



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Análisis neutrónico de un reactor nuclear de gas de
alta temperatura para la producción de hidrógeno

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
INGENIERO ELÉCTRICO ELECTRÓNICO
PRESENTA:
GUILLERMO ELÍAS BASTIDA ORTIZ

DIRECTOR DE TESIS:
DR. JUAN LUIS FRANÇOIS LACOUTURE



2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Carlos Chávez Mercado
Vocal: Dr. Juan Luis François Lacouture
Secretario: Dra. Cecilia Martín del Campo Márquez
1^{er}. Suplente: M. Edgar Salazar Salazar
2^o. Suplente: Ing. Alberto Cortez Mondragón

Facultad de Ingeniería, UNAM.

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Juan Luis François Lacouture

FIRMA

Agradecimientos:

Gracias a mi mamá, sin su ayuda y cariño no hubiera logrado llegar hasta aquí. A mi abuelita, quién hasta sus últimos días mostró su apoyo y deseo de continuar con mis estudios, su recuerdo e infinito amor nunca ha dejado de brillar y motivar, ni siquiera en los momentos difíciles.

Gracias a la Dra. Cecilia Martín del Campo por haberme despertado el interés en el tema de los sistemas energéticos. Al Dr. Carlos Chávez Mercado, porque sus conocimientos y pasión por el tema de la energía nuclear me incitaron a seguir ese camino. Al M. Edgar Salazar Salazar por los conocimientos proporcionados y reafirmar mi decisión de seguir este rumbo. Al Ing. Alberto Cortez Mondragón por haber aceptado la invitación a esta tesis. Y sobretodo al Dr. Juan Luis François Lacouture, su tiempo, apoyo, confianza, paciencia y capacidad para orientarme, son la causa principal de la elaboración de esta tesis, sin él, nada de esto hubiera sido posible. Y en conjunto, a los cinco por las aportaciones y correcciones proporcionadas para este trabajo.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México y en especial a la Facultad de Ingeniería por permitirme ser parte de ella, por la educación que me brindó y por hacerme sentir tan cómodo en todo momento durante mi estancia.

Agradezco la beca que recibí por parte de la UNAM-DGAPA, por mi participación en los proyectos: PAPIIT IN106310 (2012) Producción de hidrógeno a partir del calor producido por reactores nucleares de alta temperatura y PAPIIT IN113213 (2013) Estudio y diseño de reactores avanzados de fisión nuclear e híbridos fusión-fisión.

Gracias a René, Sergio, Héctor, Carlos, Edith, Mario, Pedro y Amhed, por su compañía y ayuda, cada uno en su momento.

Y por último, pero no menos importante, agradezco a todos mis profesores y compañeros, cuyas enseñanzas abrieron mi visión, de lo que me gusta, me importa, considero correcto y de lo que no, a todos ellos, gracias.

Índice

Índice de Tablas	vi
Índice de Figuras	vii
Tabla de Acrónimos	ix
INTRODUCCIÓN.....	10
CAPÍTULO 1	13
El Hidrógeno	13
1.1 Características generales.....	13
1.1.1 Aplicaciones del Hidrógeno	15
1.1.2 Aspectos de Seguridad.....	16
1.2 Métodos de obtención del hidrógeno	17
1.2.1 Electrólisis de alta temperatura.....	21
1.2.2 Electrólisis de vapor a alta temperatura.....	21
1.2.3 Ciclos termoquímicos	23
1.2.4 Familia del azufre	25
1.2.4.1 <i>Ciclo I-S (Yodo-Azufre)</i>	25
1.2.5 <i>Ciclo del sulfato</i>	28
1.2.6 Ciclos termoquímicos híbridos.....	29
1.2.6.1 <i>Ciclo ácido sulfúrico-bromo</i>	29
1.2.6.2 <i>Ciclo híbrido de Azufre (S-hybrid) o Westinghouse</i>	30
1.2.6.3 <i>Ciclo metal-metal hidruro</i>	31
1.2.6.4 <i>Ciclo cobre-cloro</i>	31
1.2.7 Familia de los óxidos.....	32
1.2.8 Familia de los haluros.....	32
1.2.8.1 <i>Ciclo hierro-cloro</i>	33
1.2.8.2 <i>Ciclo hierro-bromo-calcio</i>	34
CAPÍTULO 2	37
LA ENERGÍA NUCLEAR	37
2.1 La energía nuclear en la actualidad	37
2.2 Fundamentos de energía nuclear	39
2.2.1 Partículas fundamentales	40
2.2.2 Conceptos básicos de la energía nuclear	41
2.3.1 Centrales nucleares de fisión	45

2.3.2 Tipos de reactores para producir hidrógeno	48
2.3.2.2 Reactor rápido refrigerado con gas (GFR) '	53
2.3.2.3 Reactor rápido refrigerado con sodio (SFR) '	56
2.4 Fusión nuclear	59
2.4.1 Confinamiento	61
2.4.2 Evolución histórica y proyectos futuros	62
2.4.3 Ventajas de la fusión nuclear.....	64
2.4.4 El proyecto de fusión nuclear por confinamiento magnético: el ITER	65
2.4.4 .1 Emplazamiento del ITER	66
CAPÍTULO 3	67
Metodología.....	67
3.1 Cálculo de transporte de neutrones,	67
3.1.1 La ecuación del transporte de neutrones	68
3.1.2 La teoría de difusión.....	69
3.1.3 Métodos de cálculo y estado del arte.....	72
3.2 Códigos Deterministas.....	72
3.3 Datos nucleares evaluados,	73
3.4 Método Monte Carlo	76
3.5 Código SERPENT	79
Capítulo 4	82
SIMULACIÓN DE MODELOS	82
4.1 Validación.....	82
4.2 Simulaciones con quemado de combustible.....	85
4.2.1 Factor de multiplicación de neutrones.....	85
4.2.2 Densidades atómicas.....	88
4.2.3 Distribución de potencia.....	93
4.3 Casos de estudio	95
Conclusiones.....	110
Referencias	112

Índice de Tablas

Tabla 1.1 Características del hidrógeno	14
Tabla 2.1 Reactores en operación	38
Tabla 2.2 Características físicas de las partículas fundamentales.....	41
Tabla 2.3. Reactores de Generación IV.....	49
Tabla 2.4. Características principales de los diseños de reactores de generación IV.....	58
Tabla 4.1 Características de los materiales del combustible utilizados en el modelo SFR (SERPENT).....	85
Tabla 4.2 Valores de K_{inf} para el reactor rápido refrigerado por sodio, simulado en MCNPX y SERPENT (SFR20 y SFR30)	86
Tabla 4.3 Distribución de los materiales para los distintos modelos de SFR.....	95
Tabla 4.4 Composición del combustible y refrigerante utilizados en los modelos de SFR...	96
Tabla 4.5 Composición y distribución de los materiales utilizados en el ensamble del combustible para los casos GFR, GFR2, SFR y SFR22.....	101
Tabla 4.6 K_{inf} en función de los pasos de quemado, modelo de ensamble de combustible en medio infinito.....	101
Tabla 4.7 Características físicas del ensamble de combustible del modelo HTGR.....	106
Tabla 4.8 Composición del combustible para los diferentes reactores.....	107

Índice de Figuras

Figura 1. 1 Esquema del ciclo I-S acoplado a un VHTR	27
Figura 1. 2 Esquema de la parte del circuito secundario y el ciclo IS.....	28
Figura 1. 3 Diagrama de flujo del proceso UT-3 adiabático.	36
Figura 2. 1 Esquema del reactor VHTR	51
Figura 2. 2 Elemento de combustible TRISO	52
Figura 2. 3 Proceso de transmutación de los isótopos fértiles U238 y Th232	55
Figura 2. 4 Esquema del reactor GFR	56
Figura 2. 5 Esquema del reactor SFR.....	58
Figura 2. 6 El Sol es un ejemplo de la fusión nuclear.	59
Figura 3. 1 Partícula en volumen infinitesimal d^3r , moviéndose en la dirección positiva del eje x. La energía de la partícula se encuentra en intervalo dE alrededor de un valor E dado.	69
Figura 3. 2 Diagrama del proceso de creación y validación de los datos nucleares evaluados	75
Figura 3. 3 Reacción de dispersión elástica de un neutrón recorriendo una longitud dx en un medio.	78
Figura 4. 1 Descripción geométrica del modelo SFR (SERPENT).....	83
Figura 4. 2 Celda básica del combustible del modelo SFR.	83
Figura 4. 3 Comparación de los valores de K_{inf} para MCNPX y SERPENT (SFR20 y SFR30).....	86
Figura 4. 4 Variación de la densidad atómica del U235 en función del quemado del quemado del combustible.	89
Figura 4. 5 Variación de la densidad atómica del U238 en función del quemado del quemado del combustible.	90
Figura 4. 6 Variación de la densidad atómica del Np239 en función del quemado del quemado del combustible.	90
Figura 4. 7 Variación de la densidad atómica del Pu239 en función del quemado del quemado del combustible.	91
Figura 4. 8 Variación de la densidad atómica del Pu241 en función del quemado del quemado del combustible.	91
Figura 4. 9 Variación de la densidad atómica del Xe135 en función del quemado del quemado del combustible.	92
Figura 4. 10 Variación de la densidad atómica del Cs137 en función del quemado del quemado del combustible.	92
Figura 4. 11 Variación de la densidad atómica del Sm-147 en función del quemado del quemado del combustible.	93
Figura 4. 12 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo SFR, en el plano XY.....	94
Figura 4. 13 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo SFR. ...	95

Figura 4. 14 Comparación de K_{inf} en función de los pasos de quemado para los distintos modelos de SFR.....	97
Figura 4. 15 Gráfica comparativa del espectro de neutrones en el reactor correspondiente a cada modelo SFR.....	98
Figura 4. 16 Descripción geométrica del modelo y celda básica del combustible para el modelo GFR (SERPENT).	100
Figura 4. 17 K_{inf} en función de los pasos de quemado para los modelos GFR y GFR2 ...	102
Figura 4. 18 K_{inf} en función de los pasos de quemado para los modelos SFR y SFR22 ..	102
Figura 4. 19 K_{inf} en función de los pasos de quemado para los modelos GFR y SFR22..	103
Figura 4. 20 K_{inf} en función de los pasos de quemado para los modelos SFR y GFR2....	103
Figura 4. 21 Gráfica comparativa del espectro de neutrones en el reactor correspondiente a los conceptos SFR22 y GFR2.....	104
Figura 4. 24 Descripción geométrica del modelo y celdas básicas del combustible para el modelo HTGR (SERPENT).	105
Figura 4. 22 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo GFR, en el plano XY.....	105
Figura 4. 23 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo GFR..	105
Figura 4. 25 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo HTGR, en el plano XY.....	106
Figura 4. 26 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo HTGR.	107
Figura 4. 27 Comparación de K_{inf} en función de los pasos de quemado de los reactores SRF, GFR y HTGR.	108
Figura 4. 28 Espectro de neutrones en el reactor correspondientes a los conceptos SFR, GFR y HTGR.	109

Tabla de Acrónimos

AECL	Atomic Energy of Canada Limited
GFR	Gas-Cooled Fast Reactor
GIF	Generation IV International Forum
GTMHR	Gas Turbine Modular Helium Reactor
HTES	High Temperature Electrolysis of Steam
HYTREC	Hydrogen Thermochemical Cycles
IAEA	International Atomic Energy Agency
ITER	International Thermonuclear Experimental Reactor
LFR	Lead-Cooled Fast Reactor
MCNPX	Monte Carlo N-Particle eXtended
MSR	Molten Salt Reactor
OCDE	Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos
PBMR	Pebble Bed Modular Reactor
PRIS	Power Reactor Information System
RCCS	Reactor Cavity Cooling System
RWTH	Rheinisch Westfaelische Technische Hochschule
SCWR	Supercritical Water Cooled Reactor
SFR	Sodium-Cooled Fast Reactor
TOKAMAK	Toroidal Kamera Magnetik
UT-3	University of Tokyo 3
VHTR	Very High Temperature Reactor

INTRODUCCIÓN

La necesidad de disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero, la disminución de reservas de combustibles fósiles y su inequitativa distribución geográfica, y el garantizar el suministro de energía eléctrica, son aspectos de suma importancia para la estabilidad sociopolítica y económica de cualquier país. Ante tales situaciones es necesario encontrar tecnologías y fuentes de energía alternativas, las cuales deben ser más eficientes y respetuosas con el ambiente, además de cumplir con aspectos económicos razonables.

La diversidad en las formas de producción de energía parece ser la mejor opción a dicho desafío. Actualmente, las tecnologías que se están desarrollando toman en cuenta los criterios de sostenibilidad para proveer energía eléctrica a precios competitivos sin suponer daños insostenibles al equilibrio ambiental.

El desarrollo de fuentes de energía renovables y limpias es esencial para asegurar una perspectiva de energía estable para generaciones futuras, en donde, posiblemente, los combustibles fósiles dejen de ser quemados y sean utilizados en otros ámbitos como la petroquímica, la alimentación y la medicina. La tecnología nuclear, de los diseños de la llamada Generación IV¹, parece ser la más adecuada para responder de manera muy positiva a esta necesidad, en virtud del concepto singular de seguridad que se ha desarrollado, la simplicidad de su diseño y las amplias posibilidades de aplicación que se prevén.

También son especialmente importantes aquellos diseños que tratan de ampliar el espectro de sus aplicaciones más allá de la producción eléctrica, permitiendo aumentar más aún el aprovechamiento energético. Ejemplos de ello serían la desalación de agua de mar, la generación de calor para su uso en diferentes procesos o la producción de hidrógeno.

¹ <http://www.gen-4.org/>

Por Generación IV se engloba a toda una serie de proyectos, programas e iniciativas para el desarrollo y prueba de varios sistemas nucleares, utilizables comercialmente hacia 2030 y que ofrecen ventajas en los campos de sostenibilidad, economía, seguridad, y fiabilidad, no proliferación y protección física. Además de la generación de energía eléctrica directa en centrales, es aplicable a otros campos como la generación de hidrógeno o grandes sistemas de transporte.

Uno de los retos más ambiciosos de este proyecto es el de sostenibilidad, basado en la disminución o eliminación de los residuos radiactivos, mediante el uso de reactores rápidos, técnicas de transmutación y la utilización más eficiente del combustible. En cuanto a los aspectos económicos, se espera aumentar la vida de estas centrales a 60 años, con lo que se consiguen costos competitivos, y el aumento de los sistemas de seguridad pretende alcanzar niveles de riesgos financieros comparables a otros proyectos energéticos.

Los principales reactores que se están estudiando en este contexto son los siguientes:

SFR: reactor rápido refrigerado por sodio

LFR: reactor rápido refrigerado por aleaciones de plomo

GFR: reactor rápido refrigerado por gas.

SCWR: reactor refrigerado por agua supercrítica

MSR: reactor de sales fundidas

VHTR: reactor de muy alta temperatura

En el capítulo 2 se hablará un poco más de estos reactores.

