 K, la temperatura de diseño es de 1500 K.

En ambos casos, los valores obtenidos son cercanos a los valores de diseño, la estimación de canal promedio nos permitió obtener resultados que representan todo el núcleo de manera homogénea, sin embargo, si se modela la geometría como en el caso 2 sería posible identificar las distintas zonas en el núcleo.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el financiamiento otorgado por el CONACyT en el Posgrado de Energía y Medio Ambiente de la UAM-Iztapalapa. Además, los autores agradecen el apoyo económico recibido del proyecto estratégico No. 212602 del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética, CONACyT-SENER.

REFERENCIAS

1. Wu, Y.W., Li, X., Yu, X., Qiu, S.Z., Su, G.H., Tian, W.X., 2013. Subchannel thermal-hydraulic analysis of the fuel assembly for liquid sodium cooled fast reactor. *Progress in Nuclear Energy*, **68**, p. 65–78 (2013).
2. Basehore, K.L., Todreas, N.E., *SUPERENERGY-2: A Multiassembly Steady-State Computer Code for LMFBR Core Thermal-hydraulic Analysis*, Pacific Northwest Laboratory, Richland, WA, USA (1980).
3. Todreas, N. E., Kazimi, M. *Nuclear Systems, Thermal Hydraulic Fundamentals*. CRC Press.USA, (2012).
4. Tenchine, D., Baviere, R., Bazin, P., Ducros, F., Geffraye, G., Kadri G., Perdu, F., Pialla, D., Rameau, B. y Tauveron, N. (2012) *Status of CATHARE code for sodium cooled fast reactors. Nuclear Engineering and Design*. **245**, p.140-152.
5. Mikityuk, K., Schikorr, M. (2013). *New transient analysis of the Superphénix start-up tests*. En: Proceedings of International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Safe Technologies and Sustainable Scenarios (FR13). 4–7 de marzo de 2013, Paris, Francia.
6. Malambu, E., Sobolev, V., Messaoudi, N., Aït Abderrahim, H., Struwe, D., Schikorr, M. y Bubelis, E. (2008). *Preliminary core design of the European lead-cooled system*. Proceedings of the 2008 International Conference on the Physics of Reactors “Nuclear Power: A Sustainable Resource”. PHYSOR-2008, 14–19 de septiembre de 2008. Casino-Kursaal Conference Center, Suiza. pp. 1–11.
7. Grasso, G., Petrovich, C., Mattioli, D., Artioli, C., Sciora, P., Gugiu, D. (2014). *The core design of ALFRED, a demonstrator for the European lead-cooled reactors. Nuclear Engineering and Design*. **278**, p. 287-301.
8. Bubelis, E., Tosello, A., Pfrang, W., Schikorr, M., Mikityuk, K., Panadero, A., Martorell, S., Ordóñez, J., Seubert, A., Lerchl, G., Stempniewicz, M., Alcaro, F., De Geus, E., Delmaere, T., Pומרouly, S. y Wallenius, J. (2012). *Systems codes benchmarking on a low sodium void effect SFR heterogeneous core under ULOF conditions*. *Nuclear Engineering and Design*. **320**, p. 325-345.
9. Won-Seok, K., Young-Gyun, K. y Young-Jin, K. (2002) *A subchannel analysis code MATRA-LMR for fire wrapped LMR subassembly*. *Annals of Nuclear Energy*. **29**, p. 303-321.
10. Matuzas, V., Ammirabile, L., Cloarec, L., Lemasson, D., Perez-Martin, S. and Ponomarev. (2017) *A. Extension of ASTEC-Na capabilities for simulating reactivity effects in Sodium Cooled Fast Reactor, Annals of Nuclear Energy*. **119**, p. 440-453.
11. Carbajo, J., Yoder, G., Popov, S., Ivanov, V. (2001) *A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels. Journal of Nuclear Materials*, **299(3)**, p. 181-198.
12. Bird, R., Stewart, W., Lightfoot, E. *Fenómenos de transporte*, Wiley, México, (2007).
13. Yunus A. Cengel, Afshin J. Ghajar, *Transferencia de calor y masa: Fundamentos y aplicaciones*. McGraw-Hill, México, (2007).
14. Aufiero, M. C. (2013). *A Multi-physics time-dependent model for the Lead Fast Reactor single-channel analysis. Nuclear Engineering and Design*, **256**, p. 14-27.

Acoplamiento y simulación de difusión neutrónica y termo-fluido en el reactor ELFR

Heriberto Sánchez Mora^A, Juan Luis François Lacouture^B

Sergio Quezada García^C

^{A B C}UNAM Facultad de Ingeniería

Av. Universidad No. 3000, C.U., CDMX, 04510

^Aheribertosanchez7@hotmail.com ; ^Bjuan.luis.francois@gmail.com;

^Csequga@gmail.com

Marco A. Polo^D

UAM - Cuajimalpa

Vasco de Quiroga 4871, Contadero, 05370 Ciudad de México, CDMX

^Dplabarríos@hotmail.com

Raimon Pericas^E

Universitat Politècnica de Catalunya

Av. Diagonal, 647 08028 Barcelona

^Eraipercas@yahoo.es

Resumen

Con el presente trabajo se muestra el análisis de seguridad del reactor nuclear ELFR (European Lead-cooled Fast Reactor) en escenario de pérdida de refrigerante con un acoplamiento de la ecuación de difusión neutrónica y los efectos térmicos de las barras de combustible del reactor, el cual tiene considerado 8 zonas o anillos del núcleo y es enfriado por plomo líquido. Para obtener la retroalimentación entre los efectos de difusión neutrónica con los efectos térmicos por efecto Doppler se hizo uso de las secciones eficaces, velocidad del neutrón y coeficientes de difusión en función de la temperatura promedio del combustible, las cuales son extraídas del código SERPENT. El acoplamiento es llevado a cabo calculando el perfil de densidad de potencia promedio axial por medio de la ecuación de difusión neutrónica. Dicho perfil promedio es utilizado para calcular la temperatura de una barra promedio del combustible, lo cual es una simplificación mediante un canal promedio. El modelo de la ecuación de difusión neutrónica considera un modelo bidimensional y transitorio para un núcleo homogéneo y de un solo grupo de energía, mientras que las ecuaciones de transferencia de calor de la barra de combustible son consideradas unidimensionales, al igual que la ecuación de transporte de calor, estas dos últimas también consideradas en régimen transitorio. Para enriquecer el análisis, las ecuaciones son programadas en Python y con el uso de librerías de OpenGL se desarrolla una interfaz gráfica del comportamiento en tiempo real de simulación.

1. INTRODUCCIÓN

El reactor ELFR (Europe Lead-cooled Fast Reactor) pertenece a la IV generación de reactores nucleares que forman parte de los reactores LFR (Lead-cooled Fast Reactors), que son investigados por la Unión Europea con el fin de enfrentar los futuros retos en el suministro energético como también los problemas ambientales de efectos invernadero [1]. Este tipo de reactores están basados en trabajos previos de reactores enfriados con plomo líquido, como lo es la configuración del reactor ELSY y el reactor ALFRED. El ELFR tiene también como objetivo incrementar la seguridad ante accidentes severos [2].

Las características técnicas han sido basadas en la configuración previa y verificada del reactor ELSY [1]. Los parámetros generales del núcleo son los mostrados en la **Tabla 1**.

Tabla 1. Parámetros Generales [1]

Parámetro	ELFR
Potencia térmica	1500 MW_t
Geometría del arreglo de ensambles	Hexagonal
Número de ensambles	427
Número de barras/ensamble	169
Longitud de la zona activa	140 cm
Radio de la zona activa	240 cm
Velocidad del Refrigerante	1.53 m/s

Por otro lado, las barras de combustible cuentan con una perforación en el centro que varía su dimensión dependiendo de la zona del reactor. Para 157 ensambles de la zona interna se tiene una perforación de 4 mm de diámetro, mientras para 270 ensambles en la zona externa se tiene una perforación de 2 mm de diámetro. Dicha perforación tiene como objetivo reducir el perfil de temperatura y evitar el daño al núcleo a medida que se muestre un aumento de potencia considerable [1]. Las dimensiones de las barras se presentan en la **Tabla 2**.

Tabla 2. Parámetros Generales [1]

Parámetro	
Distancia entre barras	15 mm
Diámetro externo del encamisado	10.5 mm
Diámetro interno del encamisado	9.3 mm
Diámetro externo del combustible	9.0 mm
Diámetro interno del combustible	4.0/2.0 mm (interno/externo)
Material del combustible	MOX
Material del encamisado	T91

Para la implementación matemática en el modelo de difusión neutrónica, las secciones eficaces, velocidad del neutrón, coeficiente de difusión y los parámetros de los precursores son extraídos de SERPENT, donde previamente se ha simulado el reactor ELFR a diferentes temperaturas promedio

del combustible: 600 K, 900 K y 1500 K, para las diferentes regiones radiales del núcleo (8 regiones). Debido a que se trata de una temperatura promedio es útil considerar un canal promedio para resolver los modelos matemáticos y observar el comportamiento tanto del flujo neutrónico como del campo de temperatura en el combustible en una barra promedio. Debido a que se consideran dos tipos de perforaciones en las barras de combustible en diferentes zonas solo se considera la barra con 2 mm de diámetro interno en el combustible. El modelado se realiza con el ELFR como reactor homogéneo dividido en 8 anillos. A continuación se muestran los modelos y las consideraciones en las condiciones de frontera e iniciales.

2. MODELO MATEMÁTICO

2.1. Difusión neutrónica

La ecuación de difusión neutrónica para el modelo del reactor ELFR es de manera transitoria y en dos dimensiones, considerando la contribución de los precursores y un solo grupo de energía;

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(z, r, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(z, r, t)}{\partial z^2} + \frac{D}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r \partial \phi(z, r, t)}{\partial r} \right) \right) + \left((1 - \beta_{eff}) \gamma \Sigma_f - \Sigma_a \right) \phi(z, r, t) + \langle \lambda \rangle C(z, r, t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial C(z, r, t)}{\partial t} = \gamma \beta_{eff} \Sigma_f \phi(z, r, t) - \langle \lambda \rangle C(z, r, t) \quad (2)$$

Donde, ϕ es el flujo neutrónico escalar, z corresponde a la componente axial, r es el componente radial, t es la componente temporal, D es el coeficiente de difusión, v es la velocidad del neutrón, β_{eff} es la fracción de neutrones retardados totales, γ son los neutrones producidos promedio por fisión, Σ_f sección macroscópica de fisión, Σ_a sección eficaz macroscópica de absorción, $\langle \lambda \rangle$ coeficiente de decaimiento promedio de precursores y C es la concentración de precursores.

Para la fracción de neutrones retardados y los coeficientes de decaimiento, se consideran 9 precursores, los cuales son aglomerados en promedio como se muestra en las Ecs. 3 y 4,

$$\beta_{eff} = \sum_{i=1}^9 \beta_i \quad (3)$$

$$\langle \lambda \rangle = \frac{\beta_{eff}}{\sum_{i=1}^9 \beta_i / \lambda_i} \quad (4)$$

donde β es el la fracción del precursor, λ es el coeficiente de decaimiento, y el subíndice i es el número del precursor .

La Ec. 1 está sujeta a las siguientes condiciones iniciales y de frontera,

Condición inicial:

$$\phi(z, r, t = 0) = \phi_o \quad \forall r, z \quad (5.a)$$

Condiciones de frontera en la componente radial:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad \left(\phi + 2 \left(\frac{1-B}{1+B} \right) D \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \Big|_{r=R_r} = 0 \quad (5.b)$$

Condiciones de frontera en la componente axial:

$$\left(\phi - 2 \left(\frac{1-B}{1+B} \right) D \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = 0 \quad \left(\phi + 2 \left(\frac{1-B}{1+B} \right) D \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \Big|_{z=L} = 0 \quad (5.c)$$

ϕ_o es un flujo de neutrones inicial, R_r es el radio del reactor, L es la longitud del reactor, B es la fracción del flujo de neutrones que regresan al núcleo por albedo del material reflectante de neutrones.

La condición inicial de la Ec. 2 es,

$$C(z, r, t = 0) = C_o \quad (5.d)$$

C_o es la densidad de precursores inicial.

Para determinar la potencia total generada por el reactor se utiliza la Ec. 6,

$$P = \int_V \sum_f \phi(z, r, t) \cdot E_r \cdot f \cdot \Sigma_f \cdot dV \quad (6)$$

P es la potencia total del reactor, ff es la fracción del volumen de combustible dividido entre el volumen total del reactor; este coeficiente es añadido debido a que solo se realiza fisión en el combustible, E_r es la energía liberada por fisión, V es el volumen del reactor.

Para tener un perfil de densidad de potencia axial promedio se estima con la Ec. 7, haciendo promedios radiales en diferentes posiciones axiales, esto útil para localizar la temperatura promedio del reactor, ya que la retroalimentación de las secciones eficaces radica en la temperatura promedio del combustible,

$$q'''(z) = 2 \cdot E_r \cdot \Sigma_f \frac{\int_0^{R_r} \phi(z, r, t) r dr}{R_r^2} \quad (7)$$

$q'''(z)$ es el perfil de densidad de potencia promedio en la dirección axial.

2.2. Transferencia de Calor

La transferencia de calor se aplica a una barra de combustible usando la densidad de potencia promedio (Ec. 7) para obtener la temperatura promedio del combustible. El modelo de transferencia de calor para la barra solo se considera con la componente radial, debido a que se contempla que la transferencia de calor tiene mayor relevancia en ésta.

Se resuelve dicho modelo radial en diferentes niveles axiales para considerar el perfil de potencia axial promedio. Las Ecs. 8, 9 y 10, muestran la descripción de la temperatura de la barra de combustible,

$$Cp_f \rho_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = \frac{k_f}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_f}{\partial r} \right) + q'''(z) \quad (8)$$

$$0 = \frac{k_g}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) \quad (9)$$

$$Cp_c \rho_c \frac{\partial T_c}{\partial t} = \frac{k_c}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_c}{\partial r} \right) \quad (10)$$

Cp es la capacidad calorífica, ρ es la densidad, k es la conductividad térmica y T es la temperatura. Los subíndices f , g y c , son usados para asociar las propiedades al combustible, a la holgura y al encamisado, respectivamente.

Las Ecs. 8, 9 y 10, tienen las siguientes condiciones de frontera,

Condiciones de frontera de la Ec. 8,

$$\left. \frac{\partial T_f}{\partial r} \right|_{r_{in}} = 0 \qquad T_f \Big|_{r_f} = T_g \Big|_{r_f} \qquad (11.a)$$

Condiciones de frontera de la Ec. 9,

$$T_g \Big|_{r_f} = T_f \Big|_{r_f} \qquad T_g \Big|_{r_g} = T_c \Big|_{r_g} \qquad (11.b)$$

Condiciones de frontera de la Ec. 10,

$$T_c \Big|_{r_g} = T_g \Big|_{r_g} \qquad -k_c \left. \frac{\partial T_c}{\partial r} \right|_{r_{rod}} = h_l \left(T_c \Big|_{r_{rod}} - T_l(z) \right) \qquad (11.c)$$

r_{in} es el radio interno del combustible, r_f es el radio externo del combustible, r_g es el radio interno del encamisado, r_{rod} es el radio externo del encamisado, h_l es el coeficiente convectivo de transferencia de calor del plomo líquido y $T_l(z)$ es la temperatura del plomo líquido con dependencia axial.

Las condiciones iniciales en las temperaturas en los componentes de la barra de combustible son,

C.I. de las Ecs. 8, 9 y 10, respectivamente,

$$T_f = 1400.0 \text{ K} \quad \forall r_{in} < r < r_f \qquad (12.a)$$

$$T_g = 1000.0 \text{ K} \quad \forall r_f < r < r_g \qquad (12.b)$$

$$T_c = 800.0 \text{ K} \quad \forall r_g < r < r_{rod} \qquad (12.c)$$

2.3. Transporte de Calor por el Termo-Fluido

El transporte de calor por el termo-fluido (plomo) se modela de manera unidimensional y transitoria con la siguiente ecuación,

$$Cp_l \rho_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial t} + v_l \frac{\partial T_l}{\partial z} \right) = \frac{2\pi r_f^2 q'''(z)}{A_f} \quad (13)$$

donde l denota las propiedades del plomo y A_f es el área de flujo del fluido, la cual es igual a la siguiente expresión,

$$A_f = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} L_{pitch} - \pi r_{rod}^2 \right) \quad (14)$$

donde L_{pitch} es la distancia entre barras.

Como condiciones frontera e inicial para la Ec. 13 se tiene,

Condición de frontera para la Ec.13,

$$T_l|_{z=0} = T_{lo} \quad (15.a)$$

Condición inicial para la Ec. 13,

$$T_l = 650.0K \quad \forall z \quad (15.b)$$

donde T_{lo} es la temperatura de entrada de entrada del refrigerante.

Para una aproximación del fenómeno se estima una velocidad del plomo constante a través del canal.

Para el cálculo del coeficiente convectivo del plomo mencionado en la Ec. 11.c se establece la siguiente correlación del número de Nusselt para geometría hexagonal [2],

$$Nu = 7 + 0.025(\text{Pr Re})^{0.8} \quad (16)$$

donde Pr es el número de Prantl y Re es el número de Reynolds ambos para el plomo.

3. SOLUCIÓN NUMÉRICA Y RESULTADOS

El método de solución para la Ecs. 1, 8, 9, 10 y 13, es una aproximación mediante el método de diferencias finitas implícito [3]. A diferencia de las demás ecuaciones mencionadas, la aproximación

de la Ec. 1 está bajo el esquema implícito de dirección alternante (IDA) [3], el cual permite resolver ecuaciones diferenciales parciales parabólicas en dos dimensiones espaciales con el uso de matrices tridiagonales. La Ec. 2, es resuelta por el método de Euler [3]; y las ecuaciones 1, 8, 9, 10 y 13, una vez discretizadas, la matriz de coeficientes para cada ecuación es resuelta mediante el algoritmo de Thomas [4].

Debido a que se obtuvieron valores de secciones eficaces y parámetros de los precursores evaluados en temperaturas promedio del combustible de 600 K, 900 K y 1500 K, para cada uno de los 8 anillos del reactor, se utiliza una interpolación entre los valores para tener continuidad de los datos cuando se tiene la variación de la temperatura del combustible.

Para la nodalización de la Ec. 1 se utilizó 24 nodos axiales y 24 nodos radiales, por lo que la densidad de potencia promedio axial cuenta con 24 nodos. Para el combustible en la barra de combustible, Ec. 8, se consideraron 13 nodos radiales, 3 nodos para la Ec. 9 y 4 nodos para la Ec. 10. Ya que la distribución de potencia axial promedio cuenta con 24 nodos, la Ec.13 se discretiza con la misma cantidad de nodos. Con un paso de integración temporal de $\Delta t = 0.00001s$. El valor de B se estima para lograr criticidad con la potencia térmica nominal del reactor. Las propiedades del combustible se pueden ver referenciadas en el trabajo de *Carbajo et al. (2001)*. Las propiedades del plomo son extraídas de *Sobolev et al. (2008)*, las propiedades del encamisado hecho de T91 citadas de *Getachew (2013)*, las propiedades del huelgo son extraídas de *Lamarsh et al (2001)*.

En la **Figura 1** se muestra el flujo neutrónico del núcleo del reactor y en la **Figura 2** se muestra el campo de temperaturas de la barra de combustible, ambas figuras en estado estable con el uso de las librerías de OpenGL para su visualización. El estado estable se alcanza a los 30 s de simulación.

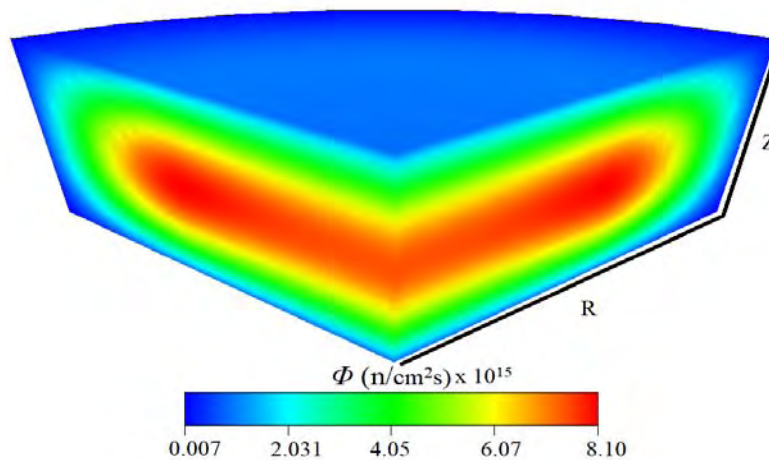


Figura 1. Flujo neutrónico en estado estable del ELFR.

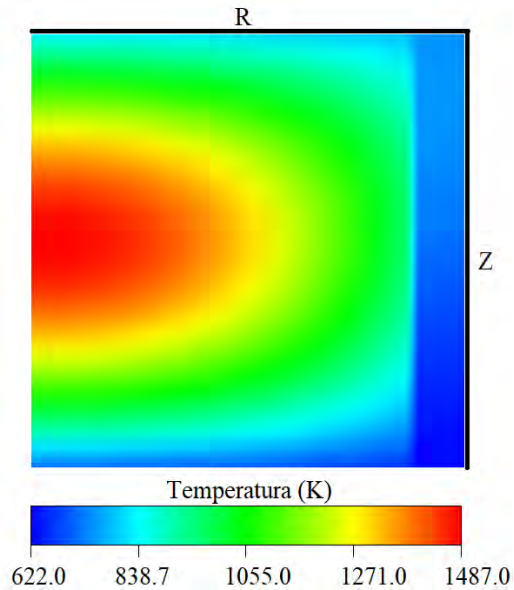


Figura 2. Campo de temperaturas en estado estable de la barra de combustible.

En las Figuras 3, 4 y 5, se muestran los distintos escenarios transitorios para el flujo de refrigerante, tanto fluctuación como aumento del mismo una vez conseguida la criticidad y el estado estable del sistema. La Figura 3 muestra el cambio en la temperatura máxima de la barra de combustible promedio, debido a que se tiene que la temperatura máxima en el centro de la barra, ya que resulta fácil ubicarla gracias a la Figura 2. La Figura 4 muestra el cambio en la potencia térmica y la Figura 5 el cambio en la temperatura promedio del refrigerante.

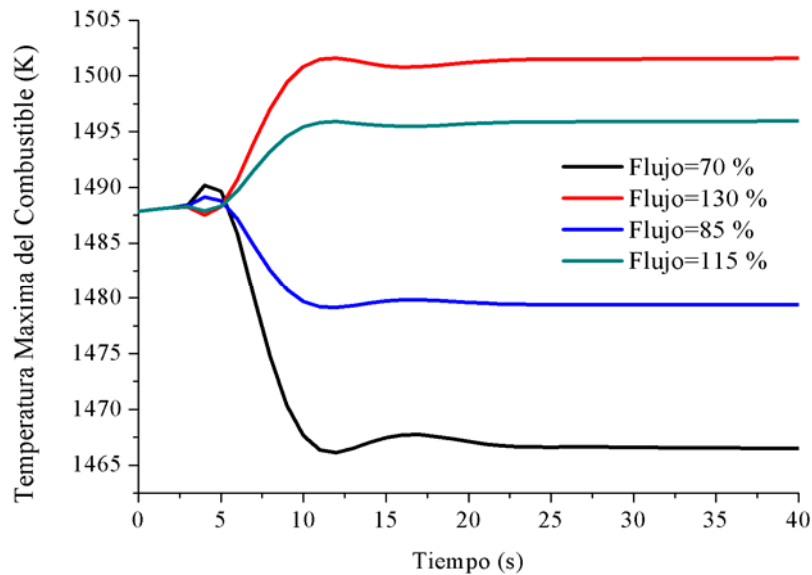


Figura 3. Variación de la temperatura máxima del combustible en función al flujo de refrigerante.

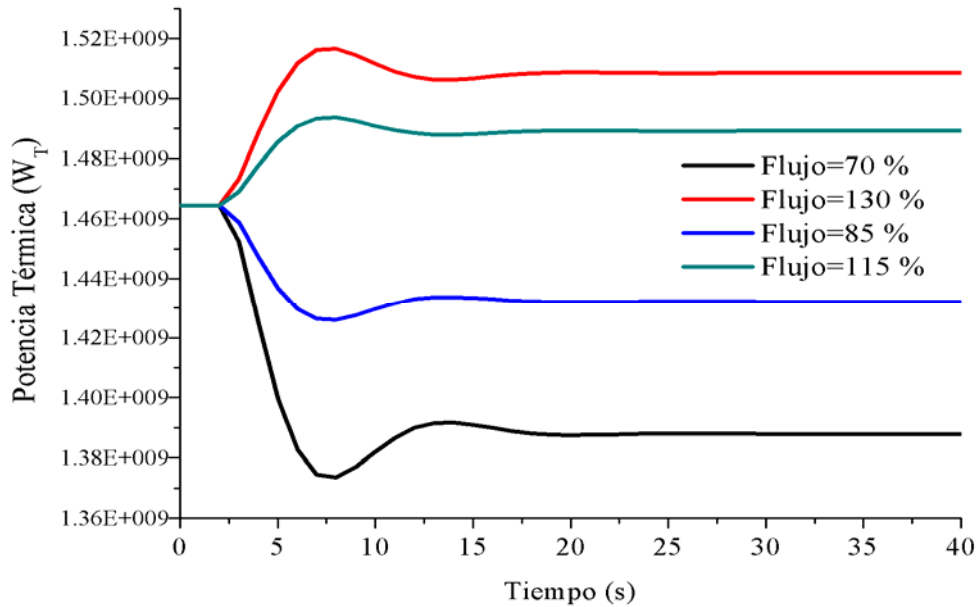


Figura 4. Variación de la potencia térmica en función del flujo de refrigerante.

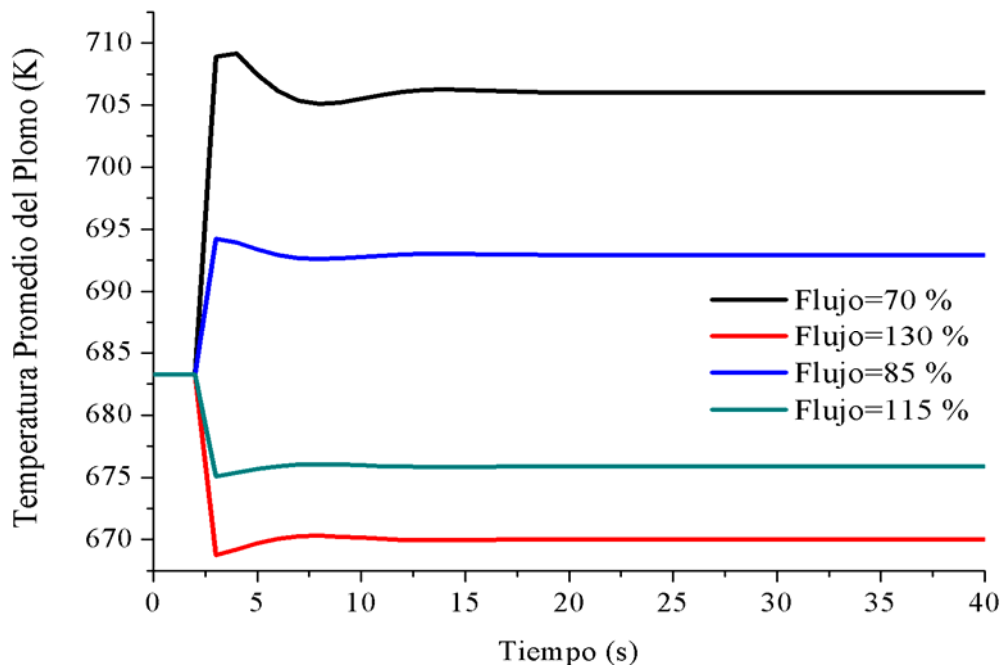


Figura 5. Variación de la temperatura promedio del refrigerante en función de su flujo.

4. CONCLUSIONES

Con base a los resultados obtenidos, la ventaja de la simulación con la ecuación de difusión neutrónica y su retroalimentación con la temperatura del combustible, es la capacidad de integrar las diferentes regiones del núcleo para el análisis de transitorios, como se puede observar en la **Figura 1**. El campo del flujo neutrónico converge en un estado estable de criticidad. Dicho estado de criticidad es logrado después de 30 s de simulación. Los resultados transitorios responden a la dinámica, debido a que al disminuir la cantidad de flujo del refrigerante hay un aumento en la temperatura en el combustible de forma instantánea pero se ve regulada gracias al efecto Doppler; el cual disminuye las secciones eficaces macroscópicas de fisión y aumenta las secciones eficaces macroscópicas de absorción, dando paso a una disminución de potencia, autorregulándose el reactor y empieza a disminuir como se observa en la **Figura 3**. En el caso contrario, donde hay aumento de refrigerante, el combustible al disminuir su temperatura de forma instantánea hay un aumento de potencia en el reactor, ya que las secciones eficaces macroscópicas de fisión aumentan y las de absorción disminuyen, posteriormente, debido al aumento de potencia la temperatura del combustible aumenta de manera paulatina, como se observa en la **Figura 3**.

Como se tienen en los resultados en una variación de $\pm 30\%$ en la cantidad de flujo del refrigerante, el combustible no se ve comprometido en daño de fundición o de alguna temperatura que perjudique al encamisado, pues la variación de temperatura con las fluctuaciones simuladas muestran un aumento en la temperatura máxima del combustible nominal de aproximadamente 10 K, lo cual revela que el ELFR está lejos de daño ante este tipo de escenarios.

REFERENCIAS

1. Döderlein C., Tuček K., Grasso G., Alemberti A., “Definition of the ELFR Core And Neutronic Characterization”, European Commission, (2013).
2. Espinosa-Paredes Gilberto, François J. L., Sánchez-Mora H., Pérez Valseca-Alejandría D., Martín-del-Campo Cecilia, “Study on the Temperature Distributions in fuel Assemblies of Lead-cooled Fast Reactors”, México, *Int. J. Nuclear Energy Science and Technology*, Vol. **11**, p.185-203 (2017).
3. Chapra Steven C., Canale Raymond P., “Métodos Numéricos para Ingenieros”, p. 859-885 Mc Graw Hill, Ciudad de México, México (2007).
4. S. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill, New York, U.S. (1980).
5. Carbajo, J., Yoder, G., Popov, S., Ivanov, V, A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels. *Journal of Nuclear Materials*, Vol. **299**: 181-198 (2001).
6. Sobolev, V.P., Schuurmans, P. and Benamati, G. ‘Thermodynamic properties and equation of state of liquid lead and lead–bismuth eutectic’, *Journal of Nuclear Materials*, Vol. **376**, pp.358–362 (2008).
7. Tibba Getachew, *Modeling the Inelastic Behavior of Heat Exchangers Accounting for Fluid-Structure Interactions*, Bedele, Etiopía, p. 82 (2013).
8. J. Lamarsh and A. Baratta., *Introduction to Nuclear Engineering*, Prentice Hall, New Jersey, U.S. p. 755 (2001).

Término fuente durante la pérdida de potencia externa de un reactor de agua en ebullición

**Rodolfo Amador García, Eduardo Martínez Caballero
Rogelio Castillo Durán, Jorge Viais Juárez y Javier Ortiz Villafuerte**
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera Federal México a Toluca La Marquesa s/n,
Ocoyoacac Estado de México C.P. 52750
rodolfo.amador@inin.gob.mx; eduardo.martinez@inin.gob.mx;
rogelio.castillo@inin.gob.mx; jorge.viais@inin.gob.mx; javier.ortiz@inin.gob.mx

Resumen

El Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) a través del Grupo de Análisis Termohidráulico y de Seguridad de Reactores Nucleares (GATSRN) del Departamento de Sistemas Nucleares (DSN) ha iniciado el proceso de obtener el término fuente durante la simulación de un SBO (Station Blackout por sus siglas en inglés) sin sistemas de enfriamiento de emergencia y con el RCIC fuera de servicio, realizado con el código de cómputo Modular Accident Analysis Program 5.03 (MAAP5.03) que son representativos de un modelo integral de un reactor de agua en ebullición con contenedor MARK II. La simulación de la secuencia es descrita en el presente trabajo y fue realizada durante 50,000 segundos, obteniéndose el fallo de la vasija aproximadamente a los 21,000 segundos. Además se muestra el comportamiento de algunos de los parámetros más importantes como son: presión, masa de núcleo fundido, área de ruptura de la vasija, masa de “corium” generada, masa total de los productos de fisión generada en el sistema primario y liberada al contenedor, fracción de masa del yoduro de cesio (CsI) que se distribuye al pozo seco y pozo húmedo. Finalmente se reporta la cantidad de masa de los materiales que son liberados a la contención dados por MAAP5.03 al final del accidente.

1. INTRODUCCIÓN

El código MAAP5.03 (de sus siglas en inglés Modular Accident Analysis Program) ha sido desarrollado por el Instituto Estadounidense Electric Power Research Institute (EPRI) y está diseñado para realizar el análisis de accidentes severos en reactores de agua ligera, además de predecir la evolución de un accidente partiendo de condiciones predeterminadas (potencia térmica, flujos másicos, presiones, temperaturas, masas, entre otras), un conjunto de sistemas (agua de alimentación, recirculación, inyección a alta presión, inyección a baja presión, de limpieza del agua, de ventilación y enfriamiento de la contención, entre otros) y sucesos iniciadores (cierre de las válvulas de aislamiento de las líneas de vapor principal, disparo de las bombas de recirculación, disminución o aumento de la temperatura del agua de alimentación, entre otros). De esta manera, el código permite simular la respuesta de dichos reactores durante secuencias de accidente severo,

incluyendo las acciones tomadas para la gestión del accidente. MAAP5.03 predice la fenomenología propia del accidente severo tales como:

- Fusión del núcleo y liberación de los productos de fisión.
- Interacción núcleo fundido refrigerante.
- Degradación y rotura de la vasija.
- Transporte de los productos de fisión en el sistema primario y contención.
- Dinámica de los aerosoles (dispersión, transporte, deposición, etc.).
- Interacción núcleo fundido con el concreto (MCCI).
- Explosiones de hidrógeno dentro y fuera de la vasija del reactor.
- Liberación de los productos de fisión al medio ambiente.
- Sistemas de salvaguardias de la contención (rociadores, ventiladores, etc.)
- Radioquímica (iodo).

Adicionalmente, el código MAAP5.03 ha sido empleado como herramienta de apoyo en la evaluación individual de planta (IPE), análisis del término fuente, análisis probabilista de seguridad (APS), mitigación de accidentes severos, renovación de licencia de planta, determinación de los criterios de éxito y cálculo de tiempos durante el accidente para apoyar los análisis de la tarea de fiabilidad humana [1].

2. DESCRIPCIÓN DEL MODELO INTEGRAL DE PLANTA CON UN REACTOR DE AGUA EN EBULLICIÓN Y UNA CONTENCIÓN MARK II

El código de simulación MAAP5.03 considera para la composición del modelo integral de planta, un sistema primario que suele ser la vasija de un reactor agua en ebullición, incluido los elementos internos y el núcleo de combustible, y un conjunto de compartimentos que pueden tener relación entre ellos y/o el sistema primario que dar forma al contenedor primario MARK II, dichos compartimentos son: la cavidad del pedestal, pozo seco, pozo húmedo, tubos de venteo y medio ambiente (Figura 1).

Dependiendo de la falla de la vasija se puede tener una transferencia de masa y energía a la cavidad del pedestal o bien al pozo seco, incluso la cavidad tiene un hueco que comunica con el pozo seco, el cual, tiene tres conexiones adicionales los tubos de venteo, las rompedoras de vacío y el medio ambiente. Por otra parte, el pozo húmedo cuenta con tres conexiones hacia los tubos de venteo, las rompedoras de vacío y el medio ambiente.

Dicha configuración y progresión del posible accidente, con su respectivo intercambio de materia y energía entre los distintos compartimentos, se ilustra en la Figura 2, donde se muestran las conexiones entre las estructuras, sistemas y componentes (ESC).

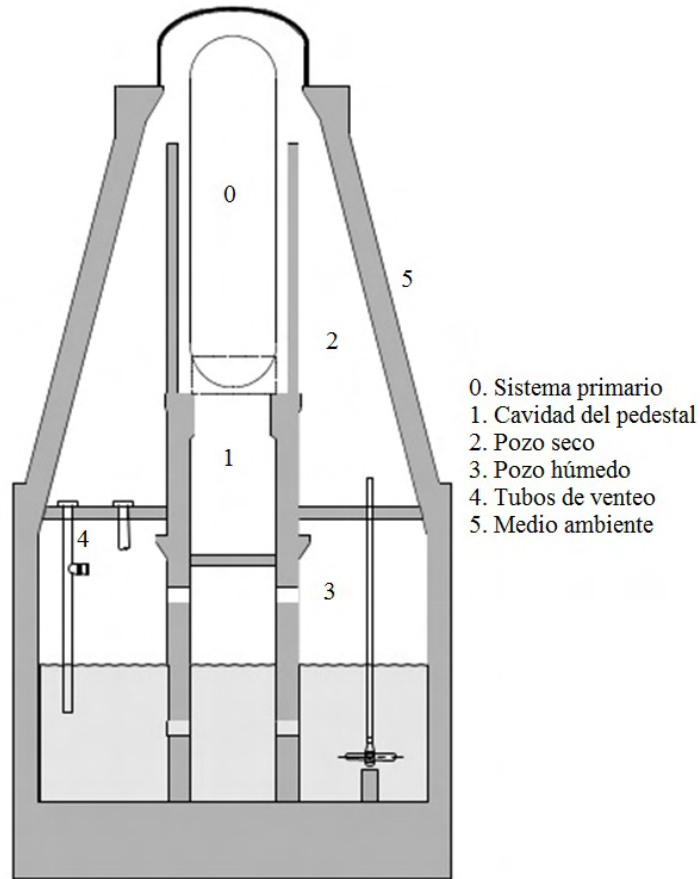


Figura 1. Compartimientos modelados de la contención MARK II con un reactor de agua en ebullición.

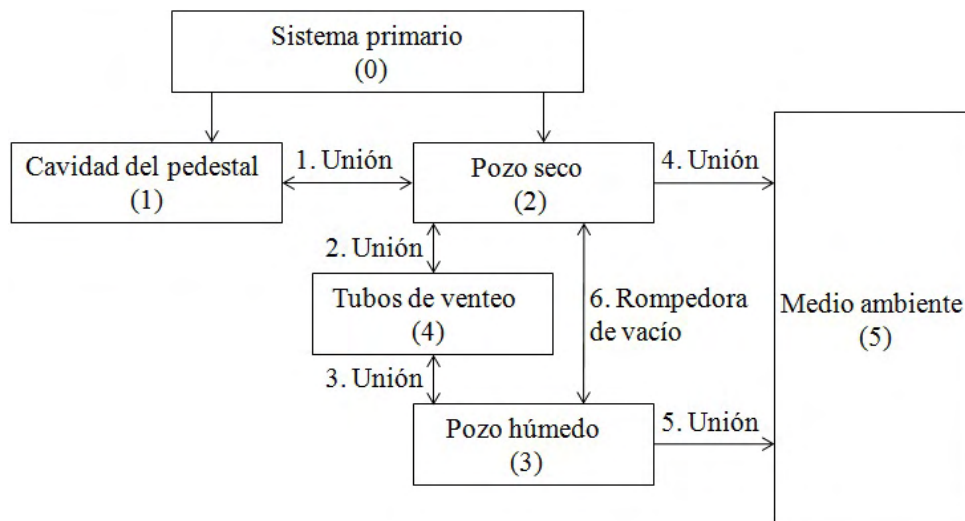


Figura 2. Conexiones de ESC en un contenedor MARK II.

En MAAP5.03, el sistema primario representa básicamente la vasija del reactor, la cual se divide en el cabezal superior (Tapa de la vasija), separadores de humedad y secadores de vapor, cabezal de la envolvente (Tapa de la envolvente), núcleo de combustible, cabezal inferior (Fondo de la vasija), tubos guía de las barras de control, parte superior del downcomer, parte inferior del downcomer, bombas de chorro y lazos de recirculación. Un esquema de la nodalización de código MAAP5.03 del *Sistema Primario* se muestra en la Figura 3 [2].

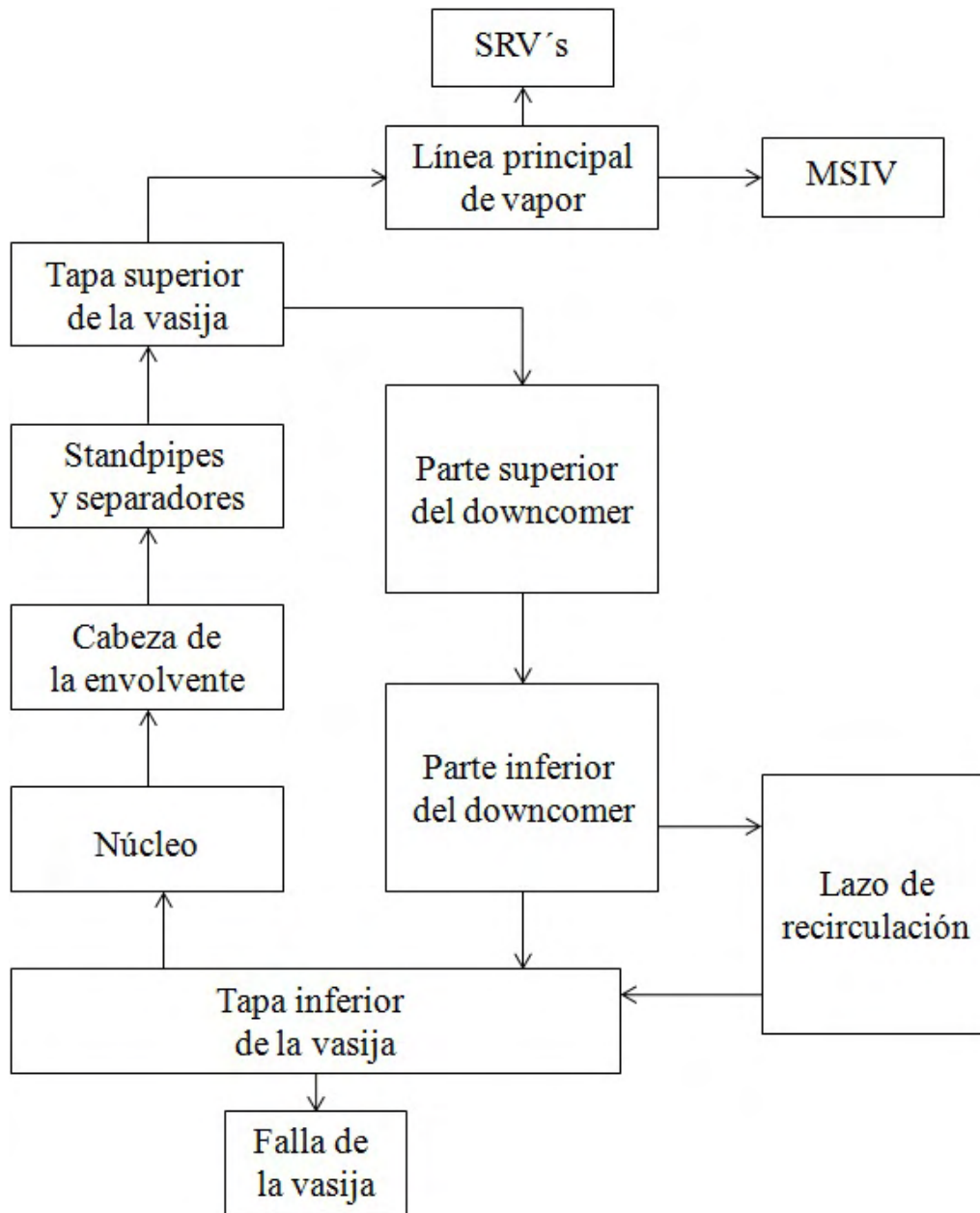


Figura 3. Diagrama de flujo del sistema primario.

3. DESCRIPCIÓN DE LA SECUENCIA DE ACCIDENTE

El evento de la pérdida total de corriente eléctrica (SBO, Station Blackout por sus siglas en inglés) [3], se da por la pérdida de la corriente eléctrica tanto externa como interna en combinación con la falla de todos los generadores diésel, la cual induce un accidente severo.

En este caso, con la pérdida de la corriente eléctrica externa, interna y la falla de los generadores diésel, no están disponibles los sistemas de inyección de refrigerante a la vasija a alta presión como son: el sistema de rocío del núcleo a alta presión (HPCS) y el sistema de enfriamiento del núcleo con reactor asilado (RCIC), además de los sistemas de inyección de refrigerante a la vasija a baja presión como son: el sistema de rocío del núcleo a baja presión (LPCS) y el sistema de inyección de agua a baja presión (LPCI).

Partiendo del estado estacionario el evento inicia con la pérdida total de energía eléctrica tanto externa como interna así como la falla de los generadores diésel y en consecuencia con la indisponibilidad de los sistemas de enfriamiento de emergencia a alta y baja presión, produciéndose la pérdida de la capacidad de enfriamiento del núcleo de combustible y de la contención primaria por la pérdida de los enfriadores, el cierre de las válvulas de aislamiento de las líneas de vapor principal por la acción de los resortes calibrados que tienen las válvulas al perderse la acción neumática que las mantiene abiertas, así como la disminución del nivel de agua en la vasija del reactor por el incremento de la presión al cerrar las válvulas de aislamiento de las líneas de vapor principal. El SCRAM del reactor es debido al incremento de presión en la vasija del reactor al cerrar las válvulas de aislamiento de las líneas de vapor principal.

Tanto el sistema de limpieza de agua del reactor (RWCU) y el sistema de recirculación están fuera de servicio por la pérdida de energía eléctrica y con el aumento de la presión en la vasija del reactor inicia la apertura y cierre en forma cíclica de las válvulas de seguridad y alivio un su modo seguridad por la acción de los resortes calibrados que tiene cada válvula al perderse la acción neumática que las opera, ocasionando un incremento de la presión en el pozo húmedo y pozo seco por las descargas de vapor de las válvulas de seguridad y alivio hacia la alberca de supresión y finalmente se da la falla de la vasija.

4. RESULTADOS

El evento de la pérdida total de corriente eléctrica sin inyección de refrigerante por parte del sistema de agua de alimentación, los sistemas de enfriamiento de emergencia a alta presión, los sistemas de enfriamiento de emergencia a baja presión y el sistema de enfriamiento del núcleo con reactor asilado fue simulado con el código de simulación MAAP5.03 con el propósito de obtener el comportamiento del término fuente durante el desarrollo del accidente. El código requiere de un término fuente inicial, el cual fue obtenido con el código ORIGEN-ARP de SCALE 6 [4], donde se ha considerado un combustible típico 10X10 para reactores de agua en ebullición que ha estado en el núcleo de combustible durante tres ciclos de operación y dos recargas. En la Tabla I se muestra el

término fuente inicial obtenido con ORIGEN-ARP, en donde se reporta la masa por elemento al final del tercer ciclo de operación.

Tabla I. Término fuente inicial para MAAP5.03.

Elemento	W (kg)	Elemento	W (kg)
Xe	444,00	Ru	187,40
Kr	34,48	Sb	1,12
I	15,63	Te	39,22
Rb	33,08	Ce	233,30
Cs	255,90	Pr	97,43
Sr	85,26	Nd	338,70
Ba	126,90	Sm	58,80
Y	44,77	Np	33,67
La	107,90	Pu	606,00
Zr	329,70	Am	7,588
Nb	2,10	Cm	1,515
Mo	289,60	Rh	37,19
Tc	70,55		

La Figura 4 muestra la presión en el sistema primario del reactor durante toda la simulación del evento SBO, al inicio y hasta los 21,000 segundos se puede observar un comportamiento de ciclado de las válvulas SRV's en su modo seguridad debido a su apertura y cierre, y a los 21,149.724 segundos se advierte una caída de presión debido a la falla de la vasija.

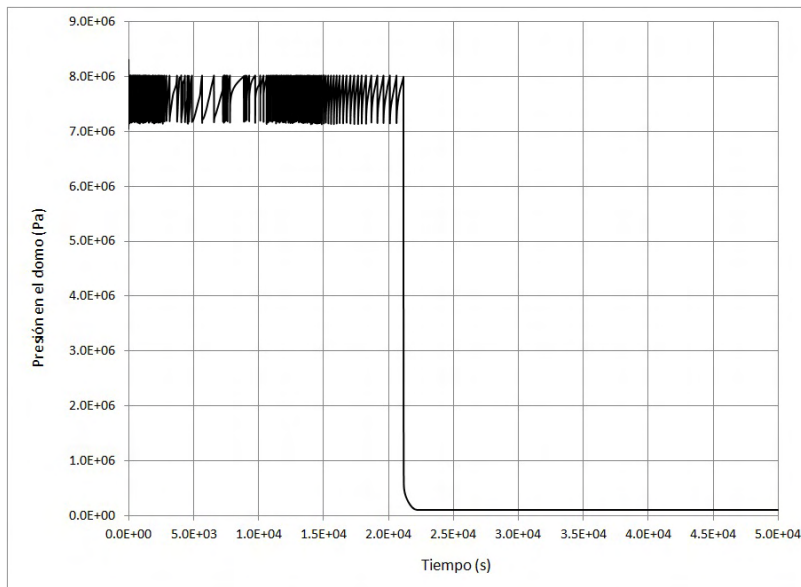


Figura 4. Presión en el sistema primario.

En la Figura 5 se puede ver el material del núcleo “molten” generado con picos alrededor de los 72,00 y 12,500 segundos con su respectivo desplome a los 21,149.724 segundos (falla de la vasija).

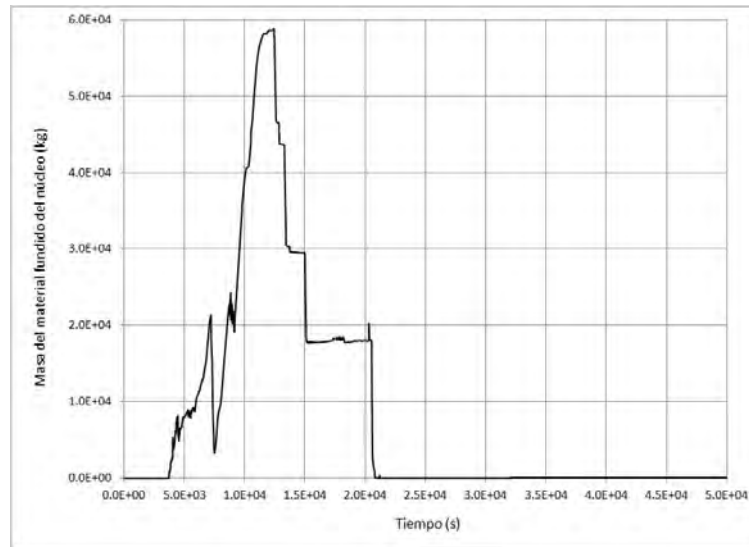


Figura 5. Material del núcleo “molten”.

En la Figura 6 expone el área de ruptura de la falla de la vasija a los 21149.724 segundos de iniciado la simulación del evento SBO y la Figura 7 muestra la masa del “corium” generada durante todo el evento SBO.

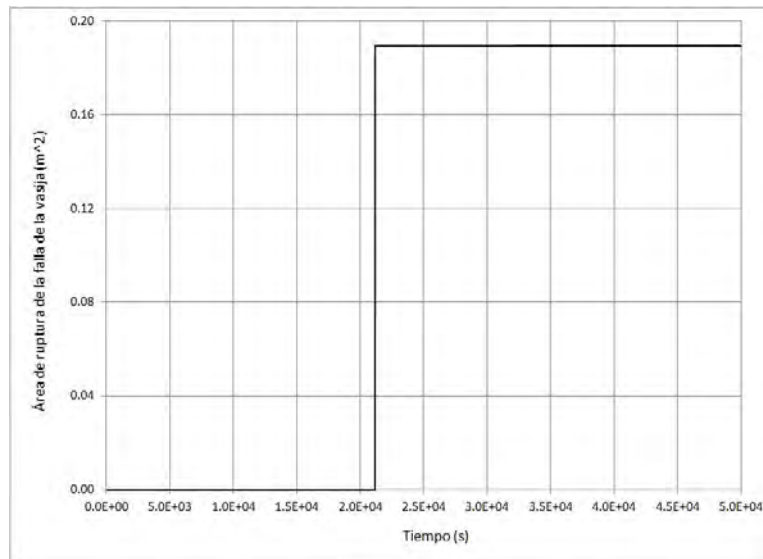


Figura 6. Área de ruptura de la falla de la vasija.

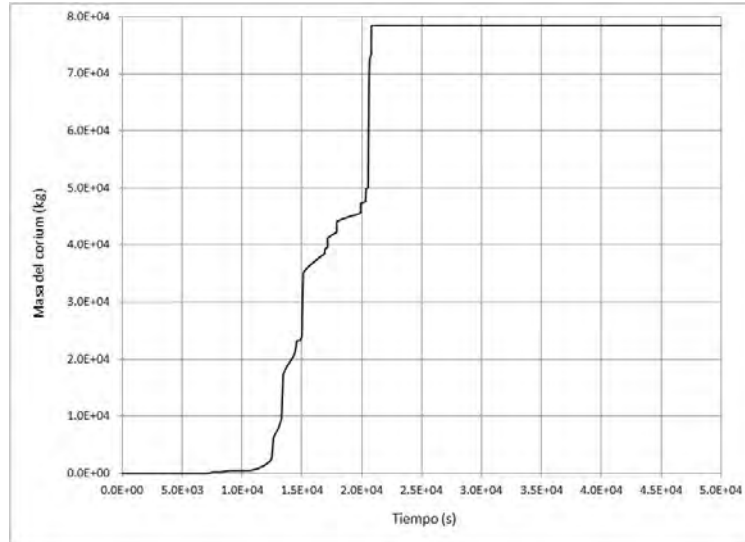


Figura 7. Masa del corium.

En las Figuras 8 y 9 se exhiben la evolución de los productos de fisión volátiles tanto en el sistema primario como en la contención respectivamente. En el caso de los productos de fisión contenidos en el sistema primario podemos observar que se alcanza un máximo de 111.52493 kg a los 4,191.1777 segundos de iniciado el accidente y posteriormente disminuyen. Debido a la ruptura de la falla de la vasija a los 21,149.724 segundos se liberan 149.50364 kg de productos de fisión a la contención.

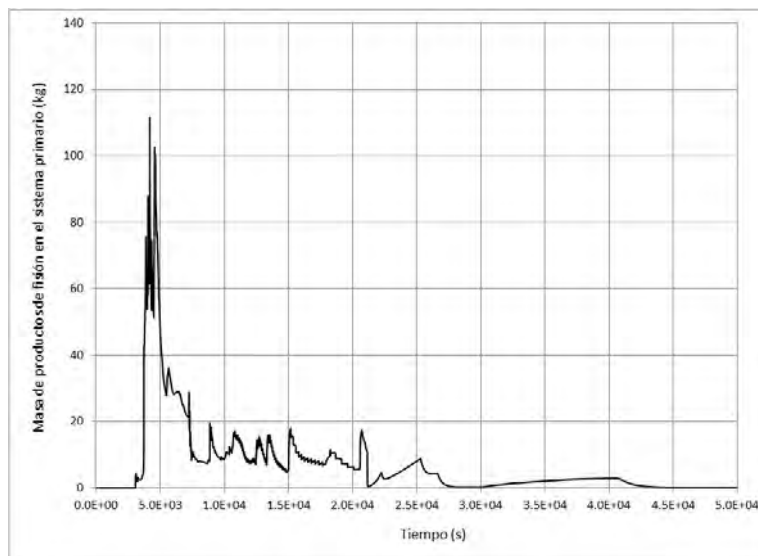


Figura 8. Masa total de productos de fisión volátiles en el sistema primario.

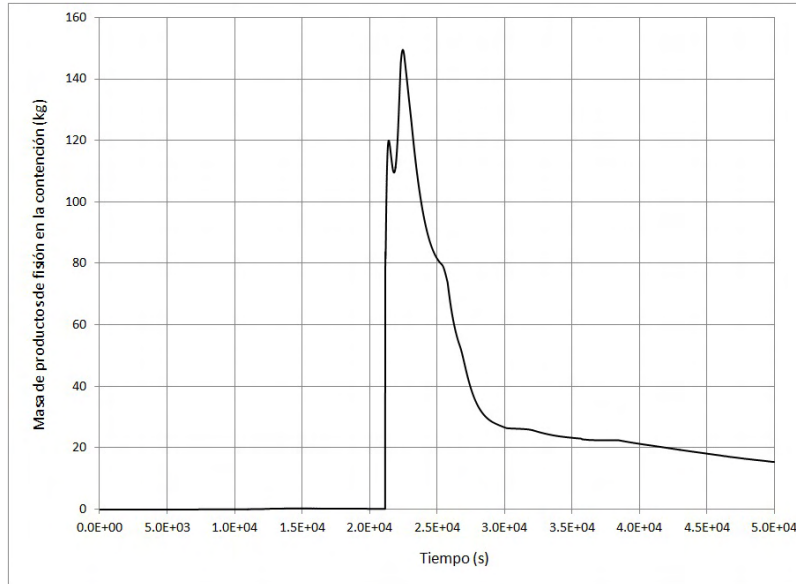


Figura 9. Masa total de productos de fisión volátiles en la contención.

La fracción de masa de Yoduro de Cesio (CsI) durante toda la secuencia del accidente, tanto en el pozo seco como en el pozo húmedo es mostrada en las Figuras 10 y 11 respectivamente.

Podemos ver que para el caso del pozo seco la liberación del CsI del sistema primario hacia éste, se da en el instante que falla la vasija, obteniéndose un pico alrededor de los 22,642 segundos de iniciado el accidente, posteriormente comenzara a esparcirse por toda la contención.

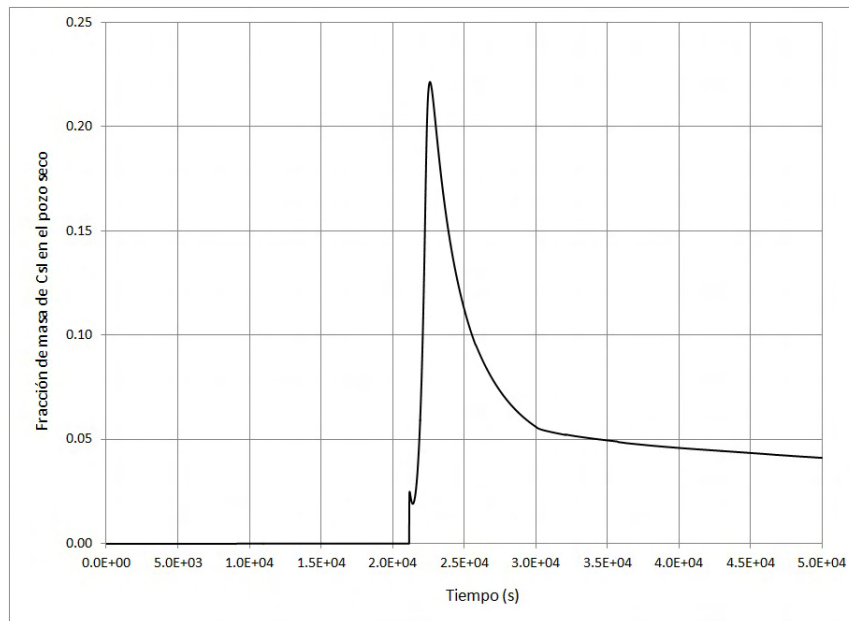


Figura 10. Comportamiento de la fracción de masa de CsI en el pozo seco.

A los 3,157 segundos de iniciado el accidente comienza el fallo de los combustibles, momento en el cual se produce el CsI. Debido a la comunicación que existe entre el sistema primario y el pozo húmedo por medio de las SRV el CsI se depositara progresivamente a lo largo de toda la simulación en la alberca de supresión contenida en el pozo húmedo, teniendo su punto máximo cuando se da la falla de la vasija, después se estabilizara en un valor por la retención del CsI en la alberca de supresión. Todo lo descrito anteriormente se puede ver en la Figura 11.

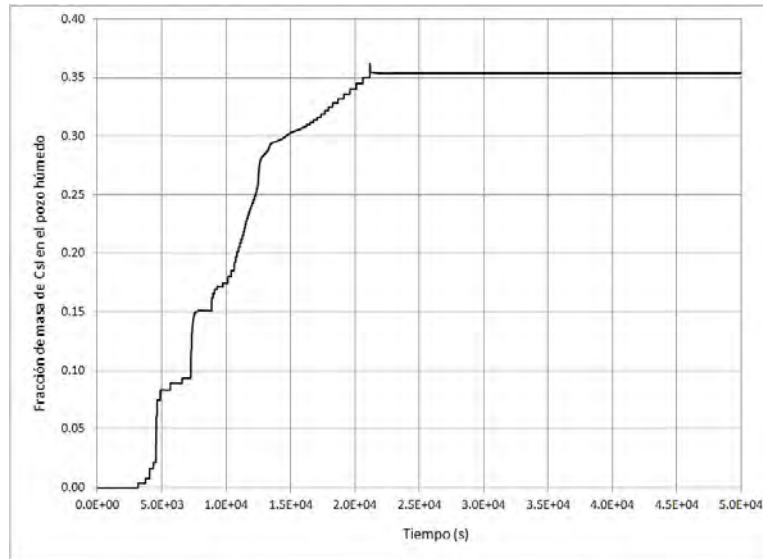


Figura 11. Comportamiento de la fracción de masa de CsI en el pozo húmedo.

En la Tabla II se dan los valores de la masa de los materiales que son liberados al contenedor reportados por MAAP5.03 al final de la simulación del SBO sin sistemas de enfriamiento de emergencia y con el RCIC fuera de servicio, los cuales son: dióxido de telurio (TeO_2), óxido de estroncio (SrO), dióxido de molibdeno (MoO_2), hidróxido de cesio (CsOH), óxido de lantano (La_2O_3), óxido cerio (CeO_2), antimonio (Sb), telurio (Te_2) y dióxido de uranio (UO_2).

Tabla II. Materiales liberados al contenedor.

Material	Masa (kg)
TeO_2	0.0783
SrO	3.5801
MoO_2	3.0133
CsOH	3.8950
La_2O_3	39.0455
CeO_2	11.2354
Sb	0.0261
Te_2	0.1709
UO_2	1.6127

5. CONCLUSIONES

Es importante subrayar que en el ININ es la primera vez que se analiza la obtención del término fuente durante la simulación del accidente debido al SBO, sin sistemas de enfriamiento de emergencia y con el RCIC fuera de servicio. Se desarrolló un modelo genérico de un reactor de agua en ebullición con un contenedor MARK II para el código MAAP5.03, motivo por el cual se deberá llevar a cabo una revisión de los valores de las distintas variables del archivo de parámetros y/o archivo de entrada para aplicarse a condiciones específicas de planta.

AGRADECIMIENTOS

Los autores reconocen el apoyo del Fondo de Sustentabilidad Energética SENER-CONACYT al proyecto FSE-2013-04-213519, del cual este trabajo forma parte de los Entregables del proyecto.

REFERENCIAS

1. EPRI, “Modular Accident Analysis Program 5 (MAAP5) Applications Guidance, Desktop Reference for Using MAAP5 Software—Phase 3 Report”, Technical Report, November 2017.
2. Fausky & Associates, inc., “BWR MARK II Users Guide Modular Accident Analysis Program (MAAP)”, Electric Power Research Institute (November 2008).
3. U.S.N.R.C., “Station Blackout Accident Analyses (Part of NRC Task Action Plan A-44)”, NUREG/CR3226, May 1983.
4. ORNL "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations", ORNL/TM-2005/39, Version 6, January 2009.

Reactores modulares pequeños una opción para México

G. Mendoza

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México Toluca S/N, La Marquesa, Ocoyoacac, México, C. P. 52750
gonzalo.mendoza@inin.gob.mx

X. López

Comisión Federal de Electricidad, Central Laguna Verde
Kilómetro 42.5 Cardel Nautla, Veracruz, México.
xochitl.lopez@cfe.gob.mx

Resumen

México ha tenido una experiencia buena con la nucleoelectricidad, la única central de este tipo con dos unidades que opera comercialmente desde 1990, equipadas con reactores de agua en ebullición.

Los reactores modulares pequeños son una tecnología emergente que puede desempeñar un papel importante para satisfacer la creciente demanda mundial de energía, derivada en gran parte del crecimiento de la población y las crecientes necesidades del mundo en desarrollo. Satisfacer la mayor demanda de energía requerirá un mejor uso de las fuentes de energía actualmente disponibles, los cambios estratégicos en la combinación de energía que se está utilizando y la aplicación de nuevas fuentes de energía.

El objetivo fundamental de este trabajo es poner a consideración las nuevas tecnologías, así como sus ventajas y desventajas de los diseños de reactores modulares pequeños sobre los reactores grandes y promover la inclusión de algún tipo de reactor modular pequeño que permitiría en parte satisfacer las necesidades futuras de energía eléctrica.

Como parte del objetivo también es, dar continuidad y acelerar la adquisición de experiencia y entrenamiento en el campo de la energía nuclear en México, y en algunos aspectos replantearse como en el caso de los diferentes diseños de Reactores Avanzados, Avanzados/Pasivos y de Nueva Generación, con el objeto de reactivar y dar impulso a las actividades que conduzcan al desarrollo científico y tecnológico en estos temas. Con este trabajo se pretende ayudar a incursionar en algunos temas que se podrían abordar, y al mismo tiempo llevar a cabo el proceso de formación de cuadros de trabajo e incorporarse a los desarrollos de diseños de reactores modulares pequeños. Tales temas podrían ser; estimar el estado actual y las perspectivas futuras de los materiales estructurales para los ensambles de combustible de Reactores Rápidos Enfriados por Metal Líquido y los materiales de encamisado y envolvente de combustible, en particular centrarse en la necesidad de desarrollar aceros que sean fácilmente compatibles con los refrigerantes líquidos metálicos.

1. INTRODUCCIÓN

En el mundo la tendencia con las plantas nucleares que concluyeron la licencia de operación está llevando a cabo los requerimientos reglamentarios que deben cumplirse con el fin de obtener una renovación de licencia, inclusive, ya se tiene la normativa aplicable y regulación para una segunda solicitud de renovación de licencia, que permite operar las plantas nucleares hasta 80 años.

Por otro lado, la inversión en energía cayó por tercer año consecutivo en 2017, según la Agencia Internacional de Energía y la inversión en energía nuclear se redujo en casi un 45% el año antepasado a 17 mil millones de dólares. El gasto en reactores nuevos alcanzó el nivel más bajo en cinco años, y la inversión en mejoras de unidades existentes aumentó.

Consideramos que para México sería una buena opción empezar a evaluar y estudiar las potencialidades de los diseños de reactores modulares pequeños para poder reiniciar un programa nuclear que contribuirá al cumplimiento de los compromisos nacionales hacia el combate al cambio climático, así como en la generación de electricidad.

Aun cuando la Reforma Energética del 2013 no enfatiza el uso de la energía nuclear, si la define como “energía limpia” y por ello, es uno de los energéticos llamados a integrar la oferta de energías limpias que permitan cumplir los compromisos contraídos por el país en relación con la lucha contra el cambio climático. Entre las distintas fuentes de energía primaria disponibles hoy, la energía nuclear representa una de las opciones que permite generar energía en condiciones ambientalmente satisfactorias. La energía nuclear tiene una emisión muy baja de gases de efecto invernadero. Además, en un aspecto más amplio de evaluación de costos externos asociados a daños ambientales y a la salud, la energía nuclear se coloca dentro de las mejores alternativas de generación eléctrica.

El primer paso para poder llegar a implementar los diseños de reactores modulares pequeños es estudiando sus potencialidades y características de diseño, así como los desafíos que enfrenta su licenciamiento. Observar sus ventajas y desventajas y revisar la situación internacional y determinar su viabilidad para el país. Existe un gran interés en unidades pequeñas y más simples para generar electricidad a partir de la energía nuclear y para el calor del proceso. Este interés en los reactores de energía nuclear pequeños y medianos está impulsado tanto por el deseo de reducir el impacto de los costos de capital como por proporcionar energía lejos de los grandes sistemas de red. Las tecnologías involucradas son numerosas y muy diversas.

2. PANORAMA GENERAL DE LOS DISEÑOS, APLICACIONES Y DESARROLLO DE REACTORES MODULARES PEQUEÑOS

En esta sección se proporciona una descripción breve de los Reactores Modulares Pequeños (en inglés SMR), destacando sus características distintivas en comparación con las grandes centrales nucleares tradicionales, los reactores no modulares de menos de 700 MW(e). Las características de diseño y aplicaciones específicas de los SMR se describen junto con un rango de estimaciones para la viabilidad económica de su implementación.

2.1. Características de Diseño

Los reactores modulares pequeños tienen varias características de diseño que los diferencian de otras fuentes de generación de energía. En contraste con las grandes instalaciones de generación que utilizan combustibles fósiles o nucleares que normalmente tienen una producción de electricidad superior a 700 MW (e), los SMR generan una potencia menor a 300 MW(e). Si bien a nivel mundial existen varios diseños de reactores operando que caen dentro del rango de tamaño de los SMR pero que no tienen características semejantes a los SMR. Dependiendo del diseño específico del reactor, los SMR se caracterizan no solo por su tamaño, sino también por sus características que incluyen diseño integrado, modularidad de fabricación e instalación, seguridad pasiva y sistemas de remoción de calor, contención subterránea y requisitos de combustible reducidos.

Existen varias características de diseño que hacen que los SMR sean sustancialmente diferentes de los diseños de plantas de energía nuclear en operación. Una de las características clave es la modularidad tanto en la fabricación como en el despliegue. Para los SMR, debido a una potencia térmica sustancialmente menor, los componentes del sistema primario se pueden integrar dentro o en la proximidad con la vasija del reactor, por lo tanto, formando un módulo de reactor que elimina la necesidad de tuberías de grandes longitudes para el refrigerante.

Además de las ventajas asociadas con su pequeño tamaño y naturaleza modular, los SMR tienen importantes características de diseño relacionadas con la seguridad pasiva, la eliminación pasiva de calor, la simplicidad de diseño y la no proliferación. Las funciones de seguridad pasiva permiten que los SMR se apaguen automáticamente, mientras se mantienen enfriados sin alimentación externa o intervención del operador, por un período de tiempo mucho más prolongado que los diseños de reactor refrigerado por agua convencionales en operación. La eliminación pasiva de calor permite que el reactor permanezca enfriado permitiendo que el enfriamiento tenga lugar a través de la gravedad, la convección y la evaporación, y sin el uso de bombas activas para hacer circular el fluido de enfriamiento. La simplicidad del diseño se realiza a través de una reducción grande en los componentes en comparación con las grandes instalaciones de energía, y mediante la integración de los sistemas primarios en una vasija simple del reactor.

2.2. Viabilidad Económica y Despliegue

Los diseños simplificados de SMR dan como resultado una reducción en el número de componentes y una reducción proporcional en los costos. La modularidad de los SMR que permite la fabricación centralizada de los componentes principales de la unidad de potencia tiene varias ventajas, incluida la estandarización de los componentes y el diseño, lo que genera importantes economías de producción en masa. Las economías de escala de la modularización provendrán no solo de la fabricación en masa de módulos de componentes, sino también de los aumentos de ganancias de productividad y eficiencia a medida que la producción de módulos sucesivos continúa a lo largo del tiempo. Las economías obtenidas a través de la fabricación y el aprendizaje en masa darán como resultado que los SMR sean económicamente competitivos con las instalaciones nucleares

convencionales, compensando la pérdida de la "economía de escala" de las instalaciones nucleares más grandes.

Además de estas economías de escala, los SMR requieren tiempos de construcción más cortos en comparación con las grandes instalaciones de generación, lo que se traduce en una reducción de los costos de financiamiento a largo plazo y los riesgos de calendarización. Los costos operativos para la energía nuclear, incluidos los SMR, tienen una sensibilidad mucho menor a la volatilidad del costo del combustible que el carbón o el gas natural. Estos factores, junto con la recarga del reactor más eficiente y bajos costos de mantenimiento, pueden resultar en costos de electricidad muy competitivos y nivelados.

2.3. Aplicaciones de los SMRs

Las características de diseño de los SMR permiten una flexibilidad de implementación y una variedad de aplicaciones que no se encuentran en grandes plantas de energía nuclear. Estas incluyen la incorporación de SMR en una variedad de tipos y tamaños de redes, opciones para la integración con energías renovables, aplicaciones no eléctricas y características de seguridad. En términos de integración de la red, el tamaño y la modularidad de los SMR les permite formar parte de redes eléctricas más pequeñas que sirven a una población más dispersa en comparación con las centrales nucleares o las instalaciones de generación de combustibles fósiles. Además, los módulos SMR pueden integrarse secuencialmente para proporcionar incrementos progresivos en la producción de energía.

Otra característica importante de los SMR es su uso potencial en aplicaciones no eléctricas. Si bien las grandes plantas nucleares y de combustibles fósiles se usan casi exclusivamente para producir electricidad, algunos SMR innovadores que operan a temperaturas más altas (por ejemplo, reactores de alta temperatura enfriados por gas) tienen potenciales aplicaciones adicionales. Las aplicaciones de cogeneración para las que los SMR son particularmente adecuadas son: 1) la provisión de calor de proceso para aplicaciones industriales; 2) calefacción urbana; y 3) desalinización térmica.

Además de su tamaño y modularidad, las características de diseño y seguridad de los SMR los hacen accesibles a mercados que no serían adecuados para grandes plantas nucleares o de combustibles fósiles. El emplazamiento en lugares que no sean cerca de grandes cuerpos de agua es posible, ya que el agua necesaria para enfriar un SMR se reduce significativamente. Además, los sistemas de seguridad pasiva de algunos diseños permiten que los SMR operen sin fuentes de energía o agua externas y sin acción humana durante períodos prolongados, lo que les permite operar en lugares donde los sistemas de soporte no están bien desarrollados. De manera similar, al construir por debajo del nivel del suelo, los requisitos de seguridad de SMR pueden ser menores que para plantas de energía nuclear más grandes [1].

3. COMPARACIÓN CON OTRAS ENERGÍAS LIMPIAS

La energía nuclear y la energía renovable son los principales competidores de la electricidad baja en carbono en muchos países. A medida que las tecnologías de energía renovable han crecido en

volumen e inversión, se vuelven mucho más baratas. En respuesta a la crisis climática, pocos países tienen los recursos económicos para expandir sustancialmente la inversión en energía nuclear y renovable. Esto se demuestra en 2016 por el gobierno del Reino Unido, que está ofreciendo enormes subsidios a largo plazo a la energía nuclear, mientras que reduce severamente los subsidios existentes a corto plazo a la energía renovable.

Enseguida se presenta un análisis de tendencias respecto a la Energía Nuclear frente a energía renovable. A pesar de su producción variable, que en general se puede pronosticar al menos con la misma precisión que la demanda de electricidad, la energía eólica y solar fotovoltaica se está volviendo significativa. La electricidad real producida por energía solar fotovoltaica, eólica y nuclear presenta niveles cambiantes de producción desde 1997, durante este período, ha habido 616 TWh adicionales por año de energía eólica producida en 2013 en comparación con 1997, 124 TWh de energía solar fotovoltaica superando a la nuclear con solo 114 TWh.

La fecha de referencia es 1997, ya que esta era la fecha de la firma del Protocolo de Kyoto. Teniendo en cuenta el bajo nivel de desarrollo nuclear en los últimos 15 años, es sorprendente que agencias como la Agencia Internacional de Energía (AIE) sigan asumiendo en sus escenarios de descarbonización que habrá un aumento significativo en el despliegue de la energía nuclear.

Si bien, por un lado, reconocen el bajo nivel de inversión nuclear desde 2000, que la AIE calcula que es de US \$ 8 mil millones por año, aún asumen que durante 2014-2035 la inversión anual promediaría US \$ 78 mil millones. Esto parece muy divergente del sentimiento y las elecciones actuales del mercado, por lo que parece poco probable que se acelere la descarbonización del sector de la energía si no es simplemente imposible de lograr al confiar en el despliegue rápido de la energía nuclear.

La participación de la energía nuclear en la generación total de electricidad mundial disminuyó por décimo año consecutivo, a casi el 11% en 2015. Sin embargo, esto todavía corresponde a casi un tercio de la producción de electricidad baja en carbono del mundo. La rápida expansión impulsada por las políticas de la energía eólica, solar y la biomasa en la generación de electricidad continuó, pero los combustibles fósiles, especialmente el carbón, siguen siendo el principal combustible para el suministro de energía. Aunque las nuevas energías renovables (que incluyen energía eólica, solar y geotérmica, pero no hidroeléctrica) han superado a la energía nuclear en capacidad instalada total, su participación en la generación de electricidad real es menos de un tercio de la producida por la energía nuclear debido a su intermitencia [2].

Para México, teniendo como marco de referencia que la tendencia mundial a invertir en programas relacionados con la energía va a la baja y, además, considerando que en la Reforma Energética del 2013 la energía nuclear se define como “energía limpia”, el uso de esta permitirá cumplir los compromisos contraídos en relación con la lucha contra el cambio climático.

Es conveniente que el sector de generación de energía que ha estado impulsando la inversión en energía solar fotovoltaica y eólica, no prescinda de los beneficios y ventajas de la energía nuclear a través de los reactores pequeños modulares, ya que, se pueden construir unidades pequeñas independientes para sitios remotos, éstas se consideran una inversión más manejable. Una

comparación con las energías limpias como la eólica y la solar estima que, el área ocupada por un parque eólico de 225 MWe es 4000 veces el área de un SMR de 225 MWe, y el área ocupada por una granja de energía solar fotovoltaica de 225 MWe es del orden de 160 veces la ocupada por un SMR de 225 MWe.

4. POTENCIALIDADES Y DISEÑOS DE LOS SMRs

El primer paso para poder llegar a implementar los diseños de reactores modulares pequeños es estudiando sus potencialidades y características de diseño, así como los desafíos que enfrenta su licenciamiento. Observar sus ventajas y desventajas y revisar la situación internacional y determinar su viabilidad para el país.

Existe un gran interés en unidades pequeñas y más simples para generar electricidad a partir de la energía nuclear y para el calor de proceso. Este interés en los reactores de energía nuclear pequeños y medianos está impulsado tanto por el deseo de reducir el impacto de los costos de capital como por proporcionar energía lejos de los grandes sistemas de red. Las tecnologías involucradas son numerosas y muy diversas.

4.1. Ventajas y Desventajas de los SMRs

La Agencia Internacional de Energía Atómica (AIEA) define “reactor pequeño” como inferior a 300 MWe, y hasta aproximadamente 700 MWe como “reactor mediano”. Juntos ahora la AIEA los denomina reactores pequeños y medianos (SMR).

El enorme potencial de los SMR se basa en una serie de factores como:

- Su pequeño tamaño y modularidad, los SMR casi podrían construirse completamente en un entorno de fábrica controlado e instalarse módulo por módulo, mejorando el nivel de calidad y eficiencia de la construcción.
- Su pequeño tamaño y características de seguridad pasiva los prestan para países con redes eléctricas más pequeñas y con menos experiencia en la energía nuclear.
- El tamaño, la eficiencia de la construcción y los sistemas de seguridad pasiva (que requieren menos redundancia) pueden conducir a un financiamiento más fácil en comparación con el de las plantas más grandes.
- Además, lograr “economías de producción en serie” para un diseño de SMR específico reducirá aún más los costos.

Las características de un SMR incluyen:

- Potencia pequeña y arquitectura compacta y usualmente (al menos para sistemas de suministro de vapor nuclear y sistemas de seguridad asociados) empleo de conceptos pasivos. Por lo tanto, existe una menor dependencia de los sistemas activos de seguridad y bombas adicionales, así como de la energía de Corriente Alterna para la mitigación de accidentes.
- La arquitectura compacta permite modularidad de fabricación (en la fábrica), lo que también puede facilitar la implementación de estándares de calidad más altos.
- La potencia más baja conduce a la reducción del término fuente, así como un menor inventario radiactivo en un reactor (reactores más pequeños).
- Potencial para la ubicación por debajo del nivel del suelo (subterránea o subacuática) de la unidad del reactor que proporciona más protección contra riesgos naturales (por ejemplo, sísmicos o tsunamis según la ubicación) o provocados por el hombre (por ejemplo, impacto de aeronaves).
- El diseño modular y el tamaño pequeño se presta para tener múltiples unidades en el mismo sitio.
- Menor requerimiento de acceso al agua de enfriamiento, por lo tanto, adecuado para regiones remotas y para aplicaciones específicas como la minería o la desalinización.
- Capacidad para remover el módulo del reactor o el desmantelamiento en sitio al final de la vida útil.

El licenciamiento es un desafío para los SMR, los costos de certificación del diseño, licencia de construcción y operación no son necesariamente menores que para reactores grandes, lo que supone una gran carga para los desarrolladores y los proponentes [3].

4.2. Experiencia Nacional en SMRs

México a través del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares ha participado y adquirido experiencia en este concepto de reactores a través de convenios de colaboración con la compañía Westinghouse. El alcance de la participación fue en tareas relativas a los cálculos del Análisis Probabilístico de Riesgos para eventos internos en el diseño del reactor IRIS (en inglés, International Reactor Innovative & Secure).

IRIS de Westinghouse (International Reactor Innovative & Secure) es un diseño de reactor que se desarrolló durante más de dos décadas. Se propuso una capacidad de 1000 MWt, 335 MWe, aunque

podría escalar a 100 MWe. IRIS es un reactor de agua a presión modular con sistema integral de refrigerante primario y circulación por convección. El combustible es similar a los LWR (Reactor de Agua Ligera) actuales y (al menos para la versión de 335 MWe) los ensamblajes de combustible serían idénticos a los de AP1000. El enriquecimiento es del 5% con veneno quemable e intervalo de recarga de hasta cuatro años (o más con un mayor enriquecimiento y combustible MOX). La certificación de diseño de los EE. UU, se encontraba en la etapa previa a la solicitud, pero ahora figura como "inactiva", y el concepto ha evolucionado en el SMR de Westinghouse [4].

4.3. Actualidad en Otros Países de los SMRs.

4.3.1. Soporte de los Estados Unidos para los SMRs

En abril de 2018, el DOE seleccionó 13 proyectos para recibir \$ 60 millones USD de financiamiento de I + D de costo compartido para tecnologías nucleares avanzadas, incluidos los primeros reconocimientos en el marco de la Iniciativa de Oportunidades Industriales de los Estados Unidos para el Desarrollo Avanzado de la Tecnología Nuclear.

4.3.2. Soporte del Reino Unido para los SMRs

En diciembre de 2017, el Departamento de Negocios, Energía y Estrategia Industrial (BEIS), el departamento sucesor de DECC (Department of Energy & Climate Change), anunció que el concurso de SMR había sido cerrado. En cambio, se lanzó un nuevo concurso de reactor modular avanzado de dos fases, diseñado para incorporar una gama más amplia de tipos de reactores. El financiamiento total para el concurso es de hasta £ 44 millones, y se recibieron 20 ofertas para el plazo inicial del 7 de febrero de 2018.

4.3.3. Otros países

Países como China han desarrollado la tecnología para reactores modulares pequeños, el proyecto más avanzado se encuentra en China, donde Chinergy está comenzando a construir el HTR-PM (Reactor de Alta Temperatura) de 210 MWe, que consta de dos reactores gemelos enfriados por gas a alta temperatura, que se basan en la experiencia de varios reactores innovadores de los años 1960 a 1980.

Urenco (es una compañía de combustible nuclear que opera varias plantas de enriquecimiento de uranio en Alemania, los Países Bajos, los Estados Unidos y el Reino Unido) ha pedido el desarrollo europeo de reactores intrínsecamente seguros, muy pequeños de 4 MWe, basados en conceptos de HTR moderados con grafito. Está buscando apoyo del gobierno para un prototipo de "batería U" que funcionaría durante 5-10 años antes de requerir recarga de combustible o servicio.

Ya operan en Siberia cuatro unidades pequeñas en la planta de cogeneración Bilibino. Estas cuatro unidades de 62 MWt (térmicos), son un diseño inusual de agua hirviendo moderada con grafito con canales de agua / vapor a través del moderador. Producen vapor para calefacción urbana y 11 MWe (red) de electricidad cada uno, lejos de cualquier red. Son los reactores de potencia comercial más

pequeños del mundo y han tenido un buen desempeño desde 1976, más baratos que las alternativas de combustibles fósiles en el clima severo de esta región ártica, pero se retirarán para el 2023.

También en la categoría de reactores pequeños están los reactores de agua pesada presurizados de 220 MWe (PHWR) basados en tecnología canadiense, y los PWR chinos de 300-325 MWe como los construidos en Qinshan Phase I y en Chashma en Pakistán, y ahora llamados CNP-300 (China Nuclear Power Unit).