En este trabajo se hará un análisis neutrónico del combustible de algunos de los reactores nucleares de alta temperatura, estudiando sus principales características, además de algunas alternativas de combustible compuesto por uranio y plutonio. Para el estudio de dichas características es necesario el uso de un código capaz de realizar un cálculo confiable de los principales parámetros del combustible.

El uso del método de Monte Carlo es conveniente para simular el transporte de neutrones en el núcleo del reactor, el cual es la base del código SERPENT², con el que se harán los cálculos para el análisis.

El presente documento está dividido en 5 capítulos, destinados a describir, lo más detalladamente posible, el estudio neutrónico de los reactores de alta temperatura seleccionados para la producción de hidrógeno; en donde en el capítulo 1 se describen las principales características, aplicaciones y métodos de producción del hidrógeno.

En el capítulo 2 se mencionan los fundamentos de energía nuclear y los tipos de reactores nucleares capaces de producir hidrógeno.

El capítulo 3 presenta una descripción del código SERPENT y del método de Monte Carlo.

En el capítulo 4 se incluyen las consideraciones y datos de entrada para la simulación de los reactores de alta temperatura estudiados, y un reactor térmico, así como los resultados obtenidos. El trabajo finaliza con un quinto capítulo que muestra un análisis de los resultados obtenidos y las conclusiones más importantes obtenidas en el desarrollo de dicho trabajo.

² Serpent. *a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code.*
<http://montecarlo.vtt.fi/>

CAPÍTULO 1

El Hidrógeno

1.1 Características generales³

El hidrógeno (en condiciones normales de presión y temperatura) es un gas diatómico (H₂) incoloro, inodoro, insípido, no metálico y altamente inflamable. Se representa con el símbolo ¹H y tiene un peso atómico de 1.00794. El hidrógeno es el elemento más ligero y abundante, no sólo en la Tierra, sino en todo el universo, constituyendo aproximadamente el 73.9% de la materia del universo. Existen tres isótopos del hidrógeno: el protio, tiene un solo protón y ningún neutrón, y se encuentra en más del 99.98% del elemento natural; el deuterio, con un protón y un neutrón, se encuentra en la naturaleza aproximadamente en un 0.02%, y el tritio, que tiene un protón y dos neutrones, y aparece en pequeñas cantidades en la naturaleza, pero puede producirse artificialmente por medio de varias reacciones nucleares.

En su ciclo principal, las estrellas están compuestas por hidrógeno en fase de plasma. El hidrógeno elemental es muy escaso en la Tierra, como hidrógeno libre se le puede hallar en las emisiones volcánicas, ya que en los gases volcánicos se encuentra hasta 30% en volumen y en la estructura de ciertas rocas, pero como elemento químicamente combinado se halla presente en el agua formando el 11% en peso, en toda materia orgánica, en el gas natural, el petróleo y el carbón. A continuación, se presentan las principales características del hidrógeno:

³<http://www.redhidrogenocyted.com.ar/esp/upload/Publicaciones/La%20energia%20del%20hidrogeno.pdf>

Tabla 1.1 Características del hidrógeno³

Hidrógeno

Símbolo químico	H
Número atómico	1
Grupo	1
Periodo	1
Aspecto	incoloro
Bloque	s
Densidad	0.0899 kg/m ³
Radio medio	25 pm
Radio atómico	53
Radio covalente	37 pm
Radio de van der Waals	120 pm
Configuración electrónica	1s ¹
Electrones por capa	1
Estados de oxidación	1, -1
Estructura cristalina	hexagonal
Estado	gaseoso
Punto de fusión	14.025 K
Punto de ebullición	20.268 K
Punto de inflamabilidad	255 K
Calor de fusión	0.05868 kJ/mol
Presión de vapor	209 Pa a 23 K
Temperatura crítica	23.97 K
Presión crítica	1.293x10 ⁶ Pa
Volumen molar	22.42x10 ⁻³ m ³ /mol
Electronegatividad	2,2
Calor específico	1.4304x10 ⁴ J/(K·kg)
Conductividad eléctrica	- S/m
Conductividad térmica	0.1815 W/(K·m)

1.1.1 Aplicaciones del Hidrógeno

Algunos usos del hidrógeno son:

- Para el procesamiento combustibles fósiles.
- Para producir amoníaco utilizado en los productos comunes de limpieza del hogar.
- El hidrógeno se utiliza como un agente hidrogenante para producir metanol y convertir aceites y grasas no saturadas en aceites y grasas saturadas.
- El punto triple del hidrógeno (la temperatura a la que las 3 fases, sólida, líquida y gaseosa están en equilibrio) puede utilizarse para calibrar algunos termómetros.
- El tritio, el isótopo radioactivo de hidrógeno, se produce en las reacciones nucleares. Se puede utilizar para fabricar bombas de hidrógeno y actúa como una fuente de radiación en pinturas luminosas. En las ciencias biológicas, el tritio se utiliza a veces como un marcador isotópico.
- Se utiliza para detectar fugas en los envases de alimentos.
- Se utiliza como refrigerante del rotor en generadores eléctricos.
- El hidrógeno en estado gaseoso se usa como un gas de protección en la soldadura de hidrógeno atómico.
- También se usa en la producción de ácido clorhídrico, utilizado ampliamente en las industrias químicas.
- El gas de hidrógeno se utiliza para reducir muchos minerales metálicos.
- Puede ser utilizado para crear agua.

El empleo más importante del hidrógeno es en la síntesis del amoníaco. La utilización del hidrógeno está aumentando con rapidez en las operaciones de refinación del petróleo, como el rompimiento por hidrógeno (*hydrocracking*), y en el tratamiento con hidrógeno para eliminar azufre. Se consumen grandes cantidades de hidrógeno en la hidrogenación catalítica de aceites vegetales líquidos insaturados para obtener grasas sólidas. La hidrogenación se utiliza en la manufactura de productos químicos

orgánicos. Grandes cantidades de hidrógeno se emplean como combustible de cohetes, en combinación con oxígeno o flúor, y como un propulsor de cohetes impulsados por energía nuclear.

1.1.2 Aspectos de Seguridad

El hidrógeno es la sustancia más inflamable de todas las que se conocen, es un poco más soluble en disolventes orgánicos que en el agua. Muchos metales absorben hidrógeno, su adsorción en el acero puede volverlo quebradizo, lo que lleva a fallas en el equipo para procesos químicos.

A temperaturas ordinarias, el hidrógeno es una sustancia poco reactiva, a menos que haya sido activado de alguna manera; por ejemplo, por un catalizador adecuado. A temperaturas elevadas es muy reactivo.

Aunque por lo general es diatómico, el hidrógeno molecular se disocia a temperaturas elevadas en átomos libres. El hidrógeno atómico es un agente reductor poderoso, aun a la temperatura ambiente. Reacciona con los óxidos y los cloruros de muchos metales, entre ellos la plata, el cobre, el plomo, el bismuto y el mercurio, para producir los metales libres. Reduce a su estado metálico algunas sales, como los nitratos, nitritos y cianuros de sodio y potasio. Reacciona con cierto número de elementos, tanto metales como no metales, para producir hidruros, como el NaH, KH, H₂S y PH₃. El hidrógeno atómico produce, con oxígeno, peróxido de hidrógeno: H₂O₂. Con compuestos orgánicos, el hidrógeno atómico reacciona para generar una mezcla compleja de productos; con etileno, C₂H₄, por ejemplo, los productos son: etano, C₂H₆, y butano, C₄H₁₀. El calor que se libera cuando los átomos de hidrógeno se recombinan para formar las moléculas de hidrógeno, se aprovecha para obtener temperaturas muy elevadas en soldadura de hidrógeno atómico.

El hidrógeno reacciona con oxígeno para formar agua, y esta reacción es extraordinariamente lenta a temperatura ambiente; pero si la acelera un catalizador,

como el platino, o una chispa eléctrica, se realiza con violencia explosiva. Con nitrógeno, el hidrógeno experimenta una importante reacción para dar amoníaco. El hidrógeno reacciona a temperaturas elevadas con cierto número de metales y produce hidruros. Los óxidos de muchos metales son reducidos por el hidrógeno a temperaturas elevadas para obtener el metal libre o un óxido más bajo. El hidrógeno reacciona a temperatura ambiente con las sales de los metales menos electropositivos y los reduce a su estado metálico. En presencia de un catalizador adecuado, el hidrógeno reacciona con compuestos orgánicos no saturados, adicionándose al enlace doble⁴.

1.2 Métodos de obtención del hidrógeno⁵

El método de obtención de hidrógeno será una decisión crítica en la apuesta por un modelo energético sostenible. Las tecnologías y procesos de producción del hidrógeno se pueden clasificar en:

- Reformado
- Pirólisis
- Gasificación
- Termólisis
- Electrólisis
- Fermentación
- Fotólisis

Reformado: es el procedimiento más usado actualmente, aproximadamente el 95% de la producción mundial. En este proceso el metano, a partir de gas natural, reacciona con vapor de agua (reformado con vapor de agua) ó con oxígeno

⁴ <http://www.lenntech.es/periodica/elementos/h.htm>.

⁵ LÓPEZ, Natalia, *Usos de la electricidad para la obtención de hidrógeno a través de la electrólisis de agua*. Bachiller en Ingeniería Eléctrica, Universidad de Costa Rica, 2006.

(reformado por oxidación parcial) o mediante una combinación de ambos (reformado auto-térmico). En cualquiera de estos procesos el CO₂ aparece como uno de sus subproductos.

Pirólisis: consiste en la descomposición controlada de carbón o biomasa mediante la acción de calor en ausencia de oxígeno para generar gas de síntesis rico en hidrógeno.

Gasificación: consiste en una combustión de carbón o biomasa pobre en oxígeno, cuya posterior manipulación consigue generar hidrógeno de gran pureza.

Termólisis: proceso en el que el calor de una fuente externa (como por ejemplo: la energía solar) es capaz de extraer el hidrógeno de una molécula.

Electrolisis: proceso en el que se usa la corriente eléctrica para romper la molécula de agua y disociar el hidrógeno y el oxígeno que contiene.

Fermentación: consiste en la producción de hidrógeno mediante la producción de etanol (fermentación alcohólica) o biogás (fermentación anaerobia) a partir de biomasa.

Fotólisis: procedimiento de carácter experimental que emplea la luz solar usando organismos (procesos foto-biológicos) o semiconductores de diseño específico (procesos foto-electroquímicos) para la producción de hidrógeno.

Del análisis del estado actual de las tecnologías de producción anteriores, sus costos y desarrollo, se deduce que, a corto plazo, el hidrógeno se seguirá produciendo a partir de fuentes energéticas fósiles; si bien tras un periodo de transición, a mediano plazo, en el que las tecnologías alternativas vayan alcanzando una cierta madurez, su producción se basará masivamente en el empleo de fuentes renovables y la nuclear, lo que contribuirá a un modelo energéticamente sostenible.

A largo plazo, los expertos coinciden en que la producción de hidrógeno a partir de la energía solar y nuclear se vislumbra como unas de las tecnologías más prometedoras en la producción de hidrógeno.

Hoy en día, el método más rentable para producir la molécula de di-hidrógeno es el reformado con vapor del metano que consiste en la siguiente reacción:



Como se puede constatar, esta técnica consume metano, un combustible fósil, y produce CO₂, un gas con efecto invernadero, lo que es contrario a los criterios de “desarrollo sostenible”.

Los procesos más estudiados y convenientes para la producción de hidrógeno a partir de energía nuclear son:

- Electrolisis de alta temperatura (emplea electricidad de origen nuclear y vapor generado por aprovechamiento del exceso de calor que porta el helio con el que se enfría el reactor)
- Ciclos termoquímicos. Uso de calor nuclear para la ruptura de la molécula de agua mediante series de reacciones a alta temperatura.
- Ciclos híbridos, que combina electrolisis y calor de origen nuclear.
- Reformado de hidrocarburos con calor de origen nuclear.

Los procesos aprovechan el calor generado por los reactores para producir hidrógeno. Una de las ventajas de utilizar energía nuclear para este fin, es que durante la generación de energía no se emiten gases de efecto invernadero, a excepción del reformado de hidrocarburos con calor de origen nuclear. Además, se pueden producir hidrógeno y electricidad en forma simultánea, lo que permite desplazar la producción hacia el producto deseado dependiendo de las necesidades del mercado.

El Departamento de Energía de Estados Unidos (DOE) tiene un programa llamado *Nuclear Hydrogen Initiative* (NHI), cuyo objetivo es demostrar la producción a escala comercial de hidrógeno utilizando energía nuclear, para el año 2017⁶.

En España entre los años 2004 y 2007, la empresa de ingeniería Empresarios Agrupados desarrolló el proyecto HYTHEC (*Hydrogen Thermochemical Cycles*), cuyo objetivo fue evaluar los procesos termoquímicos considerados más adecuados para la producción de hidrógeno según dos variables cuantitativas fundamentales: costo de producción y eficiencia térmica⁷.

Los ciclos seleccionados por su mayor eficiencia y menor costo fueron el ciclo yodo-azufre (I-S) y el ciclo híbrido de azufre (S-H), los cuales se analizaron y optimizaron paralelamente. El estudio se realizó sobre el acoplamiento de los ciclos a un reactor VHTR (*Very High Temperature Reactor*, por sus siglas en inglés) y los resultados obtenidos fueron 110 toneladas de hidrógeno por día para el ciclo I-S y 98 toneladas de hidrógeno por día para el S-H, con un costo estimativo de entre 3 y 5 euro/kg de H₂ producido.

Como una continuación del proyecto HYTHEC, surgió el proyecto HyCycles (*Materials and components for Hydrogen production by sulfur based thermochemical Cycles*), que tiene como objetivo la elaboración de materiales y componentes para los ciclos termoquímicos a base de azufre⁷.

El uso eficiente de energía es un factor importante para cualquier plan enfocado en satisfacer la demanda creciente. Por lo tanto, es necesario evaluar las tecnologías de producción de hidrógeno nuclear en términos de su eficiencia energética en la fase de generación. La eficiencia global para el uso de la energía nuclear en la producción de

⁶ *Nuclear Hydrogen R&D Plan*. DOE, March 2004.

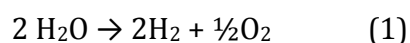
http://www.hydrogen.energy.gov/pdfs/nuclear_energy_h2_plan.pdf

⁷ MARTINEZ S, ORDEN A, ROEB M, LE DUIGOU A, DECHELOTTE S, CERRI G, Aplicaciones de la energía nuclear para la generación de hidrógeno. Conclusiones proyecto HYTHEC. 34^o Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española, Murcia 2008. http://www.empre.es/OE_Autores.pdf

hidrógeno depende de la temperatura de operación, la eficiencia de conversión del proceso y la complejidad del sistema. La elección general dependerá del costo del proceso, lo que se traduce en costo de los equipos.

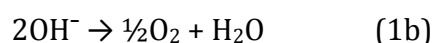
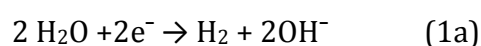
1.2.1 Electrólisis de alta temperatura⁸

La electrólisis es un proceso que utiliza electricidad para separar un compuesto en los elementos que lo conforman. En el caso de producción de hidrógeno, se utiliza la electrólisis del agua.



La descomposición del agua no se produce de forma espontánea ($\Delta G > 0$), por lo tanto para producir la ruptura de la molécula es necesario aplicar energía (energía eléctrica en el caso de la electrólisis).

El proceso de electrólisis se lleva a cabo en reactores, llamados celdas electrolíticas, en los cuales la reacción (1) se lleva a cabo en dos semireacciones.



1.2.2 Electrólisis de vapor a alta temperatura⁸

Una tecnología a gran escala en la producción de hidrógeno, que se encuentra aún en desarrollo, es la electrólisis de vapor a alta temperatura (high-temperature

⁸ MARTÍNEZ, P. E. y PASQUEVICH, D. M. Estudio de los ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno nuclear, Instituto de Energía y Desarrollo Sustentable, Comisión Nacional de Energía Atómica

electrolysis of steam HTES). Un factor a considerar son los recientes desarrollos de aplicar energías alternativas a la electrólisis del agua, como la fotovoltaica, la nuclear o la eólica en el suministro de la electricidad utilizada en el método de producción.

La tecnología HTES, en combinación con energía térmica y electricidad, se utiliza para separar el agua en una celda electrolítica de óxido sólido. La operación a alta temperatura produce un mejor desempeño, debido a la disminución de la sobrepotencialización del electrodo y al incremento en la difusión del ion de oxígeno. Desde un punto de vista termodinámico, la energía eléctrica demandada por la electrólisis disminuye con la temperatura. Sin embargo, para la producción de hidrógeno a gran escala, las temperaturas de operación probablemente estarán limitadas en un rango de 800-850 [°C], incluso con el acoplamiento de un reactor avanzado de alta temperatura.

La celda electrolítica consiste de un electrolito de óxido-sólido, con electrodos porosos eléctricamente conectados y colocados en ambos lados del electrolito. Una mezcla de vapor de agua e hidrógeno a una temperatura de 750-950 [°C] es suministrada al cátodo del electrolito. Los iones de oxígeno son arrastrados a través del electrolito por medio de un potencial electroquímico, liberando sus electrones y recombinándose para formar la molécula de oxígeno (O₂) en el ánodo. La mezcla de gases a la entrada contiene: 90% de vapor de agua y 10% de hidrógeno, y a la salida contiene: 90% de hidrógeno y 10% de vapor de agua. La mezcla de vapor de agua y de hidrógeno obtenida, se pasa posteriormente a un separador de membrana para purificar el hidrógeno.

La separación del agua mediante la electrólisis a alta temperatura, a partir de procesos nucleares de calor y electricidad, tienen la capacidad de producir hidrógeno (H₂) con un sistema de eficiencia global cercano a los procesos termoquímicos y de hidrocarburos, pero sin las condiciones corrosivas de los proceso termoquímicos, el

consumo de combustibles fósiles y sin las emisiones de gases de efecto invernadero asociados a los procesos con hidrocarburos.

Específicamente, un reactor nuclear avanzado de alta temperatura, acoplado a un electrolizador de alta temperatura, puede alcanzar una eficiencia de conversión térmica a hidrógeno del orden de 45% a 50%.

1.2.3 Ciclos termoquímicos⁸

Los ciclos termoquímicos son procesos que permiten obtener hidrógeno y oxígeno mediante reacciones conducidas térmicamente, que producen la descomposición de la molécula de agua. Como su nombre lo indica, los componentes químicos que participan (a excepción del agua) se regeneran.

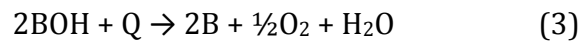
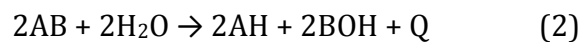
Cabe destacar que en los reactores actuales de la Generación II y en los de la Generación III, las temperaturas de trabajo (aproximadamente 400 [°C]) son insuficientes para llevar a cabo la electrólisis de alta temperatura. Los reactores que pueden ser utilizados para estos procesos son los de Generación IV, los cuales, algunos de ellos, trabajarán a temperaturas superiores a los 800 [°C].

La termólisis directa del agua implica trabajar con temperaturas muy elevadas, aproximadamente 4,000 [°C], y no es aplicable en condiciones normales de presión. Para evitar trabajar con esas temperaturas, se utilizan los llamados “ciclos termoquímicos”, con los cuales se puede producir la ruptura de la molécula de agua a temperaturas menores.

Existen alrededor de trescientos ciclos propuestos, los criterios a tener en cuenta para la selección de un ciclo son: número de reacciones y/o pasos de separación en el ciclo, número de elementos que intervienen, costo y disponibilidad de los procesos químicos, corrosividad de las especies involucradas, costo y disponibilidad de los

materiales de construcción, condiciones ambientales, de seguridad y salud, efecto de las elevadas temperaturas proyectadas en los costos, cantidad de investigaciones realizadas sobre el ciclo y existencia de algún modelo operando en forma continua. Además de algunos criterios más: eficiencia térmica, temperatura de operación (cuanto más baja, mejor), el ΔG de las reacciones individuales debe ser negativo o próximo a cero (para disminuir los requerimientos de energía), la velocidad de reacción de cada paso individual debe ser elevada y similar a la de los otros pasos, la separación de los productos de reacción debe ser mínima en términos de consumo de energía y costo y los productos intermedios deben ser fácilmente manejables. Todos estos criterios son importantes a la hora de la selección de un ciclo para su implementación.

Los procesos de separación del agua pueden ser subdivididos en diferentes reacciones parciales. El principio está dado por el siguiente ciclo:



Donde Q representa la carga de calor, la cual puede provenir, por ejemplo, de un reactor nuclear de alta temperatura.

Dependiendo de las especies que participan (A y B), los ciclos pueden clasificarse en distintas familias, detalladas a continuación.

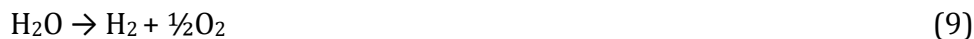
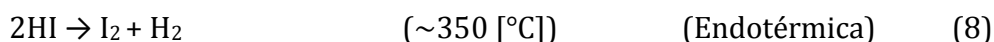
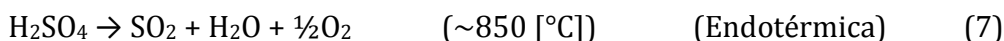
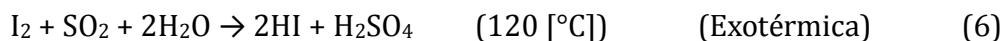
1.2.4 Familia del azufre

Dentro de esta familia se han estudiado cuatro ciclos: el de cuatro pasos, el de yodo-azufre, el del sulfato y el de ácido sulfúrico-metanol; pero los más desarrollados son el de yodo-azufre y el del sulfato.

1.2.4.1 Ciclo I-S (Yodo-Azufre)⁷

Consta de dos secciones principales, una sección donde se produce la descomposición del H₂SO₄ y otra sección donde se produce la descomposición del HI.

Las reacciones que conforman este ciclo termoquímico pueden resumirse como:



El aporte de calor se introduce en el ciclo a través de una o más reacciones químicas de alta temperatura. Todos los compuestos, a excepción del agua, son regenerados y reciclados, lo que beneficia la eficiencia del proceso.

El H₂SO₄ y el HI se forman en la reacción exotérmica de H₂O, SO₂ y I₂ (6), también conocida como reacción de Bunsen y, posteriormente, el hidrógeno es generado en la descomposición del yoduro de hidrógeno.

La disociación del H₂SO₄ (reacción 7) consume la mayor parte del calor aportado. El ácido sulfúrico se puede descomponer a una temperatura aproximada de 850 [°C] liberando el oxígeno y recirculando el dióxido de azufre.

Para conseguir las descomposiciones del ácido sulfúrico y del ácido yodhídrico se necesita un aporte de calor para alcanzar altas temperaturas, que es proporcionado por el reactor nuclear.

El reactor elegido para realizar su acoplamiento es un reactor nuclear de Generación IV de muy alta temperatura tipo VHTR de 600[MWt]. Este reactor tiene la capacidad de calentar el refrigerante del circuito primario (Helio) hasta una temperatura de salida del reactor de 950[°C]. El uso del helio como fluido circulante se debe a que sus propiedades termodinámicas son muy favorables, especialmente su alto calor específico.

Para el acoplamiento entre el ciclo I-S y el reactor nuclear VHTR se estudiaron diferentes opciones:

- La inclusión de una isla de potencia para la generación de electricidad en paralelo al aporte de calor al ciclo I-S.
- El arreglo, tanto del ciclo en sí como de la isla de potencia en el circuito primario o en el secundario, de forma que la parte de potencia es capaz de producir tanta electricidad como es demandada por todos los componentes eléctricos de ambas plantas; tanto nuclear como termoquímica, lo cual permitiría a la planta funcionar sin conexión a la red si fuera necesario (ciclo autoabastecido), tal y como se muestra en la figura 1.1.

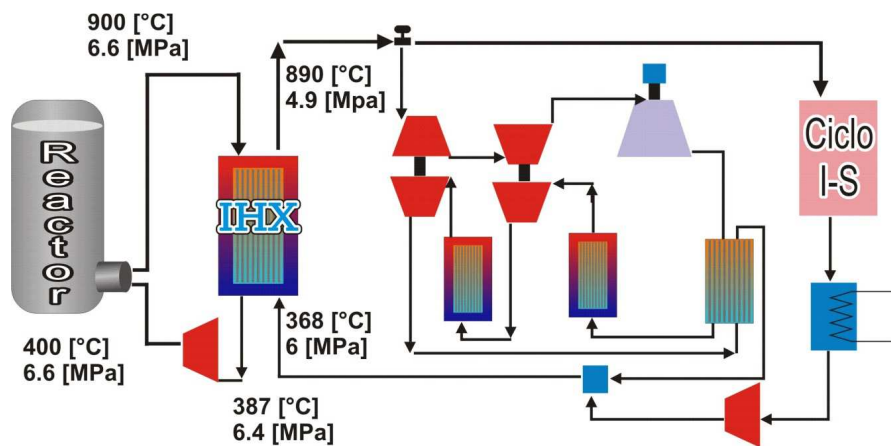


Figura 1. 1 Esquema del ciclo I-S acoplado a un VHTR

Con esta configuración, el circuito primario resulta muy simple: el helio pasa por el reactor de 600[MW] de potencia, del que sale con una temperatura de 950[°C] y se introduce en el Intercambiador de Calor Intermedio (IHX), donde se cede el calor necesario al circuito secundario. Después, el helio es comprimido lo suficiente como para superar las pérdidas de carga de este circuito, entrando de nuevo al reactor a 400[°C].

El helio del circuito secundario recoge el calor cedido en el Intercambiador de Calor Intermedio y su flujo es dividido entre la parte de potencia y el ciclo I-S.

El ciclo I-S aprovecha la alta temperatura del helio del circuito secundario para realizar las reacciones de descomposición de H_2SO_4 , que requieren tales temperaturas. Con los caudales de helio que se pasan a través de los intercambiadores del ciclo I-S, se consigue una producción de hidrógeno de 110 [Ton/día].

Al abandonar la parte dedicada al ciclo I-S, el helio está a 422[°C], una temperatura demasiado alta como para mezclarla con la parte del ciclo Brayton que sale a 348[°C], y tiene que ser enfriada en un intercambiador para ajustarla para su mezcla. Este componente (*'cooler'*) sirve, además, para amortiguar las posibles oscilaciones de

temperatura que se produzcan a la salida del ciclo I-S, y evitar, así, que dichas oscilaciones puedan tener repercusión en el funcionamiento continuo del VHTR y que pudieran causar un disparo no programado del reactor. Un esquema de los cambiadores que intercambian calor con el ciclo I-S está representado en la figura 1.2.

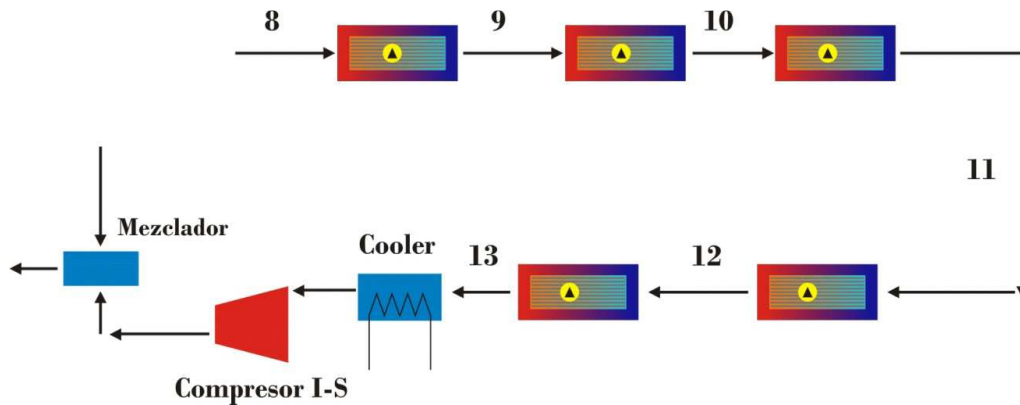
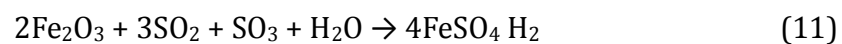
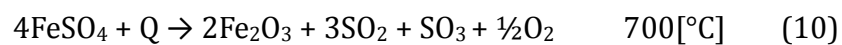


Figura 1. 2 Esquema de la parte del circuito secundario y el ciclo IS

La parte de potencia es un ciclo Brayton con recuperación de calor. Debido a la alta temperatura de entrada, el rendimiento del ciclo es bastante elevado, de forma que se producen 110 [MWe].

1.2.5 Ciclo del sulfato



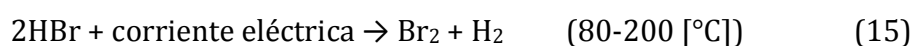
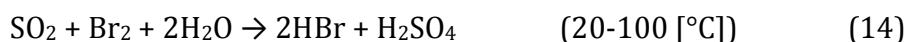
El paso de baja temperatura puede producir ácido sulfhídrico y sulfuro ferroso en lugar de hidrógeno. Esto llevó a la idea de reemplazar el paso de baja temperatura por una fase electroquímica, lo que da lugar a los ciclos termoquímicos híbridos. La

principal desventaja de los ciclos de la familia del azufre es la corrosión que produce la descomposición del ácido sobre el material de los reactores químicos.

1.2.6 Ciclos termoquímicos híbridos

En estos se combinan ciclos termoquímicos con reacciones electrolíticas, realizando un paso extra, de baja temperatura, en forma electrolítica. Varios ciclos termoquímicos híbridos son posibles desde el punto de vista energético, pero no todos son factibles. Los criterios más importantes para su factibilidad son el voltaje necesario para el paso electrolítico y la eficiencia.

1.2.6.1 Ciclo ácido sulfúrico-bromo



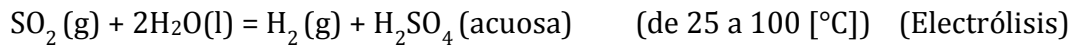
Donde la reacción (15) es el paso electrolítico.