La Corporación de Energía Nuclear de la India (NPCIL, Nuclear Power Corporation of India Limited) se está centrando ahora en las versiones de 540 MWe y 700 MWe de su PHWR, y está ofreciendo versiones de 220 y 540 MWe a nivel internacional. Estos pequeños diseños establecidos son relevantes para situaciones que requieren unidades pequeñas a medianas, aunque no son tecnología de punta.

Otra línea importante de desarrollo es en reactores rápidos muy pequeños de menos de 50 MWe. Algunos están concebidos para áreas alejadas de las redes de transmisión y con pequeñas cargas; otros están diseñados para operar en grupos en competencia con unidades grandes. Las tablas I y II muestran una lista de reactores pequeños en operación y reactores pequeños en construcción, respectivamente [3].

Tabla I. Reactores pequeños en operación

Nombre	Capacidad	Tipo	Desarrollador
CNP-300	300 MWe	PWR	SNERDI/CNNC, Pakistan & China
PHWR-220	220 MWe	PHWR	NPCIL, India
EGP-6	11 MWe	LWGR	at Bilibino, Siberia (cogen, soon to retire)

Tabla II. Diseño de reactores pequeños bajo construcción

Nombre	Capacidad	Tipo	Desarrollador
KLT-40S	35 MWe	Integral PWR	OKBM, Russia
RITM-200	50 MWe	Integral PWR	OKBM, Russia
CAREM-25	27 MWe	Integral PWR	CNEA & INVAP, Argentina
HTR-PM	2x250 MWt	HTR	INET, CNEC & Huaneng, China
ACPR50S	60 MWe	PWR	CGN, China

5. PROPUESTA DE ACTIVIDADES PARA INCURSIONAR EN LOS SMRs

En los últimos años, ha habido un renacimiento de las actividades de investigación y desarrollo sobre los combustibles del Reactor Rápido Refrigerado por Metal Líquido (LMFR) y las opciones del ciclo del combustible. Se tiene contemplado estudiar los orígenes y la naturaleza del daño por

radiación a los materiales estructurales utilizados en los reactores rápidos, la selección y la composición química de los materiales de encamisado y envolvente utilizados para los LMFR.

En las siguientes subsecciones se indican algunos tópicos o temas que se tiene contemplado abordar, y al mismo tiempo llevar a cabo el proceso de formación de cuadros de trabajo y así incursionar o incorporarse en los desarrollos de diseños de reactores modulares pequeños.

Estimar el estado actual y las perspectivas futuras de los materiales estructurales para los ensambles de combustible del LMFR en general, y los materiales de encamisado y envolvente de combustible, en particular se centra en la necesidad de desarrollar aceros que sean fácilmente compatibles con los refrigerantes líquidos metálicos. Entre otros temas enfocados a la seguridad están los relacionados con las técnicas y metodologías del Análisis Probabilístico de la Seguridad.

5.1. Evaluación Probabilística de Riesgo

Un área clave de la estrategia de Evaluación Probabilística de Riesgo (PRA) del Reactor Modular Pequeño Avanzado es el desarrollo de metodologías y herramientas que se usarán para predecir la seguridad, la protección, el rendimiento y la viabilidad de despliegue de los sistemas del SMR a partir del Proceso de diseño a través de la fase de operación. El objetivo de la actividad del PRA de los SMR será desarrollar métodos y herramientas cuantitativos y el marco de análisis asociado para evaluar una variedad de riesgos. Estos riesgos se centrarán en los diseños de SMR y las estrategias operativas, ya que se relacionan con la base técnica detrás de la caracterización de la seguridad.

El desarrollo y la implementación de métodos de evaluación de seguridad centrados en SMR pueden requerir nuevos métodos analíticos o la adaptación de los métodos tradicionales al diseño avanzado y las características de operación de los SMR. El desarrollo de modelos de seguridad específicos de SMR para la determinación de margen proporcionará un caso de seguridad que describe los posibles accidentes, las opciones de diseño (incluidos los controles postulados) y respalda las actividades de concesión de licencias al proporcionar una base técnica sobre seguridad.

En los diseños de SMR, como en los diseños de reactores más grandes, la estrategia de defensa en profundidad se utiliza para proteger al público y al medio ambiente de las liberaciones accidentales de radiación. Ciertas características comunes de los reactores más pequeños se prestan a características de seguridad pasivas e inherentes, tales como tamaños de núcleo relativamente más pequeños que permiten diseños de sistemas de refrigerante integrales y relaciones de superficie / volumen mayor del reactor o densidades de potencia del núcleo más bajas que facilitan la eliminación pasiva del calor de decaimiento. Usando los beneficios de tales características, el objetivo principal es eliminar o prevenir, a través del diseño, la mayor cantidad posible de iniciadores de accidentes y las consecuencias de los accidentes. Los iniciadores de accidentes plausibles restantes y las consecuencias se abordan mediante combinaciones apropiadas de sistemas de seguridad activos y pasivos. El resultado esperado es una mayor simplicidad de la planta con altos niveles de seguridad que, a su vez, pueden permitir reducir los requisitos de emergencia fuera del sitio [5].

5.2. Daños por Radiación en Materiales Estructurales del Núcleo en Reactores Rápidos de Metal Líquido

A partir de que los SMR están en desarrollo para todas las líneas principales de reactores como son los Reactores de Agua Ligera (LWR), Reactores de Agua Pesada (HWR), Reactores Enfriados por Gas (GCR) y los Reactores Refrigerados por Metal Líquido (LMCR), en esta última línea hay dos reactores de cría. Se está considerando llevar a cabo investigaciones sobre la tecnología de reactores rápidos, en actividades tales como el estudio de daño por radiación sobre los materiales estructurales del núcleo debido a intensos ambientes de neutrones, además de estudios sobre compatibilidad de los aceros con los refrigerantes de metal líquido.

5.2.1. Daño por radiación debido a intensos ambientes de neutrones

En diversos entornos de reactores hay campos intensos de fotones, partículas cargadas y neutrones, cada uno de los cuales posee una amplia gama de energías. Todos estos tipos de radiación pueden causar cambios en los materiales estructurales. En general, sin embargo, se experimenta un balance diferente de las contribuciones de daños no solo para cada material sino también para cada tipo de reactor y para cada tipo de ubicación como núcleo, manto, reflector, vasija de contención, etc. También se estudian otros aspectos que afectan al desempeño del combustible, así como los criterios de diseño para tubos de encamisado y envolvente

En los reactores basados en la fisión nuclear, los neutrones existen en un rango de energía que abarca alrededor de 10 órdenes de magnitud, pero la contribución relativa de cualquier rango de energía dado varía principalmente con el tipo de refrigerante principalmente y el tipo de combustible de manera secundaria. Los neutrones crean dos tipos de daño, uno de los cuales predomina en las energías inferiores (transmutación) y el otro en las energías superiores (desplazamiento atómico). Para las aleaciones estructurales ubicadas en las regiones del núcleo y cercanas al núcleo de los reactores rápidos, el daño predominante se produce como resultado de las colisiones de los neutrones de alta energía con los átomos en el metal, lo que crea más del 95% del daño por desplazamiento. En comparación con los reactores enfriados por agua, la transmutación es solo una contribución de segundo orden al proceso de daño en aleaciones austeníticas y especialmente ferríticas irradiadas en reactores rápidos. Los campos de partículas cargadas y fotones no aumentan significativamente el desplazamiento atómico en los reactores rápidos, sino que contribuyen principalmente al calentamiento interno del componente, que generalmente se manifiesta como calentamiento gamma.

5.3 Compatibilidad de los Aceros con los Refrigerantes de Metal Líquido.

5.3.1. Compatibilidad con sodio líquido.

Un gran número de reactores rápidos experimentales refrigerados por sodio ya fueron construidos, lo que permite afirmar que el uso del sodio como refrigerante es hoy una tecnología conocida y

madura, haciendo que el riesgo de introducción de nuevas tecnologías tenga grandes oportunidades de éxito, el gran desafío hoy es probar la competitividad económica del mismo [6].

La evaluación de los efectos ambientales del sodio en las propiedades de resistencia mecánica es esencial para asegurar la integridad estructural durante toda la vida útil diseñada en los reactores rápidos enfriados con sodio. El encamisado del combustible se ve particularmente afectado por el sodio, ya que el encamisado es extremadamente delgado y las temperaturas de funcionamiento son muy altas. Por lo tanto, es importante comprender la compatibilidad de los materiales con sodio a temperaturas elevadas. Es imperativo que el líquido refrigerante de sodio utilizado tenga un estricto control de la química, particularmente con respecto a los elementos responsables de la fragilidad del metal líquido (As, Sb, Bi) y también del carbono y el oxígeno, que son los principales responsables de la degradación de las propiedades mecánicas y la corrosión.

5.3.2. Compatibilidad del plomo – bismuto líquido con aceros inoxidables

Estudiar los mecanismos de erosión-corrosión por Pb-Bi, así como la corrosión en Pb-Bi eutéctico. La compatibilidad de los aceros con un flujo de plomo líquido-bismuto eutéctico (45Pb-55Bi) es una de las cuestiones clave para los reactores rápidos enfriados con Pb-Bi. Este problema es mucho más crítico que en los sistemas enfriados con sodio.

Se puede concluir, resumiendo, que las tecnologías para el uso de plomo o de plomo bismuto eutéctico como refrigerante precisan ser sedimentadas, necesitando aún muchas pruebas de resistencia a la corrosión en alta temperatura; el mapeo de la corrosión en función de la temperatura, velocidad de desfogue y presencia de oxígeno, para materiales del reactor y del encamisado del combustible; pruebas de degradación de las propiedades mecánicas de los materiales estructurales [6].

Algunos defectos formados por la disolución de elementos de aleación en Pb-Bi pueden mejorar el desprendimiento de un trozo de acero de la matriz de acero. Por lo tanto, la penetración de Pb-Bi puede causar erosión a gran escala. Estos estudios concluyen que los aceros con bajo contenido de Cr y el acero austenítico se erosionan más fácilmente bajo el bajo potencial de oxígeno presente en el flujo de Pb-Bi, por lo tanto, los aceros con alto contenido de Cr (sin Ni) deberían ser una opción preferida para resistir la corrosión en Pb-Bi [7].

6. CONCLUSIONES Y EXPECTATIVAS

Las decisiones acerca de la viabilidad y factibilidad para considerar la opción de los reactores modulares pequeños deben ser tomadas por el Gobierno Federal a través de la Secretaría de Energía. El fortalecimiento de la actividad nuclear en México a través de la promoción de nuevas tecnologías energéticas contribuirá al cumplimiento de los compromisos nacionales hacia el combate al cambio climático.

Promover la inclusión de cualquier tipo de reactor modular pequeño como parte del Plan de Expansión del Sistema Eléctrico Mexicano complementando así la participación de las energías

renovables que permitiría en parte satisfacer las necesidades futuras de energía eléctrica, al mismo tiempo evitando la dependencia del uso del gas y energéticos fósiles.

Dar continuidad a la adquisición de experiencia y entrenamiento en el campo de la energía nuclear en México a través del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares y otras instituciones, y en algunos aspectos replantearse como es el caso de los diferentes diseños de Reactores Avanzados, Avanzados/Pasivos y de Nueva Generación, con el objeto de reactivar y dar impulso a las actividades que conduzcan al desarrollo científico y tecnológico en estos temas.

Considerando la experiencia adquirida a través de la operación de la Central Nucleoeléctrica de Laguna Verde y además de tomar en cuenta la colaboración que ha existido entre el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares y la Central, se propone se estudie la posibilidad de que ambas instituciones trabajen en un programa conjunto sobre las tecnologías de diseños de pequeños reactores modulares estudiando sus potencialidades y características de diseño, así como los desafíos que enfrenta su licenciamiento y determinar su posible viabilidad.

Esperamos iniciar las tendencias de México en estas tecnologías estableciendo proyectos de investigación auspiciados por el Organismo Internacional de Energía Atómica entre otros, e incluir colaboración con otras instituciones mexicanas.

REFERENCIAS

1. IAEA-TECDOC SERIES. *Deployment Indicators for Small Modular Reactors. Methodology, Analysis of Key Factors and Case Studies*. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY VIENNA. IAEA-TECDOC-1854. 2018.
2. Antony Froggatt, Mycle Schneider. Nuclear Power Versus Renewable Energy-A Trend Analysis. *POINT OF VIEW*. Vol. 103. p. 487-490. (2015).
3. <http://www.world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/nuclear-power-reactors/small-nuclear-power-reactors.aspx>. (2019).
4. G. Mendoza. J. Viais. A. Maioli. D. Finnicum. Modeling of Emergency Heat Removal System of the IRIS. *Congreso Internacional Conjunto Cancún 2004 LAS/ANS-SNM-SMSR. XV Congreso Anual de la SNM y XXII Reunión Anual de la SMSR*. Cancún, Q. R., México, 11-14 de Julio, 2004.
5. IAEA Nuclear Energy Series. *Design Features to Achieve Defence in Depth in Small and Medium Sized Reactors*. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY VIENNA, 2009.
6. G. Mendoza, J. Klapp. Contribución de los Reactores Rápidos de IV Generación al Desarrollo Sustentable. “*Contribución de la Energía Nuclear al Desarrollo Sustentable de América Latina*” 2007 XXV Reunión Anual de la SMSR y XVIII Congreso Anual de la SNM. Cancún, Quintana Roo, México, del 1 al 5 de Julio 2007. p. 520-537.
7. IAEA Nuclear Energy Series. *Structural Materials for Liquid Metal Cooled Fast Reactor Fuel Assemblies Operational Behaviour*. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY VIENNA, 2012.

Análisis de la expansión del sistema eléctrico mexicano con reactores nucleares avanzados

Emilio Javier Yañez, Juan Luis François y Cecilia Martín del Campo

Departamento de Sistemas Energéticos, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, C.U., 04510 Ciudad de México
emilioj.2491@gmail.com; juan.luis.francois@gmail.com; cecilia.martin.del.campo@gmail.com

Resumen

El objetivo del presente trabajo es plantear escenarios a largo plazo (2019-2050), contemplando la introducción de nuevas capacidades nucleares para finales de la próxima década e inicio del 2030, y analizar el ciclo de combustible asociado. Realizamos un estudio tomando como referencia las nuevas capacidades nucleares proyectadas para los años 2029, 2030 y 2031 en el programa de desarrollo del sistema eléctrico nacional (PRODESEN 2018), y proponemos la introducción de reactores rápidos refrigerados por sodio para los años 2035, 2036, 2037 y 2038. Se calculan las variables asociadas tanto para el Front End como para el Back End, como son: toneladas de uranio natural requerido, necesidades de conversión y enriquecimiento de uranio, combustible necesario a fabricar, toneladas de uranio natural ahorradas por el uso de mezclas de óxidos de plutonio y uranio (MOX), toneladas de combustible descargado acumulado, entre otras, como elementos para la toma de decisiones a cerca de la participación de la tecnología nuclear en la planeación del sistema eléctrico nacional. En un primer escenario se estudió la incorporación de reactores nucleares avanzados de agua ligera presurizada de tipo AP1000, y en un segundo escenario se analizó, además de los AP1000, la introducción de reactores nucleares rápidos. Se estudiaron, también, diferentes configuraciones del ciclo de combustible nuclear, tales como la incorporación de MOX y la implementación de estrategias de reciclado y reprocesado de combustible nuclear gastado. Como herramienta principal de análisis se empleó el sistema de cálculo de ciclo de combustible nuclear NFCSS (por sus siglas en inglés), del Organismo Internacional de Energía Atómica. Se obtuvieron resultados que nos permiten plantear que se pueden hacer recargas de combustible MOX para los reactores AP1000 con parte del combustible descargado de la Central Nuclear Laguna Verde. La introducción de nuevos reactores nucleares de tipo AP1000 sentarán las bases para la incorporación de reactores rápidos con ciclos de combustible más sustentables.

1. INTRODUCCIÓN

El desarrollo e implementación de un sistema energético fuerte y eficiente es un tema de suma importancia, el cual concierne a prácticamente todas las naciones comprometidas a alcanzar un desarrollo superior. En materia energética es sumamente conveniente contar con una planificación energética a corto, mediano y largo plazo, con el fin de poder predecir el comportamiento de la curva de demanda y suministro energético en el sector nacional y regional. México al igual que la

mayoría de las naciones en vías de desarrollo experimentará un aumento en la demanda energética en las próximas décadas, lo cual se puede traducir si no se incluyen fuentes de energías limpias, en un aumento en el consumo de los combustibles fósiles y por consiguiente un aumento en las emisiones de gases de efecto invernadero, emisiones que, mediante el acuerdo de París, el país se ha comprometido a reducir , en 45% para el año 2030 con respecto al año 2010.

Gran parte del sector energético nacional ha prestado fuerte interés en la exploración e implementación de nuevas fuentes alternativas de energías limpias mediante el uso fundamentalmente de fuentes de energía solar-fotovoltaica, eólica, hidroeléctrica, geotérmica y nuclear. Por otra parte, está contemplado un considerable retiro de capacidades de generación eléctrica en el periodo de tiempo comprendido entre 2018-2032 (ver Figura 1).

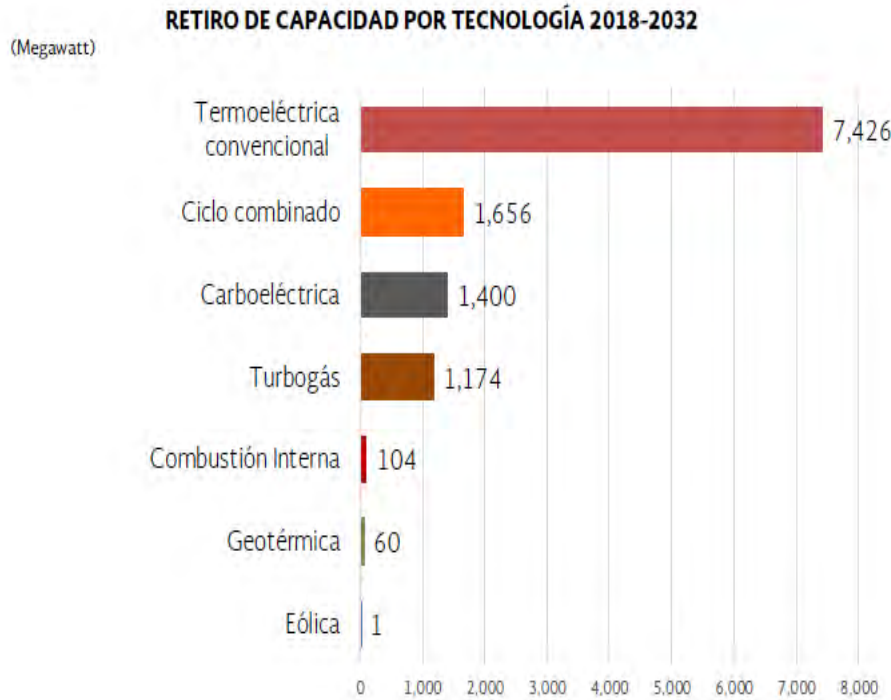


Figura 1. Capacidades a retirar del sistema eléctrico nacional [1]

Es de conocimiento por parte de los expertos en materia energética a nivel nacional que, para poder hacer frente a los retos energéticos futuros y cumplir con los compromisos de reducción de emisiones de dióxido de carbono (CO₂), es necesario trazar una ruta que incluya de manera coherente todas las alternativas reales y necesarias para alcanzar dichos retos y compromisos. En el Programa de Desarrollo del Sistema Eléctrico Nacional (PRODESEN) del año 2018 [1], se contempla la opción nuclear como una vía para robustecer el sistema eléctrico nacional. En este documento se plantea la opción de incorporar nuevas capacidades nucleares en los años 2029, 2030, 2031, de tal manera que para estos años se pueda incrementar la capacidad de generación eléctrica en hasta 4000 MW de potencia [1].

En este sentido, el objetivo del presente trabajo es plantear escenarios a largo plazo (2019-2050), contemplando la introducción de nuevas capacidades nucleares para finales de la próxima década e inicio del 2030, y realizar el análisis del ciclo de combustible asociado, los cuales contribuyan al desarrollo sostenible de la energía nuclear. Dos escenarios han sido contemplados; en un primer escenario se plantea la introducción de reactores nucleares avanzados de agua ligera a presión de tipo AP1000 en los años 2030, 2031 y 2032, en sinergia con los reactores nucleares de la Central Nuclear Laguna Verde, y en un segundo escenario se evalúa la incorporación de reactores nucleares rápidos enfriados con sodio, de tipo EFR, en los años 2035, 2036, 2037 y 2038. Centrándonos fundamentalmente en el ciclo de combustible nuclear asociado a los escenarios planteados, donde a su vez se plantean estrategias de incorporación de combustible de óxidos mixtos (MOX), reprocesado del combustible nuclear descargado de las capacidades nucleares a instalarse y de la Central Nuclear Laguna Verde. Se analizan aspectos relacionados con el *front end* y *back end* del ciclo de combustible nuclear como son: toneladas de uranio natural requerido, necesidades de conversión y enriquecimiento de uranio, combustible necesario a fabricar, toneladas de uranio natural ahorradas por el uso de mezclas de óxidos de plutonio y uranio (MOX), toneladas de combustible descargado acumulado, y la repercusión en la no proliferación mediante las estrategias de reprocesado y uso de combustible nuclear, así como el impacto en el desarrollo sustentable de la energía nuclear, aspectos documentados en la estrategia INPRO [2] del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA).

2. MODELADO DEL CICLO DE COMBUSTIBLE NUCLEAR

El Sistema de Simulación del Ciclo de Combustible Nuclear (NFCSS) es un sistema de simulación basado en escenarios, para estimar los requerimientos de servicio y los materiales del ciclo de combustible nuclear a largo plazo, así como la producción de materiales. El Sistema de Simulación del Ciclo de Combustible Nuclear fue desarrollado por el OIEA para estimar el ciclo de combustible nuclear a largo plazo, requerimientos de materiales y servicios, para una opción dada del ciclo de combustible nuclear [3]. El NFCSS puede calcular, por año, durante largos periodos de tiempo, los requisitos del ciclo de combustible nuclear para todos los tipos de reactores. Los cálculos se pueden realizar para un reactor, parque de reactores en un país o parque de plantas de energía nuclear en todo el mundo. Se pueden calcular las cantidades de uranio natural, conversión, enriquecimiento y fabricación de combustible. Además, las cantidades y calidades (composición isotópica) de los combustibles descargados se pueden evaluar para permitir que el usuario aplique una estrategia de reciclaje si lo desea. La velocidad de cálculo del sistema es lo suficientemente rápida como para permitir la comparación de diferentes opciones en un tiempo considerablemente corto. El NFCSS está diseñado para ser una mezcla óptima de precisión, simplicidad y velocidad. El usuario puede optar por utilizar las reservas de combustible gastado para desarrollar una estrategia de reciclaje. La estimación de la acumulación de actínidos, incluidos los actínidos menores, es una de las capacidades de la simulación. Esas estimaciones de acumulación podrían usarse para comparar cualquier opción futura de ciclo de combustible para la transmutación de actínidos menores. El modelo utiliza enfoques simplificados para calcular los requisitos del ciclo de combustible y las salidas, lo que hace posible estimar los requisitos de servicio del ciclo de combustible a largo plazo para las estrategias de ciclo de combustible tanto abierto como cerrado.

El NFCSS se puede describir como una herramienta de simulación que realiza cálculos utilizando un conjunto de parámetros de entrada para producir un conjunto de parámetros de salida. Los parámetros de entrada utilizados en el modelo se pueden dividir en tres grupos:

- **Parámetros de la estrategia:** capacidad nuclear y estrategias de reprocesamiento y reciclaje, mezcla de tipos de reactores y factores de carga, etc., sobre una base anual.
- **Parámetros de combustible:** quemado de descarga promedio, enriquecimiento inicial promedio y ensayo de colas promedio, etc., sobre una base anual.
- **Parámetros de control:** participación del combustible MOX en el núcleo de los reactores que utilizan este tipo de combustible, tiempos de demora de los diferentes procesos, coeficientes de pérdida en los procesos, uso de uranio empobrecido o enriquecido y el número de ciclos de reprocesamiento, etc.

Los resultados se dividen en los siguientes grupos:

- **Front End:** requisitos de uranio natural, requisitos de conversión, requisitos de servicio de enriquecimiento y requisitos de combustible fresco.
- **Back End:** combustible gastado producido, generación de nucleidos individuales, incluyendo uranio, plutonio y actínidos menores y requerimientos de reprocesamiento.

En la Figura 2 se muestran los parámetros de entrada y salida del NFCSS. El lado izquierdo muestra los parámetros de entrada requeridos, mientras que el lado derecho muestra la lista de parámetros de salida para el Front End y el Back End [3].

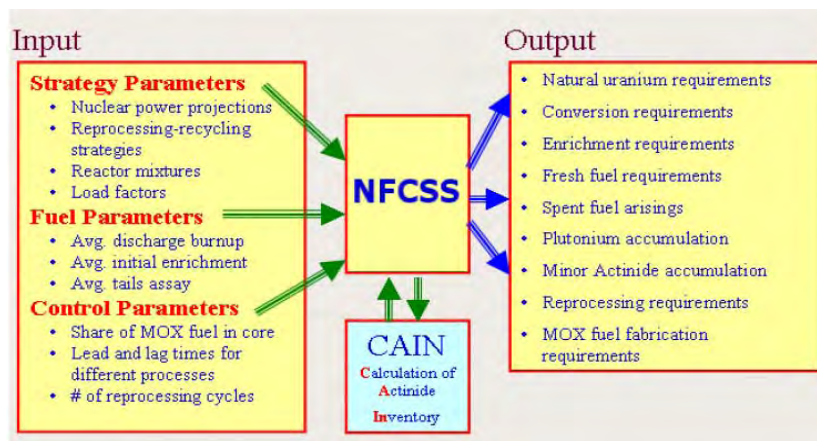


Figura 2. Esquema simplificado NFCSS

3. ESCENARIOS ESTUDIADOS

Con el objetivo de realizar un análisis del ciclo de combustible nuclear asociado, en el presente trabajo dos escenarios han sido considerados. En el primero se consideró la introducción en el sector energético nacional de reactores nucleares avanzados de agua ligera a presión de tipo AP1000 con 1110MWe en los años 2030, 2031, y 2032, y en un segundo escenario se estudió la posible introducción en los años 2035, 2036, 2037 y 2038 de reactores rápidos refrigerados con sodio del tipo EFR con 1400MWe, en sinergia con los reactores AP1000. En ambos escenarios se supone que la Central Nuclear de Laguna Verde (CNLV) recibirá los permisos necesarios para operar hasta el año 2050, es decir, que la Comisión Nacional de Seguridad Nuclear y Salvaguardias (CNSNS) otorgará a la central la extensión de su licencia de operación para que la unidad 1 pueda operar hasta el 2050 (su licencia vence en 2020) y la unidad 2 hasta el 2055, ya que su licencia vencerá en 2025 [4]. La potencia eléctrica, utilizada en este trabajo, de cada uno de los dos reactores de la CNLV es de 810 MWe. El rango de tiempo considerado en nuestros escenarios inicia en el 2019 y termina en el 2050.

A continuación, se exponen y explican los resultados principales obtenidos, los cuales se generaron en archivos de salida en formato Excel, luego de sus correspondientes corridas en el NFCSS. Las gráficas presentadas son elaboración propia a partir de estos resultados.

La Figura 3 muestra el comportamiento de la capacidad instalada en función del tiempo. Mediante la introducción de los tres reactores de tipo AP1000, la capacidad nuclear instalada significaría 2.3% de la capacidad total estimada para el año 2050, por otra parte, con la introducción de los reactores rápidos en los años 2035, 2036, 2037 y 2038, la capacidad total instalada sería de 10738 MWe, representando un 5% de la capacidad total prevista para el año 2050.



Figura 3. Capacidad nuclear proyectada a instalar

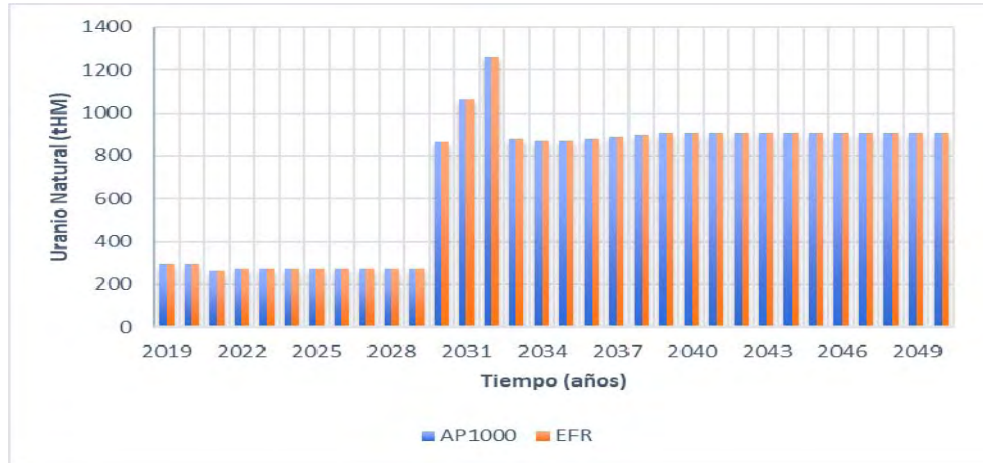


Figura 4. Demanda anual de uranio natural

Con la incorporación de reactores nucleares rápidos, los requerimientos de uranio natural (ver Figura 4) no se verían afectados debido a que el combustible nuclear usado por estos reactores es de tipo MOX, por tanto, proviene del reprocesado de combustible nuclear gastado. Para los dos escenarios estudiados se esperan picos en las demandas de uranio natural, para los años 2030, 2031, y 2032 con valores de 867, 1066 y 1264 toneladas de uranio natural respectivamente, estos picos están directamente relacionados con la carga inicial de combustible para la puesta en marcha de los reactores AP1000. En los años posteriores al año 2032 se necesitarán entre 800 y 900 toneladas de uranio natural para suplir la demanda de combustible de los reactores en operación. Un comportamiento similar al anterior se espera en los requisitos de conversión de uranio a hexafluoruro de uranio (UF₆) para su posterior enriquecimiento. Por su parte en la Figura 5 se muestran las unidades de trabajo separativo (SWU, por sus siglas en inglés) involucradas en el proceso de enriquecimiento, donde se observa el comportamiento similar al resto de las variables, debido a que coincide con las cargas iniciales de los AP1000.



Figura 5. SWU requeridas por año

Como resultado del proceso de enriquecimiento de combustible podemos apreciar en la Figura 6 las demandas de uranio enriquecido para la puesta en funcionamiento de los reactores AP1000, se observan aumentos escalonados en las necesidades de uranio enriquecido para los años 2030, 2031 y 2032 con valores de 119, 141 y 163 toneladas de uranio enriquecido, tendiendo a estabilizar esta demanda posterior al año 2032 y oscilando entre valores de 95 y 100 toneladas para los siguientes años hasta el 2050.

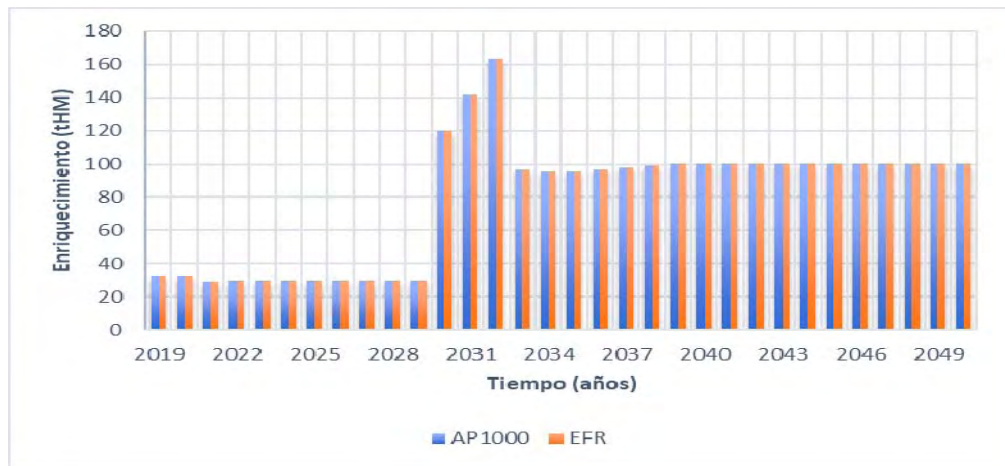


Figura 6. Demandas anuales de uranio enriquecido

Con el objetivo de determinar las demandas de combustible asociadas a los reactores rápidos, en nuestro caso el EFR, se calculó el inventario de uranio empobrecido y plutonio fisible necesario para la fabricación de combustible tipo MOX y su posterior quemado en el núcleo del reactor. Se observa en la Figura 7 aumentos en la demanda de uranio empobrecido proveniente de combustible descargado de reactores de agua ligera (LWR) con valores que van desde 33 hasta 67 toneladas de combustible de bajo enriquecimiento para los años 2035 y 2038. De igual manera, la Figura 8 presenta las toneladas de plutonio requeridas en el periodo de tiempo comprendido desde el 2035 hasta el 2050.



Figura 7 Demanda de uranio de bajo enriquecimiento

Como veremos en la sección 3.2, estas demandas iniciales de plutonio en los reactores rápidos pueden reducirse si se establecen estrategias de reprocesado de combustible para el año 2032, previa entrada de los reactores rápidos, además para estos años se tendrá un stock de combustible nuclear gastado de 403 toneladas procedente de la central Laguna Verde (este valor se obtuvo en corridas para los BWR de Laguna Verde en el rango de tiempo 2019-2050 considerado en los escenarios), y además se tendrán descargadas 65 toneladas de combustible quemado en los reactores AP1000.



Figura 8 Requerimiento de plutonio reprocesado

Por tanto, buena parte del plutonio fisil contenido en el combustible gastado, puede ser reprocesado y extraído para la fabricación de combustible de reactores rápidos. Las demandas iniciales de plutonio son: 8.4, 12.63, 16.8, y 21.10 toneladas para los años 2035, 2036, 2037 y 2038 respectivamente.

3.1. Estrategias de Introducción de Combustible MOX

En la búsqueda de alternativas que permitan lograr un ciclo de combustible nuclear óptimo y de esta forma poder cerrar el ciclo, se analizó la posibilidad de introducir combustibles de tipo MOX en los reactores AP1000, y analizar el comportamiento de los parámetros del FRONT END y del BACK END. Se tomaron en cuenta tres variantes de introducción del MOX, una en la que el MOX represente el 20% del total de combustible en el núcleo, otra donde representa el 30% y por último la variante donde el MOX representa el 50% del combustible total en el núcleo. Las nuevas demandas de uranio natural con la introducción de combustible MOX se muestran en la Figura 9, y de manera más detallada se aprecia en la Figura 10 el ahorro en toneladas anuales de uranio natural que representaría la incorporación de combustible MOX, llegando a ahorros de hasta 438 toneladas de uranio en la fase de incorporación al sector eléctrico y logrando ahorrar entre 203 y 215 toneladas de uranio natural posterior a su incorporación al sector eléctrico mexicano.

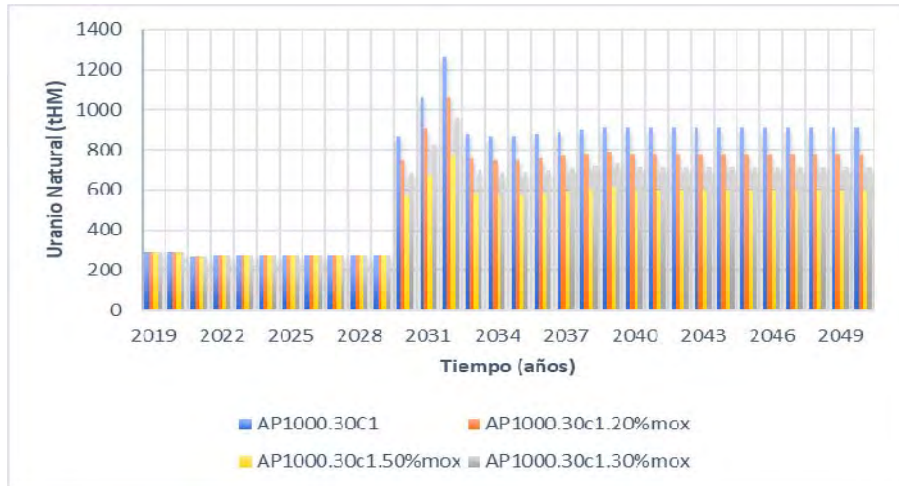


Figura 9 Requerimiento de uranio natural para los escenarios con MOX

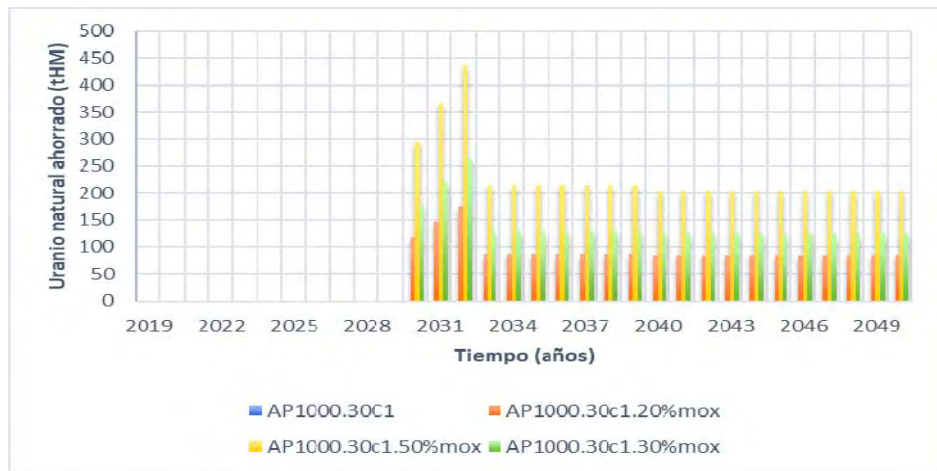


Figura 10 Toneladas de uranio natural ahorradas por la introducción de MOX

Por otra parte, las demandas de uranio enriquecido se pueden reducir considerablemente con la estrategia de incorporación de combustible MOX, como se observa en la Figura 11. Sin considerar la incorporación de combustible MOX las demandas de uranio enriquecido para los años 2030, 2031 y 2032 son: 120, 142 y 163 toneladas de uranio enriquecido por los años mencionados, para la estrategia de incorporación de MOX al 20% los valores anteriores son: 101, 119 y 136 toneladas.

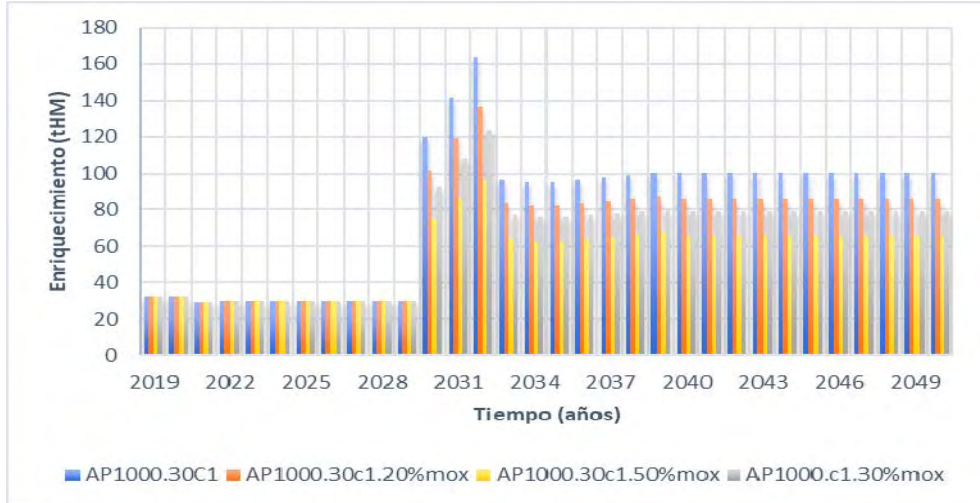


Figura 11 Requerimiento de uranio enriquecido con la introducción de MOX

Por lo que incluso a valores bajos de incorporación de combustible MOX (20%) se observan ahorros considerables en el uranio natural. Para el caso de introducción de combustible MOX en un 50% se logra ahorrar; 45, 57 y 66 toneladas de uranio enriquecido para los años 2030, 2031 y 2032.

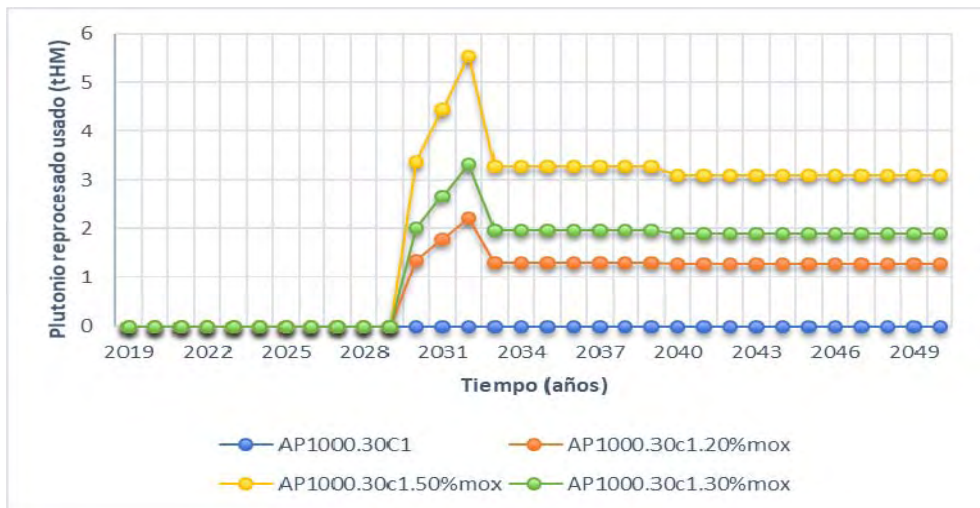


Figura 12 Plutonio reprocesado requerido para los escenarios con MOX

En la Figura 12 se observan las toneladas de plutonio requeridas anualmente para la implementación de introducción de combustible MOX, los valores más altos se observan para una participación del combustible MOX del 50% necesitándose entre 3.3 y 5.6 toneladas de plutonio reprocesado entre los años 2030 y 2032. Para los casos de 20% y 30% de participación de combustible MOX, se esperan picos en el uso de plutonio reprocesado de 2.2 y 3.3 toneladas de plutonio, respectivamente. En los

años siguientes al 2032 se esperan demandas de plutonio de 1.28, 1.9 y 3.10 toneladas para las diferentes vías de incorporación de MOX planteadas.

3.2. Reprocesado de Combustible Gastado

Se consideró la posibilidad de reprocesar el combustible acumulado de la central nuclear de Laguna Verde, y posteriormente el combustible de los reactores nucleares planteados en nuestros escenarios, se estudió la posibilidad de empezar a reprocesar combustible en el año 2028, previo a la entrada de los reactores AP1000 en el año 2030.

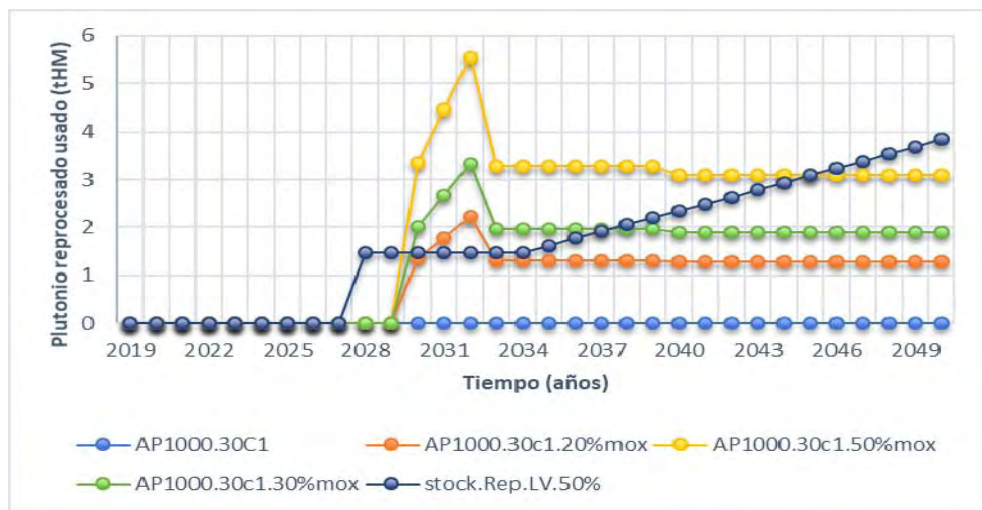


Figura 13. Comparativo de requerimiento de plutonio vs el stock de plutonio para Laguna Verde con 50% de reprocesado

En la Figura 13 se muestra el comportamiento en la demanda anual de plutonio para la fabricación de combustible MOX con los diferentes porcentajes de participación de éste en el núcleo del reactor. La curva etiquetada “stock.Rep.LV.50%” representa el “stock” de plutonio procedente del combustible nuclear gastado en la central nuclear Laguna Verde mediante el reprocesado del mismo a partir del año 2028, mientras que las restantes leyendas representan las demandas de plutonio para 20%, 30%, y 50 % MOX de forma anual, y el escenario base AP1000.30c1, el cual representa los reactores AP1000 sin combustible MOX. Como se puede apreciar en la gráfica, la extracción del plutonio vía reprocesado podría suplir la demanda inicial del plutonio para el caso de 20% de participación de combustible MOX, siendo estas cantidades incapaces de cubrir la demanda para aportaciones de MOX al 50% en el núcleo.

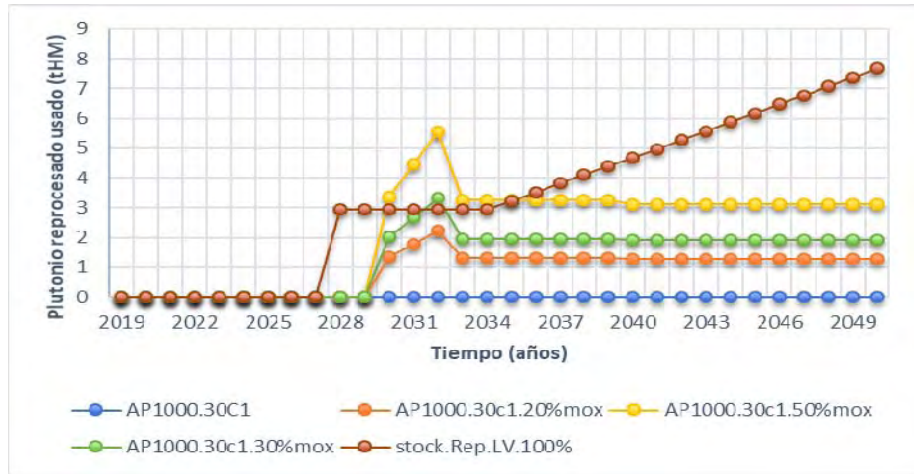


Figura14. Comparativo de requerimiento de plutonio vs el stock de plutonio para Laguna Verde con 100% de reprocesado

De igual forma, si se lograra reprocesar el 100% del combustible nuclear descargado de la central nuclear Laguna Verde, y teniendo en cuenta que solo se ha analizado el rango de tiempo 2019-2050, se pueden suplir las cargas iniciales de los reactores AP1000 tanto para cargas de MOX al 20 % como para el 30%, (ver Figura 14).

La Figura 15 muestra la demanda anual de plutonio para los reactores rápidos (color amarillo), mientras que las curvas etiquetadas con: Rep.20%, Rep.50% y Rep.100% representan el stock de reprocesado de combustible de los reactores BWR y AP1000 a partir del año 2032, con varias tasas de reprocesado del combustible gastado desde 20%, 50% y 100% del combustible descargado.

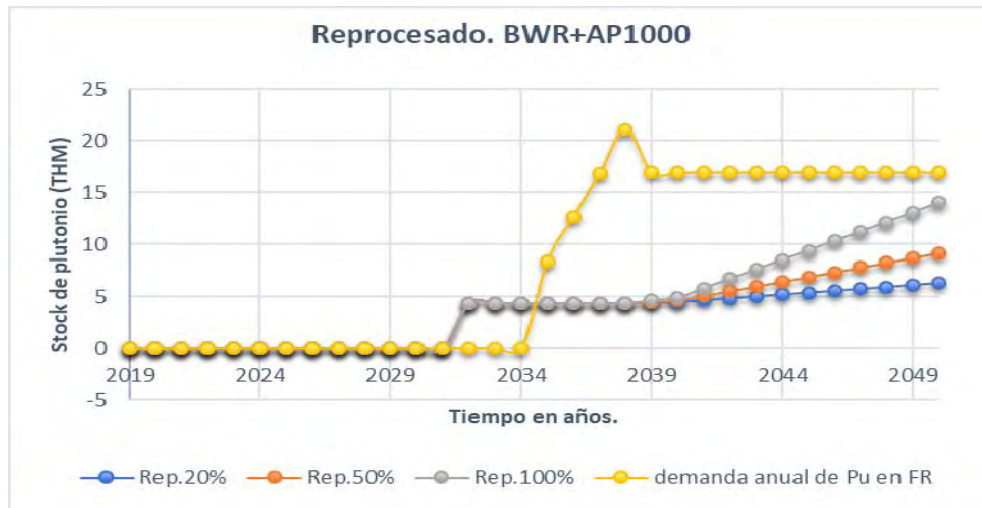


Figura 15. Comparativo de requerimiento de plutonio para EFR vs el “stock” de plutonio para Laguna Verde y los AP1000 con 100% de reprocesado

4. CONCLUSIONES

Se obtuvieron datos relacionados con el ciclo de combustible nuclear, los cuales nos indican la cantidad de recursos de combustible nuclear que podrán estar involucradas en un posible despliegue de nuevos reactores nucleares en las próximas décadas, y que, en su caso, deberán tomarse en cuenta para futuras planificaciones. Si se logra reprocesar combustible gastado de la central Laguna Verde, éste podría tener un impacto positivo en la puesta en marcha de reactores AP1000 con recargas parciales con combustible tipo MOX. Una vez terminada la primera etapa de expansión del parque nuclear mexicano, donde estarían desplegados los reactores AP1000, todo el ciclo de combustible asociado sentaría las bases para, que en un plazo de tiempo mayor (2040), comenzar la introducción de reactores rápidos al país, ya que la sinergia entre los reactores rápidos y los reactores térmicos garantizarían a futuro una mayor eficiencia de los recursos fisiles. Según nuestras estimaciones, bajo las condiciones existentes, a partir del año 2040 estaríamos planteando la introducción de reactores rápidos. Incluso con la pequeña flota de reactores que proponemos en el trabajo, al 2050 la representación de la capacidad nuclear con respecto a la capacidad total es de 5%, lo cual advierte sobre el uso desproporcionado de otras fuentes alternativas con relación a las fuentes nucleares. Mediante nuestro estudio quedaron cubiertos muchos aspectos relacionados al ciclo de combustible nuclear, por lo que con base en ellos podremos estimar los costos relacionados, y el ahorro neto de elegir una alternativa u otra en el ciclo de combustible.

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), por el aporte económico otorgado a Emilio Yañez para la realización de este trabajo que es parte de su investigación de doctorado.

REFERENCIAS

1. SENER, "Programa de Desarrollo del Sistema Eléctrico Nacional 2018-2032. (PRODESEN)", Ciudad de México, México (2018).
2. International Atomic Energy Agency, "Guidance for Application of an Assessment Methodology for Innovative Nuclear Energy Systems", IAEA-TECDOC-1575, Vienna, Austria (2008).
3. International Atomic Energy Agency, "Nuclear Fuel Cycle Simulation System", (2011).
4. Comisión Nacional de Seguridad Nuclear y Salvaguardias, "Informe de Rendición de Cuentas de Conclusión de la Administración 2012-2018", https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/415721/CNSNS_Informe_Consolidado_RC2_012-2018.pdf (2018).

Plataforma de cálculo numérico y de diseño gráfico con aplicaciones en fusión

M. Salvador, R. M. Chávez, A. Aguilera, L.R. Hernández, A. Acosta, M. García, F. Sánchez
Grupo de Investigación en Fusión, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad Autónoma de Nuevo León
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N. L., México
max.salvadorhr@uanl.edu.mx

A. Aguilera
Fábrica de Software FIME, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad Autónoma de Nuevo León
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N. L., México
antonio.aguilera@uanl.edu.mx

Resumen

La aplicación del supercómputo es esencial en el actual siglo XXI pues permite desarrollar investigación sobre fenómenos complejos que involucran el desarrollo de modelos físico teóricos en fusión nuclear, ejemplo de ellos son los códigos generados para el diseño de una instalación experimental de confinamiento magnético y aceleradores de partículas esto dentro del Grupo de Investigación en Fusión (GIF) de la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica (FIME) de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL). Esta Plataforma de Supercómputo, Cálculo y Diseño (PSCD) se ha constituido como un soporte altamente redituable en la investigación, el cual nos ha permitido abordar fenomenologías complejas en el desarrollo de la Fusión y sus aplicaciones, como son el desarrollo cálculo numérico para la gestación de códigos para estudios de campos magnéticos, diseño de bobinas D-shaped en configuraciones Tokamak, cálculo y diseño para aceleradores de partículas y sistemas de calentamiento ECRH, o el de desarrollar Proyectos de Sustentación Económica como el de una Plataforma de Seguridad y Exploración – 1 Experimental. Siendo así, el GIF-UANL ha desarrollado un sistema integral que posee software especializado aplicado en áreas de multifísica, multiusuario y multiplataforma, potencializando la simbiosis teórico-experimental, el trabajo en paralelo, con gran capacidad de almacenamiento y velocidad de procesamiento, desarrollando algoritmos propios y aquellos que nos permitan explotar la capacidad informática para el diseño avanzado.

1. INTRODUCCIÓN

En el presente siglo la humanidad ha avanzado enormemente en el área del procesamiento de cualquier clase de información, datos, gráficos, animaciones, etc., abordando diferentes fenomenologías presentes tanto en la investigación científica avanzada como en la innovación tecnológica de la industria. En este documento hacemos referencia al Sistema Integral por el cual está compuesta la Plataforma de Supercómputo, Cálculo y Diseño (PSCD) del Grupo de

Investigación en Fusión (GIF) la cual funge como una de las herramientas principales para el diseño. El Grupo de Investigación en Fusión, tiene como objetivo fundamental la generación de ciencia y tecnología e innovación tecnológica, debido a ello busca desarrollar una nueva fuente de energía, limpia y poderosa: la fusión nuclear para fines enteramente pacíficos en el área de la generación de energía a través de sus diseños Tokamak. También posee diversos proyectos que se han gestado en la PSCD, como son: el diseño del Sistema de Calentamiento Electrón Ciclotrón, la Plataforma de Seguridad y Exploración – 1 eXperimental (PSE-1X), el diseño de un Motor convencional para un Cohete, entre otros.

El supercómputo, cálculo numérico y diseño, son áreas altamente redituables en el que las diferentes áreas de investigación se hacen presentes, nuestra Universidad reconoce el apoyo que se brinda al estructurar estables y avanzadas herramientas computacionales, sabemos que otras entidades tanto nacionales como internacionales han realizado esfuerzos para explotar sistemas integrales como el nuestro, apoyando directamente la generación de ciencia y tecnología.

Nuestra Plataforma PSCD se encuentra constituida bajo el esquema de multiplataforma, multiusuario y multifuncional, se explota en supercómputo y supercálculo, así como en Diseño 3D CAD, gracias a la mejora sustancial de procesamiento, y a la actual estabilidad y flexibilidad de los sistemas operativos (SO). La Plataforma nos ha permitido trabajar en los diseños de nuestras configuraciones de confinamiento magnético, el Tokamak de Baja Razón de Aspecto y mediano tamaño “T” [1] como el diseño del Tokamak Esférico de Apoyo hacia “T”, el TEA-T así como sus sistemas inherentes, también nos ha permitido abordar estudios sobre los aspectos de ingeniería presentes en los sistemas que conforman a dichas instalaciones, estudios mecánico-térmicos, electromagnetismo, estudios para el diseño de conductores, así como otros proyectos que son enteramente diferentes a los presentes en Fusión, como la Plataforma de Seguridad y Exploración - 1 eXperimental (PSE-1X), y de igual manera proceder a los estudios correspondientes de mecánica, simulaciones de aerodinámica. Debido a la correcta explotación de la PSCD, éste último Proyecto PSE-1X ha ganado 15 premios en la generación de Patentes como de Modelos Industriales en el Premio UANL a la Invención Ediciones 2016, 2017 y 2018

El GIF posee como resultado de la Plataforma PSCD, el desarrollo de un diseño completo para un sistema avanzado Girotrón, para el calentamiento de plasmas a 60 GHz – 300kW [2], así como la construcción de un sistema de calentamiento por RF a 2.45 GHz, ambos sistemas entran en operación para los Tokamaks del GIF. En nuestra la PSCD ha jugado un papel fundamental tanto en diseño 3D CAD como en simulaciones, explotando códigos como el E-GUN y que serían arduos para su comprensión de no contar con la suficiente capacidad de cálculo, el GIF presenta 2 trabajos sobre ambos desarrollos en este XXX Congreso de la Sociedad Nuclear Mexicana.

En este presente artículo mostramos ciertos resultados obtenidos con la adecuada explotación de la PSCD: algunos involucran el diseño 3D CAD sobre los Tokamaks de la Plataforma Teórica-Experimental de Fusión, simulaciones de campo magnético, diseños sobre la Plataforma de Seguridad y Exploración – 1 Experimental, simulaciones respecto al flujo de viento y presión. También algunos realizados por simulaciones atomísticas computacionales centradas en la

interacción del silicio intersticial dentro del carburo de silicio (material de baja activación de interés para la comunidad de Fusión). A continuación, mostraremos nuestra contribución apoyados fuertemente en la PSCD procedemos con la Silicon Graphics SGI Altix XE250 del GIF a la que se le conoce como POLAR.

2. PLATAFORMA SGI ALTIX XE 250

La estabilidad de los sistemas operativos posee gran parte de la atracción en cualquier sistema computacional sobre todo aquellos orientados a supercómputo y supercálculo, pues le permitirán a cualquier plataforma la correcta administración de recursos y esto se traduce en el empleo adecuado de su operatividad en la escala de tiempo hombre-máquina, así como en la obtención de resultados concretos, cuanto más sí existen varios desarrollos ejecutándose en paralelo. Ahora no sólo en el ámbito científico imperan estas valoraciones, al día de hoy los teléfonos inteligentes presentan incluso zonas que afectan e involucran la compra de dispositivos que posean sistemas operativos absolutamente confiables y estables.

Actualmente, el mercado ha desarrollado nuevos procesadores con mayor cantidad en velocidad de procesamiento, y se exige que se cumplan características en las plataformas no sólo de estabilidad y velocidad sino también de compatibilidad pues tanto los sistemas operativos ampliamente difundidos comercialmente (ej. Microsoft Corp.) y aquellos que poseen licencia libre (ej. GNU/Linux), compiten ampliamente en el mercado actual de computadoras y telefonía, siendo un mercado muy importante el de plataformas para aplicaciones científicas pero mayor extendido hoy: el de telefonía. En toda esta gran cantidad de sistemas operativos que operan, juega un rol fundamental: la distribución de los recursos. El primer sistema operativo que citamos arriba (aplicado para el mercado de computadoras) ha decidido orientarse más al ambiente de gráficos (propios para cualquier diseño), los sistemas de Microsoft todavía controlan más 52% del mercado de computadoras, empero los sistemas con base GNU/Linux también cuentan con un notable 48%, estos últimos sistemas se encuentran impactando en gráficos pero con mucha mayor medida de telefonía celular, es de todos conocido que la aplicación más importante para sistemas con base UNIX sigue siendo la modelización (éste último es el sistema operativo número uno instalado en las supercomputadoras a nivel mundial [3]), o lo que es lo mismo cálculo numérico.

En telefonía, el uso de sistemas basados en UNIX ó GNU/Linux se encuentra con mucha mayor difusión adoptado, casi el 99% de los dispositivos lo emplea, incluso en las naciones industrializadas éste SO sigue siendo de uso prioritario en el área de la investigación. La visión que presentamos en este documento es la correcta unión de varios SO, brinda una mayor flexibilidad para el desarrollo de ciencia y tecnología (no solo en el área nuclear, sino en casi todas las áreas del conocimiento); esta es la razón que hace atractivo al supercómputo y supercálculo y de diseño gráfico, tanto en el aula como en la industria, permitiendo así, establecer una simbiosis en el lado científico que va desde la comprensión de fenómenos experimentales y los modelos que ayudan a comprenderlos, reproducirlos e incluso que puedan predecir el comportamiento del fenómeno bajo estudio. También es atractivo el supercómputo por el diseño, pues existen programas que permiten la creación y/o la

innovación tecnológica a través del diseño de piezas que pueden ser sometidas a simulaciones de elemento finito que reproducen lo físico partiendo de lo teórico.

Nuestra PSCD ha sido configurada para explotar de manera total las funciones de supercálculo, se encuentra equipada con un sistema operativo Gentoo GNU / Linux y Windows 7 como anfitrión, siendo capaz de satisfacer las necesidades primeramente de cálculo numérico aplicado en modelización y el diseño de las partes que conforman nuestros proyectos. Gracias a esta arquitectura realizamos al mismo tiempo diseño con fuerte impacto en la tecnología (ciencias de la ingeniería) y simulación de fenómenos con una fuerte aplicación del conocimiento científico (ciencias físicas).

De entre los programas de diseño mecánico que utilizamos en nuestra plataforma, contamos con algunos que requieren un SO de Microsoft Corp., siendo el más destacado SolidWorks. El uso de GNU/Linux, nos da la posibilidad de implementar un alto control en la administración de recursos físicos y de software, así como de la seguridad; y a la vez podemos ejecutar programas de análisis importando las geometrías realizadas previamente en SolidWorks hacia el software de simulaciones en multifísica COMSOL, permitiéndonos someter a nuestros diseños a análisis mecánicos, eléctricos, magnéticos, térmicos, y de radiofrecuencia.

3. APLICACIÓN DE MULTIPLATAFORMA

La propiedad multiplataforma nos permite explotar diversas utilidades en el mismo espacio de tiempo entre diferentes SO. Actualmente se encuentran en nuestra máquina dos sistemas operativos: Gentoo GNU / Linux que es el anfitrión y dentro de un sistema virtualizado tenemos Windows 7, la peculiaridad de este acomodo de sistemas es que gracias al núcleo XEN y a la propiedad VT (*virtualization technology*) que poseen los procesadores de esta gama de INTEL, nos es posible una virtualización completa sin penalizaciones significativas de rendimiento, utilizando múltiples sistemas operativos, tantos y tales como la capacidad de la máquina pueda soportar, según la asignación específica de recursos físicos que se deseen.

XEN puede aislar componentes de hardware para uso único y pleno de cada máquina virtual dotando así de un rendimiento superior a otras máquinas virtualizadas. Dicho sistema es actualmente el *hypervisor* de mayor desempeño en el mercado, y gracias a su licencia GPL se convierte en nuestra mejor opción: posibilita y facilita la virtualización de un sistema como W7 sin ser modificado. Esto gracias a los aportes de INTEL en arquitectura VT (*Codename Vanderpool*), lo cual hace que los sistemas como Windows se ejecuten con la misma fluidez que los de GNU/Linux.

4. APLICACIONES MULTIUSUARIO

Una de las grandes ventajas de tener un servidor con poderosas capacidades de cálculo y de gráficos, es la posibilidad de tener múltiples conexiones remotas con retardos imperceptibles para el usuario, explotando totalmente las distintas características contenidas en la SGI Altix, conocida como

POLAR, todo esto sin comprometer la seguridad en el tráfico de la información. Al principio de nuestras consideraciones en supercómputo, usamos como protocolo de conexión Secure Shell (SSH) entre el servidor y las terminales; mediante un servidor gráfico X instalado del lado del cliente accedíamos a nuestro sistema operativo huésped para poder interactuar con el sistema operativo virtualizado. Hoy en día se ha instalado *VirtualGL* para que el procesamiento gráfico se realice de forma remota permitiéndonos reducir el tráfico en la red. Contamos además con una administración de tiempo máquina en el uso de los procesadores; el criterio que hemos establecido para la asignación de los tiempos es según la prioridad del usuario y sobre todo del proceso a realizar. Esta capacidad de multiusuarios nos permite trabajos en paralelo y una diversidad de funciones de ejecución independiente, esto aunado a la característica de *hyperthreading*.

POLAR ha sido probada con múltiples conexiones remotas trabajando a potencia plena y con uso real en sistemas GNU/Linux, el acceso se permite en modo terminal, así como en servidores gráficos. En la Figura 1, se puede apreciar con mayor la claridad la potencia del hardware y de los componentes que integran nuestro computador.

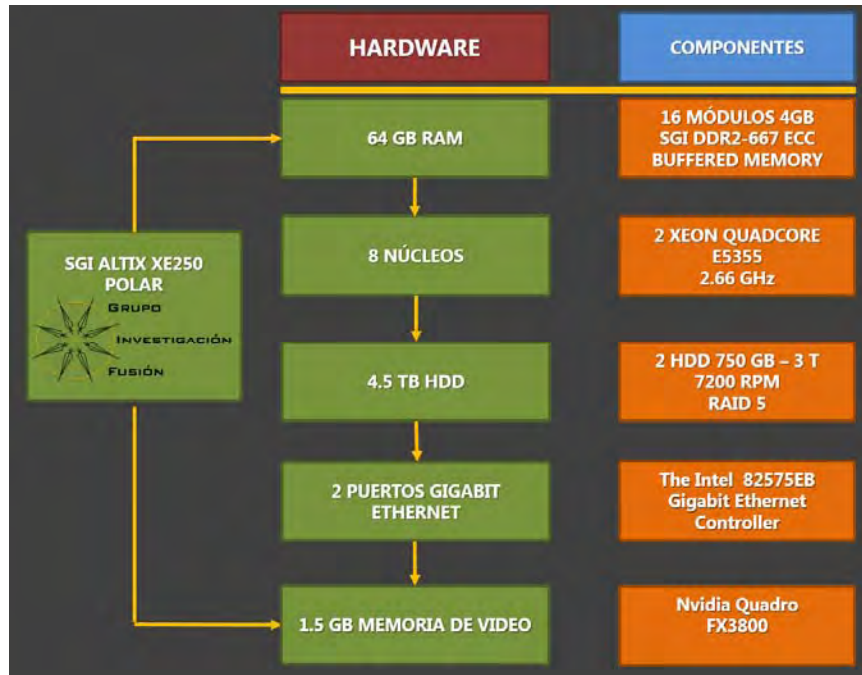


Figura 1. Esquema del hardware y componentes de la SGI Altix XE250: POLAR.

Dentro del repertorio de software instalado, POLAR presenta cinco vertientes principales: Compiladores e intérpretes como lo son GNU Compiler Collection 4.4, Python 2.6, Perl 5.10, Intel Fortran Compiler 11.0, GNU Fortran, Java JDK 1.6; librerías y paquetes gráficos como Gnuplot, Grace, COMSOL Multiphysics, Xmakemol, Visual Molecular Dynamics (VMD), GIMP, SolidWorks; librerías de cálculo numérico como LAPACK-BLACS-SCALAPACK; editores de texto y consolas de programación como Vim, Emacs, TeX / LaTeX, Openoffice.org; entre otras utilidades como Bash, GMAKE, GZIP, ZIP - UNZIP, BZIP2, LZMA, Ghostscript.

5. APLICACIONES DEL SUPERCÓMPUTO Y SUPERCÁLCULO

El Grupo de Investigación de Fusión tiene dos objetivos que involucran al supercómputo, al supercálculo y al diseño 3D CAD. El primero es diseñar todos y cada uno de los Proyectos del GIF, totalmente, participando casi todas las áreas de las ciencias de la ingeniería y de las ciencias físicas. El segundo objetivo es el de generar modelos físico-teóricos computacionales que traten de reproducir el fenómeno de interés; bajo éste precepto tenemos que definir las aplicaciones de explotación de supercómputo y supercálculo que desarrollamos a través de los siguientes conceptos como son: cálculo numérico, simulaciones computacionales, física computacional, modelización multiescala.

El supercomputo es muy importante ya que abre nuevas puertas directamente en la academia para la generación de nuevas líneas de investigación y optimizar el tiempo de los proyectos que estén realizándose, así como la oportunidad de asignar recursos para la creación de una plataforma de cómputo de alto rendimiento (High Performance Computing, HPC) que esta misma pueda ser administrada por los usuarios y los administradores del sistema en este caso alumnos del área de sistemas, por ende, se tocan dos áreas de oportunidad muy importantes:

La primera satisfacer las necesidades para cómputo de alto rendimiento de la academia consolidando todos los recursos que estos ya poseen y los próximos recursos que se puedan adquirir.

La segunda poder reforzar las competencias en el área de sistemas de TI de los alumnos que se encuentran administrando el sistema generando experiencia profesional y desarrollo académico/personal para que estos mismos puedan vincularse con la investigación o el sector privado.

6. INFRAESTRUCTURA DE CÓMPUTO

La Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, cuenta con la infraestructura de varios SITES (con clima controlado y acceso), algunos se dedican a transmisión de datos mientras que otros SITES se orientan al alojamiento de servidores administrativos y de alumnos, en el apartado de servidores además de POLAR se cuenta con 4 servidores HP PROLIANT DL 360 G6 con doble procesador Intel Xeon 5504 y 32 GB de RAM cada uno, así como almacenamiento de 300 GB en Raid 1 para la tolerancia de datos en estos servidores de los cuales utilizan la tecnología VMware Vsphere para la virtualización de varios servidores administrativos así como servidores aplicativos de la Fábrica de Software FIME y diversos servicios para la Facultad.



Figura 2. Imagen de los servidores Kappa, Lambda y Sulaco, en donde se virtualizan varios servicios de la FIME.

En 2 servidores se planea montar un clúster con PROXMOX VE para la virtualización y la alta disponibilidad de los servicios que se prestan al personal docente y administrativo, así como los servicios que tiene la Fábrica de Software FIME.

Además, se cuenta con el servidor GAMA el cual administra la página de la FIME, y varias aplicaciones. Se posee además un servidor llamado PANDORA, el cual tiene páginas de personal docente y servicio de FTP.

La FIME cuenta con toda esta infraestructura de hardware de la parte administrativa además de los servidores personales de investigadores, con todas las instalaciones físicas y de red se puede consolidar toda una plataforma para la creación de un centro de datos/cómputo, con una administración centralizada en todos los servidores y así optimizar los recursos que se pueden destinar al Data Center, esto permitiría posicionar a la FIME como un referente en el HPC/Data Center.

Principalmente el beneficio de construir un Data Center/Centro de Cómputo de Alto Rendimiento en la FIME es permitir a los investigadores realizar en menor tiempo proyectos que requieran calculo pesado. Por otro lado, el beneficio económico bajo una sola administración y operación del centro de datos optimizaría el costo para la adquisición de hardware adquiriendo solo lo necesario, así como minimizar el tiempo de ocio de los equipos de cómputo.

El otro beneficio que se puede conseguir en la construcción del Data Center es el académico que permitiría la especialización y el desarrollo profesional de alumnos, que bajo supervisión podrían administrar el centro de datos involucrando a todos los servidores, dando soporte técnico a usuarios y mantenimiento a la plataforma, todas estas competencias impactan fundamentalmente en la formación de recursos humanos. La gestación del conocimiento adquirido se proyectaría hacia los alumnos y un mejor desempeño profesional, consecuentemente la Facultad a través de talleres, y/o edición de material didáctico podría reforzar el área de sistemas.

7. CALCULO NUMÉRICO: EJEMPLOS DE MODELIZACIÓN

Dependiendo fuertemente del interés a desarrollar es que se pueden manejar, (por ejemplo, en el concepto de modelización multiescala dentro de la Teoría de la Elasticidad y Plasticidad), cajas de simulación de dinámica molecular, en las cuales se puede comprender el origen del estado primario de daño por irradiación, que cubre tiempos de femto hasta nanosegundos y en donde los potenciales, debido a la exactitud que se desea, consume demasiados recursos del equipo para su ejecución, necesitándose una plataforma estable, adecuada, potente en su velocidad de procesamiento.

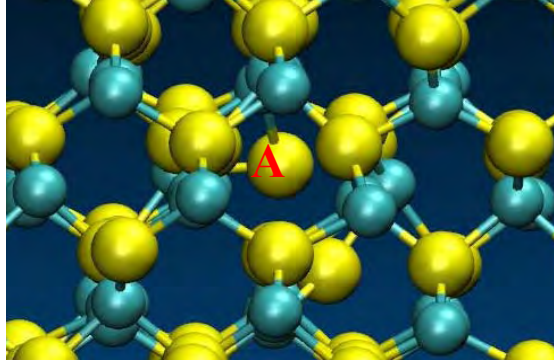


Figura 3. Caja de simulación del carburo de silicio, temperatura de 1950 K, utilizamos para la visualización el programa Visual Molecular Dynamics (VMD), observamos la difusión de un intersticial tetraédrico de silicio (amarillo) rodeado de 4 carbonos (azul).

Los tipos de códigos que se aplican y/o desarrollan en la modelización multiescala, pueden situarse en dos consideraciones. La primera tiene que ver con la exactitud del potencial que debe de ser capaz de reproducir correctamente un comportamiento experimental, pero, esta exactitud ésta limitada por el tamaño permisible de la caja de simulación, es decir, la explotación tiempo máquina. Existen códigos que poseen (como el VASP *ab initio*) [4] potenciales exhaustivos que emplean a la mecánica cuántica a través de la Teoría de la Densidad Funcional (DFT, siglas en inglés) con cajas de simulación de 100 átomos, que consumen una gran cantidad de recursos computacionales en su ejecución; existen códigos semiempíricos que cuentan con aproximaciones y/o inserciones de parámetros empíricos que permiten mayor ligereza al momento de resolver las ecuaciones de movimiento en la dinámica molecular, como nuestro modelo *tight binding* (Código TBSiC) [5], y que pueden manejar cajas de simulación de 1000 átomos permitiendo una disminución coherente de tiempo de ejecución hora máquina. Conforme uno establece la exactitud del potencial es que podrá reproducir con mayor certeza en la simulación un comportamiento experimental. Nosotros hemos partido para la creación de nuestro TBSiC de la idea que en su momento tuvieron Weissmann y Fu [6], en su trabajo sobre las superficies de silicio bombardeada con iones de carbono y en las parametrizaciones para el carbono de Xu *et al* [7] y para el silicio de Kwon *et al* [8]. Y por último están los que emplean valores completamente empíricos como son el de Tersoff [9] o de Lennard-Jones que, aunque pueden manejar cajas de simulación de cientos de miles de átomos, fallan al no poder reproducir con exactitud valores de energías de formación de defectos y/o de su difusión debido a las consideraciones propias del potencial.

La Figura 1, fue obtenida en una simulación con energía constante a 1950 K, en ella apreciamos la difusión de un intersticial de silicio introducido como defecto en un tetraedro de carbono y hemos observado a esta temperatura, que el silicio intersticial solo interacciona con átomos de su misma especie, y que difunde a través del fenómeno de *kick-out*, en el cual un átomo de una especie solo interacciona con otro similar.

Hemos encontrado a través de nuestro modelo *tight binding*, que las energías de activación de los defectos intersticiales de silicio y carbono, implantados en cristales de carburo de silicio con 65 átomos a baja temperatura (1500-1000 K), poseen los siguientes valores: 0.51 (eV) para el intersticial de carbono, y de 0.55 (eV) para el intersticial de silicio [10]. En este presente estudio hemos incrementado la estadística a 217 átomos y considerado toda una escala de temperatura que va desde los 2200 a los 1000 K y se corrobora experimental y teóricamente con [11, 12] que los valores de energía de activación del intersticial de carbono respecto al silicio son proporcionales a la masa, es decir, el carbono intersticial difunde con mayor rapidez que el silicio intersticial, respetando el fenómeno de *kick-out* para cada especie, existiendo un consenso en la estabilidad de los defectos puntuales en el β -SiC [13]. Lo que buscamos con este estudio es comprender la primera fase del daño por irradiación en el β -SiC, realizando nuestro estudio en la nano-escala permitiéndonos extrapolar valores de energía de formación de los defectos y de difusión, hacia estudios Montecarlo y de la dinámica de dislocaciones que sirvan para macroscópicamente, comprender la evolución de *clusters* de defectos, mejorando las propiedades macroscópicas, tiempo de vida, de los materiales bajo estudio.

Tabla 1. Comparación de algunos valores de energías de formación de defectos intersticiales de Silicio (Si_{TC} Si_{TSi}) en el β -SiC, todas ellas en (eV).

Defecto	<i>Ab initio</i>	<i>Tight binding</i>	<i>Tersoff</i>
Si_{TC}	6.17	6.84* - 6.32 [†]	15.18
Si_{TSi}	8.71	7.54* - 7.02 [†]	14.64

Para comparar el uso de recursos, podemos mencionar algunas simulaciones por ejemplo en la máquina JEN50 del Centro de Investigaciones Energéticas Medioambientales y Tecnológicas de España (CIEMAT), una simulación de 200,000 pasos de tiempo, con 192 procesadores (de los cuáles se usaron solo ocho debido a la cola de trabajos) MIPS R14000 a 900 MHz la cuál es una SGI ORIGIN 3800, poseía un tiempo de ejecución para 65 átomos, a 1600 K de temperatura de: 16 horas. Cajas de simulación de 217 átomos de carburo de silicio más un defecto intersticial, pueden tardar 11 días ejecutándose en máquinas como la JEN50. El lenguaje de programación de nuestros códigos se encuentra en Fortran.

8. DISEÑO APLICADO A LAS INSTALACIONES DE CONFINAMIENTO MAGNÉTICO

Actualmente el Grupo de Investigación de Fusión ha desarrollado y diseñado 4 Instalaciones Experimentales de Confinamiento Magnético Tokamak, contando con 2 versiones de diseño de cámara de vacío el Tokamak “T” que es de Baja Razón de Aspecto, y 2 para el Tokamak Esférico de Apoyo hacia “T”, el TEA-T, empero lo que deseamos resaltar con nuestra plataforma, no es sólo el diseño que se puede gestar, sino el análisis científico de cada diseño nuestro a través de software especializado.

Las configuraciones magnéticas Tokamak, son resultado del esfuerzo de un grupo mexicano de investigación que busca y desea que México pueda participar enteramente en el Reactor Termonuclear Experimental Internacional (ITER) en construcción actualmente en Cadarache, Francia.

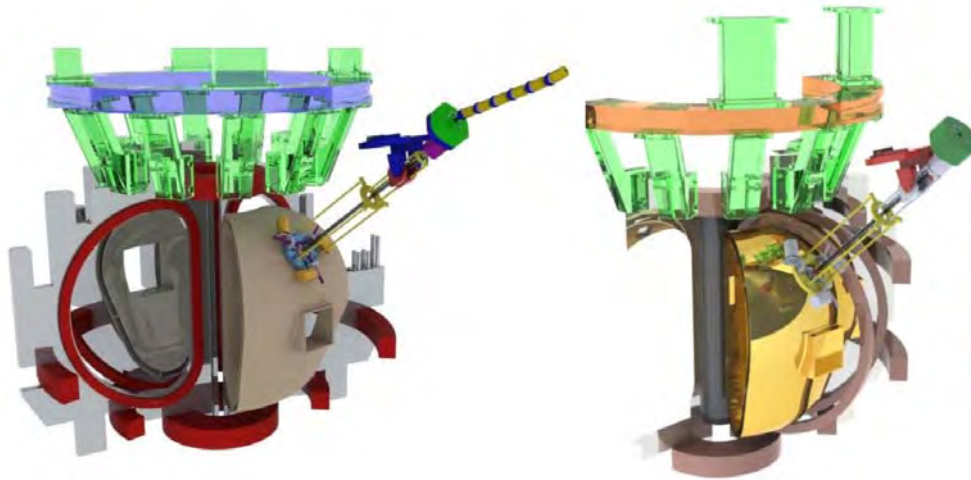


Figura 4. Vista renderizada de la Instalación Experimental de Confinamiento Magnético, esta imagen es un prototipo de diseño, en ella se aprecia el interior de la cámara de vacío, el solenoide central y las bobinas que rodean a la instalación a través de un corte en la parte superior del Tokamak “T” [14].

Trabajar con una plataforma que es capaz de sostener dos ámbitos importantes tanto en la ciencia (modelización de fenómenos complejos) y la tecnología (diseño de sistemas validados por software especializado) nos conduce a un nivel que, propiamente a través de terminales, se puede crear toda una instalación y no sólo eso, sino también el validarla, estudiarla, mejorarla, e impactar en la innovación tecnológica para beneficio de nuestro propio País.

Todas las piezas que conforman a nuestras instalaciones fueron primero diseñadas con base en las ciencias de la física y de la ingeniería, apoyados con programas en su mayoría realizados por el mismo GIF de cálculo numérico, una vez determinada, por ejemplo, la forma de la bobina D-Shaped se procede a establecer con los mejores parámetros para la generación de campo, el diseño del

conductor, se comenta que para ello, en un conductor de cobre, se emplean tiempos de corto circuito de máximo 700 ms, una vez determinada forma, generación de campo magnético, área del conductor, se procede a realizar en software de 3D CAD, el diseño en 3D de la bobina, usamos el SolidWorks para éste fin. Después de ello procedemos a aplicar simulaciones de elemento finito para estudios de temperatura, resistencia mecánica, corriente, campo magnético, etc.

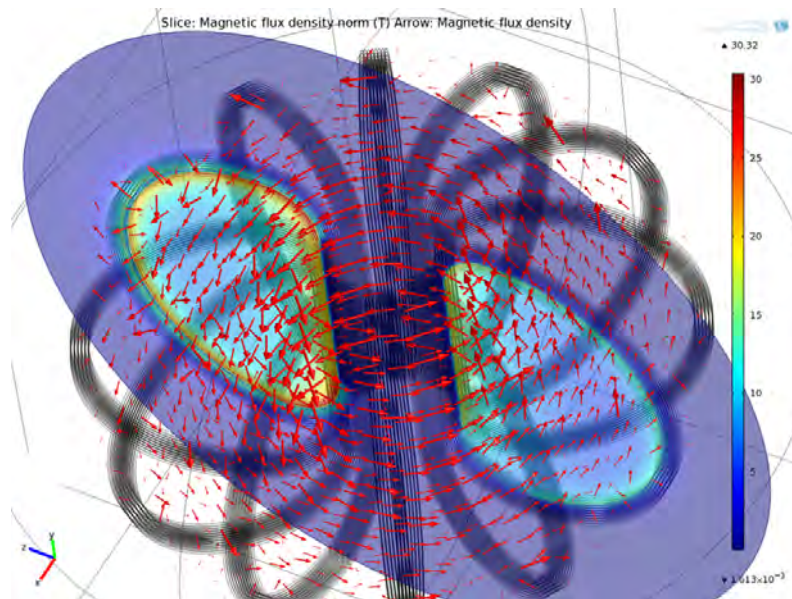


Figura 5. Simulación de campos magnéticos sobre bobinas.

El diseño de las geometrías de nuestros Tokamak, se han corroborado respecto a sus tres factores dimensionales como son la razón de aspecto (A), su factor de seguridad (q) y su razón (β) entre la presión cinética del plasma y la presión magnética [15]. Tenemos que decir que para el diseño de las bobinas toroidales se necesitó en primera instancia determinar la forma de la geometría de la bobina y después el amplio estudio de conductores que nos permitieron explorar una gran matriz de áreas de los mismos y entre los cuáles se ha elegido uno que cuenta con la suficiente área para soportar en su través una corriente promedio de 10,000 A, las bobinas toroidales generan en el primer desarrollo 1.6 T se generaron programas en lenguaje Fortran para cubrir este fin.

Como parte del diseño, se realizan diversos análisis como son: mecánicos para las estructuras, térmicos para las bobinas debido a la corriente, de refrigeración para bobinas y cámara de vacío, generación de campos magnéticos por las bobinas, esfuerzos en cámaras de vacío, el diseño nos permite desarrollar versiones optimizadas sobre cada una de nuestras propuestas.

9. DISEÑO APLICADO A LA PLATAFORMA DE SEGURIDAD Y DE EXPLORACIÓN – 1 EXPERIMENTAL (PSE-1X)

Nuestra Plataforma se compone además de POLAR de un servidor gráfico, que cuenta con las siguientes características: 16GB RAM, 6 Core AMD Processing, Nvidia Quadro Graphics al que le denominamos PANDA. Entre sus funciones está precisamente el diseño mecánico tanto en 2D como en 3D, apoyando también con simulaciones. Para sostener los objetivos del GIF, se ha diversificado el interés y se han desarrollado nuevos proyectos como el de la Nave Dirigible Doble Rígido, PSE-1X.