Según el Organismo Internacional de Energía Atómica (IAEA, por sus siglas en inglés), este ciclo fue operado satisfactoriamente en 1978, utilizando solamente especies gaseosas ó líquidas en una planta a escala laboratorio con una producción de hidrógeno de 100[L/hr] durante 150[hr].

1.2.6.2 Ciclo híbrido de Azufre (S-hybrid) o Westinghouse⁷

En el ciclo híbrido de azufre, la solución más simple consiste en electrolizar el bióxido de azufre (SO₂), el ácido sulfúrico (H₂SO₄) y el hidrógeno (H₂).

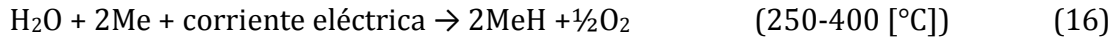
El esquema de reacciones del ciclo híbrido de Azufre es el siguiente:



La principal característica de este ciclo es que consiste de sólo dos reacciones y esto permite la producción de hidrógeno a partir de una planta nuclear. El principal inconveniente es el uso de la electrólisis en un paso del proceso. El problema más importante para incrementar la competitividad de este ciclo es la reducción del voltaje de la celda (actualmente ~ 0.6 [V] comparado con un valor teórico de 0.17 [V]) y el costo de los electrolizadores. Se han estado tomando las debidas precauciones para evitar formaciones de sulfuro en el paso del uso de la electrólisis. Nuevamente, la desventaja es la corrosión que produce la descomposición del ácido. Se estima que los ciclos híbridos de dos pasos reducen las corrientes de materiales en comparación con lo descrito para el ciclo iodo-azufre.

En general, los procesos involucran un paso electrolítico que no es competitivo debido a la sobrepotencialización y la gran inversión de electrolizadores. La eficiencia óptima se logra con ácido sulfúrico al 65%. La eficiencia energética calculada es de 37 a 40%, pero puede llevarse a 46% si se realiza la electrolisis en varias etapas. A pesar de la parte electrolítica que contiene, coloca a este proceso como un buen aspirante para competir con la electrólisis del agua.

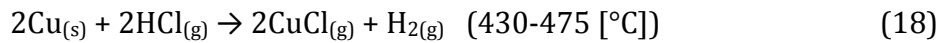
1.2.6.3 Ciclo metal-metal hidruro



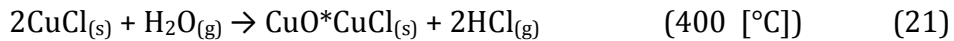
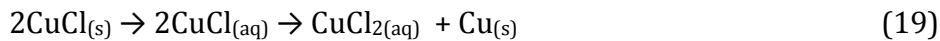
Donde Me= Li, K, Na o mezclas.

En el RWTH (*Rheinisch-Westfaelische Technische Hochschule*, por sus siglas en alemán) de Aachen, Alemania, se realizaron además pruebas con litio. Por otro lado, las aleaciones Ti-Ni demostraron ser resistentes durante 500 horas bajo condiciones de electrólisis. Este ciclo ofrece una posibilidad interesante para la producción de hidrógeno con un reactor de alta temperatura refrigerado con gas.

1.2.6.4 Ciclo cobre-cloro



Electrólisis a 25-80[°C]:



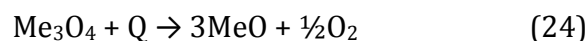
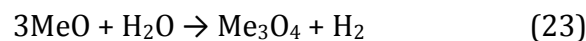
La reacción (18) es el paso de producción de hidrogeno en el cual el cobre sólido, en forma de partículas, reacciona con ácido clorhídrico gaseoso para producir hidrógeno. Dos variantes de este proceso están bajo estudio, una de 5 pasos y otra de 4 pasos. En el primero, el cloruro cúprico acuoso es secado y llevado a forma de partículas sólidas,

que luego reaccionan con agua para formar oxiclورو de cobre. En la segunda variante, la de 4 pasos, el cloruro cúprico ingresa a la cámara de hidrólisis en estado acuoso para producir oxiclورو de cobre.

El proceso de cuatro pasos tiene menor complejidad debido a que no maneja sólidos, reduciendo así la cantidad de equipamiento, pero el proceso de 5 pasos es más eficiente desde el punto de vista energético. Este ciclo fue identificado por *Atomic Energy of Canada Limited, AECL*, como el más prometedor para la producción de hidrógeno con un reactor nuclear de Generación IV, utilizando agua en estado supercrítico como refrigerante.

1.2.7 Familia de los óxidos

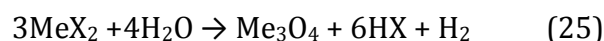
Es el proceso de separación de agua más simple, el ciclo consiste en dos pasos con óxidos metálicos (MeO) en una reacción del tipo redox.



Donde Me = Mn, Fe o Co

1.2.8 Familia de los haluros

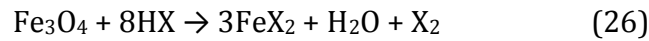
La reacción general para esta familia es:



Donde Me = Mn o Fe y X= Cl, Br o I

Para el ciclo que utiliza manganeso, la cantidad de hidrógeno producido es muy pequeña. Para la producción de oxígeno se han propuesto tres reacciones. En una de

ellas, la reacción de oxidación se lleva a cabo en dos pasos, con la adición de una fase de óxido que reacciona para regenerar el haluro correspondiente.



Donde A= Mn ó Ca y X= Cl ó Br

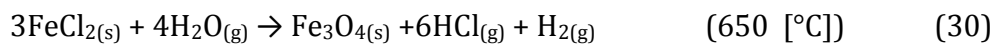
1.2.8.1 Ciclo hierro-cloro

Este ciclo consta de tres pasos:

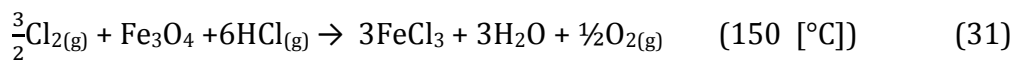
Descomposición:



Hidrólisis:



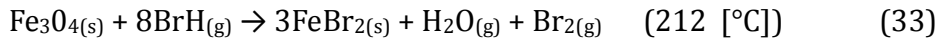
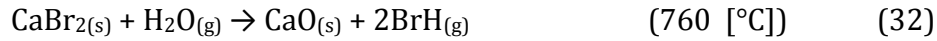
Cloración:



La eficiencia teórica de este ciclo es de 44%, pero en la práctica la eficiencia no supera el 30% debido a problemas de los materiales, el acoplamiento con las fuentes de calor y la separación de las fases gaseosas. El número pequeño de reacciones, la abundancia de los elementos involucrados (Fe y Cl) y una temperatura máxima entre 100-200[°C] más baja que en otros ciclos, son las características más atractivas de este proceso.

1.2.8.2 Ciclo hierro-bromo-calcio

Este ciclo llamado UT-3 (*University of Tokio 3*) es la combinación de A= Ca y X= Br



En las reacciones (32) y (33) se producen los reactivos para las reacciones (34) y (35). Todas las reacciones son sólido-gas y el proceso se lleva a cabo en cuatro reactores tubulares conectados en serie.

Esta producción termoquímica de hidrógeno ha sido desarrollada por Kameyama y Yoshida en la Universidad de Tokio⁹ (la mayor parte de los trabajos sobre este ciclo, han sido realizados en Japón). El proceso UT-3 es uno de los ciclos termoquímicos de producción de hidrógeno más estudiados en el mundo. Se debe resaltar que el proceso UT-3 fue desarrollado para acoplarlo a los reactores nucleares. La eficiencia del ciclo se encuentra en un rango entre el 40% al 50%. El ciclo involucra las siguientes cuatro reacciones sólido-gas.

El proceso consta de cuatro reactores tubulares conectados en serie, dos separadores de membrana y tres intercambiadores de calor. El reactor nuclear transfiere calor a una corriente de vapor en un intercambiador de calor secundario. La corriente de vapor que ha sido calentada circula a través de todo el circuito. Los reactores químicos están dispuestos en pares: un par contiene los compuestos del calcio y el otro los compuestos del hierro. Los reactivos sólidos están en forma de *pellets* esféricos y

⁹ FERNÁNDEZ Clara y BOLAÑOS Badia, Energética del hidrógeno. Contexto, Estado Actual y Perspectivas de Futuro.

formando un lecho empacado. Este lecho es atravesado por la corriente de reactivos gaseosos produciéndose así la reacción química.

La producción de hidrógeno involucra a las reacciones (32) y (35), mientras que la producción de oxígeno involucra las reacciones (33) y (34). Tanto el hidrógeno como el oxígeno se obtienen en los separadores de membrana.

La primera reacción es la etapa cinéticamente más lenta de las cuatro reacciones, y por lo tanto la que limita la velocidad de todo el ciclo. Debido a que todas las reacciones deben transcurrir a la misma velocidad, para una operación continua del ciclo, la baja tasa de la hidrólisis del bromuro de calcio afecta desfavorablemente al proceso. Otra característica indeseable del ciclo UT-3 es que es un proceso tipo gas-sólido, que consiste en un par de reacciones de hidrólisis (endotérmicas) y una reducción del bromo (exotérmica), y que transcurre en cuatro reactores en serie. Para conducir este proceso en un lecho de reactores unido, los gases tendrían que fluir alternativamente en direcciones opuestas. Es decir, un reactor tiene que realizar una reacción endotérmica en una dirección durante unas dos horas, y después una exotérmica en dirección contraria durante las siguientes dos horas, y así sucesivamente.

El ciclo UT-3 ha sido investigado en profundidad durante, al menos, 25 años, desde que se propuso por primera vez en 1978. La eficiencia global del ciclo adiabático mejorado UT-3 está entre el 40% y el 50%. Sin embargo, el ciclo todavía necesita ser mejorado.

En 1996, se publicó el ciclo UT-3 adiabático, cuyo diagrama simplificado se muestra en la figura 1.3.

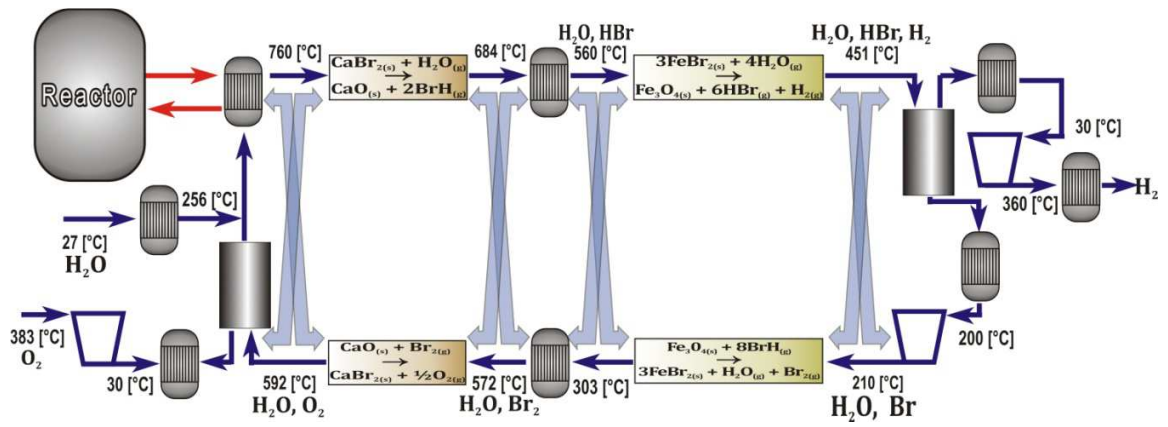


Figura 1.3 Diagrama de flujo del proceso UT-3 adiabático.

CAPÍTULO 2

LA ENERGÍA NUCLEAR

2.1 La energía nuclear en la actualidad

Para que el sistema energético mundial resulte sustentable, se necesitan centrales nucleares simples y económicas que sean fáciles de construir y que incorporen conceptos de seguridad que excluyan la posibilidad de daños de gran envergadura. La simplicidad es un requisito indispensable para garantizar la financiación de la construcción de centrales energéticas.

La necesidad mundial de una cantidad cada vez mayor de energía, aparejada con las inquietudes por las consecuencias ambientales del quemado de combustibles fósiles para suministrar dicha energía, exige que la energía nucleoelectrica comience a satisfacer una parte cada vez mayor de las necesidades futuras.

La respuesta al reto planteado parece hallarse en la diversidad. Todas las tecnologías están desarrollándose para cumplir con criterios de sostenibilidad, es decir, proporcionar energía a precios competitivos sin suponer perjuicios intolerables para el medio ambiente. La tecnología nuclear, en particular, está proponiendo diseños innovadores, también llamados Generación IV, más allá de los modernos reactores de Generación III y III+. Una de sus características principales es el aumento de la eficiencia térmica de las centrales, cuyas consecuencias inmediatas son el mejor aprovechamiento del recurso energético y la menor generación de residuos por unidad de energía eléctrica producida. Asimismo, las menores inversiones necesarias influyen significativamente en la reducción del costo de [kWh] nuclear. También son especialmente importantes aquellos diseños que tratan de ampliar el espectro de sus aplicaciones más allá de la producción eléctrica, permitiendo aumentar más aún el aprovechamiento energético.

El mapa mundial de energía nuclear del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA o IAEA por sus siglas en inglés *International Atomic Energy Agency*) de Naciones Unidas, al 24 de abril de 2013, muestra que están operativos 437 reactores repartidos en 29 países.

Según el Sistema de Información de Reactores de Potencia (PRIS por sus siglas en inglés) del OIEA, otras 68 plantas se encuentran actualmente en etapa de construcción.

En la tabla 2.1 se muestra una lista de países con reactores nucleares:

Tabla 2.1 Reactores en operación.

País	Reactores	Capacidad eléctrica [MW]	Reactores en construcción	Capacidad eléctrica [MW]
Argentina	2	935	1	692
Armenia	1	375		
Bélgica	7	5927		
Brasil	2	1884	1	1245
Bulgaria	2	1906		
Canadá	19	13500		
China	18	13860	28	27844
Republica Checa	6	3804		
Finlandia	4	2752	1	1600
Francia	58	63130	1	1600
Alemania	9	12068		
Hungría	4	1889		
India	20	4391	7	4824
Irán	1	915		
Japón	50	44215	2	2650
Corea del Sur	23	20739	4	4980
México	2	1530		
Holanda	1	482		
Pakistán	3	725	2	630
Rumania	2	1300		
Rusia	33	23643	11	9297
Eslovaquia	4	1816	2	880

Eslovenia	1	688		
Sudáfrica	2	1860		
España	8	7560		
Suecia	10	9395		
Suiza	5	3278		
Ucrania	15	13107	2	1900
Reino Unido	16	9231		
Emiratos Árabes Unidos			1	1345
EEUU	103	101276	3	3399
Total	437	373209	68	65486

Fuente: Sistema de Información de Reactores de Energía (PRIS) del OIEA:
<http://www.iaea.org/pris/>

En este capítulo se hablará brevemente sobre los conceptos básicos de la energía nuclear y de los diferentes reactores nucleares más utilizados para la producción de energía y capaces de ser utilizados para la producción de hidrógeno, que actualmente se encuentran en operación y otros en desarrollo.

2.2 Fundamentos de energía nuclear

La materia ordinaria está compuesta de átomos, los cuales a su vez están formados de sólo tres componentes básicos: electrones girando alrededor de un núcleo compuesto de neutrones y protones. El electrón es en verdad una partícula fundamental (pertenece a una familia de partículas llamadas leptones); pero los neutrones y protones están hechos de partículas más pequeñas, llamadas quarks. Los quarks, hasta donde sabemos, son realmente elementales¹⁰.

¹⁰ ¿Qué es la teoría de cuerdas? <http://athena.nucleares.unam.mx/~alberto/physics/cuerdas.html>.

2.2.1 Partículas fundamentales

La suma de nuestros conocimientos actuales sobre la composición subatómica del universo se conoce como el modelo estándar de la física de partículas. Este describe tanto a los "ladrillos" fundamentales de los cuales está constituido el mundo, como las fuerzas a través de las cuales dichos ladrillos interactúan. Existen doce "ladrillos" básicos. Seis de ellos son quarks, y tienen nombres curiosos: arriba, abajo, encanto, extraño, fondo y cima. (Un protón, por ejemplo, está formado por dos quarks arriba y uno abajo.) Los otros seis son leptones, estos incluyen al electrón y a sus dos hermanos más pesados, el muón y el tauón, así como a tres neutrinos.

Existen cuatro fuerzas fundamentales en el universo: la gravedad, el electromagnetismo, y las interacciones débil y fuerte. Cada una de estas es producida por partículas fundamentales que actúan como portadoras de la fuerza. El ejemplo más familiar es el fotón, una partícula de luz, que es la mediadora de las fuerzas electromagnéticas. (Esto quiere decir que, por ejemplo, cuando un imán atrae a un clavo, es porque ambos objetos están intercambiando fotones.) El gravitón es la partícula asociada con la gravedad. La interacción fuerte es producida por ocho partículas conocidas como gluones. La interacción débil, por último, es transmitida por tres partículas, los bosones W^+ , W^- , y Z^0 .

Las partículas fundamentales, en Ingeniería Nuclear, de nuestro interés son:

- Electrón
- Protón
- Neutrón
- Fotón
- Neutrino

A continuación se enlistan sus principales características:

Tabla 2.2 Características físicas de las partículas fundamentales

Positrón y Negatrón (Electrón)	Masa en reposo: 9.10954×10^{-31} [Kg] Carga $e = \pm 1.60219 \times 10^{-19}$ coulombs
Protón	Masa en reposo: 1.67265×10^{-27} [Kg] Carga $e = \pm 1.60219 \times 10^{-19}$ [C]
Neutrón	Masa en reposo: 1.67495×10^{-27} [Kg] eléctricamente neutro, puede decaer en protón con emisión de partícula beta
Fotón	Onda electromagnética, comportamiento dual.
Neutrino	Masa en reposo: Cero Aparece en el decaimiento de ciertos núcleos 6 tipos, 2 son importantes: electrón neutrinos y electrón antineutrinos.

El núcleo de un átomo está compuesto por nucleones:

Protones y Neutrones

Se caracterizan por:

Z= Número de protones en el núcleo=Número Atómico

N= Número de neutrones en el núcleo

A= Z+N=Numero Másico Atómico ó Número de Nucleones

2.2.2 Conceptos básicos de la energía nuclear

Los isótopos son átomos que contienen el mismo número de protones, pero diferente número de neutrones (igual Z pero diferente N).

El peso atómico o molecular se define como masa total de un átomo o una molécula relativa a la masa del átomo neutral ^{12}C .

Unidad de masa atómica (u.m.a)

Doceava parte de la masa del átomo de carbono más abundante.

$$1 \text{ u.m.a.} = 16606 \times 10^{-27} \text{ [Kg]}$$

Su equivalente en energía es:

$$E = (1 \text{ u.m.a.}) c^2 = 16606 \times 10^{-27} \text{ Kg } (3 \times 10^8 \text{ m/s})$$

$$E = 1.49 \times 10^{-10} \text{ J } (1 \text{ eV} / 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}) = 931 \text{ MeV.}$$

$$B = \text{defecto másico} \times 931 \text{ MeV}$$

Donde B es la energía liberada en la formación de un núcleo. El defecto másico es la diferencia entre la masa en reposo de un núcleo y la suma de las masas en reposo de los nucleones que lo forman.

Núclido

Núcleo de un isótopo.

Energía de enlace nuclear

Energía necesaria para separar un núcleo en sus nucleones, o bien, energía que se libera cuando se unen los nucleones para formar el núcleo.

El origen de la energía de ligadura, o de enlace nuclear, reside en la desaparición de una parte de la masa de los nucleones que se combinan para formar el núcleo. Esta diferencia de masa recibe el nombre de defecto másico y se transforma en energía.

Si a la suma de las masas de los nucleones y electrones de un átomo le restamos la masa medida experimentalmente a través del espectrógrafo de masas, obtenemos el

defecto másico. La energía de enlace será equivalente a la energía liberada en la formación de un núcleo.

Desintegraciones Alfa, Beta, Gama

Partículas alfa: átomos de helio (He) doblemente ionizados (han perdido sus electrones, tienen 2 neutrones y 2 protones). Radiación característica de isótopos de número atómico elevado (Uranio, Torio, Radio, Plutonio). Gran masa y velocidad (10^7 m/s). Se detienen por unos centímetros de aire o milésimas de milímetro de agua.

Partículas beta: electrones emitidos a grandes velocidades próximas a la de la luz. Menor masa. Se detienen en algunos metros de aire o 1 [cm] de agua. Pueden llegar a traspasar la piel, pero no tejido subcutáneo. Los positrones (partículas beta positivas) tienen masa despreciable y carga equivalente a la de un protón.

Partículas gamma: radiaciones electromagnéticas de la misma naturaleza que los rayos X pero de menor longitud de onda. Son capaces de atravesar el cuerpo humano. Quedan frenadas con 1[m] de hormigón o unos centímetros de plomo. Hay que utilizar blindajes adecuados.

Los neutrones proceden de reacciones de fisión o de reacciones nucleares con otras partículas. Pueden ser muy penetrantes excepto en agua y concreto, y se usan para producir elementos radiactivos cuando interactúan con elementos estables.

Reacciones nucleares

Ocurren cuando cambia el número de neutrones o de protones en un núcleo. Unas liberan energía y otras ocurren cuando se añade energía al núcleo. La emisión de partículas por núcleos radiactivos es una forma de reacción nuclear. El núcleo

radiactivo libera su exceso de energía en forma de energía cinética de las partículas emitidas.

La vida media y razón de decaimiento

La vida media de un elemento es el tiempo necesario para que decaiga la mitad del núcleo radiactivo. Para un isótopo radiactivo puro es única, para ese isótopo en particular.

Actividad

Número de desintegraciones por segundo de una sustancia radiactiva. Es proporcional al número de átomos radiactivos presentes.

Radiactividad

Propiedad que poseen ciertos núcleos atómicos de modificarse espontáneamente emitiendo radiación, el proceso no es alterado por un cambio o la condición de la muestra (temperatura, presión, campos electrostáticos, magnéticos o gravitacionales). La velocidad de emisión de las radiaciones, cuando los átomos radiactivos se desintegran en una muestra, es proporcional al número de átomos radiactivos presentes. Puesto que este número está disminuyendo continuamente, el proceso se le conoce como decaimiento radiactivo. Cuando la radiactividad se produce en los cuerpos sin intervención de agentes externos recibe el nombre de *natural*. Si ha sido provocada se llama *artificial*.

2.3 La fisión nuclear

Se llama fisión nuclear a la ruptura del núcleo de un átomo. La energía liberada por la fisión es muy grande (para 1 [Kg] de U 235 se libera 18.7 millones de [kW-hora] en forma de calor)¹¹.

El proceso de fisión iniciado por la absorción de un neutrón en el U 235, libera un promedio de 2.5 neutrones en los núcleos fisionados.

La reacción en cadena que se produce dentro del reactor se puede medir por medio del factor de multiplicación de neutrones: k (razón de neutrones que se produce entre los que se consumen). En un reactor se pueden tener las condiciones siguientes:

$k = 1$ (reacción crítica)

$k > 1$ (reacción supercrítica). Más neutrones que los que se consumen, la potencia aumenta.

$k < 1$ (reacción subcrítica). Deficiencia de neutrones. Disminución de potencia.

Para mantener la reacción en cadena se frena el neutrón a través de una serie de colisiones elásticas con núcleos ligeros como Hidrógeno, Deuterio o Carbono. En esto se basa el diseño de reactores de fisión llamados térmicos, empleados para producir energía.

2.3.1 Centrales nucleares de fisión¹²

Son un tipo de centrales térmicas de producción de energía eléctrica que, en vez de utilizar combustibles fósiles, aprovechan la energía liberada en reacciones de fisión como fuente de calor para un ciclo termodinámico de potencia. Las reacciones de fisión se producen en el interior de los elementos de combustible nuclear; que se

¹¹ FRANÇOIS, Juan Luis. Apuntes de la asignatura Fundamentos de Energía Nuclear. Facultad de Ingeniería UNAM.

¹² FERNÁNDEZ PÉREZ, Álvaro. Análisis de la Viabilidad Técnica-económica de Futuros Reactores Nucleares HTGR para la producción de electricidad y calor. Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Niversidad Pontificia Comillas, 2008.

alojan en el núcleo de un reactor nuclear.

Las reacciones de fisión pueden inducirse mediante el bombardeo del combustible nuclear con neutrones, que al interactuar con el núcleo de un átomo fisible, lo rompen generando dos o más núcleos de menor tamaño. Además, en la fisión se liberan neutrones de alta velocidad, partículas α y β y radiación γ . Si la cantidad de material fisible es suficiente (mayor o igual que la denominada masa crítica), los neutrones liberados en la reacción inicial provocarán nuevas fisiones, produciéndose una reacción en cadena que no necesita aporte exterior de neutrones para sostenerse.

Los componentes principales de una central nuclear son:

El combustible nuclear, del que se obtiene la energía por fisión. El más utilizado es el uranio, en forma de óxido, que contiene U-235 (su isótopo fisible) en una concentración de entre el 3% y el 5 %. Al ser esta concentración mayor que la que se encuentra en la naturaleza, el uranio natural debe enriquecerse con U-235. El combustible se presenta en forma de pastillas de óxido de uranio, que se introducen en vainas de zircaloy y se agrupan en elementos de combustible, que son los que finalmente se alojan en el núcleo. También existen reactores que utilizan plutonio como combustible, si bien éste no se encuentra de forma natural, se obtiene como subproducto de reacciones nucleares. El Pu-239 y el Pu-241 son isótopos físiiles.

El refrigerante, es el que se encarga de retirar el calor generado en el interior del reactor. Puede utilizarse directamente el fluido del ciclo de potencia (ciclo directo) u otro fluido que lo transfiera mediante un intercambiador de calor (ciclo indirecto). Es necesario que tenga buenas propiedades termohidráulicas, como alto calor específico y buena conductividad térmica. Puede utilizarse agua, gases (como helio o dióxido de carbono), metales fundidos o sales fundidas.

El moderador. Superar la masa crítica no es condición suficiente para garantizar una reacción en cadena. Según el tipo de combustible, los neutrones que provoquen la reacción en cadena deberán ser de alta velocidad (en los denominados reactores

rápidos) o de baja velocidad (en los reactores térmicos). Como los que se liberan al producirse una fisión son neutrones rápidos, los reactores térmicos necesitarán frenarlos mediante un moderador. En cambio, éste no será necesario en los reactores rápidos. El moderador suele ser agua, agua pesada o grafito.

Las barras de control, que se introducen en el núcleo del reactor para reducir o detener la reacción, suelen estar fabricadas de acero aleado con algún material absorbente de neutrones, como por ejemplo cadmio o boro.

El reflector, que evita que los neutrones escapen del núcleo y los dirige hacia el combustible, aumentando la eficiencia del reactor. Puede utilizarse agua, acero, grafito o uranio natural o empobrecido.

La vasija del reactor, que es el contenedor de acero en cuyo interior está el núcleo del reactor y que sirve para confinar la fisión.

El blindaje, que es una construcción hecha generalmente de concreto que sirve como barrera adicional frente a la salida de radiaciones y protege al reactor de daños externos.

El conjunto de componentes y sistemas de una central nuclear se diseñan teniendo como primer objetivo la seguridad y utilizando el concepto de “defensa en Profundidad” (Defense-in-Depth). Éste acepta que ningún sistema de seguridad es infalible, por lo que establece varias barreras de protección redundantes e independientes. Aunque un fallo múltiple llegara a ocasionar un accidente severo, las distintas barreras actuarían para garantizar que no se produzcan consecuencias en el exterior de la planta. Más aún, los sistemas de seguridad deben impedir que los propios equipos resulten dañados. De esta forma, se minimiza la probabilidad de accidente hasta valores muy por debajo de los exigidos por la legislación.

Los distintos tipos de reactores nucleares pueden clasificarse según cualquiera de los

anteriores componentes. Además, existe una clasificación adicional que agrupa a los reactores según el periodo de tiempo en el que se desarrollan o utilizan. A cada conjunto de tipos de reactor se le conoce con el nombre de Generación.

2.3.2 Tipos de reactores para producir hidrógeno

Los científicos confían en que los reactores de cuarta generación estén listos para el 2030. Con ellos se espera producir menos residuos y menos contaminantes, incrementar su competitividad económica con respecto a las actuales y que no se favorezca la proliferación de armas nucleares. La tecnología de cuarta generación se centra en seis tipos de reactores que se diferencian básicamente en el refrigerante que utilizan, y que se dividen en dos grupos, los térmicos y los rápidos. Entre los primeros se trabaja en los de “muy alta temperatura” (hasta mil grados centígrados) que, además, servirían para producir hidrógeno; en los de agua supercrítica, cuya temperatura y presión se encuentran en su punto crítico termodinámico, lo que aumentaría la sencillez y eficiencia energética de las futuras plantas y permitirían generar electricidad a bajo costo, y los reactores de sal fundida, refrigerados con este producto.

En cuanto a los reactores rápidos, se investiga en el refrigerado por gas, con el que se quiere conseguir mayor eficiencia en la conversión del uranio y en la gestión de los actínidos (elementos químicos usados para obtener energía nuclear, constituyen un grupo de quince elementos consecutivos en la tabla periódica, encabezados por el actinio, de número atómico 89, hasta el laurencio con número atómico 103. A pesar de que muchos de estos elementos se les puede encontrar en la naturaleza, los de mayor número atómico, no se encuentran en ella y tienen tiempos de vida media cortos y sus isótopos son radiactivos), el refrigerado por sodio, que busca aumentar la eficiencia del uso de uranio y eliminar los isótopos transuránicos (los de número atómico mayor de 92), y el refrigerado por plomo, cuyo enfriamiento se produce por convección natural, y que también podría utilizarse para producir hidrógeno.