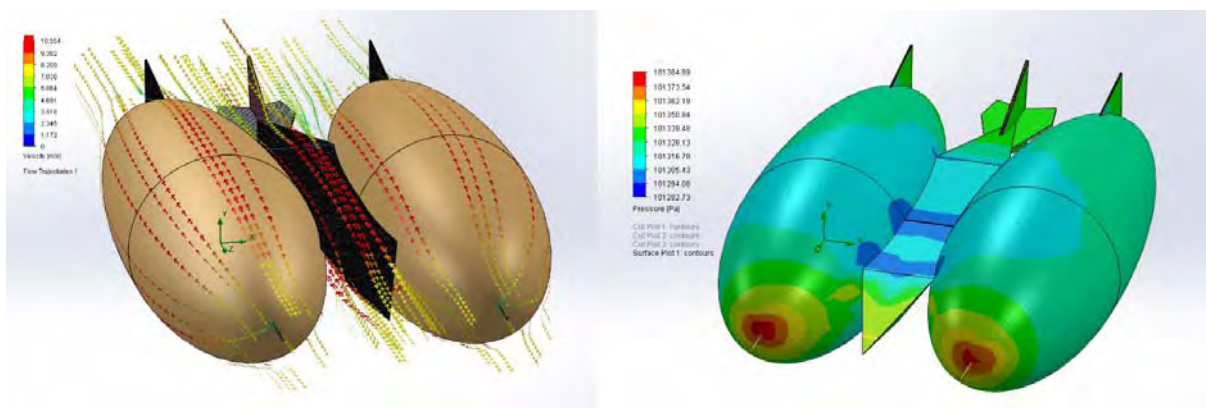


Figura 6. Estudio realizado con el software COMSOL Multiphysics y el Módulo de SolidWorks para fluidos que permite comprender la velocidad del viento en la Plataforma de Seguridad y Exploración – 1 eXperimental (PSE-1X) y la distribución de las presiones

Es una nave que permite -dependiendo de la carga- sostener hasta 500 toneladas, y es multifuncional, multipropósito, de gran altura y las áreas de trabajo en las que puede desarrollarse son: Plataforma de control de tráfico terrestre, estación retransmisora de señal, meteorológica, de seguridad y vigilancia, publicidad, defensa, portadrones y de pasajeros.

La Figura 5 es tan sólo un ejemplo de las simulaciones que actualmente desarrollamos sobre la PSE-1X, gracias a la Plataforma de Supercómputo, Cálculo y Diseño, éste proyecto en específico ha desarrollado 5 Modelos Industriales hoy con título por el Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial (IMPI) y 7 desarrollos de Patente también ya depositados ante el IMPI, ha ganado 15 premios en las Ediciones 2016, 2017, 2018 del Premio UANL al a Invención, la nave en sí tiene como características: autosustentable, puede emplear energías renovables (solar y eólica); mayor capacidad de vuelo (4 semanas); navegación redundante; construida modularmente permitiendo generar varias configuraciones aerodinámicas; innovación en materiales para resistir mayor carga, y el empleo de Impresión 3D para ellos.

10. CONCLUSIONES

El supercómputo nos ha permitido la generación de conocimiento y el desarrollo de nuevas tecnologías, al reproducir mediante modelos físico-teóricos y de análisis, múltiples fenómenos que abarcan desde la modelización multiescala en el área de la ciencia y tecnología nuclear, como el diseño en 3D de nuestras instalaciones experimentales de confinamiento magnético Tokamak: “T” y “TEA-T”. En este esfuerzo científico tecnológico, participan adecuadamente aplicaciones que permiten explotar todos los recursos de nuestra Plataforma POLAR, PANDA para convertirla en algo más que una simple herramienta computacional: nuestro centro neurálgico de supercómputo, cálculo y diseño: PSCD.

Es ampliamente notable el incremento de la capacidad que al día de hoy poseen los sistemas computacionales, como bien se ha comentado no sólo en diseño sino también en cálculo, nuestra PSCD nos ha permitido abordar con mayor libertad Proyectos de Sustentación Económica que sostienen el interés primordial del GIF para iniciar la siguiente fase: la construcción del Tokamak Esférico de Apoyo hacia T, TEA-T. El Proyecto TEA-T ésta siendo llevado a cabo en conjunto con la Universidad Estatal de San Petersburgo (SPbSU) en la Federación Rusa, el GIF de la UANL entonces desea consolidar el área de la Fusión por Confinamiento Magnético en nuestro País.

La elección de un sistema operativo (GNU/Linux) junto con sus aplicaciones libres, ha sido de vital importancia debido a las ventajas que presenta la licencia GPL. Esto nos permite desarrollar códigos para la implementación de conocimientos en el ámbito de la generación de la energía en el campo de la fusión nuclear, sin tener que destinar recursos económicos para la obtención de Licencias, exceptuando a nuestros programas de Diseño en 3D y de análisis en Multifísica que corren con Licencia Comercial.

El proyecto del Data Center/Centro de cómputo de alto rendimiento proyecta un gran potencial que con el apoyo del Posgrado de la FIME, como ha sucedido hasta ahora, podrá contribuir al fortalecimiento de la plataforma a través de la unión de los proyectos de investigadores y el financiamiento de las convocatorias de infraestructura existentes, adquiriendo el equipamiento necesario para la creación de la plataforma de cómputo y alto rendimiento beneficiando a el área de investigación y academia otorgándoles una plataforma para desarrollo de sus proyectos, todo el equipo con el que actualmente cuenta la FIME se puede fortalecer gracias al apoyo que pueden otorgar los profesores investigadores y la necesidad que día a día crece para el computo de alto rendimiento.

Se debe contar con un espacio físico con las características ideales para la construcción de este Data Center/Centro de cómputo de alto rendimiento las cuales son, energía regulada, clima controlado, seguridad física, planta de emergencia, personal de atención para servicio técnico e infraestructura así como sus respectivas certificaciones.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos de antemano al Programa para el Mejoramiento de Profesorado (PROMEP) clave: UANL-EXB-156 por el Apoyo Económico de este proyecto. Así mismo agradecemos el soporte que realiza la Dirección General de Informática (DGI) de nuestra Universidad hacia nuestra SGI Altix XE 250: POLAR.

REFERENCIAS

1. Salvador, M., *et al*, *Mexican Design of the Tokamak Experimental Facility*, 23ra IAEA Fusion Energy Conference; Daejeon, Korea, (2010).
2. Guevara, J.A.; *et al*, *60 GHz 300 kW Gyrotron General Design for the Mexican Tokamak "T"*, 26 IAEA Fusion Energy Conference, Kyoto, Japan (2016)
3. <http://www.top500.org/stats/list/34/osfam> "Operating system Family share for 11/2009"
4. Bernardini, F., Colombo, L. "Interaction of doping impurities with 30° partial dislocations in SiC: an ab initio investigation", *Phys. Rev. B* 72, 085215 (2005).
5. Colombo, L. "Tight-binding molecular dynamics", *Rivista del Nuovo Cimento* 28, no.10, 1 (2005).
6. Fu.C.C.; Weissmann, M.; "Tight Binding molecular dynamics study of amorphous carbon deposits over silicon surfaces", *Phys. Rev. B* 60 (1999) 2762-2770.
7. Xu. C.H.; Wang, C.Z.; Chan, C.T.; Ho, K.M.; "A transferable tight binding potential for carbon", *J. Phys.: Condens. Matter* 4 (1992) 6047-6054.
8. Kwon, I.; Biswas, R.; Wang, C.Z.; Ho, K.M.; Soukolis, C.M.; "Transferable tight-binding models for silicon", *Phys. Rev. B* 49 (1994) 7242-7250.
9. Mura, D.; Colombo, L. *et al*, "Structural and chemical order of bulk $Si_{1-x}C_x$ amorphous alloys", *Phys. Rev. B*, **Vol. 58**, 16, 1998.
10. Salvador, M.; Perlado, J.M.; Mattoni, A.; Bernardini, F.; Colombo, L. "Defect energetics of β -SiC using a new tight-binding molecular dynamics model", *Journal of Nuclear Materials* (08 2004), Elsevier; ISSN: 0022-3115; **Vol. 329**, pages 1219-1222.
11. Rüschemschmidt, K., Bracht, H., Laube, M. *et al*, "Self-diffusion in isotopically enriched silicon carbide and its correlation with dopant diffusion", *J. Appl. Phys.* 96 (2004), 1458-1463, ISSN: 0021-8979.
12. Lucas, G., Pizzagalli, L., "Ab initio molecular dynamics calculations of threshold displacement energies in silicon carbide", *Physical Review B*, **Vol. 72**, Article Number: 161202, ISSN: 1098-0121, (2005).
13. Lucas, G., Pizzagalli, L., "Theoretical study of the recombination of Frenkel pairs in irradiated silicon carbide", *Journal of Physics Condensed-Matter*, **Vol. 19**, Article Number: 086208, ISSN: 0953-8984 (2007).
14. Angular and Articulated Pellet Mechanism on the Mexican Tokamak Experimental Facility, Symposium on Fusion Technology, Porto, Portugal (2010)
15. Ludwig, G.O.; Del Bosco, E.; Ferreira, J.G.; Berni, L.A.; *et al*; "Spherical Tokamak development in Brazil", *Brazilian Journal of Physics*, **Vol. 33**, no.4, pp. 848-859, December 2003.

Diseño D-shaped para las bobinas toroidales en dispositivos de confinamiento magnético de fusión.

M. Salvador, L. R. Hernández, J. González, S. Martínez

*Grupo de Investigación de Fusión, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica,
Universidad Autónoma de Nuevo León
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L., México
max.salvadorhr@uanl.edu.mx, raulhdz0296@gmail.com*

E. Chapa

*Grupo de Investigación de Fusión, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas,
Universidad Autónoma de Nuevo León
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L., México
emiliochvi@gmail.com*

G. M. Voryobov

*Departamento de Física.
Universidad Estatal de San Petersburgo, Federación Rusa.*

Resumen

El presente artículo cubre el diseño de las bobinas 'D-shaped' para un sistema toroidal que conforma una parte fundamental de un reactor nuclear de fusión por confinamiento magnético. Para ello, se empieza del análisis puramente matemático de la curvatura en forma de 'D' sin entrar en el aspecto electromagnético del arreglo como primera aproximación de la superficie. Se llega a una ecuación diferencial cuya solución puede ser dada de manera analítica o numérica, en nuestro trabajo, esto se logró a través de una metodología numérica programando un algoritmo en lenguaje Fortran. Se establecieron criterios sobre nuestros valores dimensionales para proseguir con la configuración del diseño de la bobina toroidal en tres dimensiones con ayuda del software SolidWorks (diseño 3D CAD). Presentamos entonces el diseño de los sistemas magnéticos toroidales dándole la debida importancia a la relación del radio de la bobina 'D-shaped' con el campo electromagnético que se puede generar, siendo así mostramos los campos magnéticos toroidales generados con diversos valores de corriente sobre la bobina y su relación con el aspecto geométrico respecto al radio mayor de la instalación. El presente estudio permite entonces determinar la correcta geometría que debe aplicarse a bobinas toroidales de reactores de fusión por confinamiento magnético, el presente estudio puede generar geometrías aplicadas a Tokamaks convencionales, de Baja Razón de Aspecto y Tokamaks Esféricos. También el estudio permite sentar la base para determinar el diseño del área del conductor que conforma la bobina.

1. INTRODUCCIÓN

Un Tokamak es, en esencia, un dispositivo magnético toroidal diseñado para permitir el confinamiento sobre un plasma, el cuál debe poseer ciertas características tales como: densidad, temperatura y confinarle en un tiempo suficiente para gestar las reacciones de fusión en él. Las condiciones extraordinarias presentes en el plasma hacen atractivo a este dispositivo como una fuente de explotación de energía. Esta configuración magnética toroidal es una de las concepciones de generación de fusión nuclear más prometedoras en nuestro actual siglo, desde que, en 1950, Igor E. Tamm y Andrei D. Sakharov por parte del Instituto Kurchatov en tiempos de la Unión Soviética (U.R.S.S.) publicaron su artículo fundamental sobre la fusión magnética [1, 2, 3, 4].

A lo largo de los años, avances en los dispositivos de fusión por confinamiento magnético en el área de la fusión nuclear han demostrado que la humanidad está cada vez más cerca de conseguir energía gracias al aprovechamiento de ellos, en este sentido los Tokamaks son las máquinas que más se han desarrollado en este ámbito, por lo tanto, tales sistemas han obtenido total interés e inversiones en grandes países. En Francia actualmente se está concluyendo la construcción del primer reactor por confinamiento magnético, es un Tokamak y es el Reactor Termonuclear Experimental Internacional (ITER, siglas en inglés) [20], esta máquina, tiene como objetivo el demostrar la integración de todos los sistemas inherentes a un reactor de confinamiento magnético como la seguridad y la explotación de la fusión nuclear como fuente de energía, las investigaciones sobre ITER han avanzado con certeza y hoy incluso existe la proyección hacia un reactor mucho más compacto que se llama DEMO.

Los países que actualmente están participando en ITER son: la Federación Rusa, los Estados Unidos de América, la Unión Europea, Japón, la República Popular de China, India, Corea del Sur, y del Grupo del G5, sólo Brasil, México y Sudáfrica no participan. En la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL) a través del Grupo de Investigación en Fusión (GIF) conformado por personal de la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica (FIME) y la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas (FCFM) ha desarrollado 4 diseños de instalaciones de confinamiento magnético y 1 de ellas será construida en colaboración con la Universidad Estatal de San Petersburgo en la Federación Rusa. Nuestra instalación entonces permitirá fortalecer el campo de la Fusión Nuclear en México.

Los diseños generados muchas veces se encuentran determinados por las configuraciones del mismo reactor, es decir, los parámetros que determinan el cizallamiento del campo electromagnéticos, los materiales que soportan a la generación de esos campos, así como el tiempo de operación de ellos, afecta el rendimiento de la máquina. Para optimizar y generar mayores beneficios de uso en reactores nucleares de fusión, se reconoce la indispensabilidad en los avances en áreas científicas como ciencias físicas, ciencias de la ingeniería.

En la UANL en Monterrey, México, se han generado diseños Tokamak de: Baja Razón de Aspecto (LAR, siglas en inglés) como Tokamaks Esféricos (ST, siglas en inglés) [5, 6], nuestros diseños consideran en esta primera fase, materiales clásicos para los conductores de los sistemas de bobinas, con la intención de que en un futuro migremos a materiales superconductores para los sistemas

magnéticos en nuestras instalaciones. Así, se conseguirá una descarga de mayor duración en nuestros dispositivos, el GIF de la UANL tiene actualmente en vigor un convenio con la Universidad Estatal de San Petersburgo, para la construcción de Tokamaks Esféricos.

Uno de nuestros diseños se enfoca a un ST pequeño y cuenta con un campo toroidal de B_T de 0.5 T, a éste le llamamos: Tokamak Esférico de Apoyo hacia “T” (TEA-T), éste pequeño dispositivo reforzará el Diseño del Tokamak “T”, el cual evoluciona de 1.6 T a 3 T proyectándose ya no como un Tokamak de Baja Razón de Aspecto sino una configuración Tokamak Esférico de Alto Campo Magnético. Se debe reconocer que, en la configuración magnética de un Tokamak, el campo toroidal requiere ser mayor que el campo poloidal ($B_T \gg B_P$) además de la corriente máxima del plasma debe cumplir con, siendo un factor importante en el régimen del confinamiento. Mineev [7] calcula la corriente máxima del plasma con la siguiente relación $I_p \approx \frac{2\pi a B_T}{\mu_0 q R}$.

En la historia, cuando se comenzó a estudiar el fenómeno del confinamiento magnético del plasma, se utilizaron bobinas toroidales con forma circular, debido a la simplicidad del diseño, instalación y análisis de los sistemas, pero con el paso del tiempo se han realizado estudios sobre la mejora en la estabilidad del plasma [8, 9, 10, 11], además que, debido a los campos magnéticos generados, estos afectan con tensiones-esfuerzos el conjunto de sistemas de bobinas, como a la máquina en sí [12] y ello determina la geometría de las bobinas para reducir los esfuerzos y mejorar el confinamiento [13, 14]. Hoy en día se cuentan con geometrías interesantes para las bobinas toroidales con bobinas D-shaped estableciendo la idea que actualmente ha sido proyectada en las instalaciones de ITER [15]. Debido a estos trabajos previos que han reportado excelentes beneficios es que también diseñamos nuestras bobinas con la forma D-shaped para nuestros dispositivos de confinamiento Tokamak.

La fusión nuclear se encuentra cada vez más cerca de lograrse, de conseguirse, los Programas Internacionales que en conjunto y a través de convenios enriquecen el quehacer científico de la fusión, serán altamente redituables. El GIF de la UANL hace este esfuerzo para precisamente dotar a México de esta fuente de energía.

El diseño de una geometría para una bobina D-shaped cuenta con un atractivo tanto en el aspecto de la Física como de la Ingeniería, pues existen cargas que tanto los conductores, sus carcasas, y sus soportes tendrán que resistir, todo un esfuerzo mecánico que, aprovechando dicha geometría, puede distribuir mejor dichas cargas, de esto dependerá la integridad de la máquina al momento de realizar las descargas de alta corriente con una interacción múltiple de campos magnéticos considerables.

2. DISEÑO DE LA BOBINA ‘D-SHAPED’

2.1. Diseño de la geometría D-shaped.

El diseño geométrico de las bobinas toroidales en un dispositivo de confinamiento, está gobernado por dos consideraciones: el esfuerzo mecánico en la bobina y el calor removido, ciertos dispositivos de investigación para el confinamiento magnético poseen bobinas toroidales regularmente circulares

o rectangulares debido a los bajos campos magnéticos en pequeños Tokamaks, sin embargo, el nivel de las fuerzas se incrementa considerablemente en Tokamaks mayores, debido a que el estrés mecánico (F) es proporcional al cuadrado del campo Toroidal (B_T) y el radio mayor (R) pudiendo generar una deformación en las bobinas [8, 9, 10, 17]. Esto tuvo solución gracias al análisis de File *et al* [10, 12, 13, 14], incorporando un nuevo tipo de bobinas toroidales ‘D-shaped’, donde el radio de curvatura llega a ser pequeño cuando la presión magnética es grande [17].

El campo magnético en el diseño toroidal es inversamente proporcional al radio (r) [13, 14], así como la presión magnética es proporcional a $\frac{1}{r^3}$. Obteniendo así que, esto para tener una distribución uniforme del estrés mecánico. Una geometría toroidal en la forma D-shaped depende de:

$$B_T(r) \sim r^{-1} \quad (1)$$

$$\frac{B_T^2}{2\mu_0} \sim r^{-2} \quad (2)$$

La descripción analítica para la generación de la forma de las bobinas toroidales D-shaped en un caso ideal con bobinas continuas (no uniones eléctricas) puede ser expresada a través de la ecuación diferencial [13, 14, 17]:

$$r \frac{d^2 r}{dz^2} = \pm \frac{1}{k} [1 + \left(\frac{dr}{dz}\right)^2]^{3/2} \quad (3)$$

$$k = \frac{1}{2} \ln \frac{r_1}{r_2} \quad (4)$$

Donde (k) es la relación entre el radio externo-interno de la D-shaped, la ecuación 3 permite trabajar el radio (r) de la D-shaped en función de la altura (z). Se debe hacer notar que la distribución espacial del campo magnético depende de la geometría, y que el factor (k) puede ser también como sigue a través de las siguientes ecuaciones:

$$k = \frac{2T}{IB_m r_1} = \frac{4\pi T}{\mu_0 N I^2} \quad (5)$$

Donde (T) es la tensión promedio.

Se reporta del artículo de Raeder [17] dos soluciones a la ecuación (3) a partir de una parametrización, ignorando la proporcionalidad inversa del campo magnético con respecto al radio (es decir, campos magnéticos toroidales ideales) y tratando a las bobinas como filamentos de corriente infinitamente delgados, es decir, el análisis puramente matemático. Su trabajo, da una solución analítica con funciones de Bessel, y otra, una solución numérica, siendo esta última

solución la base para este trabajo. A continuación, procederemos a describir nuestro desarrollo matemático y resultados de nuestras simulaciones.

2.1.1. Solución Numérica.

Con la intención de solucionar la ecuación (3) con la parametrización brindada en el artículo de Raeder [17] y mostradas en las ecuaciones (7) y (8), se logra una dependencia de la altura (z) de la bobina y su radio (r) con respecto al ángulo:

$$dr = ds \sin \alpha \quad (7)$$

$$dz = ds \cos \alpha \quad (8)$$

Donde ' ds ' es la longitud de la curvatura.

Las ecuaciones anteriores, deben cumplir las siguientes condiciones iniciales para conseguir la forma en 'D':

$$r(\alpha = 0) = r_a \quad (9)$$

$$z(\alpha = 0) = 0 \quad (10)$$

Donde ' r_a ' es el punto donde el radio (r) es mayor. Las integraciones analíticas de las ecuaciones (7) y (8) dan como resultado una expresión que fácilmente puede emplearse (11) pero otra que necesita una integración numérica o en su defecto, usar las funciones modificadas de Bessel de primera clase y orden n:

$$r = r_a e^{-k} e^{k \cos \alpha} \quad (11)$$

$$z(\alpha) = r_a k e^{-k} \int_0^\alpha e^{k \cos \alpha'} \cos \alpha' d\alpha' \quad (12)$$

Desarrollamos un algoritmo que programamos en Fortran, dicho programa estable para cada radio (r), y altura (z) que, facilitamos la solución a ambas ecuaciones (11) y (12) escribiendo un programa en el lenguaje de programación Fortran. De lo cual se consigue la siguiente gráfica:

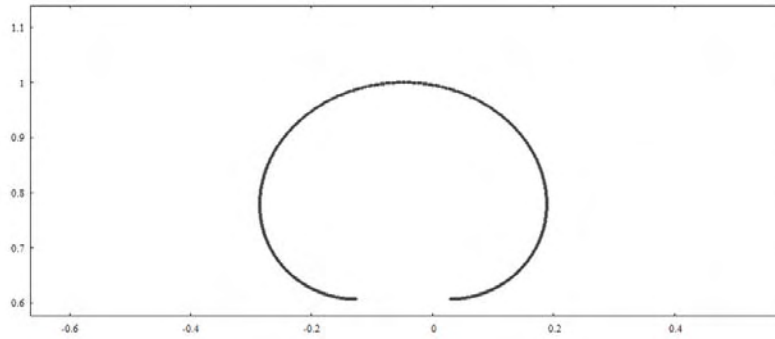


Figura 1. Gráfica de la solución numérica de las ecuaciones 11 y 12.

Tenemos la capacidad de estudiar y cubrir diferentes relaciones de radio, altura, características de la bobina que obviamente en el mundo de los Tokamaks interesan pues se pueden abordar: convencionales, de baja razón de aspecto y Tokamaks Esféricos. Este desarrollo realizado por el GIF- UANL le ha permitido desarrollar las dos últimas configuraciones, el Tokamak "T" que es de Baja Razón de Aspecto y el TEA-T el cual es un Tokamak Esférico.

Se desea conseguir la superficie D-shaped con mediciones óptimas y para ello, visualizaremos distintas gráficas pues nos interesa obtener en el centro el valor.

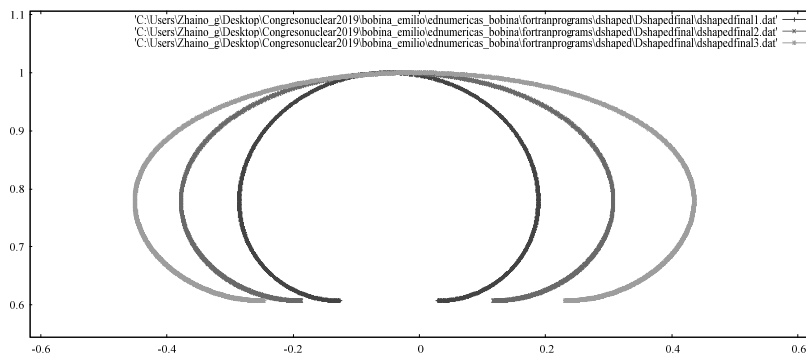


Figura 2. Diferentes gráficas modificando la relación de radios (k) para 'n' cantidad de bobinas.

3. ESTUDIOS DE GENERACIÓN DE CAMPO MAGNÉTICO RESPECTO AL RADIO MAYOR (R)

Cuando uno trata de calcular los campos del conductor, se puede integrar la Ley de Biot-Savart [12, 18]:

$$B(r_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{Idl \times (r_2 - r_1)}{|r_2 - r_1|^3} \quad (13)$$

Donde $B(r_2)$ es el vector del campo magnético en la posición r_2 , μ_0 es la permeabilidad magnética del espacio libre, I es la corriente conducida por el conductor, r_1 es el vector localizado en el conductor, dl es el segmento diferencial conductor en la dirección del flujo de la corriente.

Al ser un diseño complejo de la bobina como el que se propone, el Grupo de Investigación en Fusión [19] estableció para la generación del campo magnético toroidal (B_T) a través de la bobina D-shaped:

$$B = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \left[\int_{\theta_1}^{\theta_2} \cos(\pi + \theta) d\theta + \frac{a}{r^2 r_2} \sum^3 \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{a - r \cos(\theta - \theta_0)}{[r^2 - 2ar \cos(\theta - \theta_0) + a^2]^{3/2}} d\theta \right] \hat{z} \quad (14)$$

La integral (13) tiene problemas por divergir cuando r_2 se aproxima a r_1 , este problema se evita usando una ecuación más fundamental, siendo la Ecuación de campo:

$$B(r) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{J \times (r_2 - r_1) dA}{|r_2 - r_1|^3} \quad (15)$$

Aquí dA , es la diferencial del área de la sección eficaz del conductor y J es la densidad de corriente, se ha encontrado que para bobinas circulares, rectangulares o D-shaped, la integral (15) puede ser parcialmente evaluada permitiendo una línea integral de una dimensión con un argumento que permite relacionar los valores r_2 y r_1 . La distribución radial del campo magnético toroidal para una bobina delgada puede ser aproximada en su evaluación por las siguientes ecuaciones:

$$B_\phi = B_m \frac{r_2}{r} \left[1 + \frac{1}{\left(\frac{r}{r_2}\right)^N - 1} + \frac{1}{\left(\frac{r_2}{r}\right)^N - 1} \right] \quad (16)$$

$$B_m = \frac{\mu_0 N I}{2\pi r_2} \quad (17)$$

Las singularidades de los radios, cuando r_1 y r_2 pueden desaparecer, es decir, la forma de las bobinas toroidales de campo D-shaped, se convierte en circular cuando N es pequeño. Siendo así, es posible evaluar el campo magnético de la bobina.

Es verdad que analizar un sistema completo como el que proponemos puede resultar arduo, sin embargo, se pueden realizar análisis generales que al final dan resultados coherentes con respecto a los obtenidos para la generación del campo magnético y la tensión), por lo tanto, estableceremos que el campo magnético toroidal en una sección transversal no es uniforme, pero mantiene una relación con respecto al radio mayor de la D-shaped de la siguiente manera (ver FIGURA 3):

$$B_T R = \text{constante.} \quad (18)$$

Se asume y respeta que los resultados generales no dependen del traslape perfecto de las secciones eficaces del toro o del solenoide, sino que dependen de la exactitud con la cual un campo toroidal está en concordancia con la consideración electromagnética básica:

$$B_T = \frac{\mu_0 N_{tot} I}{2\pi R} \quad (19)$$

$$T = \frac{\mu_0 N_1 N_2 I_1 I_2}{8\pi} \ln \frac{R_2}{R_1} \quad (20)$$

En la ecuación (19) B_T , I es la corriente de alimentación en la bobina conductora, N_{tot} es el total de vueltas sobre todas las bobinas (ej. JET tiene 32 bobinas por 24 vueltas cada una = 768); R, es el radio en el cual el campo es requerido. Este diseño de forma de bobina nos permite trabajar con el diseño del conductor, en este caso es cobre, para ello consideramos tiempo de corto circuito.

Esto quiere decir que, ese campo (o capa) toroidal depende de cómo está empaquetado uniformemente y cómo está cerrado en el espacio, la ecuación (19) contiene además un número ya determinado de vueltas para el toroide, estas portan al igual, una corriente también establecida, si existiesen algunas zonas con cierto espacio entre ellos, entonces sí, la mejor exactitud provendría de las integraciones de línea de campo a lo largo de toda la bobina para nuestra D-shaped, ecuación (15).

El Toro Conjunto Europeo (JET, siglas en inglés) integra en sus cálculos la validación de consideraciones básicas (ecuaciones 19 y 20) para calcular el campo en el interior del toroide y su tensión [16], presentado también por la División de Energía por Fusión y el Oak Ridge National Laboratory en sus estudios respecto al traslape [8].

Para esto, se escribió un programa en Fortran y se generaron las curvas que se aprecian en la Figura 3 que involucran la ecuación (19) que concentra la relación del radio y su barrido de campo magnético, con un valor de corriente de 10,000 A y número de vueltas de 8, 9, 12, 15, 20, 22, 25 y 30 vueltas por bobina, que multiplicadas por el número total de bobinas (12, 14 y 16), darán completamente el número total de vueltas por bobinas en el toroide para determinar el campo toroidal más adecuado en cada configuración de corriente.

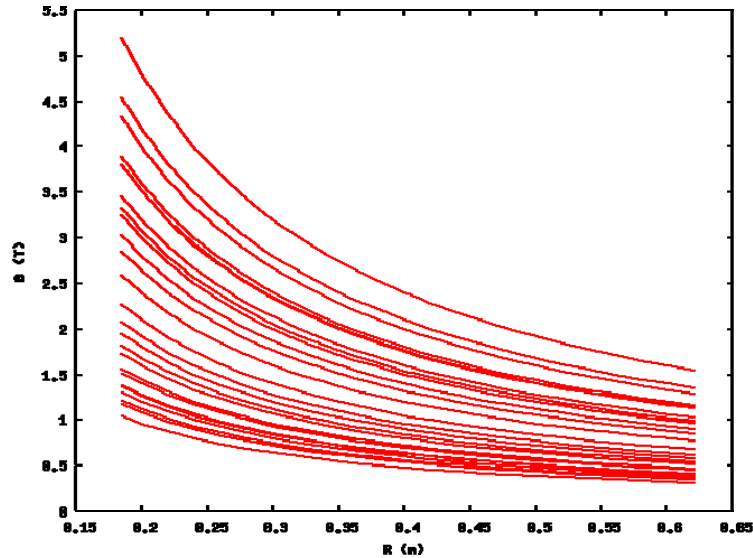


Figura 3. Gráficas del campo magnético manteniendo la corriente de 10,000 A en la bobina D-shaped para un campo magnético de 1.6 T a 0.41 m.

La forma correcta de la interpretación para la generación del campo toroidal es determinar el campo magnético en el centro de nuestra cámara de reacción [16] para encontrar los campos toroidales externos ($B_{T\text{ext}}$) e internos ($B_{T\text{int}}$). El JET reporta la generación de 4 T usando la ecuación (19) con una corriente de 78,000 A a 3 m de radio con el razonamiento escrito anteriormente.

4. DISEÑO 3D CAD

Con ayuda del software SolidWorks, el uso de las ecuaciones (11) y (12), y con la Figura 2 se obtuvieron los radios interior y exterior de la bobina D-shaped con un mayor aprovechamiento para la confinación del plasma.

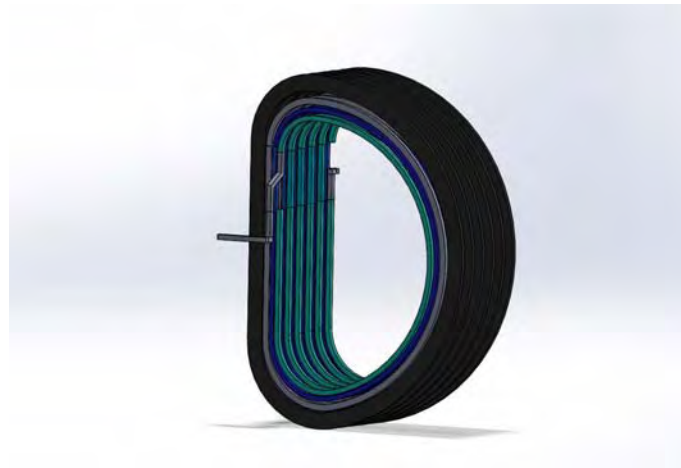


Figura 4. Propuesta de la bobina D-shaped del Grupo de Investigación en Fusión

Se visualiza en la Figura 4 una bobina D-shaped reproducida paralelamente en el espacio y haciendo una conexión entre todas para tener un circuito cerrado por el cual una corriente puede conducir. Se hizo un estudio con el conductor a tiempo de corto circuito.

5. CONCLUSIONES

El sistema magnético toroidal en un reactor nuclear de fusión es uno de los estudios primordiales en el diseño de un reactor de confinamiento magnético, debido a que generará el espacio donde el plasma quedará confinado, gracias a las contribuciones de Tamm, Sakharov y avances establecidos por File y Reader (entre otros científicos), es que el Grupo de Investigación en Fusión (GIF) diseñó a través de consideraciones matemáticas las bobinas toroidales para sus dispositivos Tokamak, dando inicio a un panorama enorme de investigación como aspectos magnéticos, térmicos, mecánicos, y se orienta hacia materiales superconductores de alta temperatura, además de proyectar las siguientes áreas de interés como lo son la construcción del TEA-T con la Universidad Estatal de San Petersburgo (SPbSU, por sus siglas en inglés).

El GIF-UANL posee investigadores, desarrollos tecnológicos, convenios científicos y de acuerdo a sus estimaciones de tiempo, nuestras configuraciones Tokamak entrarán en operación pronto, así que nuestros esfuerzos se enmarcan en el progreso para contribuir en los avances científico-tecnológicos de la fusión por confinamiento magnético en Tokamaks. El siguiente paso que posee el GIF por delante es la construcción de la evolución del Tokamak “T” que evoluciona de 1.6 T a 3 T y que deja de ser de Baja Razón de Aspecto para convertirse en un Tokamak Esférico, para ello es que se apoyará en el diseño de un pequeño Tokamak Esférico de Apoyo hacia “T” de 0.5 T que reforzará el diseño y construcción final del Tokamak “T”.

AGRADECIMIENTOS

El Grupo de Investigación en Fusión agradece al PRODEP (anterior PROMEP), por el apoyo brindado gracias a la aprobación del Proyecto de Fusión (UANL-EXB-156), que ha permitido generar nuestra Plataforma de Supercómputo, Cálculo y Diseño (PSCD) con nuestras máquinas POLAR (SGI Altix XE250) y PANDA.

REFERENCIAS

1. A.D. Sakharov. “Fizika Plasmy i Problema Upravlyaemykh Termoyadernykh Reaktsii”, **Vol. 1**; Ed. M. A. Leontovich; Moscú, p. 20, (1958).
2. I.E. Tamm. “Fizika Plasmy i Problema Upravlyaemykh Termoyadernykh Reaktsii”, Ed. M. A. Leontovich; Moscú, p. 3, (1958).
3. E.A. Azizov. “Tokamaks: from A.D. Sakharov to the present (the 60-year history of Tokamaks) /A.D. Sakharov’s 90th Birthday Commemoration”, Russian Academy of Sciences, (2012).

4. V.D. Shafranov. "Atom. Energ.", 19 (2) 120 (1965).
5. Azizov, E.A.; Mineev, A.B.; "On the limits of compactness of Tokamak-based neutron sources", Problems of Atomic Science and Technology, *Ser. Thermonuclear Fusion*, (2012).
6. Azizov, E.A.; Mineev, A.B.; "Joint Upgraded Spherical Tokamak", Troitsk Institute for Innovation and Thermonuclear Research.
7. A.B. Mineev. *Physico-Technical Fundamentals of Controlled Thermonuclear Fusion*, Publishing House of the Saint Peterburg Polytechnic University, en Ruso (2006).
8. W.H. Gray, et al. "Bending free toroidal shells for Tokamak fusion reactors", The Johns Hopkins University Press, (2001).
9. Y.V. Gribov.; L.E. Zakharov.; S.V. Putvinski.; "Basis of the choice of Tokamak Reactor Parameter", *Sum of Science and Technics*, ser. Plasma Physics, **V.13** p.218 , (1993).
10. S.L. Gralnick. F.H. Tenney.; "Analytical Solution of the Toroidal Constant Tension Solenoid", Proc. 6th Symp. On Engineering Problems of Fusion Research, (1976).
11. H.N. Cheol.; et al.; "Design of Magnetic Systems for SNUT-79 Tokamak", *Journal of the Korean Nuclear Society*, **Vol. 16**; No. 2, 1984.
12. D.W. DeMichele. J. B. Darby.; "Three-dimensional mechanical stresses in toroidal magnets for controlled thermonuclear reactors", 5th Symposium on Engineering Problems of Fusion Research, (1973).
13. J. File.; R. G. Sheeld.; "Large superconducting magnet designs for fusion reactors", Plasma Physics Laboratory, Princeton University.
14. J. File.; R. G. Sheeld.; "A large superconducting magnet for fusion research", Plasma Physics Laboratory, New Jersey.
15. ITER under collaboration Home Teams, TAC-16 Progress Report-Research & Development R&D, 2000
16. E. Bertolini, et al.; "Raising the JET Toroidal Field to 4 Tesla", JET-R (99)10, (2000).
17. J. Raeder. "Some analytical results for toroidal magnetic field coils with elongated minor cross-sections", Max Planck Institut für Plasmaphysik, (1976).
18. L. Youngxing, et al. "Computation of the magnetic field and ripple for the toroidal coils in HL-2M Tokamak", SWIP Annual Report.
19. Grupo de Investigación en Fusión (GIF). "Mexican Design of a Tokamak Experimental Facility", 23rd IAEA Fusion Energy Conference Daejeon, Rep. Corea, IAEA-FEC (2010).
20. "Página del Reactor Experimental Termonuclear Internacional (ITER)", <http://www.iter.org/>.

Consideraciones generales sobre la cámara de vacío del Tokamak “T”

M. Salvador, L.R. Hernández, D.I. Sánchez, M.A Villarreal, J. González, S. Martínez, M. García
*Grupo de Investigación en Fusión, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad
Autónoma de Nuevo León,
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L., México
max.salvadorhr@uanl.edu.mx*

J.A. Guevara, E. Chapa
*Grupo de Investigación en Fusión, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad
Autónoma de Nuevo León,
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L., México*

G.M. Vorobyov
*Departamento de Física, Universidad Estatal de San Petersburgo
Federación Rusa*

Resumen

La cámara de reacción de un reactor de fusión nuclear es una de las partes esenciales e importantes dentro de la constitución e integridad del reactor, marca con su tiempo de operación la vida de un reactor de fusión, sea de confinamiento magnético o inercial, el Grupo de Investigación en Fusión (GIF) de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL) ha realizado 4 diseños de cámaras de vacío, 2 diseños corresponden al Tokamak de Baja Razón de Aspecto, conocido como el Tokamak “T”, los otros 2 corresponden al Tokamak Esférico de Apoyo hacia “T”, TEA-T, además debido a la colaboración con la Universidad Estatal de San Petersburgo de la Federación Rusa, se ha propuesto un último diseño el cual es también un Tokamak Esférico. En este artículo entonces, analizaremos de manera general las consideraciones generales sobre el diseño de la cámara de un Tokamak como lo es “T”, estableciendo las características inherentes para la concreción de los diseños, que nacen de un estudio sobre la geometría de la forma D-Shaped para reactores de fusión por confinamiento magnético, en este caso orientado a la configuración Baja Razón de Aspecto Tokamak. La cámara del presente diseño presenta las consideraciones generales sobre estructura y elementos que constituyen la cámara y tiene como objetivo sentar consideraciones de ingeniería y aspectos de la física inherente a los Tokamaks.

1. INTRODUCCIÓN

En la época actual la energía por Fusión Nuclear promete un desarrollo muy concreto, desde que se originó en los años 50 del pasado siglo XX, la forma en la cual el plasma se debe controlar ha sido un tema complejo y a la vez interesante, ya que éste presenta condiciones extremas las cuales son necesarias para realizar la fusión, pues para llegar a ello debe cumplir con el criterio de Lawson en

densidad, temperatura y tiempo de confinamiento (η , T , τ) que establece directamente la explotación de un plasma termonuclear. Entonces una de las áreas fundamentales en fusión es el diseño de las cámaras de reacción en reactores de fusión, donde un plasma puede desarrollarse, estabilizarse, confinarse, y sus materiales de cara al plasma, deben de resistir toda la radiación neutrónica que nace de las reacciones de fusión (14.1 MeV, energía de los neutrones), fungiendo como barrera primaria contra la emisión de radiación.

En la cámara de reacción o de vacío, se desarrollará el plasma, y es la alta frontera de la interacción plasma-materia, es la sección donde se convertirá y transmitirá la energía naciente del plasma y donde todos los sistemas son soportados estructuralmente y se conectan para generar, sostener y controlar la fusión. Entonces la cuestión de la geometría de la cámara constituye *per se*, una actividad de investigación vital. En Fusión por Confinamiento Magnético (FCM), la cámara ayuda a estabilizar el plasma; en Fusión por Confinamiento Inercial (FCI), deberá contar con las aberturas propias para que los sistemas de iones (pesados o ligeros) puedan iluminar al blanco y realizar la fusión nuclear. En ambos confinamientos han existido varias máquinas experimentales y decenas de conceptos que han explotado diversas configuraciones geométricas, para ambas formas de confinamiento, el material de cara al plasma tiene que mantener sus propiedades termomecánicas la mayor cantidad de tiempo posible para ser efectivo en la conversión de energía y determinar con ello, el tiempo de operación de la máquina, además debe de resistir a ese bombardeo de neutrones, activándose y transmutándose lo menos posible, varios estudios se han realizado respecto a los materiales de primera pared, tanto teóricos como experimentales, desde la primera fase de daño por irradiación desarrollando códigos (VASP *ab initio*, *Tight Binding* [1] o empleando potenciales clásicos empíricos) enmarcando a la dinámica molecular hasta la dinámica de dislocaciones en la modelización multiescala [2], para entender los mecanismos de daño, generación de grietas, hinchamiento, y condiciones extremas bajo irradiación con el fin de mejorar los materiales de cara al plasma, aunado a ello, también habrá que decir que existen conceptos y proyectos sobre la reproducción de tritio dentro de las cámaras, el cual es uno de los combustibles que pueden explotarse en un reactor de fusión nuclear, siendo así también existen estas consideraciones de cámaras reproductoras de tritio dentro del vasto mundo de las cámaras de reacción.

Todos los materiales de cara al plasma que conforman a un reactor de fusión entonces sufren abrasiones, desgaste, sirven para reproducir tritio, proteger al personal fuera de la instalación, deben soportar condiciones extremas termomecánicas y de radiación, además de ello, la cámara esta refrigerada, proporcionando la evacuación del calor con un refrigerante que circula alrededor de ella.

Las cámaras de reacción deben cumplir con tres funciones principales:

- Hacer más eficiente la conversión y aprovechamiento de la energía del neutrón engendrado por el plasma termonuclear.
- Proporcionar protección a la estructura exterior tanto de los sistemas como de las personas.
- Contribuir a la estabilización pasiva del plasma.

Ésta comprobado que, el flujo de neutrones ocasiona, sobre los materiales de las cámaras de reacción de primera pared en fusión y/o en las vasijas de fisión, un debilitamiento, una merma considerable en las características termomecánicas de los materiales involucrados (hinchamiento, fragilización, pérdidas de conductividad térmica, resistencia a la tensión-compresión, etc.), además de una activación del material [3]. Esto efectos son debido al bombardeo de neutrones los cuales originan enormes cascadas de desplazamientos de los diferentes átomos que conforman los materiales; algunos neutrones con energía suficiente llevan a cabo, dentro del material, reacciones inelásticas que vuelven activo a lo inerte, originando con ello, la primera fase de daño por irradiación neutrónica.

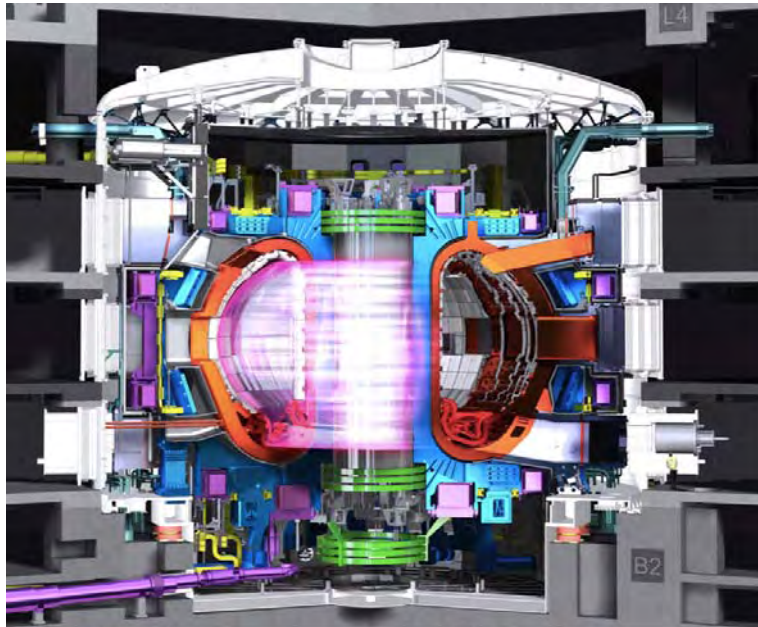


Figura 1. Modelo del Reactor Termonuclear Experimental Internacional, ITER (siglas en inglés), mostrando la cámara de reacción, cortesía ITER.

Los problemas que comprometen la capacidad de la fusión nuclear radican en la presencia de las radiaciones (sobre todo neutrones) y como hemos visto la consecuente producción de los elementos radioactivos, para ello entonces tenemos que considerar los criterios de elección de los materiales estructurales:

- Sí recapitulamos un poco, podremos decir que el daño que se producirá en los materiales estructurales será mayor en un reactor de fusión que en uno de fisión, pues el flujo de neutrones es mayor en la primera. La vida estimada de los componentes de primera pared, resulta entonces limitada ocasionando la disminución de la seguridad para el personal de la planta, fiabilidad de sistemas y sobre todo en la economía de la instalación.
- La activación de los materiales estructurales puede ser un problema y aumentar los costes en el funcionamiento de la planta como su posterior desmantelamiento.

- En los reactores de primera generación, será inevitable la presencia de tritio, y habrá que tratarle para evitar el peligro de su actividad hacia las personas y el medioambiente.

Tendremos que hacer hincapié que todos los problemas relacionados con la radiación que nacerá de las reacciones, van a depender en gran medida de la respuesta de la irradiación de los materiales del reactor, sobre todo aquellos que serán considerados como de primera pared de la cámara de reacción. Ya que no basta solamente elegir aquel que presente las mejores características en las propiedades mecánicas, térmicas, y la eficiencia de transmisión del calor (sellando el rendimiento de la máquina en un factor económico que dependerá de la conversión de energía para la generación de electricidad), también es necesario garantizar que sus propiedades se mantendrán lo máximo posible contra los efectos de la radiación y que se disminuya lo más que se pueda, el nacimiento de radionucleidos peligrosos de vida media o larga.

Los criterios de elección que debemos considerar de un nivel de activación dependen de la definición de material de baja activación que se basa siempre por la definición de situaciones precisas de referencia, como pueden ser, reciclaje manual o remoto, enterramiento superficial o profundo, etc.; y que se rigen por el seguimiento de las normas legales en los cuáles se fijen los límites de actividad considerados aceptables en cada caso.

2. PARÁMETROS DE LAS CÁMARAS DE VACÍO EN TOKAMAKS

El Tokamak se caracteriza generalmente por su forma de dona (geométricamente llamada toro), con una sección transversal en forma de D (ver Figura 1), la cual es determinada así por los efectos que realizan los campos magnéticos confinantes: el poloidal y el toroidal.

Cuando el plasma caliente se confina mediante campos magnéticos que actúan como trampa magnética para las partículas cargadas del plasma (las cuáles obedecen a las leyes de Lorentz) se le conoce como confinamiento magnético, puede llegar a conseguir la combustión del mismo mediante el aporte de energía por los propios subproductos de fusión y sistemas externos de calentamiento. Aquí juega un papel fundamental el aspecto geométrico, la dirección toroidal se denota con el símbolo (φ) y ella, gira alrededor de la cavidad de la cámara de reacción o dicho de otro modo, como si la línea del campo magnético fuese perpendicular a la figura que estamos observando, a su vez la dirección poloidal que se le denomina con el símbolo (Θ), gira envolviendo a la dona o donut en un plano perpendicular a la dirección toroidal. Las partes principales de que consta un Tokamak, son: el solenoide central, las bobinas de campo toroidal, las bobinas poloidales de control de plasma ó bobinas de campo vertical, las bobinas de corrección y la cámara de reacción o de vacío.

La determinación de la geometría que permite una configuración magnética de una instalación se encuentra determinada por 3 parámetros principalmente [4]:

- Parámetro β

Se define como el cociente entre la presión cinética y la presión magnética:

$$\beta = \frac{F_{atmósfera}}{F_{magnética}} = \frac{2\mu H_0}{B^2} \quad (1)$$

- Factor de seguridad (q)

Se determina por la siguiente ecuación:

$$q = \frac{aR_T}{RB_p} \quad (2)$$

- Relación de aspecto (A)

Representa la relación geométrica existente entre el radio mayor de la instalación y el radio menor del plasma en la sección toroidal:

$$A = \frac{R}{a} \quad (3)$$

De los parámetros anteriores, se genera una variedad de configuraciones. En la Figura 2, se muestra una configuración en donde se denota como Radio Mayor a R_0 , siendo (a) el radio menor del plasma, (k) la elongación y q_{95} el factor de seguridad en la sección transversal de una configuración Tokamak.

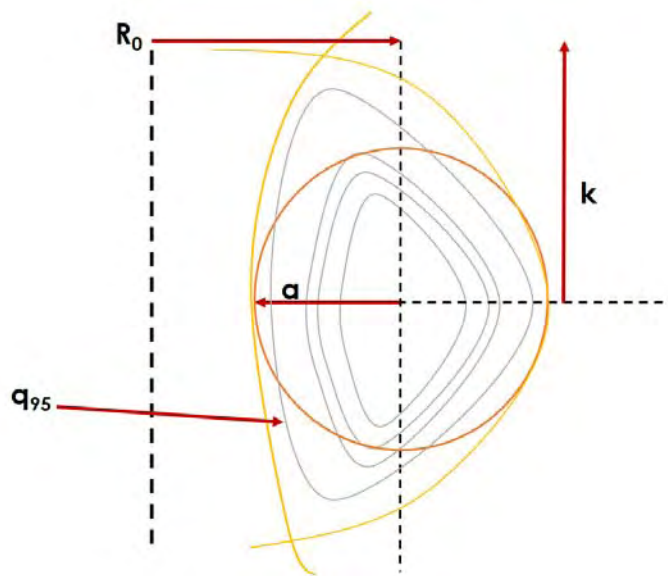


Figura 2. Parámetros principales de una configuración magnética Tokamak

El Tokamak es una configuración magnética originada en la URSS en la década de los años 50, y el reactor más importante al día de hoy y que entrará en operación pronto es el: **Reactor Termonuclear Experimental Internacional, ITER**, y demostrará la viabilidad de la fusión

termonuclear para fines pacíficos, aunado a esto, existen diversas configuraciones que generan y acoplan los conceptos anteriormente citados, trabajando con la densidad y temperatura del plasma, así como el tiempo de confinamiento. Esto puede apreciarse ya en las ecuaciones anteriormente citadas relacionando dichas configuraciones entre estos parámetros fundamentales (ver Figura 3): SpheroTokamak (ST), Spheromak, Campo reversible (FRC), Tokamak, etc. La situación actual dentro del panorama internacional de investigación en fusión nuclear pone de relieve la amplia participación en la investigación con la configuración Tokamak, pudiendo decirse y afirmarse entonces que los primeros dispositivos de ignición serán los Tokamaks, como es el caso de ITER, más en el futuro, cuando se hayan comprendido bien todas las características inherentes de la fusión, otro tipo de dispositivos de confinamiento magnético como los *stellarators* podrían ser aprovechados también como reactores de fusión.

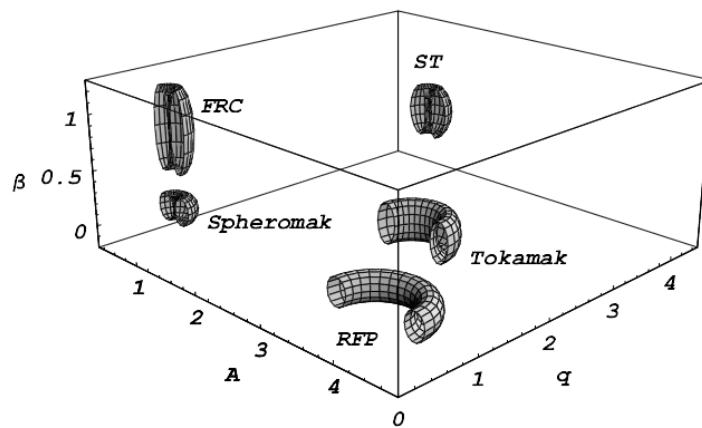


Figura 3. Parámetros principales de diversas configuraciones magnéticas que relacionan al factor de seguridad (q), a la razón de aspecto (A), y al parámetro (β) [4]

3. CONSIDERACIONES DE LA CÁMARA TOKAMAK “T”

En la Universidad Autónoma de Nuevo León, el Grupo de Investigación en Fusión conformado entre dos Facultades: Ingeniería Mecánica y Eléctrica (FIME) y la de Ciencias Físico Matemáticas (FCFM), considera los siguientes objetivos, 1.- Formación de recursos humanos altamente capacitados en el área de las energías alternativas como lo es la Fusión Termonuclear, 2.- Generación de conocimiento científico e innovación tecnológica en el campo de ingeniería y de la física nuclear para beneficio de nuestro País, 3.- Participación en proyectos de gran impacto científico-tecnológico en beneficio de México.

El Tokamak “T” es un Tokamak con Baja Razón de Aspecto (A) esto indica que posee una adecuada elongación (k), también tiene un apreciable factor de seguridad (q) y tendrá una alta corriente de plasma en donde el parámetro que habrá que considerar beneficiar entonces es el (β) que nos indica la relación entre la presión térmica y magnética, la cámara del Tokamak “T” es una D-shaped.

La descripción analítica para la generación de la forma D-shaped en un caso ideal con bobinas continuas (no uniones eléctricas) puede ser expresada a través de la ecuación diferencial [5, 6, 7, 8]:

$$r \frac{\partial^2 r}{\partial z^2} = \pm \frac{1}{K} \left[1 + \left(\frac{\partial r}{\partial z} \right)^2 \right]^{3/2} \quad (4)$$

$$k = \frac{1}{2} \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (5)$$

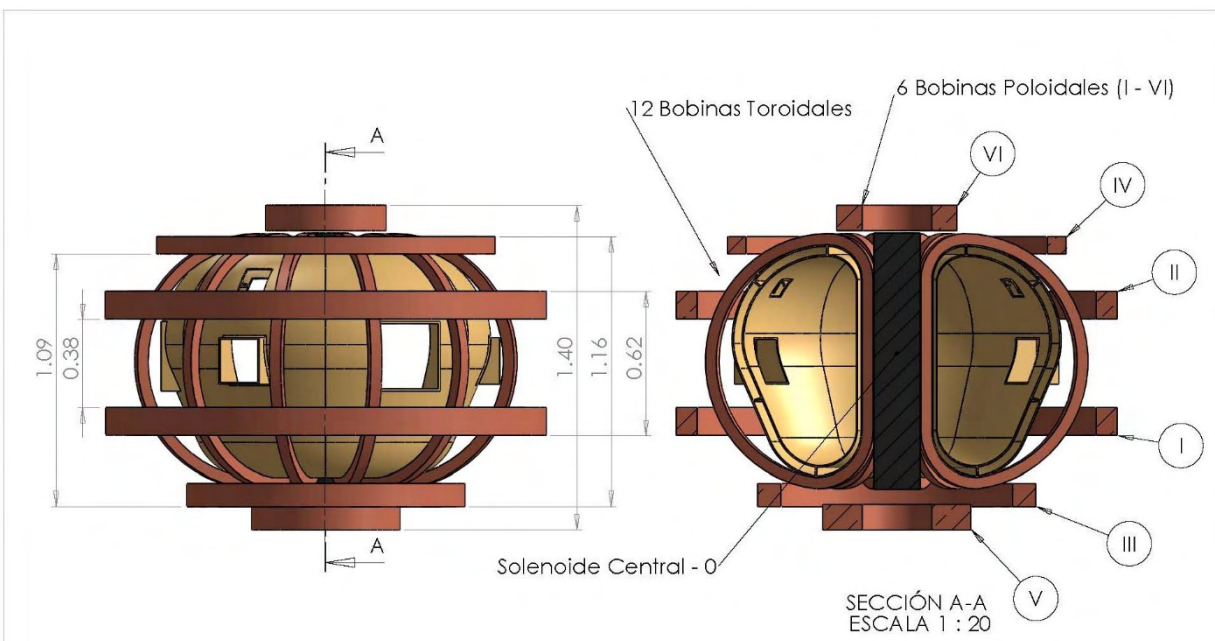


Figura 4. Dimensiones de la cámara de vacío del Tokamak “T”, estos fueron determinados gracias al desarrollo general de las ecuaciones citadas en este documento, propuesta A.

El diseño de una instalación de confinamiento magnético Tokamak, puede verse altamente beneficiado si consideramos una cámara que pueda aprovechar la geometría de la bobina, como en nuestro caso. En la Figura 1 vemos la propuesta A, comparada con la propuesta B de la Figura 5, en la parte inferior de la propuesta A, se presenta un perfil que cuenta con una sección recta que tiene como función la preparación del espacio para un divertor. En la propuesta B, dicha sección desaparece perfilando la estructura a una cámara consecuente con la D-shaped.

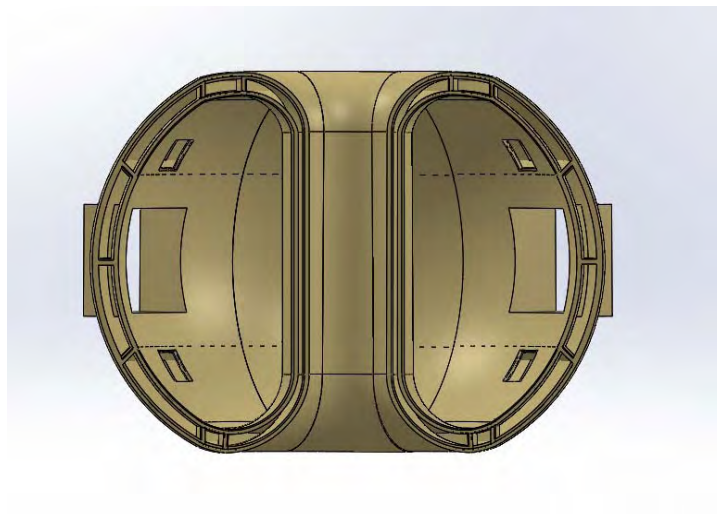


Figura 5. Propuesta B de la cámara de vacío del Tokamak “T”, esta cámara ya posee una sección completamente D, que se acopla a la geometría de la bobina de campo toroidal

Tabla I. Características generales de la cámara de vacío del Tokamak “T”

Material de la cámara:	Acero inoxidable SS 304 LN
Espesor de la pared de la cámara:	7 a 10 mm
Altura de la cámara:	1 metro
Secciones de la cámara:	6 secciones. De 15 a 18 aberturas puestas a 120°, <i>blanket</i> : losetas intercambiables.
Refrigerante:	Agua
Divertor:	Single null
	La cámara posee un diseño de Doble “casco”
Radio mayor:	41 cm
Radio menor:	18.5 cm
Campos magnéticos:	1.6 Tesla
Corriente máxima del plasma:	277 kA
Sistema de calentamiento:	Óhmico en su primera fase de calentamiento, Calentamiento auxiliar RF y/o partículas neutras en la segunda
Duración del plasma:	bobinas de cobre 300 ms, máximo 1 segundo
Densidad electrónica del plasma:	$2 \text{ a } 3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Temperatura de electrones:	aprox. 516 eV
Temperatura de iones:	aprox. 280 eV

La cámara del Tokamak “T”, se encuentra dividida en 6 sectores toroidales, unidos por soldaduras en el plano central, además, posee puertos de acceso alternos. El diseño propuesto tanto en A como en B, es el de toda una estructura soldada, hecha de acero y con dobles corazas como camisas (doble

casco), por este espacio entre las planchas de la cámara, circulará un refrigerante (líquido o gas) para proteger a los sistemas externos por el calor, entre el soporte de la primera pared y la pared exterior, este espacio cuenta con un espesor entre placa de 5 centímetros. Las cámaras de nuestras propuestas pueden no llevar materiales de primera pared fijados a ellas, el concepto desarrollado de nuestra cámara proyecta para el futuro el uso de materiales de cara al plasma que son importantes para los sistemas de potencia por fusión.

La cámara de vacío del Tokamak “T”, tiene 18 puertos (superiores, ecuatoriales e inferiores), las zonas localizadas en los puertos superiores, pueden usarse como entrada a los canales que podrán hacer circular refrigerante al diseño propuesto de cámara de doble casco, aprovechando la gravedad. Los puertos ecuatoriales se usarán para acceder al plasma, para diagnosticarle con sus sistemas y para colocación de antenas de RF para calentarlo, también para acceder por medio de un brazo autómatas al reemplazo de los módulos de losetas que pertenecen a la cámara que se deslizarán a ciertos puntos de recogida, además se usarán para el posicionamiento de los sistemas de calentamiento y/o sistemas de diagnóstico.

Debido a la interacción de los campos magnéticos del Tokamak “T”, del campo poloidal y de la presión magnética, el plasma puede aproximarse a la pared e inducir corrientes “espejo” que pueden producir campos magnéticos que ayuden a alejar al mismo plasma de la cámara, el diseño de la cámara del Tokamak “T” de la propuesta B de la Figura 5, si solo se considerase el acero estructural para su operación de cara al plasma, beneficiaría directamente estas corrientes espejo, el acero y el espesor deben ser tales que permitan el paso de los campos magnéticos externos, sobre todo el vertical, por ende el espesor del material de la cámara se sugiere sea desde 7 mm hasta 10 mm como máximo.

El acero SS 304 LN, que deseamos usar como material estructural de la instalación experimental, puede limpiarse fácilmente y por ser de baja conductividad eléctrica, los campos magnéticos podrán confinar al plasma. En una instalación como la que se ha diseñado en él GIF, se realizarán descargas de limpieza de baja potencia en la cámara para que así exista la más mínima cantidad de impurezas posibles, ya que ellas le quitan temperatura al plasma y eso afectaría enormemente a los perfiles de energía deseados en descargas óptimas. En un Tokamak, la cámara debe de evitar que se produzcan descargas en las paredes en vez de al plasma, los puertos ayudan a ello, deberán poseer material aislante y distribuir el alto voltaje que el embobinado primario puede ocasionar.

En la cámara, las mayores fuerzas electromagnéticas son las disrupciones del plasma. La corriente pasa del plasma a los conductores de la construcción de la cámara. Esto sumado a la interacción de corrientes y los campos magnéticos llevan a la aparición de fuerzas. Dependiendo el sistema y sus componentes se distingue [8]:

- Falla a lo largo de un radio mayor
- Movimiento rápido a lo largo de la vertical con la formación de las corrientes de Halo *simétricas*.
- Movimiento rápido a lo largo de la vertical con la formación de Halo-corrientes *asimétricas*.

En el primer caso, la componente vertical de la fuerza total en la cámara de vacío es cero. A la presión asociada con la presencia de un vacío en la cámara, las fuerzas dirigidas hacia el centro de la cámara se agregan y conectan con la transferencia de corriente desde el plasma a la cámara.

En el segundo caso, el plasma se mueve muy rápido a lo largo de la vertical, de modo que aparece una corriente que fluye a través del plasma y los elementos conductores de la estructura, la conocida corriente de Halo. Esta corriente tiene una topología inusual, se cierra por un lado alrededor de la periferia del plasma, por el otro, a través de la cámara de vacío gestando la aparición de un componente vertical de la fuerza que actúa durante el *breakdown* (la ruptura) de la cámara y tiende a romper la cámara.

En el último caso, el movimiento vertical rápido con la formación de halo-corriente asimétrico, la asimetría aparece en los horizontes del toroide. Esta asimetría se tiene en consideración al introducir el llamado factor de pico de selección toroidal (*toroidal pick-factor*), cuya magnitud es de escala de dos. Y finalmente surge una fuerza direccional horizontal.

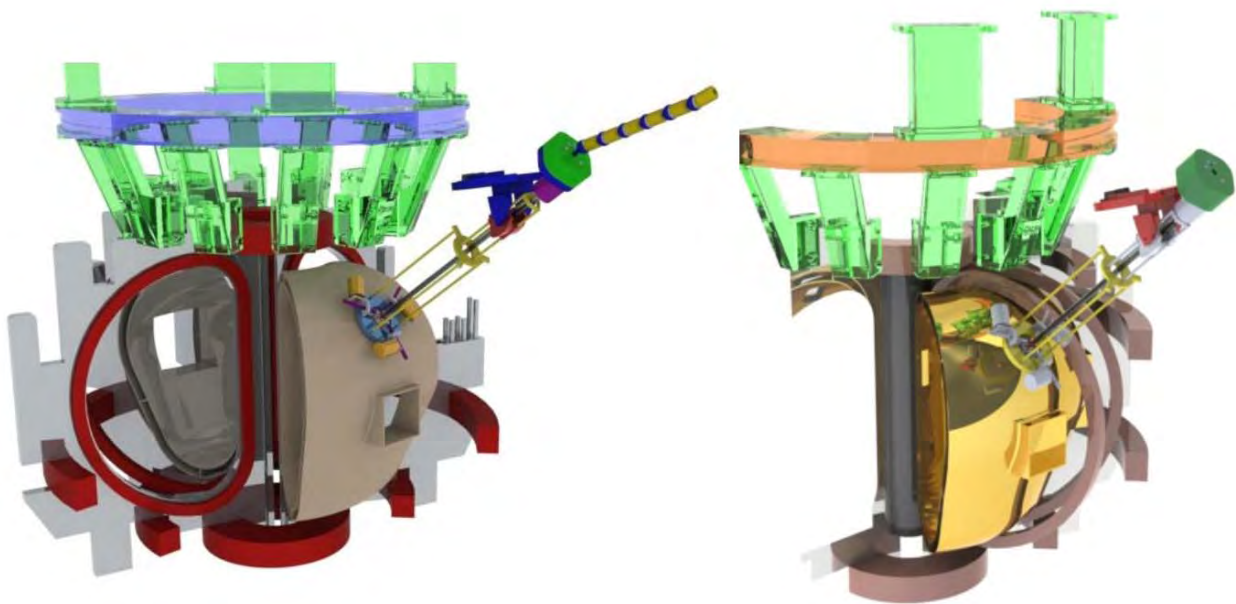


Figura 6. Vista renderizada de la Instalación Experimental de Confinamiento Magnético, esta imagen es un prototipo de diseño, en ella se aprecia el interior de la cámara de vacío, el solenoide central y las bobinas que rodean a la instalación a través de un corte en la parte superior del Tokamak “T”.

Durante las interrupciones del plasma, hay corrientes de Eddy que varían con el tiempo y que son inducidas en la cámara de vacío y en los componentes que están de cara al plasma. Además, las corrientes halo fluyen parcialmente por estas estructuras durante los eventos de desplazamiento vertical, con el campo magnético, como resultado, se obtienen las fuerzas electromagnéticas, si estas

fuerzas fueran constantes tendríamos una respuesta no dinámica de la cámara de vacío, pero este no es el caso. Por lo tanto, se ve necesaria la opción de desarrollar reforzamientos diseñados para las diferentes tensiones, deformaciones y desplazamientos de la cámara.

El diseño de las geometrías de nuestros Tokamak, considera para el diseño, diversos análisis como son: mecánicos y electromagnéticos para las estructuras, térmicos para las bobinas debido a la corriente, de refrigeración para la cámara de vacío, generación de campos magnéticos por las bobinas, esfuerzos en cámaras de vacío, consideración de las corrientes de Eddy, el diseño nos permite desarrollar versiones optimizadas sobre cada una de nuestras propuestas.

4. CONCLUSIONES

El Tokamak “T” por ser una máquina de experimentación, no manejará plasmas radioactivos sino aquellos de hidrógeno, debido al perfil de energía, por ende, no habrá una reacción termonuclear que prodigue tritio con los hitos que esto implica.

Hemos comentado con suficiente énfasis que uno de nuestros objetivos principales es la formación de personal en el área de la Fusión Termonuclear, también la Generación de Conocimiento e Innovación Tecnológica, y ello nos permitirá establecer el Programa Mexicano de Energía por Fusión, siendo uno de los frutos de este esfuerzo, que nuestro personal participe y extrapole el desarrollo tecnológico hacia instalaciones de primer nivel como lo es ITER, en México. Los estudios que se realizan en este tipo de investigación sobre la cámara son vastos: Interacción plasma-pared permitiendo el desarrollo tecnológico para la generación de materiales que se activen y transmuten lo menos posible, mantenimiento remoto en instalaciones de potencia. Estudios sobre disrupciones que conlleva el desprendimiento de impurezas que irán directamente al plasma ocasionando pérdidas en la energía (enfriándolo), empero en la extracción es inevitable que las impurezas se mezclen con el plasma por ende se deben abordar técnicas apropiadas para la evacuación y limpieza del plasma (divertores), que también en esta instalación experimental de confinamiento magnético se desea desarrollar. También sobre el diseño de cámaras a través de simulaciones de elemento finito, para la optimización de la misma. Se ha comentado que gracias a la potencia de cálculo podemos simular mediante modelos físicos los diversos fenómenos que se presentan en el material bajo irradiación en instalaciones de potencia, y que se caracterizan por la disminución de sus propiedades termomecánicas. Los materiales que actualmente se encuentran en investigación son los Aceros Ferríticos Martensíticos, las aleaciones de Vanadio-Cromo-Titanio y el Carburo de Silicio.

El supercómputo nos ha permitido la generación de conocimiento y el desarrollo de nuevas tecnologías, al reproducir mediante modelos fisico-teóricos y de análisis, múltiples fenómenos que abarcan desde la modelización multiescala en el área de la ciencia y tecnología nuclear, como el diseño en 3D de nuestras instalaciones experimentales de confinamiento magnético Tokamak: “T” y “TEA-T”.

El GIF de la UANL hoy tiene un Proyecto conjunto con la Universidad Estatal de San Petersburgo (SPbSU) en la Federación Rusa, para la construcción de un Tokamak Esférico de Apoyo hacia T, el

TEA-T. El Proyecto TEA-T ésta siendo llevado a cabo en conjunto con el GIF de la UANL para consolidar el área de la Fusión por Confinamiento Magnético en nuestro País.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos de antemano al Programa para el Mejoramiento de Profesorado (PROMEP) clave: UANL-EXB-156 por el Apoyo Económico de este proyecto.

REFERENCIAS

1. Colombo, L. "Tight-binding molecular dynamics", *Rivista del Nuovo Cimento* 28, no.10, 1 (2005).
2. Perlado, J.M.; Domínguez,E.; Lodi,D.; Malerba,L.; Marian,J.; Prieto,J.; Salvador, M.; Díaz de la Rubia, T.;Alonso, E.; Caturla,M.J.; Colombo,L.. "Multiscale modeling of radiation damage of metals and SiC in inertial fusion reactors" *Fusion Technology*, **Vol.39**, núm: 2, pp. 579-584.
3. Perlado,J.M.; Sanz,J.; Velarde,M.; Reyes,S.; Caturla,M.J.; Arévalo,C.; Cabellos,O.; Domínguez,E.; Marian,J.; Martínez,E.; Mota,F.; Rodríguez,A.; Salvador, M.; Velarde,G. "Activation and damage of fusion materials and tritium effects in inertial fusion reactors: strategy for adequate irradiation" *Laser and Particle Beams*, Cambridge University Press; ISSN: 0263-0346; **Vol. 23**, pp. 345-349 (2005).
4. G.O. Ludwig, E. Del Boscco, J.G. Ferreira, L.A. Berni, R.M. Oliveira, *et al*, "Spherical Tokamak Development in Brazil", *Brazilian Journal of Physics*, **Vol.33**, no.4, Diciembre, (2003).
5. File, J.; Mills, R.G.; Sheffield, G.V.; "Large superconducting magnet designs for fusion reactors", Plasma Physics Laboratory, Princeton University.
6. DeMichele, D.W.; Darby, J.B.; "Three-dimensional mechanical stresses in toroidal magnets for controlled thermonuclear reactors", *5th Symposium on Engineering Problems of Fusion Research*, (1973).
7. Raeder, J. "Some analytical results for toroidal magnetic field coils with elongate minor cross-sections", IPP 4/141, (1976).
8. Anatoly Borisovich Mineev, "*Physico-Technical Fundamentals of Controlled Thermonuclear Fusion*", Publishing House of the Saint Petersburg Polytechnic University, ISBN 5-7422-1117-1, sólo en lengua Rusa, (2006).

Dependencia de la fracción de neutrones retardados con la biblioteca ENDF-B7 y JEFF 3.1.1 en una celda BWR

Alejandro Campos Muñoz

Instituto Politécnico Nacional - Escuela Superior de Física y Matemáticas
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n Edificio 9 Unidad Profesional “Adolfo López Mateos”
Col. San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, Ciudad de México C.P. 07738
acamposm1204@gmail.com

Vicente Xolocostli Munguía, Armando Miguel Gómez Torres

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México - Toluca, La Marquesa, Estado de México, México. C.P. 52750
vicente.xolocostli@inin.gob.mx; armando.gomez@inin.gob.mx

Resumen

Controlar un reactor nuclear es una de las tareas más importantes durante la operación, usualmente se requiere de mecanismos externos que desempeñen esta labor, las barras de control son el mecanismo que permite controlar un reactor nuclear; controlar la población de neutrones es lo que se logra al insertar o extraer barras de control, sin embargo no todos los neutrones que nacen de la fisión lo hacen al mismo tiempo, existen los que nacen prácticamente al momento de ocurrir la fisión, llamados neutrones inmediatos, y los que nacen después de un tiempo, llamados neutrones retardados, y justamente son éstos últimos los que ofrecen el tiempo necesario para controlar el reactor. Existen diversas formas de calcular la fracción de neutrones retardados, y a nivel de códigos puede utilizarse la aproximación de 6 u 8 grupos de precursores de neutrones retardados como son el caso de las bibliotecas ENDF y JEFF, respectivamente. Se ha modelado una celda de combustible de un reactor tipo de BWR 10 x 10 con el código SERPENT y se ha realizado un quemado hasta los 30 MWd/KgU para ver el efecto de utilizar las bibliotecas ENDF y JEFF para el cálculo de la beta efectiva, también se simuló la celda con el código CASMO-4 para validar el modelo realizado con el código SERPENT. Los resultados muestran que la fracción de neutrones retardados disminuye con el quemado debido a la formación de plutonio, también se observa que los valores calculados con JEFF 3.1.1 son un 3% más grandes que los calculados con ENDF-B7. Hacer una simulación de algún transitorio con un código determinístico es el siguiente paso para apreciar realmente el impacto de utilizar una u otra biblioteca de datos nucleares.

1. INTRODUCCIÓN

Poder controlar un reactor nuclear es uno de los aspectos principales y más importantes al diseñar un reactor, se debe poder controlar la reactividad por diferentes medios que pueden ser activos o pasivos; dentro de los medios pasivos podemos señalar algunos como: el coeficiente de reactividad por temperatura del combustible, el coeficiente de reactividad por temperatura del moderador y la introducción de venenos quemables al combustible, por otra parte el principal mecanismo activo para controlar la reactividad en un reactor nuclear son las barras de control. Las barras de control permiten absorber neutrones para que no puedan inducir una fisión en el combustible; debido a que

el tiempo de generación de neutrones está íntimamente relacionado con el periodo del reactor, si únicamente se tuviesen neutrones inmediatos que se emiten en un tiempo del orden de 10^{-15} s después de ocurrir la fisión el periodo del reactor sería demasiado corto como para insertar un agente externo que disminuya la reacción en cadena; sin embargo, gracias al tiempo de retardo del nacimiento de los así llamados neutrones retardados el periodo del reactor aumenta y es posible insertar un mecanismo de control en un tiempo suficiente para evitar una posible alta multiplicación de neutrones en el tiempo [1].

Por lo mencionado anteriormente, conocer la fracción de neutrones retardados que se tienen en el reactor a lo largo del ciclo de operación es fundamental para la seguridad durante el mismo. Este trabajo busca establecer las diferencias entre calcular la fracción de neutrones retardados con diferentes bibliotecas de datos nucleares, ENDF-B7 y JEFF 3.1.1, es este caso, para diferentes pasos de quemado entre 0 y 30 MWd/KgU; así también determinar las consecuencias sobre la fracción de neutrones retardados al quemar el combustible.

1.1. Neutrones Retardados

En los problemas de reactores estáticos, los neutrones de fisión inmediatos y retardados siempre aparecen juntos como el número total de neutrones de fisión. Sin embargo, la dependencia temporal del flujo de neutrones, puede estar fuertemente influenciada por la pequeña fracción de los neutrones de fisión que se producen con retrasos de entre un segundo a varios minutos. Aunque esta fracción es pequeña, puede jugar un papel dominante en muchos fenómenos cinéticos.

En los reactores térmicos que usan U_{235} y U_{238} a altos quemados, varios isótopos contribuyen significativamente a la producción de neutrones retardados, por esto, los datos nucleares de los neutrones retardados de varios isótopos fisionables se deben considerar.

Después de que el proceso de fisión y la producción de neutrones inmediatos se ha completado, los productos de la reacción de fisión consisten de:

- dos núcleos radioactivos,
- varios neutrones inmediatos, y
- varios rayos gamma.

Ninguno de los núcleos de los productos de fisión resultantes puede emitir directamente un neutrón adicional. Sin embargo, algunos de los núcleos productos de fisión pueden decaer en núcleos hijos para los que la energía de excitación es mayor que la energía de enlace del neutrón. Tales núcleos pueden emitir inmediatamente un neutrón, el cual es retardado por el comparativamente más largo tiempo que le toma tener un decaimiento beta. Prácticamente, el retraso completo viene por el decaimiento beta y únicamente una parte despreciable viene por la emisión del neutrón. Los términos núcleo “precursor” y “emisor” se usan comúnmente para denotar los núcleos “padre” e “hijo” respectivamente que producen neutrones retardados. Los neutrones retardados se emiten en promedio con energías considerablemente más pequeñas que los neutrones inmediatos [1].

El número promedio total de neutrones, ν , que se compone de neutrones inmediatos y retardados, se expresa en términos de los rendimientos relevantes (yields) en neutrones por fisión:

$$\nu = \nu_p + \nu_d \quad (1)$$

donde ν_p y ν_d son el número promedio de neutrones inmediatos y retardados emitidos por fisión, respectivamente.

La producción de neutrones retardados se describe usualmente usando la fracción de neutrones retardados:

$$\beta = \frac{\nu_d}{\nu} \quad (2)$$

Dado que la fracción de neutrones retardados producidos arriba de los 4MeV es muy pequeña, ν_d se asume independiente de la energía del neutrón incidente en el rango completo de cálculos neutrónicos.

Los rendimientos de neutrones retardados totales, ν_{di} , son significativamente diferentes para diferentes isótopos. Se observan, sin embargo, dos regularidades:

1. El rendimiento total de neutrones retardados se incrementa cuando incrementa el peso atómico de un elemento dado.
2. El rendimiento total de neutrones retardados disminuye cuando aumenta el número de protones.

Hay aproximadamente 40 de un total de 500 diferentes productos de fisión que tienen la propiedad especial requerida para ser emisores de neutrones retardados. Todos los 40 precursores tienen diferentes vidas medias y por ello los neutrones retardados correspondientes aparecerán con diferentes tiempos de retardo. La consecuencia de las diferencias en las vidas medias es que los neutrones retardados correspondientes tendrán un efecto diferente en la dependencia temporal del flujo neutrónico. Por esto, las diferencias en las vidas medias se deben tomar en cuenta.

Una aproximación adecuada para obtener datos condensados de los neutrones retardados se sugirió históricamente por el hecho de que el conocimiento experimental en relación a la producción de neutrones retardados estuvo disponible principalmente en la forma de curvas promediadas de fuentes, $S_d(t)$.

Esta complicada superposición $S_d(t)$ puede representarse con precisión usando seis funciones exponenciales sin incluir un término de acumulación, representando la producción de precursores por decaimiento beta:

$$S_d(t) = \sum_{k=1}^6 \nu_{dk} \lambda_k e^{-\lambda_k t} \quad (3)$$

donde n_f representa el número de fisiones que ocurrieron.

La ecuación anterior representa una fuente de neutrones retardados que resulta del decaimiento de seis grupos “promediados” de precursores, todos ellos producidos al tiempo $t = 0$.

Los rendimientos de los “grupos de neutrones retardados” ν_{dkt} y las constantes de decaimiento de los grupos λ_{kt} se obtienen para cada isótopo i por medio de un ajuste de mínimos cuadrados del lado derecho de la ecuación a los valores experimentales:

$$S_{dt}(t) = n_{ft} \sum_{k=1}^6 \nu_{dkt} \lambda_{kt} e^{-\lambda_{kt}t} \quad (4)$$

Esta estructura de seis grupos de retardados es de uso general en la cinética de reactores.

1.2. Bibliotecas de Datos Nucleares

En los últimos años, ha habido un progreso significativo en el desarrollo de las Bibliotecas de Datos Nucleares. Diferentes actualizaciones y versiones de éstas han sido realizadas y subsecuentemente validadas y utilizadas, algunas de éstas son:

- ENDF/B: Estados Unidos [2]
- JEFF: Unión Europea [3]
- JENDL: Japón
- CENDL: China

por mencionar algunas. En este trabajo se utilizaron las Bibliotecas de Datos Nucleares ENDF-B7 y JEFF 3.1.1 para realizar las simulaciones.

También ha habido intentos por mejorar los datos básicos de neutrones retardados para ser consistentes con el resto de los datos de secciones eficaces en estas bibliotecas. Ésto es importante ya que en el proceso de evaluar los parámetros de neutrones retardados con códigos de celda estos datos de secciones eficaces son usados en el proceso de homogeneización y colapsamiento. En adición, diferentes técnicas de corrección pueden ser utilizadas en el proceso de evaluación de la fracción de neutrones para obtener una estimación más precisa de la fracción de neutrones retardados efectiva (β_{eff}).

Interesados en mejorar la precisión de los datos de neutrones retardados, en la década de los 90 la Agencia de Energía Atómica (NEA), formó el “OECD - NEA WPEC SG6” para cumplir dicho propósito [4]. Los resultados más importantes a los que se llegaron fueron:

- Recomendar un nuevo conjunto de rendimientos de neutrones retardados para los isótopos fisiles principales.

- Desarrollo de un nuevo modelo de 8 grupos para agrupar los precursores de neutrones retardados que tiene una mejor base física que el modelo de 6 grupos.
- Investigar la necesidad de parámetros de neutrones retardados obtenidos explícitamente en función de la energía del neutrón incidente.

A pesar de que se ha mejorado la precisión de los datos a nivel microscópico, para calcular la fracción de neutrones retardados efectiva se debe tomar como base las medidas macroscópicas de los datos de emisión de neutrones retardados, usando medidas integrales y efectos dependientes del tiempo.

Las recomendaciones hechas por la NEA fueron tomadas en cuenta en el desarrollo de las Bibliotecas de Datos Nucleares, particularmente la biblioteca ENDF utiliza un modelo basado en 6 grupos de precursores, mientras que la Biblioteca de datos nucleares JEFF utiliza un modelo basado en 8 grupos de precursores de neutrones retardados.

2. MODELO DE CELDA BWR

El modelo utilizado para hacer la comparación entre las simulaciones utilizando las bibliotecas de datos nucleares ENDF-B7 y JEFF 3.1.1 es el de una celda de combustible tipo BWR 10 x 10. Se realizó el modelo de la celda con dos códigos: el código CASMO-4 [5] y el código SERPENT. La simulación realizada con CASMO-4 fue hecha con el propósito de validar el modelo realizado con SERPENT.

La celda que fue simulada tiene las siguientes características:

- 25 diferentes tipos de combustibles UO₂ (enriquecimiento 3% - 5%).
- 8 combustibles con Gd (5% y 6%).

como el que se muestra en la Figura 1.

Se realizó el quemado de la celda con el código SERPENT a los siguientes quemados: 0.0, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 5.0, 10.0, 15.0, 20.0, 25.0 y 30.0 MWd/KgU, en cada paso de quemado se obtuvo la siguiente información para cada una de las bibliotecas utilizadas [6]:

- Factor de multiplicación infinito.
- Fracción de neutrones retardados efectiva.
- Densidades atómicas (U^{235} , U^{238} , Pu^{239} , Pu^{241} y Pu^{243}).