En la tabla siguiente se presenta un resumen de las principales características de los reactores de Generación IV:

Tabla 2.3. Reactores de Generación IV¹²

	Espectro	Refrigerante	T[°C]	Presión	Combustible	Potencia [MW _e]
GFR	Rápido	He	850	Alta	U ²³⁸	288
LFR	Rápido	Pb-Bi	500-800	Baja	U ²³⁸	50-1200
MSR	Epitérmico	Sales Fundidas	700-800	Baja	UF ₄ en sal	1000
SFR	Rápido	Na	550	Baja	U ²³⁸ /MOX	150-1500
SCWR	Térmico o Rápido	H ₂ O	510-550	Muy Alta	UO ₂	1500
VHTR	Térmico	He	1000	Baja	UO ₂	250

La cuarta generación de reactores nucleares, además de un avance para el sector supone una necesidad, ya que, al ritmo actual y, según la OCDE, las actuales plantas podrían acabar con el uranio en un siglo. Según este organismo internacional, las centrales del planeta producen actualmente un 16% de la energía que se consume, cifra que se elevaría al 22% a mediados de siglo, para lo que entre 2030 y 2050 habría que construir 50 reactores cada año¹³.

Algunos países ya se han puesto a trabajar y según la Asociación Mundial Nuclear ya hay aprobadas más de 90 nuevas plantas. Es el caso, por ejemplo, de Estados Unidos que cuenta con 20 solicitudes para la construcción de nuevos reactores, y de China, que quiere elevar al cuádruple su capacidad nuclear para 2020. En la UE, por su parte, los 151 reactores en funcionamiento proporcionan la tercera parte de la electricidad que consume¹³.

¹³ Diario de León. *Reactores nucleares más seguros, eficientes y con menos residuos*. [http://www.diariodeleon.es/noticias/revista/reactores-nucleares-mas-seguros-eficientes-y-con-menos-residuos_439911.html] 08 de marzo del 2009

Se están desarrollando modelos de producción de hidrógeno en centrales nucleares. Para ello, se ha realizado un análisis en profundidad de las diferentes configuraciones que propone Generación IV, para realizar la elección del más idóneo para estos fines, en base a la seguridad, criterios económicos, disponibilidad de diseños y otros (planes estratégicos futuros, factor político, etc). A continuación, se describen, con un poco más de detalle, los reactores estudiados en esta tesis.

2.3.2.1 VHTR^{14, 15}

El VHTR está especialmente diseñado para funcionar a muy alta temperatura (~ 950°C), con el fin de suministrar el calor necesario a procesos de descomposición del agua por ciclos termoquímicos o por electrólisis a alta temperatura. El VHTR puede estar completamente dedicado a la producción de hidrógeno, o para producir electricidad (o también en cogeneración). El sistema de referencia tiene una potencia unitaria de 600 [MWth]. Es un reactor con refrigerante gaseoso asociado a un núcleo térmico con un ciclo del combustible abierto. La moderación se hace con bloques de grafito y el gas de refrigeración es el helio bajo 47[bar] de presión. En la siguiente figura se muestra un VHTR acoplado a una planta de producción de hidrógeno.

¹⁴ <http://www.gen-4.org/>

¹⁵ QUENTIN, Moyart. Seguridad del acoplamiento de un reactor VHTR a una planta de producción de hidrógeno. Memoria de PFC 2008.

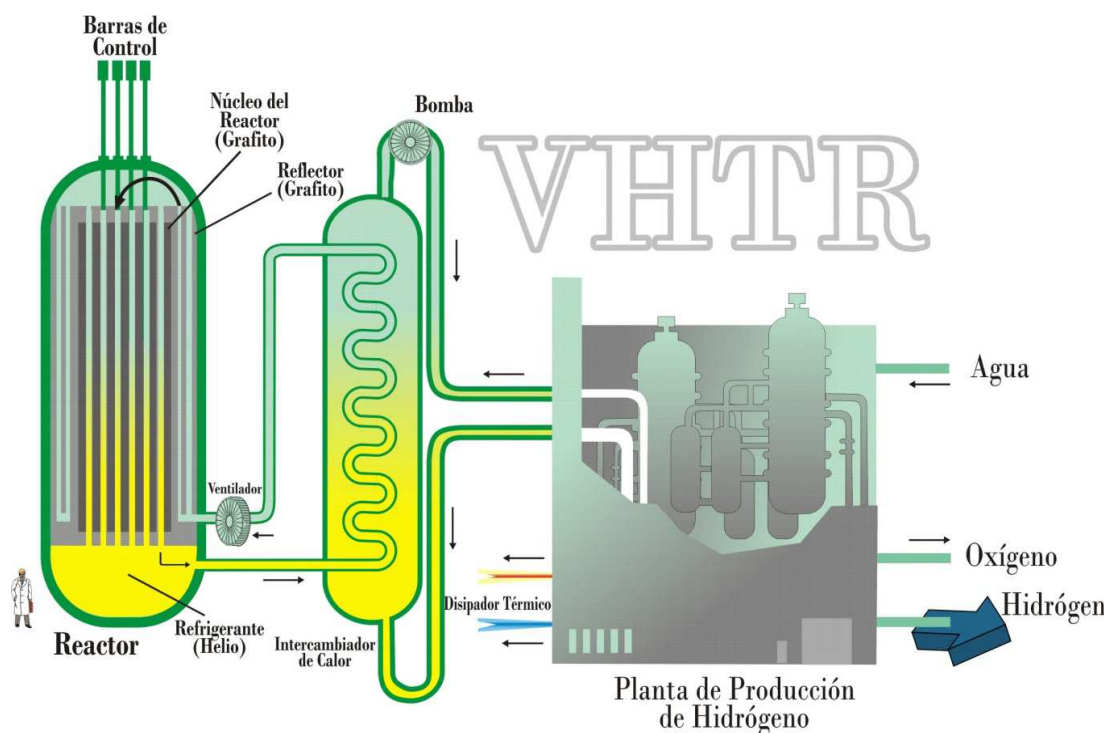


Figura 2.1 Esquema del reactor VHTR

Desde el punto de vista de la seguridad, se prevé un confinamiento del reactor y de la totalidad del circuito primario en subsuelo. La seguridad pasiva, tema fuerte de la Generación IV, es asegurada gracias a un diseño del núcleo de baja densidad de potencia (alrededor de 6 MW/m³). En caso de pérdida de la refrigeración por el circuito de helio, la potencia residual se transmite por conducción y radiación térmica del combustible hacia la vasija y luego de la vasija hacia el RCCS (Reactor Cavity Cooling System: Sistema de refrigeración del pozo de la vasija). Los paneles del RCCS colocados alrededor de la vasija evacúan esta potencia por circulación de agua en convección natural con piscinas colocadas arriba.

El combustible de los VHTR se presenta en forma de partículas multicapa (TRISO) de 0.92 [mm] de diámetro (ver figura 2.2). El núcleo de estas partículas, que es el combustible en sí mismo (dióxido de uranio, UO₂), está recubierto en primer lugar por una capa de grafito poroso que posee suficiente espacio para retener los gases que se liberan durante la reacción de fisión. En segundo lugar, hay dos capas de carbono

pirolítico separadas por una capa intermedia de carburo de silicio. En conjunto, las tres últimas capas proporcionan a la partícula una gran resistencia a las altas temperaturas y a los esfuerzos mecánicos, constituyendo una primera barrera de contención de los productos de fisión.

La estructura multicapa de las partículas TRISO garantiza que su integridad estructural no se ve comprometida por debajo de 1600 [°C]. La temperatura de operación normal de los HTGR es de alrededor de 900[°C], por lo que hay un importante margen de seguridad hasta la temperatura límite. Si además se tiene en cuenta la gran inercia térmica del reactor y su tendencia natural a perder calor por medios pasivos, puede garantizarse que no se alcanzará el límite de 1600[°C] y que, por tanto, los productos de fisión quedarán confinados en el interior de las partículas de combustible, evitándose que pasen al refrigerante ya sea en condiciones de operación normal o de accidente.

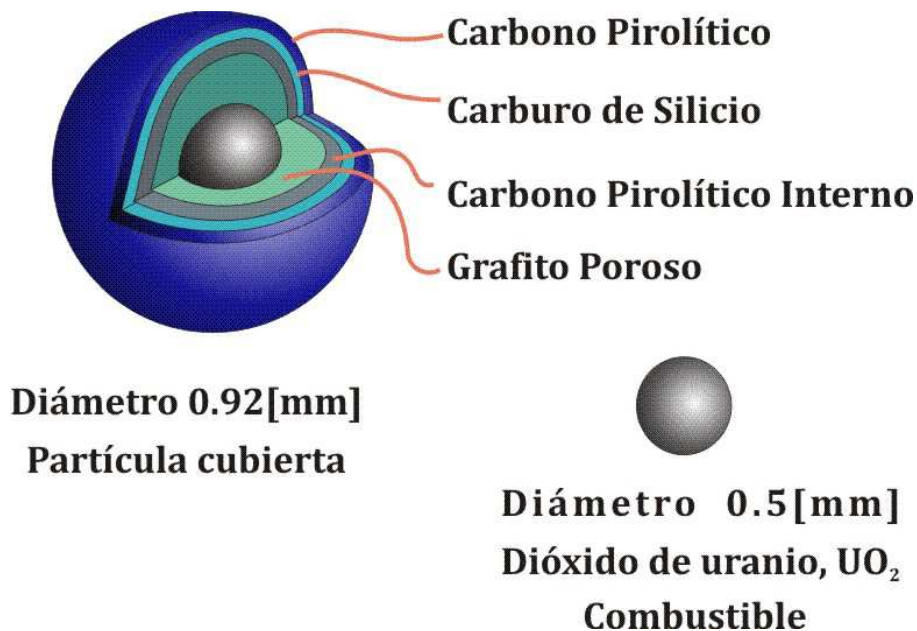


Figura 2. 2 Elemento de combustible TRISO

En la versión PBMR (*Pebble Bed Modular Reactor, por sus siglas en inglés*) del VHTR, estas partículas se agrupan en matrices de grafito esféricas de mayor tamaño que se depositaban en el interior del reactor, formando un lecho de bolas a través del cual fluía el helio. Mientras que en la versión GT-MHR (*Gas Turbine Modular Helium Reactor, por sus siglas en inglés*) se agrupan en matrices prismáticas de grafito formando barras de combustible, y éstas a su vez ensambles hexagonales fijos. Estas distintas disposiciones del combustible se mantienen en la actualidad, existiendo proyectos en fase de desarrollo de cada una de ellas.

Dentro de los proyectos de reactores actuales, los más estudiados son el PBMR que, como ya se mencionó, es un reactor de lecho de bolas refrigerado directamente por helio, que mueve un ciclo termodinámico Brayton interrefrigerado regenerativo para producir energía eléctrica. También contempla la cogeneración de electricidad y calor para procesos industriales. Por otro lado, hay que destacar el GT-HTR300 japonés, que es un reactor de barras prismáticas con ciclo de Brayton regenerativo, sin interrefrigeración. Y el ANTARES, francés, que plantea el uso de un ciclo combinado, aunque no se espera que la temperatura de 1000 [°C] pueda alcanzarse a muy corto plazo.

Estos reactores están siendo diseñados para funcionar con partículas de combustible TRISO (figura 2.2), independientemente de la forma de la matriz de grafito en que se agrupen.

2.3.2.2 Reactor rápido refrigerado con gas (GFR) ^{16, 17}

El GFR es un reactor de alta temperatura que utiliza helio como refrigerante. Ofrece la

¹⁶ <http://www.gen-4.org/>

¹⁷ MARTÍNEZ, P. E. y PASQUEVICH, D. M. Estudio de los ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno nuclear, Instituto de Energía y Desarrollo Sustentable, Comisión Nacional de Energía Atómica

posibilidad de trabajar con ciclo de combustible cerrado. Estos reactores poseen un espectro neutrónico rápido, lo que permite un mejor aprovechamiento del combustible, minimizando la cantidad de residuos radiactivos. A su vez la elevada temperatura de salida del refrigerante permite no sólo generar electricidad, sino también el uso de ese calor en procesos industriales, por ejemplo en la producción de hidrógeno.

El refrigerante (helio) ingresa en el núcleo del reactor por debajo, y sale caliente por la parte superior del núcleo. Una vez que abandona el reactor, el gas caliente acciona una turbina de gas, que a su vez acciona un generador de energía eléctrica y dos compresores, y cuando el gas sale de la turbina se enfría, se comprime y regresa al reactor. El calor del gas a la salida de la turbina podría ser utilizado en procesos industriales que requieren calor, por ejemplo en la producción de hidrógeno por procesos termoquímicos. Otra ventaja del espectro neutrónico rápido es la posibilidad de trabajar con materiales físiles y materiales fértiles. Varios tipos de combustibles son los candidatos por tener el potencial para funcionar a temperaturas muy elevadas y para asegurar una excelente retención de los productos de fisión: el combustible de cerámica compuesta, partículas de combustible avanzadas, o elementos de cerámica revestida de compuestos actínidos. Las configuraciones del núcleo pueden estar basadas en bloques prismáticos o conjuntos basados en placas.

Es importante recordar que los materiales físiles son aquellos que pueden sufrir reacciones de fisión con neutrones térmicos o rápidos. Disponen de un número impar de nucleones (protones y neutrones), por ejemplo U-233, U-235, Pu-239 y Pu-241. Los materiales fértiles reciben su nombre porque pueden producir núcleos físiles por medio de reacciones de captura neutrónica (reacciones entre un núcleo y un neutrón, en las que no aparecen neutrones entre los productos de reacción, sólo el núcleo compuesto y algún fotón de desexcitación en su caso); también pueden fisionarse pero sólo con neutrones rápidos. Poseen número de nucleones par, por ejemplo U-238, Pu-240, Pu-242 y Th-232. Los isótopos fértiles más usados son el U-238 y el Th-232 que producen Pu-239 y U-233, respectivamente, mediante las reacciones siguientes:

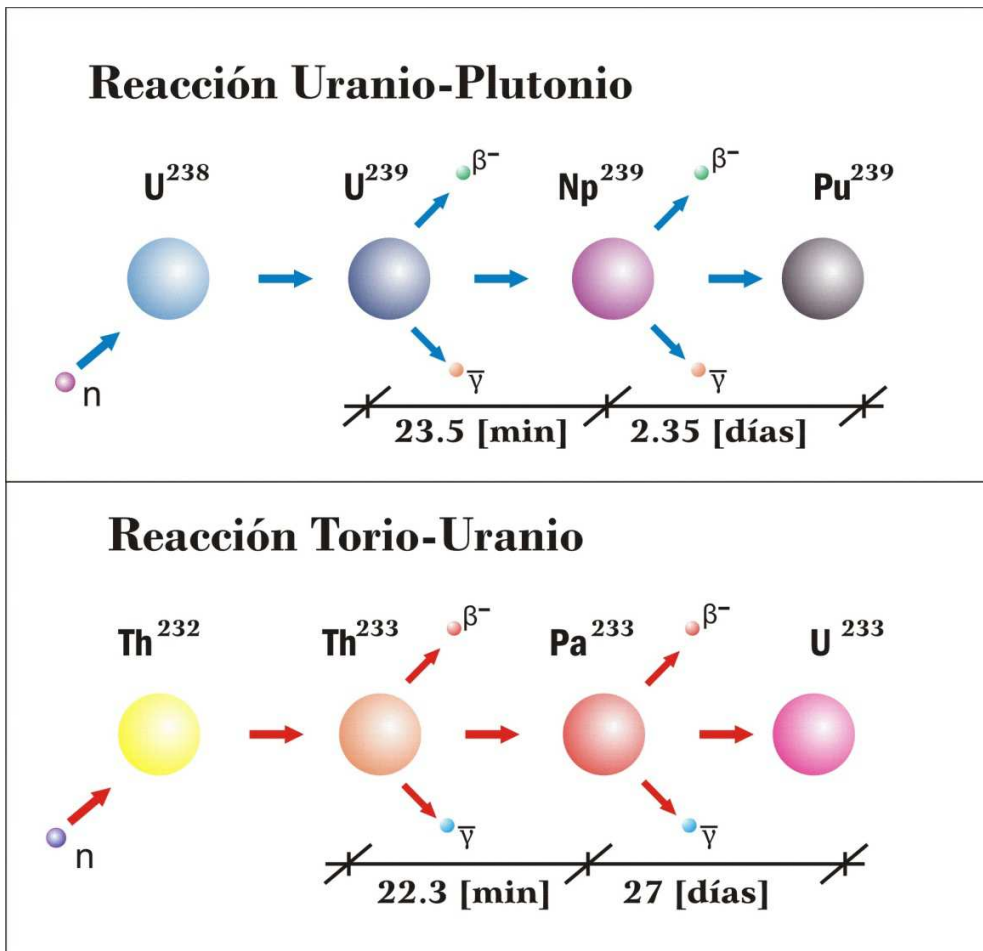


Figura 2. 3 Proceso de transmutación de los isótopos fértiles U238 y Th232

En la siguiente figura se muestra un GFR acoplado a un ciclo Brayton de turbina de gas.

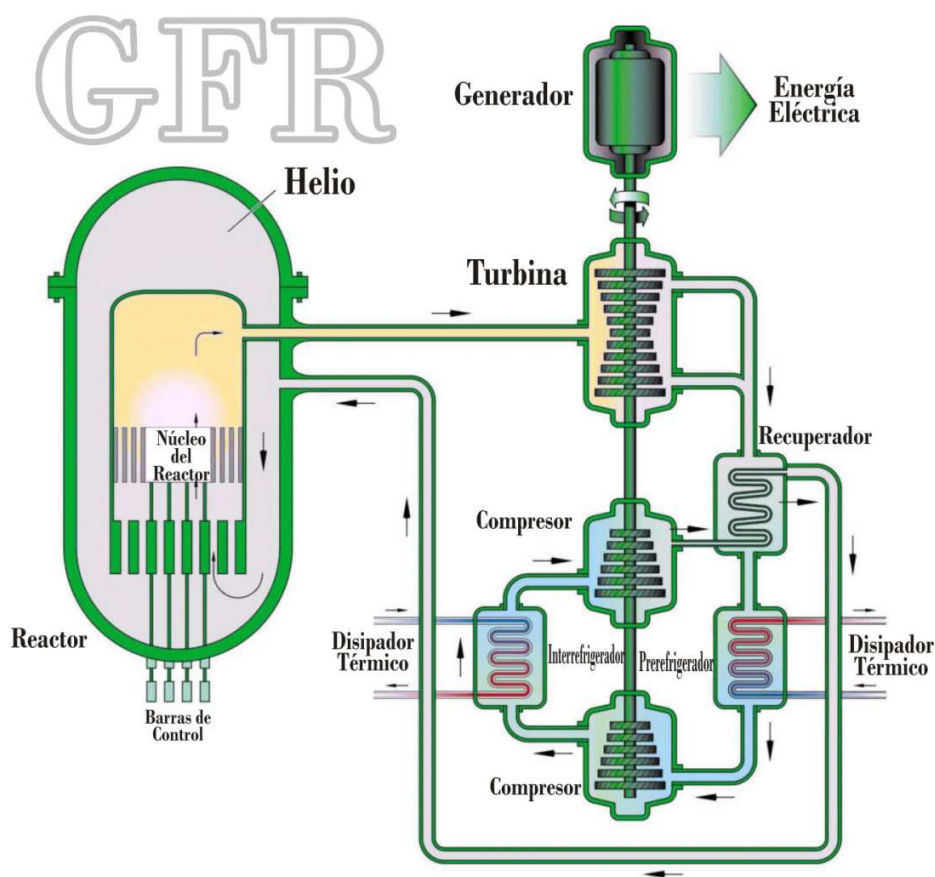


Figura 2. 4 Esquema del reactor GFR

2.3.2.3 Reactor rápido refrigerado con sodio (SFR) ^{18, 19}

Posee un espectro neutrónico rápido y la posibilidad de trabajar con un ciclo de combustible cerrado por lo que, al igual que los GFR, realizan un buen aprovechamiento del combustible. El SFR está diseñado para la gestión de residuos de alto nivel y, en particular, la gestión del plutonio y otros actínidos. Este reactor puede ser utilizado principalmente para la generación de electricidad, y aunque no alcanza temperaturas tan altas como los dos reactores descritos previamente, también puede

¹⁸ <http://www.gen-4.org/>

¹⁹ Fieras de la ingeniería. *La próxima generación de la energía nuclear.*

<http://www.fierasdelaingenieria.com/la-proxima-generacion-de-la-energia-nuclear/>.

ser utilizado en cogeneración para producir hidrógeno. El sistema posee dos intercambiadores de calor, de los cuales uno está dentro del reactor. El sodio que está dentro del reactor (sodio primario) atraviesa el núcleo e ingresa al primer intercambiador de calor (el que se encuentra dentro del reactor) que utiliza sodio como refrigerante (sodio secundario). Luego el sodio secundario le transfiere el calor al fluido de trabajo del sistema de conversión de energía (ver figura 2.5).

Las importantes características de seguridad del sistema incluyen un tiempo corto de respuesta térmica, un amplio margen de refrigerante en ebullición, un sistema de refrigeración primario que opera cerca de la presión atmosférica, y un sistema intermedio entre el sodio radiactivo en el sistema primario y el sistema de conversión de energía. El agua/vapor y el dióxido de carbono están siendo considerados como los fluidos de trabajo para el sistema de conversión de energía a fin de lograr resultados de alto nivel en el rendimiento térmico, la seguridad y la confiabilidad.

El ciclo de combustible cuenta con un total de actínidos a reciclar con tres opciones principales. La primera opción es de un gran tamaño (de 600 a 1,500 MW) para el reactor refrigerado por sodio, usando una mezcla de uranio y plutonio, soportado por un ciclo de combustible basado en un procesamiento avanzado acuoso mediante centralización, sirviendo al número de reactores necesarios. La segunda opción es para un tamaño intermedio (de 300 a 600 MW) de reactor de tipo estanque, y el tercero de un tamaño pequeño (de 50 a 150 MW), de reactor refrigerado por sodio de tipo modular que emplean uranio-plutonio-actínidos-zirconio, con el apoyo de un ciclo de combustible basado en el procesamiento pirometalúrgico en instalaciones integradas con el reactor. La temperatura de salida es de aproximadamente 550°C para los tres conceptos.

El espectro rápido de SFR también hace posible el uso de materiales fisionables disponibles y fértiles (incluyendo el uranio empobrecido) mucho más eficientemente que los reactores de espectro térmico a través de los ciclos de combustible.

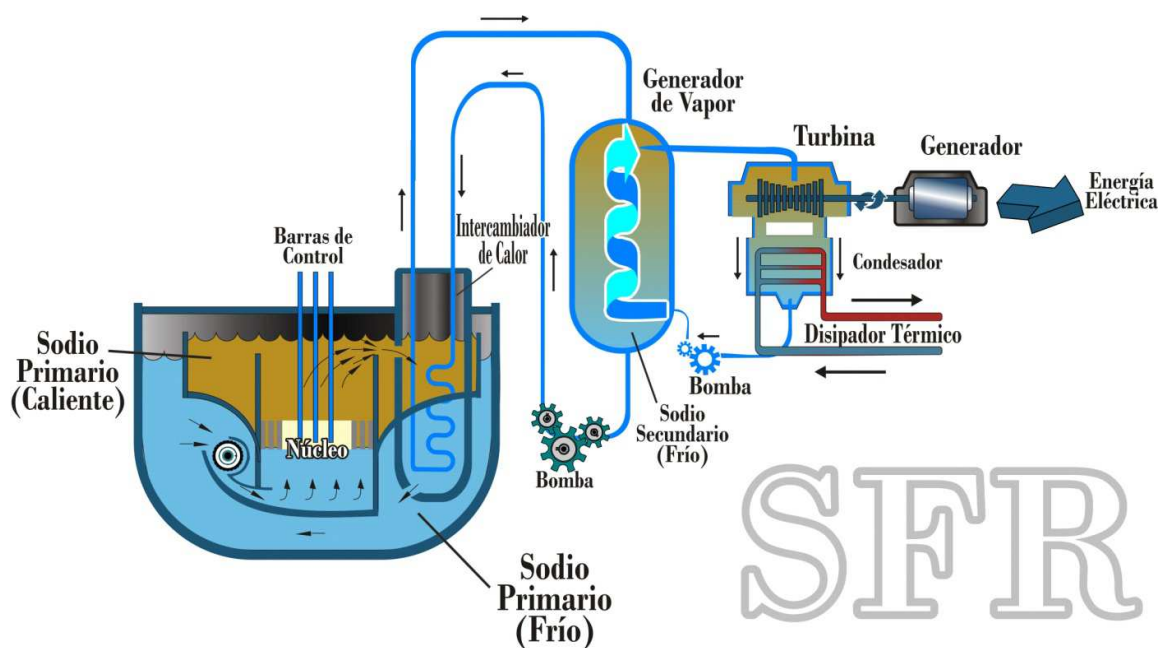


Figura 2. 5 Esquema del reactor SFR.

Tabla 2.4. Características principales de los diseños de reactores de generación IV

Reactor	Espectro	Refrigerante	Temperatura [°C]	Potencia [MW _e]	Productos Posibles	Ciclos Termoquímicos
GFR	Rápido	He	850	288	Energía Eléctrica e Hidrógeno	UT-3, Fe-Cl, HyH ₂ SO ₄ , Cu-Cl
LFR	Rápido	Pb-Bi	500-800	50-1200	Energía Eléctrica e Hidrógeno	UT-3, Fe-Cl, Cu-Cl
MSR	Epitérmico	Sales Fundidas	700-800	1000	Energía Eléctrica e Hidrógeno	UT-3, Fe-Cl, Cu-Cl
VHTR	Térmico	He	1000	250	Energía Eléctrica e Hidrógeno	UT-3, Fe-Cl, I-S, H ₂ SO ₄ -Br, HyH ₂ SO ₄ , M-Mi, Cu-Cl
SFR	Rápido	Na	550	150-1500	Energía Eléctrica	Cu-Cl
SCWR	Térmico o Rápido	H ₂ O	510-550	1500	Energía Eléctrica e Hidrógeno	Cu-Cl

2.4 Fusión nuclear²⁰

La fusión nuclear es una reacción nuclear en la que dos núcleos de átomos ligeros, en general el hidrógeno y sus isótopos: el deuterio (D) y el tritio (T) se unen para formar otro núcleo más pesado, liberando una gran cantidad de energía.

Un ejemplo claro sucede a diario en la energía solar (ver figura 2.6) que tiene su origen en la fusión de núcleos de hidrógeno, generándose helio y liberándose una gran cantidad de energía que llega a la Tierra en forma de radiación electromagnética.

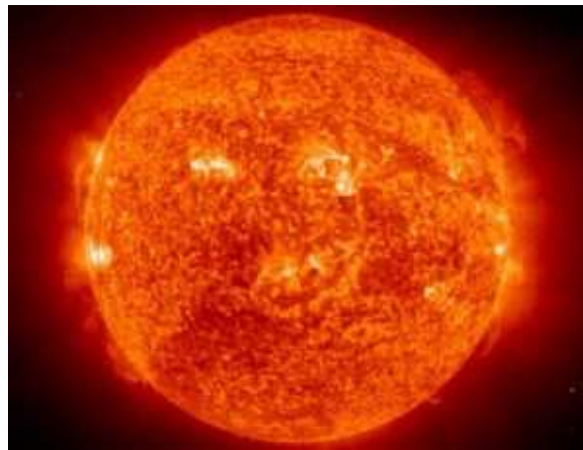


Figura 2. 6 El Sol es un ejemplo de la fusión nuclear.

Para efectuar las reacciones de fusión nuclear, se deben cumplir los siguientes requisitos:

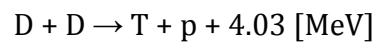
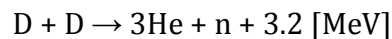
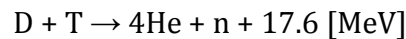
- Temperatura muy elevada para separar los electrones del núcleo y que éste se aproxime a otro venciendo las fuerzas de repulsión electrostáticas. La masa gaseosa compuesta por electrones libres y átomos altamente ionizados se denomina plasma.
- Confinamiento necesario para mantener el plasma a elevada temperatura durante un tiempo mínimo.
- Densidad del plasma suficiente para que los núcleos estén cerca unos de otros y

²⁰ Energía Nuclear. Fusión Nuclear. http://energia-nuclear.net/como_funciona/fusion_nuclear.html.

puedan dar lugar a reacciones de fusión.

Los confinamientos convencionales, como las paredes de una vasija, no son factibles debido a las altas temperaturas del plasma.

Las reacciones de fusión más importantes son:



n = neutrones

p = protones

Para que tengan lugar estas reacciones debe suministrarse a los núcleos la energía cinética necesaria para que se aproximen los núcleos reaccionantes, venciendo así las fuerzas de repulsión electrostáticas. Para ello se necesita calentar el gas hasta temperaturas muy elevadas (10^7 ó 10^8 [°C]), como las que se supone que tienen lugar en el centro de las estrellas. El gas sobrecalentado a tan elevadas temperaturas, de modo que los átomos estarán altamente ionizados, recibe el nombre de plasma.

El requisito de cualquier reactor de fusión nuclear es confinar dicho plasma con la temperatura y densidad lo bastante elevadas y durante el tiempo justo, a fin de permitir que ocurran suficientes reacciones de fusión nuclear, evitando que escapen las partículas, para obtener una ganancia neta de energía. Esta ganancia energética depende de que la energía necesaria para calentar y confinar el plasma sea menor que la energía liberada por las reacciones de fusión nuclear. En principio, por cada miligramo de deuterio-tritio se pueden obtener 335 [MJ].