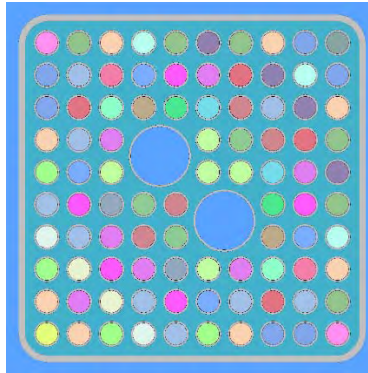


Figura 1: Modelo de la celda BWR 10 x 10 utilizada para las simulaciones.

3. RESULTADOS

Los resultados obtenidos para el factor de multiplicación infinito para validar el modelo de SERPENT con CASMO-4 se muestran en la Tabla I.

Tabla I: Valores de k_{inf} a 0.0 B.

	k_{inf}	dif* [pcm]
CASMO-4	1.16277	
SERPENT (ENDF-B7)	1.16005	272
SERPENT (JEFF 3.1.1)	1.15875	402

* dif = CASMO-4 – SERPENT

Los resultados de la Tabla I muestran que las desviaciones entre los valores de SERPENT y CASMO-4 caen dentro de lo permitido ya que son códigos con diferentes métodos de solución. Al comparar CASMO-4 con SERPENT (ENDF-B7) las diferencias son menores ya que CASMO-4 también utiliza la Biblioteca ENDF. Donde B representa el quemado en MWd/KgU.

La Figura 2 muestra la evolución del factor de multiplicación a lo largo de los pasos de quemado dados.

La Figura 2 muestra que la k_{inf} de 0.0 a 5.0 MWd/KgU tiene un valor prácticamente constante y después de los 5.0 MWd/KgU aumenta debido a que se ha consumido el Gd, y finalmente la k_{inf} disminuye a quemados más grandes.

La Figura 3 muestra las zonas “calientes” que representan la potencia relativa por fisiones (rojo-amarillo) y las zonas “frías” que representan el flujo térmico relativo (azul); puede observarse que al tener combustible fresco las zonas con mayor potencia son en los elementos con Gd, al ir

aumentando el quemado la potencia se distribuye de forma más uniforme en el ensamble de combustible.

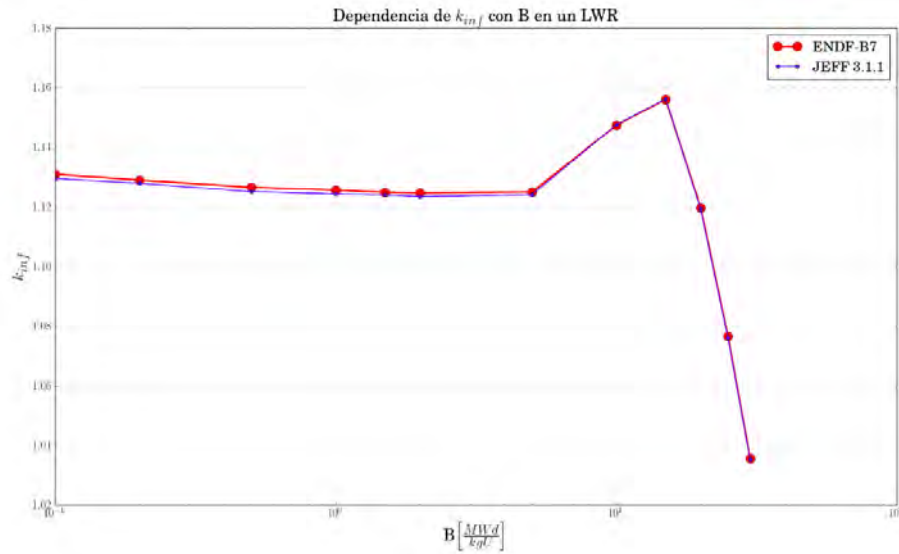


Figura 2: Dependencia del factor de multiplicación con el quemado.

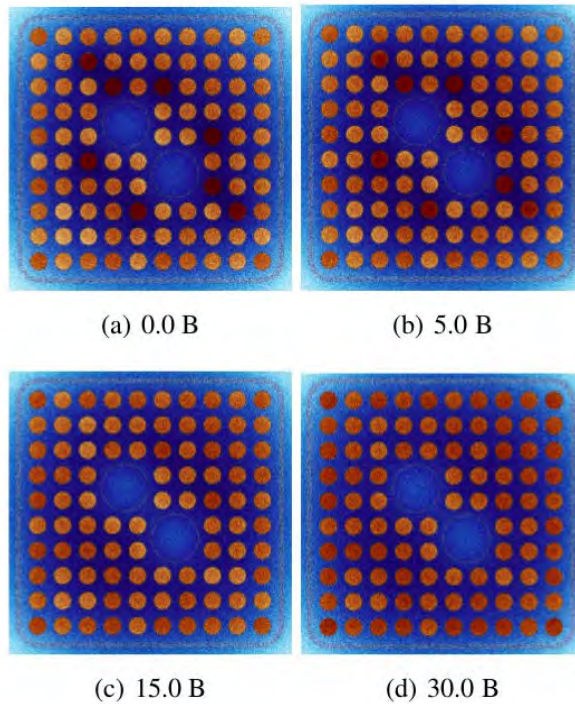


Figura 3: Interacciones de los neutrones en la celda a diferentes quemados.

Otro parámetro que se graficó con respecto al quemado fue la fracción de neutrones retardados efectiva, la Figura 4 muestra cómo varía con cada una de las bibliotecas utilizadas.

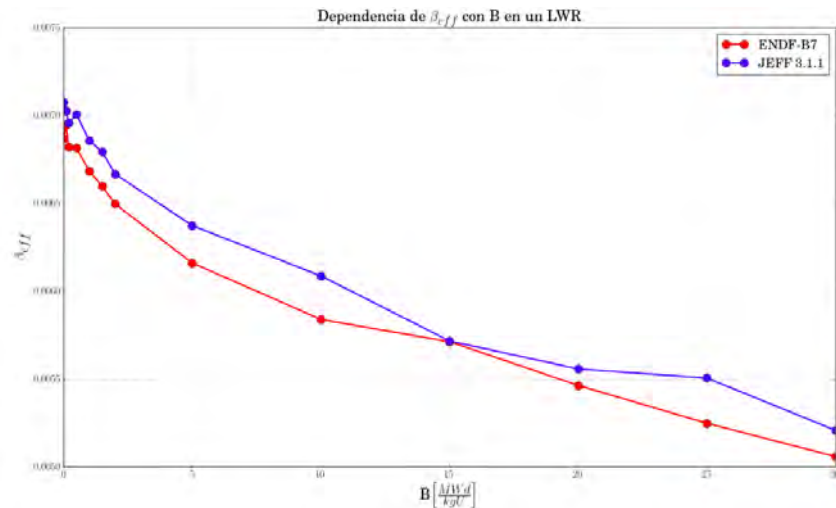


Figura 4: Dependencia de la fracción de neutrones retardados efectiva con el quemado.

La Figura 4 muestra que en general los valores calculados con JEFF 3.1.1 de β_{eff} son ligeramente mayores ($\sim 3\%$) a los calculados con ENDF-B7. Adicionalmente puede notarse de la Figura 4 que la β_{eff} disminuye con el quemado, como era de esperarse pues la β del plutonio es menor que la del uranio.

Finalmente se graficó el inventario de los principales isótopos fisiles en un reactor térmico, la Figura 5 muestra la evolución de la densidad atómica de estos isótopos con el quemado.

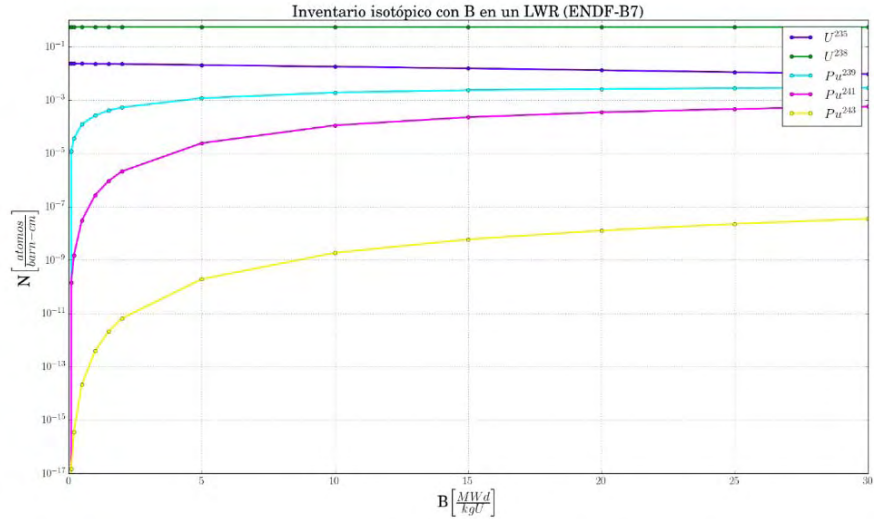
La Figura 5 muestra que los isótopos del plutonio van aumentando conforme el quemado, por lo que al momento de tener plutonio la β_{eff} disminuye ya que el yield del plutonio es más pequeño. Lo cual explica el decremento que muestra la Figura 4.

4. CONCLUSIONES

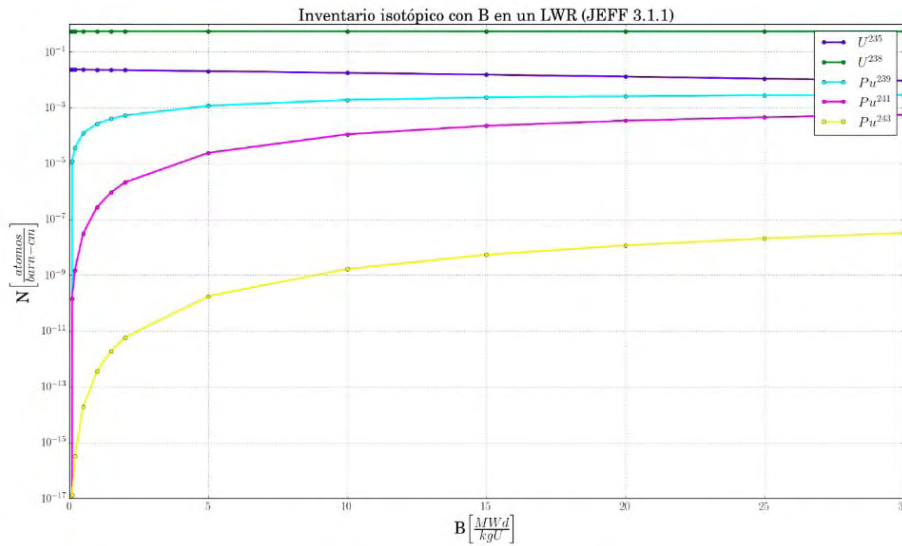
Con los resultados obtenidos se pudo validar el modelo de la celda BWR realizado con el código SERPENT mediante la comparación con el código CASMO-4, el cual es un código licenciado, teniendo una desviación de 272 pcm, como se muestra en la Tabla I.

Al comparar los valores de k_{inf} con ambas bibliotecas de datos nucleares los resultados son prácticamente los mismos y se puede observar que utilizar venenos quemables, como el gadolinio, ayudan a controlar la reactividad positiva del combustible al principio de ciclo; también es

importante escoger adecuadamente los pasos de quemado, haciendo pasos pequeños al principio del ciclo para lograr ver el consumo de los venenos, por otra parte al tener un aumento del factor de multiplicación después de los 5 MWd/KgU permite alargar el ciclo de operación.



(a) ENDF-B7



(b) JEFF 3.1.1

Figura 5: Densidades atómicas de los principales isótopos fisiles.

Finalmente, al comparar los valores de la fracción de neutrones retardados a lo largo del quemado ambas bibliotecas siguen la misma tendencia, es decir, la β_{eff} disminuye conforme el quemado aumenta, lo cual no es bueno ya que el periodo disminuye y es más difícil controlar el reactor. De la Figura 4 se observa que los valores de β_{eff} calculados con JEFF 3.1.1 son mayores, alrededor de un 3%, lo que puede llevar a la conclusión de que utilizar esta biblioteca (en consecuencia utilizar una aproximación de 8 grupos de precursores de neutrones retardados) llevará a que los resultados de la simulación de algún transitorio sean menos conservadores. Sin embargo, se requiere hacer un análisis de sensibilidad a la variable β_{eff} aplicando un código determinístico dinámico para poder cuantificar el impacto de utilizar una u otra biblioteca de datos nucleares.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACyT-SENER para la elaboración de este trabajo. Así mismo el autor Alejandro Campos Muñoz agradece al Instituto Politécnico Nacional y al CONACyT por la beca recibida para sus estudios de maestría.

REFERENCIAS

1. K. Ott and J. Neuhold. Introductory Nuclear Reactor Dynamics. American Nuclear Society, USA (1985).
2. “National Nuclear Data Center ENDF B-VII.” (2019). URL <https://www.nndc.bnl.gov/endl/b7.1/>.
3. “Nuclear Energy Agency JEFF 3.1.1.” (2019). URL <https://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/>.
4. G. Spriggs, et al. “An 8-group Delayed Neutron Model Based On a Consistent Set of Half-Lives.” Progress in Nuclear Energy, 41, pp. 223–251 (2002).
5. Rhodes, J. and Edenius M. “CASMO-4 A Fuel Assembly Burnup Program.” Technical report, Studsvik Scandpower.
6. Leppänen, J., et al. “The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013.” Annals of Nuclear Energy, 82, pp. 142–150 (2015).

Desarrollo de un algoritmo de cálculo simbólico para la resolución de las ecuaciones de decaimiento y transmutación de Bateman.

Carlos Antonio Cruz López, Juan Luis François Lacouture
Universidad Nacional Autónoma de México
Departamento de Sistemas Energéticos
Paseo Cuauhnáhuac 8532, Col. Progreso, C.P. 62550, Jiutepec Morelos
cacl@ier.unam.mx; juan.luis.francois@gmail.com

Resumen

El modelo matemático más adecuado para describir los cambios en la composición isotópica de un reactor nuclear, consiste en un plantear un conjunto de ecuaciones diferenciales lineales acopladas. En 1910 el matemático Harry Bateman propuso una solución para dicho sistema de ecuaciones, la cual se conoce desde entonces como la solución de Bateman. Aun cuando dicha solución permite resolver la mayoría de los problemas de transmutación y decaimiento que se presentan en varias ramas de la ingeniería nuclear, tiene dificultades para resolver estructuras donde existen elementos repetidos en transformaciones sucesivas. Estas últimas estructuras se conocen como cadenas cíclicas, y para tratar con ellas existen principalmente dos metodologías. La primera consiste en realizar pequeñas modificaciones en los parámetros conocidos como constantes de decaimiento efectivas, y de esta manera poder usar la ecuación de Bateman. La otra consiste en desarrollar soluciones más generales que admitan la posibilidad de tener elementos repetidos. Sin embargo, estas soluciones generales suelen involucrar pasos de análisis o cálculo más complejos, y por lo tanto requieren de un mayor tiempo de cómputo o de la necesidad de aproximar funciones como derivadas e integrales. En el presente trabajo, se ha desarrollado un algoritmo que puede construir las soluciones a cadenas cíclicas de una forma rápida a través del cálculo simbólico. Dicho algoritmo, utiliza un análisis combinatorio de las posibles posiciones que pueden ocupar elementos repetidos, y a través de un conjunto de funciones de variables del tipo "string", construye las soluciones de una forma veloz y dinámica. Así mismo, el presente trabajo incluye un análisis del tiempo de cómputo que consume dicho algoritmo, y propone una forma de realizar una comparación con las soluciones existentes.

1. INTRODUCCIÓN

El combustible de un reactor nuclear experimenta cambios en su composición isotópica en el transcurso del tiempo. Dichos cambios se deben principalmente a tres procesos que se presentan en forma de transformaciones sucesivas: el fenómeno de fisión, el de captura y el de decaimiento radiactivo. Estas transformaciones dan lugar a nuevos isótopos, y a la reducción o desaparición de otros. Dado que las propiedades neutrónicas de un reactor dependen de forma considerable de la composición isotópica del combustible, es necesario cuantificar matemáticamente estos cambios.

Si se utiliza el conjunto de funciones $X_i(t), 1 \leq i \leq n$ para denotar la concentración del isótopo i como función del tiempo, es posible representar una sucesión de transformaciones sucesivas mediante la siguiente estructura:



Donde $r_{k,k+1}$ representa la reacción mediante la cual el isótopo k se ha transformado en el isótopo $k + 1$. Estructuras como la que se muestra en (1), donde los isótopos tienen a lo más un sucesor y a lo más un antecesor, reciben el nombre de cadenas lineales.

A pesar de que en la práctica es más probable encontrar estructuras de transformaciones sucesivas más complejas, llamadas redes de decaimiento y transmutación, es posible reducir prácticamente cualquier estructura compleja a un conjunto de cadenas lineales a través del proceso de linealización y superposición [1]. Por lo tanto, desarrollar soluciones para cadenas lineales como la descrita en (1) es fundamental para el análisis de problemas de quemado y activación en ingeniería nuclear.

Gracias a los trabajos de Rutherford [2] y Rubinson [3], es posible modelar las transformaciones sucesivas en (1), a través del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\frac{d}{dt} X_i = b_{i-1,i}^{\text{eff}} \lambda_{i-1}^{\text{eff}} X_{i-1} - \lambda_i^{\text{eff}} X_i, \text{ con } b_{0,1}^{\text{eff}} = 0 \quad (2)$$

Donde $b_{i-1,i}^{\text{eff}}$ representa el coeficiente de ramificación efectivo, que es el porcentaje de las transformaciones que experimenta el isótopo $i - 1$ y que dan lugar a la creación del isótopo i . Por otro lado, los coeficientes λ_i^{eff} son una generalización de la constante de decaimiento radiactiva, que incluye también la razón de pérdidas por captura y fisión. Si se consideran las siguientes condiciones iniciales:

$$X_1(0) \neq 0, X_i(0) = 0, i = 2, \dots, n \quad (3)$$

Entonces, es posible resolver la ecuación (2) usando la solución que propuso en 1910 el matemático Harry Bateman, quien resolvió un sistema similar que solo consideraba decaimiento radiactivo [4]. Dicha solución es la siguiente [5]:

$$X_n(t) = X_1(0) \prod_{k=1}^{n-1} b_{k,k+1}^{\text{eff}} \lambda_k^{\text{eff}} \sum_{i=1}^n e^{-\lambda_i^{\text{eff}} t} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{(\lambda_j^{\text{eff}} - \lambda_i^{\text{eff}})} \quad (4)$$

La ecuación (4) es útil para resolver un gran número de problemas de quemado y activación. Sin embargo, no puede usarse cuando existen elementos o isótopos repetidos en una cadena lineal, es decir cuando hay dos isótopos iguales en (1), situación que por lo regular se presenta en estructuras conocidas como cadenas cíclicas. Como se puede observar, en dicho caso sucederá que la resta $\lambda_j^{\text{eff}} - \lambda_i^{\text{eff}}$ será igual a cero para algún par de i y j , y por lo tanto el término dentro de la productoria en (4) no estará definido. Dado que las cadenas cíclicas son comunes, sobre todo en estructuras

originadas por la transmutación y decaimiento de isótopos pesados, este tópico es de vital importancia e interés para el desarrollo de códigos de quemado y activación.

Para superar este problema se desarrollaron dos metodologías durante el siglo pasado. La primera de ellas consistió en introducir pequeñas modificaciones en las constantes de decaimiento efectivas, de tal forma que la resta que se mencionó antes nunca sea igual a cero. La segunda metodología, consistió en desarrollar soluciones más generales que consideraran la posibilidad de que uno o más elementos en una cadena lineal pudieran repetirse.

El desarrollo de soluciones generales comenzó prácticamente desde 1927 [6] y ha continuado a lo largo de los años, siendo la más popular la desarrollada por Cetnar en el 2006 [7], y siendo la desarrollada por Dreher en el 2013 [8] la que se ha publicado más recientemente. Sin embargo, como algunos autores han señalado [9], el uso de las soluciones generales involucra un mayor tiempo de cómputo, debido a que prácticamente se construye una solución para cada cadena lineal con elementos repetidos. Además, que algunas soluciones generales no pueden implementarse de forma directa en un algoritmo debido a su complejidad, y por lo tanto tienen que ser aproximadas.

En el presente trabajo se propone una metodología alternativa para resolver cadenas cíclicas, que consume una menor cantidad de tiempo de cómputo, y que no necesita ninguna aproximación. Esencialmente, esta metodología consiste en utilizar una formulación integral y por método de Laplace para construir la solución de cadenas cíclicas, acelerando dicho proceso mediante la implementación de un algoritmo de cálculo simbólico.

Para dicha formulación, fue necesario llevar a cabo un análisis combinatorio que identificara todas las posibles configuraciones de cadenas con elementos repetidos que pueden presentarse, descartando aquellas que físicamente son imposibles. Luego, a través del cálculo simbólico, se construyen estas soluciones usando un algoritmo con variables del tipo “*string*”.

Como se mencionó, a diferencia de la implementación computacional de otras soluciones generales, el cálculo simbólico (también conocido como álgebra computacional) puede reducir de forma considerable el tiempo de cómputo sin necesidad de aproximar numéricamente la solución de cadenas cíclicas.

La estructura del presente trabajo es la siguiente: en la Sección 2, se describe de forma breve el desarrollo de soluciones generales, así como los principales métodos matemáticos que se han usado para obtenerlas. La Sección 3 contiene una breve descripción del cálculo simbólico, y en ella se analizan las principales partes del algoritmo desarrollado. La Sección 4 contiene la metodología para realizar comparaciones, y los resultados preliminares, y finalmente en la Sección 5 se presentan las conclusiones.

2. SOLUCIONES GENERALES.

De esta sección en adelante, se entenderá por solución general cualquier solución del sistema descrito en (1) y (2), que tiene las condiciones iniciales dadas en (3), y que admite el caso donde existan elementos repetidos.

Luego de una profunda revisión, se encontraron al menos 17 publicaciones relacionadas con el desarrollo de soluciones generales para la ecuación de Bateman, o que resuelven sistemas similares al descrito en (2). Dichas soluciones pertenecen a un amplio rango de disciplinas, que van desde la astrofísica, hasta la teoría de transporte, incluyendo a la ingeniería nuclear. Así mismo, la metodología usada para el desarrollo de dichas soluciones no siempre fue la misma. En la Tabla I se listan de forma cronológica las publicaciones.

Es posible clasificar este conjunto de soluciones en 4 tipos, de acuerdo con las herramientas matemáticas usadas para obtenerlas: solución por transformada de Laplace, solución por formulación integral, solución por expansión en serie de potencias y la solución por límites en incrementos.

En el presente trabajo se seleccionaron dos soluciones para ser programadas en cálculo simbólico. La primera de ellas fue la solución basada en una formulación integral. Como se verá más adelante, esta metodología involucra esencialmente el cálculo de integrales. Después se consideró la solución obtenida por Transformada de Laplace, porque esta involucra el cálculo de múltiples derivadas. De esta forma se consideró adecuado comparar la implementación del cálculo simbólico, determinando qué era más rápido: calcular derivadas o calcular integrales.

Para el resto de las soluciones, basta decir que la solución por expansión en series de potencia, usa justamente esta técnica en una parte de la solución de Bateman, para evaluar el caso en que existen constantes de decaimiento idénticas. La solución por límite en incrementos consiste en plantear la ecuación (4) con elementos repetidos, cuya constante efectiva de decaimiento es modificada con un incremento Δ , al que posteriormente se hace tender a cero.

Vale la pena mencionar que, por la forma en la que están expresadas estas soluciones, no resulta evidente comprobar que son equivalentes. Aún más, soluciones como la de Cetnar [7] están escritas en forma de sumatorias anidadas, mientras que otras como las de Wilson [10] o Dreher [8] están expresadas en términos de derivadas múltiples.

2.1. Solución por formulación integral.

La solución por formulación integral parte de la ecuación (2). Si se arreglan los términos y se multiplica dicha ecuación por el factor integrante $e^{\lambda_i t}$, se tiene que:

$$\frac{d}{dt} \left(X_i e^{\lambda_i t} \right) = b_{i-1} \lambda_{i-1} X_{i-1} e^{\lambda_{i-1} t} - \lambda_i X_i e^{\lambda_i t} \quad (5)$$

Lo cual se reduce a:

Tabla I. Listado de publicaciones relacionadas con soluciones generales

Año	Autores	Método	Ref.	Año	Autores	Método	Ref.
1927	Meyer y Schweidler	Integral	[6]	1994	Vukadin	Serie de potencias	[18]
1949	Rubinson	Integral	[3]	1996	Pommé et al.	Integral	[19]
1961	Clayton	Laplace	[11]	1997	Mirzadeh y Walsh	Integral	[20]
1973	Bell	Límite	[12]	1999	Wilson	Integral	[10]
1978	Newman	Laplace	[13]	1999	Popovic'	Laplace	[21]
1980	Tasaka	Integral	[14]	2006	Cetnar	Límite	[7]
1981	Miles	Integral	[15]	2008	Slodička y Balážová	Límite	[22]
1989	Raykin y Shlyakhter	Integral	[16]	2013	Dreher	Límite	[8]
1993	Blaauw	Laplace	[17]				

$$X_i(t) = X_i(0)e^{-\lambda_i t} + b_{i-1}^{eff} \lambda_i^{i-1} e^{-\lambda_i t} \int_0^t X_{i-1}(t_1) e^{\lambda_i t_1} dt_1 \quad (6)$$

Como se puede observar, la ecuación por formulación integral es del tipo recursivo, en cuanto a que requiere conocer X_{i-1} para poder obtener X_i . Con el fin de analizar el comportamiento de este método cuando existen elementos repetidos, es necesario desarrollar la ecuación (6) para varios términos, comenzando con $i = 2$. Para ello se considerará que:

$$X_1(t) = X_1(0)e^{-\lambda_1 t} \quad (7)$$

Algo que puede obtenerse sin dificultades de la ecuación (2) y las condiciones iniciales (3). Así, considerando $i = 2$ en la ecuación (6), y sustituyendo (7), se tiene que:

$$X_2(t) = X_1(0) b_{12}^{eff} \lambda_1^{eff} e^{-\lambda_2 t} \int_0^t e^{-(\lambda_2 - \lambda_1) t'} dt' \quad (8)$$

En este primer caso, podemos observar que (8) contiene una diferencia de constantes de decaimiento efectivas, entre el isótopo 1 y el isótopo 2. Si se diera el caso que el isótopo 1 es igual al isótopo 2, es claro que esa resta sería igual a cero, y el resultado de la integral sería simplemente t . Repitiendo este proceso para el caso $i = 3$, se obtiene:

$$X_3(t) = X_1(0) b_{12}^{eff} \lambda_1^{eff} b_{23}^{eff} \lambda_2^{eff} e^{-\lambda_3 t} \int_0^t e^{-(\lambda_3 - \lambda_2) t_2} dt_2 \int_0^{t_2} e^{-(\lambda_3 - \lambda_1) t_1} dt_1 \quad (9)$$

Nuevamente aparece una diferencia de constantes de decaimiento efectivas, esta vez entre la que corresponde al isótopo 2 y la que corresponde al isótopo 3. Repitiendo este procedimiento para el caso $t = n$, y utilizando el Teorema de Fubini [23], se tiene que:

$$X_n(t) = X_1(0) \prod_{j=1}^{n-1} b_{j+1}^{eff} \lambda_j^{eff} e^{-\lambda_n^{eff} t} I(n) \quad (10)$$

Con $I(n)$ igual a:

$$\int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} e^{-[(\lambda_n^{eff} - \lambda_{n-1}^{eff})t_{n-1} + (\lambda_n^{eff} - \lambda_{n-2}^{eff})t_{n-2} + \dots + (\lambda_n^{eff} - \lambda_1^{eff})t_1]} dt_{n-1} \dots dt_1 \quad (11)$$

Una parte del presente trabajo consistió en desarrollar y analizar la ecuación (11), en la cual se observaron varias propiedades que resultan útiles para las cadenas cíclicas. En primer lugar, dicha ecuación permite reducir todos los casos en los que existan elementos repetidos que a su vez sean consecutivos. De esta forma, es posible simplificar la sumatoria de la exponencial en (11), y disminuir la dificultad de la integral.

Por otro lado, mediante cambios de variable, es posible reordenar algunos términos que resulten similares, aun cuando no sean consecutivos. Sin embargo, debido a que las diferencias en (11) no están multiplicadas por la misma variable t_k , con $1 \leq k \leq n - 1$, esta tarea no es del todo sencilla. Sin embargo, es posible realizar dicho procedimiento a través de un análisis combinatorio sobre las distintas configuraciones en las que pueden presentarse los elementos repetidos en las cadenas cíclicas.

2.2. Solución por transformada de Laplace.

Como se mencionó anteriormente, existen varias formulaciones de la solución general, algunas de las cuales resultan más fáciles de programar que otras. Por ello, como una primera aproximación se tomó la decisión de utilizar la solución general obtenida por la transformada de Laplace para el presente estudio. Sin embargo, en el futuro, es posible que esta investigación se extienda para realizar una comparación con todas las soluciones generales.

El método de solución por Laplace fue utilizado por primera vez por Harry Bateman en 1910. De hecho, fue la primera vez que dicha técnica se utilizó para resolver ecuaciones diferenciales [24]. Esencialmente, se deben utilizar las siguientes relaciones:

$$\begin{cases} \mathcal{L}\{X_j\} = \tilde{x}_j = \int_0^{\infty} X_j(t) e^{-st} dt, & 1 \leq j \leq n \\ \mathcal{L}\left\{\frac{dX_j}{dt}\right\} = s\mathcal{L}\{X_j\} - X_j(0) = s\tilde{x}_j - X_j(0) \end{cases} \quad (12)$$

Luego, es necesario reescribir (2) de forma matricial, aplicar (5) y las condiciones iniciales dadas en (3):

$$\begin{aligned}
 \left[\begin{aligned} \frac{dX_1}{dt} &= && -\lambda_1^{\text{eff}} X_1 \\ \frac{dX_2}{dt} &= & b_{1,2}^{\text{eff}} \lambda_1^{\text{eff}} X_1 - \lambda_2^{\text{eff}} X_2 \\ &\dots && \dots \\ \frac{dX_n}{dt} &= & b_{n-1,n}^{\text{eff}} \lambda_1^{\text{eff}} X_{n-1} & \lambda_n^{\text{eff}} X_n \end{aligned} \right] \xrightarrow[\text{(6)}]{\text{usando}} \left[\begin{aligned} s\tilde{X}_1 &= & X_1(0) & -\lambda_1^{\text{eff}} \tilde{X}_1 \\ s\tilde{X}_2 &= & b_{1,2}^{\text{eff}} \lambda_1^{\text{eff}} \tilde{X}_1 & -\lambda_2^{\text{eff}} \tilde{X}_2 \\ &\dots & \dots & \dots \\ s\tilde{X}_n &= & b_{n-1,n}^{\text{eff}} \lambda_1^{\text{eff}} \tilde{X}_{n-1} & -\lambda_n^{\text{eff}} \tilde{X}_n \end{aligned} \right] \quad (13)
 \end{aligned}$$

Sistema (2) escrito de forma matricial.
Usando las condiciones iniciales dadas en (6)

Después de múltiples sustituciones, es posible obtener de (13) la siguiente expresión:

$$\tilde{X}_n = X_1(0) \prod_{k=1}^{n-1} b_{k,k+1}^{\text{eff}} \lambda_k^{\text{eff}} \frac{1}{(s + \lambda_1^{\text{eff}})(s + \lambda_2^{\text{eff}}) \dots (s + \lambda_n^{\text{eff}})} \quad (14)$$

Luego, para resolver el sistema solo es necesario encontrar la transformada inversa de (14). En este punto es donde Harry Bateman supuso que todas las constantes de decaimiento efectivas eran distintas. Es decir, que el conjunto de $-\lambda_i^{\text{eff}}, 1 \leq i \leq n$ eran raíces simples del polinomio de variable s que está en el denominador de (14). En tal caso, es posible usar fracciones parciales y escribir:

$$\frac{1}{(s + \lambda_i^{\text{eff}})} = \sum_{j=i} \frac{1}{s + \lambda_j^{\text{eff}}} \quad (15)$$

De esta forma se tiene que la transformada inversa de (14) es igual a:

$$X_n = \mathcal{L}^{-1}\{\tilde{X}_n\} = X_1(0) \prod_{k=1}^{n-1} b_{k,k+1}^{\text{eff}} \lambda_k^{\text{eff}} \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_j^{\text{eff}} - \lambda_i^{\text{eff}}} \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{1}{s + \lambda_j^{\text{eff}}} \right\} \quad (16)$$

Considerando que $\mathcal{L}^{-1}\{1/(s + \lambda_i^{\text{eff}})\} = e^{-\lambda_i^{\text{eff}}t}$, es posible verificar que (16) es igual a (4). Sin embargo, para el caso general el paso (15) es más complejo, puesto que el polinomio no necesariamente tiene raíces simples, ya que, si hay elementos repetidos, algunos de los binomios estarán elevados a una potencia igual al número de veces en que se presenta dicha repetición. En este caso, se considerará que de los n isótopos que componen (1), hay un total de m distintos, donde claramente $m \leq n$.

Luego se considerará el conjunto de números k_1, k_2, \dots, k_m para denotar el número de veces que los isótopos aparecen repetidos. En este sentido el isótopo h , con $1 \leq h \leq m$, aparecerá k_h veces repetido en (1). Es posible verificar sin dificultad que $k_1 + k_2 + \dots + k_m = n$. Con estas nuevas condiciones la ecuación (14) se transforma en:

$$\tilde{X}_n = \frac{X_1(0) \prod_{i=1}^m (b_{i,i+1}^{\text{eff}} \lambda_i^{\text{eff}})^{k_i}}{b_{n-1,n}^{\text{eff}} \lambda_{n-1}^{\text{eff}}} \frac{1}{(s + \lambda_1^{\text{eff}})^{k_1} (s + \lambda_2^{\text{eff}})^{k_2} \dots (s + \lambda_m^{\text{eff}})^{k_m}} \quad (17)$$

Donde ${}_{n-1,n}b^{eff}$ y ${}_{n-1}\lambda^{eff}$ representan el coeficiente de ramificación y la constante de decaimiento del isótopo que se encuentra en la posición n en la sucesión dada en (1). La parte derecha de (17) también puede reescribirse usando fracciones parciales [25]:

$$\text{Donde: } \frac{1}{(s + \lambda_1^{eff})^{k_1} (s + \lambda_2^{eff})^{k_2} \dots (s + \lambda_m^{eff})^{k_m}} = A(s) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{k_j} \frac{c_{j,i}}{(s + \lambda_j^{eff})^i} \quad (18)$$

Con estas definiciones la transformada inversa de (17) se reduce a:

$$X_n(t) = \frac{X_1(0) \prod_{i=1}^{n-1} (b_{i,i+1}^{eff} \lambda_i^{eff})^{k_i}}{{}_{n-1,n}b^{eff} {}_{n-1}\lambda_{n-1}^{eff}} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{k_j} c_{j,i} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(s + \lambda_j^{eff})^i} \right\} \quad (20)$$

Finalmente, se considerará la siguiente igualdad:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(s + \lambda_j^{eff})^i} \right\} = \frac{e^{-\lambda_j^{eff} t} t^{i-1}}{\Gamma(i)} \quad (21)$$

Donde Γ representa a la función gamma. Usando (21), la solución general por el método de Laplace es igual a:

$$X_n(t) = \frac{X_1(0) \prod_{i=1}^{n-1} (b_{i,i+1}^{eff} \lambda_i^{eff})^{k_i}}{{}_{n-1,n}b^{eff} {}_{n-1}\lambda_{n-1}^{eff}} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{k_j} c_{j,i} \frac{e^{-\lambda_j^{eff} t} t^{i-1}}{\Gamma(i)} \quad (22)$$

2.3. Análisis algorítmico de las soluciones.

A pesar de que no resulta evidente, las ecuaciones (10) y (22) son equivalentes. Gracias a la forma en cómo fueron obtenidas y por la manera en que fueron expresadas, cada una de ellas tiene ventajas y desventajas que son necesarios analizar.

Las ventajas de la ecuación (10), están relacionadas con el tipo de integral que se debe resolver en cada paso del proceso recursivo. Cuando dos constantes de decaimiento son iguales, entonces el proceso de integración se reduce a encontrar integrales de la forma $t^k e^{-\lambda t}$, $1 \leq t \leq n$, $0 \leq k \leq n$. Estas integrales han sido estudiadas por años, y existen tablas con fórmulas que permiten calcularlas. Su principal desventaja, por otro lado, es que el proceso de comparación entre las constantes de decaimiento efectivas es lento, porque se hace por pares.

Por su parte, la ecuación (22) realiza la comparación entre las constantes de decaimiento una sola vez y de manera rápida. Para llevar a cabo esta tarea, se determina cuántos elementos repetidos hay, y por lo tanto se calculan los números k_m , eliminando la necesidad de analizar por pares, como sucede en la ecuación (10).

Sin embargo, la principal desventaja se relaciona con la determinación de los coeficientes a_{ij} , que involucran el cálculo de derivadas de orden superior de la función racional que está en la parte derecha de la ecuación (17). Esta dificultad en cuanto al cálculo de derivadas no solo se presenta en la solución por transformada de Laplace, sino también en la solución propuesta por Dreher y [8] por Slodička y Balážová [22].

Si bien es posible aproximar dichas derivadas, como lo propone Dreher [8], también resulta conveniente buscar alternativas para construir las funciones de forma exacta, puesto que, a diferencia de muchos otros problemas en ingeniería nuclear, en este caso contamos con soluciones analíticas exactas, como puede observarse en (10) y en (22).

En este punto es donde interviene el cálculo simbólico, una herramienta computacional que permite construir funciones matemáticas que luego pueden ser incorporadas a un código, para su evaluación. A diferencia de los métodos numéricos, que aproximan valores de funciones, el cálculo simbólico permite aproximar funciones con otras funciones, o calcularlas de forma exacta. Esta herramienta computacional es sumamente útil cuando se utilizan fórmulas recursivas, como la dada en (10), porque permite la construcción de funciones a través de bucles.

Esta construcción por bucles es igualmente útil cuando se calculan derivadas de orden superior, puesto que en esencia se trata de derivar una función, y luego definir esta “derivada” como una nueva función, y volver a derivarla, lo que esencialmente también es un bucle. Así, la comparación de la presente investigación se reduce a determinar qué es más rápido, a nivel de cálculo simbólico, calcular integrales o calcular derivadas.

3. CÁLCULO SIMBÓLICO.

Es necesario distinguir entre dos tipos de cálculos: los basados en métodos numéricos, y los que se basan en métodos analíticos, o por manipulación de fórmulas. Existen diferencias esenciales entre estas dos metodologías. En primer lugar, para el cálculo simbólico es necesario conocer la solución exacta, y realizar ciertas manipulaciones mientras que en el cálculo numérico no. Así mismo, este último cálculo involucra un mayor número de evaluaciones, que en ocasiones se traducen a pasos recursivos, mientras que el simbólico suele necesitar de la sola evaluación de una fórmula analítica.

Así mismo el cálculo numérico permite aproximar con un alto grado de precisión una operación o ecuación, a través de una serie de operaciones numéricas de tipo algebraico o funcional, sin necesidad de conocer la solución exacta del problema. Mientras que el cálculo simbólico, requiere esencialmente la manipulación de expresiones y el análisis de las relaciones entre ellas.

Cuando el cálculo simbólico se incorpora a un programa de cómputo, es que se habla de computación algebraica [26]. Si bien el cálculo numérico es quien dominó desde el principio la computación científica, el cálculo simbólico también se fue desarrollando a través varios sistemas algebraico computacionales (denotados por las siglas CAS por su acrónimo en inglés Computer

Algebra System), encontrándose entre los más destacables Mathematica (donde se incluye a Wolfram Alpha) [27], Maple [28], Maxima [29] y SymPy [30] entre otros.

3.1. Operaciones comunes en la formulación integral.

A través de un estudio de la ecuación (11) se encontraron las siguientes operaciones recurrentes:

$$\int_0^c e^{-(\lambda_i^{\text{eff}} - \lambda_j^{\text{eff}})t_1} dt_1 = \begin{cases} -\frac{1}{\lambda_i^{\text{eff}} - \lambda_j^{\text{eff}}} [e^{-(\lambda_i^{\text{eff}} - \lambda_j^{\text{eff}})c} - 1], & \lambda_i^{\text{eff}} \neq \lambda_j^{\text{eff}} \\ c, & \lambda_i^{\text{eff}} = \lambda_j^{\text{eff}} \end{cases} \quad (23)$$

La operación descrita en (23) puede abreviarse a través de una función binaria dada por $\omega(\lambda_i^{\text{eff}}, \lambda_j^{\text{eff}})$. La siguiente operación común, consiste en la multiplicación de $\omega(\lambda_i^{\text{eff}}, \lambda_j^{\text{eff}})$ por una función exponencial:

$$\varphi(\lambda_i^{\text{eff}}, \lambda_j^{\text{eff}}) = e^{-\lambda_j^{\text{eff}}t} \omega(\lambda_i^{\text{eff}}, \lambda_j^{\text{eff}}) = \begin{cases} -\frac{1}{\lambda_i^{\text{eff}} - \lambda_j^{\text{eff}}} [e^{-\lambda_i^{\text{eff}}t} - e^{-\lambda_j^{\text{eff}}t}], & \lambda_i^{\text{eff}} \neq \lambda_j^{\text{eff}} \\ e^{-\lambda_j^{\text{eff}}t}, & \lambda_i^{\text{eff}} = \lambda_j^{\text{eff}} \end{cases} \quad (24)$$

Si se avanza en una integración adicional, se tiene que la siguiente expresión

$$\text{Es igual a: } \begin{cases} -\frac{1}{\lambda_i^{\text{eff}} - \lambda_j^{\text{eff}}} [\varphi(\lambda_i^{\text{eff}}, \lambda_k^{\text{eff}}) - \varphi(\lambda_j^{\text{eff}}, \lambda_k^{\text{eff}})], & \lambda_i^{\text{eff}} \neq \lambda_j^{\text{eff}} \\ e^{-\lambda_k^{\text{eff}}t} \int_0^c e^{-(\lambda_i^{\text{eff}} - \lambda_k^{\text{eff}})t_1} dt_1, & \lambda_i^{\text{eff}} = \lambda_j^{\text{eff}} \end{cases} \quad (25)$$

Finalmente, la última expresión identificada y de la que se obtuvo una fórmula general está relacionada con el cálculo del siguiente producto:

$$\text{El cual es igual a: } e^{-\lambda_j^{\text{eff}}t} \int_0^c t_1^n e^{-(\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})t_1} dt_1 \quad (27)$$

$$= -\frac{t^n e^{-\lambda_x^{\text{eff}}t}}{(\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})} + \frac{nl (e^{-\lambda_x^{\text{eff}}t} - e^{-\lambda_y^{\text{eff}}t})}{(\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})^{n+1}} + \sum_{k=1}^{n-1} \left[-\frac{nl t^{n-k} e^{-\lambda_x^{\text{eff}}t}}{(n-k)! (\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})^{k+1}} \right] \quad (28)$$

3.2. Construcción de una librería de cálculo simbólico.

Como se mencionó al principio de esta sección, existen varios CAS con los que se puede llevar a cabo la resolución de (11) y (22). Al principio de esta investigación se seleccionó la paquetería SymPy, que es una biblioteca de licencia libre para el lenguaje Python [30].

Sin embargo, durante el desarrollo del algoritmo surgieron algunas dificultades con el uso de SymPy, relacionadas con la forma en cómo este sistema CAS realizaba algunas factorizaciones y simplificaciones. Si bien era posible superar estos problemas con un estudio más profundo de la

forma en cómo se definieron algunas funciones y clases en dicha librería, se consideró más apropiado desarrollar un sistema CAS propio, y que solo dependiese de variables del tipo “string”.

Esto último, permitiría que el sistema de cálculo simbólico desarrollado, pudiera implementarse en otros códigos sin muchas dificultades. La discusión que se presentará en la siguiente sección, proporciona los aspectos más relevantes de la librería desarrollada para la resolución de la ecuación (11), siendo este procedimiento similar al utilizado para resolver la ecuación (22).

3.3. Funciones y paréntesis.

Para la resolución de la ecuación (11) se necesitan 7 funciones. Cuatro de ellas son operaciones binarias, y tres aceptan un solo argumento. Estas funciones se representarán por una letra, o un par de estas, así como un par de paréntesis para denotar o “encerrar” su argumento. En la Tabla II se listan las principales funciones, con la operación matemática a la que corresponden.

La mayoría de los lenguajes de programación pueden manipular variables del tipo “string” (también llamadas “character”), así que, aunque la siguiente descripción corresponde a la manipulación de este tipo de variables que se hace en el lenguaje de programación Python 3.5, puede extenderse a otros lenguajes sin muchas dificultades.

Para representar las constantes de decaimiento efectivas se utilizará la letra “I” acompañada de un número. Así, por ejemplo, la constante $\lambda_{\text{I}4}$ quedará representada por “I4”. No se utilizará ninguna variable para representar los coeficientes de ramificación efectivos, puesto que la ecuación (11) no las contiene.

Función	Representación Simbólica	Argumentos	Propiedades
$a - b$	$d(a, b)$	2	$d(a, b) = -d(b, a)$
$a + b$	$S(a, b)$	2	$S(a, b) = S(b, a)$ $S(a, -b) = d(a, b)$
$a \cdot b$	$M(a, b)$	2	$M(a, b) = M(b, a)$ $M(d(a, b), c) = d(M(a, c), M(b, c))$ $M(S(a, b), c) = S(M(a, c), M(b, c))$ $M(a, 1) = a$
e^{ax}	$ex(a)$	1	$M(ex(a), exp(b)) = expn(S(a, b))$ $ex(d(lx, ly)) = 1, \text{ si } lx = ly$
t^a	$t(a)$	1	$M(t(a), t(b)) = t(S(a, b))$
$\frac{1}{a - b}$	$d_i(a, b)$	2	$d_i(a, b) = -d_i(b, a)$

$\int_0^1 a dt$	$G(a)$	1	$G(M(a, b)) = M(a, G(b))$ si a es constante $G(S(a, b)) = S(G(a), G(b))$ $G(d(a, b)) = d(G(a), G(b))$
-----------------	--------	---	---

Tabla II. Representación de las principales funciones con cálculo simbólico y sus propiedades.

Es importante dotar a las funciones de ciertas propiedades, por ejemplo, la de conmutación $M(a, b) = M(b, a)$, puesto que esto permite al programa simplificar algunas operaciones para resolver las ecuaciones. El algoritmo comienza con la siguiente ecuación:

$$e^{-\lambda_1^{\text{eff}} t} \int_0^1 e^{-(\lambda_1^{\text{eff}} - \lambda_2^{\text{eff}}) t'} dt' \quad (29)$$

Que en cálculo simbólico se escribe como:

$$M\left(\exp(-t2), G\left(\exp(-d(i2, t1))\right)\right) \quad (30)$$

A continuación, se deben buscar todas las integrales que existen en la expresión (30). Dado que esta expresión se almacenará en una variable del tipo “string”, para realizar dicha búsqueda solo hace falta identificar en dicha variable cuántas veces aparece la letra “G”.

Este procedimiento se puede realizar en Python 3.5 a través del método “count”. Una vez localizadas las integrales, deben resolverse una a una mediante iteraciones. En primer lugar, se debe identificar el argumento de estas, lo cual se realiza mediante una función que analiza la cantidad de paréntesis izquierdos y derechos que hay. Nuevamente, esta tarea puede realizarse mediante el método “count”. Luego, se deben simplificar los argumentos de las integrales, lo que es necesario prácticamente en un solo caso: cuando las integrales contienen exponentes de diferencias. Justamente, esta operación se relaciona con el análisis de las constantes de decaimiento efectivas de las cadenas cíclicas. Así, la función integral tiene las siguientes posibilidades en base a su argumento:

$$\begin{cases} a \int_0^1 g(t) dt & \text{si } f(t) = ag(t) \\ t & \text{si } f(t) = e^{-(\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})t}, \text{ y } \lambda_x^{\text{eff}} = \lambda_y^{\text{eff}} \\ -\frac{1}{\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}}} [e^{-(\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})t} - 1] & \text{si } f(t) = e^{-(\lambda_x^{\text{eff}} - \lambda_y^{\text{eff}})t} \text{ y } \lambda_x^{\text{eff}} \neq \lambda_y^{\text{eff}} \end{cases} \quad (31)$$

Que en términos de cálculo simbólico pueden escribirse:

$$\begin{cases} M(a, G(b)) & \text{con } G(M(a, b)) \text{ y } a \text{ constante} \\ t(1) & \text{con } G(\exp(-d(lx, ly))) \text{ y } lx = ly \\ M(-d_i(lx, ly), d(\exp(-d(lx, ly)), 1)) & \text{con } G(\exp(-d(lx, ly))) \text{ y } lx \neq ly \end{cases} \quad (32)$$

Existe una posibilidad adicional que no se ha incluido, debido a que requiere de la definición de productoria y sumatoria, que no se incluyeron en la Tabla II por simplicidad. Sabemos que $\lambda_1^{eff} \neq \lambda_2^{eff}$, de esta forma (30) se transforma en:

$$M \left(\exp(-l_2), M \left(-d_i(l_1, l_2), d \left(\exp(-d(l_1, l_2)), 1 \right) \right) \right) \quad (33)$$

Si se utiliza la propiedad distributiva con respecto a la resta en el segundo producto se tendría

$$d \left(M \left(-d_i(l_1, l_2), \exp(-d(l_1, l_2)) \right), -d_i(l_1, l_2) \right) \quad (34)$$

Sustituyendo esto en (33), se tiene finalmente que:

$$d \left(M \left(-d_i(l_1, l_2), \exp(-l_1) \right), M \left(-d_i(l_1, l_2), \exp(-l_2) \right) \right) \quad (35)$$

Es importante notar que la última expresión se obtuvo solamente aplicando las propiedades de la Tabla II a la ecuación (30), sin ninguna manipulación matemática normal. Si transformamos la ecuación (35) a su equivalente matemática, tenemos:

$$-\frac{e^{-\lambda_1^{eff} l_1}}{\lambda_1^{eff} - \lambda_2^{eff}} + \frac{e^{-\lambda_2^{eff} l_1}}{\lambda_1^{eff} - \lambda_2^{eff}} \quad (36)$$

Que es justamente el resultado de la ecuación matemática en (29). Este ejemplo muestra cómo puede resolverse uno de los pasos de la ecuación (11), usando cálculo simbólico. Es claro que se necesitaron pasos de identificación, sustitución y la aplicación de varias propiedades, que podrían volver este procedimiento difícil si se realizara manualmente, pero por fortuna dichas tareas pueden realizarse sin dificultad en un algoritmo computacional.

Si la expresión en (35) se almacena en una variable del tipo “string” llamada Ψ , para calcular el siguiente paso en la solución de (11), solo hace falta resolver la siguiente expresión de cálculo simbólico:

$$M \left(\exp(-l_3), G \left(M(\Psi, \exp(l_3)) \right) \right) \quad (37)$$

La cual es el equivalente de la ecuación (6). En este punto, el algoritmo para la resolución de las integrales que se describió en líneas anteriores vuelve a efectuarse. Un proceso similar se llevó a cabo para la construcción y resolución de las derivadas definidas en la ecuación (19), y por lo tanto para la resolución de la ecuación (22). Una vez construidas las soluciones, se desarrolló un algoritmo de “traducción”, que permite que expresiones de cálculo simbólico como la mostrada en (53) puedan incorporarse a un código y evaluarse.

4. Comparación

Existen dos formas de comprobar la utilidad del cálculo simbólico en la resolución de la ecuación general de Bateman. La primera de ellas consiste en resolver un conjunto de cadenas cíclicas con un algoritmo que contenga cálculo simbólico, y con otro que no lo haga, analizando el tiempo de

cómputo que ambos códigos requieren para obtener resultados similares. Sin embargo, esta comparación es compleja, porque la mayor parte de los algoritmos que implementan soluciones generales, ocupan aproximaciones de derivadas o de integrales. Por lo tanto, la comparación deberá incluir un análisis de qué tan precisa puede ser una solución que no use cálculo simbólico en comparación con una que sí lo use.

Dicho proceso requiere de un análisis más profundo que compare las soluciones generales con las que usan aproximaciones, un tópico que formará parte de un futuro trabajo. Por ahora, el análisis que puede realizarse en términos computacionales se reduce a verificar que las soluciones obtenidas para un conjunto de cadenas cíclicas sean correctas, y analizar cuál de ellas es más eficiente en cuanto al tiempo de cómputo.

Resulta claro que en el futuro se construirán con cálculo simbólico el resto de las soluciones, para determinar cuál de ellas resulta más conveniente de ser incluida en un algoritmo computacional. Por lo anterior, el presente análisis consistió en tres pasos. Primero, usando cálculo simbólico, se resuelve la ecuación general de Bateman usando la solución de Laplace y la solución integral. La estructura que se resolvió es similar a la mostrada en (25). Luego, se verificaba que dichas soluciones fueran idénticas. Finalmente, se consideró el tiempo que le tomó a cada solución construir la ecuación. La Figura 1 contiene una gráfica comparativa en términos del tiempo de cómputo que necesitó cada una de las soluciones para construir la ecuación general de Bateman, variando la longitud de la cadena cíclica.

Para esta comparación se utilizó el lenguaje de programación Python 3.5, y se utilizó un equipo de cómputo con un procesador Intel i-7 de sexta generación, con 2.6GHz de velocidad de reloj base.

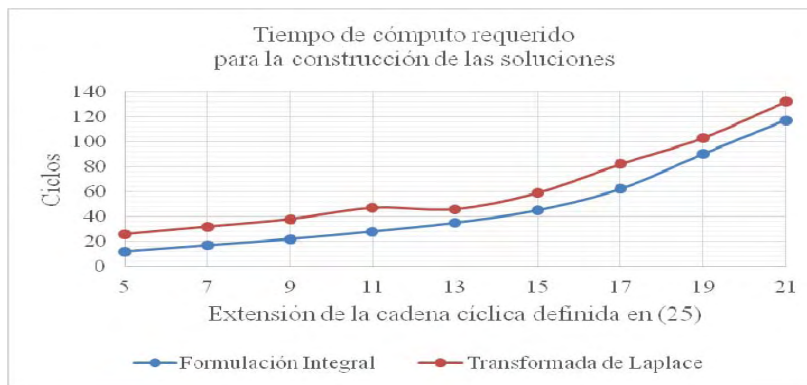


Figura 1. Ciclos de cómputo para el método de Formulación Integral, y para el método de Transformada de Laplace, en función de la extensión de la cadena cíclica con la estructura dada en (25).

Nótese que no se proponen tiempos de ejecución, porque esto está fuertemente condicionado por el hardware y arquitectura de un equipo, optándose mejor por ciclos (definidos fácilmente como una

base normalizada). Como se puede observar en la Figura 1, el método de formulación integral es más veloz que el método basado en la transformada de Laplace.

Esto puede explicarse en cuanto a que es más rápido calcular integrales del tipo exponencial, que el cálculo de derivadas de funciones racionales. Sin embargo, es posible observar que la diferencia entre el tiempo se mantiene aproximadamente constante.

Por otro lado, es posible observar que el tiempo de ambos métodos aumenta de forma considerable para los últimos puntos de la gráfica. Luego de una inspección se observó que esto se debe a la presencia de una variable t^k , cuyo exponente incrementa. Esto a su vez incrementa el número de términos, como puede apreciarse en la ecuación (27), y se traduce a una derivada de orden mayor en el caso de la ecuación (19).

5. Conclusiones.

En el presente trabajo se construyeron dos soluciones generales de la ecuación de Bateman usando cálculo simbólico. Para ello se identificaron las principales propiedades de la formulación integral, y se realizó un análisis del cálculo de derivadas de alto orden relacionadas con el método por transformada de Laplace.

Usando variables del tipo “string” fue posible construir una librería CAS especializada en la resolución de integrales y derivadas relacionadas con la ecuación de Bateman. Al únicamente utilizar funciones de este tipo de variables, la metodología desarrollada puede extenderse fácilmente a otros lenguajes de programación.

Al realizarse una comparación entre la construcción de la solución basada en el tiempo real, y la solución basada en la transformada de Laplace, se concluyó que el primer proceso es más rápido, y que dicha diferencia entre los tiempos de cómputo permanece aproximadamente constante. En ambos casos, el tiempo incrementa de forma notoria cuando aumenta la longitud de la cadena cíclica.

Es posible concluir del presente trabajo, que a través del cálculo simbólico pueden aprovecharse las soluciones generales que diferentes autores han publicado, sin necesidad de que algunas operaciones relacionadas con ellas sean aproximadas, y por lo tanto pierdan exactitud. Adicionalmente, el cálculo simbólico permite construir las soluciones en tiempo real, lo que permitirá que los códigos tengan flexibilidad para simular cadenas cíclicas más complejas.

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por brindar el apoyo económico a C.A. Cruz para la realización de este trabajo que forma parte de su investigación doctoral. Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602: “AZTLAN Platform: Desarrollo de

una plataforma mexicana para el análisis y diseño de reactores nucleares”, del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACYT - SENER.

A la UNAM, por el apoyo otorgado a través del proyecto PAPIIT-IN115517.

REFERENCIAS

1. Stammler, R. J. J., Abbate, M. J., *Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design*, Academic Press Inc, Estados Unidos (1983).
2. Rutherford, E., *Radio-Activity*, Cambridge Physical Series, Cambridge, Inglaterra (1904).
3. Rubinson, W., “The Equations of Radioactive Transformation in a Neutron Flux”, *The Journal of Chemical Physics*, **Vol. 17**, (6), p. 542-547 (1949).
4. Bateman, H., “Solution of a System of Differential Equations Occurring in the Theory of Radioactive Transformations”, *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **Vol. 15**, p. 423–427 (1910).
5. Isotalo, A., *Computational Methods for Burnup Calculation with Monte Carlo Neutronics*, Doctoral Dissertation. Aalto University Publication Series. Helsinki, Finland (2013).
6. Meyer, S., Schweidler, E., *Radioaktivität*, Springer Fachmedein Wiesbaden GmbH. p. 56-57 (1927).
7. Cetnar, J., “General Solution of Bateman Equations for Nuclear Transmutations”, *Annals of Nuclear Energy*, **Vol. 33**, p. 640–645 (2006).
8. Dreher, R., “Modified Bateman Solution for Identical Eigenvalues”, *Annals of Nuclear Energy*, **Vol. 53**, p. 427-438 (2013).
9. Isotalo, A. E., Aarnio, P. A., “Higher order methods for burnup calculations with Bateman Solutions”, *Annals of Nuclear Energy*, **Vol. 38**, p. 1987-1995 (2011).
10. Wilson, P. P. H., *ALARA: Analytic and Laplacian Adaptive Radioactivity Analysis*, Doctoral dissertation, Fusion Technology Institute, University of Wisconsin, Madison Wisconsin, USA (1999).
11. Clayton, D. D., Fowler, W. A., Hull, T. E., Zimmerman, B. A., “Neutron Capture Chains in Heavy Element Synthesis”, *Annals of Physics*, **Vol. 12**(3), p.331-408 (1961).
12. Bell, M. J., “ORIGEN- The ORNL Isotope Generation and Depletion Code”, ORNL-4628, Oak Ridge National Laboratory (1973).
13. Newman, M. J., “S-Process Studies: The Exact Solution”, *The Astrophysical Journal*, **Vol. 219**, p. 676-689 (1978).
14. Tasaka, K., “DCHAIN 2: A Computer Code for Calculation of Transmutation of Nuclides”, Japan Atomic Energy Research Institute. Tokyo, Japan (1980).
15. Miles, R. E., “An Improved Method for Treating Problems Involving Simultaneous Radioactive Decay, Buildup, and Mass Transfer”, *Nuclear Science and Engineering*, **Vol. 79** (2), p. 239-245 (1981).
16. Raykin, M. S, Shlyakhter, A.I., “Solution of Nuclide Burnup Equations Using Transition Probabilities”, *Nuclear Science and Engineering*, **Vol. 102**, p. 54-63 (1989).

17. Blaauw, M., “A Versatile Computer Algorithm for Linear First-order Equations Describing Compartmental Models with Backward Branching”, *Applied Radiation and Isotopes*, **Vol. 44** (9), p. 1225-1229 (1993).
18. Vukadin, Z., “Solution of Depletion Chain Equations Using Nonsingular Bateman Coefficients”, *Nuclear Science and Engineering*, **Vol. 117** (2), p. 121-125 (1994).
19. Pommé, S. G., Hardeman, F. E. M. C., Robouch, P. B., Etxebarria, N., De Corte, F. A., De Wispelaere, A. H. M. J., Sluijs, R. v., Simonits, A. P., “General Activation and Decay Formulas and Their Application in Neutron Activation Analysis with k_0 Standardization. Analytical Chemistry”, **Vol. 68**(24), p. 4326-4334 (1996).
20. Mirzadeh, S., Walsh, P., “Numerical Evaluation of the Production of Radionuclides in a Nuclear Reactor (Part I)”, *Applied Radiation and Isotopes*, **Vol. 49**(4), p. 379-382 (1998).
21. Popovic, J., “Derivation of Laplace Transform for the General Disposition Deconvolution Equation in Drug Metabolism Kinetics”, *Experimental and Toxicology Pathology*, **Vol. 51**, p. 409-411 (1999).
22. Slodička, M., Balážová, A., “Singular Value Decomposition Method for Multi-species First-order Reactive Transport with Identical Decay Rates”, *Transport in Porous Media*, **Vol. 73**(2), p. 161-172 (2008).
23. Marsden, J. E., *Elementary Classical Analysis*, W. H. Freeman and Company, University of California, Berkeley, Estados Unidos, p. 302-306 (1976).
24. Deakin, M. A., “The Development of the Laplace Transform, 1737-1937 II. Poincaré to Doetsch, 1880-1937”, *Archive for History of Exact Sciences*, **Vol. 26**(4), p. 351-381, (1982).
25. Boyd, S., *Introduction to Signal & Systems*, Stanford University, Course Notes. Lecture 5: Rational Functions and Partial Fractions Expansion, p. 25-29 (2003).
26. Davenport, J. H., Siret, Y., Tournier, E., *Computer Algebra*, Academic Press (1993).
27. David, C., *Interactive Documents and Computer Algebra System: JOBAD and Wolfram/Alpha*, Jacobs University Bremen, Bremen, Alemania (2010).
28. Char, B. W., Geddes, K. O., Gentleman, M., Gonnet, G. H., “The design of Maple: A compact, portable, and powerful computer algebra system”, *Conferencia Europea en Álgebra Computacional*. EUROCAL, Berlin, Heidelberg (1983).
29. Rand, H. R., *Introduction to Maxima*, Departamento de Mecánica Teórica y Aplicada, Universidad de Cornell, Nueva York, Estados Unidos (2010).
30. Meurer, A., Smith, C. P., Paprocki, M., Čertík, O., Kirpichev, S. B., Rocklin, M., Kumar, A.,..., Scopatz, A., “SymPy, symbolic computing in Python”, *PeerJ Computer Science*, **Vol. 3**(3), 103.

Simulación de arreglos nucleares experimentales críticos con el código Serpent

Dan Adrian Alba Montiel y Carlos Filio López
Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Física y Matemáticas
Unidad Profesional “Adolfo López Mateos”
Col. Lindavista 07738, México D. F.
daalba_esfm@hotmail.com; cfilio@esfm.ipn.mx

Resumen

Del manual NEA/NSC/DOC/(95) que contiene especificaciones de referencia (benchmark) de seguridad de criticidad, que se han derivado de experimentos realizados en varias instalaciones críticas nucleares en todo el mundo, se eligieron cuatro arreglos experimentales para su simulación con el código Monte Carlo Serpent. Se simularon los siguientes arreglos experimentales: 18 configuraciones de arreglos críticos de barras de combustible de UO_2 de bajo enriquecimiento con razones de volumen de agua a combustible de 1.5 a 3.0, con número de especificación LEU-COMP-THERM-006; 29 configuraciones de arreglos de barras de combustible de $U(2.35)O_2$ moderadas con agua y reflejadas por dos paredes de plomo, uranio empobrecido o de acero, con número de especificación LEU-COMP-THERM-017; esfera desnuda de ^{239}Pu metálico (4.5 at.%, ^{240}Pu , 1.02 wt.% Ga), con número de especificación PU-MET-FAST-001 y el experimento crítico de referencia de una esfera de plutonio reflejada por torio, con número de especificación PU-MET-FAST-008. En este trabajo se describen los arreglos experimentales críticos; se proporciona la geometría con sus dimensiones, la composición de los materiales que constituyen el combustible, el moderador, las estructuras de soporte y del material usado como reflector. Asimismo, se presentan los resultados del factor de multiplicación obtenido con el código Serpent y la comparación de estos resultados con el resultado experimental. Se muestra que los modelos de simulación preparados para simular estos arreglos experimentales en el código Serpent fueron correctamente diseñados, ya que las diferencias de los resultados numéricos del factor de multiplicación con los experimentales fueron muy pequeñas. Adicionalmente, se confirmó la validez y confiabilidad de este código para su uso en cálculos neutrónicos para cualquier arreglo de combustible nuclear. Este trabajo es la base de la tesis de licenciatura en ciencias fisicomatemáticas, con especialidad en ingeniería nuclear, que desarrolló el autor Dan Adrian Alba Montiel, alumno de la Escuela Superior de Física y Matemáticas del IPN.

1. INTRODUCCIÓN

El Departamento de Energía de los Estados Unidos de Norte América inició en octubre de 1992 el “Proyecto de Evaluación de Experimentos de Referencia de Criticidad Segura (CSBEP, de sus siglas en inglés). Conforme científicos de otros países interesados se involucraron, el proyecto se convirtió rápidamente en un esfuerzo internacional de tal forma que este proyecto se convirtió en una

actividad oficial de la Organización para la Cooperación y Desarrollo Económico - Agencia de Energía Nuclear (OCDE-NEA) en 1995, proyecto (ICSBEP).

Como resultado de este proyecto se elaboró el manual NEA/NSC/DOC/ (95) que contiene especificaciones de referencia (benchmark) de seguridad de criticidad que se han derivado de experimentos que se realizaron en varias instalaciones críticas nucleares en todo el mundo. Las especificaciones de referencia están destinadas a ser utilizadas por los ingenieros de seguridad de criticidad para validar técnicas de cálculo utilizadas para establecer márgenes subcríticos mínimos para operaciones con materiales fisionables. Los datos de referencia de seguridad de criticidad evaluados se dan en siete volúmenes. Estos volúmenes contienen 284 evaluaciones con especificaciones de referencia para 2352 críticas, casi críticas o configuraciones subcríticas.

Con el fin de obtener experiencia en la simulación de experimentos de criticidad en arreglos de combustible nuclear, del manual mencionado, se eligieron cuatro arreglos experimentales de criticidad para simularlos con el código Monte Carlo “Serpent”.

Se presentan en este trabajo las descripciones de cada uno de los arreglos experimentales, los resultados del factor de multiplicación que se obtuvieron de su simulación con el código Serpent y la comparación de estos resultados con el valor del factor de multiplicación experimental.

2. SIMULACIÓN DE 4 ARREGLOS CRÍTICOS DE COMBUSTIBLE NUCLEAR

Del manual titulado “International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments” [1] se seleccionaron 4 tipos de arreglos experimentales de criticidad de combustible nuclear para su simulación con el código Serpent [2]. Se describen brevemente estos experimentos, proporcionando el arreglo geométrico, las características del tipo de combustible empleado y los parámetros experimentales que se obtuvieron para lograr el estado crítico del arreglo. Para cada arreglo experimental se muestran los resultados del factor de multiplicación obtenido con el código Serpent y se compara con el resultado experimental.

2.1. Descripción y Simulación del Experimento LEU-COMP-THERM-006 [3]

En el Volumen IV del documento “NEA/NSC/DOC/ (95)03/IV” [3] se reportan los experimentos denominados “Arreglos críticos de barras de combustible de bajo enriquecimiento con razones de volúmenes de agua a combustible de 1.5 a 3.0”, de estos se seleccionó el experimento LEU-COMP-THERM-006 para su simulación con el código Serpent.

Para realizar el experimento, en el que se formaron reticulados cuadrados de UO_2 con 2.6wt% de enriquecimiento y moderados con agua ligera, se construyó un tanque cilíndrico metálico, con un diámetro de 1.832m y de 2.078m de altura, en el que las barras de combustible están sostenidas por un conjunto de placas con rejillas de acero inoxidable, las que se colocan en la parte superior e

inferior del tanque y la criticidad se alcanza ajustando el nivel de agua utilizando una bomba de agua de alimentación; se emplearon seis detectores de neutrones situados a una distancia de 15cm de la periferia del reticulado y no se usaron barras de control. En la Figura 1 se muestra una sección transversal vertical del tanque.

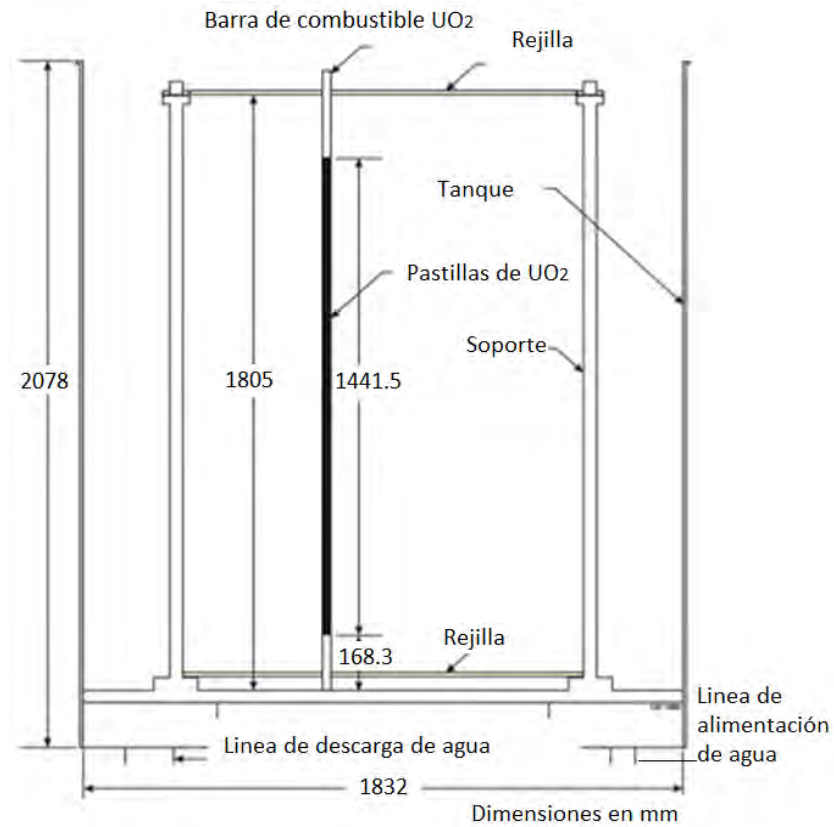


Figura 1. Sección transversal vertical del tanque experimental

Las pastillas de combustible tienen un diámetro de 1.25cm y están revestidas por un tubo de aluminio. La longitud de la región de combustible es de 144.15cm. En la Figura 2 se muestran detalles de las especificaciones de la barra de combustible.

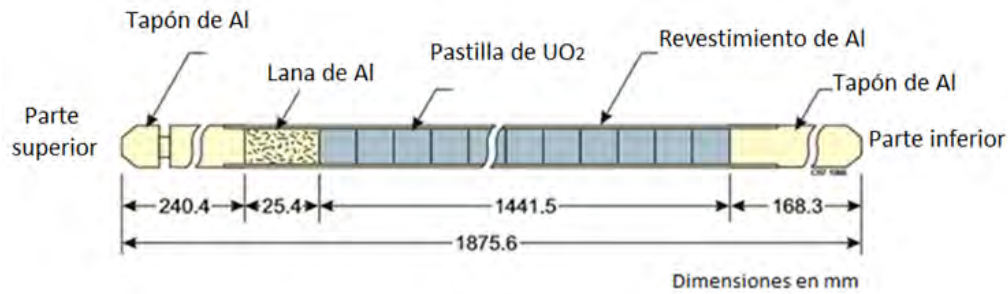


Figura 2. Barra de combustible

En la Tabla I se indican las especificaciones de la barra de combustible.

Tabla I. Especificaciones de la barra de combustible

Elemento	Valor
Composición de Uranio	
²³⁵ U (wt%)	2.596±0.005
²³⁸ U (wt%)	97.4004±0.005
Pastilla de UO ₂	
Diámetro (cm)	1.25±0.005
Densidad (g/cm ³)	10.4±0.05
Altura (cm)	1.27
Región activa (cm)	144.15±0.3
Revestimiento de aleación de aluminio	
Diámetro interior (cm)	1.265±0.0005
Espesor (cm)	0.076±0.0005
O/M (Relación de oxígeno a materiales metálicos)	2.04

El espaciado de centro a centro de las varillas (“pitch”) de los reticulados oscila entre 1.849 y 2.293 cm, lo que corresponde a una relación de volumen de agua y combustible que varía de 1.5 a 3.0 (la razón de volumen de agua a volumen de combustible se logra remplazando las rejillas con otro conjunto que tiene diferente espaciamiento). Los reticulados cuadrados se colocan en el centro del tanque.

Los niveles críticos del agua en los núcleos experimentales se midieron en el intervalo de temperatura de 10 a 30°C. En la Figura 3 se muestran algunos de los patrones de barras de combustible de los núcleos experimentales.

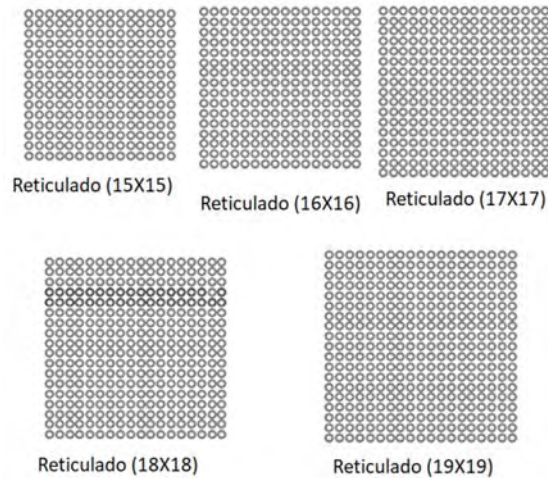


Figura 3. Arreglos de los reticulados

En el código Serpent se realizó un modelo tridimensional del arreglo, en el que cada barra de combustible (pin) se representó explícitamente; se consideró la región superior de los reticulados que se encuentra por encima del nivel crítico del agua y la región de 30cm del reflector de agua inferior. En el modelo se omitieron las rejillas, las placas de soporte y el espesor del tanque. El espesor del reflector de agua lateral es de más de 40 cm. La sección transversal horizontal del tanque central se muestra en la Figura 4.

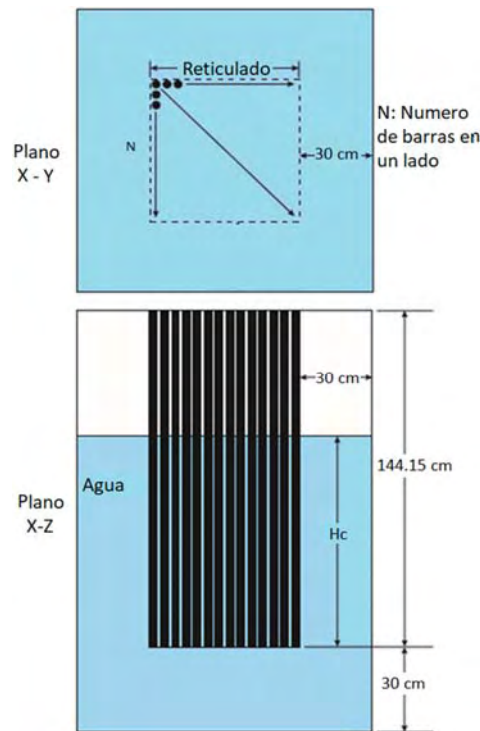


Figura 4. Modelo tridimensional en Serpent

En la Tabla II se muestran los resultados experimentales de los niveles críticos de agua para 18 diferentes reticulados cuadrados, así como los resultados del factor de multiplicación obtenidos con el código Serpent para cada uno de estos niveles experimentales de agua con una temperatura de 20°C. Los autores de los experimentos reportan el promedio de la medición de dos o más alturas críticas y consideran que corresponden a una k_{eff} de 1.000. Las diferencias en pcm entre el factor de multiplicación calculado k_{eff} y el experimental se obtuvieron mediante la expresión $((k_{eff} - 1.000)/k_{eff}) \times 10^5$.

Tabla II. Resultados experimentales del nivel crítico y del factor de multiplicación obtenido con el código Serpent

Espaciamiento (cm)	No. Caso	Número de varillas	Nivel crítico (cm)	k_{eff} (SERPENT)	ρ (pcm)
1.849	1	19X19	99.45±0.93	1.00007±0.00134	7
	2	20X20	73.73±0.83	0.99930±0.00124	-70
	3	21X21	60.81±0.52	1.00160±0.00152	160
1.956	4	17X17	114.59±1.69	1.00120±0.00129	120
	5	18X18	75.32±0.90	0.99809±0.00128	-191
	6	19X19	60.38±0.21	0.99976±0.00126	-24
	7	20X20	51.65±0.17	0.99910±0.00126	-90
2.150	8	21X21	46.01±0.08	1.00045±0.00131	45
	9	16X16	78.67±0.25	1.00039±0.00127	39
	10	17X17	59.96±0.10	1.00172±0.00124	171
	11	18X18	50.52±0.04	1.00011±0.00117	11
	12	19X19	44.55	0.99893±0.00128	-107
2.293	13	20X20	40.44	0.99831±0.00131	-170
	14	15X15	90.75±0.07	1.00115±0.00136	115
	15	16X16	64.42±0.09	1.00193±0.00134	192
	16	17X17	52.87±0.04	1.00008±0.00128	8
	17	18X18	46.06±0.04	0.99886±0.00124	-114
	18	19X19	41.54±0.01	1.00080±0.00127	80

2.2. Descripción y Simulación del Experimento LEU-COMP-THERM-017 [4]

De los experimentos mencionados en el punto anterior (2.1), se seleccionó el experimento denominado LEU-COMP-THERM-017 para su simulación con el código Serpent. En este experimento se formaron arreglos de 3 reticulados rectangulares de UO₂ con 2.35wt% moderados con agua ligera. Estos arreglos se colocaron entre un par de paredes reflectoras de tres materiales diferentes, a saber: uranio empobrecido, acero y plomo. Para obtener la criticidad con cada par de

paredes, los experimentadores variaron la separación entre las barras de combustible, la separación entre los reticulados, y la separación entre los reticulados y las paredes reflectoras. También, para este experimento se tuvieron razones de volúmenes de agua a combustible de 1.5 a 3.0.

Los experimentos se realizaron en un tanque de acero de 0.952 cm de espesor. Las dimensiones internas del tanque son 1.8 x 3.0 x 2.1 metros de profundidad. En la Figura 5 se muestra el contenedor que se utilizó para formar estos arreglos. La Figura 6 muestra el arreglo para el caso número uno, dentro del contenedor. En la Tabla III se muestran las dimensiones de las paredes usadas en el experimento.

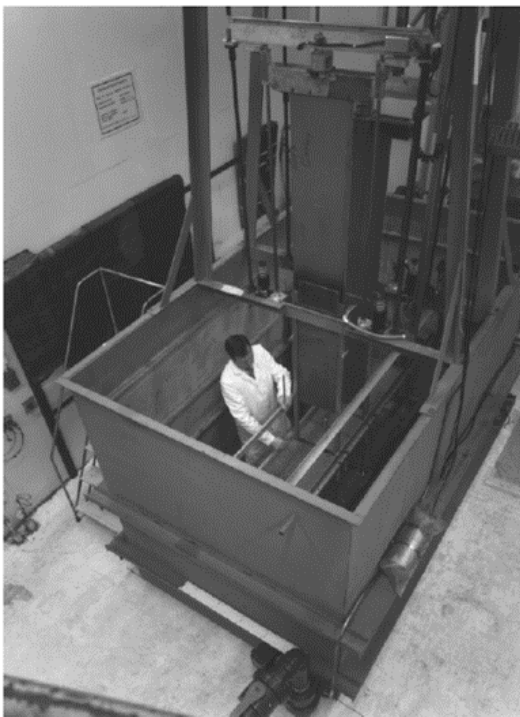


Figura 5. Contenedor de los arreglos de combustible

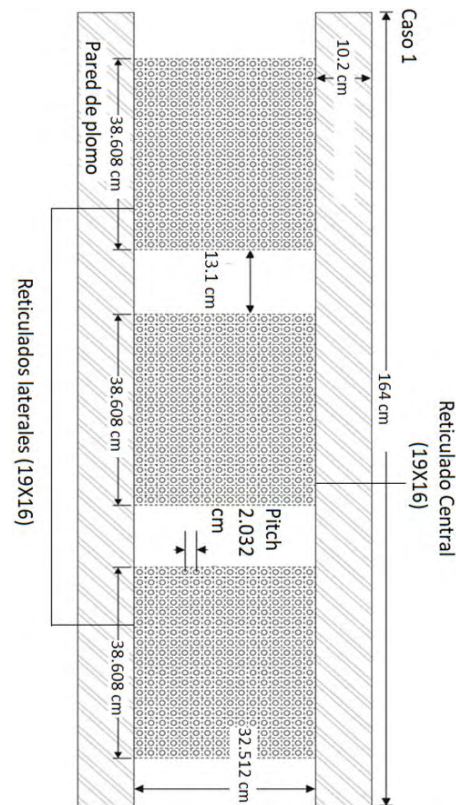


Figura 6. Caso experimental No. 1

Tabla III. Medidas de las paredes reflectoras

Material de la pared	Plomo	Uranio empobrecido	Acero
Altura (mm)	1234	1219	1219
Largo (mm)	1640	1523	1473
Grosor (mm)	102	76.5	102

En la Tabla IV se indican las configuraciones para cada uno de los arreglos experimentales; para los 7 primeros casos el pitch fue de 2.032 cm y para los restantes casos el pitch fue de 1.684 cm. Para los casos del 1 al 14 los reticulados fueron de 19 x 16 barras de combustible y para los arreglos restantes el reticulado central fue de 25 x 18 barras de combustible y los reticulados laterales fueron de 20 x 18 barras de combustible.

Tabla IV Arreglo de las 29 configuraciones.

Caso	Separación entre los ensamblados (cm)	Separación entre paredes reflectoras y ensamblados (cm)	Material de la pared reflectora	Caso	Separación entre los ensamblados (cm)	Separación entre paredes reflectoras y ensamblados (cm)	Material de la pared reflectora
1	13.1	0.0	Plomo	16	9.166	0.66	Acero
2	12.98	0.66	Plomo	17	9.096	1.321	Acero
3	10.51	2.616	Plomo	18	9.246	1.684	Acero
4	11.09	0.0	Uranio	19	8.866	2.344	Acero
5	13.19	1.321	Uranio	20	8.646	3.005	Acero
6	13.37	1.956	Uranio	21	8.126	3.912	Acero
7	12.96	2.616	Uranio	22	7.256	6.726	Acero
8	9.95	5.405	Uranio	23	9.646	0.0	Plomo
9	7.82	10.676	Uranio	24	9.696	0.66	Plomo
10	9.888	0.0	Acero	25	8.086	3.276	Plomo
11	10.438	0.66	Acero	26	7.646	0.0	Uranio
12	10.438	1.321	Acero	27	9.086	1.321	Uranio
13	9.598	2.616	Acero	28	9.416	2.616	Uranio
14	8.748	3.912	Acero	29	8.776	3.912	Uranio
15	8.566	0.0	Acero				

En la Figura 7 se muestran las dimensiones de la barra de combustible.

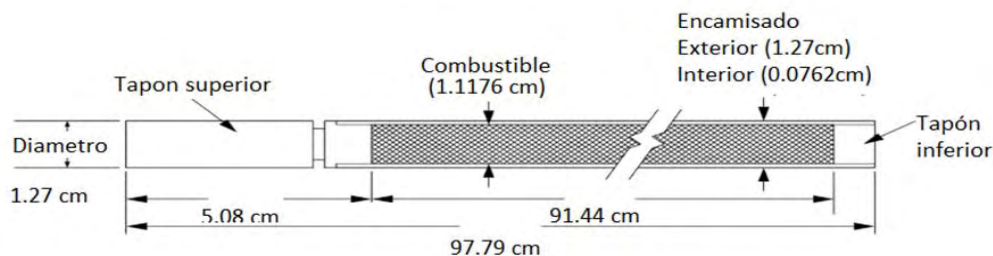


Figura 7. Barra de combustible

Los experimentadores reportan que para los 29 casos el valor de la k_{eff} es igual a 1.

Se utilizó el código Monte Carlo “Serpent” para simular los 29 arreglos experimentales descritos anteriormente.

En la Tabla V se presentan los resultados obtenidos con Serpent para el factor de multiplicación, junto con su incertidumbre. Las diferencias en pcm con los resultados experimentales se obtuvieron mediante la expresión $((k_{\text{eff}} - 1.000)/k_{\text{eff}}) \times 10^5$.

Tabla V Resultados de Serpent

Caso	k_{eff} (SERPENT)	ρ (pcm)	Caso	k_{eff} (SERPENT)	ρ (pcm)
1	1.00055 ± 0.00128	55	16	0.99924 ± 0.00130	-76
2	0.99638 ± 0.00126	-363	17	0.99884 ± 0.00132	-116
3	0.99855 ± 0.00125	-145	18	0.99732 ± 0.00125	-269
4	0.99936 ± 0.00125	-64	19	0.99944 ± 0.00130	-56
5	0.99921 ± 0.00132	-79	20	0.99628 ± 0.00128	-373
6	1.00204 ± 0.00133	204	21	0.99885 ± 0.00125	-115
7	0.99703 ± 0.00127	-298	22	0.99924 ± 0.00129	-76
8	1.00026 ± 0.00129	26	23	0.99927 ± 0.00123	-73
9	0.99651 ± 0.00126	-350	24	0.99806 ± 0.00125	-194
10	0.99844 ± 0.00123	-156	25	0.99875 ± 0.00122	-125
11	0.99990 ± 0.00132	-10	26	0.99593 ± 0.00134	-409
12	0.99771 ± 0.00129	-230	27	0.99661 ± 0.00127	-340
13	1.00019 ± 0.00127	19	28	1.00018 ± 0.00133	18
14	1.00010 ± 0.00088	10	29	0.99783 ± 0.00128	-217
15	0.99511 ± 0.00127	-491			

2.3. Simulación del Experimento PU-MET-FAST-001 [5]

A principios de la década de 1950, el conjunto crítico ^{239}Pu Jezebel fue fabricado y operado en el Laboratorio Científico de Los Alamos (Referencia 1). En realidad, se construyeron tres ensamblajes

de Jezabel, uno que usa Pu (4.5 a. % ^{240}Pu , 1.02 wt. % Ga) y que se conoce como el ^{239}Pu Jezabel, uno que usa Pu (20 a. % ^{240}Pu) y que se conoce como el ^{240}Pu Jezabel, y otro que usa ^{233}U y se refiere como el ^{233}U Jezabel. Solo el ^{239}Pu Jezabel se describe en el volumen I del documento NEA/NSC/DOC(95)03/I. El ^{239}Pu Jezabel era un ensamble crítico de ^{239}Pu de fase delta desnudo, de forma casi esférica. Se consideró aceptable para su uso como un experimento crítico de referencia, por lo que en este trabajo se seleccionó para su simulación con el código Serpent.

Para fines de seguridad de criticidad, la masa casi esférica se construyó en cuatro piezas principales, cada una de aproximadamente la misma masa, que se ensamblaron para proporcionar una subdivisión de tres partes para la seguridad operacional. Debido a la toxicidad del plutonio, todas las partes fueron niqueladas.

La Figura 8 muestra el ensamble experimental en su configuración desmontada y en la Figura 9 se muestra la parte activa del original ^{239}Pu Jezabel. En la referencia indicada, se proporciona la descripción detallada del experimento. En este trabajo solo se proporcionan los datos que se requirieron para la simulación con el código Serpent.

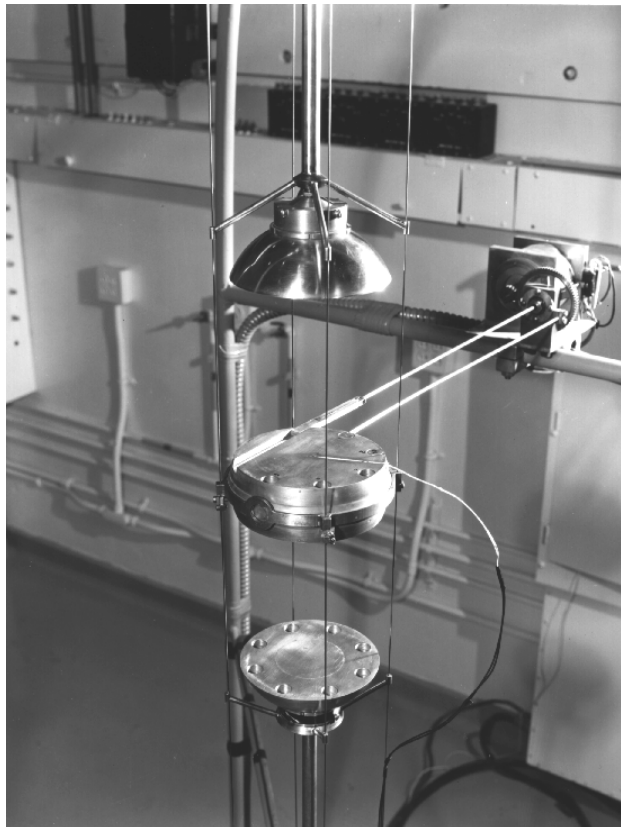


Figura 8. Jezabel en su configuración desmontada o segura

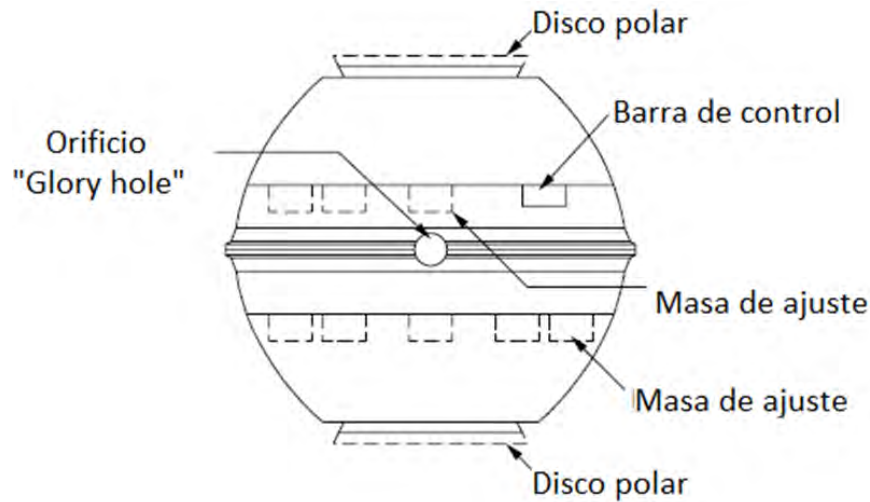


Figura 9. Parte activa del original ²³⁹Pu Jezebel.

La composición promedio de la aleación de plutonio de fase delta utilizada en el ensamble es de 98.98 wt. % de Plutonio y 1.02 wt. % de galio. La esfera es de 17.020 gramos de aleación de plutonio con una densidad de 15.61 g/cm³ y con un radio de 6.3849 cm. Las densidades atómicas se muestran en Tabla VI.

Tabla VI Densidades atómicas

Núclido	Densidad atómica átomos/barn-cm
Ga	1.3752 x 10 ⁻³
²³⁹ Pu	3.7047 x 10 ⁻²
²⁴⁰ Pu	1.7512 x 10 ⁻³
²⁴¹ Pu	1.1674 x 10 ⁻⁴

En la Tabla VII se presenta el resultado obtenido con el código Serpent para el factor de multiplicación y su diferencia en pcm con el resultado experimental reportado; esta diferencia se obtuvo mediante el uso de la expresión indicada anteriormente.

Tabla VII Resultados de Serpent

Experimental	k _{eff} (SERPENT)	ρ (pcm)
1.000	1.00033±0.00157	33

2.4. Simulación del Experimento PU-MET-FAST-008 [6]

Desde diciembre de 1960 hasta noviembre de 1961, se operó un ensamble crítico en el Laboratorio Científico de Los Álamos utilizando una masa esférica de plutonio en fase delta reflejada por torio. El experimento se diseñó para estudiar las propiedades neutrónicas del torio en apoyo de un posible reactor rápido de cría de ^{233}U . La incertidumbre en la masa crítica de este experimento original hizo que el ensamblaje se configurara nuevamente y se tomaran las medidas de reactividad. El promedio de los resultados para dos configuraciones experimentales críticas se utilizó para determinar la masa crítica final. El resultado de este experimento se consideró aceptable como un experimento crítico de referencia.

El experimento se realizó utilizando la máquina de ensamble Thor, una modificación de la máquina del ensamble universal Planet. Las modificaciones fueron al accionamiento de la barra de control y al mecanismo de seguridad. El núcleo de plutonio se construyó de tres partes principales; una tapa polar superior, una tapa polar inferior y una sección central. Juntas, las tres partes se aproximaron a una esfera de 10.59 cm de diámetro cuando se ensamblaron. La tapa polar superior y la sección central permanecieron estacionarias, mientras que la tapa polar inferior estaba ubicada en un elevador neumático. La sección central tenía un orificio (“glory hole”) de 1.27 cm de diámetro. Este orificio se llenaba de plutonio, según fuera necesario. Todas las partes de plutonio fueron recubiertas con níquel de 0.013 cm de espesor. Las diferentes piezas del núcleo se muestran en la Figura 10.

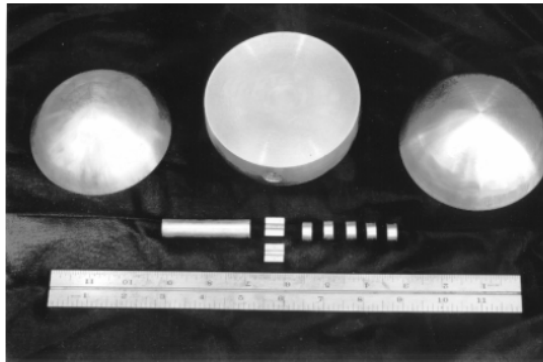


Figura 10. Las diferentes piezas del núcleo

El reflector cilíndrico de torio estaba compuesto por un reflector periférico, el bloque de seguridad superior, el bloque de seguridad inferior y un vernier cilíndrico de control. Estos se combinaron para formar un cilindro de 21.0 pulgadas de diámetro con una altura de 21.0 pulgadas. El bloque de seguridad superior de 6 pulgadas de diámetro rodeaba la tapa polar superior y la sección central encajaba dentro de la parte superior del reflector. El bloque de seguridad inferior de 5 pulgadas de diámetro sostenía la tapa polar inferior y encajaba dentro de la parte inferior del reflector. La barra de control de 3 pulgadas de diámetro entró en la parte inferior a través del bloque de seguridad

inferior directamente debajo de la tapa polar inferior. La barra de control tenía una distancia total de recorrido de 5 pulgadas. El bloque de seguridad superior y el reflector tenían un orificio (“glory hole”) de 1.27 cm que se alineaba con el orificio de relleno de plutonio en la sección central del núcleo. Todas las partes de torio se recubrieron con 0.0013 cm de cromo.

La configuración experimental se muestra en la Figura 11. El ensamblaje se efectuó levantando la tapa polar inferior y el bloque de seguridad inferior dentro del arreglo. En caso de un problema, se realiza un desmontaje rápido retrayendo el bloqueo de seguridad superior e inferior, así como el uso de la barra de control (Referencia 1). Para ajustar la reactividad se utilizaron las piezas de relleno de plutonio, introduciéndolas en el orificio para tal fin.

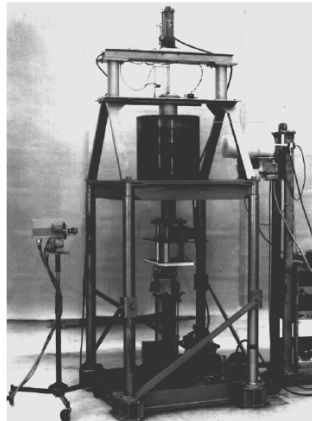


Figura 11. Configuración experimental del arreglo completo.

La composición promedio del núcleo de plutonio está dada por la Tabla VIII. El plutonio también contiene 1.01 wt. % de galio. La densidad del núcleo de plutonio es de 15.29 g/cm³. El reflector es un cilindro cuadrado de 53.34 cm de diámetro, con 100 wt. % de ²³²Th y una densidad de 11.58 g/cm³.

Tabla VIII. Composición del material del combustible.

Isótopo	Wt.%
²³⁹ Pu	93.59
²⁴⁰ Pu	5.10
²⁴¹ Pu	0.30
Galio	1.01

Las densidades isotópicas del combustible y del reflector se muestran en la Tabla IX[4].

Tabla IX Densidades isotópicas

Isótopo	Densidad atómica (átomos/barn-cm)
Núcleo	
²³⁹ Pu	3.6049×10^{-2}
²⁴⁰ Pu	1.9562×10^{-3}
²⁴¹ Pu	1.1459×10^{-4}
Galio	1.3338×10^{-5}
Reflector de Torio	
²³² Th	3.0054×10^{-2}

En las referencias no se menciona la temperatura a la cual se realizó el experimento. En la simulación de este experimento se supuso una temperatura de 293 grados kelvin. El factor de multiplicación experimental reportado fue de 1.000.

En la Tabla X se presenta el resultado obtenido con Serpent para el factor de multiplicación y su diferencia en pcm con el resultado experimental reportado; esta diferencia se obtuvo mediante el uso de la expresión indicada anteriormente.

Tabla X. Resultados de Serpent.

k _{eff} Experimental	k _{eff} (SERPENT)	ρ (pcm)
1.000	0.99937±0.00160	-63

3. CONCLUSIONES

En este trabajo se simularon con el código Monte Carlo Serpent cuatro arreglos experimentales críticos tomados del manual NEA/NSC/DOC/(95) que contiene especificaciones de referencia (benchmark) de seguridad de criticidad, que se han derivado de experimentos realizados en varias instalaciones nucleares en todo el mundo. De acuerdo a las pequeñas diferencias de los resultados obtenidos con el código Serpent del factor de multiplicación con los resultados experimentales reportados en este manual, se mostró que los modelos para simular estos arreglos experimentales fueron correctamente diseñados y que adicionalmente se confirmó la validez y confiabilidad de este código para su uso en cálculos neutrónicos para cualquier arreglo de combustible nuclear.

Los experimentadores calcularon las incertidumbres en el factor de multiplicación efectivo haciendo uso del código TWOTRAN las cuales no se incluyen en este trabajo ya que se desconoce la versión usada para este código. Por otra parte, los experimentadores reportan el factor de multiplicación efectivo medido es igual a la unidad, para los arreglos experimentales simulados en este trabajo.

Entre los resultados que se obtienen con el código Serpent se encuentran las secciones transversales macroscópicas de los materiales que forman los arreglos experimentales, estas se pueden usar como datos de entrada para códigos que resuelven numéricamente las ecuaciones de transporte y difusión de neutrones, para simular con estos códigos los arreglos experimentales mostrados en este trabajo.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco el apoyo del Dr. Edmundo del Valle Gallegos por darme acceso al código Serpent y a sus computadoras, así como a la M. en C. Lucero Arriaga Ramírez y al M. en C. Julian Arturo Duran Gonzalez por su asesoría en el uso del código Serpent. Agradezco también a la Sociedad Nuclear Mexicana por el apoyo brindado para asistir al congreso.

REFERENCIAS

1. OECD/NEA, *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*, Nuclear Energy Agency, París, Francia (2000).
2. Jaakko Leppänen, *Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Coden (User's Manual)*, VTT Technical Research Centre of Finland, Finland, 2004.
3. Yoshinori Miyoshi, Takuya Arakawa, *Critical Arrays of Low-Enriched Pu-239 Fuel Rods with Water-to-Fuel Volume Ratios Ranging from 1.5 to 3.0*, OECD/NEA, París, Francia (2000).
4. Soon S. Kim, Virginia F. Dean, *Water-Moderated U(2.35)O₂ Fuel Rods Reflected by Two Lead, Uranium, or Steel Walls*, OECD/NEA, París, Francia (2000).
5. R. Douglas O'Dell, "Bare Sphere of Plutonium-239 Metal (4.5 at.% ²⁴⁰Pu, 1.02 wt.% Ga),", OECD/NEA, París, Francia (2000).
6. Roger W. Brewer, *Benchmark Critical Experiment of a Thorium Reflected Plutonium Sphere*, OECD/NEA, París, Francia (2000).

Desarrollo de un módulo de quemado para el código de transporte de neutrones “Gemma”

Hirepan Palomares Chávez y Gustavo Alonso Vargas

*Instituto Politécnico Nacional
Avenida Instituto Politécnico Nacional San Pedro Zacatenco, Nueva Industrial Vallejo, Ciudad de
México. C.P. 07738
hirepan.49@gmail.com.; gustavoalonso3@gmail.com*

Samuel Vargas Escamilla

*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México Toluca-La Marquesa s/n, Ocoyoacac, Estado de México. C.P. 52750
Samuel.vargas@inin.gob.mx*

Guillermo Ibarra Reyes

*Comisión Nacional de Seguridad Nuclear y Salvaguardias
Dr. José Ma. Barragán 779, Narvarte, Ciudad de México. C.P. 03020
guillermoibarra@gmail.com*

Resumen

En este trabajo se presenta el desarrollo de un módulo de quemado de combustible para el código Gemma. Como el código Gemma lee secciones eficaces macroscópicas, se le implementó una subrutina para calcular densidades atómicas con lo cual calcula las secciones macroscópicas a partir de una biblioteca de secciones eficaces microscópicas, se le agregaron nuevas tarjetas de entrada que tienen que ver con la densidad de potencia y los pasos de quemado y se generaron bibliotecas de secciones eficaces microscópicas con el código de NJOY utilizando la biblioteca evaluada ENDF. Como un primer desarrollo del código, en la matriz de quemado se considera únicamente el consumo de combustible por absorción de neutrones, sin formación de plutonio y sin la aparición de los productos de fisión. Para la solución de las ecuaciones de quemado en un paso de tiempo se aplica un método predictor-corrector y se resolvieron con el método CRAM (Chevyshev Rational Approximation Method) que tiene buena estabilidad en una región cercana al eje real negativo, lo cual es una característica de las matrices de quemado. Los resultados que se presentan son preliminares, ya que el código aún está en desarrollo, el factor de multiplicación disminuye muy rápido en quemados cortos por lo que faltan incorporar más isotopos a la matriz de quemado que le puedan restar reactividad al sistema como productos de fisión.

1. INTRODUCCIÓN

Gemma es un código que resuelve la ecuación de transporte de neutrones en dos dimensiones por el método de las características y aún está en desarrollo [1], como parte de este desarrollo está la incorporación de un módulo de quemado de combustible. Para hacer un módulo de quemado se necesita un código que proporcione flujos neutronicos (Gemma) para calcular tasas de reacción, además también se necesita un conjunto de bibliotecas de secciones eficaces microscópicas procesadas para actinidos y productos de fisión.

Los cálculos de quemado de combustible son muy importantes, ya que nos permiten seguir el cambio de composición de los materiales con respecto al tiempo así como los parámetros neutrónicos del núcleo de un reactor nuclear. Para llevar a cabo estos cálculos se resuelven las ecuaciones de quemado de Bateman, lo cual consiste en resolver un sistema de ecuaciones diferenciales lineales mediante la solución de una matriz exponencial, por lo tanto se necesita un método que resuelva este conjunto de ecuaciones de manera eficiente con un tiempo de cómputo reducido.

La composición de los materiales cambia durante el paso de tiempo y las tasas de reacción también cambien en este intervalo. Para hacer un cálculo de quemado se considera que las tasas de reacción calculadas al inicio del paso de tiempo permanecen constantes, por lo tanto se necesita una metodología que disminuya el error de cálculo que introduce esta consideración.

En el módulo desarrollado en éste trabajo se resuelven las ecuaciones de Bateman considerando las tasas de reacción constantes, aplicando un método predictor corrector junto con el método CRAM. Las bibliotecas de secciones eficaces microscópicas de los isótopos del sistema que se tomaron en consideración en la matriz de quemado se procesaron desde la biblioteca evaluada ENDF en espectro continuo utilizando el código NJOY para obtener las bibliotecas en forma de multigrupo[2].

2. CÁLCULOS DE QUEMADO

El propósito de los cálculos de quemado es obtener el cambio neto del contenido del isótopo fisil del combustible en un sistema nuclear para un tiempo determinado de operación. Estos cálculos recaen en dos ecuaciones principales: la ecuación de transporte de neutrones, la cual esencialmente, es un balance de neutrones y las ecuaciones de quemado de Bateman que expresan el cambio de composición para un isótopo en específico, debido a las reacciones nucleares inducidas por neutrones.

La principal suposición que se hace para resolver las ecuaciones de quemado en un paso de tiempo es que la distribución de neutrones permanece constante en un paso de tiempo, lo cual significa que las tasas de reacción con neutrones también permanecen constantes. Para un paso de tiempo se resuelve la ecuación de transporte, obteniendo las tasas de reacción y posteriormente se obtiene el cambio de densidades atómicas de los isótopos por la solución de las ecuaciones de quemado de Bateman. Este método de cálculo es refinado mediante la aplicación de un método predictor-

corrector.

2.1. Ecuación de Transporte de Neutrones

La ecuación de transporte de neutrones independiente del tiempo en su forma de eigenvalor y para multigrupo es [3]:

$$\vec{\Omega} \nabla \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_{r,g}(\vec{r}) \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} \Sigma_{s,g's'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \frac{\lambda_g(\vec{r})}{4\pi k} \int_{4\pi} \nu \Sigma_{f,g'}(\vec{r}) \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (1)$$

Usando las siguientes secciones eficaces promediadas en energía:

$$\Sigma_{r,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \Sigma_r(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE} \quad (2)$$

$$\Sigma_{s,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \Sigma_s(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE} \quad (3)$$

$$\Sigma_{s,g's'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \frac{\int_{E_{g'}}^{E_{g'+1}} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE' dE}{\int_{E_{g'}}^{E_{g'+1}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE'} \quad (4)$$

$$(5)$$

Para los flujos escalares que se utilizan en las tasas de reacción:

$$\phi(\vec{r}) = \int_{4\pi} \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (6)$$

2.1.1. Ecuaciones de Quemado

El cambio de densidad atómica de un núcleo "i" está dado por las ecuaciones de quemado de Bateman[4]:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \gamma_{ji} \sigma_{f,j} N_j \phi + \sigma_{c,i-1} N_{i-1} \phi + \sum_k \lambda_{ki} N_k - (\sigma_{a,i} \phi + \lambda_i) N_i \quad i = 1, \dots, I, \quad (7)$$

las unidades de cada una de las variables de la ecuación de Bateman se muestran en la Tabla I. Las ecuaciones de quemado resultan en un sistema de I ecuaciones diferenciales lineales ordinarias, si se toma a \vec{N} como un vector que contiene a todos los núclidos del sistema, se puede escribir en notación matricial:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = A\vec{N} \quad (8)$$

donde la solución es:

$$\vec{N} = \vec{N}_0 e^{At} \quad (9)$$

Tabla I: Variables de la Ecuación de quemado de Bateman.

Variable	Descripción	Unidades
N_i	Densidad atómica del núclido i	cm^{-3}
β_{ij}	Yield de fisión para el núclido j a partir de la fisión del núclido i	--
$\sigma_{f,j}$	Sección eficaz microscópica de fisión del núclido j	cm^2
$\sigma_{a,i}$	Sección eficaz microscópica de absorción del núclido i	cm^2
$\sigma_{c,i-1}$	Sección eficaz microscópica de capture del núclido $i-1$	cm^2
ϕ	Flujo escalar de neutrones	$cm^{-2}s^{-1}$
λ_{ki}	Constante de decaimiento del núclido k al núclido i	s^{-1}
λ_i	Constante de decaimiento del núclido i	s^{-1}

Para encontrar la solución se debe calcular la matriz exponencial (e^{At}). La matriz de quemado A tiene $I \times I$ elementos, donde cada uno de ellos denota una tasa de reacción. Si se asume que los núclidos están ordenados respecto a su masa atómica, la matriz de quemado tiene la forma que se muestra en la Figura 1, donde los elementos diferentes de cero se concentran cerca de la diagonal principal, lo cual representa las diferentes tasas de reacción y en las ultimas columnas del lado derecho se concentran las tasas de aparición para los productos de fisión.

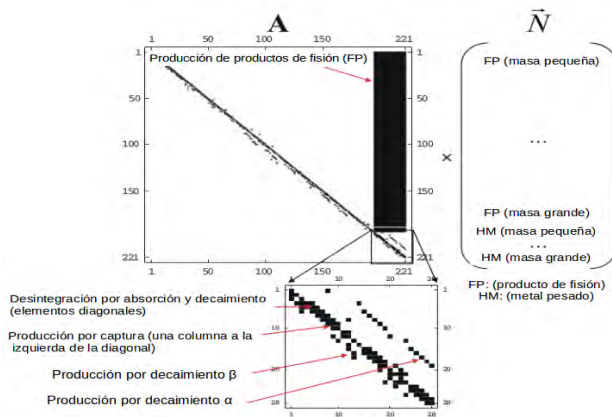


Figura 1: Forma de la matriz de quemado para un ordenamiento de los núclidos tomando en cuenta su masa atómica (adaptación al español de la referencia [1])

2.2. Método de solución para el Quemado

Para incorporar el módulo de quemado al código Gemma\cite{reyes2018gemma} se necesitó hacer nuevas tarjetas en el archivo de entrada, una de ellas es *depletion*, que representa los pasos de quemado en (MWd/TU) y la otra *power density* la cuál es la densidad de potencia del problema en (W/g-combustible). El uso de estas tarjetas en el archivo de entrada es como sigue:

```
depletion 0 0.1 0.5 1 3 5 10 15 30
```

```
power density 37
```

Para el tratamiento de la geometría, Gemma divide una celda en distintas regiones, cada una con su material correspondiente. En el caso de un pin, el nivel de refinamiento se indica mediante la siguiente tarjeta:

```
refine pin [pin-id] [n] [inner] [outer]
```

donde [n] es el factor de división de la celda donde el número de sectores en que se divide es 2^n , [inner] es el número de anillos internos agregados y [outer] el número de anillos externos agregados. Por ejemplo si tuvieramos la tarjeta “*refine pin 1 3 2 1*”, el pin 1 se dividiría en las regiones que se muestran en la Figura 2.

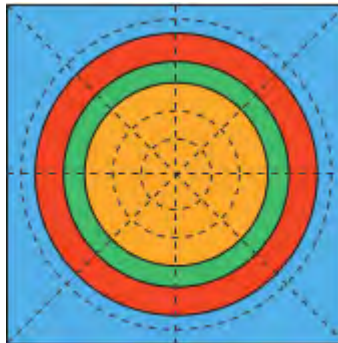


Figura 2: Refinamiento de una celda unitaria en el código Gemma

Después de hacer el cálculo de transporte, Gemma proporciona los flujos neutrónicos escalares en cada una de las regiones y para cada grupo de energía, ahora bien, para el quemado únicamente se toman en cuenta las regiones que contienen combustible por lo que se tienen tasas de reacción diferentes en cada región de combustible y diferente grado de quemado, entonces la tasa para una reacción x y un núclido i será:

$$R_{ntf} = \sum_{r=1}^{R_F} \sum_{g=1}^G \sigma_{f,nt,g} \phi_{r,g} \quad (10)$$

donde R_F es el número de regiones de combustible. Al resolver las ecuaciones de quemado para cada región de combustible se tendrán diferentes resultados de densidades atómicas para cada región en particular, por lo que para hacer el siguiente cálculo de criticidad se homogenizan las densidades atómicas en todas las regiones de combustible que pertenezcan al mismo elemento utilizando la ecuación (11).

$$N_i = \frac{\sum_r N_i r V_r}{\sum_r V_r} \quad (11)$$

donde V_r es el volumen de la región generada por la discretización espacial. En Gemma los flujos están normalizados a la fuente total de fisión es igual a 1, es decir:

$$\|F\phi\|_1 = \sum_r V_r \sum_g \nu \Sigma_{f,t,g} \phi_{r,g} \quad (12)$$

donde F representa el componente de las fisiones en la ecuación de transporte. Dado lo anterior, se necesita renormalizar los flujos, tal que la densidad de potencia promedio se igual a la de la tarjeta de entrada. Para esto, se calcula un factor de renormalización por potencia f_p mediante un proceso iterativo (ver Figura 3) y esta dado por las Ecuaciones (13), (14), (15) y (16). Para la primera iteración se calcula f_p inicial dado por la Ecuación (17), la integral de la Ecuación (16) se obtiene al evaluar la Ecuación (19), las variables de las Ecuaciones (13), (14), (15), (16) y (17) se describen en la Tabla II.

$$B = 86400 \cdot \Delta E_n \sum_r^{R_F} V_r \rho_r H_r \quad (13)$$

$$H_r = 1 - \sum_m Y_{r,m} \quad (14)$$

$$(15)$$

$$B = F_p \sum_r^{R_F} V_r \sum_m \kappa_m \int_0^{t^{n+1}} N_{m,r}(t) dt \sum_g \sigma_{f,m,r,g} \phi_{r,g} \quad (16)$$

$$f_p = \frac{P_d \sum_r^{R_F} \rho_r V_r}{B} \quad (17)$$

En la metodología de refinar el cálculo con la aplicación de un método predictor-corrector primeramente se hace un cálculo de criticidad para obtener a $keff_n$ y ϕ_n para $n = 0$, una vez hecho el primer cálculo de criticidad se resuelve la Ecuación (19) para obtener el resultado predictor, es decir, $N_{n+1}(p)$. Seguidamente se actualizan las secciones eficaces macroscópicas a $XS_{n+1}(p)$, después se hace un segundo cálculo de criticidad para obtener $keff_{n+1}(p)$ y $\phi_{n+1}(p)$; en seguida se resuelven las ecuaciones de quemado con la Ecuación (19) con $\phi_{n+1}(p)$ para obtener el resultado corrector:

$N_{n+1}(c)$. Finalmente se obtienen las densidades del siguiente paso de tiempo (nuevas condiciones iniciales) promediando los resultados corrector y predictor obtenidos previamente:

$$N_{n+1} = \frac{N_{n+1}(P) + N_{n+1}(C)}{2} \quad (18)$$

Tabla I: Variables de las Ecuaciones (13), (14), (15), (16) y (17).

Variable	Descripción	Unidades
B	Tamaño del paso de quemado en unidades de energía	Joules
ΔE_n	Tamaño del paso de quemado n	Mwd/THM
ρ_r	Densidad másica de la región r	g/cm ³
V_r	Volumen de la región r	cm ³
H_r	Fracción masa de metal pesado en la región r	--
$X_{r,m}$	Fracción masa del núclido fisionable m' en la región r	--
Δt_n	Tamaño del paso de quemado	s
P_d	Densidad de potencia dada en la tarjeta de entrada "power density"	W/g-fuel
K_m	Energía liberada por fisión del núclido fisionable m	J
P_d	Densidad atómica del núclido fisionable m en la región r	átomo-cm ³
$\sigma_{f,m,g}$	Sección eficaz microscópica de fisión para el isótopo m en la región r para el grupo de energía g	cm ²
$\phi_{n,g}$	Flujo escalar de neutrones en la región r para el grupo de energía g	cm ⁻² s ⁻¹

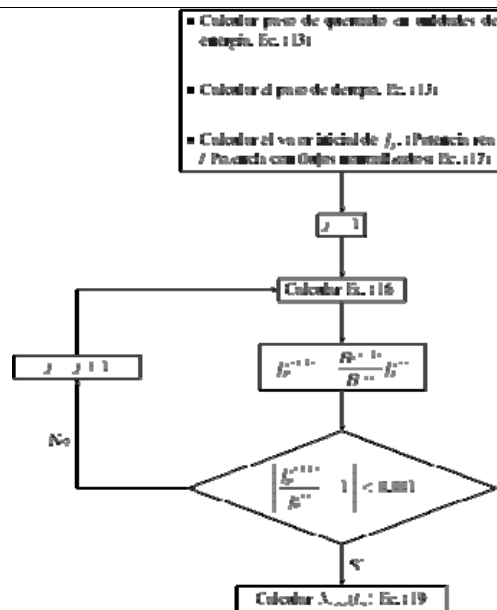


Figura 3: Diagrama de flujo de datos para un paso de quemado.

Adicionalmente, se vuelven a actualizar las secciones eficaces para repetir los pasos anteriores. Debido a la naturaleza de la matriz de quemado, es decir, su alto grado de dispersión y la gran diferencia entre la magnitud de un elemento a otro, por ejemplo la tasa de decaimiento de un núclido de baja vida media comparado con la tasa de reacción de otro, puede conducir a eigenvalores de una magnitud arbitrariamente grande. Se ha calculado el espectro de la matriz de quemado para una gran variedad de problemas y los eigenvalores se concentran en una región cercana al eje real negativo [5].

Una metodología que proporciona una solución robusta y precisa para las ecuaciones de quemado implica aproximar a \bar{N} mediante una función racional. Dentro de las opciones está la aproximación CRAM (Chevyshev Rational Approximation Method) en donde se requieren tiempos de cómputo más bajos [6]. La aproximación CRAM[7] está dada por la Ecuación (19):

$$\bar{N}(\Delta t) = \alpha_0 \bar{N}_0 + 2\Re\left[\sum_{i=1}^k \alpha_i (A\Delta t - i\theta_i)^{-1} \bar{N}_0\right] \quad (19)$$

donde α_i y θ_i son los residuos y polos respectivamente de la función racional y k es el orden de la aproximación racional. Para un orden de $k=16$, estos valores están dados en la Tabla III. La solución del método CRAM (de orden 16) involucra el cálculo de 8 matrices inversas, es decir, $(A\Delta t - i\theta_i)^{-1}$, con i dentro de $[1,k]$. Regularmente como las matrices de quemado son bastante dispersas y dependiendo de las bibliotecas de secciones eficaces procesadas, puede llegar a tener dimensiones bastante grandes, computacionalmente hablando i.e. 300x300, 1000x1000, NxN. Entonces para resolver calcular la matriz inversa se utilizara el método de factorización en LU, que involucra la solución de 2N sistemas triangulares de ecuaciones lineales:

$$LY = I \quad (20)$$

$$UX = Y \quad (21)$$

donde $X = A^{-1}$. El algoritmo de cálculo para desarrollar el código será entonces el que se muestra en el Algoritmo (1). En cada paso de quemado proporcionado por el usuario, se hace un primer cálculo de criticidad utilizando las secciones eficaces macroscópicas al principio del paso de tiempo, con este cálculo de criticidad se obtienen los flujos escalares multigrupo de neutrones para cada región. Después se calculan las tasas de reacción de absorción para generar una matriz de quemado en cada región de combustible y se resuelve para obtener las densidades atómicas al final del paso de tiempo, siendo éste el cálculo predictor. Enseguida se actualizan las secciones eficaces macroscópicas con las densidades atómicas obtenidas en el cálculo predictor para hacer el segundo cálculo de criticidad y obtener los flujos escalares multigrupo de neutrones. Con los flujos de neutrones obtenidos en el segundo cálculo de criticidad se vuelven a calcular las tasas de reacción de absorción para construir nuevamente una matriz de quemado, la cual se resuelve para obtener las densidades atómicas del

cálculo corrector. Finalmente se promedian los resultados predictor y corrector para actualizar las secciones eficaces macroscópicas que se utilizarán en el siguiente paso de tiempo.

Tabla III: Coeficientes utilizados en el Método CRAM

Coeficiente	Parte Real	Parte Imaginaria
θ_1	$-1.084\ 391\ 707\ 869\ 698\ 784\ 4 \times 10^1$	$+1.927\ 744\ 616\ 718\ 165\ 104\ 9 \times 10^1$
θ_2	$-5.264\ 971\ 343\ 442\ 646\ 833\ 9 \times 10^0$	$+1.622\ 022\ 147\ 316\ 792\ 839\ 4 \times 10^1$
θ_3	$+5.948\ 152\ 268\ 951\ 177\ 212\ 8 \times 10^0$	$+3.587\ 457\ 362\ 018\ 322\ 104\ 5 \times 10^0$
θ_4	$+3.509\ 103\ 608\ 414\ 918\ 085\ 1 \times 10^0$	$+8.436\ 198\ 985\ 884\ 374\ 224\ 0 \times 10^0$
θ_5	$+6.416\ 177\ 699\ 099\ 434\ 583\ 7 \times 10^0$	$+1.194\ 122\ 393\ 370\ 138\ 590\ 6 \times 10^0$
θ_6	$+1.419\ 375\ 897\ 185\ 666\ 035\ 6 \times 10^0$	$+1.092\ 536\ 348\ 449\ 672\ 267\ 7 \times 10^1$
θ_7	$+4.993\ 174\ 737\ 717\ 996\ 691\ 8 \times 10^0$	$+5.996\ 881\ 713\ 603\ 942\ 287\ 7 \times 10^0$
θ_8	$-1.413\ 928\ 462\ 488\ 886\ 150\ 8 \times 10^0$	$+1.349\ 772\ 569\ 889\ 274\ 542\ 7 \times 10^1$
α_1	$-5.090\ 152\ 186\ 522\ 492\ 032\ 6 \times 10^{-7}$	$-2.422\ 001\ 765\ 285\ 228\ 906\ 4 \times 10^{-5}$
α_2	$+2.115\ 174\ 218\ 246\ 603\ 128\ 6 \times 10^{-4}$	$+4.389\ 296\ 964\ 738\ 067\ 206\ 9 \times 10^{-3}$
α_3	$+1.133\ 977\ 517\ 848\ 393\ 006\ 3 \times 10^2$	$+1.019\ 472\ 170\ 421\ 585\ 701\ 7 \times 10^2$
α_4	$+1.505\ 958\ 527\ 002\ 346\ 691\ 9 \times 10^1$	$-5.751\ 405\ 277\ 642\ 182\ 234\ 4 \times 10^0$
α_5	$-6.450\ 087\ 802\ 553\ 964\ 877\ 5 \times 10^1$	$-2.245\ 944\ 076\ 265\ 209\ 616\ 8 \times 10^2$
α_6	$-1.479\ 300\ 711\ 355\ 799\ 880\ 0 \times 10^0$	$+1.768\ 658\ 832\ 378\ 293\ 688\ 2 \times 10^0$
α_7	$-6.251\ 839\ 246\ 320\ 791\ 687\ 6 \times 10^1$	$-1.119\ 039\ 109\ 428\ 322\ 831\ 3 \times 10^1$
α_8	$+4.102\ 313\ 683\ 541\ 002\ 065\ 1 \times 10^{-2}$	$-1.574\ 346\ 617\ 345\ 546\ 706\ 1 \times 10^{-1}$
α_0	$+2.124\ 853\ 710\ 495\ 223\ 632\ 1 \times 10^{-16}$	$+0.000\ 000\ 000\ 000\ 000\ 000\ 0 \times 10^0$

Algoritmo 1 Solución de un paso de quemado mediante la aplicación de un método predictor-corrector

Foreach *step* in *depletion* **do**

Calc $k_{eff_n} \rightarrow \varphi_n$ with N_n // Primer cálculo de criticidad

Calc $f_p(p)$ // Cálculo predictor de f_p

Foreach r in R_f **do** // Para todas las regiones de combustible

buildMatrix(φ_n, σ_x) // Construir la matriz de quemado

solveStep(N_n, φ_n): $N_{n+1}(p)$	// Solucionar CRAM predictor
End for	
updateXS($N_{n+1}(p)$)	// Actualizar XS con el resultado predictor
Calc keff $_{n+1}(p) \rightarrow \varphi_{n+1}(p)$	// Cálculo de criticidad predictor
Calc $f_p(c)$	// Cálculo corrector de f_p
Foreach r in R_f do	
buildMatrix($\varphi_{n+1}(p), \sigma_x$)	// Construir la matriz de quemado
solveStep(N_n, φ_{n+1}): $N_{n+1}(c)$	// Solucionar CRAM corrector
End for	
$N_{n+1} = [N_{n+1}(p) + N_{n+1}(c)]/2$	// Promediar predictor y corrector
updateXS($N_{n+1}(p)$)	// Actualizar XS con el resultado promediado
End for	

2.3. Cambios de las Tarjetas de Entrada

Como ya se mencionó, anteriormente el usuario le tenía que proveer las secciones eficaces manualmente al código, por ejemplo para un problema de 4 grupos de energía el uso de la tarjeta de materiales donde se incluía la sección macroscópica total, la nu Sigma de fisión macroscópica, el espectro de fisión χ_g y la matriz de dispersión macroscópica, era la siguiente:

```
material UO2
Σt,1 Σt,2 Σt,3 Σt,4
νΣf,1 νΣf,2 νΣf,3 νΣf,4
χ4 χ3 χ2 χ1
Σs,1→1 Σs,1→2 Σs,1→3 Σs,1→4
Σs,2→1 Σs,2→2 Σs,2→3 Σs,2→4
Σs,3→1 Σs,3→2 Σs,3→3 Σs,3→4
Σs,4→1 Σs,4→2 Σs,4→3 Σs,4→4
```

Ahora mediante la tarjeta del material se indican los diferentes isótopos que contiene el material con su respectiva densidad mediante una nomenclatura ZAIID. Al leer estos isótopos, busca su biblioteca de secciones eficaces dentro de un directorio que contiene todas las bibliotecas que se han procesado con el código NJOY[2], para después calcular las secciones macroscópicas. Se implementaron dos opciones para proveer la composición del material:

1. Proporcionar las densidades atómicas de los diferentes isótopos. Ejemplo:

```
material <material-id>
<ZAIID1>.<temperatura id> <densidad atómica 1>
```


<ZAID2>. <temperatura id> <densidad atómica 2>

2. Después del identificador del material se especifica la densidad másica y seguido de cada isotopo se especifica el porcentaje en masa. Ejemplo:

material <material-id>

<ZAID1>. <temperatura id> <densidad atómica 1>

<ZAID2>. <temperatura id> <densidad atómica 2>

Las unidades con las que trabaja Gemma son, para densidad másica (gr cm^{-3}) y para densidad atómica ($\text{átomo barn}^{-1} \text{cm}^{-1}$). Para iniciar el desarrollo del código de quemado se tomó en cuenta una matriz de dimensiones 2x2 donde se considera unicamente las tazas de absorción del U^{238} y U^{235} . Por lo tanto la matriz de quemado tomó la siguiente forma:

$$A = \begin{bmatrix} -\sigma_{a,238}^{U^{238}} \phi_{ne} & 0 \\ 0 & -\sigma_{a,235}^{U^{235}} \phi_{ne} \end{bmatrix} \quad (22)$$

3. RESULTADOS

Para probar el código se resolvió un problema de referencia para reactores LWR con combustible de nueva generación [8]. El problema consiste de un sólo elemento de combustible con UO2 y Zirconio natural como encamisado, la geometría y la composición de los materiales se muestra en las Tablas IV y V respectivamente. Los resultados del problema se compararon con el código Serpent[9], la comparación de keff se muestra en la Figura 4 y en la Tabla VI y la comparación de las densidades atómicas se muestra en la Figura 5 y la Tabla VII.

Para este problema se utilizaron bibliotecas de secciones eficaces que fueron procesadas con el código NJOY en el formato WIMS, se utilizaron 69 grupos de energía con 13 grupos rápidos, 14 grupos en la región de resonancia y 42 grupos térmicos.

Tabla IV: Geometría del problema.

Descripción	Cm
Pitch	1.265
Diámetro de la pastilla de combustible	0.824
Diámetro interno del encamisado	0.824
Diámetro externo del encamisado	0.952

Tabla V: Composición de los materiales utilizados en el benchmark

Combustible	
Enriquecimiento de ^{235}U	6.5 wt%
Densidad másica	10.36 gr/cm ³
Temperatura	900 K
Densidades atómicas (barn ⁻¹ cm ⁻¹)	
^{235}U	1.5122E-03
^{238}U	2.1477E-02
^{16}O	4.5945E-02
Encamisado	
Densidades atómicas (barn ⁻¹ cm ⁻¹)	
Zr-nat	1.5122E-03
Moderador	
Densidad másica	0.997 gr/cm ⁻³
Temperatura	300 K
Fracción Masa	
^1H	0.11191
^{16}O	0.88809

Tabla VI: Tabla de resultados de la Figura 4.

Mwd/THM	Gemma	Serpent
0	1.57981	1.59786
10	1.57665	1.49252
25	1.57208	1.47542
50	1.56324	1.46364
75	1.55307	1.46349
100	1.54129	1.45893
125	1.52751	1.46240
150	1.51123	1.46059
175	1.49176	1.45961
200	1.46817	1.45893
225	1.43904	1.46026
250	1.40235	1.45565

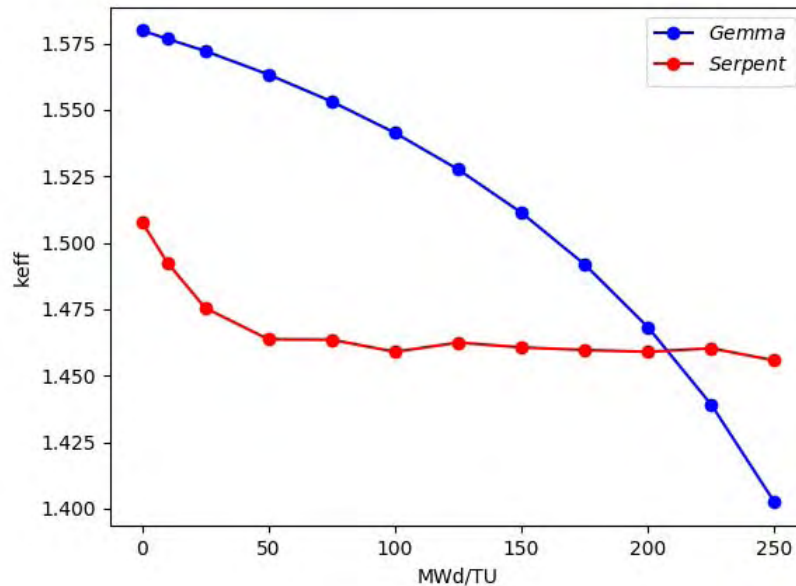


Figura 4: Factor de multiplicación efectiva como función del quemado

Tabla VII: Tabla de resultados de la Figura 5.

Mwd/THM	Gemma		Serpent	
	$N^{U^{235}}$ (at/b·cm)	$N^{U^{238}}$ (at/b·cm)	$N^{U^{235}}$ (at/b·cm)	$N^{U^{238}}$ (at/b·cm)
0	0.0015122	0.0214770	0.0015122	0.0214770
10	0.0014719	0.0214548	0.0015117	0.0214746
25	0.0014318	0.0214326	0.0015113	0.0214745
50	0.0013125	0.0213652	0.0015106	0.0214742
75	0.0012337	0.0213197	0.0015098	0.0214740
100	0.0011166	0.0212505	0.0015091	0.0214738
125	0.0010394	0.0212036	0.0015084	0.0214735
150	0.0009246	0.0211319	0.0015077	0.0214733
175	0.0008489	0.0210830	0.0015070	0.0214731
200	0.0007365	0.0210076	0.0015063	0.0214728
225	0.0006624	0.0209556	0.0015056	0.0214726
250	0.0005525	0.0208742	0.0015048	0.0214723

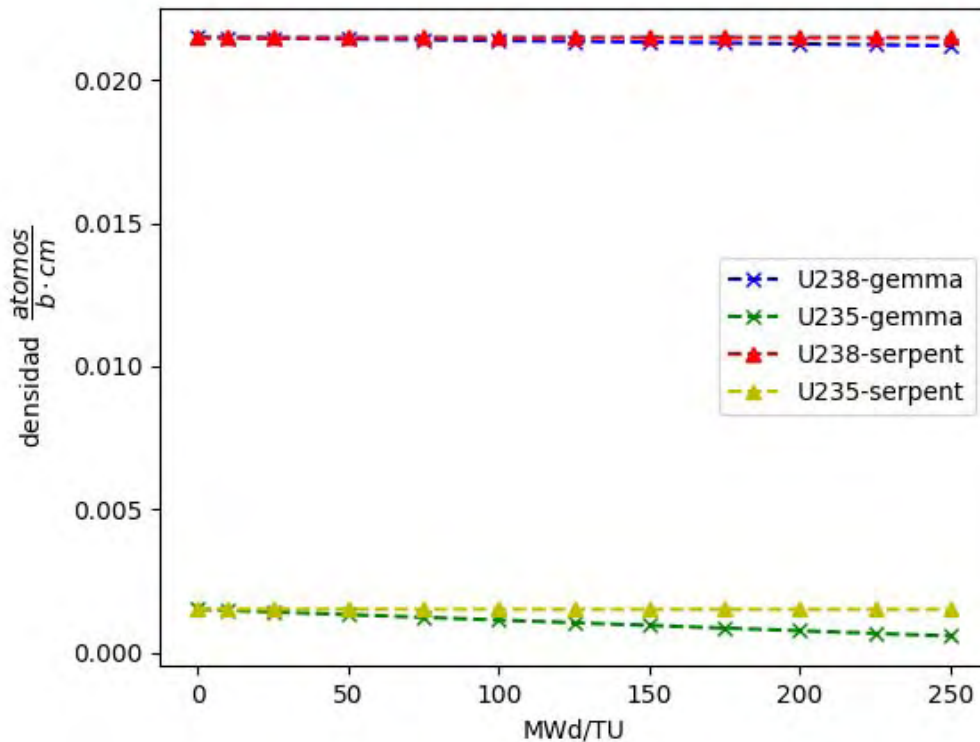


Figura 5: Densidad atómica en función del quemado

4. CONCLUSIONES

En la Figura 4 el valor calculado para la k_{eff} con el código Gemma sigue una tendencia de disminuir, a comparación del código Serpent que tiende a permanecer constante después de un quemado de 50 MWd/THM; igualmente con las densidades atómicas, en el código Gemma tienden a disminuir y en el código Serpent tienden a permanecer constantes para este grado de quemado (250 MWd/THM). Si bien son quemados muy cortos (un reactor comercial alcanza quemados de alrededor 60,000 - 70,000 MWd/THM) la k_{eff} no debería de disminuir tan rápido como se calculó con el código Gemma, esto se le atribuye a que en la matriz de quemado que se resuelve en Gemma únicamente se consideran el U235 y el U238, además de que no se están considerando formación de actinidos ni productos de fisión que le pueden restar reactividad al sistema.

Sin embargo el código de quemado aún se encuentra en pleno desarrollo, estos fueron los primeros resultados obtenidos. Para continuar con la implementación del quemado, se incorporarán a la matriz nuevas cadenas de quemado, así como nuevos isótopos para poder proceder con la validación del código.

REFERENCIAS

1. Guillermo Ibarra Reyes y col. “Gemma: Development of a two-dimensional neutron transport code with the method of characteristics”. En: *Annals of Nuclear Energy*, **115**, p. 367 – 376 (2018).
2. Robert Macfarlane y col. “The NJOY Nuclear Data Precessing System, Version 2016”, (2017). DOI: 10.2172/1338791.
3. E. E. Lewis y W.F. Miller. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley & Sons, (1984).
4. D. Knott y A. Yamamoto. “*Lattice physics computations – Handbook of Nuclear Engineering*”, Editado por D. G. Cacuci, Vol. II Reactor Design. Springer Science, (2010), p. 913-1239.
5. Maria Pusa y Jaakko Leppänen. “Computing the matrix exponential in burnup calculations”, En: *Nuclear Science and engineering* **164.2**, p. 140 – 150 (2010).
6. AE Isotalo y PA Aarnio. “Comparison of depletion algorithms for large systems of nuclides”. En *Annals of Nuclear Energy* **38.2-3** (2011), p. 261- 268.
7. Maria Pusa. “Rational approximations to the matrix exponential in burnup calculations”. En: *Nuclear Science and Engineering* **169.2**, p. 155 – 167 (2011).
8. Akio Yamamoto y col. “Benchmark problem suite for reactor physics study of LWR next generation fuels”. En: *Journal of Nuclear Science and Technology*, **39.8**, p. 900 – 912.
9. Jaakko Leppänen. “Serpent – a continuous-energy Monte Carlo reactor physics burnup calculation code”. En: *VTT Technical Research Centre of Finland* Vol. **4** (2013).

Validation exercise of the domestic code AZNHEX through implementation of macroscopic neutron cross-sections generated by SERPENT

Lucero Arriaga-Ramirez¹, Roberto Lopez-Solis², Armando Gomez-Torres^{2},
and Edmundo del-Valle-Gallegos¹*

¹*Instituto Politécnico Nacional – Escuela Superior de Física y Matemáticas,
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n Edificio 9, Delegación Gustavo A. Madero, CDMX
guten_tag_04@hotmail.com; edmundo.delvalle@gmail.com*

²*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares,
Carretera México - Toluca La Marquesa s/n, Ocoyoacac, Estado de México C.P. 52750, Mexico
rcarlos.lope@gmail.com; armando.gomez@inin.gob.mx*

Abstract

In this work, an exercise for validation of the domestic deterministic code AZNHEX is described. The AZNHEX code is a deterministic code, part of the AZTLAN Platform, a set of nuclear codes for nuclear reactor analysis and design, being currently under development for different institutions in Mexico. The code AZNHEX is aimed to solve the neutron diffusion equation in hexagonal geometry, making it suitable for Fast Reactor and VVER Reactor analysis. The reference core chosen for this exercise is the Chinese Experimental Fast Reactor, a 65 MWth pool-type sodium-cooled fast reactor developed by the China Institute of Atomic Energy. The exercise consists of the simulation of every fueling step, for a total of 16 steps, ten subcritical and six critical. The methodology followed was to simulate every core configuration in the stochastic code SERPENT for macroscopic cross-section generation; these cross-sections were input in the deterministic code AZNHEX in each full core model. The keff results for both codes were compared among each other with relatively small differences; these results are a step forward in setting the AZNHEX code and the AZTLAN Platform in general as a reliable tool for nuclear analysis. Further exercises will include control rod worth measurements and reactivity coefficients calculations.

1. INTRODUCTION

The AZTLAN[1] Platform project is a Mexican national initiative led by the National Institute for Nuclear Research, which brings together the nuclear institutions of higher education in Mexico: the National Polytechnic Institute, the National Autonomous University of Mexico and the Autonomous Metropolitan University, in an effort to take a significant step towards positioning Mexico, in the medium term, in a competitive international level on nuclear reactors analysis and modeling software.

The core of the AZTLAN Mexican reactor analysis platform consists of a thermo-hydraulic code (AZTHECA), a neutron transport code (AZTRAN) and two neutron diffusion codes, namely AZKIND and AZNHEX. These codes are currently in the testing phase by simulating a variety of fuel assemblies and nuclear reactor cores to compare and verify their results with those obtained by codes globally used in the nuclear community such as SERPENT, CASMO/SIMULATE, MCNP, and others.

AZNHEX is a novel 3D neutron diffusion code for nuclear core analysis with hexagonal-z geometry, and it is part of the Mexican project on the development of domestic nuclear analysis software "AZTLAN Platform". Currently, the code is under development, but some important steps have been made in the verification procedure of the code. A composite nodal method for prismatic hexagons has been developed and applied to solve the neutron diffusion equations for cores built by the union, side by side, of hexagonal prisms. A Galerkin finite element method is used starting by the strong form to get the corresponding weak form.

The verification and validation process [2] of the AZNHEX code started with some academic exercises. In a further study [3], to move toward much more realistic scenarios the OECD/NEA UAM Sodium Fast Reactor Benchmark was used together with the SERPENT code for further verification. One of the exercises of the OECD/NEA Sodium Fast Reactor Benchmark is focused on the neutronic characterization of global parameters (k_{eff} , sodium void worth, Doppler, etc.) and feedback coefficient evaluation. This Benchmark was intended to confirm the ability of participants and their neutronic codes to provide generally consistent results when analyzing SFR core characteristics and thus, it represents a very good exercise for the AZNHEX development team.

In the exercise presented in this paper, a new benchmark was treated, the Chinese Experimental Fast Reactor [4] was chosen for this exercise due to the availability of its experimental data from the China Institute of Atomic Energy. More information on this benchmark will be presented in the next section.

2. DESCRIPTION OF THE BENCHMARK CORE

China Experimental Fast Reactor (CEFR) is the first fast reactor of China, which reached its first criticality in 2010. It is in the China Institute of Atomic Energy, at a southwest suburb of Beijing. It is a 65MWth pool-type sodium-cooled fast-spectrum reactor. The first loading of the reactor core was uranium dioxide fuel, with the enrichment of U-235 at 64.4%.

Table I and Figure 1 show the main characteristics of the core and a cross section of the whole core under full fueling state.

Under non-fueled state the fuel sub-assemblies are replaced by mock-up fuel, which are essentially fuel sub-assemblies without the fuel, these mock-up fuels are then replaced by real fuel sub-assemblies in every fueling step. Ten subcritical fueling steps were simulated in which the core had 24, 40, 46, 55, 61, 65, 68, 69, 70, and 71 fuel Sub-assemblies (SA) inserted.

Table I. Main parameters of the CEFR nuclear core

Parameter	Value
Thermal/electric power, MW _{th} /MW _e	65/20
Designed life, year	30
Maximum burn-up, MWd/t	60000
Maximum neutron flux, cm ⁻² s ⁻¹	3.2E15
Refueling period, days	80
Diameter/height of main vessel, m	8.0/12.2
Covering gas pressure, MPa	0.005
Core inlet/outlet temperature (full power), °C	360/530
Equivalent diameter/height of active core (fuel region), cm	60/45
SA lattice pitch (installation temperature), mm	61.0
Enrichment of U-235 of fuel, %	64.4
Number of fuels SAs	79
Total mass of UO ₂ /U in fuel, kg	417/367
Total mass of UO ₂ /U in blanket, kg	356/313
Total mass of B ₄ C in control SAs, kg	6.9
Total mass of B ₄ C in boron shielding SAs, kg	552

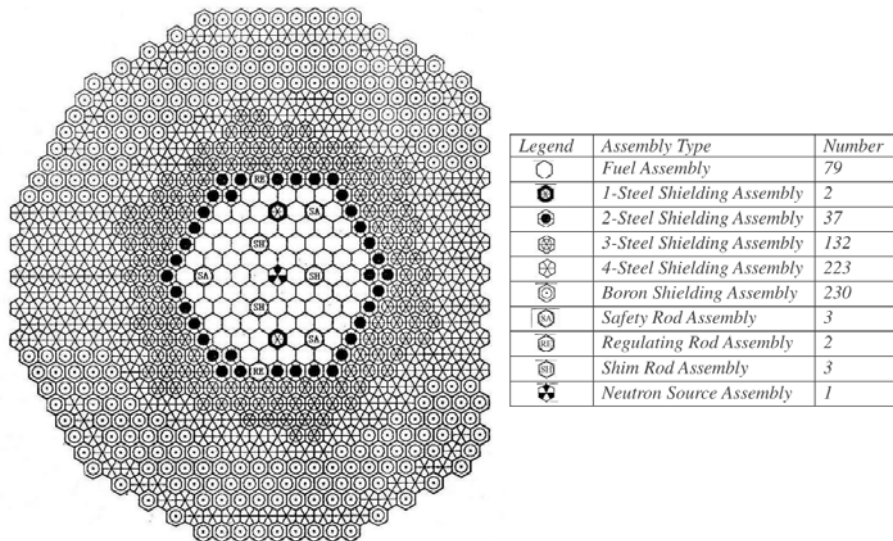


Figure 1. Cross-section of the fully fueled CEFR core

After the fuel sub-assembly number 72, the core reaches supercriticality and one of the control rods is inserted at different heights until the lower end of the control section which is 70 mm above the

lower end of the fuel region, where criticality is reached.

Every fueling step of the core must be modeled individually in both the stochastic code SERPENT and the deterministic code AZNHEX for a fair comparison.

3. DESCRIPTION OF THE CODES

In this section the codes used for this work will be briefly described, for a more detailed description the reader is encouraged to follow the mentioned references.

3.1. SERPENT

SERPENT is a three-dimensional continuous-energy Monte Carlo reactor physics code with burnup capability. It is being developed at VTT Technical Research Centre of Finland since 2004, and its version used in this study is the 2.1.29. According to the developers, SERPENT main capabilities are listed below:

- Spatial homogenization and group constant generation for deterministic reactor calculations.
- Fuel cycle studies involving detailed assembly.
- Level burnup calculations.
- Validation of deterministic lattice transport codes.
- Full-core modeling of research reactors, SMRs, and other closely coupled systems.
- Coupled multiphysics applications.
- Educational purposes and demonstration of reactor physics phenomena.

For fuel depletion analysis, by default, SERPENT solves the Bateman's depletion equations according to the Chebyshev Rational Approximation Method (CRAM), which is based on the predictor midpoint step technique [5]. SERPENT also uses a methodology to better represent the changes due to material composition variation. This code uses a predictor-corrector method with linear interpolation based on Euler's method [6].

3.2. AZNHEX

AZNHEX [7] is the tool aimed for the design and analysis of cores with hexagonal-z geometry elements. It is based on the numerical solution of the multigroup neutron diffusion equations in 3D for steady state or time-dependent problems [8], [9], [10], for the calculation of the effective neutron multiplication factor k_{eff} , neutron flux, and power distribution. The first step was to apply a Gordon-Hall transformation to each quadrant of hexagonal cross sections (see Figure 2) of all the assemblies in a core as it is described in [11]. With this transformation, the starting multi-group neutron diffusion equations with constant XS are changed to a set of partial differential equations with non-

constant coefficients. The next step was to apply the classical Galerkin finite element method using the well-known RTN-0 (Raviart-Thomas-Nédélec of index zero) nodal approximation to approximate the space dependency of the neutron flux and the precursors' concentration as well. To discretize the time-dependency of the final set of ordinary differential equations the theta-method leading to the fully implicit scheme when $\theta=1$ and the semi-implicit when $\theta=1/2$.

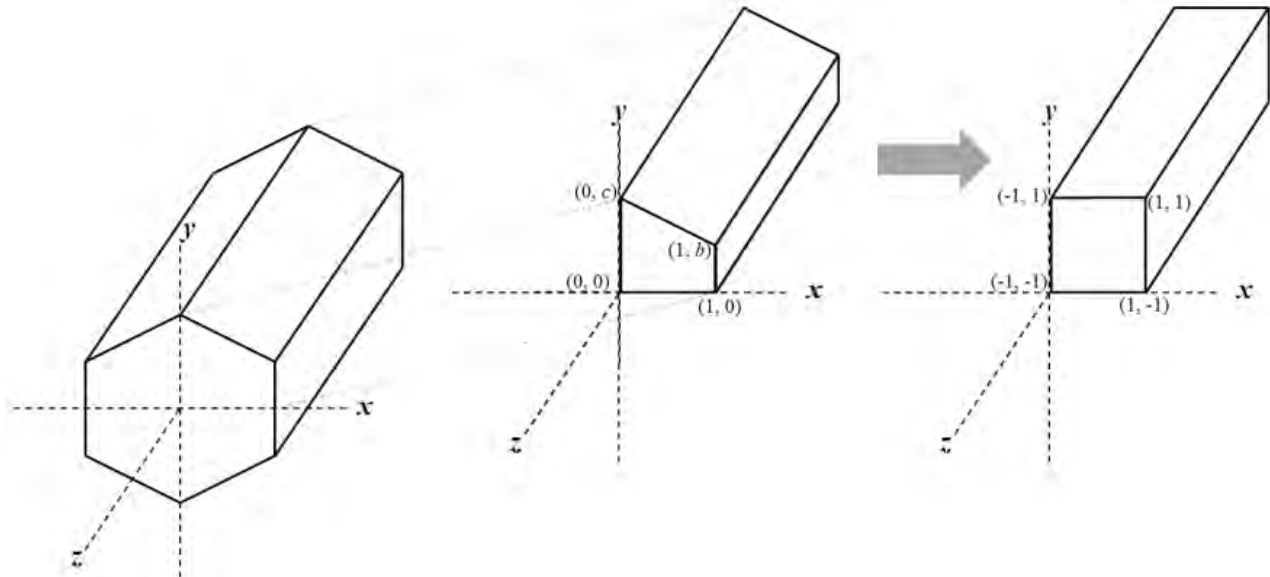


Figure 2. Coordinates transformation from a 1/4 of hexagon-z cell into square-z cell.

For more information on nodal methods [12][13] and for more on the Gordon-Hall transformation [14][15].

4. IMPLEMENTATION OF THE MODELS IN THE CODES

In order to simulate the cores in AZNHX, a set of macroscopic cross sections (XS) must be generated for each region inside the core, for this task the stochastic code SERPENT is used.

4.1. Neutron Cross-Section Generation with 2D models

Every sub-assembly in the core is divided into different axial regions, a set of infinite 2D models in SERPENT are made for each of these different regions and the resulting XS are taken into AZNHX. Figure 3 shows a cross section of the cell model for the fueled region and an unfueled region. It is important to note that given the way the stochastic codes like SERPENT work, in order to have neutron sources some fuel is needed to be added in the cells of the unfueled region, this is why in Figure 3 the central unfueled region in the center is surrounded by fuel sub-assemblies. In

order to make the cell infinite, reflection conditions are given to the walls. Once the XS are generated, they are taken to AZNHEX for the full core simulation.

4.2. Neutron Cross-Section Generation with 3D models

A different way of generating the macroscopic XS is to model the complete 3D core in SERPENT and extract them for each defined zone. This carries some extra considerations in the definitions of each region, since even when two assemblies are identical, they must be considered different in the case that they are far from each other or are subject to very different neutron fluxes or other conditions due to their positions.

Figure 4 shows how different regions are considered for each type of assembly in the core (fuel, reflector and shield).

It is important to consider that each assembly is divided into different axial zones, which in the end lead to a relatively big number of total regions in the core.

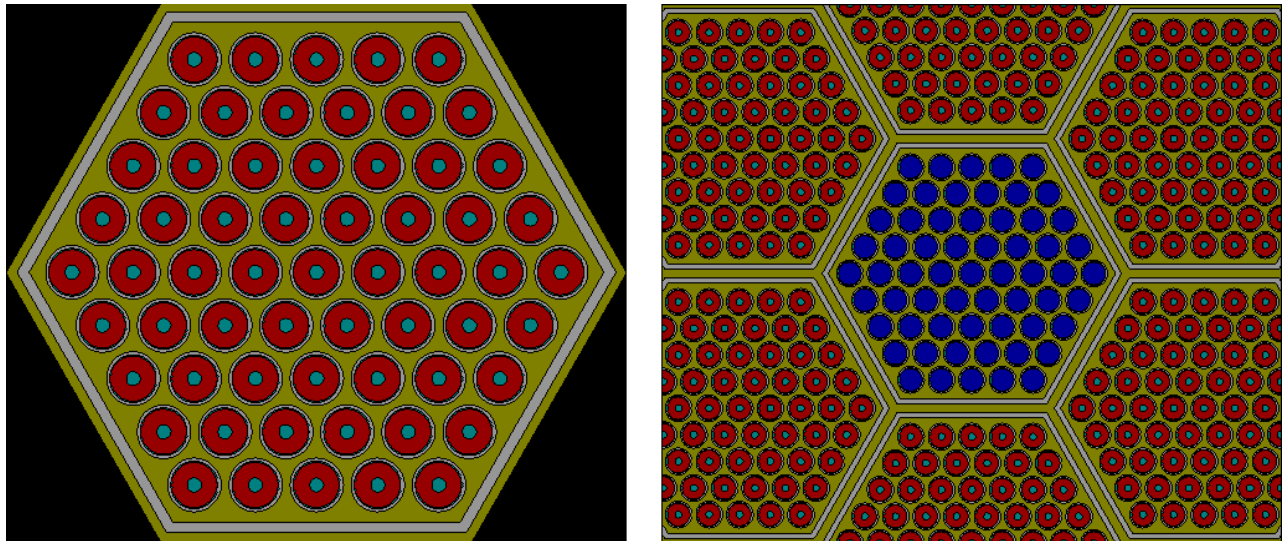


Figure 3. 2D cells for fuel (left) and unfueled (right) region.

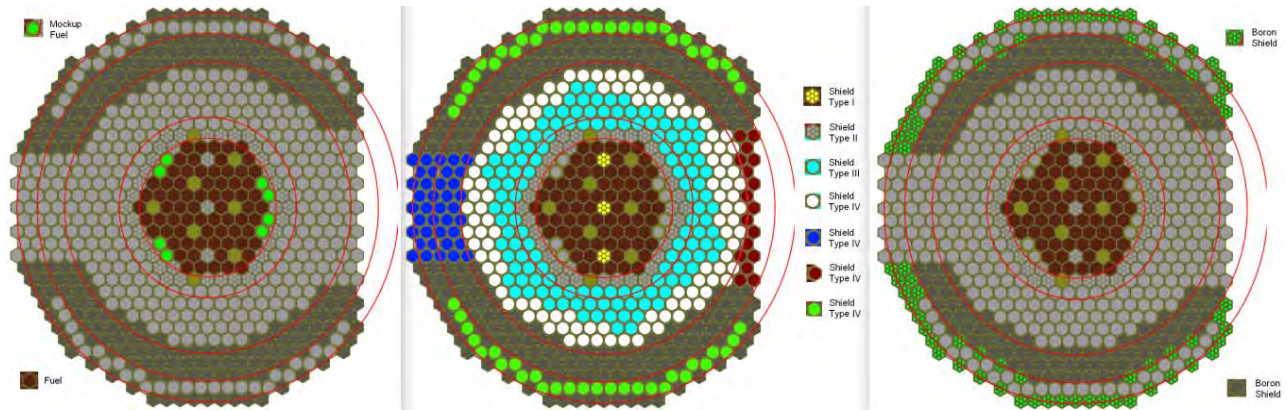


Figure 4. Region separation for each assembly type.

4.3. Discretization of the Energy Spectrum

Two energy grouping schemes were used in this work:

- 2 energy groups (gr).
- 24 energy groups (gr).

In the case of the 2 groups, the boundary between the two groups is given at 0.625 eV. By default, the lower energy limit considered is 1e-4 eV and 20 MeV for the upper limit.

For the 24-energy group structure selected for XS generation in this work, the Table II shows the upper limits of each group.

Table II. Upper limits on the 24 energy groups.

Group	Up. Limit (MeV)	Group	Up. Limit (MeV)	Group	Up. Limit (MeV)
1	2.0000E+01	9	3.0197E-01	17	5.5309E-03
2	1.0000E+01	10	1.8316E-01	18	3.3546E-03
3	6.0653E+00	11	1.1109E-01	19	2.0347E-03
4	3.6788E+00	12	6.7379E-02	20	1.2341E-03
5	2.2313E+00	13	4.0868E-02	21	7.4852E-04
6	1.3534E+00	14	2.4788E-02	22	4.5400E-04
7	8.2085E-01	15	1.5034E-02	23	3.1203E-04
8	4.9787E-01	16	9.1188E-03	24	1.4894E-04

4.4. Description of the simulated

The object of the presented work is to simulate each fueling step on the CEFR core. In every fueling step some mock-up Fuel Assemblies (FA) were replaced by active Fuel Assemblies (FA), 16 fueling

steps were simulated which include Control Rod (CR) insertion at different heights from the bottom of the active zone and are described in Table III. Figure 5 shows the core layout in every fueling step.

Table III. Description of fueling steps.

Fueling step	Inserted FA	Position of CR	Inserted SS assemblies
1	24	Out of core	0
2	40	Out of core	2
3	46	Out of core	2
4	55	Out of core	2
5	61	Out of core	2
6	65	Out of core	2
7	68	Out of core	2
8	69	Out of core	2
9	70	Out of core	2
10	71	Out of core	2
11	72	Out of core	2
12	72	1CR at 190 mm	2
13	72	1CR at 170 mm	2
14	72	1CR at 151 mm	2
15	72	1CR at 70 mm	2
16	72	2CR at 70 mm	2

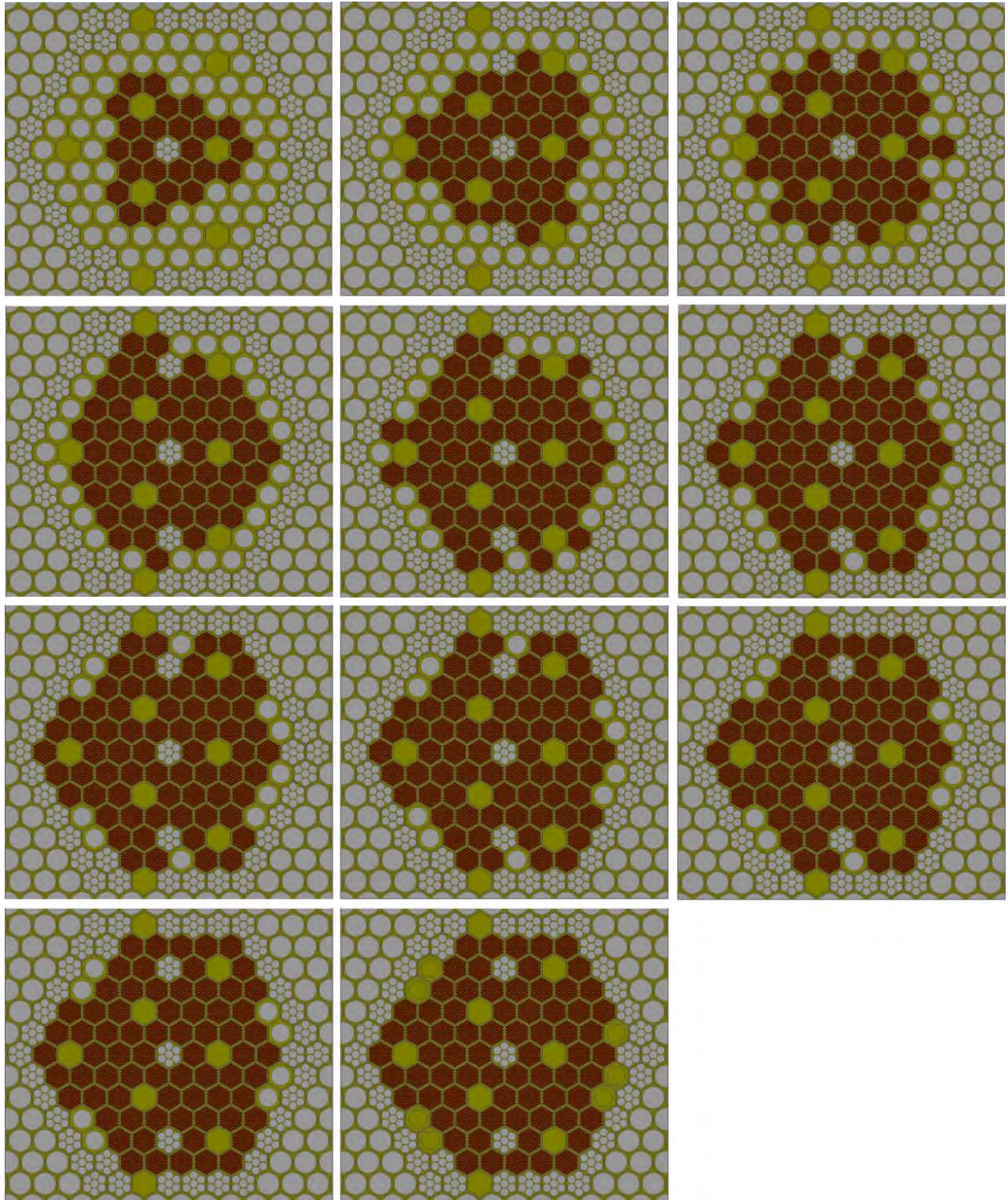


Figure 5. Layout of the fuel region for each of the fueling steps simulated (from left to right, top to bottom: 24, 40, 46, 55, 61, 65, 69, 70, 71, and 72 FAs inserted).

5. RESULTS AND DISCUSSION

All the cases in Table III were simulated by different methodologies;

- SERPENT: The calculation taken as reference is a 3D model of the whole core in the code SERPENT version 2.1.29 with a set of microscopic XS generated by the organizers of the reference benchmark.
- 2D: A set of macroscopic XS is generated following the 2D methodology described in section 4.1 with the 24 energy groups (gr) described in section 4.3. The XS obtained were implemented in AZNHEX in a full core simulation.
- 3Da: The set of XS obtained by the 3D methodology in section 4.2 for 2 energy groups (gr), considering only one set of XS for each type of sub-assembly as shown in Figure 4 left, the XS are fed into AZNHEX for a full core simulation.
- 3Db: The set of XS obtained on the same way as 3Da, but the XS are implemented in AZNHEX in a compact core model where only the active zone (where the fuel is located) plus two rings of reflector.
- 3Dc: The set of XS is generated on a 3D model where every assembly zone is divided into more subzones, as described in Figure 4 central and right.

The results of the simulations made are shown in the Table IV and in the Figure 6.

Table IV. The k_{eff} values for each simulated fueling step.

Fueling Step	SERPENT	AZNHEX			
		2D (24 gr)	3Da (2 gr)	3Db (2gr)	3Dc (2gr)
1	0.68185	0.65268	0.73255	0.70231	0.74947
2	0.83798	0.82223	0.90229	0.86424	0.90049
3	0.87822	0.84664	0.92588	0.88563	0.93700
4	0.93142	0.91720	0.99520	0.94892	0.98978
5	0.95679	0.94465	1.02109	0.97060	1.00795
6	0.97187	0.96127	1.03673	0.98355	1.02040
7	0.98595	0.97633	1.05136	0.99655	1.03256
8	0.99043	0.98099	1.05594	1.00063	1.03645
9	0.99480	0.98587	1.06070	1.00487	1.04081
10	0.99922	0.99059	1.06523	1.00891	1.04539
11	1.00374	0.99540	1.06986	1.01308	1.04934
12	1.00266	0.99421	1.06831	1.01228	1.04679
13	1.00259	0.99412	1.06821	1.01223	1.04636
14	1.00251	0.99402	1.06804	1.01211	1.04656
15	1.00223	0.99369	1.06770	1.01192	1.04605
16	1.00067	0.99195	1.06565	1.01088	1.04190

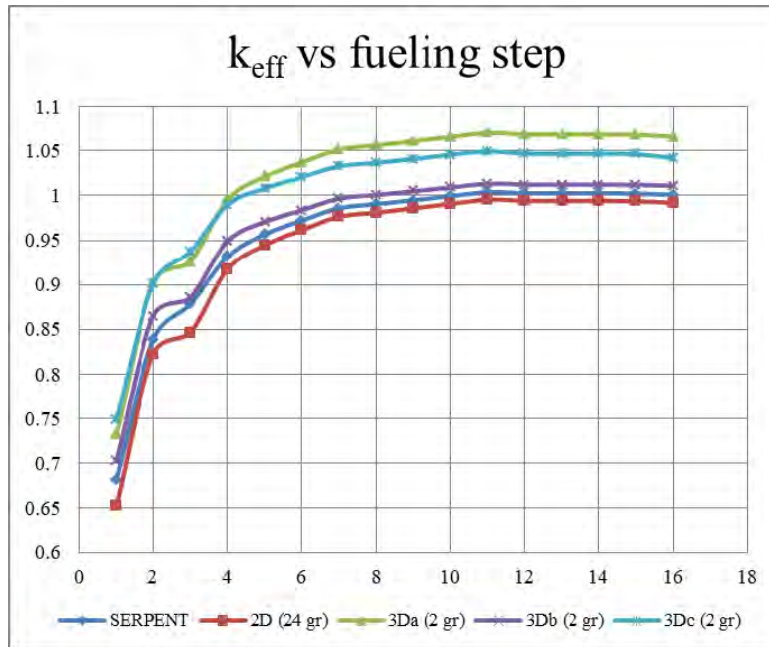


Figure 6. Behavior of k_{eff} for the 16 simulated fueling steps

As can be seen, the results vary depending on the methodology used for neutron XS generation. The difference of the k_{eff} values in pcm are shown in Table V and in Figure 7, where all the simulations with the XS for two-group overestimate the value of k_{eff} comparing them with the reference value, and the case executed with XS for 24 groups underestimate them.

In almost all fueling steps the differences against the reference are high, but still a tendency of improvement can be observed in every step as long as more fuel is included leading to a less diffusive problem. The only case where this tendency is not observed is the case for XS generated in a 3D model for two energy groups with only one set of XS by each type of assembly, where the difference is more or less maintained in all cases. This can be due to the lack of refining in the XS generation for every assembly type without considering its position inside the core. The case where the XS were generated with 2D models with 24 energy groups showed the results closer to the reference, it is suspected that can be due to the refining in the energy groups and not to the use of the 2D methodology because, as shown later, the use of the same XS for each assembly type regarding on their position is not the best option.

In the fueling step of the same XS generated in 3D for 2 energy groups but used in a full and compact core (3Db and 3Dc) the results are interesting. In the step of the compact core the results are closer to the reference core, not because is a more correct model but due to the lack of the extra shielding rings increases the neutron leakage and thus reduces the k_{eff} value.

Still it is interesting to see that in the compact core the tendency of reducing the difference as the fuel is being loaded is observed, but in the case of the full core model is not observed.

For the case of the XS extracted by zone directly from the 3D model with the subzones separations (3Dc), a big difference between codes is obtained, but the tendency of reducing it as the core is being loaded is observed which is satisfactory, the difference between codes can be reduced by the use of a more refined energy grouping.

Table V. Differences in pcm between calculations and the SERPENT reference value

Fueling step	AZNHEX			
	2D (24 gr)	3Da (2 gr)	3Db (2gr)	3Dc (2Gr)
1	-2917	5069	2046	6762
2	-1575	6430	2626	6251
3	-3158	4766	741	5879
4	-1422	6378	1750	5836
5	-1214	6431	1382	5116
6	-1060	6486	1168	4853
7	-962	6541	1060	4662
8	-944	6551	1020	4602
9	-893	6589	1007	4601
10	-863	6601	968	4617
11	-834	6612	934	4543
12	-845	6565	962	4413
13	-848	6562	964	4377
14	-849	6553	960	4405
15	-854	6547	969	4381
16	-872	6498	1021	4123

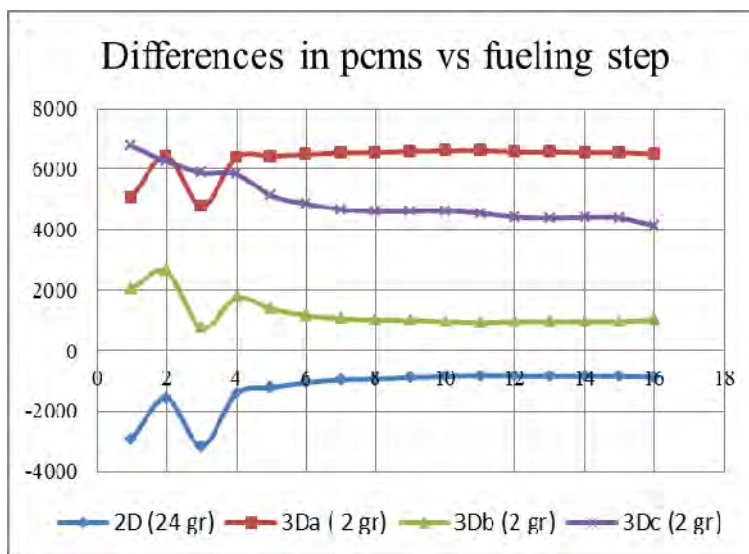


Figure 7. Differences in pcm of the different calculations in AZNHEX.

6. CONCLUSIONS

The AZNHEX code for simulating nuclear cores was tested and in that matter the exercise was a success.

Another important thing tested was the methodology for XS generation. It is observed that 2-group discretization while easy to implement in AZNHEX and not so computationally costly it is not ideal for having reliable results.

On the same manner while generating the XS by zones in a 3D stochastic model would seem like to be the ideal method for generating them, it is very sensible to the assembly type subdivision as shown in the results obtained. A careful selection of the energy group number and the energy limits for each group must be done in combination to the 3D methodology in order to have the right results.

The effect of the extra layers of reflector and shielding in the full core compared to the compact core is very interesting, as expected by reducing the number of reflector layers the compact core suffers from neutron leakage which tends to decrease k_{eff} , and in this case as the original full core model is much above from the reference core, making it closer to the reference value. This can be attributed to the fact that with the full core the k_{eff} value is some thousands pcm above criticality and as explained before the code is not as reliable with values too far from 1.0. In the Figure 6 shows the behavior of the k_{eff} for the 16 steps that were simulated, it is observed that the behavior for 2D (24 gr) and 3Db (3 gr), seems to limit below and above respectively the Serpent while 3Da (2gr) and 3Dc (2 gr) have a behavior similar but then they separate. In the Figure 7 shows that 2D, 3Da and 3Db behave in a similar way, although at different levels, but 3Dc does not look like anything, this may be because the AZNHEX code does not have ADFs or an angular approximation greater than P1, which is not feasible to obtain results similar to those of SERPENT.

Regarding future work, a further study on the sensibility on the energy grouping limits can be made in order to find the ideal energy discretization scheme.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors of this work thank the financial support received for the strategic project No. 212602 (AZTLAN Platform) of the Sectorial Fund for Energy Sustainability CONACYT-SENER.

REFERENCES

1. A.M. Gómez Torres, F. Puente Espel, E. del Valle Gallegos, J.L. François, C. Martin-del-Campo, G. Espinosa-Paredes, "AZTLAN: Mexican Platform for Analysis and Design of Nuclear Reactors", *Proceedings of ICAPP 2015*. Nice, France. May 03-06, (2015).

2. Juan Galicia-Aragon, Juan-Luis Francois, Guillermo Bastida-Ortiz, Cecilia Martin-del-Campo, Julio A. Vallejo-Quintero, Edmundo del-Valle-Gallegos, “Initial verification of AZNHEX hexagonal-z neutron diffusion code with MCNP6 for two different study cases”, *Progress in Nuclear Energy*, Vol. **106**, p. 284-292 (2018).
3. Edmundo del-Valle-Gallegos, Roberto Lopez-Solis, Lucero Arriaga-Ramirez, Armando Gomez-Torres, Federico Puente-Espel, “Verification of the multi-group diffusion code AZNHEX using the OECD/NEA UAM Sodium Fast Reactor Benchmark”, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. **114**, p. 592-602 (2018).
4. Xingkai Huo, *Technocal Specifications for Neutronics Benchmark of CEFR Start-Up Tests (CRP-I31032)*, China Institute of Atomic Energy, Beijing, China, 2018.
5. Davide Chersola, Guglielmo Lomonaco, Riccardo Marotta, Guido Mazzinic. “Comparison between SERPENT and MONTEBURNS codes applied to burnup calculations of a GFR-like configuration”. *Nuclear Engineering and Design*. Vol **273**, p. 542–554 (2014).
6. Pusa, M., Leppänen, J. “Computing the matrix exponential in burnup calculations”, *Nuclear Science and Engineering*, Vol **164**, p. 40-150, (2010).
7. Jaime Esquivel Estrada, *Métodos Nodales Aplicados a la Ecuación de Difusión de Neutrones Dependiente del Tiempo en Geometría Hexagonal-Z*. M. Sc. Thesis, Instituto Politecnico Nacional, ESFM, Mexico City (2015).
8. A. F. Henry, *Nuclear Reactor Analysis*, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, (1975).
9. J.J. Duderstadt, J. Hamilton, *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley & Sons, New York, (1976).
10. J.R. Lamarsh, *Introduction to Nuclear Reactor Theory*, Addison-Wesley Pub. Co., (1996).
11. J.P. Hennart, E.H. Mund, E. Del Valle, “A composite nodal method for hexagons”, *Nuclear Science and Engineering*, Vol **127**, p. 139-153, (1997).
12. E. del Valle, J.P. Hennart, D. Meade, “Finite element formulations of nodal schemes for neutron diffusion and transport problems”, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. **92**, p. 204-211, (1986).
13. P. Lesaint, P.A. Raviart, “On a finite element method for solving the neutron transport equation”, *Proceedings of the Symposium on Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, Madison, US, April 1 - 3, (1974).
14. W.J. Gordon, C.A. Hall, “Transfinite element methods: blending–function interpolation over arbitrary curved element domains”, *Numerical Mathematics*, Vol **21**, p. 109 - 129, (1973).
15. W.J. Gordon, C.A. Hall, “Construction of curvilinear coordinate systems and applications to mesh generation”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol **7**, p. 461 - 477, (1973).

Desarrollo de códigos SPH para el estudio de transferencia de calor en el núcleo de reactores nucleares

Felipe de Jesús Pahuamba Valdez y Dra. Estela Mayoral Villa
Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México – Toluca s/n, La Marquesa, 52750 Ocoyoacac, México
narehc@hotmail.com; estela.mayoral@inin.gob.mx

Dr. Carlos Enrique Alvarado Rodríguez
Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales
y Exactas, Universidad de Guanajuato
Noria Alta s/n, 36050 Guanajuato, Gto. México
ce.alvarado@ugto.mx

Dr. Armando Miguel Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México – Toluca s/n, La Marquesa, 52750 Ocoyoacac, México
armando.gomez@inin.gob.mx

Dr. Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional
edmundo.delvalle@gmail.com

Resumen

La convección natural es de gran importancia en muchas aplicaciones de ingeniería. En este trabajo se presenta el desarrollo de códigos SPH (Smoothed-particle hydrodynamics) para analizar la transferencia de calor en el núcleo de reactores nucleares, por el momento, a través del mecanismo de convección natural, que se presenta en el espacio que existe entre la pastilla combustible y el encamisado, mejor conocido como huelgo. La hidrodinámica de partículas suavizadas (SPH) es un método computacional utilizado para simular la dinámica de medios continuos, tales como la mecánica de sólidos y los flujos de fluido. Ha sido desarrollado por Gingold y Monaghan (1977) inicialmente para problemas astrofísicos. Su uso abarca múltiples campos de investigación, incluyendo astrofísica, balística, vulcanología y oceanografía. Es un método de Lagrange (donde las coordenadas se mueven con el fluido) sin malla, y la resolución del método se puede ajustar fácilmente con respecto a variables como la densidad. Las ecuaciones de medio o fluido continuo, las cuales son la conservación de masa, momento y energía del fluido, se presentan en su forma Lagrangiana y posteriormente se presentan discretizadas en ecuaciones SPH. Se describe brevemente el código DualSPHysics, al cual se le están haciendo las implementaciones y modificaciones requeridas, para analizar la termohidráulica de la barra de combustible. El método

numérico se valida comparando los resultados obtenidos de simulaciones realizadas con datos experimentales reportados en la literatura.

1. INTRODUCCIÓN

Los métodos de simulación y modelado numéricos son fundamentales para el análisis, control y operación de un reactor nuclear, permitiéndonos estudiar y resolver problemas relacionados con la termohidráulica, la neutrónica y la dinámica de fluidos los cuales se encuentran involucrados de manera acoplada en estos sistemas. Actualmente el uso de modelado numérico ha cobrado especial interés para la evaluación de la seguridad de Centrales Nucleares en el análisis de transitorios y accidentes severos.

En un reactor de agua en ebullición (BWR) el combustible nuclear, el moderador, los elementos de control y parte del sistema de remoción de calor se encuentran en la misma estructura, dentro de la vasija del reactor, y se presenta la complejidad de que el agua que se utiliza como moderador es, de igual forma, empleada como vehículo de remoción de calor. Al entrar en contacto el agua líquida con el combustible, éste le transfiere calor proporcionando la energía necesaria para que pase a estado gaseoso. El vapor de agua generado pasa entonces a las turbinas de los turbogeneradores de vapor que convierten la energía de vapor en potencia eléctrica. Cuando ocurre la transición de fase se afectan las propiedades de transferencia de calor y aunado a ello la nucleación provocada por el proceso de ebullición genera alteraciones en la dinámica del fluido. En los reactores BWR, la transición de fase de líquido a vapor juega un papel muy importante, lo que marca una diferencia entre estos y los reactores de agua a presión (PWR) donde se opera a presiones elevadas que no permiten que el agua presente esta transición de fase.

Un fenómeno muy importante que puede ocurrir en los BWR y que debe preverse es la posibilidad de que se forme una capa de vapor en la superficie del encamisado del combustible, esta capa de vapor presenta una alta resistencia a la transferencia de calor actuando entonces como un aislante térmico, lo cual conlleva a que la barra de combustible no se enfríe adecuadamente, se sobrecaliente y pueda llegar a fundirse, este fenómeno es conocido como secado (dryout). El patrón de flujo de la dinámica del fluido en un reactor tipo BWR también es un factor muy importante en la transferencia de calor a través del sistema de remoción de calor, el comportamiento turbulento del fluido (principalmente en la región de transferencia de calor en ebullición nucleada saturada) favorece la transferencia de calor en el sistema de remoción de calor y su control debe ser el adecuado para poder optimizar el funcionamiento del mismo. Para ello se pueden hacer diseños especiales para inducir la turbulencia que favorezcan, junto con los procesos de ebullición, la extracción del calor generado por los procesos de fisión.

En general se han empleado métodos de simulación numérica de tipo Euleriano para estudiar estos sistemas, entre los cuales destacan elemento finito, volúmenes finitos y diferencias finitas. Este tipo de métodos y códigos conocidos como de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD: Computational Fluid Dynamics) han mostrado ser una herramienta muy importante en el diseño, control y operación de los reactores nucleares PWR, sin embargo para los BWR, debido a la

transición de fase, su aplicación presenta algunas restricciones y limitantes importantes sobre todo cuando se trata de estudiar problemas con fronteras móviles o difusas, transiciones de fase, geometrías complejas y sistemas dinámicos o fluidos turbulentos, que son los casos que se presentan en muchos de los fenómenos fundamentales que acontecen en un reactor nuclear BWR [2].

La principal limitante de las soluciones Eulerianas en este sentido, es que los sistemas se resuelven por la discretización de las ecuaciones diferenciales acopladas que rigen al sistema en una malla, la cual no es dinámica ni adaptiva, a los cambios estructurales que se presenten lo que conlleva al uso de aproximaciones para poder resolver el sistema. Así mismo la incorporación de más efectos físicos, resulta en un incremento en la complejidad de la solución numérica que puede llevar a fuertes inestabilidades numéricas [3]. Las técnicas tradicionales de modelos unidimensionales (o de parámetros concentrados) se basan en modelos simplificados en los que se incorporan correlaciones empíricas y aproximaciones que introducen incertidumbres difíciles de cuantificar. Por ello es cada vez más necesaria la incorporación de modelos físicos de primeros principios para representar a los principales fenómenos que ocurren en los reactores de agua ligera (LWR) como ebullición, condensación, intercambio de materia y energía entre fases, transporte de partículas, etc. en sustitución del uso de correlaciones empíricas que adicionalmente tienen intervalos de validez limitados.

2. MÉTODO SPH (SMOOTH PARTICLE HYDRODYNAMICS)

El método SPH (Hidrodinámica de Partículas Suavizadas), es un método numérico para la solución de problemas de dinámica de fluidos computacional. Se trata de un método Lagrangiano, es decir, el fluido se sustituye por un conjunto significativo de partículas distribuidas de manera arbitraria esperándose así que el modelo sea más flexible y versátil que los convencionales métodos basados en malla, ya que las propiedades del fluido viajan con cada partícula. En los últimos años se ha aplicado en numerosos campos de la dinámica de fluidos. En particular, reproduce fácilmente fenómenos de superficie libre en los que se estudien la rotura de olas, interacciones fluido estructura y comportamientos no lineales de fluidos [4].

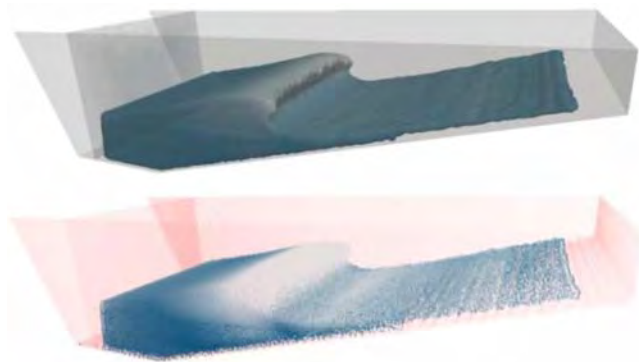


Figura 1: Imagen de fluido continuo (arriba) y de partículas en SPH (abajo). (Tomada de la referencia [4]).

2.1. Método de Interpolandos

SPH se basa en la teoría de los interpolandos integrales. El principio fundamental es aproximar cualquier función $A(r)$ por:

$$A(r) = \int_{\Omega} A(r') W(r - r', h) dr' \quad (1)$$

Donde r es el vector de posición; W es la función de peso o kernel; h es la distancia de interacción llamada distancia de suavizado que controla el dominio de Ω . El valor de h deberá de ser mayor que la distancia inicial de separación entre partículas.

La aproximación 1, en notación discreta, lleva a la siguiente aproximación de la función en la posición de la partícula a:

$$A_a = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} W_{ab} \quad (2)$$

Donde la sumatoria se realiza sobre las partículas vecinas b que se encuentran en la región de soporte compacto de la función kernel. La masa y la densidad de las partículas vecinas se denotan como m_b y ρ_b respectivamente y $W_{ab} = W(r_a - r_b, h)$ es la función de peso o kernel.

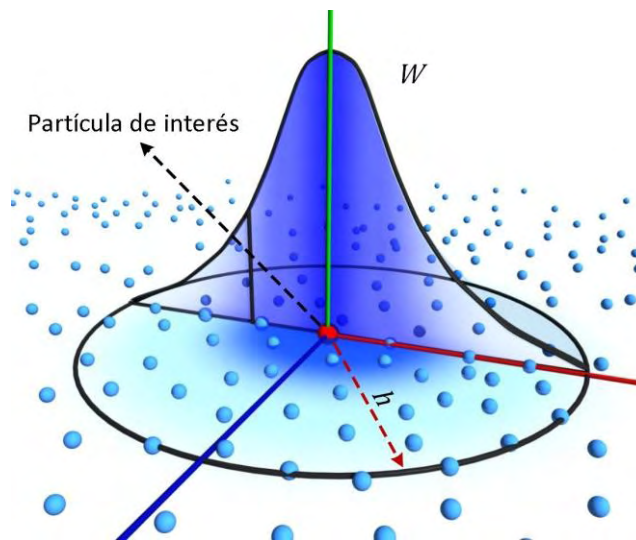


Figura 2: Esquema de la función peso o kernel.

3. MODELO SPH PARA CONVECCIÓN NATURAL

La transferencia de calor por convección natural en cilindros concéntricos alineados horizontalmente, puede caracterizarse por dos parámetros adimensionales: el número de Rayleigh Ra y el número de Prandtl Pr , que se definen como:

$$Ra = \frac{g\beta L^3 \Delta T}{\nu \alpha} \quad (3)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (4)$$

donde g es el módulo de aceleración gravitacional, β es el coeficiente de expansión volumétrica del fluido, L es el espacio entre los cilindros, ΔT es la diferencia de temperatura entre los cilindros, ν es la viscosidad cinemática del fluido y α es la difusividad térmica del fluido. El número de Prandtl es la relación de la difusividad viscosa respecto a la difusividad térmica. El número de Rayleigh se puede considerar como la relación de la energía potencial gravitatoria respecto a la energía debido a la disipación viscosa y la difusión térmica.

Para el flujo viscoso con transferencia de calor por convección natural, se utiliza la forma lagrangiana de las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (5)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} + F^B \quad (6)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho C_p} \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (7)$$

donde ρ es la densidad del fluido, t es el tiempo, \mathbf{u} es la velocidad del fluido, p es la presión del fluido y μ es la viscosidad dinámica del fluido, T es la temperatura del fluido, C_p es el calor específico a presión constante y k es la conductividad térmica del fluido. F^B denota la fuerza boyante que actúa sobre el fluido.

El movimiento del fluido debido al cambio de la temperatura lo proporciona la fuerza Boyante F^B anexada en la ecuación de momento:

$$F^B = -g\beta(T - T_r) \quad (8)$$

donde g es la aceleración de la gravedad, β es el coeficiente de expansión volumétrica del fluido, y T_r es la temperatura de referencia.

Usando las fórmulas de suma de partículas de una función y sus derivadas, las ecuaciones gobernantes se pueden discretizar en SPH de la siguiente forma:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (u_a - u_b) \cdot \nabla_a W_{ab} \quad (9)$$

$$\frac{du_a}{dt} = - \sum_b m_b \left(\frac{\rho_a}{\rho_a^2} + \frac{\rho_b}{\rho_b^2} \right) \nabla_a W_{ab} + \sum_b \frac{m_b (k_a + k_b) (r_a - r_b) \cdot \nabla_a W_{ab}}{\rho_a \rho_b (r_{ab}^2 + \eta)} (u_a - u_b) - F^a \quad (10)$$

$$\frac{dT_a}{dt} = \frac{1}{c_p} \sum_b \frac{m_b (k_a + k_b) (r_a - r_b) \cdot \nabla_a W_{ab}}{\rho_a \rho_b (r_{ab}^2 + \eta)} (T_a - T_b) \quad (11)$$

donde los subíndices a y b indican partículas SPH, m es la masa de una partícula. $W_{ab} \equiv W(r_a - r_b, h)$, aquí h es una longitud de suavizado que se utiliza para controlar el ancho del kernel. $\nabla_a W_{ab}$ denota el gradiente de W tomado respecto a la partícula a. El término $\eta = 0.01h^2$ se agrega para evitar la singularidad cuando dos partículas están demasiado cerca una de otra [5].

3.1. Modelo de Densidad Variable en Función de la Temperatura

En el formalismo de SPH, el fluido es tratado como ligeramente compresible, lo cual facilita el uso de una ecuación de estado para determinar la presión del fluido, que es mucho más rápido que resolver una ecuación como la de Poisson usada en el tratamiento incompresible. La ecuación de estado de Tait, relaciona la presión y densidad. Se puede apreciar que una pequeña oscilación en la densidad puede generar una gran variación en la presión.

$$P = B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (12)$$

El parámetro B es una constante relacionada con el módulo de la compresibilidad del fluido, $\rho_0 = 1000.0 \text{ Kg/m}^3$ es la densidad de referencia, tomada como la densidad del fluido en la superficie y γ es la constante politrópica, normalmente entre 1 y 7.

En este fluido compresible se define una velocidad del sonido, c, que viene dada por la raíz cuadrada de la derivada de esta ecuación de estado respecto a la densidad:

$$c^2(\rho) = \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{B\gamma}{\rho_0} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma-1} = \frac{B\gamma}{\rho_0^\gamma} \rho^{\gamma-1} \quad (13)$$

$$c_0^2 = c^2(\rho_0) = \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_0} = \frac{B\gamma}{\rho_0} \quad (14)$$

donde c_0 es la velocidad del sonido para la densidad de referencia (en la superficie del fluido); la constante B es igual a $B = \frac{c_0^2 \rho_0}{\gamma}$ y además proporciona un límite para el máximo cambio de densidad.

Con las ecuaciones anteriores no podemos calcular el cambio de volumen o densidad en función de la presión y temperatura, como sería si utilizáramos otra ecuación de estado, sin embargo, es posible emplear el coeficiente de expansión volumétrica para calcular el cambio de volumen en función de la temperatura y posteriormente cambiar la densidad de referencia en la ecuación de estado para que el fluido tienda a valores de nuevas densidades. El modelo desarrollado es el siguiente.

Establecemos una relación entre el cambio de volumen y la temperatura utilizando el coeficiente de expansión volumétrica.

$$V_f = V_i [1 + \beta (T_f - T_i)] \quad (15)$$

Donde V_f y V_i son los volúmenes finales e iniciales respectivamente, β es el coeficiente de expansión volumétrica, T_f y T_i son las temperaturas finales e iniciales. Considerando la relación entre densidad, masa y volumen.

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (16)$$

Y sustituyendo la densidad en la ecuación (15) obtenemos que:

$$\rho_f = \rho \left(\frac{1}{1 + \beta (T_f - T_i)} \right) \quad (17)$$

De esta forma se evoluciona la densidad de referencia $\rho_0 = \rho_f$ en la ecuación (12) en cada paso de tiempo, así el fluido tiende al valor de una nueva densidad cuando cambia la temperatura del fluido. Este cálculo se realiza por partícula en cada paso de tiempo.

3.2. Modelo de Conductividad Térmica Variable

Como sabemos la difusividad térmica del fluido combina la conductividad térmica del mismo con su densidad y el calor específico a presión constante.

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \quad (18)$$

Al establecer previamente un modelo para el cambio de densidad del fluido en función de la temperatura, podemos utilizar este modelo para variar la conductividad de cada partícula en función del cambio de densidad, con la siguiente fórmula.

$$k_s = \alpha \rho_s C_p \quad (19)$$

$$k_s = \frac{\nu \rho_s C_p}{Pr} \quad (20)$$

donde el subíndice indica nuestra partícula SPH de interés.

4. CÓDIGO DUALSPHYSICS

El código DualSPHysics proviene del código SPHysics, que es un modelo de SPH de código abierto desarrollado por investigadores de la Universidad Johns Hopkins (USA), La Universidad de Vigo (España), la Universidad de Manchester (Reino Unido) y la Universidad de Roma, La Sapienza. El código se puede descargar gratuitamente de la página www.sphysics.org.

Si bien SPHysics permite simular problemas con alta resolución y una amplia gama de formulaciones, el problema principal para su aplicación a problemas reales de ingeniería es el tiempo de ejecución computacional excesivamente largo, lo que significa que SPHysics rara vez se aplica a grandes dominios. La aceleración de hardware y la computación paralela son necesarias para que SPHysics sea más útil y versátil para aplicaciones de ingeniería.

Las Unidades de Procesamiento de Gráficos (GPU) se originaron en la industria de los juegos de computadora y ahora se han establecido como una alternativa barata a la Computación de Alto Rendimiento (HPC) para la computación científica y el modelado numérico. Las GPU están diseñadas para administrar grandes cantidades de datos y su poder de cómputo se ha desarrollado en los últimos años mucho más rápido que las unidades de procesamiento central convencionales (CPU). Compute Unified Device Architecture (CUDA) es un marco y lenguaje de programación paralelo para la computación de GPU que utiliza algunas extensiones al lenguaje C/C++. Investigadores e ingenieros de diferentes campos están logrando altas aceleraciones implementando sus códigos con el lenguaje CUDA. Por lo tanto, la computación de potencia paralela de las GPU también se puede aplicar a los métodos de SPH donde los mismos bucles para cada partícula durante la simulación pueden paralizarse.

El código FORTRAN de SPHysics es robusto y confiable, pero no está correctamente optimizado para grandes simulaciones. DualSPHysics está desarrollado en lenguaje C++ y CUDA para realizar simulaciones en la CPU o GPU respectivamente. El nuevo código de la CPU presenta algunas ventajas, como un uso más optimizado de la memoria. El paradigma de programación orientado a objetos proporciona un código que es fácil de entender, mantener y modificar con un sofisticado control de los errores disponibles. Además, se implementaron mejores optimizaciones, por ejemplo,

las partículas se reordenan para dar un acceso más rápido a la memoria, y se implementa el mejor enfoque para crear la lista de vecinos. El lenguaje CUDA gestiona la ejecución paralela de hilos en las GPU. Los mejores enfoques se consideraron implementados como una extensión del código C++, por lo que se implementaron las optimizaciones más apropiadas para paralelizar la interacción de partículas en la GPU [6].

5. RESULTADOS

La validación del modelo y de la implementación hecha en el código DualSPHysics, para simular la convección natural, se probó un caso reportado en la literatura en dos dimensiones, obteniéndose los siguientes resultados. La figura 3 muestra el sistema estudiado, que consiste en un sistema de cilindros concéntricos alineados horizontalmente, en donde los dos cilindros están a temperatura constante de diferente magnitud, siendo el cilindro interior el de mayor temperatura, así como los componentes empleados para mantener las condiciones experimentales. El diámetro exterior del cilindro interno es de 3.56 cm, con un espesor de 0.51 cm y el diámetro interior del cilindro externo es de 9.25 cm, con un espesor de 0.45 cm, con lo cual se mantiene una relación $L/D_i = 0.8$ [7].

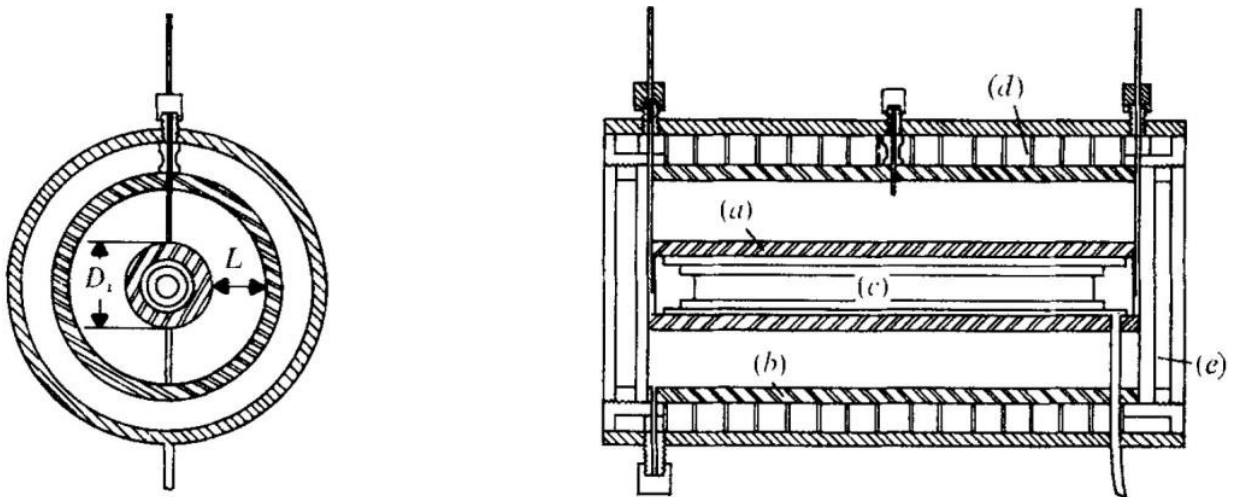


Figura 3: Diagrama del aparato experimental. (a) Cilindro interno. (b) Cilindro externo. (c) Calentador. (d) Canales de agua de enfriamiento. (e) Ventana. (Tomada de la referencia [7]).

La Figura 4 muestra los perfiles de temperatura para una de las pruebas de agua por encima de $RaL = 105$. La posición vertical superior es 0° con 180° en la parte inferior. Las capas límite térmicas cerca de ambos cilindros están bien definidas, al igual que la inversión de temperatura en la región central [7].

Cabe resaltar que para estos resultados, se dejó que el aparato alcanzara un estado estacionario, que llevó al menos 8 horas para el circulamiento del agua.

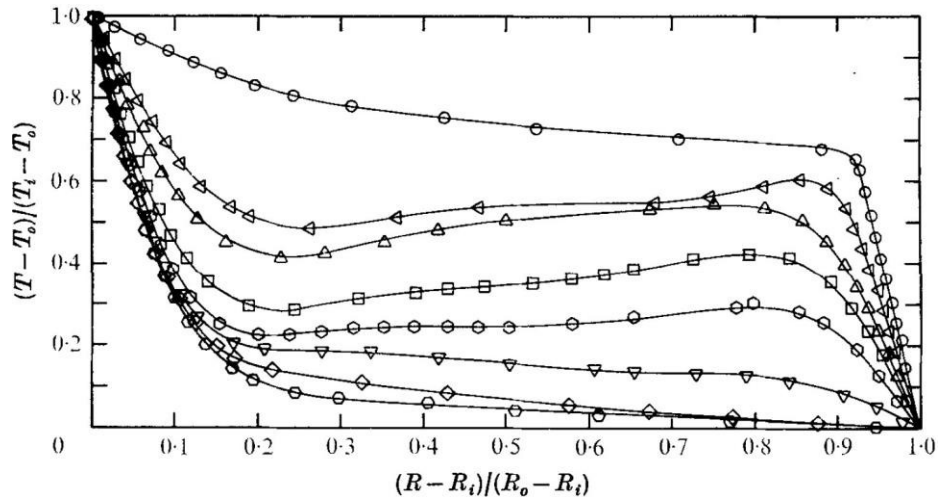


Figura 4: Distribución adimensional de temperatura radial en agua para $RaL = 2.09 \times 10^5$, $Pr = 5.45$, $L/D_i = 0.8$. \circ , 0° ; Δ , 15° ; \circ , 30° ; \square , 60° ; \S , 90° ; \circ , 120° ; \circ , 150° ; $\#$, 180° . (Tomada de la referencia [7]).

La tabla I muestra los valores utilizados en la simulación y las figuras 5, 6, 7 y 8, muestran distintos instantes de tiempo de la simulación para diferentes parámetros calculados.

Tabla I: Datos de la simulación

Distancia entre partículas	0.02 cm
Viscosidad Laminar + SPS	$1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Temperatura inicial del fluido	278.15 K
StepAlgorithm	Verlet
Kernel	Wendland
Tiempo de simulación	4 segundos
Temperatura del contorno frío	278.15 K
Temperatura del contorno caliente	343.15 K
Calor específico a presión constante	4.1813 kJ/kg·K
Difusividad térmica del fluido	$1.84 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
Coefficiente de expansión volumétrica	$0.582 \times 10^{-3} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
Partículas contorno	17644
Partículas fluidas	143192

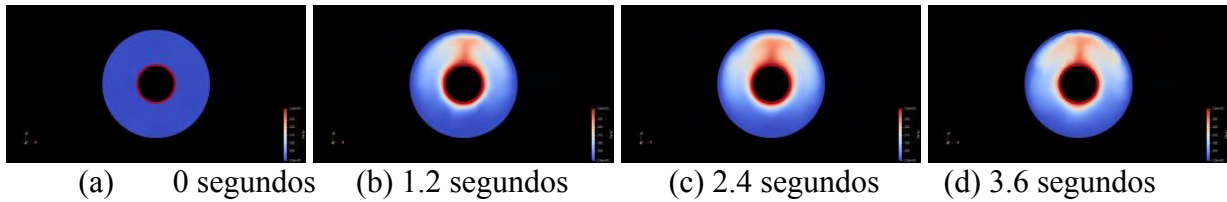


Figura 5: Distribución de la temperatura a diferentes instantes de simulación.

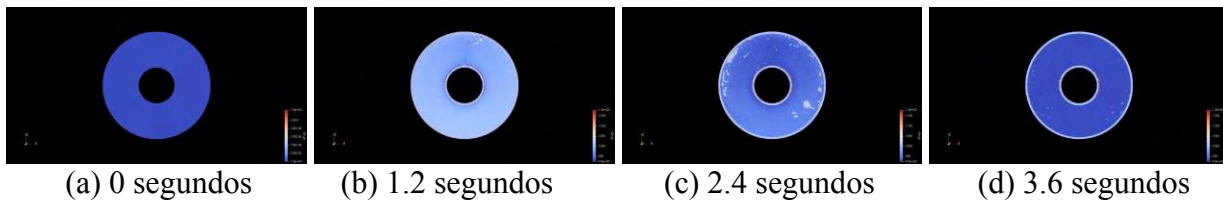


Figura 6: Variación de la densidad a diferentes instantes de simulación.

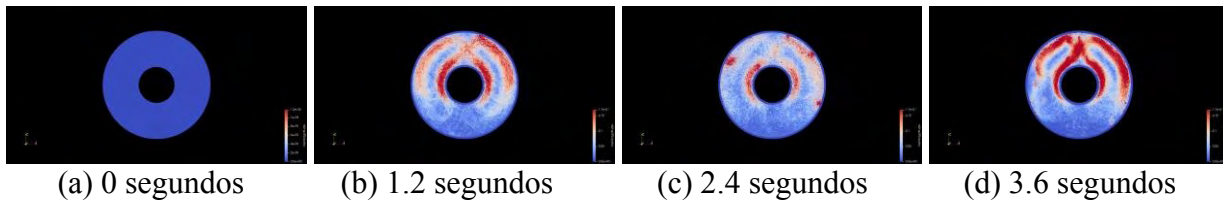


Figura 7: Perfiles de velocidad a diferentes instantes de simulación.

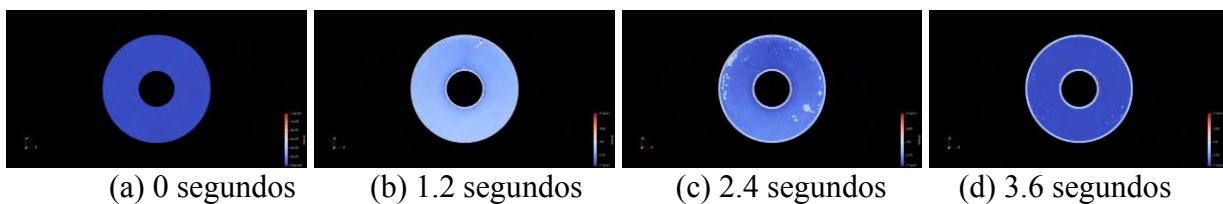


Figura 8: Cambio de la conductividad térmica a diferentes instantes de simulación.

En la figura [5](#), se aprecia el efecto que la fuerza boyante ejerce sobre el fluido, al formar lo que coloquialmente se denomina como “pluma”. Lo que muestra un estado estable con una 1 pluma, ya que se identifican cuatro estados de convección diferentes en simulaciones numéricas, estado estable con 1 pluma (SP1), estado inestable con 1 pluma (UP1), estado estable con n ($n > 1$) plumas (SPN) y estado inestable con n ($n > 1$) plumas (UPN). En la figura [9](#) se hace una comparación entre los

resultados de la simulación realizada en el código DualSPHysics y los resultados obtenidos que se publicaron en el experimento de la referencia [7].

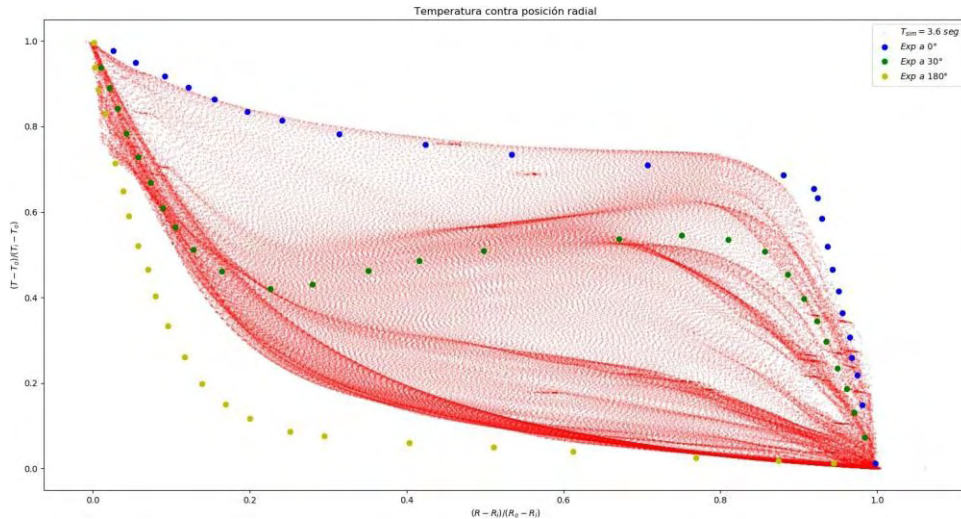


Figura 9: Comparación entre resultados experimentales y simulados.

6. CONCLUSIONES

A pesar de ser un método relativamente nuevo para la solución de problemas de dinámica de fluidos, el método SPH es más flexible y versátil que los métodos basados en malla. Aunque, por el momento, la limitante de este método es el tiempo de cómputo, ya que actualmente las verificaciones de las implementaciones se están corriendo sobre CPU, esto se puede apreciar notoriamente en la figura 9, al no poder alcanzar el estado estacionario del sistema en la simulación realizada con el código DualSPHysics.

En un futuro se planea emplear la paralelización del código DualSPHysics sobre GPU's, lo cual acelerará el tiempo de cómputo de manera significativa. Además se pretende utilizar la facilidad que ofrece el mismo código para introducir geometría detallada de modelado CAD, mediante archivos con formato *.stl, esto para simular lo más detalladamente posible las barras de combustible de un reactor nuclear.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZT-LAN Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACyT-SENER para la elaboración de este trabajo. Así mismo el autor Felipe de Jesús Pahuamba Valdez agradece al Instituto Politécnico Nacional y al CONACyT por la beca recibida para sus estudios de maestría y

al Dr. Carlos Enrique Alvarado Rodríguez, por la ayuda técnica brindada para la realización de este proyecto.

REFERENCIAS

- [1] “Best Practice Guidelines for the Use of CFD in Nuclear Reactor Safety Application – revision.” *Informe de la OECD sobre las buenas prácticas de aplicación de CFD*.
- [2] J. M. Perez. *Development of CFD Thermal Hydraulics and Neutron Kinetics Coupling Methodologies for the Prediction of Local Safety Parameters for Light Water Reactors*. Ph.D. thesis, Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), Alemania.
- [3] A. N. Charles. *Smoothed Particle Modelling of Liquid-Vapour Phase Transitions*. Ph.D. thesis, School of Applied Sciences, RMIT University.
- [4] A. Barreiro, A. J. C. Crespo, J. M. Domínguez, and M. Gómez-Gesteira. “Aplicación del modelo SPH en la protección de costas.” Universidade de Vigo, España (2012).
- [5] X. Yang and S.-C. Kong. “Numerical study of natural convection states in a horizontal concentric cylindrical annulus using SPH method.” Department of Mechanical Engineering, Iowa State University, USA (2017).
- [6] E. P.L. et. al. *Users Guide for DualSPHysics code*. Universidade de Vigo (ES) and the School of Mechanical, Aerospace and Civil Engineering from The University of Manchester (RU).
- [7] T. H. Kuehn and R. J. Goldstein. “An experimental and theoretical study of natural convection in the annulus between horizontal concentric cylinders.” *J Fluid Mech*.

Síntesis de fitatos de circonio para recuperar uranio en solución

Ordoñez Regil E., Almazán Torres M.G.

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

Departamento de Química

Carretera México-Toluca, s/n, La marquesa, Ocoyoacac C.P. 52750

eduardo.ordonez@inin.gob.mx ; guadalupe.almazan@inin.gob.mx

Escalante Gutiérrez D.C., Ortiz Landeros J.

Instituto Politécnico Nacional

Departamento de Ingeniería Metalúrgica y Materiales

Av. Luis Enrique Erro s/n, Zacatenco, Delegación Gustavo A. Madero, C.P. 07738 CDMX

descalanteg27@gmail.com ; jlanderos@gmail.com

Resumen

El desarrollo de la tecnología de la producción de electricidad por medios nucleares nos impone la necesidad de tener en cuenta el control de las diferentes fases del proceso así como de los residuos producidos por los reactores nucleares. En este sentido se han desarrollado muchos sistemas de recuperación de radionúclidos que por una u otra causa están libres en la naturaleza. Se han empleado materiales naturales y sintéticos altamente eficientes en la purificación de efluentes contaminados, pero por su costo de producción resultan de aplicación muy restringida. En la naturaleza existen compuestos que tienen la propiedad de reaccionar con algunos contaminantes, tal es el caso del hexafosfato de inositol (IP6) que se presenta abundantemente en los cereales y otras plantas. Este fosfato, soluble en agua tiene la propiedad de reaccionar con muchos metales, los atrapan y precipitan haciendo muy sencilla su aplicación tecnológica en la descontaminación y remediación de derrames tóxicos. En este trabajo se presentan los avances sobre la factibilidad de usar el complejo de ácido fítico con circonio (IV) para recuperar al ion uranilo de soluciones, en condiciones controladas.

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los mayores retos que ha tenido que enfrentar la industria nuclear, y que ha frenado en gran medida su expansión y desarrollo, tiene que ver con el uso de material nuclear y el manejo de los residuos radiactivos que se generan como resultado de la producción de energía eléctrica. Esto se debe a su alto contenido de elementos radiactivos, particularmente actínidos, entre los que se encuentran emisores alfa, altamente tóxicos y de vidas medias largas [1]. Algunos actínidos, particularmente el uranio, han estado presentes en la corteza terrestre desde su origen [2], encontrándose distribuido de manera heterogénea, contribuyendo así a la dispersión de la radiactividad natural en los diferentes medios, sólo que la concentración y distribución de estos actínidos en el ambiente, depende del medio en el que se encuentran (agua, suelo, rocas) [3].

Uno de los métodos que se han propuesto para limitar la movilidad de actínidos consiste en reducir su solubilidad en agua y suelo transformando éstos de formas potencialmente móviles a formas termodinámicamente estables [4]. El reactivo seleccionado debe ser compatible con el agua o suelo, potencialmente usado para ayudar en el proceso de inmovilización [5]. Dicho sistema deberá primero capturar los iones metálicos pesados y entonces remover estos del flujo de agua a través de un proceso llamado proceso de intercambio catiónico. Dada la gran variedad de sitios de coordinación posibles en las biomoléculas, es difícil describir la formación de complejos por los métodos clásicos de química en solución. La estrategia que se presenta en este trabajo es el estudio de los mecanismos intermoleculares involucrados en la interacción catión-ligando en sistemas simples [6]. Así pues, en este estudio se propone estudiar el sistema ácido fítico/circonio, que servirá de sustrato adecuado para coleccionar los complejos formados en solución con el U (VI) [7]. Dado que el ácido fítico, altamente reactivo por sus 12 sitios protonados, es soluble en agua y el principio de acción de este método se basa en la formación de un complejo de varias moléculas de ácido fítico ligadas a un átomo central de circonio, lo que le confiere una alta insolubilidad, dejando aún muchos sitios activos protonados que son los que pueden reaccionar con el uranio.

El ácido fítico o Hexakis[dihidrogeno(fosfato)] de (1r,2R,3S,4s,5R,6S)-ciclohexano-1,2,3,4,5,6-hexaio ($C_6H_{18}O_{24}P_6$) es un ácido orgánico que contiene fósforo. El ácido fítico se encuentra en forma natural en los cereales, nueces, legumbres y semillas, donde cumple con funciones biológicas importantes. Una característica interesante del ácido fítico es su capacidad para acomplejar iones metálicos pesados. Las interacciones entre iones pesados y ácido fítico forman compuestos insolubles que precipitan lo que les impide interaccionar con otras sustancias. En particular, el ácido fítico presenta buena afinidad frente a algunos actínidos como el uranio, por lo que se ha propuesto su uso en la remoción de actínidos en suelos y aguas [8]. Debido a estas características se plantea la hipótesis de poder formar complejos de fitatos de circonio que son insolubles y aun en esta forma tienen sitios activos que pueden reaccionar con el uranio disperso en solución, a lo largo de un amplio margen de pH, de 2 a 12 [9], formando diferentes complejos ternarios Fitato-Circonio-Uranilo

2. METODOLOGÍA

El material de prueba para la sorción de uranio ($Zr-IP_6$) fue sintetizado en el laboratorio de radioquímica del ININ, usando reactivos analíticos comerciales, con pureza certificada. El compuesto obtenido fue caracterizado por varias técnicas, tanto físicas como químicas y su evaluación para sorber el uranio en solución se realizó elaborando una cinética de sorción en condiciones controladas

2.1. Síntesis del $Zr_3(IP_6)_4$

El $Zr_3(IP_6)_4$ fue sintetizado mediante la reacción descrita por Sun P.[10], con 10 g de $ZrCl_4$ en ácido clorhídrico concentrado y 30 ml de hexametáfosfato de inositol al 50% (IP_6) disuelto en 30 ml de agua para formar un gel, que está formado por el producto de la reacción directa de 3 átomos de circonio enlazando directamente 4 moléculas del compuesto de IP_6 en forma lineal. Se tomaron

porciones pequeñas para hacer una serie de análisis para establecer la pureza y eficiencia de la síntesis de este compuesto.

2.2. Caracterización estructural del $Zr_3(IP6)_4$

2.2.1. Difracción de rayos X

La identificación de la fase obtenida se evaluó mediante un difractómetro de rayos X D8 Discover, usando una fuente de radiación de $Cu K_{\alpha}$ ($\lambda=1.540 \text{ \AA}$) y 20 mA. El difractograma fue obtenido en un intervalo de 4° a 70° en un ángulo 2θ . Los patrones de difracción de rayos X se compararon con los patrones del JCPDS de la base de datos del Departamento de Materiales

2.2.2. Espectroscopia infrarroja.

Los espectros infrarrojos, se obtuvieron utilizando un espectrómetro PEKIN-ELMER modelo 1600-FTIR, se obtuvieron espectros de transmitancia en un intervalo de número de onda de 4000 a 400 cm^{-1} , la preparación de las muestras se realizó con bromuro de potasio (KBr) grado infrarrojo el cual fue homogenizado junto con 5 % en peso de la muestra de Zr-IP6 en un mortero de ágata, y se prepararon de pastillas por prensado.

2.2.3. Espectroscopia Raman

Los espectros Raman se realizaron en un equipo Horiba Jobin Yvon modelo Labram HR 800 equipado con un microscopio confocal Olympus modelo BX41, como fuente de irradiación, se empleó un láser de 663 nm, además el análisis fue empleado un objetivo 50X, se utilizó un filtro D06 con un arreglo de $400 \mu\text{m}$. Con el propósito de disminuir la señal del ruido de los espectros se utilizaron alrededor de 150 adquisiciones con un tiempo de exposición de 2 segundos, el espectro se realizó en un rango espectral de 100 a 1500 cm^{-1} .

2.2.4. Microscopia electrónica de barrido y de transmisión.

Con estas técnicas se puede controlar de manera visual el material obtenido en la síntesis, la microscopia electrónica de barrido se realizó en un equipo PHILIPS modelo XL-30, para esto, las muestras libres de humedad y bien dispersadas se fijaron en porta muestras con cinta autoadherible de carbón y se recubrieron con una capa delgada de Au. Se obtuvieron imágenes de los gránulos que componen el fitato de circonio, así como el análisis elemental puntual. La microscopia electrónica de transmisión se realizó en el equipo JEM 2010HT. Con la técnica de polvo que se dispersó en un solvente inerte, de aquí se toma una gota que es colocada en una rejilla de cobre, cubierta con una membrana de polímero plástico, esto se deja secar y se coloca en la cámara de alto vacío del el microscopio.

2.3. Caracterización superficial del $Zr_3(IP6)_4$

Estas pruebas tienen como objetivo determinar el comportamiento de la superficial de las partículas que componen el fitato de circonio.

2.3.1. Determinación del área superficial.

Esta prueba será de gran utilidad para conocer los el área que está asociada a los gránulos del fitato de circonio. Se realizó en un equipo Bel Japan, modelo Belsorp Max, con gases de nitrógeno y helio de ultra alta pureza iniciando la isoterma de absorción-desorción a 77K. Pesando una pequeña cantidad del compuesto en una probeta calibrada para este fin según el método clásico N2-BET.

2.3.2. Determinación de sitios activos de superficie.

Este parámetro es útil para determinar la cantidad de cationes reactivos que pueden ser atrapados por unidad de peso en base seca del material de prueba. Esta prueba se realiza mediante la titulación ácido-base. Las curvas de titulación fueron realizadas en un titulador automático Tritablab 90, equipada con una auto-bureta ABU901 y un baño termostático para mantener el proceso a una temperatura de 30°C. Durante todo el experimento, la suspensión se mantuvo en agitación y bajo atmósfera de nitrógeno.

2.3.3. Pruebas de Sorción de uranilo en solución.

Una solución madre 1×10^{-2} M de uranilo fue preparada a partir de cristales de nitrato de uranilo $UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$. Se pasó de la forma nitratos a perclorato adicionando un poco de agua destilada y 2 mL de ácido perclórico al 60%, se calentó en la plancha hasta sequedad. Este procedimiento se repitió 2 veces más. Posteriormente el concentrado fue recuperado con un poco de agua desionizada y aforado a 25 mL. Se prepararon lotes de 10 ml de solución 1×10^{-3} M de perclorato de uranilo, con sal de fondo perclorato de sodio 0.1 M sobre porciones de 100 mg de Zr-IP6 en tubos cónicos polipropileno de 15 ml y se agitaron en un rotador circular por diferentes espacios de tiempo y al final se separó el sobrenadante por medio de centrifugación a 3000 rpm. Midiendo el contenido de uranilo en el sobrenadante por medio de centelleo líquido contrastando con un estándar de referencia. De esta manera se elaboró una cinética de sorción durante un lapso de 20 min a 16 h a pH=4.

2.3.4. Calculo del coeficiente de partición (Kd)

Uno de los modelos empíricos o fenomenológicos más utilizados para la determinación de los parámetros que permite comparar los diferentes sorbentes es el coeficiente de partición. El concepto de Kd es el modelo típicamente usado en geoquímica, este supone que la constante de equilibrio de distribución Kd representa la relación de la concentración del radionúclido sorbido sobre la superficie del solido de prueba y la concentración total del radionúclido disuelto inicialmente, es decir la suma de todas las especies acuosas del sorbato.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se ha producido el $Zr_3(IP_6)_4$ mediante la técnica sol gel propuesta por SUN [9], mezclando una solución clorhídrica de $ZrCl_4$ por goteo sobre hexametáfosfato de inositol al 50% (IP6) disuelto en 30 ml de agua, a medida que el $ZrCl_4$ se adicionaba a la solución de IP6, se iba formando un gel blanquecino que fue agitado toda la noche, al día siguiente se centrifugo a 3000 rpm y la pasta se secó a $90^\circ C$, posteriormente se lavó nuevamente hasta que se eliminó el exceso de reactivos, se secó nuevamente y se pulverizó en mortero de ágata.

La primera prueba que se hizo a este compuesto fue la de difracción de rayos X de polvos. Esta prueba nos reveló en primer lugar, que el compuesto está formado por una mezcla de fases diferentes que corresponden al fitato de circonio con pequeñas cantidades de ZrO_2 , como lo muestra la Figura 1. En que aparece un difractograma con señales cristalinas muy finas, que indican pequeñas concentraciones de ZrO_2 , ya que el fitato de circonio es completamente amorfo y no aparece en el difractograma. Estas conclusiones fueron obtenidas al comparar estos resultados con los de nuestra base de datos.

El análisis por espectroscopía Raman confirma que existe una fracción de óxido de circonio en esta mezcla, ya que se aprecian los 18 modos vibracionales en el ZrO_2 monoclinico, en la Figura 2 se presenta un análisis de 100 a 700 cm^{-1} en que se aprecian ciertas diferencias entre los espectros del corrimiento Raman, lo que nos indica que el material obtenido es heterogéneo

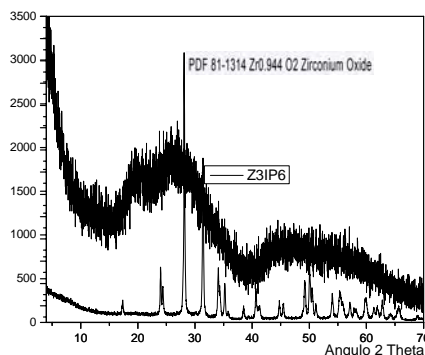


Figura 1. Difractograma XRD del Zr-IP6

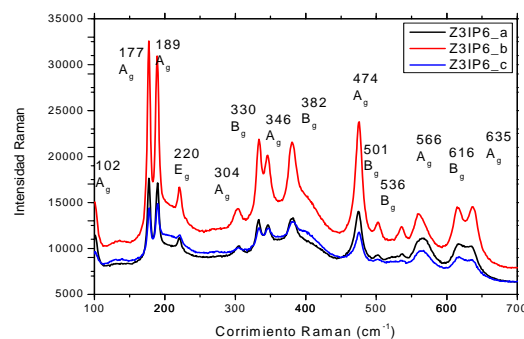


Figura 2. Espectro Raman del Zr-IP6

La espectroscopia infrarroja nos ha dado la pauta para considerar que el compuesto obtenido es una mezcla de la menos dos compuestos (Figura 3), siendo la de Zr-IP6 la mayoritario, debido a la intensidad de las bandas presentadas en las longitudes de onda de 1440 y de 511 cm^{-1} , correspondiente al enlace fosforado de la parte inorgánica de la molécula compuesta, en la banda de 1080 cm^{-1} se aprecia la confirmación de la presencia del IP6, ya que la banda corresponde a la unión C-O-P. La microscopia electrónica de barrido, a $5,000X$ mostro que hay materia orgánica en aglomerados de diferentes tamaños, entre los cuales se encuentran dispersas estructuras cristalinas de manera aleatoria (Figura 4). En la micrografía de TEM a $80,000 X$ se parecía en detalle la conformación de un aglomerado a base de gránulos firmemente cementados de Zr-IP6 y con algunos

micro cristales de óxido de circonio adheridos a la superficie, como se aprecia en la Figura 5. Los patrones de difracción de ambas partes del esta partícula mostraron patrones de anillos para el Zr-IP6 y espectro de difracción de puntos para la partícula de ZrO_2 .

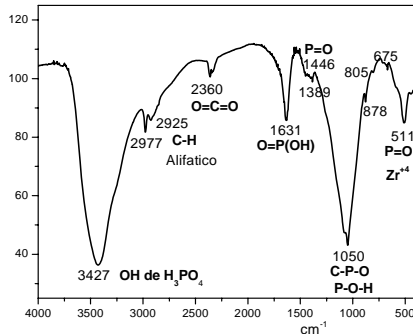


Figura 3. Espectro FTIR

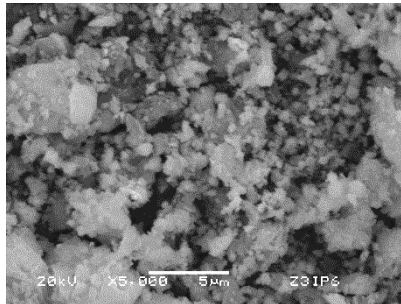


Figura 4. Micrografía SEM

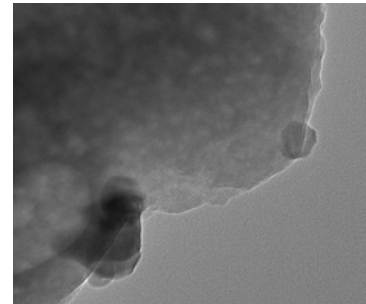


Figura 5. Micrografía TEM

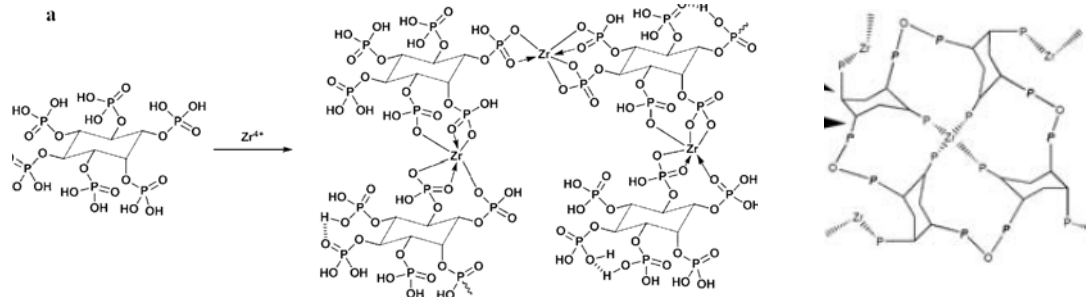
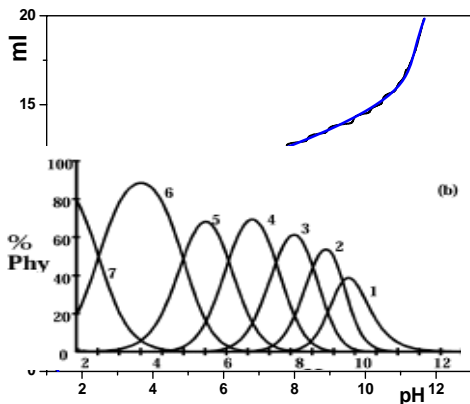


Figura 6. Productos de reacción más frecuentes del circonio con el ácido fítico.

En la Figura 6 se muestran dos de los principales productos de reacción del ácido fítico con tetracloruro de zirconio, normalmente son designados por la relación estequiométrica de su fórmula condensada quedando, la primera molécula como (3:4) 3 de Zr y 4 de IP6, la segunda sería (1:4), 1 de Zr y 4 de IP6. Después de hacer los análisis estructurales, solo fue posible determinar la existencia de grupos Zr-IP6 sin determinar aun su estequiometria, lo cual queda aún pendiente.

La determinación de la cantidad de sitios activos en la superficie del Zr-IP6 se realizó por medio de la titulación ácido-base, en la que el consumo de NaOH 0.1 N es equivalente a la cantidad de radicales ^+H en los sitios de reacción en la superficie del polvo del fitato en la suspensión que se titula. La cantidad de sitios resulta de una serie de factores que asocian la solución titulante con el peso del fitato sólido, como se explica en la Ecuación 1:.



$$D_s(\text{sitios. nm}^2) = \frac{(N_1 - N_2) \cdot N_A}{A \cdot C \cdot V \cdot (10^{-3}) \cdot (10^{-6})}$$

- N₁: Número de OH⁻ presentes en el blanco
- N₂: Numero de OH⁻ adsorbidos por el Zr-IP6
- N_A: Constante de Avogadro (6.023x10²³)
- A: Área superficial del Zr-IP6 (m²·g⁻¹)
- V: Volumen inicial de la titulación (L)
- C: Concentración del compuesto en la solución (g·L⁻¹)

Figura 7. Titulación ácido-base del fitato de circonio

De los 12 sitios protonados disponibles en el ácido fítico se aprecia en la Figura 7, que algunos sitios han sido ocupados por átomos de circonio en la molécula de fitato de circonio analizada, con lo que queda claramente establecido en enlace iónico del circonio en los sitios ácidos del IP6.

Tabla 1. Resultados para las pruebas de área superficial y densidad de sitios activos

Material	Zr-IP6
Área superficial (m ² /g)	6.144
Densidad de sitios activos (s/nm ²)	3.43

Estos valores para las constantes de superficie son relativamente altos y por tanto muy convenientes para hacer las pruebas de sorción de iones metálicos en solución.

Las pruebas de sorción de uranilo en la superficie del Zr-IP6 se realizaron por medio del método de lotes, como se ha descrito en epígrafes anteriores. Como primera prueba se elaboro una cinética de sorción de Zr-IP6 sobre una solución de uranilo con concentración de 0.1 M con un pH inicial de 4, en tiempos de 20 y 40 min, 1, 1.5, 2, 4, 6 y 16 horas y se observa un máximo de sorción para estas condiciones a 32% (Figura 8) y se hizo una regresión para determinar K_d mediante la fórmula (2). El concepto de K_d es el modelo típicamente usado en geoquímica, este supone que la constante de equilibrio de distribución K_d representa la relación de la concentración del radionúclido sorbido sobre la superficie del solido de prueba y la concentración total del radionúclido disuelto inicialmente. También se puede calcular en un primer tiempo la capacidad de sorción (q_e) de la concentración de uranilo en el equilibrio y con esto el porcentaje de uranilo sorbido y no hay disolución del fitato de circonio en estas condiciones aunque el pH final del procedimiento es cercano de 2.

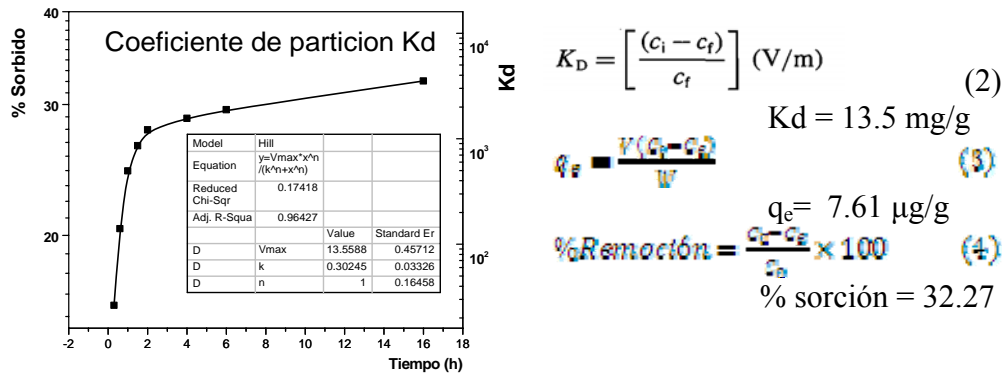


Figura 8. Cinética de sorción de uranio en Zr-IP6

4. CONCLUSIONES

-Se pudo obtener un compuesto Zr-IP6, con reactivos analíticos de IP6 y ZrCl4 en condiciones controladas y de forma repetitiva.

-Los análisis químicos y estructurales revelaron la presencia mayoritaria del Zr-IP6 y pequeñas impurezas de ZrO2 .

-Las pruebas de sorción mostraron que el Zr-IP6 tiene buenas aptitudes para sorber el uranio en solución, a pH=4, se pudo determinar una sorción de 32.2% sin pérdida de Zr-IP6 por disolución.

AGRADECIMIENTOS

Se reconoce el apoyo técnico de; Isidoro Martínez, Pavel López Carbajal y a Jorge E. Pérez por los análisis de DRX, SEM y TEM.

REFERENCIAS

1. R. Guillaumont, "Radiochemical Approaches to the migration of elements from Radwaste repository". RadiochimicaActa **66/67**(1994) 231-242.
2. J.K. Osmond, J.B.Cowart, "Natural Uranium and Thorium Series Disequilibrium: New Approaches to Geochemical Problems". Nuclear Science Applications **1**(1982)303-352.
3. P. Grabowski, H. Bem, "Uranium isotopes as a tracer of groundwater transport studies". Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry **292** (2012)1043–1048.
4. Jensen M.P., Nash K.L., Morss L.R., Appelman E.H., Schmidt M.A. "Immobilization of Actinides in Geomedia by Phosphate Precipitation" Humic and Fulvic Acids 17 (1996) pp 272285

5. Zhang W. "Column Leaching Test to Study Mobilization of Radionuclides in Liner System of On-site Disposal Facility at Fernald Site Master" Thesis at University of Cincinnati, August 2001.
6. Hummel W., Puigdomenech I., Rao L., Tochiyama O. Thermodynamic data of compounds and complexes of U, Np, Pu and Am with selected organic ligands *C. R. Chimie* 10 (2007) 948-958.
7. Shlewit H., Alibrahim M. "Recovery of uranium from phosphate by carbonate solutions" *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 275, 1 (2008) 97-100.
8. Betts K. "Phytic acid immobilizes radionuclides" *American Chemical Society* 31, 6, (1997) 263
9. Synthesis and characterization of phytate-uranium (VI) complexes.
G. Tovar-Valdín, E. Ordóñez-Regil, M-G. Almazán-Torres, S. Martínez-Gallegos.
Journal of Radioanal. Nucl. Chem **318**, 3 (2018) 2129–2137

P. Sun, Z. Li, M. Song, S. Wang, X. Yin, Y. Wang. "Preparation and characterization of zirconium phytate as a novel solid intermediate temperature proton conductor" *Materials Letters* 191 (2017) 161–164

Adsorción de U (VI) en caolinita

Ana Karen Cuevas Jaramillo, J. Ignacio Dávila Rangel, Hugo López del Río, Liliana Miranda Castro*

*Unidad Académica de Estudios Nucleares, UAZ
Ciprés 10 Fracc. La Peñuela, Zacatecas, MX
cuja2105@hotmail.com; idavilara@gmail.com; hlopez@hotmail.com*

Resumen

La caolinita es una arcilla ampliamente utilizada en diferentes industrias, pues sus propiedades como material adsorbente son muy conocidas, lo que ha favorecido el uso de este material. La adsorción de uranio en caolinita fue investigada utilizando técnicas de adsorción en batch bajo diferentes condiciones experimentales como: la relación V/m (cantidad de material), tiempo de contacto entre las fases líquida y sólida, pH de la solución de uranio, concentración inicial de uranio y temperatura. La cantidad de material de 0.480 g y una relación V/m de 16.634 mL/g fueron las más adecuadas para este proceso de adsorción; mientras que la cinética mostró que la adsorción de uranio alcanza el equilibrio en 1440 minutos. La adsorción se favoreció a condiciones de un pH de 6 y una concentración de 150 ppm y el proceso de adsorción de uranio en bentonita resultó ser altamente dependiente de la temperatura. Este trabajo contribuye a la comprensión del comportamiento de la caolinita en la adsorción de U (VI). Las respuestas a las variables estudiadas pueden ser consideraciones básicas a tomar en cuenta al momento de decidir su utilización en algún problema en específico.

1. INTRODUCCIÓN

La adsorción es uno de los procesos fisicoquímicos más importantes que se produce en las fases sólido-líquido y gas-sólido; ésta se ha convertido en uno de los métodos preferidos para la eliminación, recuperación y reciclaje de diferentes especies metálicas y compuestos químicos de efluentes acuosos. Es un proceso de transferencia de masa por el cual una sustancia es transferida desde una fase líquida hasta la superficie de un sólido donde se une por interacciones físicas y/o químicas.

Se han estudiado varios tipos de adsorbentes para eliminar y recuperar uranio, ya sea en forma pura, natural, o modificados superficialmente con otras especies. En general, todo material sólido con estructura porosa puede ser empleado como adsorbente pero, la capacidad de adsorción dependerá de su estructura interna y área superficial; adicionalmente, la selectividad para fijar esta especie está condicionada por la naturaleza química y la polaridad de la superficie adsorbente. Las arcillas y sus compuestos se consideran particularmente efectivas para la adsorción de algunos elementos, debido a su bajo costo y alta estabilidad química.

El mineral caolinita es uno de los minerales mayoritarios en los diez primeros metros de la corteza continental, la caolinita es un silicato de aluminio hidratado formado normalmente por la descomposición de feldespatos y otros silicatos de aluminio; esta descomposición se debe a los efectos prolongados de los procesos de meteorización en los que intervienen el agua y el dióxido de carbono.

La fórmula estructural de la caolinita es $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ y su composición centesimal responde a: $\text{SiO}_2=46.53\%$, $\text{Al}_2\text{O}_3=39.49\%$ y $\text{H}_2\text{O}=13.98\%$. La estructura de la caolinita es de las más sencillas, es aquella que consiste en el apilamiento indefinido de capas formadas por hojas tetraédricas (T) y octaédricas (O) ósea la lámina tipo 1:1, una hoja de tetraedros de silicio-oxígeno unida a otra hoja de octaedros de aluminio-oxígeno-OH. La sustitución del silicio por otro elemento, como el aluminio, o bien la sustitución del aluminio en la hoja tipo O por otro elemento de menor carga, por ejemplo el magnesio, causa un cambio químico en el material pero mantiene esencialmente la misma estructura.

Este material ha sido estudiado en la adsorción de diferentes tipos de iones metálicos, ya sea natural o modificada, un ejemplo es el estudio de la adsorción del Cu^{2+} bajo un campo magnético, en donde se analizaron los efectos del campo mediante el diseño de la variación del tiempo de exposición, la densidad del flujo magnético y el método de exposición magnética [1], también se ha investigado la eliminación de Fe (III) a partir de una solución acuosa por medio de caolinita, montmorillonita y sus formas de ácido activadas [2]. Arcillas de caolinita y metacaolinita obtenidas del sur de Camerún se utilizaron para estudiar su capacidad de adsorber Ni (II), el estudio destacó varios parámetros y se estableció que la eliminación de Ni (II) depende del pH, de la concentración inicial del soluto y de la masa del material adsorbente [3]. Srivastava y colaboradores estudiaron la adsorción de Cd (II), Cu (II), Pb (II), y Zn (II) en caolinita en sistemas de uno y múltiples elementos en función del pH y de la concentración en una solución con concentración de 0.001 M de NaNO_3 [4]. La adsorción de U (VI) en caolinita purificada fue estudiada por experimentos en lote bajo condiciones ambientales por Zhang y colaboradores en el 2013 [5]. Guanghui Wang y colaboradores estudiaron la adsorción de uranio en solución acuosa con caolinita calcinada y activada con ácido, notando que la capacidad de adsorción fue mejor una vez que se modificó el material [6]. Gao y colaboradores investigaron la adsorción de U (VI) en caolinita en función del tiempo de contacto, pH, concentración de U (VI) utilizando experimentos en lote [7].

La presente investigación tuvo como propósito estudiar las propiedades de adsorción de uranio en soluciones acuosas utilizando caolinita cruda como material adsorbente en función de diferentes parámetros fisicoquímicos experimentales como: efecto de la cantidad de material, efecto del tiempo de contacto, efecto del pH, efecto de la concentración de U (VI), efecto de la temperatura en el medio acuoso.

2. PARTE EXPERIMENTAL

2.1. Acondicionamiento del material

El acondicionamiento del material se realizó antes de someter la caolinita al proceso de adsorción. Para eliminar impurezas y granos finos, se sometió a un proceso de lavado por inmersión y agitación con agua desionizada durante un día; posteriormente la suspensión se decantó y la caolinita se sometió a secado por 24 h a 90 °C. El material seco se trituro para obtener malla #100 (0.150 mm), esta fracción fue utilizada en todos los experimentos. Todos los reactivos utilizados en este estudio fueron grado analítico y se utilizaron sin purificación.

2.2. Caracterización del material

Se analizó el material previamente tratado, utilizando análisis de difracción de rayos X con un difractómetro de rayos X (XRD) Bruker D8 Advanced Eco™, así como también por microscopía electrónica de barrido con un equipo FEI Quanta 650 con 2 detectores de espectrometría de energía dispersa de rayos X (EDS) (Bruker Xflash 5030).

2.3. Efecto de la cantidad de material (relación V/m)

La adsorción se efectuó con agitación mecánica, a una temperatura ambiente (25°C), utilizando 8 mL de solución de $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ con una concentración de 100 ppm de uranio, cada una de las series experimentales se realizaron por triplicado. Se utilizaron cantidades de 0.080, 0.160, 0.240, 0.320, 0.400 y 0.480 g de material; para evaluar el efecto de la cantidad de material adsorbente y para la representación de los resultados se obtuvo la relación V/m de cada una de las diferentes cantidades de material trabajadas, siendo las siguientes relaciones: 97.722, 49.813, 33.243, 24.976, 19.928 y 16.634 mL/g (siendo la mayor relación V/m la menor cantidad de material y la menor relación V/m corresponde a la mayor cantidad de material). Después de este procedimiento se trabajó con la relación (V/m) más eficiente.

2.4. Efecto del tiempo de contacto y modelado cinético

Para el efecto del tiempo de contacto, la adsorción se trabajó de igual manera con agitación mecánica a una temperatura ambiente (25°C), utilizando 0.480 gramos de caolinita en contacto con 8 mL de solución de $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ a una concentración de 100 ppm de uranio, con tiempos de contacto correspondientes a: 2, 5, 10, 20, 40, 60, 120, 240, 360, 480, 720, 1440, 2880 y 5760 minutos. De ésta serie experimental se obtiene el tiempo de contacto necesario para alcanzar el equilibrio, mismo que se utiliza en los experimentos subsecuentes.

Para el modelado de la cinética del proceso de adsorción, el análisis de los datos experimentales de la cinética de adsorción de U (VI) a diferentes tiempos de caolinita se ajustó a la forma no lineal de las ecuaciones referentes a los modelos de cinética de primer orden de Lagergren y de segundo orden de Ho y Ritchie modificado utilizando para ello, el software STATISTICA® 7, versión para Windows® [8 y 5].

2.5. Efecto del pH

En el estudio del efecto del pH inicial de la solución, el pH se varió en un rango de 2 a 9, con valores de 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 y 9; el valor del pH se ajustó al valor requerido con pequeñas cantidades de soluciones de HCl y NaOH concentrados. De estos experimentos se obtiene el valor de pH óptimo de la solución.

2.6. Efecto de la concentración y modelación de las isotermas de adsorción

Una vez definidos la cantidad de masa de material adsorbente, tiempo de contacto y pH, se procedió al estudio del efecto de la concentración de uranio, bajo las mismas condiciones, se trabajó con soluciones de uranio a diferentes concentraciones conocidas: 25, 50, 100, 150, 200 y 250 ppm, se pusieron en contacto con la caolinita y de esta manera se conoció la concentración a la cual existe mayor retención de uranio para caolinita.

El análisis de los datos experimentales de las isotermas de adsorción a diferentes concentraciones de uranio se ajustó a la forma no lineal de las ecuaciones referentes a los modelos de las isotermas de Freundlich, Langmuir y Sips utilizando para ello, el software STATISTICA® 7, versión para Windows®

2.7. Efecto de la temperatura del medio acuoso y parámetros termodinámicos

Para el efecto de la temperatura, la adsorción se efectuó con agitación mecánica, utilizando 8 mL de solución de $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ con una concentración de 100 ppm de uranio, se varió la temperatura al momento del contacto con la ayuda de un baño térmico, se trabajaron diferentes temperaturas desde: 25°C, 45°C, 65°C y 80°C. Con el fin de conocer el comportamiento del proceso de adsorción en función de la temperatura.

La definición del comportamiento de la termodinámica, fue con el fin de obtener los parámetros como la entalpía (ΔH°), la entropía (ΔS°) y la energía libre de Gibbs (ΔG°) para definir si la reacción es endotérmica o exotérmica y la espontaneidad del proceso de adsorción.

2.8 Análisis de uranio

Posterior al contacto, el uranio no adsorbido en el sobrenadante se cuantificó por el método de arsenazo (III), el cual fue adaptado del propuesto por Khan, et al., 2006, Loic, et al., 2013 y M. M., et al., 2013 a 651 nm [9, 10 y 11].

El reactivo AZ-III se prepara disolviendo 0.035 g de arsenazo III en 25 mL de HClO_4 [3 M] y se afora en un matraz de 100 mL ([Az 350 ppm]). La curva de calibración se obtiene mezclando 1 mL de solución estándar de $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ a diferentes concentraciones (1, 5, 10, 25 y 50 ppm) con 3 mL del reactivo Az-III [350 ppm] y se mide a 651 nm en el espectrofotómetro. Después de este procedimiento se realiza la formación del complejo UO_2^{2+} -AzIII. Con el sobrenadante que se obtiene de cada uno de los contactos de las diferentes etapas experimentales, y enseguida se efectúa la medición de las muestras.

El porcentaje de adsorción del metal en la fase sólida se calculó de la siguiente manera:

$$\%Ads = \frac{A_i - A_f}{A_i} \times 100 \quad (1)$$

Donde: A_i y A_f son la concentración inicial y final de uranio en la solución, respectivamente.

3. RESULTADOS

3.1. Caracterización del material

La *Figura 1*, presenta el difractograma de rayos X de la muestra de caolinita lavada; el cual indica que el mineral principal para este material es la caolinita [$Al_2Si_2O_5(OH)_4$], ya que lo contiene en mayor proporción, así como también se pueden observar otras señales que confirman la presencia de algunas impurezas de cuarzo [SiO_2] y alunita [$KAl_3(SO_4)_2(OH)_6$].

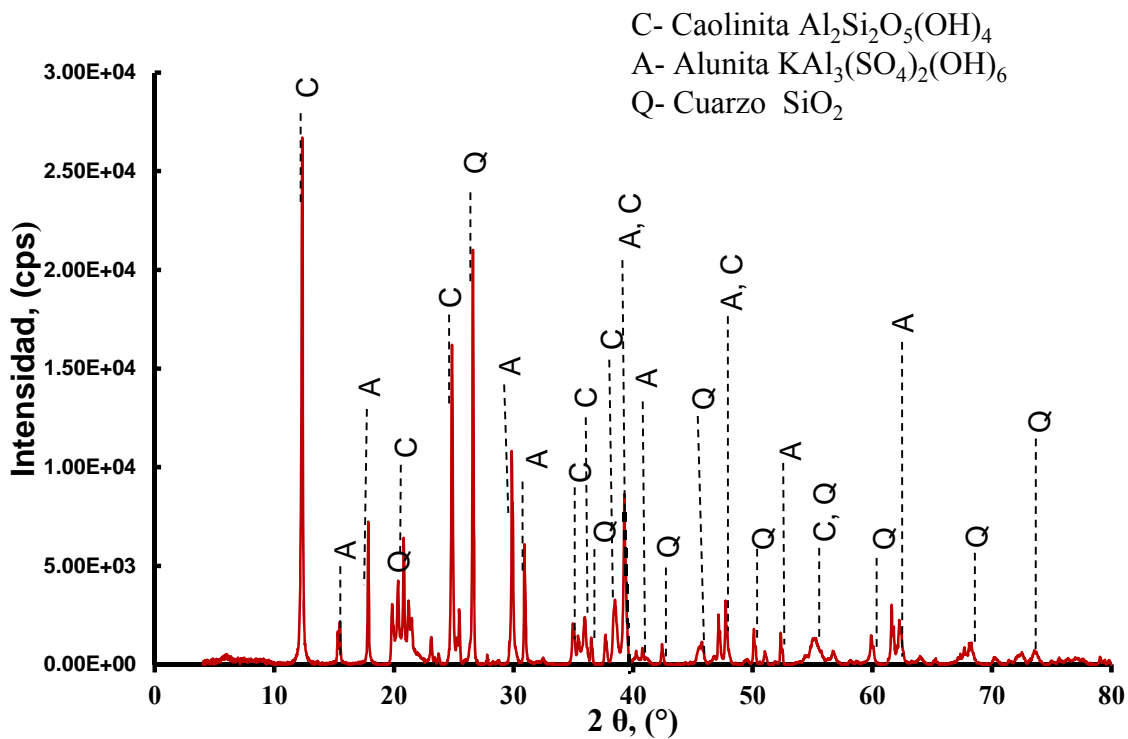


Figura 1. XDR de caolinita.

Con el microscopio electrónico de barrido se obtuvieron imágenes de alta resolución de la superficie de una muestra de caolinita lavada (*Figura 2*), se tomaron imágenes con una resolución de 30 μm y 10 μm , en donde se nota una gran cantidad de partículas finamente conglomeradas, así como también se puede apreciar que cuenta con una estructura del tipo laminar en capas muy delgadas.

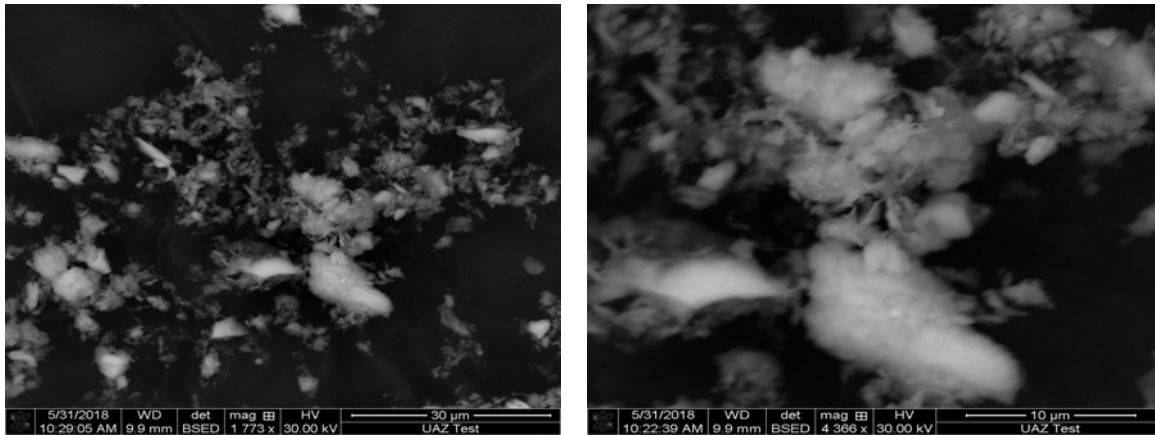


Figura 2. Microscopía electrónica de barrido (MEB) de caolinita a 30 y 10 μm .

3.2. Efecto de la cantidad de material (relación V/m)

La dosificación de material adsorbente es un parámetro importante en el proceso de adsorción, porque determina la capacidad de un adsorbente para una determinada concentración inicial de adsorbato bajo ciertas condiciones. Para evaluar el efecto de la cantidad de material se realizaron experimentos por lotes en el proceso de adsorción de uranio en caolinita. En la *Figura 3* se puede observar que la variación del porcentaje de uranio adsorbido, en función de la relación (V/m) del adsorbente, mostró que conforme que la adsorción de uranio se redujera con el aumento de la relación v/m, esto quiere decir que al aumentar la cantidad de material adsorbente (caolinita), también aumenta el porcentaje de adsorción. Esto es esperado porque un número creciente de partículas adsorbentes en la solución permite que más iones de uranio actúen con los sitios de reacción; para una concentración fija de metal, al aumentar la dosis de adsorbente hay más centros activos superficiales capaces de fijar los metales presentes en la disolución. Por lo que se tomó 0.480 g de caolinita como la cantidad óptima para trabajar, la cual da una relación v/m de 16.634 mL/g, con un porcentaje de adsorción de $71.25\% \pm 0.6355$.

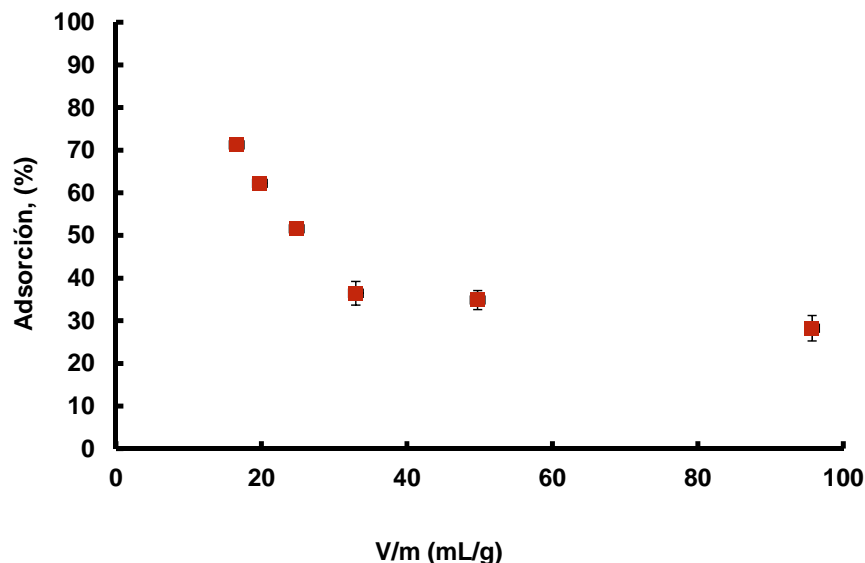


Figura 3. Adsorción de uranio en caolinita en función de la relación V/m.

3.3. Efecto del tiempo de contacto y modelado cinético

Se realizaron los experimentos de cinética de adsorción hasta que el sistema caolinita-uranilo alcanzó el equilibrio. La retención de iones metálicos en disolución sobre aluminosilicatos depende del tiempo; según el mecanismo, el tiempo necesario por el sistema para alcanzar el equilibrio se extiende desde micro o milisegundos (cuando la retención se produce por intercambio iónico o complejación superficial) hasta años en algunas reacciones de precipitación y cristalización que tienen lugar en procesos geoquímicos.

Es por esto que el tiempo de contacto también es un factor importante en el proceso de adsorción; la variación temporal de la adsorción de uranio sobre la caolinita se presenta en la *Figura 4*, como puede observarse se encontró que durante los primeros minutos el porcentaje de adsorción está alrededor del 40% ($39.10\% \pm 1.2447$) y conforme se va aumentando el tiempo de contacto también lo hace el porcentaje de adsorción hasta alcanzar el máximo valor de $70.48\% \pm 0.0735$ a 5760 minutos; a partir de los resultados encontrados se puede apreciar que el equilibrio no es muy rápido, pues la cinética de la caolinita muestra que la meseta del equilibrio comienza a notarse a partir de los 1440 minutos, puesto que después de este punto la variación del porcentaje de adsorción es mínima; por lo que se consideró un tiempo óptimo de 1440 minutos.

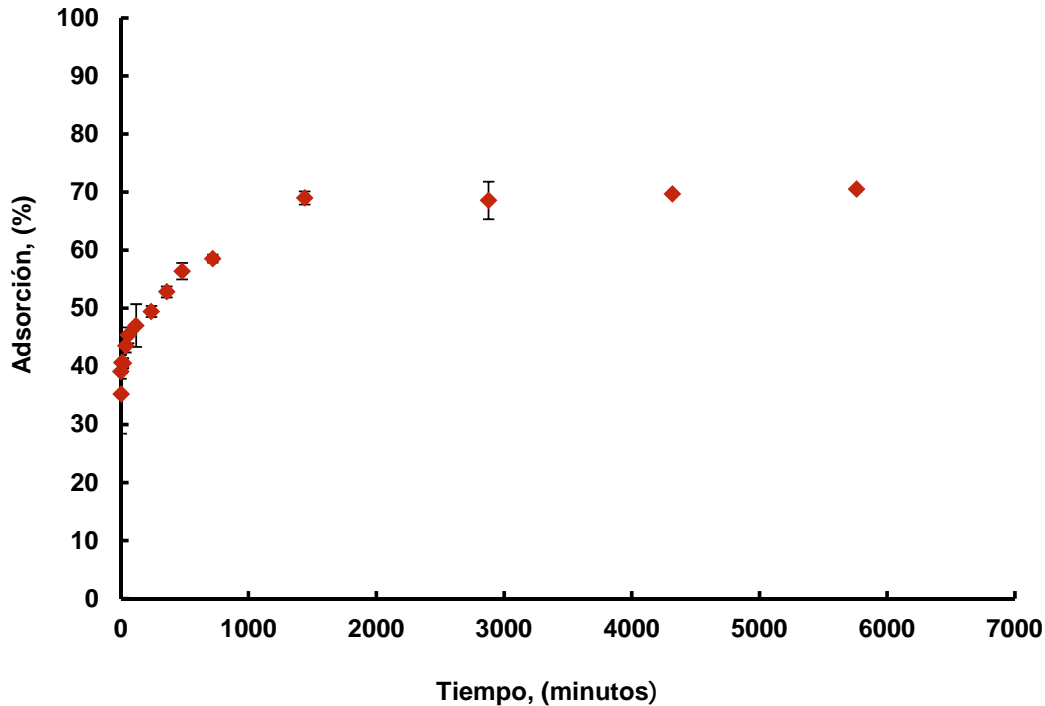


Figura 4. Adsorción de uranio en caolinita en función del tiempo de contacto.

Con el fin de investigar el mecanismo de adsorción en los sistemas líquido-sólido, los resultados se analizaron con tres modelos cinéticos basados en la capacidad del adsorbente: Pseudo-primer orden, Pseudo-segundo orden, y Ritchie modificada. Los datos experimentales se ajustaron a los modelos cinéticos por regresión no lineal usando el programa de cómputo STATISTICA®.

Al aplicar los modelos cinéticos a los resultados, se obtiene que el modelo de Ritchie Modificado es el que mejor representan el comportamiento de los datos experimentales, este comportamiento se explica en términos de que la adsorción sobre una superficie sólida heterogénea es dominada por un fenómeno de adsorción en monocapa, obteniendo un valor de $q_e=0.9613 \text{ mg/g} \pm 0.0516$.

3.4. Efecto del pH

La concentración de iones H^+ es uno de los factores más importantes que afectan el fenómeno de adsorción [12]. El uranio en disolución acuosa se encuentra en forma de diferentes especies químicas en función del pH de la disolución. Esto es un indicativo de la fuerte dependencia que existirá entre el pH de la disolución y la posibilidad de recuperación del uranio, ya que varían las posibles interacciones entre el uranio y la superficie del material adsorbente. Además, cabe considerar que la superficie del material se puede ver afectada al ponerse en contacto con soluciones ácidas o básicas, provocando reacciones en su superficie que modifiquen la capacidad de establecer interacciones con el uranio. Una variación del pH provoca modificaciones en los grupos funcionales que se encuentran en la superficie del material, pudiendo alterar la capacidad de interacción con las especies metálicas.

En solución, el uranio puede estar presente en forma de iones correspondiente a cuatro estados de oxidación: +3, +4, +5 y +6. El uranio hexavalente es el estado de oxidación más estable formando el ion uranilo (UO_2^{2+}) en solución acuosa con una configuración lineal: O-U-O [13].

En la *Figura 5*, se muestra un diagrama de especiación en medio acuoso a distintos valores de pH para el U (VI) a 25°C, en el que se puede observar que a valores menores a un pH de 6 existe mayor presencia del ión uranilo, mientras que conforme se aumenta el valor del pH se forman otras especies químicas.

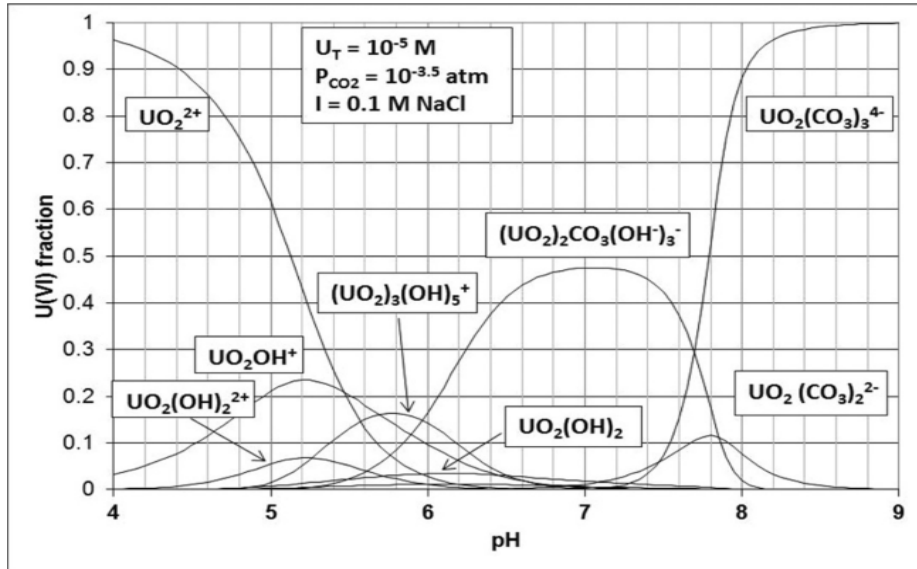


Figura 5. Diagrama de especiación en medio acuoso a distintos valores de pH para el U (VI) a 25°C, [14].

En la *Figura 6* se muestra el resultado del porcentaje de recuperación de uranio en función del pH. Los resultados muestran que la adsorción del uranio sobre la caolinita es altamente dependiente del pH. Se observa que mostró una variación más significativa, ya que a valores bajos de pH el porcentaje de adsorción fue menor y conforme se iba aumentando el valor del pH, también aumentaba el porcentaje de adsorción, llegando a un valor máximo de $69.1\% \pm 0.405$ a un pH de 6, después del pH de 7 comienza a disminuir el porcentaje de adsorción, por lo que se consideró como valor óptimo un pH de 6.

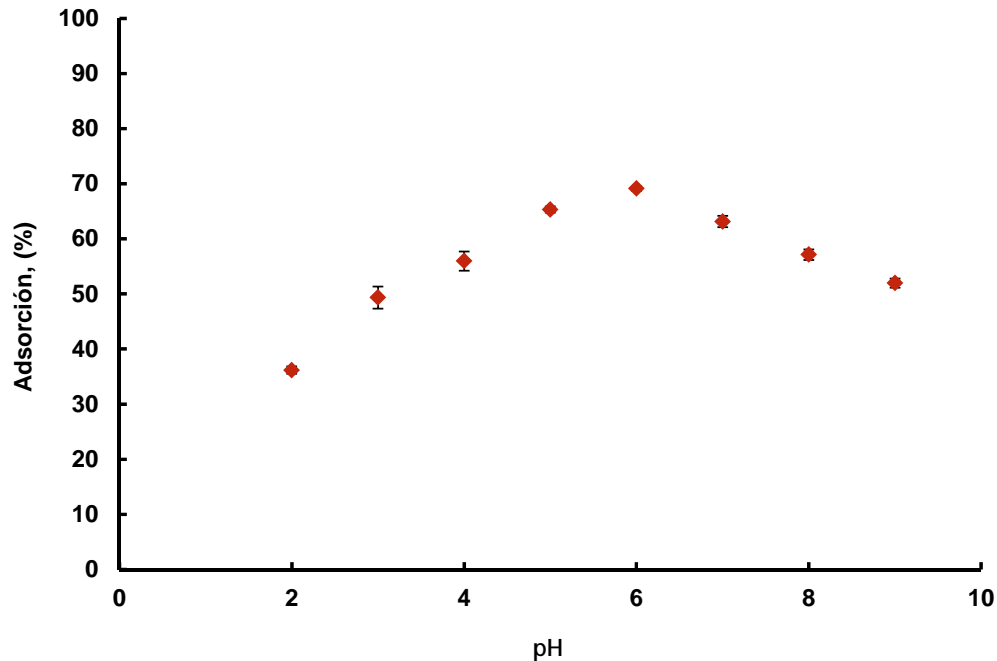


Figura 6. Efecto del pH de la solución en la adsorción de uranio en caolinita.

Liang Gao y colaboradores realizaron un estudio sobre la adsorción de U (VI) en caolinita, evaluando diferentes parámetros, en donde encontraron un pH óptimo de 6.5, en este caso el valor de pH óptimo para la caolinita fue de 6, un valor muy cercano al de Liang Gao y colaboradores [7].

3.5. Efecto de la concentración y modelación de las isotermas de adsorción

La concentración proporciona una fuerza motriz importante para superar toda la resistencia a la transferencia de masa del uranio entre la fase acuosa y la fase sólida. Normalmente un aumento de la cantidad de uranio en solución, en este caso permite aumentar su recuperación. Este aumento está causado por el equilibrio que se establece entre el metal en solución y el metal adsorbido por el material adsorbente, equilibrio que depende en cada caso de la cantidad de metal inicial de la disolución. Para conocer la efectividad de un material adsorbente es necesario conocer cuál es la cantidad máxima de metal (capacidad máxima) que puede adsorber. Los materiales adsorbentes establecen diferentes equilibrios de recuperación de metal cuando se ponen en contacto con disoluciones de diferentes concentraciones experimentales y son diferentes para cada temperatura.

En la *Figura 7* se observan los resultados obtenidos para la caolinita, ahí se puede apreciar que la adsorción del metal es altamente dependiente de la concentración inicial del ión metálico. Se puede notar que a bajas concentraciones (50 ppm) el porcentaje de adsorción es de casi el 100% ($99.8\% \pm 3.0$), pero conforme se va aumentando la concentración el porcentaje de adsorción va disminuyendo significativamente hasta llegar a un valor de $10.72\% \pm 1.70$ a una

concentración de 250 ppm, sin embargo la capacidad de adsorción de la caolinita es diferente, pues el valor de la q_e aumenta al aumentar la concentración de uranio, llegando a un valor máximo de 1.00 ± 0.077 mg/g de material a una concentración de 150 ppm, después de este punto el valor de q_e comienza a disminuir; por lo que se puede decir que la adsorción del metal es altamente dependiente de la concentración inicial del ión metálico, en este caso uranio. Este resultado es similar al reportado por Guanghui Wang y colaboradores en su estudio sobre la adsorción de uranio (VI) en una solución acuosa sobre caolín calcinado y activado por ácido [6].

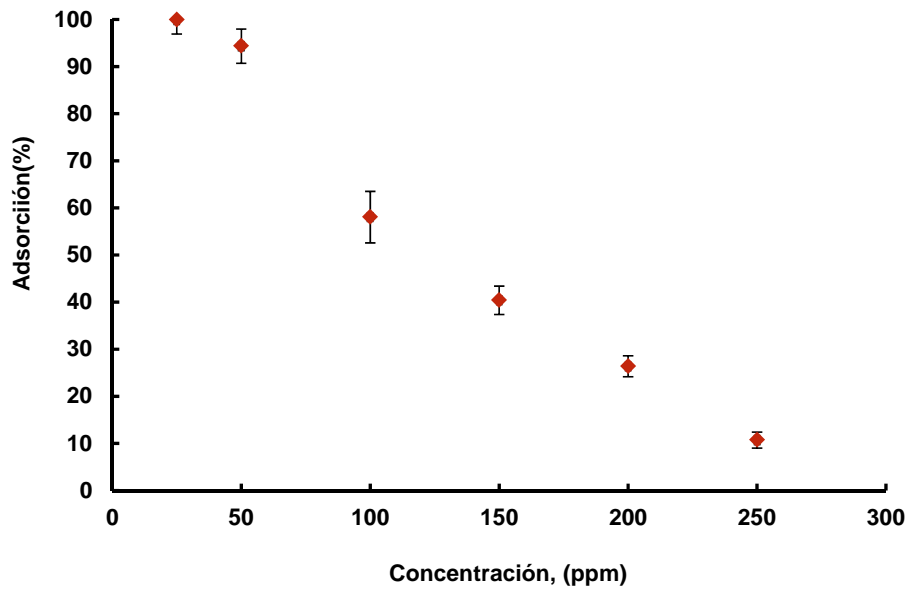


Figura 7. Efecto de la concentración en el porcentaje de adsorción de uranio en caolinita.

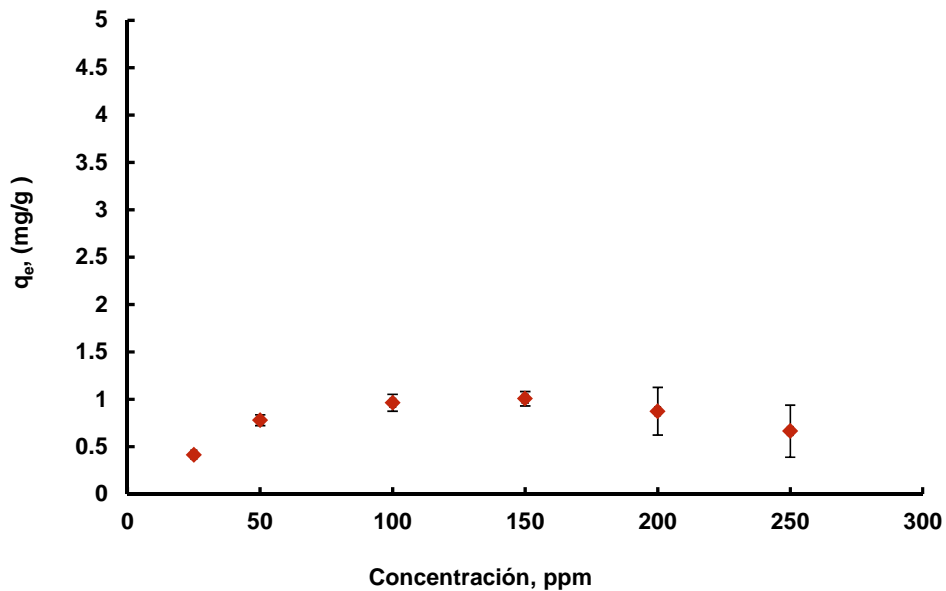


Figura 8. Efecto de la concentración vs q_e en la adsorción de uranio en caolinita.

Al representar los resultados de los equilibrios entre la cantidad de metal adsorbido y la cantidad que queda en la disolución, para unas determinadas condiciones, en este caso a un pH de 6 y temperatura ambiente (25°C) se obtiene la isoterma de equilibrio y su ecuación se puede definir utilizando distintos modelos empíricos, se trabajó con los modelos de Langmuir, Freundlich y Sips. En este caso el modelo que mejor se ajustó a los datos experimentales fue el modelo de Langmuir, el cual nos dice que existe una monocapa del soluto en la superficie del material adsorbente, obteniendo una $R=0.949$ y una $q_{\text{máx}}=0.8599 \text{ mg/g} \pm 0.0554$.

Guanghui Wang y colaboradores en el mismo estudio sobre la adsorción de uranio (VI) en una solución acuosa sobre caolín calcinado y activado por ácido, encontraron que el modelo que predominó en el proceso de adsorción fue el modelo de Langmuir, concordando con los resultados aquí mostrados [6].

3.6. Efecto de la temperatura del medio acuoso y parámetros termodinámicos

La temperatura puede incidir directamente en la adsorción de solutos en disolución. En este caso se trabajaron 4 temperaturas diferentes: 25, 45, 65 y 80°C como puede observarse en la Figura 9 a mayor temperatura mayor porcentaje de adsorción; por lo que puede decirse que el proceso de adsorción de la caolinita y el UO_2^{2+} es altamente dependiente de la temperatura.

Para obtener los parámetros termodinámicos, el coeficiente de distribución (K_d) fue calculado para cada temperatura y se graficó el $\ln K_d$ Vs $1/T$, esto para conocer la entalpía (ΔH° , J mol^{-1}) y entropía (ΔS° , $\text{J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$), puesto que este gráfico debería de ser lineal y el intercepto equivale a $(\Delta S/R)$, mientras que la pendiente sería numéricamente igual a $(-\Delta H/R)$, según la ecuación de van t'Hoff:

$$\ln K_d = \frac{-\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R} \quad (2)$$

Donde R es la constante ideal de los gases ($8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) y T es la temperatura (K). Los valores de la energía libre de Gibbs fueron calculados de la siguiente ecuación para una temperatura de 298 K [15 y 16]:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (3)$$

Se encontró que el proceso de adsorción de uranio en caolinita tiene un $\Delta G^\circ = -8.89 \text{ J mol}^{-1}$, lo cual indica que es un proceso espontáneo, mientras que el valor del $\Delta H^\circ = 36.4 \text{ J/mol K}$ nos indica que es un proceso de naturaleza endotérmica.

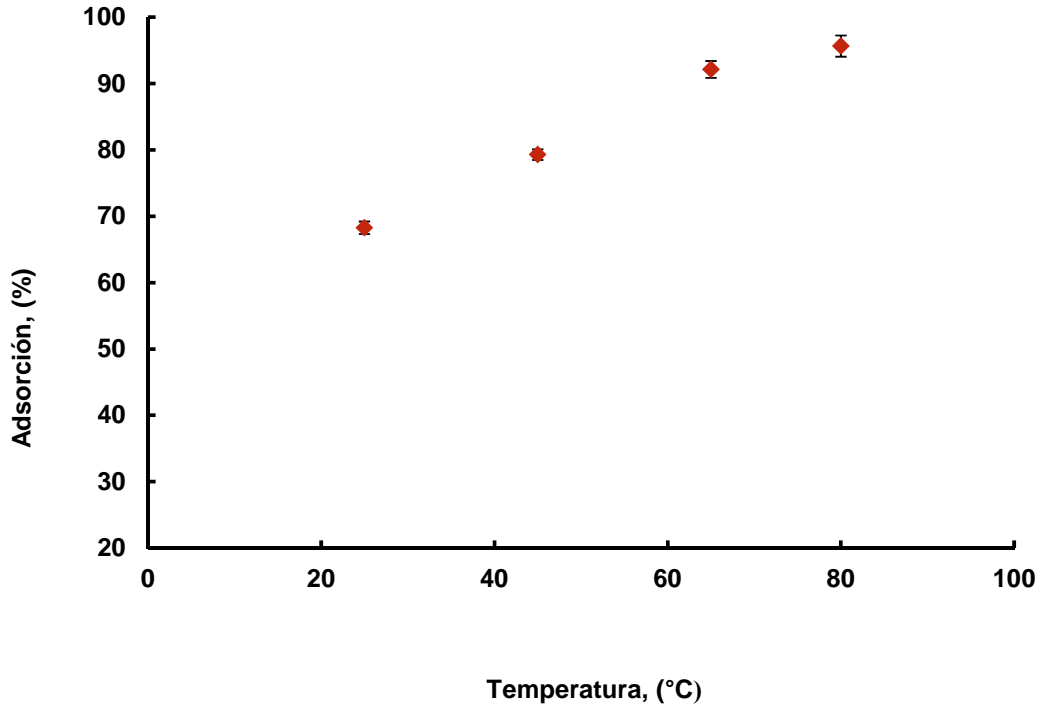


Figura 9. Efecto de la temperatura en la adsorción de uranio en caolinita.

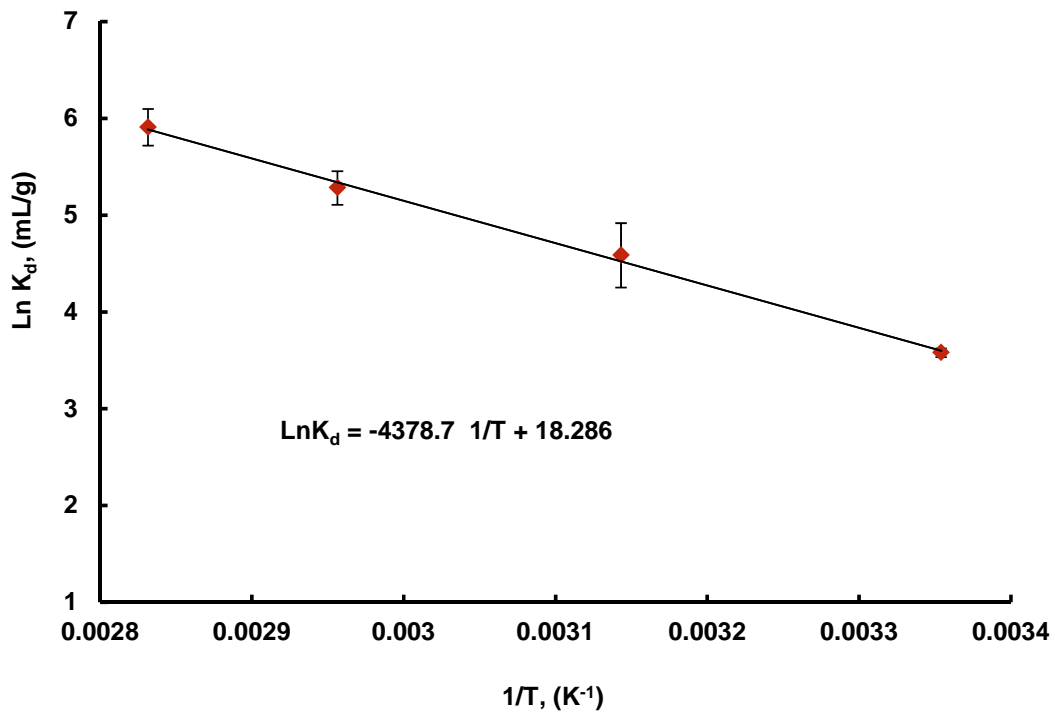


Figura 10. Variación del $\text{Ln}K_d$ Vs $1/T$ en la adsorción de uranio en caolinita.

4. CONCLUSIONES

La eficiencia de la caolinita para la adsorción de uranio en solución acuosa fue investigada, utilizando técnicas de adsorción en batch bajo diferentes condiciones experimentales. Los resultados obtenidos en esta investigación muestran que la caolinita es un material con buenas características físicas y químicas, ya que cuenta con una capacidad de adsorción considerable para el uranio.

La capacidad adsorbente de la caolinita fue dependiente de la cantidad de material, tiempo de contacto, pH de la solución, concentración inicial y temperatura. En cuanto a la cantidad de material, fue más eficaz una masa de 0.480 gramos de caolinita; para el tiempo de contacto se pudo notar que la adsorción, alcanzó el equilibrio en un tiempo de contacto entre las fases de 1440 minutos. Para el pH se obtuvo un valor óptimo de 6; mientras que la concentración óptima fue de 150 ppm, con un valor de $q_e = 1.00 \pm 0.077$ mg/g de material. En el caso de la temperatura, el proceso de adsorción de uranio en caolinita es altamente dependiente, pues a mayor temperatura mayor porcentaje de adsorción y al evaluar los parámetros termodinámicos se encontró un valor de $\Delta H^\circ = 36.4$ J/mol K, el cual indica que es un proceso de naturaleza endotérmica y es por esto que a mayor temperatura se obtiene un mayor porcentaje de adsorción. El valor negativo del ΔG° , indica la espontaneidad del proceso.

Finalmente este estudio muestra que la caolinita tiene una buena capacidad de adsorción de uranio; su bajo costo y fácil acceso hace que este material se pueda considerar como un buen candidato para ser utilizado como barreras de contención en confinamientos de desechos radiactivos de nivel medio y alto, así como para la remediación de mantos acuíferos.

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo recibido para la realización de este trabajo de investigación.

Al Dr. Víctor H. Baltazar H. catedrático del programa de maestría en ciencias e ingeniería de materiales en la Universidad Autónoma de Zacatecas por su apoyo en la caracterización de la caolinita mediante el análisis por difracción de rayos X.

REFERENCIAS

1. Jia, . Y.-y otros. "Adsorption Capacity of Kaolinite for Copper (II) under Magnetic Field". *Journal of Wuhan University of Technology*, **Volumen 19**(2), pp. 52-54. (2004).
3. Bhattacharyya , K. G. & Gupta, S. S. "Adsorption of Fe(III) from water by natural and acid activated clays: Studies on equilibrium isotherm, kinetics and thermodynamics of interactions". *Adsorption*, DOI 10.1007/s10450-006-0145-0(12), pp. 185-204. (2006).

4. Gabche Anagho, S. y otros. "Nickel adsorption from aqueous solution onto kaolinite and metakaolinite: kinetic and equilibrium studies". *International Journal of Chemistry*, **Issue 04**, pp. 1-14. (2013).
5. Srivastava, P., Balwant, S. & Angove, M. "Competitive adsorption behavior of heavy metals on kaolinite". *Journal of Colloid and Interface Science*, **Issue 290**, p. 28-38. (2005)
6. Zhang, H. y otros. "Adsorption of U (VI) onto kaolin studied by batch method". *J. Radioanal Nucl. Chem.*, **Volumen 298**, pp. 611-619. (2013).
7. Guanghui Wang y otros. "Adsorption of uranium (VI) from aqueous solution on calcined and acid-activated kaolin". *Applied Clay Science*. **Volumen 47** 448-451. (2010).
8. Liang Gao y otros. "U (VI) sorption on kaolinite: effects of pH, U (VI) concentration and oxyanions". *J. Radioanal Nucl Chem*. **Vol. 284**:519-526. (2010).
9. Wang, Y.-Q., Zhi-bin, Z. & Qin, L. "Adsorption of uranium from aqueous solution using HDTMA+-pillared bentonite: isotherm, kinetic and thermodynamic aspects". *J Radioanal Nucl Chem*, **Volumen 293**, pp. 231-239. (2012).
10. M. M., Z. y otros. "Uranium adsorption from liquid waste using thermally and chemically modified bentonite". *J. Radioanal Nucl Chem*, **Volumen 295**, pp. 1153-1159. (2013).
11. Khan, M. H., Warwick, P. & Evans, N. "Spectrophotometric determination of uranium with arsenazo III in perchloric acid". *Journal Chemosphere*, **Volumen 63**, pp. 1165-1169. (2006).
12. Loic, J. y otros. "Optimization of the arsenazo-III method for the determination of uranium in water and plant samples". *Talanta*, **Volumen 115**, pp. 751-754. (2013).
13. Pagnanelli, F. "Metal speciations and pH effect on Pb, Cu, Zn and Cd biosorption onto *Sphaerotilus natans*: Langmuir-type empirical model". *Water Research*, **Issue 37**, pp. 627-633. (2003).
14. Tsezos, M., *Biosorption of uranium and thorium*, Department of Chemical Engineering, McGill University: Montreal, Canadá. 1980.
15. Sofield, R. M. & Kantar, C. Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences.. *Earth Syst. Environ. Sci.*, Issue doi:10.1016/B978-0-12-409548-9.00804-6, p. 1-5. (2013).
16. Talip, Z., Eral, M. & Hicsonmez, U. "Adsorption of thorium from aqueous solutions by perlite". *Journal of Environmental Radioactivity*, **100**(doi:10.1016/j.jenvrad.2008.09.004), pp. 139-143. (2009).
17. Selcuk Simsek y Ulvi Ulusoy. "Uranium and lead adsorption onto bentonite and zeolite modified with polyacrylamidoxime". *J. Radioanal Nucl Chem*. **292**:41-51. (2012).

Adsorción de uranio (VI) en clinoptilolita

Iván Rodríguez Acosta, J. Ignacio Dávila Rangel*, Hugo López del Río

Unidad Académica de Estudios Nucleares, UAZ

Ciprés 10Fracc. La Peñuela, Zacatecas, MX

rshivan@hotmail.com; idavilara@gmail.com; hlopezdelrio@hotmail.com

Resumen

El uranio es uno de los metales pesados que se puede encontrar en las aguas residuales industriales, dicho elemento es muy tóxico para los seres humanos y el medio ambiente. En este trabajo, la zeolita natural clinoptilolita es usada como un adsorbente para la eliminación de uranio de soluciones acuosas. Esta se estudió en dos lotes, el primero en su forma natural y el segundo lote fue acondicionado a forma Na^+ , con la finalidad de comparar la capacidad de adsorción. Se estudiaron los efectos de los parámetros de tiempo de contacto, pH y la concentración de uranio en solución, esto para determinar las mejores condiciones de adsorción. El equilibrio se logró a los 50 minutos, mostrando una velocidad de adsorción rápida. La adsorción se demostró a valores de pH de 2 a 10, encontrando un pH de 5 como óptimo. De acuerdo a los resultados obtenidos comprobamos que la clinoptilolita es un adsorbente bastante eficiente logrando un 87.25% de adsorción de uranio en sus condiciones naturales, mientras que la clinoptilolita acondicionada a forma Na^+ alcanza los 93.15% de uranio adsorbido.

1. INTRODUCCIÓN

El uranio es el elemento natural más pesado, radiactivo y químicamente tóxico. En su estado natural aparece como una mezcla de tres isótopos: ^{234}U (0.01%), ^{235}U (0.71%) y ^{238}U (99.28%), químicamente ambos se comportan igual pero tienen propiedades radiactivas diferentes. El ^{235}U es usado como combustible para los reactores nucleares [1].

Existen varios métodos para eliminar el uranio de soluciones acuosas, como la precipitación química, ósmosis inversa, extracción por solvente y la adsorción. Entre estos la adsorción es un método muy usual debido a su alta eficiencia, facilidad de manejo y disponibilidad de diferentes materiales adsorbentes.

El proceso de adsorción es un proceso de transferencia de masa por el cual una sustancia es transferida desde una fase líquida hasta la superficie de un sólido donde se une por interacciones físicas y/o químicas. Se han estudiado diferentes tipos de adsorbentes para eliminar el Uranio, pero en general todo material sólido con estructura porosa puede ser empleado como adsorbente, pero la capacidad de adsorción dependerá de su estructura interna y área superficial.

Diversos investigadores han demostrado la gran eficiencia que tiene la clinoptilolita en los procesos de adsorción, lo cual la han convertido en la zeolita natural comúnmente utilizada en los procesos de intercambio iónico [2].

La clinoptilolita es una zeolita de origen natural, perteneciente al grupo de la heulandita. Está constituida por aluminosilicatos cristalinos, donde su estructura consta de una red tridimensional de tetraedros de $[\text{SiO}_4]^{-4}$ y $[\text{AlO}_4]^{-5}$, con los átomos de silicio o aluminio en el centro y los oxígenos en los vértices. Estos tetraedros, unidad fundamental, se enlazan por sus átomos de oxígeno originando estructuras poliédricas que constituyen las estructuras secundarias. La presencia de $[\text{AlO}_4]^{-5}$ origina un exceso local de carga la cual es neutralizada por los denominados cationes de compensación tales como Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , etc. Los cationes de compensación presentes en la estructura de la clinoptilolita pueden ser desplazados o sustituidos, de acuerdo a su radio iónico y concentración de la carga. A esto se le conoce como capacidad de intercambio catiónico, y está relacionado con la cantidad de aluminio presente en la red zeolítica [3].

El proceso de intercambio iónico en las zeolitas depende de la naturaleza de las especies catiónicas, el tamaño del catión tanto hidratado como deshidratado y la carga del catión, además de la temperatura, la concentración de las especies catiónicas en solución, las especies aniónicas asociadas con el catión en solución y el solvente, así como las características de los materiales.

Existen diversas investigaciones sobre la capacidad que tiene la clinoptilolita para adsorción de uranio y otros metales o gases. En 2016 Aghadavoud y colaboradores estudian a la clinoptilolita como un adsorbente natural para la eliminación de uranio de soluciones acuosas, encontrando las condiciones óptimas de tiempo de contacto (2 horas), pH (7.2) y temperatura ambiente logrando adsorber un 98.55% de uranio [4]. Kilincarslan y colaboradores estudian la adsorción de uranio sobre una clinoptilolita de origen turco, encontrando como condiciones óptimas un pH de 5, un tiempo de contacto de 2 horas, de esta forma logran un 82.9% de adsorción de uranio [5]. Olmez y colaboradores estudian el comportamiento de adsorción de una clinoptilolita proveniente de Balıkesir Turquía, la cual fue evaluada para eliminar uranio de soluciones acuosas, este estudio indica que la eliminación de Uranio en soluciones acuosas depende de la concentración de Uranio presente, así como del pH (pH 2), tiempo de contacto (60 minutos), temperatura (20°C) los cuales fueron encontrados experimentalmente, en estas condiciones óptimas la clinoptilolita logro adsorber un 85% de Uranio [6].

En esta investigación se tiene como propósito determinar las condiciones óptimas de adsorción en una clinoptilolita mexicana proveniente del Estado de Chihuahua para asegurar el porcentaje mayor de adsorción de uranio de una solución acuosa. La investigación se realizara en función de los parámetros experimentales como el tiempo de contacto, pH y la concentración de uranio. Además de evaluar el resultado de un proceso previo de acondicionamiento a forma Na^+ de la clinoptilolita en la capacidad de adsorción.

2. DESARROLLO EXPERIMENTAL

El desarrollo de esta investigación fue realizado con una muestra de una clinoptilolita, la cual fue molida y tamizada a una malla 100, posterior a esto el material fue lavado con agua desionizada y secada a una temperatura de 45°C. Los procesos de adsorción fueron realizados en dos lotes el primero fue con la zeolita en sus condiciones normales, el segundo lote fue con material

acondicionado en forma Na^+ .

2.1. Acondicionamiento del material a forma Na^+

En su estado natural contiene iones intercambiables (K^+ , Na^+ , Ca^{2+} y Mg^{2+}) los cuales se encuentran neutralizando la carga negativa que le confiere el $[\text{AlO}_4]^{-5}$, estos pueden ser desplazados cuando se expone la clinoptilolita a soluciones de NaCl , convirtiéndose de esta manera a su forma homoionica, observando que este acondicionamiento a su estado sódico mejora la adsorción del uranio en solución. Con este objetivo es que se acondiciona en forma sódica siguiendo el procedimiento propuesto por Dávila (2009).

Para este procedimiento se usaron 50g de material tamizado, los cuales fueron puestos en contacto en 1L de una solución 5M de NaCl con agitación constante por 8 días. Una vez transcurrido el tiempo de contacto se procedió a separar las fases, estas fueron mediante centrifugación a 8000rpm por 8 minutos, el material fue lavado nuevamente con agua desionizada para eliminar el exceso de NaCl , hasta que la prueba con solución de nitrato de plata indico la eliminación total de iones cloruro. El material fue secado a una temperatura de 45°C [7].

2.2. Intercambio con soluciones de uranio

Se realizaron tres etapas de contactos, las cuales tenían como finalidad encontrar las condiciones óptimas para alcanzar un mayor porcentaje de adsorción de uranio. Cada muestra contenía 0.100g de clinoptilolita y 10ml de solución de uranio. Las soluciones de uranio se prepararon con agua tridestilada y nitrato de uranio hexahidratado ($\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) a la concentración deseada en cada etapa.

En cada etapa experimental se especifican las condiciones de concentración y pH con las cuales se evaluó la adsorción. En las diversas etapas, las muestras fueron colocadas en el agitador con rotación mecánica para optimizar el contacto entre la solución de Uranio y la Clinoptilolita.

2.2.1. Efecto del tiempo de contacto (cinética de adsorción)

En esta etapa se determina el tiempo en el cual se alcanza el equilibrio de intercambio entre el uranio y la clinoptilolita. Se efectuó el intercambio con una solución de 50ppm de uranio y un pH de 4.5. Los tiempos de contacto fueron de 10, 20, 40, 60, 80 y 100 segundos así como 2, 5, 15, 25, 35, 50, 60, 80, 90 y 120 minutos, cada uno con agitación mecánica. De esta serie experimental se determina el tiempo de contacto necesario para alcanzar el equilibrio, mismo que se utiliza en los experimentos subsecuentes.

2.2.2. Efecto del pH

Para el estudio del efecto del pH en la adsorción de uranio en la clinoptilolita, cada uno de los diferentes contactos realizados en esta etapa se realizó al tiempo de contacto óptimo determinado en la sección anterior. Se trabajó con una solución de 50 ppm de uranio a diferentes valores de pH. El rango de pH fue de 2 a 12, ajustando este con soluciones de HCl y NaOH concentradas.

De esta serie experimental se obtiene el valor de pH óptimo de la solución de uranio donde predomina el ión uranilo, para así disponer de una concentración adecuada de uranio para los procesos de adsorción. El pH óptimo obtenido será el mismo usado en los experimentos subsecuentes.

2.2.3. Efecto de la concentración de Uranio

Para estudiar el efecto de la concentración de uranio en la adsorción, se efectuaron los experimentos de intercambio a concentraciones de uranio 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70 y 80 ppm de uranio, con el tiempo de contacto y pH óptimos encontrados en las secciones anteriores.

2.3 Análisis de Uranio

Una vez transcurrido el tiempo de contacto para cada parámetro, se procedió a separar las fases, estas fueron mediante centrifugación a 8000 rpm por 8 minutos, se recuperó el sobrenadante y se cuantifico el uranio presente mediante el método de Arsenazo-III a una longitud de onda de 651nm.

La solución del reactivo de Arsenazo-III (Az-III) se preparó disolviendo 0.035g de Az-III en 25mL de HClO₄ aforando en un matraz de 100ml. La curva de calibración se obtiene mezclando 1ml de solución estándar de UO₂(NO₃)₂·6H₂O a diferentes concentraciones de uranio (1, 5, 10, 25 y 50ppm) con 3mL del reactivo Az-III y se mide a 651nm en el espectrofotómetro. Después de este procedimiento se realiza la formación del complejo UO₂²⁺-Az-III, con el sobrenadante que se obtiene de cada uno de los contactos de las diferentes etapas experimentales, se trabajó de la siguiente manera: 1m de sobrenadante y 3ml de Az-III, posterior a la formación del complejo se efectuó la medición de las muestras en el espectrofotómetro.

El porcentaje de uranio adsorbido en la clinoptilolita se calculó de la siguiente manera:

$$\text{Adsorción (\%)} = \left(\frac{[U]_i - [U]_f}{[U]_i} \right) * 100$$

Donde $[U]_i$ es la concentración inicial de uranio y $[U]_f$ es la concentración final de uranio (concentración encontrada en el sobrenadante).

3. RESULTADOS

3.1. Efecto del tiempo de contacto

En la figura 1 se muestran los resultados de adsorción para ambos lotes de clinoptilolita evaluados con respecto al tiempo de contacto. Se puede observar que el porcentaje de adsorción de la clinoptilolita en su estado natural es favorable, ya que desde los primeros minutos de contacto esta logra alcanzar hasta el 60% de adsorción de uranio. De igual forma podemos observar que el proceso de acondicionamiento del material a forma Na⁺ (homoionica) es bastante favorable ya que el porcentaje de adsorción de uranio que se logra oscila entre el 90%. Por lo

tanto, se decidió utilizar un tiempo de contacto de 50 minutos, en las siguientes etapas experimentales con el propósito de asegurar el equilibrio en el sistema.

La velocidad en la cual se llegó al equilibrio fue demasiado rápida, lo cual se debió a que las partículas de granulometría menor realizan la remoción del metal de una manera más rápida, ya que estas presentan una mayor área superficial específica disponible.

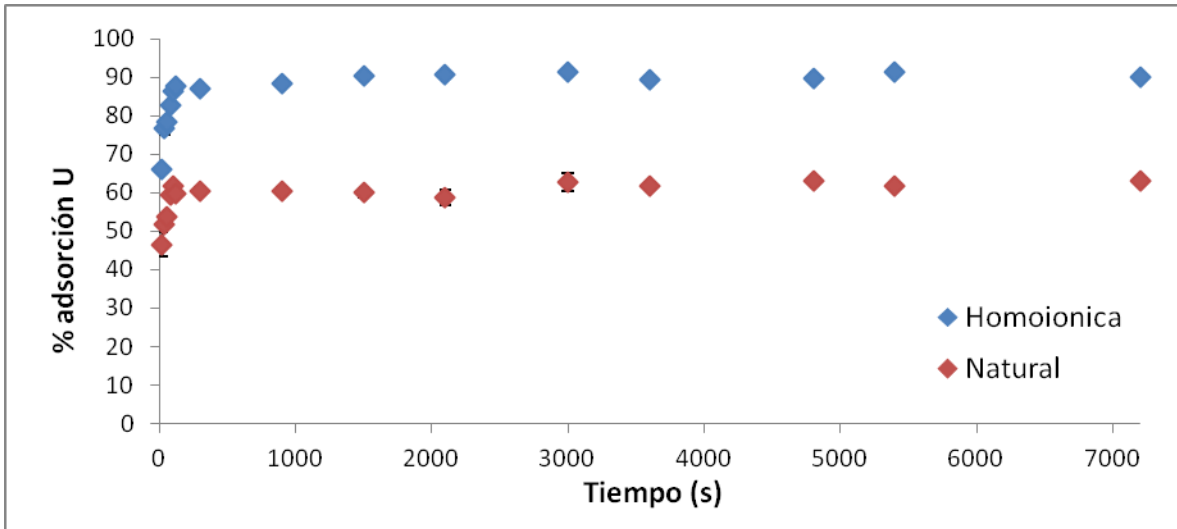


Figura1. Efecto del tiempo de contacto en la adsorción de uranio en clinoptilolita.

3.2. Efecto del pH

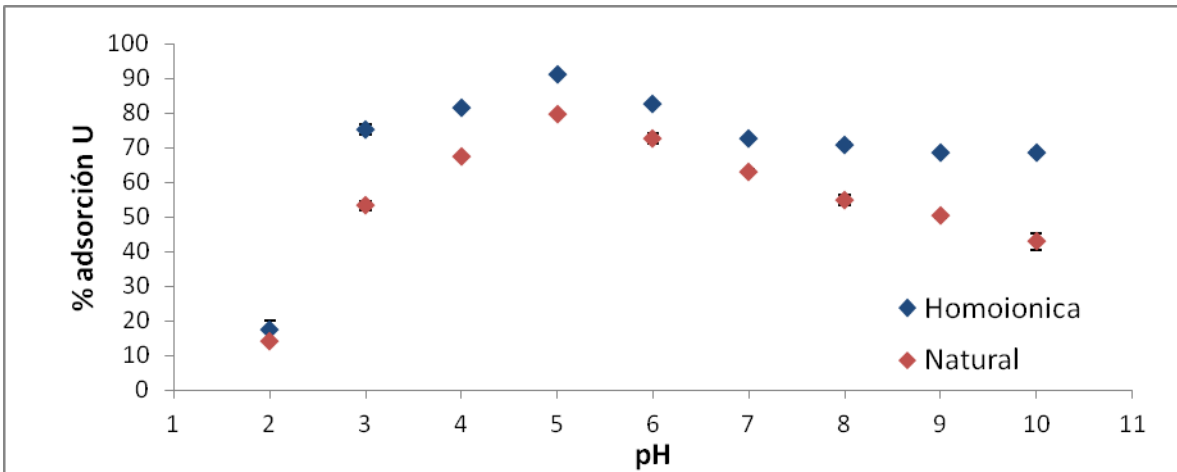


Figura 2. Efecto del pH en la adsorción de uranio en clinoptilolita.

El pH de la solución es una variable de suma importancia para la adsorción de radionúclidos en los adsorbentes, e influye en la especiación del metal y los sitios de unión a la superficie del metal. El efecto del pH en la adsorción de uranio se investigó en un rango de 2 a 10, manteniendo los demás parámetros constantes. En la figura 2 se muestra la influencia del pH en la adsorción

de uranio en la clinoptilolita. Se observa que el comportamiento de adsorción en este estudio responde a un mecanismo de adsorción en el cual depende fuertemente del pH, el cual es favorecido por un pH débilmente ácido. La figura indica que la adsorción de uranio aumenta al aumentar el pH hasta pH 5, alcanzando un 79.53% en la clinoptilolita natural y un 91.34% en la clinoptilolita homoionica, después de este la adsorción disminuye a pH altos.

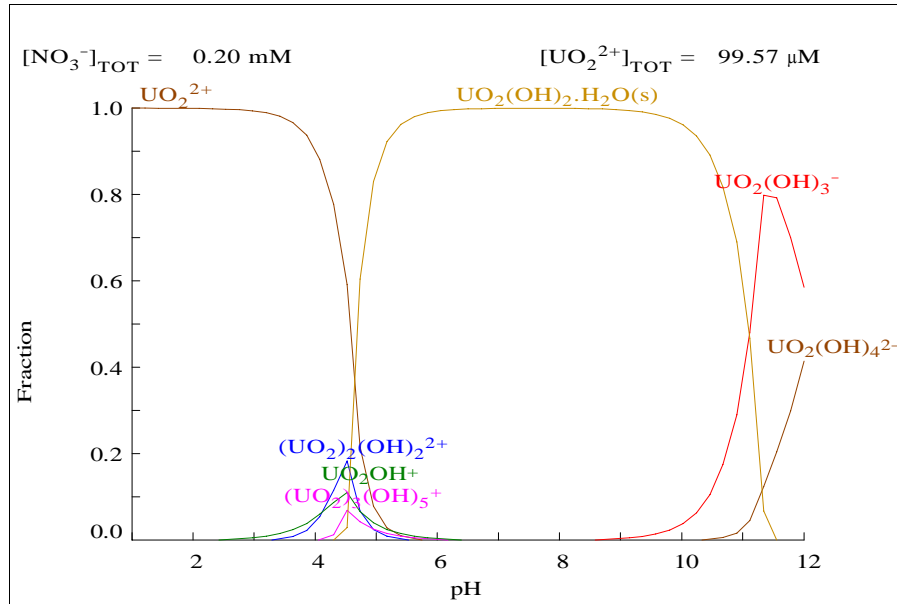


Figura 3. Diagrama de especiación de uranio en función del pH.

Como se puede apreciar en la figura 3 a valores de pH bajos el ion uranilo está presente en solución, pero como se observa en la figura 2 el porcentaje de adsorción de uranio a un pH de 2 fue muy bajo, esto es debido a la intensa interacción de los iones H^+ con los sitios de adsorción de la clinoptilolita. Por lo tanto, la protonación de la clinoptilolita en condiciones fuertemente ácidas disminuye la disponibilidad de los grupos ionizados y por ende la disminución de la tendencia del grupo uranilo a ser adsorbido. Mientras que a valores pH de 3 a 6 se forman varias especies que son fácilmente adsorbidas o intercambiadas iónicamente por la clinoptilolita. A un valor de pH por arriba de 6 se forma un producto de precipitación estable, $UO_2(OH)_2 \cdot H_2O$, por lo cual la adsorción tiende a competir con las reacciones de precipitación dando como resultado una disminución de la adsorción de uranio.

3.3. Efecto de la concentración

Uno de los parámetros más importantes en el sistema de adsorción el cual influye en el comportamiento de adsorción de uranio es la concentración de dicho elemento en solución. En la figura 4 se puede observar el comportamiento de la adsorción de uranio respecto a la concentración de uranio en solución. Como se puede apreciar el comportamiento de la clinoptilolita natural fue aumentando su porcentaje de adsorción de uranio conforme aumento la concentración de uranio, el máximo porcentaje de uranio adsorbido fue de 87.25% el cual se logró a una concentración de 50 ppm de uranio, lo cual indica que se ha logrado una saturación

en los sitios activos disponibles para la adsorción del elemento de interés en la clinoptilolita además de la presencia de reacciones competitivas, específicamente las reacciones de precipitación de uranio las cuales pueden reducir significativamente los iones de Uranio disponibles para la adsorción posterior a esta concentración de uranio.

De igual forma se observa que la clinoptilolita homoionica desde las concentraciones más bajas de uranio esta logra altos porcentajes de adsorción debido a que esta tiene más sitios activos disponibles los cuales fueron logrados con el acondicionamiento a su forma Na^+ . Pero de igual forma se aprecia que en la concentración de 50 ppm de uranio esta tiende a saturarse, adsorbiendo un 93.15% de uranio.

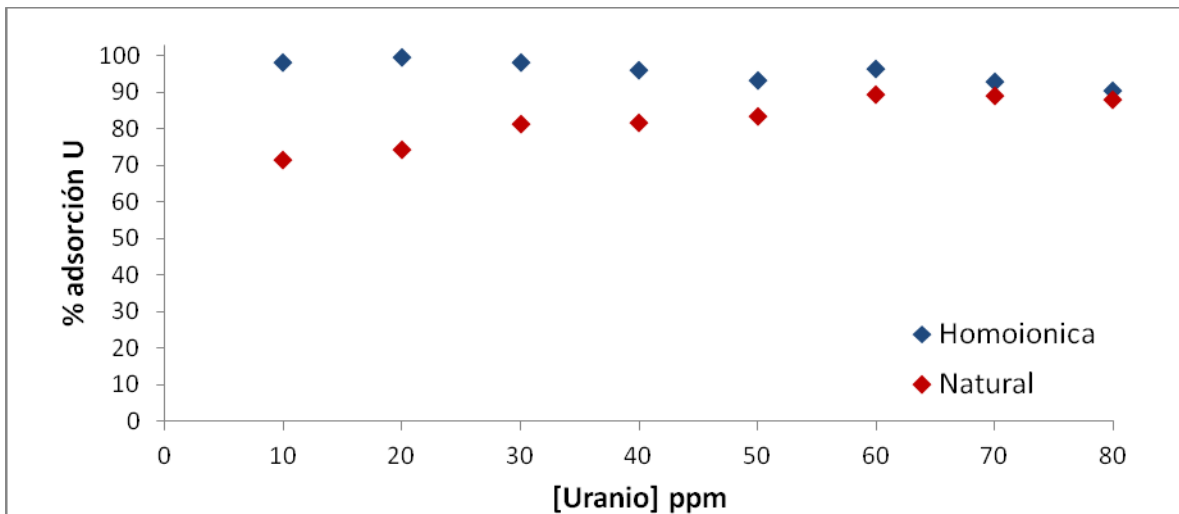


Figura 4. Efecto de la concentración de uranio en solución en la adsorción en clinoptilolita

4. CONCLUSIONES

El presente trabajo describe los experimentos de adsorción de Uranio de una solución acuosa en una zeolita natural, clinoptilolita. Se investigó la adsorción de Uranio sobre la clinoptilolita para determinar las condiciones óptimas de tiempo de contacto, pH y concentración de uranio. De igual forma se comparó la capacidad de adsorción de la clinoptilolita acondicionándola a una forma Na^+ .

La capacidad adsorbente de la clinoptilolita es dependiente del tiempo de contacto, el pH y de la concentración de uranio en solución. Se determinó que el tiempo de contacto en el cual se llega al equilibrio entre las fases fue de 50 minutos. El pH óptimo para la adsorción de Uranio en la zeolita fue de 5.

Los valores del porcentaje de adsorción de uranio a diferentes concentraciones de uranio fueron bastante altos, lo cual podemos concluir que 0.100g de clinoptilolita son bastante eficaces para adsorber uranio en un rango de soluciones de 10-80 ppm de uranio.

De igual forma se comprobó que un proceso de acondicionamiento previo del material a una forma Na^+ aumenta significativamente la capacidad de la clinoptilolita para la adsorción de uranio.

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo recibido para la realización de este trabajo de investigación.

REFERENCIAS

1. ATSDR, 1999. Toxicological Profile for Uranium, Atlanta, GA.: U.S. Department of Health and Human Services. Agency for Toxic Substances and Disease Registry.
2. Pavón, T., Campos, E., y Olguín, T. (2000). Remoción de níquel, cadmio y zinc del agua, utilizando clinoptilolita heulandota. *Redalyc.org*, 7(3), pp. 251-258.
3. Montes, A., Fuentes, N., Perera, Y., Perez, O., Castruita, G., García, S., y García, M. (2015). Caracterización de clinoptilolita natural y modificada con Ca^{2+} por distintos métodos físico-químicos para su posible aplicación en procesos de separación de gases. *Superficies y Vacío*, 28(1), pp. 5-11.
4. Aghadavoud, A., Rezaee, K., Reza, H., y Sayyari, R. (2016). Removal of uranium ions from synthetic wastewater using ZnO/Na-clinoptilolite nanocomposites. *Radiochim*, doi 10.1515, pp.1-7.
5. Kilincarslan, A., y Akyil, S. (2005). Uranium Adsorption characteristic and thermodynamic behavior of clinoptilolite zeolite. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 264(3), pp. 541-548.
6. Olmez, S., Akyil, S., y Eral, M. (2004). Adsorption and thermodynamic behavior of uranium on natural zeolite. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 260(1), pp. 119-125.
7. Davila, J. (2009). Efectos por tratamiento térmico e irradiación gamma en minerales no metálicos y su influencia en la retención de Co^{2+} y Cd^{2+} (tesis doctoral). Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Estado de México.

Concentración de uranio en muestras de agua para su medida por espectrometría alfa

César A. Arévalo B., María G. Flores R., Hugo López del R. J. Ignacio Dávila R., Fernando Mireles G., José L. Pinedo V., Carlos Ríos M., Sonia A. Saucedo A.

*Unidad Académica de Estudios Nucleares, Universidad Autónoma de Zacatecas
Ciprés 10, Fracc. La Peñuela, Zacatecas, Zac. 98068, MEXICO.*

*cesar_arevalob@outlook.com; josep_lup@hotmail.com; hlopezdelrio@hotmail.com ;
idavilara@gmail.com ; fmireles@uaz.edu.mx; jlpv85@hotmail.com ; criosmtz@hotmail.com ;
chena@hotmail.de*

Resumen

La cuantificación de uranio en muestras de agua potable a menudo presenta un reto, ya que la cantidad de uranio en ésta matriz suele ser baja, además se tiene que realizar un proceso radioquímico del elemento para proceder a su análisis por espectrometría alfa. La cuantificación de uranio por éste método incluye cuatro etapas: 1. Coprecipitación del elemento de interés en la muestra de agua, cuyo propósito es hacer una separación preliminar del uranio. 2. Separación química del uranio, en la cual se obtienen los radioisótopos de uranio aislados de los demás elementos que pueda contener la muestra. 3. Preparación de la fuente alfa de uranio por electrodeposición sobre planchetas de acero inoxidable y 4. Conteo de la fuente mediante un sistema de espectrometría alfa. En el presente trabajo se realiza la comparación cualitativa de dos procedimientos de separación química del uranio, el primero se basa en el principio de intercambio iónico usando una resina sintética y el segundo usando la extracción líquido-líquido con tri-n-butil fosfato (TBP) como solvente extractante, las etapas 1,3 y 4 en ambos procedimientos fueron las mismas. La comparativa de estos dos métodos de separación se hace con el fin de seleccionar aquella con la cual se obtenga el mejor espectro alfa posible ya que posteriormente se utilizará para realizar la determinación cuantitativa del desequilibrio radiactivo entre los radioisótopos de uranio contenidos en muestras de agua subterránea, principalmente en la relación $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$.

1. INTRODUCCIÓN

El estudio de las relaciones isotópicas dentro de las series naturales de decaimiento, tiene un gran margen de aplicaciones principalmente en ciencias ambientales, oceanografía, hidrología, arqueología etc. [1]. La serie del uranio proporciona una de las huellas isotópicas más sensibles, además su estudio ha sido muy usado para caracterizar las aguas subterráneas. El desequilibrio isotópico en la serie del uranio ocurre comúnmente en aguas subterráneas en circulación y sus rocas asociadas, además de relacionarse con el entorno en el cual estas aguas fluyen. El desequilibrio en la relación $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ es ampliamente usado en investigaciones hidrológicas [2], haciendo posible determinar la tasa de flujo o los tiempos de residencia del agua subterránea. En el ambiente natural el desequilibrio radiactivo entre el ^{234}U y el ^{238}U fue descubierto por Chalov y Cherdynstev a principios de 1950 [3] y a partir de 1960 varios artículos han sido publicados en

los cuales se da a conocer el desequilibrio radiactivo en la serie del uranio como un nuevo indicador isotópico importante en las investigaciones hidrológicas e hidrogeológicas y dado el tiempo de vida media del ^{234}U de 248 000 años, también puede resultar útil para realizar dataciones de hasta 1 millón de años.

Por lo general las metodologías usadas para realizar la determinación de los isótopos de uranio en muestras de agua se divide en cuatro etapas 1. Coprecipitación del uranio en la muestra, 2. Separación química del uranio, 3. Preparación de la fuente de medida por electrodeposición catódica y 4. Conteo de la fuente por espectrometría alfa. El objetivo de éste trabajo es establecer la mejor metodología a seguir para la obtención de espectros alfa que muestre solamente los picos pertenecientes al uranio, ya que si en la fuente de medida están presentes otros radioisótopos emisores alfa con energías similares a las de los del uranio, los picos se superpondrían entre sí lo que dificultaría el análisis del área de los mismo. Por otro lado se requiere separar el uranio de los demás elementos contenidos en las muestras, ya que estos se pueden electrodepositar junto con el uranio, con el fin de obtener un electrodeposito lo suficientemente delgado para disminuir en lo posible la autoabsorción, por ésta razón se hace un énfasis especial en la separación radioquímica del uranio. Las técnicas de separación química del uranio que aquí se desarrollan para su comparación son dos: la primera usa columnas de intercambio iónico como método de separación y la segunda realiza una extracción selectiva de los isótopos de uranio mediante una separación liquido-liquido usando TBP como solvente extractante.

2. PARTE EXPERIMENTAL

La obtención de espectros alfa de los radioisótopos de uranio se debe realizar prestando atención a la etapa de separación química del uranio a manera de lograr una fuente de medida lo más uniforme y delgada posible para evitar el fenómeno de autoabsorción a la hora de su conteo y que el análisis espectral no presente interferencias debido a otros radioisótopos de energías similares [4]. Basamos gran parte de nuestro desarrollo experimental en la metodología propuesta por la ASTM (American Society for Testing and Materials): *Standard test method for Isotopic uranium in water by radiochemistry* [5], realizando algunas modificaciones.

2.1. Coprecipitación del uranio en la muestra.

Debido a que el uranio está presente en muy bajas concentraciones en el agua, valores reportados entre 0.1 y 50 ppb, es necesario hacer una separación preliminar del uranio en ésta matriz, esto se lleva a cabo mediante un proceso de coprecipitación, que tiene lugar cuando un hidróxido de hierro precipita y arrastra con él a los actínidos presentes en la muestra de agua previamente acidificada a $\text{pH} \geq 1$.

En el laboratorio se realizó la coprecipitación del uranio partiendo de una muestra de 3L de agua se acidifica a pH 1, se pone a ebullición durante 5 minutos y se agregan 500 mg de bisulfito de sodio (NaHSO_3) y 2 ml de una solución de cloruro de hierro (FeCl_3) la cual contiene 20 mg de Fe/ml. Después de agregar el FeCl_3 se deja ebulir por 10 minutos, pasado este tiempo se agrega hidróxido de amonio (NH_4OH) concentrado hasta que la solución se enturbie, se agregan 10 ml

adicionales de NH_4OH y se pone en agitación constante sin calor por 30 minutos, inmediatamente después de la adición del NH_4OH se formará hidróxido de hierro que precipita arrastrando al uranio y demás actínidos presentes. El precipitado es separado de la fase acuosa por centrifugación, posteriormente se disuelve en un volumen mínimo de HCl concentrado y se diluye en con 100 ml de HCl 8 M, esto en caso de usar el método de separación por columna, a esta solución la llamaremos solución A. Si la separación del uranio se realizará mediante la técnica del TBP el precipitado se disuelve en 10 ml de HNO_3 8M y la llamaremos solución B, ambas, solución A y B están listas para el siguiente proceso.

2.2 Separación Química del Uranio Usando Columna de Intercambio Iónico.

El principal objetivo de la separación química del uranio es obtener una solución con los isótopos del uranio aislados de los demás elementos, ya que en la solución obtenida en el proceso de coprecipitación, además del uranio también están presentes cantidades trazas de torio, polonio y el hierro que se le agregó, entre otros, estos elementos pueden causar que la fuente de medida no sea apropiada para su medición por lo que hay que quitarlos y dejar solamente el uranio, para ello se utilizó la técnica de intercambio iónico con resinas.

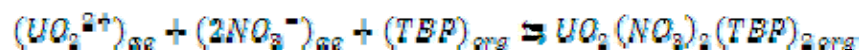
Las resinas de intercambio iónico son muy usadas en radioquímica para la extracción selectiva de varios radionúclidos, particularmente de actínidos, en muestras ambientales. En el laboratorio se usó la resina Dowex AG1 X-8 la cual es del tipo aniónica de base fuerte con grupo intercambiable cloruro (Cl^-), se pesaron de 5 a 7 g aproximadamente de esta resina, se puso en un vaso de precipitados y se le agrego un volumen mínimo de HCl 8M para activarla y lograr así su fácil incorporación a la columna (bureta de 50 ml) a la que previamente se le colocó un tapón de lana de vidrio para impedir la salida de la resina, una vez que la resina se asentó se abrió la llave de la columna para liberar el exceso de ácido, luego se hizo fluir por la resina la solución obtenida en la etapa de coprecipitación, recordemos que ésta solución tiene uranio + actínidos + hierro diluidos en HCl 8M, a estas condiciones el uranio queda fijado fuertemente a los grupos moleculares de la resina por intercambio iónico, mientras que los demás actínidos fluyen libremente sin ningún tipo de retención, se vigiló la velocidad del flujo de salida el cual se recomienda que sea de 1ml/min, en la columna quedó también el hierro el cual también debemos eliminar para evitar cualquier tipo de impurezas, esto se logra haciendo pasar por la columna una solución de acetona + HCl 6M en proporción 9:1, la completa elución del hierro se verifica agregando al eluyente una pequeña cantidad de KSCN 0.1 N, si aún hay hierro presente la solución adquirirá una tonalidad rojiza, cuando el eluyente ya no se torne de éste color al agregar el KSCN será indicador que el hierro ya no está presente en la columna, las soluciones obtenidas son desechadas. Se lava la columna con un volumen apropiado de HCl 8M y por último los isótopos de uranio son extraídos selectivamente con 60-80 ml de HCl 0.1 M, a esta condición se sustituye el uranio, el cual está unido a la base de la resina en la forma de un complejo aniónico fuerte que se forma cuando el ion uranilo ésta en una solución acuosa de HCl, $(\text{UO}_2\text{Cl}_3)^-$, por un anión cloruro procedente de la solución eluyente.

El resultado final es una solución de HCl 0.1 M, que contiene en forma aislada los isótopos de uranio, esta solución se lleva a evaporación cerca de los 20 ml y se le agregan 5 ml de ácido

nítrico (HNO_3), se evapora a sequedad cuidando de no calcinar la muestra y la muestra estará lista para el siguiente proceso.

2.2.1. Separación química del uranio usando la extracción líquido-líquido.

El tri-n-butil fosfato o TBP, $(\text{C}_4\text{H}_9\text{O})_3\text{PO}$, es muy conocido por su gran capacidad como solvente extractor de nitritos orgánicos y otras sales de soluciones acuosas. Los nitratos más fácilmente extraíbles son los de los lantánidos y actínidos, en especial los cationes tetravalentes y los iones divalentes de los actínidos (UO^{+2} , NpO^{+2} , PuO^{+2}) [7]. La extracción del uranio presente en solución ácida por el TBP puede ser descrita como sigue: [8]



La separación líquido-líquido se lleva a cabo de la siguiente manera, partiendo de la solución B obtenida en la etapa de precipitación la cual se transfiere a un embudo de separación (fase acuosa) y se añade 5 ml de TBP (fase orgánica), se agita un par de minutos, el uranio y el torio pasan a la fase orgánica quedando retenidos en ella, mientras que en la fase acuosa quedarán los demás elementos que no son de interés como los son el Fe, Po, Ra y el Pb y pueden ser desechados junto con la fase acuosa [9], se realizan dos lavados consecutivos con HNO_3 . A la solución de TBP en el embudo de separación se le adiciona 20 ml de Xileno y 15 ml de HCl 1.5 M se agita por un par de minutos y el Th pasa ahora a la fase acuosa quedando solamente el uranio en la fase orgánica, se realizan dos lavados más con HCl 1.5 M y al final se obtendrán 45 ml de HCl en los cuales estarán presentes los isótopos del torio de forma aislada, ésta solución se puede usar para aplicar otros procedimientos para el estudio del torio, en nuestro caso no nos interesa este elemento y la solución fue desechada.

Finalmente para hacer la liberación del uranio unido al TBP basta con agregar 15 ml de agua destilada al embudo de separación donde se encuentra el TBP, agitamos un par de minutos y el uranio pasará a la fase acuosa, se realizan dos lavados consecutivos con agua destilada y se obtendrán 45 ml de agua destilada con los isótopos de uranio ya aislados de los demás elementos, esta solución ya está lista para el siguiente proceso.

2.3 Preparación de la Fuente Radiactiva de Uranio

El objetivo de esta etapa es obtener una fuente radiactiva de uranio por electrodeposición catódica, para obtener una buena resolución en el espectro alfa es necesario producir un electrodepósito de uranio uniforme, delgado y plano para su conteo, para el buen diseño de la fuente hay que tener en cuenta la naturaleza de la radiación alfa, su corto alcance y el alto poder de frenado que tiene la materia que ha de atravesar, en las muestras ambientales, la presencia de contaminantes no radiactivos aun en cantidades trazas puede llevar a la pérdida de energía por autoabsorción con la consiguiente mala resolución. [10] Entre otras características que debe de cumplir la fuente están las siguientes, deben poder ser manipuladas sin perder material depositado, deben ser químicamente estables, y deben eliminarse completamente de la fuente todos los ácidos usados en el proceso con el fin de evitar daños en el equipo de detección.

En el laboratorio se fabricó una celda de electrodeposición con diversos materiales, el cuerpo de la celda es un vial de vidrio al cual se le quita el fondo, la parte de la boca donde va la tapa será ahora la base en la cual se adaptara un poste de bronce y sobre el cual se apoyara la plancheta, la cual es un disco de acero inoxidable pulida al espejo que funcionara de cátodo, en la parte donde se le quito el fondo, se coloca un tapón de teflón con dos orificios pequeños en el centro, uno por donde se introducirá el alambre de platino (ánodo) y el otro para liberar los gases que se produzcan en el proceso, la celda está dispuesta como se observa en la Figura 1.

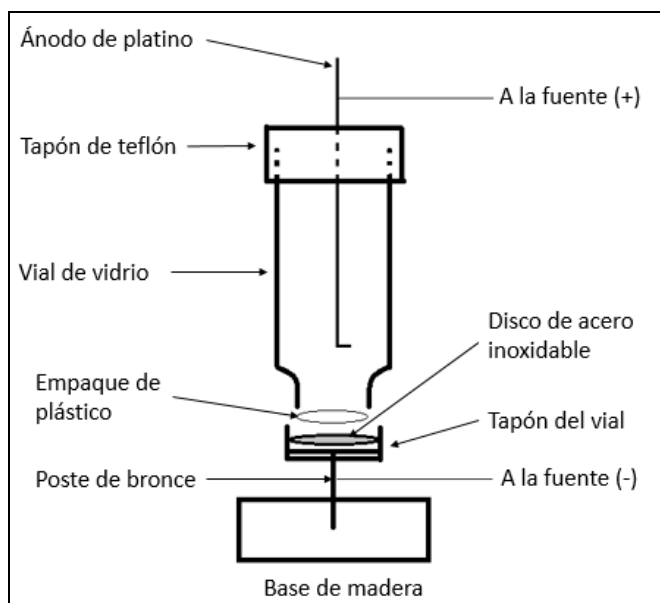


Figura 1. Celda de electrodeposición.

El proceso de electrodeposición es el siguiente: al residuo seco obtenido en el proceso de separación química se le añaden 2 ml de una solución al 5% de $\text{NaHSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{SO}_4$ 9 M, se adicionan 5 ml de HNO_3 concentrado y se evapora a sequedad sin calcinar la muestra, se disuelve la muestra en 5 ml del electrolito $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 1M y se transvasa la solución a la celda de electrodeposición, se lava el vaso 2 veces con 2.5 ml de electrolito y los lavados se añaden a la celda para un total de 10 ml de electrolito que contiene al uranio disuelto, agregar unas cuantas gotas de azul de timol que funciona como indicadores de pH el cual debe de estar entre 2.5 y 3.5, a este pH la solución se tornara de una tonalidad rosa indicando que el pH es el correcto, se coloca en ánodo de platino a una distancia de 5 mm del cátodo, se conectan los electrodos a la fuente y se ajusta la corriente a 600 mA, en éstas condiciones la electrodeposición se llevará a cabo por una hora, pasado este tiempo se retira el ánodo, se apaga la fuente, se desecha la solución y el disco se enjuaga primero con NH_4OH 0.15 M y luego con alcohol etílico, se deja secar y la fuente está lista para su conteo.

2.4 Medida de la fuente por espectrometría alfa

La espectrometría alfa es una técnica de medida que tiene numerosas aplicaciones en el campo de la ciencia, es una técnica muy utilizada en la medida de niveles bajos de radiación de muestras ambientales, sus principales aplicaciones son la obtención de datos de desintegración nuclear, estudios geológicos, datación entre otros. El sistema de espectrometría alfa está conformado por un detector, un sistema electrónico asociado a éste el cual procesa las ionizaciones producidas por el detector y un sistema de tratamiento y almacenamiento de los datos precedente del sistema electrónico que permite la fácil cuantificación e identificación de la energía de las emisiones detectadas.[11]

En la cuantificación de electrodepositos de uranio sobre planchetas de acero inoxidable por espectrometría alfa, se hace énfasis en el cuidado que se debe de tener a la hora de hacer un procedimiento radioquímico que permita en primera instancia, el aislamiento completo del radionúclido de interés de la matriz ambiental que lo contiene y segundo la preparación de fuentes apropiadas para su medición.

3. RESULTADOS

3.1 Espectro obtenido por el Método de Separación por Columna de Intercambio Iónico.

El espectro obtenido se realizó usando la separación del uranio mediante la incorporación de la solución A (precipitado + 100 ml de HCL 8M), obtenida en la etapa de coprecipitación, en la columna de intercambio iónico conforme a la sección 2.2, el flujo de esta solución por la resina fue demasiado lento, 1 ml/15 min aproximadamente, y en ocasiones el flujo se detenía completamente, se requirieron de 40 a 48 horas para que los 100 mililitros de la solución pasaran en su totalidad por la columna. En la elución del Fe, con acetona y HCl 6 M en proporción 9:1 se usaron aproximadamente 900 ml de acetona para eliminar la mayor cantidad de Fe posible, lo que puede representar un gasto excesivo de este reactivo si se quieren procesar varias muestras. En la etapa de preparación de la fuente, al final de la electrodeposición el disco de acero inoxidable tenía una coloración negra y se observaba una plasta de un grosor considerable en su superficie, atribuible a la presencia aún de Fe, se llevó al equipo de espectrometría alfa para su conteo por 48 horas y se obtuvo el espectro de la Figura 2, donde se observan los picos del ^{238}U y el del ^{234}U , se puede observar una anchura considerable en la base de los picos, indicativo del fenómeno de autoabsorción que pudo producir el Fe que aún estaba presente.

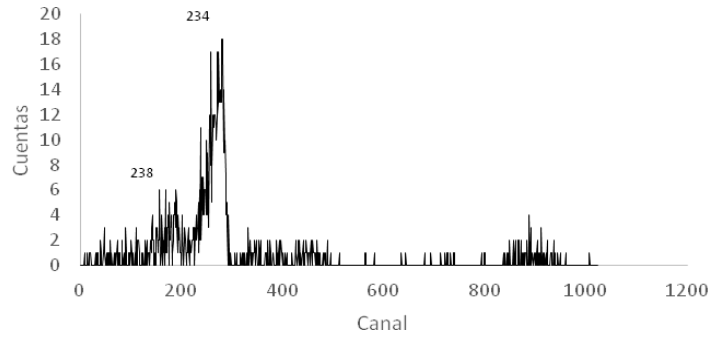


Figura 2. Espectro obtenido usando separación con resina de intercambio iónico.

3.2 Espectro obtenido por el método de separación usando TBP.

Una vez obtenida la solución B (precipitado + 10 ml de HNO₃ 8 M) se aplica la extracción líquido-líquido descrito en 2.2.1, el proceso es más rápido que el de separación por columna con un gasto de tiempo y reactivos mucho menor, el espectro obtenido, después de 24 horas de conteo, se puede observar en la Figura 3, se muestra una mejor resolución en los picos de uranio en comparación al espectro de la Figura 2, lo que sugiere que la autoabsorción es menor o nula, las fuentes al término de la electrodeposición tienen un aspecto más limpio con una ligera capa en la superficie apenas perceptible a simple vista, sin embargo se puede apreciar otros picos más a la derecha los más significativos pertenecen al ²¹²Bi y ²¹²Po, padre e hijo respectivamente, no se ha encontrado en la literatura si el ²¹²Bi represente una interferencia importante en la cuantificación del uranio. Se tomó la decisión de guardar ésta fuente para realizar un segundo conteo una vez que el ²¹²Bi, con un tiempo de vida media de 60.55 minutos, decayera por completo, el espectro de éste segundo conteo se puede ver en la Figura 4, en el cual los picos del ²¹²Bi y ²¹²Po han desaparecido.

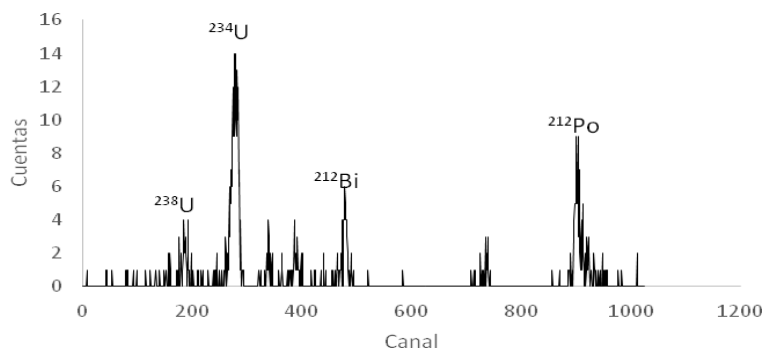


Figura 3. Espectro obtenido con la separación usando TBP.

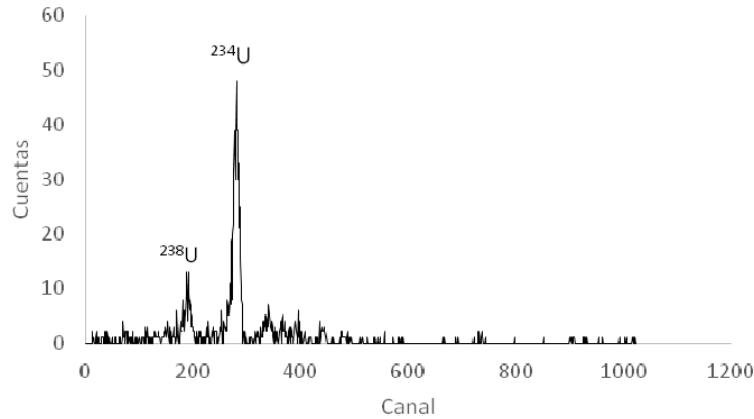


Figura 4. Espectro obtenido después del total decaimiento del ^{212}Bi .

3.3 Espectro Obtenido Usando la Combinación de los Dos Métodos de Separación.

Con el objeto de mostrar un espectro combinando los dos métodos de separación química, se decidió preparar una tercer muestra donde en primer lugar se realizó la separación por el método de extracción con TBP, con el fin de separar la totalidad de Fe, sin usar acetona, luego al final los 45 ml de agua destilada con los isótopos de uranio que se obtienen son llevados a sequedad y el residuo se disuelve con unas cuantas gotas de HCl concentrado y se diluye en 100 ml de HCl 8M los cuales serán pasados a través de la columna de intercambio iónico. La solución resultante se lleva a electrodeposición y la fuente puede ser medida de inmediato, evitando así la espera del decaimiento de otros radionúclidos como el ^{212}Bi . El espectro resultante se muestra en la Figura 5, donde se puede ver que es muy similar al espectro de la Figura 4.

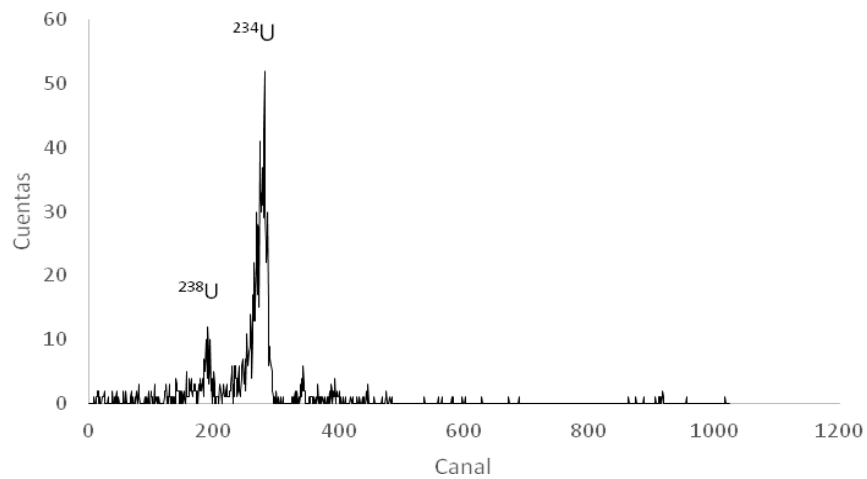


Figura 5. Espectro obtenido combinando los métodos de separación con resina y TBP.

4. CONCLUSIONES

Se realizó la comparación cualitativa de los espectros obtenidos por espectrometría alfa, usando dos métodos distintos para la separación química del uranio proveniente de muestras de agua potable.

En el primer método se usó una resina de intercambio iónico para realizar la separación de los isótopos de uranio, sin embargo el uso excesivo de acetona para el procesamiento de una sola muestra, así como el gran consumo de tiempo de trabajo, no lo hace viable para ser usado para tratar varias muestras, además al final de la electrodeposición en la preparación de la fuente, esta mostró una coloración oscura, por lo que creemos que el Fe aún estaba presente lo cual fue más notorio cuando en el espectro los picos del ^{234}U y ^{238}U muestran unas colas debido a la autoabsorción.

El segundo método usa la extracción líquido-líquido para la separación de uranio usando TBP como extractante, esta técnica mostró una mayor versatilidad frente a la primera ya que consume menos tiempo y reactivos, pudiendo procesar varias muestras a la vez en tiempos cortos. La fuente de medida al final de la electrodeposición muestra una apariencia más limpia y uniforme, sin embargo en el espectro, ver Figura 3, aparecen un par de picos de altura considerable correspondientes al ^{212}Bi el cual creemos que es electrodepositado junto con el uranio y que decae en la fuente y genera al ^{212}Po como producto de desintegración mismo que origina el segundo pico. No se ha encontrado en la literatura que éstos dos picos sean una interferencia a la hora de hacer la cuantificación de uranio, de hecho con esperar el tiempo suficiente, alrededor de 10 horas, el ^{212}Bi habrá decaído completamente y en la medición ya no aparecerán éstos picos, ver Figura 4.

También se hace un intento de combinar los dos métodos de separación química del uranio, el espectro obtenido, ver Figura 5, es muy similar al espectro obtenido solo con el TBP después de que el ^{212}Bi ha decaído en su totalidad.

Por último, el método que se considera usar para realizar la determinación cuantitativa de uranio en muestras de agua subterránea y determinar el grado de desequilibrio en la relación $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, será el de la separación química usando la extracción líquido-líquido con TBP, aunque el uso combinado de ambos métodos arroja un espectro similar, es posible que la combinación afecte directamente a la eficiencia de recuperación del uranio.

REFERENCIAS

1. Van Calsteren; Louise Thomas, "Uranium Series Dating Applications in Natural Environmental Science", *Earth Science Reviews*, **Vol. 75**, p 155-175, (2006).
2. Osmond, J. K.; Cowart, J. B., "The Theory and Uses of Natural Uranium Isotopic Variations in Hidrology", *Atomic Energy Reviw*, **Vol. 14**, p. 621-679, (1976).
3. Ivanovich, M., Harmon, R. S. *Uranium Series Disequilibrium: Applications to Eart, Marine and Environmental Sciences*. Clarendon Press, United Kingdom (1992).

4. Equillos, H.E., Campos, J. M. “Determination of Uranium plus Plutonium by Alpha Spectrometry in Different Matrix”, *Technical Memory Autoridad Regulatoria Nuclear*, Buenos Aires Argentina, 17-21 Julio 2011, **Vol. 188**, p. 157-166, (2011).
5. ASTM: D3972-09, Standard Test Method for Isotopic Uranium in Water by Radiochemistry (2009).
6. Douglas A. Skoog, Donald M. West. *Fundamentos de Química Analítica*. CENCAGE Learning (2015).
7. Alcock, K., Grimley, S. S., Healy, T. V., Kennedy, J., & McKay, H. A. C. “The Extraction of Nitrates by tri-n-butyl phosphate (TBP). Part 1. The system TBP+ Diluent+ H₂O+ HNO₃”. *Transactions of The Faraday Society*, **Vol. 52**, p 39-47. (1956)
8. Sam, A. K. Radiochemical Studies on Environmental Radioactivity in Sudan. *Thesis* (1998).
9. Lehitani, M., Mantero, J., Casacuberta, N., Masqué, P., & García-Tenorio, R. “Comparison of Two Sequential Separation Methods for U and Th Determination in Environmental Samples by Alpha-Particle Spectrometry”. *Radiochimica Acta International journal for chemical aspects of nuclear science and technology*, **Vol. 100**, p 431-438. (2012)
10. Crespo, M. T. “Determination of Natural Alpha-Emitting Isotopes of Uranium and Thorium in Environmental and Geological Samples” *Informes Técnicos CIEMAT* (1996)
11. Tsoufanidis, N. *Measurement and Detection of Radiation*. CRC press. (2010)

Simulación de un haz de electrones mediante el método partícula en celda y Monte Carlo.

Lizárraga-Rubio Víctor Manuel, Ibarra-Armenta José Guadalupe y Valerio-Lizárraga Cristhian Alfonso

Universidad Autónoma de Sinaloa
Av. de las Américas y Blvd. Universitarios,
Cd. Universitaria, CP 80000, Culiacán, Sinaloa, México
vmlizarraga.fcfm@uas.edu.mx; jgibarra@uas.edu.mx; cvalerio@uas.edu.mx

Resumen

El modelar los procesos físicos de un tokamak de forma adecuada es de vital importancia para lograr una fusión eficiente antes de construirlo, en este trabajo se plantea un modelo de un fluido de partículas cargadas eléctricamente buscando encontrar configuraciones de equilibrio entre los componentes del plasma usando dos métodos distintos. Para el primer método se hizo una simulación utilizando el método particle-in-cell, en el cual se calcula directamente la dinámica de las partículas del plasma para hacer un rastreo de sus trayectorias, de las cuales se desprende una colectividad que incluye la creación de partículas cargadas por medio de la ionización. En el segundo se desarrolló un programa diseñado para encontrar la configuración de equilibrio al usar movimientos aleatorios de los componentes del plasma dentro de las celdas de simulación, utilizando la regla de aceptación dada por el Algoritmo de Metropolis y la distribución de probabilidad de Boltzmann en la colectividad canónica, con lo que se decide si la evolución del sistema es la adecuada. Tras obtener algunas configuraciones representativas del equilibrio se hizo estadística con ellas para obtener promedios, así como el cálculo del parámetro β que mide la razón entre la presión ejercida por el plasma y la presión magnética, con lo que se puede discernir una medida de estabilidad del mecanismo de confinamiento del plasma.

1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la sociedad requiere de una gran cantidad de energía para subsistir, esta energía se obtiene principalmente de la quema de combustibles fósiles, como el gas natural y el carbón, así como la generación en reactores nucleares de fisión, entre otros procesos [1]. Debido a que estos métodos generan residuos que contaminan el ambiente, es necesario migrar a formas de generación de energía limpias y seguras, entre estas se encuentra la generación por fusión nuclear. Para lograr llevar a cabo el proceso de fusión se requiere del trabajo en colaboración de un gran conjunto de científicos de diferentes líneas de investigación, como física nuclear, electromagnetismo, diversas ingenierías y expertos en simulación de los procesos físicos envueltos en el trabajo [2], [3]. En particular, nuestro estudio se enfoca en simulaciones por computadora del plasma usando dos métodos distintos: el método de partícula en celda (PIC), y un método híbrido de Monte Carlo con dinámica, considerando el Algoritmo de Metropolis [4].

Como ya se comentó, el primer método es el de PIC, el cual fue utilizado para encontrar la evolución en el tiempo del sistema. Para realizar las simulaciones se utilizaron las librerías IBSimu [5] en C++, las cuales contienen herramientas para obtener la distribución de los componentes de un haz de partículas, la densidad de las trayectorias y el espacio fase de este. El programa permite crear librerías propias para el uso que se desee. Al mismo tiempo, se pueden agregar funciones encargadas de aproximar otras cantidades importantes como la presión y la temperatura.

El segundo se basa en encontrar la convergencia del sistema a partir de una distribución de probabilidad para cada uno de los microestados disponibles. Este método se utilizó para contrastar con otros métodos usados, como el de solucionar las ecuaciones de magnetostática [6], solucionar la forma del plasma como un problema de eigenvalores no lineal [7] o resolver como un problema de difusión en el espacio de velocidades [8]. Los resultados de la simulación con este método son importantes ya que se pueden utilizar como condiciones iniciales para otros métodos donde se tome en cuenta la dinámica.

2. SIMULACIÓN EN IBSIMU

El primer método que se utilizó es el de Partícula en Celda (PIC) con el cual se hace un rastreo de las trayectorias de las partículas dentro de la celda de simulación. La simulación es dividida en un mallado que se utiliza para resolver numéricamente el valor del potencial eléctrico y con este calcular los campos electromagnéticos. Este proceso es iterativo y en cada paso se calcula la trayectoria de cada una de las partículas dada por la fuerza de Lorentz. La trayectoria de cada partícula termina una vez que sale de la celda de simulación, al terminar de iterar todas las trayectorias, estas se reinsertan a la celda para la siguiente iteración, haciendo que la coordenada de z sea cero mientras que las coordenadas en x y y se mantienen iguales. El fin de usar este método es el de considerar solamente una región de la celda de simulación a la vez.

La posición y velocidad inicial de cada una de las partículas del haz se genera con una distribución Gaussiana cuya desviación está determinada por el radio del haz, para la posición, y por la temperatura, para la velocidad. Una consideración que se hizo fue que la energía del haz en la dirección de z mucho mayor que la energía en la dirección de x y y . La geometría para la celda de simulación que se utilizó fue la de un cilindro con 4 cm de radio (x, y) y 10 cm de largo (z).

2.1. METODO DE CONFINAMIENTO

Para el confinamiento del haz en las simulaciones se probaron dos métodos distintos: que las paredes laterales del cilindro son reflejantes y un campo magnético no uniforme en la dirección de z . Con el primero se tiene que cuando el haz colisiona con estas paredes se tiene una colisión elástica, es decir, que la componente de la velocidad que es tangencial a las paredes se conserva, pero la componente perpendicular tiene un cambio de signo. En el segundo método se utilizó un campo magnético no uniforme en la dirección de dirección z con la finalidad de que la fuerza aplicada sobre los electrones del haz haga que se mantengan en la región central del cilindro de acuerdo con la fuerza de Lorentz ($\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$). En la figura (1) se muestra un diagrama del cambio de la dirección de la velocidad de un electrón al colisionar con la pared del cilindro y la magnitud del campo magnético dependiendo de la posición de x y y .

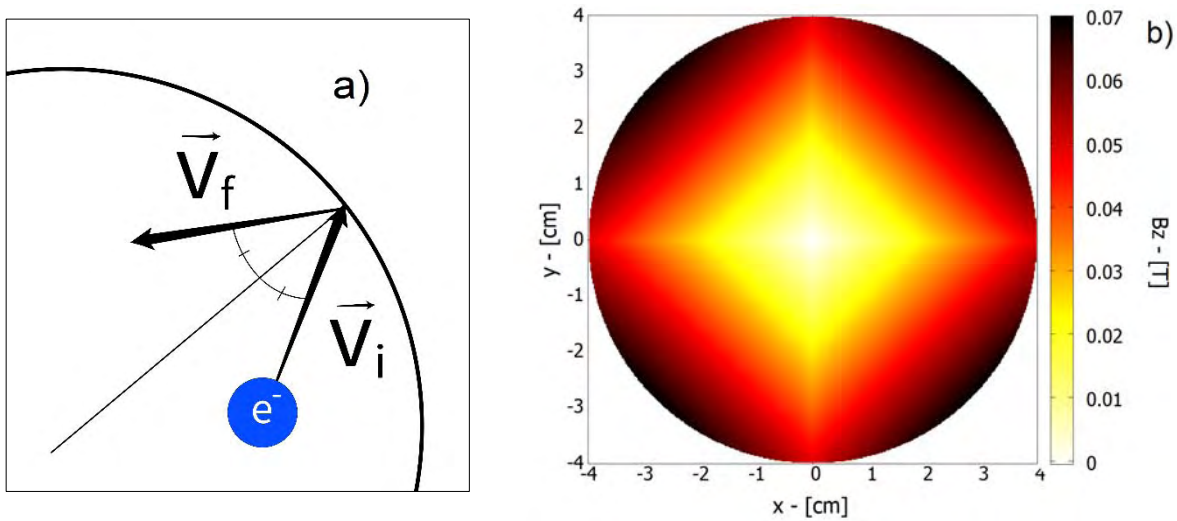


Figura 1. Métodos de confinamiento: a) Diagrama del cambio en la dirección de la velocidad de un electrón al colisionar con la pared del cilindro. b) Magnitud del campo magnético en la dirección de \hat{z} .

2.2. DISPERSIÓN CON LAS PARTICULAS NEUTRAS

Además de considerar la evolución temporal del sistema debido a los campos electromagnéticos, también se tomó en cuenta la dispersión del haz de electrones con las partículas neutras que se encuentran dentro de la celda. Esto se realizó al decidir en cada iteración si alguno de los electrones se dispersaría de acuerdo con a una probabilidad determinada por la sección eficaz del proceso de colisión, en este caso entre electrones y átomos de argón, que a su vez depende de la concentración de argón presente. La dirección de la velocidad de los electrones después de estas colisiones se escogió siguiendo distribuciones aleatorias con una dependencia de la energía de cada uno de ellos, esto de acuerdo con el modelo utilizado en el trabajo de Vahedi [9]. En la figura (2) se muestra un diagrama del cambio en la dirección de la velocidad de un electrón al dispersarse con un átomo de argón.

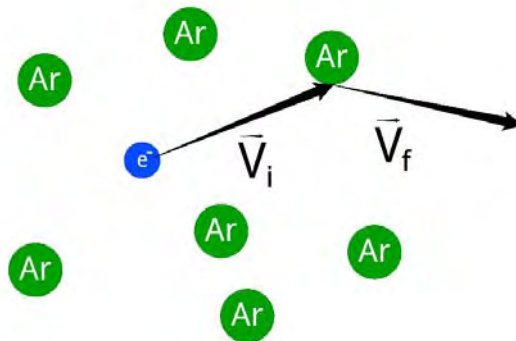


Figura 2. Diagrama del cambio en la dirección de la velocidad de un electrón al colisionar un átomo de argón.

3. SIMULACION USANDO MONTE CARLO

Esta simulación se hizo basándose en el método Monte Carlo el cual se utiliza para resolver problemas, cuya solución analítica es muy compleja, utilizando números aleatorios y estadística para obtener promedios de los microestados del sistema a estudiar, en este caso el del plasma confinado. Para las simulaciones utilizando este método, se busca encontrar la configuración del sistema en equilibrio, donde la energía del sistema pueda converger, al hacer un promedio de todas las configuraciones. Sin embargo, la configuración en equilibrio debe ser la misma que al dejar que un sistema fuera del equilibrio evolucione en un tiempo largo de acuerdo con la hipótesis Ergódica.

3.1. ALGORITMO DE METROPOLIS

El Algoritmo de Metropolis es una regla propuesta por Nicholas Metropolis con la cual se encuentra la evolución de un sistema físico de tal manera que esta cumpla cierta distribución de probabilidad tendiendo a las configuraciones de mayor probabilidad, o bien de energía mínima. Si denotamos como $f(X)$ a la distribución de probabilidad esperada, a $x^{(i)}$ a la configuración inicial del sistema y a $x^{(i+1)}$ a la configuración final a probar, se tiene que esta es aceptada si se cumple la siguiente condición:

$$\xi \leq \frac{f(x^{(i+1)})}{f(x^{(i)})} \quad (1)$$

donde ξ es un numero aleatorio en el intervalo [0,1]. Considerando esta regla de aceptación es evidente que el sistema converge a las configuraciones con mayor probabilidad pues si la probabilidad de la configuración final es mayor a la de la inicial esta es siempre aceptada.

3.2. COLECTIVIDAD CANÓNICA

Una vez obtenida la regla de aceptación que gobierna la evolución del sistema es necesario encontrar la distribución de probabilidad seguida por este. Debido a que en este caso se consideró un número de partículas constante en todas las configuraciones, y que el volumen en el cual se pueden mover estas también lo es, la colectividad natural a usarse en estas condiciones es el canónico cuyas variables naturales son justamente el número de partículas, el volumen y la temperatura (NVT). En esta colectividad, la probabilidad de tener al sistema en una configuración con energía E_i es la siguiente:

$$f(E = E_i) = \frac{e^{-E_i/k_B T}}{\sum_j e^{-E_j/k_B T}} \quad (2)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta del sistema. Así considerando esta distribución de probabilidad, la regla de aceptación (1) es ahora

$$\xi \leq \frac{e^{-E_f/k_B T}}{e^{-E_i/k_B T}} = e^{-(E_f - E_i)/k_B T} \quad (3)$$

donde E_i es la energía de la configuración inicial y E_f es la energía de la configuración final.

3.3. MODELO

Para esta simulación se desarrolló un programa en lenguaje C++ encargado de encontrar la evolución del sistema de acuerdo con la regla de aceptación (3). El funcionamiento de este programa está descrito en la figura (3).

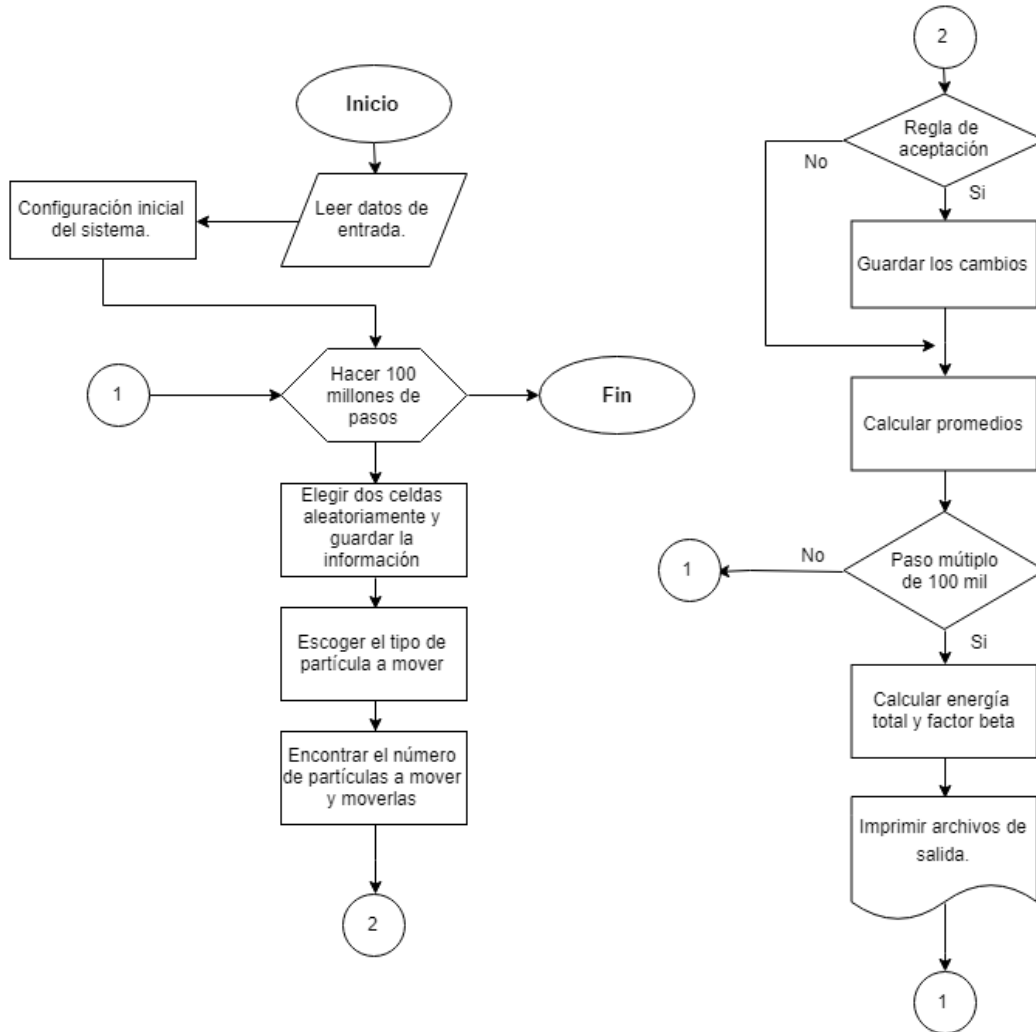


Figura 3. Diagrama de flujo del funcionamiento del programa desarrollado.

3.3.1 Subdivisión de la celda

Debido a que se busca simular un plasma confinado al interior un tokamak, el cual tiene una simetría toroidal, solo es necesario considerar una sección de este, pues el comportamiento del plasma se debe mantener a largo de la trayectoria, suponiendo que los campos magnéticos

encargados de confinar la trayectoria de las partículas no afectan en gran manera su distribución longitudinal. Sin embargo, para las simulaciones presentadas a continuación no se consideró el campo magnético explícitamente por lo que las partículas están confinadas a una parte de la región a simular de manera simple, es decir, es un confinamiento ideal que será modificado en el futuro al incluir campos magnéticos.

Como la distribución de probabilidad depende solamente de la energía del sistema es necesario encontrar una manera de calcular la energía total del sistema para ver la diferencia entre las configuraciones iniciales y finales. Para realizar este cálculo es necesario considerar la interacción entre cada par de partículas dentro de la celda de simulación, lo cual hace que se consuma una gran cantidad de recursos. Por esta razón se propuso subdividir la región a simular en sub-celdas con un volumen aproximado de $1 \times 10^{-12} \text{ m}^3$. El tamaño total de la región del toroide a simular es un cilindro de 8 cm de radio y un largo de $1 \mu\text{m}$, sin embargo, la celda de simulación tiene un tamaño de 6 cm de radio con un grosor de $1 \mu\text{m}$ (Figura 2). Estos valores fueron escogidos para representar una columna cilíndrica de plasma.

Otra consideración es que los componentes del plasma están uniformemente distribuidas dentro de cada una de las sub-celdas, por lo que la posición promedio de las partículas dentro de cada una está localizada en el centro de la sub-celda. La carga de cada una se aproximó como la carga apantallada de todas las partículas dentro de ellas, explícitamente la carga de la n-ésima sub-celda está dada por la siguiente ecuación,

$$q_n = \sum_i Z_i N_{n,i} e \quad (4)$$

donde Z_i es el estado de carga de la i-ésima componente del plasma, e es la carga fundamental y $N_{n,i}$ es el número de partículas de la i-ésima componente dentro de la sub-celda n.

Tomando esto en cuenta la energía de interacción considerada fue solamente la energía Coulombiana entre cada par de sub-celdas de acuerdo con su respectiva carga y posición en la celda de simulación. En la figura (4) se observa la región donde se confina el plasma con respecto al toroide, así como una parte de la sección transversal del toroide subdividida en cada una de las sub-celdas.

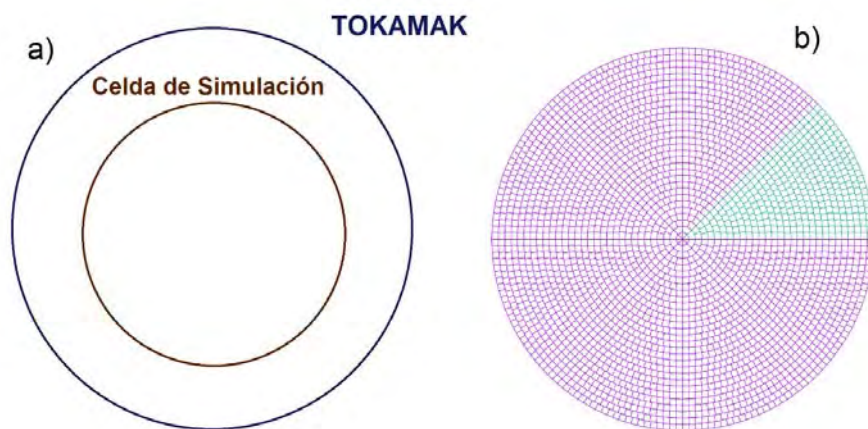


Figura 4. a) Sección transversal del toroide en azul y celda de simulación donde se encuentra el plasma confinado en café. b) Subdivisión de la sección transversal del toroide en sub-celdas. En verde la celda de simulación almacenada.

3.3.2 Movimiento de partículas

Para obtener una configuración estable es necesario generar una gran cantidad de configuraciones aleatorias, para este sistema se decidió definir un movimiento de las partículas de tal manera que el sistema converja a una configuración en equilibrio al realizar una gran cantidad de estos movimientos. Así, estos se definieron siguiendo los siguientes pasos:

- Se seleccionan dos sub-celdas aleatoriamente.
- Se elige el tipo de partícula que se moverá.
- Se selecciona el número de partículas a moverse dependiendo del punto anterior.
- Se acepta o se rechaza el movimiento de acuerdo con la regla de aceptación (3).

3.3.3 Componentes del plasma

La composición del plasma en esta simulación fue la siguiente:

- 81.8% de moléculas de hidrógeno.
- 9.1% de electrones.
- 7.3% de deuterones.
- 1.8% de protones.

Con estas proporciones y tomando una densidad de electrones de $2 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ se obtuvieron las densidades máximas de los demás componentes, los cuales están enlistados en la tabla I.

Tabla I. Densidad de partículas de los distintos componentes del plasma.

Componente	Densidad de partículas (m-3)
Electrón	2×10^{19}
Hidrógeno molecular	1.8×10^{20}
Protón	1.6×10^{19}
Deuterón	4×10^{19}

Con estas densidades de partículas la carga neta de la celda de simulación es cero pues la densidad de partículas positivas es igual que la de las negativas, lo cual permite mantener la cuasi neutralidad del plasma durante el proceso de simulación.

3.3.4 Cálculo del parámetro β

El parámetro β está definido como la razón entre la presión termodinámica de un gas y la presión ejercida por el campo magnético. Explícitamente para este caso este está dado por la siguiente ecuación:

$$\beta = \frac{k_B(\rho_i T_i + \rho_e T_e)}{\frac{B^2}{2\mu_0}} \quad (5)$$

Donde ρ_i y ρ_e son las densidades de iones y electrones respectivamente, T_i y T_e son las temperaturas de los iones y de los electrones, B es el campo magnético y μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío.

Anteriormente se mencionó que el campo magnético no se utilizó explícitamente en el confinamiento del plasma o para obtener su evolución, sin embargo, si se utilizó en el cálculo del

parámetro β utilizando campos magnéticos simulados con el programa Poisson Superfish [10] para crear el campo no uniforme.

Para obtener los valores de la temperatura de los componentes del plasma se utilizó la fórmula de Artsimovich [11,12] para la temperatura de los iones, se consideró una corriente de plasma, I_p , de 12 kA, un campo magnético toroidal, B_z , de 0.47 T, un radio mayor, R_0 , de 23 cm, un parámetro de seguridad, q, de 3 y la densidad de partículas propuesta en la sección anterior. Con estos parámetros se obtienen unas temperaturas de 50 eV y 150 eV para los iones y los electrones, respectivamente.

Con los datos anteriores y un campo magnético promedio de 450 Gauss, se obtuvo una beta promedio de ~80% lo cual indica que se obtiene un confinamiento del haz, sin embargo, este no puede considerarse estable.

4. PRUEBAS Y RESULTADOS

Las primeras simulaciones realizadas con el método PIC fueron pruebas para aprender acerca del método de solución de este. En la figura (5) se muestran la evolución de un haz durante los primeros pasos de una corrida de prueba utilizando un haz con 4000 electrones, una energía de 50 keV en la dirección de z , una temperatura en la dirección de x y y de 10 eV y un campo magnético nulo. Se puede observar como el haz se va dispersando debido a la velocidad radial que tienen los electrones.

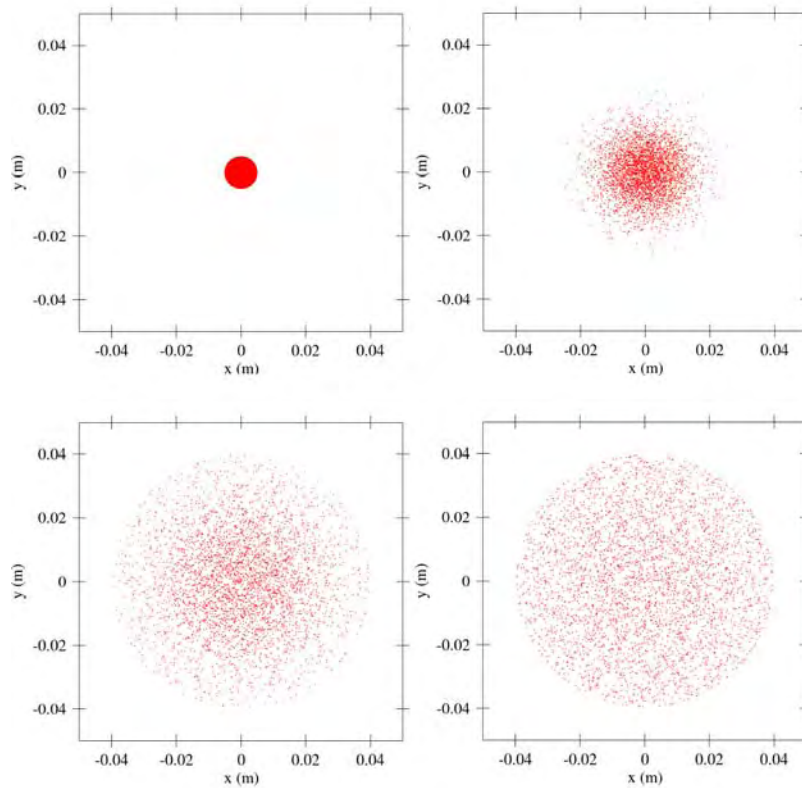


Figura 5. Evolución del haz durante las primeras iteraciones de la simulación.

En las simulaciones con el método de confinamiento de la pared reflejante se consideró un haz con las mismas características del haz de la figura anterior. En la figura (6) se muestran gráficas del espacio fase de este haz, dos en la dirección en x y dos en la dirección de y , en las cuales se puede observar que la distribución inicial de velocidades está dada por la distribución de Maxwell-Boltzmann y la final tiene aspecto de un gas ideal.

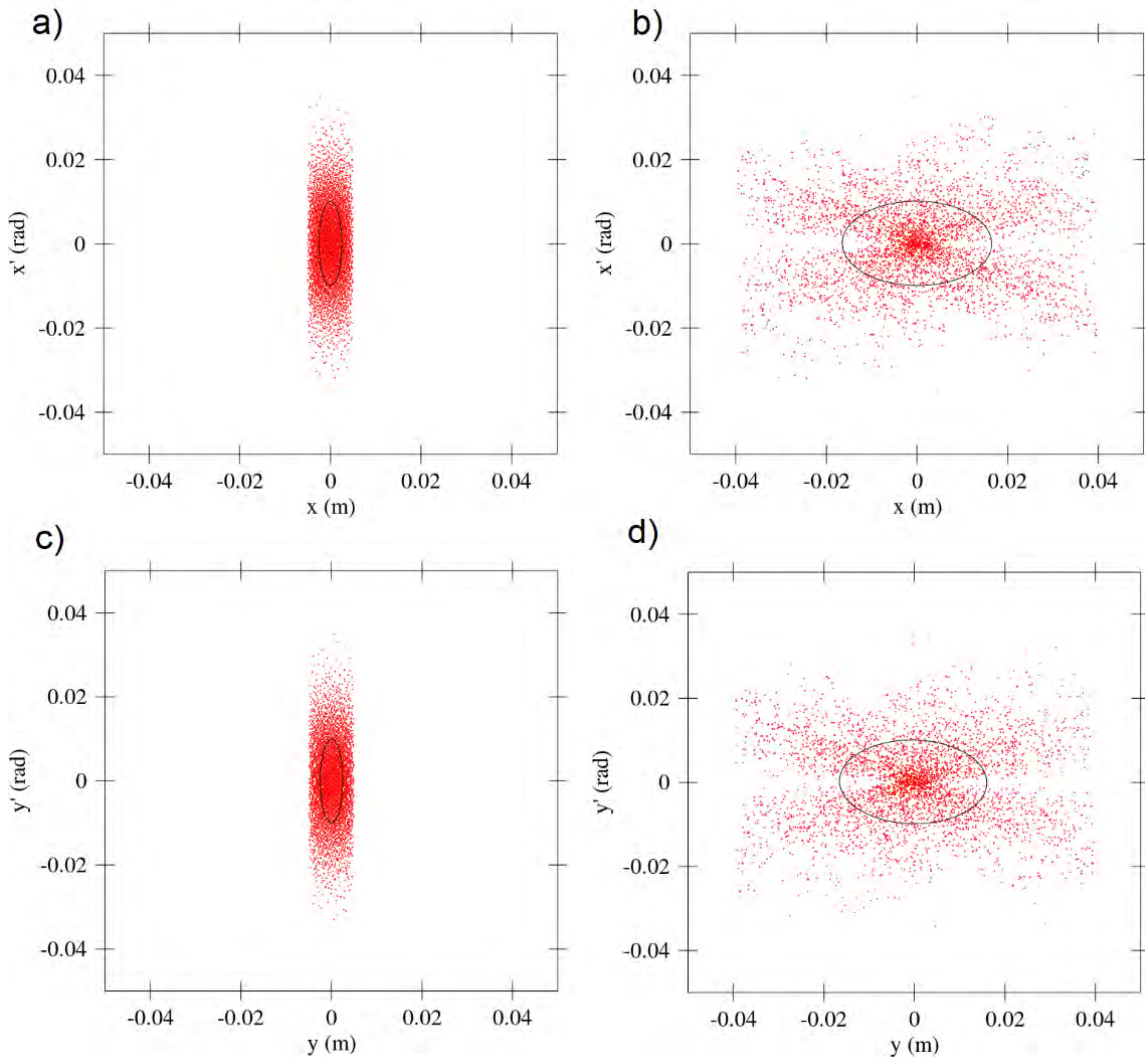


Figura 6. a-b) Gráfica del espacio fase en la dirección de x . c-d) Espacio fase en la dirección de y .

Luego se hicieron simulaciones con y sin campo magnético para observar el efecto que tiene este en el perfil del haz. Se observó que la trayectoria del haz para la simulación con el campo magnético es más centrada y menos dispersa. En la figura (7) se muestra la densidad de trayectorias en ambas simulaciones.

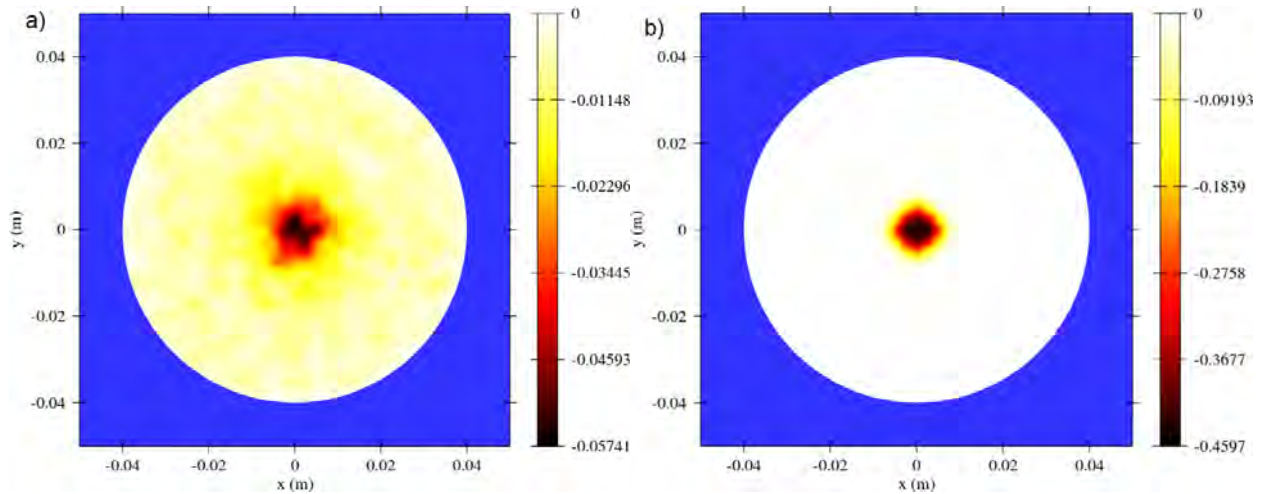


Figura 7. a) Densidad de trayectoria obtenidas en la simulación sin campo magnético (a) y con campo magnético (b).

Para las siguientes simulaciones se agregó la dispersión del haz debido a la colisión con el gas neutro dentro de la cámara. En la figura (8) se muestran las trayectorias durante las primeras iteraciones de la simulación considerando un haz con las mismas propiedades de las dos anteriores y con un campo magnético nulo. Se puede observar como la trayectoria de algunos de los electrones cambia en cada una de las iteraciones.

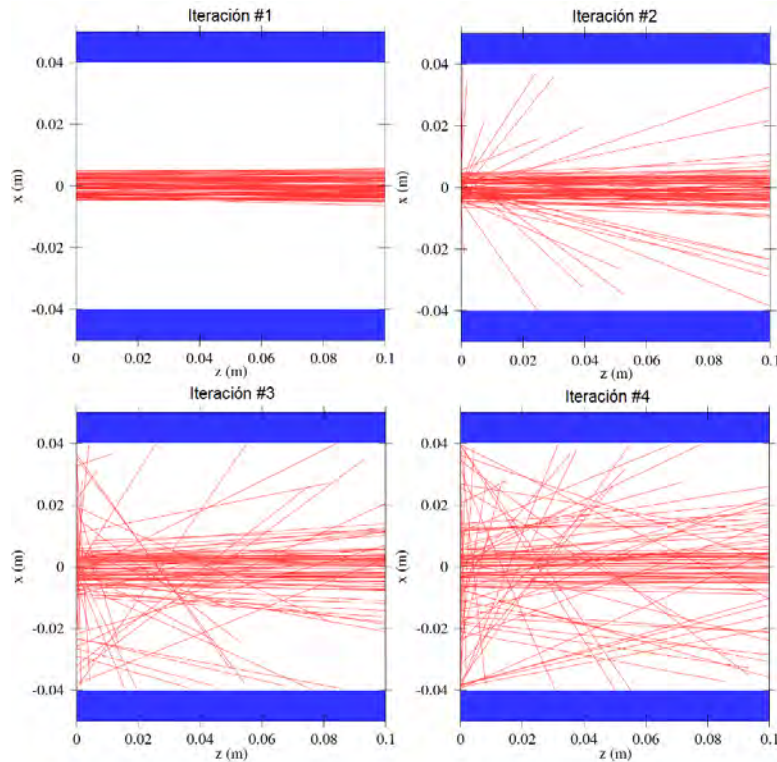


Figura 8. Termalización del haz de partículas debido a la dispersión con un gas neutro a 1×10^{-6} mbar en las primeras iteraciones, ilustrando el funcionamiento del algoritmo.

Para la simulación con el método Monte Carlo se tomaron en cuenta las siguientes condiciones: una temperatura de los iones de 50 eV y una temperatura de electrones de 150 eV. En la figura (9) se muestran los resultados de esta simulación en los cuales se puede observar como las partículas se aglomeran en sub-celdas adyacentes y con una carga neta opuesta, esto debido a que la energía es menor en estos casos. Este comportamiento de aglomeración en ciertas regiones es similar al observado en el trabajo [13]. Es importante recalcar que esta distribución de los componentes del plasma es la de un mínimo local de la energía.

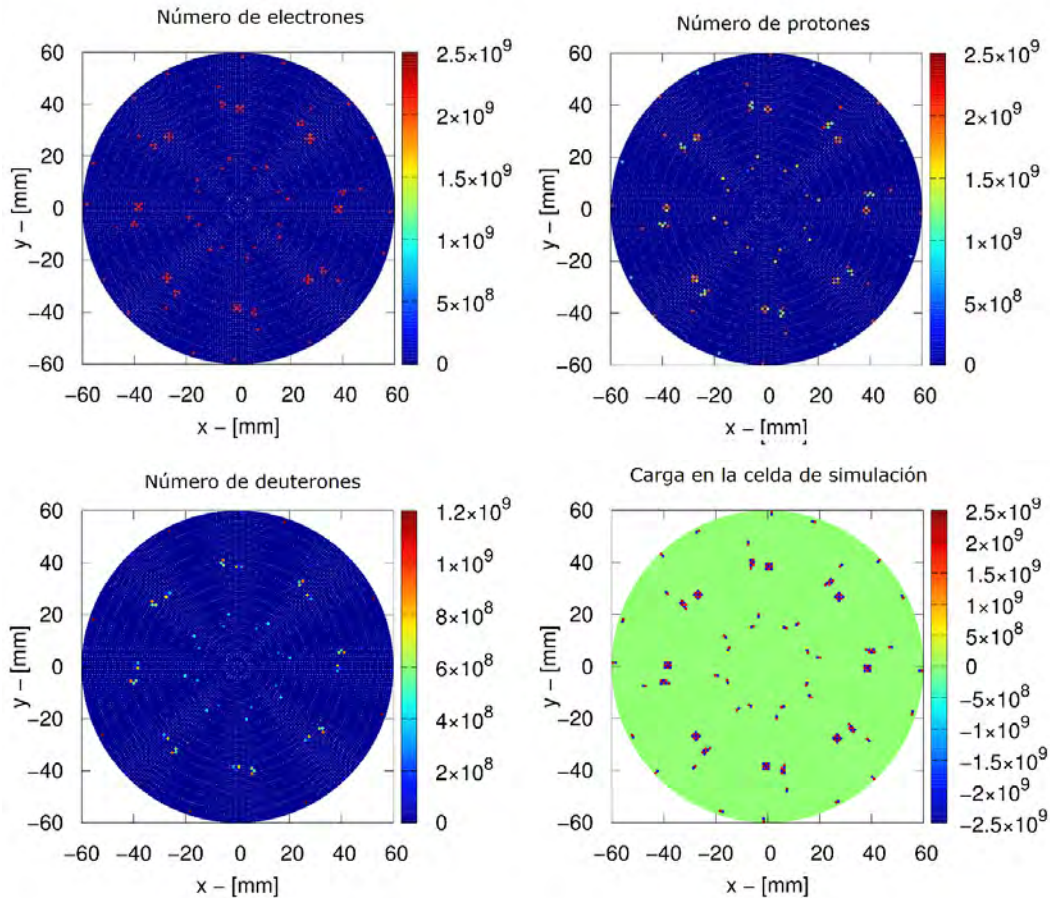


Figura 9. a-c) Número de electrones, protones y deuterones localizados en cada una de las sub-celdas. d) Carga neta de cada una de las sub-celdas.

5. CONCLUSIONES

Se obtuvieron resultados preliminares del comportamiento de un haz de electrones al ser confinado por medio de colisiones elásticas con una pared reflectora o con un campo magnético, así como la dispersión que tiene este en presencia de un gas neutro. Con esto se observó el comportamiento esperado de obtener la distribución de un gas ideal conforme avanza el tiempo,

lo cual nos permitirá agregar la repulsión de Coulomb y otros procesos físicos a las simulaciones en trabajos futuros.

También, con el método Monte Carlo se obtuvo que al confinar el plasma de manera artificial se llega a una configuración final de equilibrio local, en la aproximación utilizada, que muestra algunas de las características esperadas, como el que las partículas se aglomeren en ciertas regiones aumentando la densidad local del plasma. Este comportamiento es benéfico para encontrar los puntos donde la fusión sería más probable.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al “Programa de Desarrollo Institucional Consolidación 2017” de la Universidad Autónoma de Sinaloa: Proyectos PROFAPI2015/125 y a la Secretaría de Educación Pública (SEP), “Apoyo a la incorporación de nuevos PTC de PRODEP/Uas-ptc-129” por el apoyo económico brindado.

REFERENCIAS

1. “U.S. Energy Information Administration (EIA)”, <http://www.eia.gov> (2009).
2. John M. Dawson, “Particle Simulation of plasmas”, *Rev. Mod. Phys.*, **55**, p.403 (1983).
3. L. Neri, D. Mascali, L. Celona, S. Gammino, y G. Ciavola, “A 3D Monte Carlo code for the modeling of plasma dynamics and beam formation mechanism in electron cyclotron resonance ion sources”, *Review of Scientific Instruments*, **83**, 02A330 (2012).
4. Metropolis et al., “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”, *J. Chem. Phys.*, **21**, p.1087 (1953).
5. “Página principal de IBSimu”, <http://ibsimu.sourceforge.net/index.html> (2015).
6. M. D. Kruskal y R. M. Kulsrud, “Equilibrium of a Magnetically Confined Plasma in a Toroid”, *The Physics of Fluids*, **1**, p.265 (1958).
7. Temam, R., “A non-linear eigenvalue problem: The shape at equilibrium of a confined plasma”, *Arch. Rational Mech. Anal.*, **60**, p. 51 (1975).
8. A. Girard, C. Pernot, G. Melin, y C. Lécot, “Modeling of electron-cyclotron-resonance-heated plasmas”, *Phys. Rev. E*, **62**, p. 1182 (2000).
9. K. Halbach and R. F. Holsinger. Poisson Superfish http://laacg.lanl.gov/laacg/services/serv_codes.phtml#ps, (2013).
10. V. Vahedi, y M. Surendra, “A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges”, *Comput. Phys. Commun.*, **87**, p.179-198 (1995)
11. L. A. Artsimovich, A. V. Glukhov, y M. P. Petrov, “Ion Energy Balance in the Plasma of a Tokamak Machine”, *ZhETF Pis. Red.*, **11**, p.449-452 (1970).
12. Yu. V. Gott, “On Artsimovich's Formula”, *Plasma Physics Reports*, **33**, p.880 (2007).
13. Chang et al., “Fusion Energy Sciences Exascale Requirements Review.”, *An Office of Science review sponsored jointly by Advanced Scientific Computing Research and Fusion Energy Sciences*, Gaithersburg, Maryland. United States, January 27-29, (2016).

Desarrollo de la fuente de pre-ionización por RF a 2.45 GHz para el Tokamak esférico: TEA-T

M. Salvador, A. Acosta, J. González

*Grupo de Investigación de Fusión, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica,
Universidad Autónoma de Nuevo León
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L., México
max.salvadorhr@uanl.edu.mx, armandopr94@hotmail.com*

J. A. Guevara,

*Grupo de Investigación de Fusión, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas,
Universidad Autónoma de Nuevo León
Pedro de Alba S/N, ciudad universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L., México
sihigzzg@gmail.com*

G.M. Vorobyov

*Departamento de Física, Universidad Estatal de San Petersburgo
Federación Rusa*

Resumen

*Dentro el ámbito de la Fusión Nuclear por Confinamiento Magnético, existen varias consideraciones para poder lograr el anhelado **encendido** del plasma, una de ellas radica en la temperatura del plasma, el cual debe de encontrarse a cientos de millones de grados centígrados y que junto con la densidad y el tiempo de confinamiento deben cumplir con el criterio de Lawson, con ello, se indicaría el cumplimiento de las condiciones necesarias para realizar fusión, en este rubro se han desarrollado diversas técnicas de calentamiento aplicadas en Fusión. En el presente trabajo, el Grupo de Investigación en Fusión (GIF) de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), proyecta un sistema de pre-ionización por RF para un plasma confinado magnéticamente, se encuentra actualmente en desarrollo y en proceso de construcción, la fuente de microondas es económica y servirá como sistema de pre-ionización en el Tokamak Esférico de Apoyo hacia "T" (TEA-T), utilizando un magnetrón de 2.45 GHz, La fuente de microondas magnetrón diseñada polariza al cátodo del magnetrón, se ha modificado para obtener un funcionamiento de modo pulsado, esto se logra a través de ciertas modificaciones en el circuito doblador de voltaje de onda completa del dispositivo de calentamiento y así tener estable el magnetrón durante varios milisegundos de operación. Este sistema de RF será empleado en un plasma confinado magnéticamente a través de un campo de 0.5 T con 5 ms en descarga, otorgándonos una excelente base experimental en el TEA-T.*

1. INTRODUCCIÓN

Dentro el ámbito de la Fusión Nuclear por Confinamiento Magnético, existen varias consideraciones para poder lograr el anhelado **encendido** del plasma, una de ellas radica en la temperatura del plasma, el cual debe de encontrarse a cientos de millones de grados centígrados para cumplir con el criterio de Lawson, y que junto con la densidad y el tiempo de confinamiento en el plasma reunirían las condiciones necesarias para realizar fusión. El Calentamiento por Resonancia Electrón Ciclotrón (ECRH) es ampliamente usado para tiempos de descarga en

plasmas mayores de dispositivos de confinamiento magnético, en el presente trabajo el Grupo de Investigación en Fusión (GIF) de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), proyecta un sistema de pre-ionización y calentamiento por RF para un plasma confinado magnéticamente, es un sistema desarrollado para el Tokamak Esférico de Apoyo hacia "T", el cual funge como dispositivo de soporte en física como en ingeniería para permitir la evolución del Tokamak "T" que era de Baja Razón de Aspecto y que había sido diseñado para obtener 1.6 T de campo toroidal, hoy el Tokamak "T" se encuentra orientado a 3T convirtiéndose en un Tokamak Esférico de Alto Campo Magnético, siendo así, el TEA-T comprende el diseño de una instalación base que permitirá esa evolución, es una máquina de 0.5 T de campo toroidal y con un tiempo de operación de 5 ms.

El Grupo de Investigación en Fusión actualmente tiene una fuerte relación y colaboración científico tecnológica con el Departamento de Física de la Universidad Estatal de San Petersburgo en la Federación Rusa, junto con ellos se ha realizado la revisión de los diseños Tokamak realizados por el GIF y actualmente en curso está la construcción del primero de ellos: el TEA-T. En primera instancia el GIF consideró que un objetivo importante para desarrollar un Tokamak Esférico a pequeña escala es: permitir la observación, la experimentación sobre plasmas óhmicos producidos a escala de laboratorio y que en este caso servirán para reforzar el factor experimental del personal de GIF-UANL en tareas de fusión como: inicio de plasma, ruptura/avalancha y generación de corriente aplicando procesos inductivos y no inductivos [1].

También tiene un objetivo más trascendental, el construir un Tokamak Esférico Avanzado desarrollado entre nuestros institutos en Rusia y México, y que servirá como un banco de pruebas y una plataforma apropiada para enmarcar el proyecto de: Tokamak Esférico Conjunto Rusia México de 3T.

Dentro de todas las consideraciones que se deben cumplir para obtener una excelente descarga de plasma será necesario que la cámara de vacío primero se caliente muchas horas antes para eliminar cualquier residuo o impureza, en el documento [1], la temperatura es aproximadamente 70°C, con una presión de 8×10^{-7} mbar, en estas descargas de limpieza se puede utilizar una descarga de Ar.

El sistema de pre-ionización que se ha desarrollado, utiliza una fuente de magnetrón de 2.45 GHz, para pre-ionizar el plasma, como se comenta en [2], el campo toroidal que se utiliza para la iniciación del plasma se combina con nuestra fuente de pre-ionización de microondas. Como se ha comentado anteriormente, la fuente de microondas magnetrón se obtuvo de un dispositivo de calefacción doméstica, el circuito que polariza el cátodo del magnetrón fue modificado para obtener una operación de modo pulsado del magnetrón, esto se logra a través de ciertas modificaciones en la onda de circuito promedio del dispositivo de calefacción y así operar un magnetrón estable.

Artsimovich en 1971 estableció experimentalmente una relación entre la presión del plasma, aspecto térmico y aspecto magnético [3], y donde η_e y T_e son la densidad y la temperatura electrónica, α es la razón del promedio de las temperaturas iónicas y electrónicas, esta relación se indica de forma en donde $\alpha = T_i / T_e$.

$$\eta_e k T_e (1 + \alpha) < B T^2 \frac{a^2}{R^2} \frac{1}{2 \mu q_0} \quad (1)$$

Para la determinación de la temperatura iónica (T_i) nos basamos en nuestro estudio en los cálculos realizados por L.A. Artsimovich [4, 5] para la energía del equilibrio en Tokamaks, donde hemos empleado la siguiente ecuación:

$$T_i = (1.29 \mp 0.11) \frac{(I B R^2)^{1/3}}{A_i^{1/2}} \quad (2)$$

Donde se describe la temperatura iónica al centro meridional de la sección transversal de la columna de plasma T_i y que depende del calentamiento óhmico, la corriente (I) es la corriente del plasma; el campo (B) corresponde al campo toroidal; (R) es el radio mayor; y (η) es la densidad eléctrica del plasma; (A_i) es la masa del gas de trabajo en este caso hidrógeno, sustituyendo dichos datos en la ecuación, se puede obtener la temperatura iónica.

2. FUNCIONAMIENTO Y CONFIGURACIÓN DEL MAGNETRÓN

En nuestra revisión bibliográfica, encontramos circuitos que fortalecen nuestro criterio para emplear un sistema magnetron a la frecuencia de 2.45 GHz, para aplicarse en nuestro Tokamak Esférico TEA-T, este mismo criterio se estableció operativamente en el Tokamak Esférico GLAST III de Pakistán como en el Tokamak KAIST-TOKAMAK de Corea del Sur, ambas máquinas emplean una fuente de pre-ionización, solo que el Tokamak coreano utiliza una fuente simple, y su segunda propuesta fue utilizar una fuente externa de CD otorgándole así, el voltaje requerido. En el dispositivo GLAST III se modificó el circuito de voltaje pulsado para incrementar su voltaje de salida, también modificaron el magnetron generando la misma frecuencia minimizando las pérdidas.

El magnetron que tenemos para la fuente de RF es capaz de proporcionar 500 W de potencia de microondas a 2.45 GHz. El circuito establecido en el diseño del dispositivo de calentamiento comercial, que sirve de base para nuestro sistema, se muestra en la Figura 1.

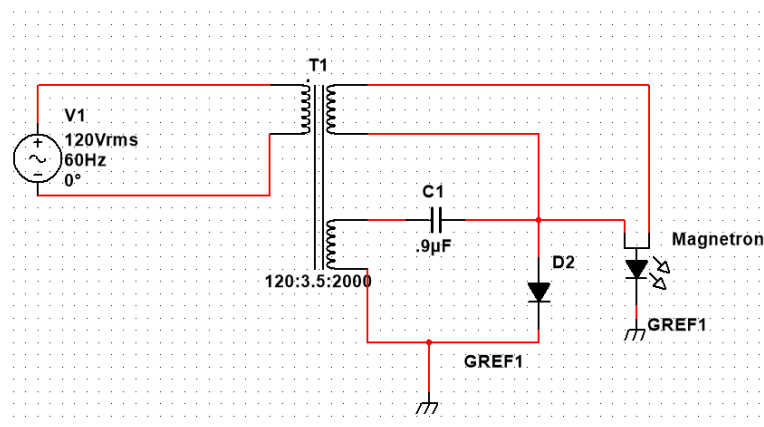


Figura 1. Diagrama esquemático del circuito de operación del magnetron en un dispositivo de calentamiento

La clave del circuito, que se realizó con MultiSim2018, se muestra en la Figura 1, es un transformador que consta de dos partes, la primera es de bajo voltaje y la otra de alto voltaje, lo que significa que el transformador en la parte de bajo voltaje proporciona 3.5 V - 11 A para calentar los filamentos de magnetrón. El alto voltaje proporciona 2,100 V a 1 A. El bucle secundario de la parte de alto voltaje está conformado por un condensador de tensión C1 y un diodo D2 (ver Figura 1, parte media), se encuentran conectados a un doblador de voltaje de media onda. A partir de este circuito se realizaron simulaciones con el mismo programa el cual permite hacer análisis de corriente como de voltaje, en nuestro caso, la simulación del circuito de la Figura 1, produjo la polarización del cátodo del magnetrón, otorgándonos el valor de: -5.4 Kv como se puede apreciar en la Figura 2.

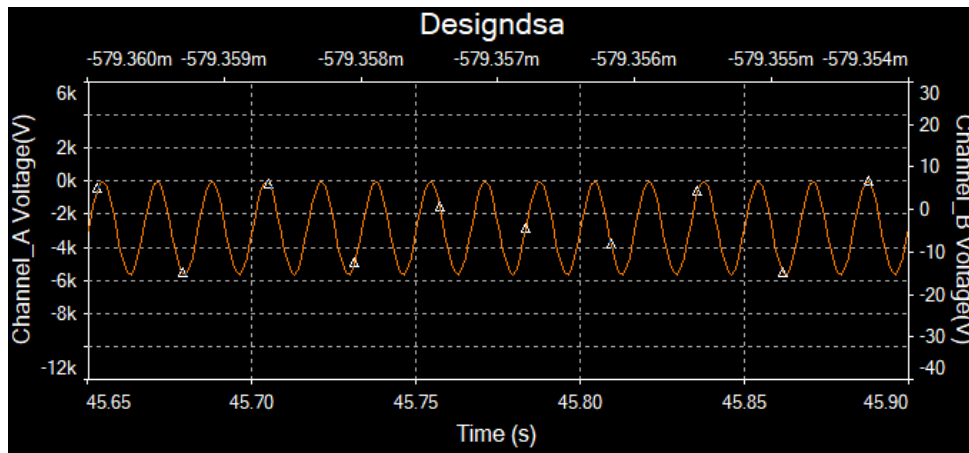


Figura 2. Segundo medio ciclo negativo, polarización del cátodo con -5.4 kV

Normalmente, el transformador de alto voltaje de un dispositivo magnetrón comercial eleva el voltaje de 120 a 2,100 voltios. Teniendo en cuenta que la tensión de C.A. varía continuamente, el valor indicado por el voltímetro es solo el Valor efectivo de esta tensión. El valor máximo alcanzado por la onda sinusoidal de C.A. Es 1,414 veces el valor efectivo. Por lo tanto, la tensión máxima alcanzada en los devanados del transformador de alto voltaje sería la siguiente [6]:

$$V_m = \sqrt{2} \times V_s \quad (3)$$

Devanado primario: Voltaje máximo = $\sqrt{2} \times 120V$ de c.a = 169.6 V de c.a

Devanado secundario: voltaje máximo = $\sqrt{2} \times 2,100V$ de c.a = 2,969 V de c.a

Durante la primera mitad del ciclo positivo de la onda sinusoidal de C.A. (ver Figura 3), la corriente de electrones fluye en la dirección indicada por la línea de color rojo que carga el condensador de alto voltaje C1 a través del diodo rectificador D2. Durante el tiempo de carga del condensador, no hay voltaje para el magnetrón porque la corriente toma el camino de menor resistencia (Figura 3).

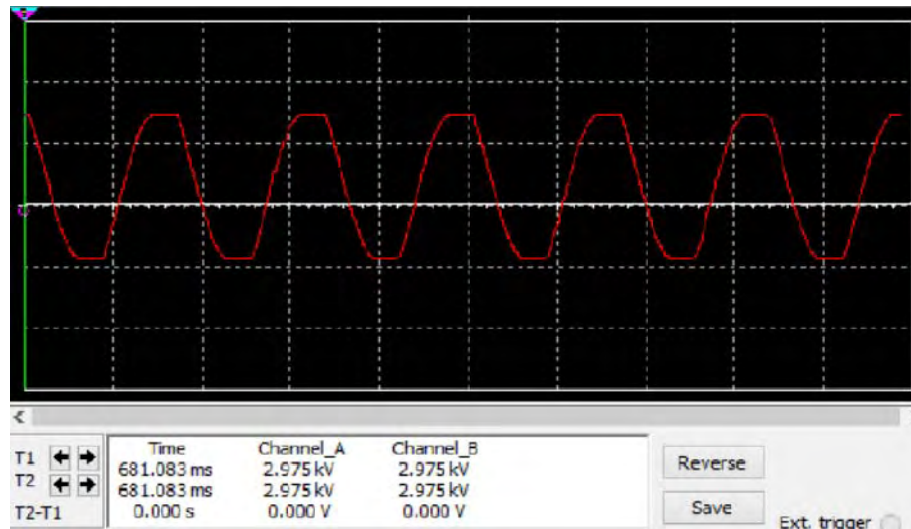


Figura 3. Primer medio ciclo positivo, carga del capacitor

La Figura 2 muestra el voltaje en el devanado secundario del transformador que pasa al semiciclo negativo hasta alcanzar su punto máximo, momento en el que el devanado mencionado anteriormente y el condensador cargado ahora son dos fuentes de voltaje en configuración en serie. Los -2,828 voltios presentes en los extremos del devanado del transformador son sumados a los 2,828 voltios almacenados en el condensador y estas cantidades suman, -5,656 voltios, se aplica al cátodo de magnetrón como una corriente continua que pulsa el voltaje medido, entre el ánodo a tierra y el cátodo de filamento en ausencia de calentamiento del filamento. La Figura 3. sugiere el funcionamiento del magnetrón y, por lo tanto, la generación de microondas a 60 Hz como un electrón y la emisión se produce al calentar los filamentos.

3. CIRCUITO MULTIPLICADOR DE TENSION

En nuestro desarrollo utilizamos un doblador de tensión para convertir una señal de corriente alterna de entrada en corriente de salida pulsante, que es lo que necesitamos, ver Figura 4. A diferencia del rectificador de media onda que se explica en la parte inferior de las propuestas siguientes, el ciclo negativo de la señal se vuelve positivo o el ciclo positivo de la señal se volverá negativo, dependiendo de si se necesita una señal positiva o negativa de corriente directa. El circuito de onda se puede utilizar para lo que necesitamos; Sin embargo, hay un desperdicio indeseable en cuestiones de potencia y seguridad de los diagnósticos. Por esta razón, el circuito de doblador de tensión se modifica para funcionar de diferente modo [7, 8].

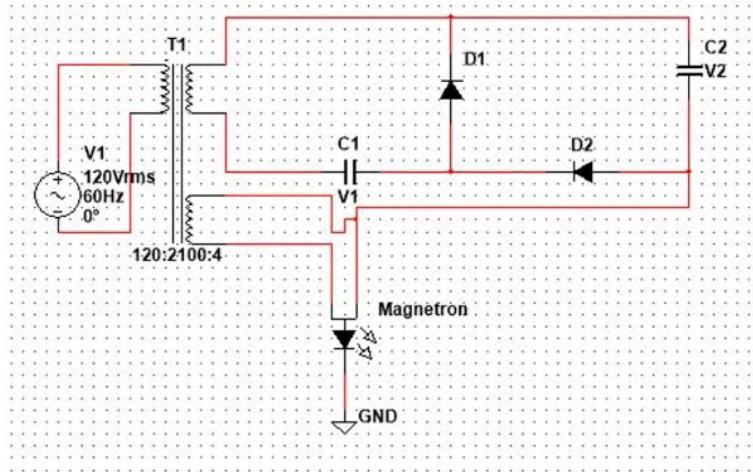


Figura 4. Modificación de circuito, que utiliza diodos y capacitores de alta tensión, para rectificador de onda completa.

La Figura 4 muestra el circuito modificado en el que aparece la rectificación completa de la onda por medio de capacitores y diodos de alto voltaje. Durante el primer pulso positivo de AC de la Figura 5, el transformador de alta tensión carga el condensador C1 a 2.7 kV esto se debe a que el diodo D1 viéndolo en la Figura 4, está en corto, así se carga C1.

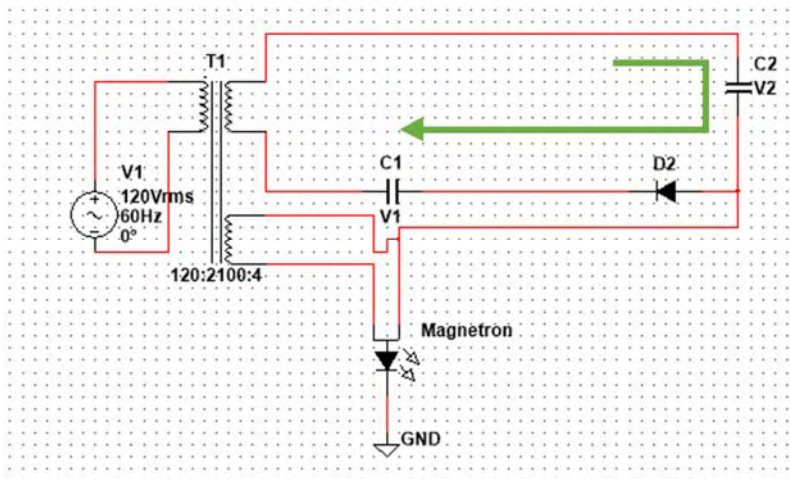


Figura 5. Análisis de circuito en semiciclo positivo

Durante el segundo impulso negativo de la onda de tensión AC de la Figura 6, la tensión de salida del transformador alcanza un valor de -2.7 kV con fase invertida, de modo que la tensión total en el condensador C2 se duplica, es decir que es 2Vs, -5.4 kV. Dado que la impedancia de C2 es menor que la del magnetrón, C2 se carga a una tensión de -5.4 kV, C2 permanece cargado y cuando va a volver a entrar el otro semiciclo se descarga hacia el lado del cátodo del magnetrón

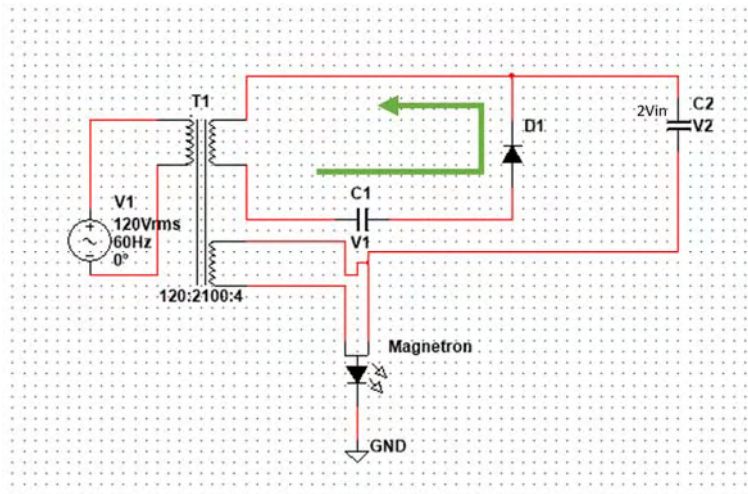


Figura 6. Análisis de circuito en semiciclo negativo

La Figura 7 observamos todo el funcionamiento de la explicación pasada de los capacitores de alta tensión C1 y C2, donde podemos observar la onda completa de trabajo de los dos capacitores y sus respectivos voltajes mediante MultiSim 14.0.

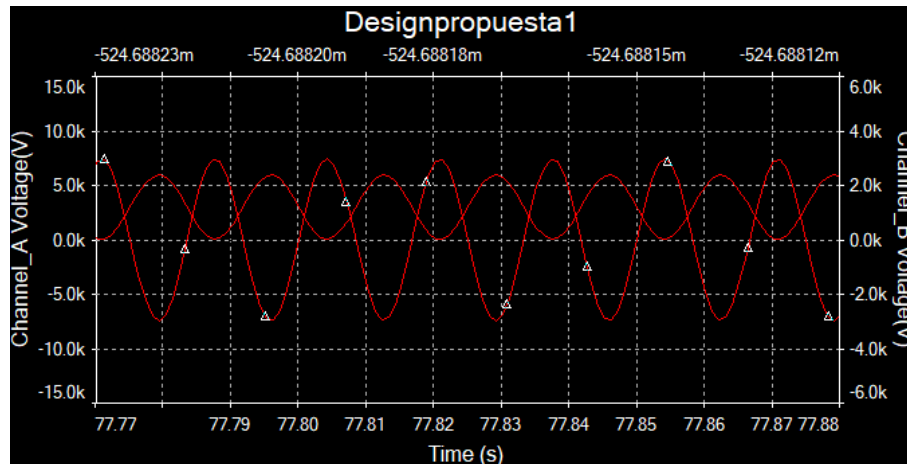


Figura 7. Comportamiento de carga de C1 y C2

En la Figura 8, observamos todo el funcionamiento completo del circuito de la Figura 4, donde podemos observar la onda completa de trabajo del magnetrón y del capacitor C2 que es observada desde el osciloscopio gráfico del MultiSim 14.0.

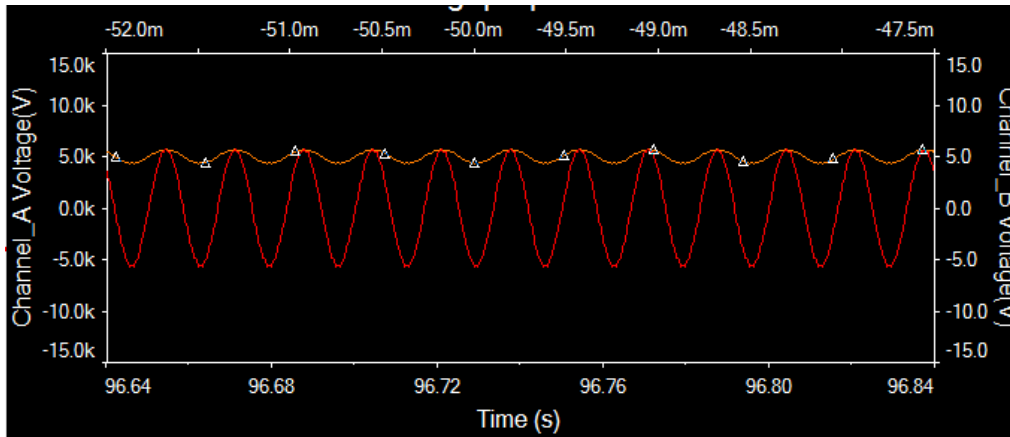


Figura 8. Comportamiento del doblador de tensión

4. CIRCUITO MODIFICADO PARA FUNCIONAMIENTO CON FUENTE DC

Mediante la rectificación de onda completa, el funcionamiento del magnetómetro se llevó a su operación máxima. Proponiendo otro circuito de operación que nos lleva a mejorar la confiabilidad de trabajo y con más control para la protección del operador, el transformador de alto voltaje y el circuito de rectificación asociado fueron reemplazados externamente por una fuente externa de DC de alto voltaje.

El voltaje proviene de una fuente de alimentación de DC, la idea general se observa en la Figura 9, el circuito utiliza una fuente de alimentación de DC de conmutación de 4 kV a un 1 A, podríamos elevar el voltaje, teniendo consecuencias al dañar el material conductor de tungsteno, todo esto es independiente de la parte de calentamiento del filamento del transformador de HV que da 3.5 V - 11 A. En esta propuesta general podemos encontrar un convertidor de DC/DC y así obtener una salida de 4 kV a 5 kV aproximadamente, una de las opciones es implementar un transformador *flyback*, que está compuesto de dos etapas, un *Feedback* y un transformador primario y la segunda etapa es el secundario donde aumentamos el voltaje. Existen otras maneras de elevar el voltaje mediante el *Buck-Boost* que son convertidores de DC/DC que aumentan el voltaje en la salida consiguiendo el voltaje requerido. A estos circuitos o métodos mencionados podemos agregarle a la salida del circuito un circuito multietapa para aumentar el voltaje de salida, del mismo modo la fuente de AC se controla mediante un relé (S1) para activar/desactivar la tensión de salida de 4 V y con otro relevador (S2) que está conectado en la fuente de DC, donde los relés permiten controlar la duración del calentamiento del filamento antes de que comience el calentamiento del cátodo, dejamos el transformador de alta tensión que nos proporciona 3.5 V - 11 A conectado al cátodo del magnetrón y al otro extremo (observamos en la Figura 9) polarizamos en el cátodo del magnetrón el total de -4 kV [12].

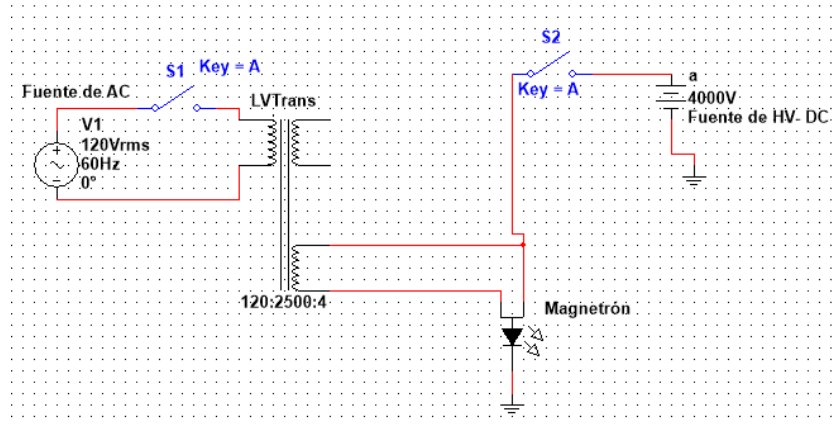


Figura 9. Modificación de circuito, para fuente externa de DC

Observamos en la Figura 10 el funcionamiento de la fuente de DC y de la fuente AC donde podemos observar el comportamiento de las dos fuentes operando al mismo tiempo.

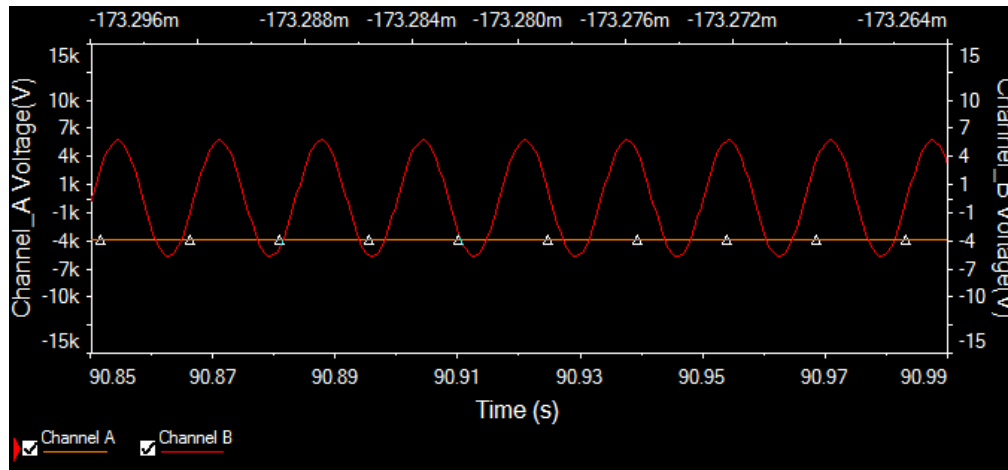


Figura 10. Operación de circuito con fuente externa de DC.

5. PROPUESTA DE UN CIRCUITO DE MEDIA ONDA CON RELES

El rectificador de media onda convierte una señal de corriente alterna en una señal unidireccional. Los diodos son ampliamente utilizados como rectificadores. Un rectificador de media onda es muy práctico, pero no es muy común en la aplicación industrial, pero es muy útil para comprender el funcionamiento de un rectificador. Durante la entrada del ciclo de voltaje positivo medio, el diodo D2 conduce y el voltaje de entrada aparece a través de la carga, en este caso es el condensador de alto voltaje quien se carga, sin embargo, cuando el semiciclo negativo del voltaje de entrada se hace presente, el diodo está en la condición de bloqueo y la tensión de salida es cero como en la Figura 11, en donde observamos unos relevadores que podemos utilizar para descargar el capacitor y así no tener cargas parásitas y controlando el inicio de la descarga en la fuente para controlar el tiempo de descarga [6, 8].

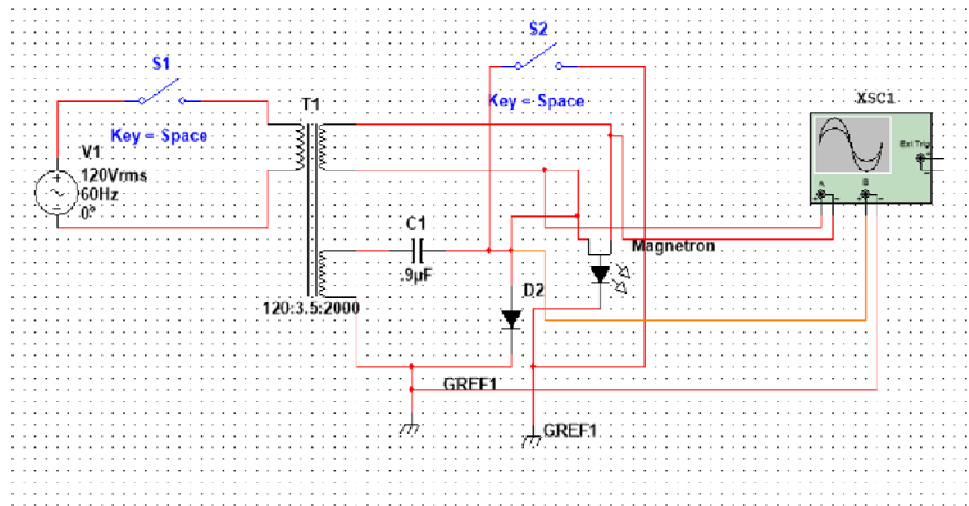


Figura 11. Operación de circuito con fuente externa de DC.

En este caso, los relés ayudan a descargar el condensador y también ayudan a cambiar la fuente de alto voltaje como se muestra en la Figura 12. El circuito de media onda común no puede garantizar la presencia de microondas durante su funcionamiento, ya que a veces no puede sincronizarse con el plasma, en este caso, tendríamos que hacer una secuencia para determinar en cual instante podemos generar la microonda hacia el plasma.

Es necesario sincronizar la generación de microondas con el inicio de las descargas óhmicas. Pero es difícil lograr la sincronización mediante el circuito de operación descrito en la Figura 9, se intentó una modificación del circuito. Alargar el tiempo de funcionamiento del magnetrón.

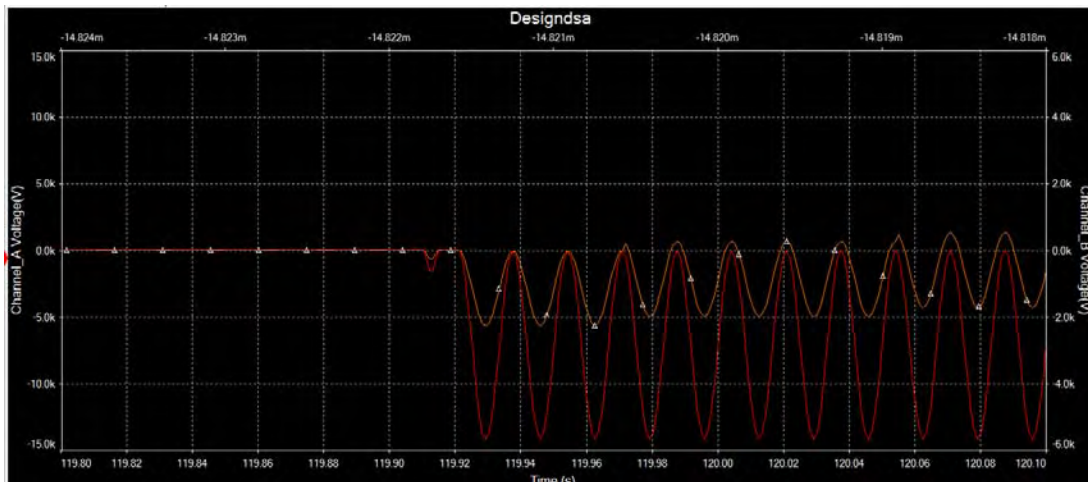


Figura 12. Operación de circuito de media onda con relevadores.

6. SISTEMA DE CONTROL

Blynk es una plataforma con iOS y Android para controlar diferentes microcontroladores por ejemplo: Arduino, Rasberry Pi y Particle Photon (WiFi) entre otros, con placa WiFi.

La plataforma es IoT (Internet of Things) es independiente del hardware con aplicaciones móviles personalizables, nube privada, administración de dispositivos, análisis y aprendizaje automático. Es un laboratorio de instrumentos digital donde se puede modelar una interfaz gráfica para cualquier necesidad de proyectos, simplemente colocándolos en un lugar preferente y soltando los widgets como observamos en la Figura 13. Es muy fácil de interactuar y configurarle, es capaz de soportar el hardware elegido, ya sea un Arduino o Raspberry Pi u otra placa controladora, está vinculada a la Internet a través de Wi-Fi, Ethernet o el modelo ESP8266 [9].

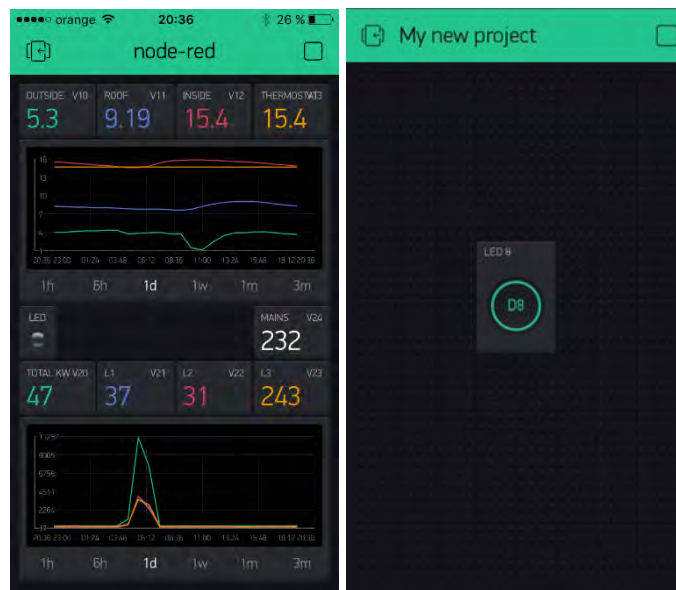


Figura 13: Ejemplo del entorno general de la App Blynk

Existen tres principales componentes en la plataforma:

Blynk Aplicación: Te permite crear tu interfaz para tus proyectos utilizando varios widgets que se proporcionan y pudiendo acomodarlos y conectando a tus necesidades del proyecto por un ejemplo lo veríamos en la Figura 13. El Servidor Blynk: Es responsable de todas las comunicaciones entre el teléfono inteligente y hardware. Puede usar la nube Blynk o ejecutar el servidor. Blynk privada a nivel local: Es de código abierto, podría manejar fácilmente miles de dispositivos e incluso puede ser lanzado en un Raspberry Pi. Blynk Bibliotecas: Permite la comunicación, para todas las plataformas de hardware populares, con el servidor y procesar todos los comandos entrantes y salientes [10].

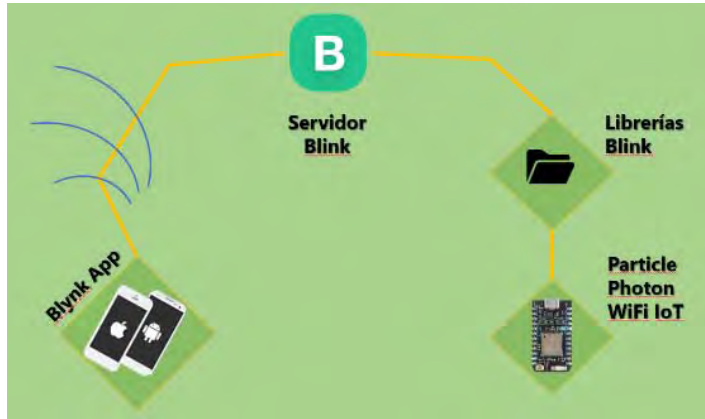


Figura 14: Arquitectura de comunicación de Blynk

El Grupo de Investigación en Fusión vio la oportunidad utilizar este tipo de herramientas para poder desarrollar nuevas herramientas tecnológicas para una visión de la Industria 4.0. A través del control de nuestra fuente de pre-ionización por RF a 2.45 GHz para el Tokamak Esférico: TEA-T.

Nuestro control se compone por un microcontrolador *Particle Photon* donde leerá el sensor de temperatura (LM35) como podemos observarlo en la Figura 15, donde medirá la temperatura emitida por el magnetrón del filamento de tungsteno, aquí estableceremos una temperatura clave para así activar un relevador para dar funcionamiento a un ventilador para la disminución de la temperatura producido por el magnetrón, también podemos observar un sensor de corriente (ACS712-30 A) el cual nos ayuda a tener un muestreo de la corriente inducida hacia el magnetrón y por consiguiente podemos obtener la potencia también suministrada, todo esto hace que el trabajo del microcontrolador sea más sencillo de operar mandando los datos hacia la Blynk app (ver Figura 15, respecto al funcionamiento de cada proceso de trabajo).

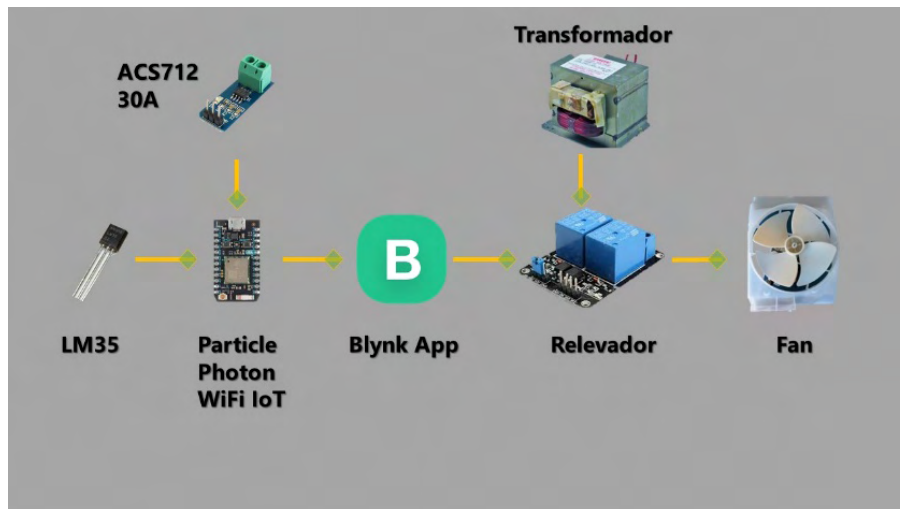


Figura 15: Proceso de trabajo

Podemos observar en el diseño App Blynk del GIF, en donde se nos desplegará una pantalla led, al inicializar nos enviará un mensaje: “HOLA GIF”, en las demás secciones de nuestra aplicación encontraremos varios bloques para los siguientes datos: temperatura, corriente y potencia. Por otra parte, podemos observar tres leds: el primero nos indicará la comunicación del microcontrolador, el segundo led indicará la activación de la prueba al presionar el botón y el tercero, nos indicará que no estará activo, nada en ningún funcionamiento, al finalizar, la pantalla led nos mostrará la terminación de la prueba con los valores que obtuvimos.

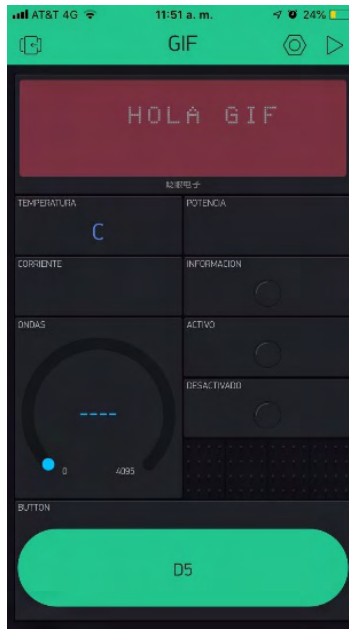


Figura 16: App GIF

7. PROPUESTA DE GUÍA DE ONDA

Existen tres modos de propagación en las guías de onda, el Modo Transversal Electromagnético (TEM), el Modo Transversal Eléctrico (TE) y el Modo Transversal Magnético (TM).

El modo TEM se caracteriza porque los componentes del campo eléctrico y del campo magnético son iguales a cero en la dirección de propagación. En el caso de TE, el componente del campo eléctrico es igual a cero en la dirección de propagación. Y en el modo TM, el campo magnético es igual a cero en la dirección de propagación. La longitud de onda es la distancia de un pico de onda a otro a una frecuencia. Suele asociarse con el espectro electromagnético. Si se conoce la velocidad y la frecuencia de la onda, se puede utilizar la fórmula de longitud de onda básica.

Procederemos a realizar la operación para determinar la longitud de onda de nuestra guía de ondas con la fórmula básica de longitud de onda, tomando como valor la frecuencia entregada por el magnetron **2.45 GHz** y tomamos la velocidad de la luz en el espacio libre como constante $v = cte$.

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{3 \times 10^8}{2.45 \times 10^9} = 0.1224 \text{ m} = 4.82 \text{ in}$$

Una vez que se obtiene la longitud de onda, podemos proceder a la construcción de la guía de onda [11].

8. CONTRUCCION DE LA FUENTE DE RF

A continuación procedemos a mostrar el inicio de la construcción de nuestro sistema de RF, donde (A) es el ventilador de enfriamiento del magnetrón ya mencionado sistema de control y acoplado un sensor de temperatura para controlar dicho factor, (B) el magnetrón de 2.45 GHz, el capacitor de potencia (C), (D) el transformador de entrada de alto voltaje de 110 V donde se acoplará un relevador activando y desactivando la fuente para tener control y así no tener ningún percance y la (E) es la protección del circuito donde se encuentra un fusible por si llegara a ver un accidente. Es necesario ensamblar el circuito con estos elementos para construir la fuente de preconización dada y los circuitos de alimentación propuestos.

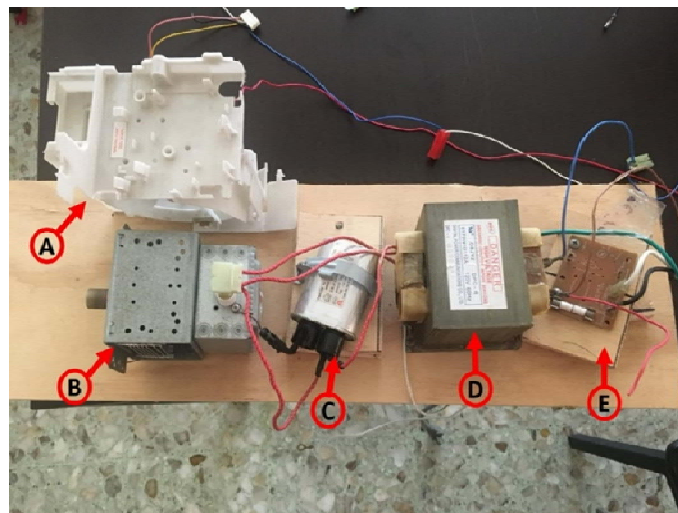


Figura 17. Montaje del transformador de alta tensión y ventilador enfriador.

9. CONCLUSIONES

El presente sistema de calentamiento por radiofrecuencia, ha sido diseñado para el Tokamak Esférico de Apoyo hacia "T", el TEA-T, este sistema será empleado en el Proyecto conjunto que el Grupo de Investigación en Fusión de la UANL (GIF-UANL) tiene con el Departamento de Física de la Universidad Estatal de San Petersburgo (SPbSU) en la Federación Rusa.

Los sistemas de calentamiento por radiofrecuencia son ampliamente usados en fusión por confinamiento magnético para pre-ionizar, calentar y eliminar las islas magnéticas en un plasma. Este pequeño sistema involucra aspectos de Física e Ingeniería los cuales se pueden proyectar en

una forma más compleja sobre un sistema acelerador, de esto se podrá apreciar en el artículo de un sistema de calentamiento Girotrón de 60 GHz que se presenta en esta misma conferencia.

En este trabajo se realizó una fuente de pre-ionización donde a futuro se implementará un detector de RF y también se acoplará un sensor de temperatura para la activación del enfriamiento del magnetrón aplicado todo ello en el TEA-T.

AGRADECIMIENTOS

El Grupo de Investigación en Fusión agradece al programa PRODEP (anteriormente PROMEP) por la financiación del proyecto de Fusión (UANL-EXB-156).

REFERENCIAS

1. Hussain, S.; Vorobyov, G.M.; "First Plasma formation in Glass Spherical Tokamak" (GLAST).
2. Ahmad, Z.; Ahmad, S.; Naveed, M.A.; Deeba, F.; Javeed, M.A.; Batool, S.; Hussain, S.; Vorobyov, G.M. "Optimization of magnetic field system for glass spherical Tokamak GLAST III", *Physica Scripta* 92 (2017) 045601 (8pp).
3. L.A. Artsimovich, "Electronic Thermal Conductivity in a Toroidal Plasma Loop", *ZhETF Pis. Red.* 13, No.2, 101-105, 20 January 1971.
4. Yu. V. Gott, "On Artsimovich's Formula", *Plasma Physics Reports*, 2007, **Vol.33**, No.10, p.880, ISSN 1063-780X.
5. L.A. Artsimovich, A.V. Glukhov, M.P. Petrov, "Ion Energy Balance in the Plasma of a Tokamak Machine", *ZhETF Pis. Red.* 11, No.9, 449-452, 5 May 1970.
6. Muhammad H. Rashid, *Electrónica de Potencia, Circuitos, dispositivos y aplicaciones*. Editorial Pearson Prentice Hall, ISBN 970-26-0532-6, tercera edición, año 2004
7. W. Choe, Gi-Chung Kwon, Junghee Kim, Jayhyun Kim, Sang-Jean Jeon, and SongwheHuh, "Simple microwave preionization source for ohmic plasmas", **Vol. 71**, Num. 79, July 2000.
8. Khan, R.; Nazir, M.; Ali, A.; Hussain, S.; Vorobyov, G.M. "Development of microwave preionization source for GLAST Tokamak", *Fusion Engineering and Design*, 126 (2018) 10-14
9. Hiral S. Doshid ,Minesh S. Shah, Umair S A. Shaikh "Internet of things (iot): Integration of Blynk for Domestic Usability" **Vol. 1** Issue 4, December 2017 ISSN: 2456-8465
10. Kiran J. S. And Divneet S. K., "Create You Own Internet of Things," *IEEE Consumer Electronics Magazine*, pp. 57-68, 2017.
11. J. Ángel Menéndez, Ángel H. Moreno, *Aplicaciones industriales del calentamiento con energía microondas*, Editorial Universidad Técnica de Cotopaxi, ISBN Electrónico 978-9978-395-34-9 Primera Edición, 2017.
12. J. E. Eirez, F. Rodríguez, S Pavoni , "Diseño de una Fuente de Alto Voltaje", *RIELAC*, **Vol.XXXIV** 3/2013 p.22-31 Septiembre - Diciembre ISSN: 1815-5928