El Deuterio y el tritio son los elementos utilizados en la fusión nuclear. Con el contenido de deuterio existente en el agua del mar (34 gramos por metro cúbico) es posible obtener una energía inagotable mediante la fusión nuclear, y cuyo contenido energético es, tal que, con la cantidad de deuterio existente en cada litro de agua de

mar, la energía obtenida por la fusión nuclear de estos átomos de deuterio equivale a 250 litros de petróleo. El Tritio, aunque es escaso en la naturaleza, puede ser generado por reacciones de captura neutrónica con los isótopos del Litio, material abundante en la corteza terrestre y en el agua del mar.

2.4.1 Confinamiento

Los confinamientos convencionales no son posibles debido a las altas temperaturas del plasma que deben soportar. Por este motivo, se han desarrollado dos importantes métodos de confinamiento:

- Fusión nuclear por confinamiento inercial (FCI): Tecnología para producir la fusión termonuclear, aprovechando la inercia mecánica de pequeñas esferas sólidas y densas de Deuterio-Tritio, que se calientan hasta la temperatura de fusión mediante la inyección de breves e intensos pulsos de energía (radiación láser o partículas muy energéticas procedentes de un acelerador). El bombardeo de estas esferas provoca su calentamiento y la posterior compresión de su superficie a una altísima temperatura, formando un plasma caliente. El plasma se escapará libremente hacia fuera, pero por conservación del impulso, parte de las partículas tendrá que ir hacia dentro. Esa implosión será capaz de comprimir la mezcla de gas Deuterio-Tritio que puede colocarse dentro de la esfera, y juntamente con el calor producido provocar una fusión termonuclear. En este proceso, las fases de calentamiento y confinamiento se efectúan al mismo tiempo, usando el mismo dispositivo suministrador de la energía.
- Fusión nuclear por confinamiento magnético (FCM): Tecnología para provocar la fusión manteniendo el plasma de Deuterio-Tritio confinado mediante un campo magnético de la configuración e intensidad adecuadas. Con el uso de los campos electromagnéticos se consigue que las partículas del plasma se aceleren, evitando que sigan caminos aleatorios y puedan reaccionar con más facilidad. Las fases de calentamiento y confinamiento se hacen por separado. El

confinamiento magnético más simple es un campo magnético uniforme, donde las partículas realizarán trayectorias espirales alrededor de la dirección del campo. Esto sería suficiente para confinar las partículas en sólo dos direcciones. Para evitar la pérdida de las partículas a lo largo del eje del campo hay dos posibles opciones: Se puede construir un toro (configuración cerrada), o se puede crear en los extremos una zona de alta densidad de líneas de campo magnético que reflejaría las partículas dentro de la región donde el campo es inferior. Serían los espejos magnéticos.

El inmenso potencial energético de la fusión nuclear incentiva el continuo desarrollo tecnológico en ambos tipos de confinamiento. Con el Deuterio existente en todo el planeta se podría obtener energía hasta por miles de años, considerando la poca cantidad que se necesita por reacción de fusión.

2.4.2 Evolución histórica y proyectos futuros

Los orígenes de la fusión nuclear se ubican hacia 1929 cuando Atkinson y Houtemans plantearon la posibilidad de obtener energía de las reacciones de fusión. Sin embargo, los conceptos más importantes de fusión nuclear y su aplicación real, se desarrollaron a partir de 1942 con los trabajos de H. Bethe, E. Fermi, R. Oppenheimer y E. Teller, entre otros. A través del proyecto Sherwood se llevaron a cabo los primeros avances tecnológicos, que permitieron desarrollar el concepto de confinamiento magnético, obteniéndose los primeros diseños: z-pinch, stellarator y espejos magnéticos.

En 1961, J. Nuckolls (EEUU) y N. Basov (URSS) desarrollaron una técnica con la cual se podrían obtener reacciones de fusión nuclear mediante altas compresiones provocadas por la cesión de energía. Se desarrollaron, así, programas secretos en EEUU y Rusia. Posteriormente, Francia se une a este desarrollo, también secreto. Otros países como Alemania, Japón, Italia y EEUU (Rochester) desarrollaron programas abiertos.

En 1965, Artsimovich presentó los resultados de sus investigaciones en la “2ª Conferencia de Plasma y Fusión Controlada”, sobre el concepto TOKAMAK (TOroidal KAmera MAgnetiK).

En el concepto TOKAMAK, el campo magnético necesario para confinar el plasma es el resultado de la combinación de un campo toroidal, de un campo poloidal, ambos creados por bobinas toroidales, y de un campo vertical (creado por un transformador). El plasma actúa como secundario de un transformador por donde se induce corriente que lo calienta. Por el primario del transformador circula una intensidad de corriente variable.

En 1968, el Premio Nobel N. Basov informó de la obtención de temperaturas de ignición y de la producción de neutrones en las reacciones de fusión nuclear empleando láseres. A partir de entonces, se pudo disponer de una gran cantidad de aparatos en construcción y operación bajo el concepto TOKAMAK como los siguientes: TFR (Francia), T-4 y T-11 (URSS), ALCATOR y ORMAK (EEUU). Otros como el T-10 (URSS), PLT (EEUU), DITE (GB), ASDEX (RFA) y FRASCATI (EURATOM-Italia) comenzaron a construirse.

En la década de los 70 comenzó a producirse la primera serie de publicaciones sobre FCI (Fusión nuclear por Confinamiento Inercial). En EEUU, los principales investigadores fueron Brueckner, Nuckolls, Kidder y Clark. En Rusia, Basov y su equipo consiguieron el experimento más avanzado, alcanzándose cerca de 3 millones de neutrones en la implosión de esferas.

Basados en este concepto, existen, y han existido, multitud de instalaciones con láser que han permitido avanzadas investigaciones sobre la fusión nuclear. De ellas, se pueden destacar: NOVA (40 [kJ], EEUU), OMEGA (30 [kJ]), GEKKO-XII (10 [kJ], Japón), PHEBUS (3 [kJ], Francia), VOLCAN (UK), ISKRA-5 (Rusia).

A partir de estas instalaciones de láser, se han desarrollado dos grandes proyectos para demostrar altas ganancias: National Ignition Facility (NIF) en EE.UU. y Laser Megajoule (LMJ) en Francia.

Pero el láser no es el único dispositivo capaz de producir implosiones, también se observa que electrones y haces de iones ligeros y pesados son serios candidatos a la fusión nuclear por confinamiento inercial. Nacen así los siguientes proyectos con iones ligeros: ANGARA y PROTO (Rusia), PBFA-I y PBFA-II (EEUU).

En relación con los iones pesados, al no existir experimentos no se han podido alcanzar resultados exactos, aunque se han realizado ciertas predicciones mediante simulaciones teóricas como las realizadas en el Proyecto HIDIF (Heavy Ion Design of Ignition Facility), patrocinado por varios laboratorios e institutos europeos y por el Lawrence Berkeley Laboratory americano.

En la década de los 90, las instalaciones de tipo TOKAMAK: JET (EURATOM), TFTR (EEUU) y JT-60 (Japón), permitieron obtener cierta potencia. El primero fue el JET, que con una mezcla de D (90%) y T (10%) consiguió en 1991, una potencia de 1.7 [MW]. Posteriormente, en 1993, el TFTR con una mezcla de D-T al 50% llegó hasta los 6 [MW], alcanzándose temperaturas de 30 [keV]. En el calentamiento se gastaron 29 [MW]. En la actualidad, el TFTR está clausurado. Hasta la fecha, se han llegado a producir hasta 12 [MW] de potencia en reacciones de fusión nuclear controladas durante más de un segundo (JET, 1997), y existe la confianza de que con los avances tecnológicos actuales sea posible llegar al rango comercial de cientos de [MW] de forma mantenida.

2.4.3 Ventajas de la fusión nuclear.

Entre las ventajas de esta fuente de energía, pueden citarse las siguientes:

- La fusión nuclear es una energía limpia, ya que no produce gases nocivos y genera residuos nucleares de baja actividad.
- Un reactor de fusión nuclear es intrínsecamente seguro, ya que la propia

reacción se detiene al cortar el suministro de combustible. No depende de ningún sistema externo de seguridad susceptible de errores.

- Es una fuente inagotable de energía, ya que el Deuterio existe en abundancia en la naturaleza y el Tritio es generado dentro del propio reactor a partir del Litio.

2.4.4 El proyecto de fusión nuclear por confinamiento magnético: el ITER

El proyecto más avanzado en fusión nuclear por confinamiento magnético es el ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor), prototipo basado en el concepto Tokamak, y en el que se espera alcanzar la ignición. Ante los buenos resultados obtenidos en el JET, en 1990 se decidió continuar el programa de fusión con una instalación mayor en la que, además del reactor, pudieran probarse sus sistemas auxiliares sin generar aún electricidad. En este proyecto participan la Unión Europea, EEUU, Japón, Rusia, China, Corea del Sur e India.²¹

El objetivo es determinar la viabilidad técnica y económica de la fusión nuclear por confinamiento magnético para la generación de energía eléctrica, como fase previa a la construcción de una instalación de demostración comercial.

ITER es un proyecto tecnológico cuya construcción se estima necesitará 10 años y al menos 20 de investigación. Entre las tecnologías empleadas para su construcción, y posterior funcionamiento y mantenimiento, destacan la robótica, superconductividad, microondas, aceleradores y los sistemas de control.

En la máquina ITER no se producirá energía eléctrica, se probarán las soluciones a los problemas que necesitan ser resueltos para hacer viables los futuros reactores de fusión nuclear. Este ambicioso proyecto de investigación dará sus primeros resultados a partir de 2050.

²¹ <http://www.iter.org/>

Las inversiones realizadas para su construcción se estiman en cerca de 5,000 millones de euros. Los costos de funcionamiento alcanzarán los 5,300 millones de euros y los de desmantelamiento ascienden a 430 millones de euros.

2.4.4 .1 Emplazamiento del ITER

En un principio, los tres emplazamientos que se disputaban el proyecto eran: Europa (Francia y España), Canadá y Japón.

El Gobierno Canadiense mostró interés por albergar el proyecto en Darlington cerca de Toronto, Japón presentó su candidatura en Rokkaishomura, Francia ofreció su centro nuclear de Cadarache y España propuso su emplazamiento en Vandellós I.

Después de un complejo proceso de evaluación tecnológica, a finales de 2003 la Comisión Europea decidió presentar como candidatura europea la francesa de Cadarache. Así, Francia representó a la Unión Europea ante las otras dos candidaturas internacionales: Canadá y Japón.

Finalmente, la candidatura ganadora fue la del sur de Francia, que es donde se está construyendo en la actualidad.

CAPÍTULO 3

Metodología

3.1 Cálculo de transporte de neutrones^{22, 23}

El objetivo del cálculo del transporte de neutrones se puede resumir, de forma muy fundamental, como la determinación del flujo neutrónico en una o varias regiones de un medio, como resultado de la presencia de una fuente de neutrones, ya sea externa o producida por el material físil.

Su objetivo es resolver la distribución de la tasa de reacciones nucleares en el marco de las condiciones de contorno de un sistema físico, tal como el núcleo de un reactor nuclear. Aquí las condiciones de contorno vienen dadas por las características geométricas, termohidráulicas y de materiales de los elementos de combustible y del núcleo, mientras que la fuente de neutrones la constituye mayoritariamente el material físil (principalmente U^{235} y Pu^{239}), disperso por la geometría del núcleo, y que supone un medio multiplicativo gracias a las reacciones de fisión.

El problema del transporte de neutrones es muy similar a otros problemas físicos de transporte, no obstante tiene algunas particularidades notables que cabe destacar:

1. Fuerte dependencia de las probabilidades de interacción de un neutrón con el medio respecto de la energía del neutrón.

²² SAMUEL GLASSTONE, Alexander Sesonske. Ingeniería de los reactores nucleares. Editorial Reverté, 1990.

²³ MODREGO CELDRAN, Jose Luis. Determinación de parámetros neutrónicos de los elementos de combustible de un PWR para uso en códigos acoplados NKTH y códigos TH con cinética puntual. Universitat Politècnica de Catalunya, abril 2010.

2. Los neutrones, al carecer de carga eléctrica, no se ven afectados por las fuerzas de Coulomb de su alrededor, lo que resulta en trayectorias rectilíneas entre dos interacciones sucesivas.

3. La probabilidad de interacción neutrón-neutrón es prácticamente nula, lo que implica linealidad en el comportamiento macroscópico de una población neutrónica.

El cálculo del transporte de neutrones se aplica principalmente al cálculo de blindajes y al cálculo de criticidad. En este trabajo sólo es de interés el segundo.

3.1.1 La ecuación del transporte de neutrones

La ecuación del transporte de neutrones describe el balance neutrónico dependiente del tiempo en un volumen diferencial (ver figura 3.1):

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t) + \hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t) = q(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t) \quad (\text{Ec.3.1})$$

donde,

\mathbf{r} : Vector posición.

v : Velocidad del neutrón.

E : Energía del neutrón.

$\psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t)$: Densidad angular neutrónica.

$\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$: Sección eficaz total macroscópica del medio.

$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t)$: Variación temporal de la densidad angular neutrónica.

$\hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ Variación del número de neutrones que abandonan (o entran) al volumen diferencial d^3r viajando en la dirección $\hat{\Omega}$.

$\Sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t)$: Interacciones que eliminan neutrones en el diferencial de ángulo y energía, ya sean capturas, reacciones de fisión o de dispersión.

$q(\mathbf{r}, \hat{\Omega}, E, t)$: Término que representa las fuentes de neutrones en el diferencial de ángulo y energía, ya sean externas, reacciones de fisión o de dispersión.

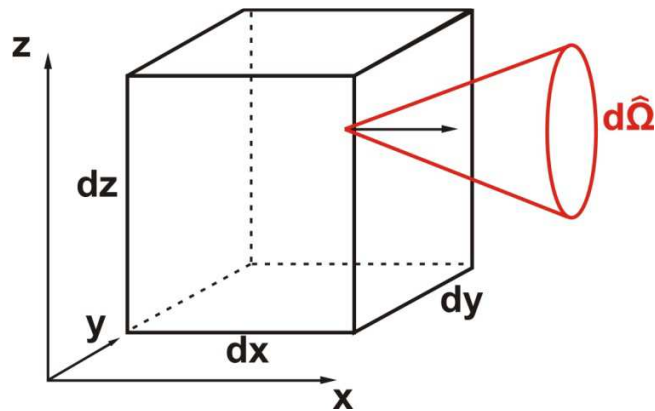


Figura 3. 1 Partícula en volumen infinitesimal d^3r , moviéndose en la dirección positiva del eje x . La energía de la partícula se encuentra en intervalo dE alrededor de un valor E dado.

Por supuesto, en la Ec. 3.1 se pueden introducir simplificaciones, como por ejemplo la que se deriva de la ausencia de dependencia temporal en caso de que los términos de fuentes y pérdidas se equilibren.

3.1.2 La teoría de difusión

Para resolver la ecuación del transporte de neutrones de forma eficaz es necesario adoptar dos métodos principales: La discretización de la variable energía y el tratamiento de la dependencia angular.

El modelo de difusión es una aproximación, ampliamente utilizada, para resolver el transporte de neutrones, y se basa en un proceso muy común en diversos campos de la física, en los que un gran número de partículas se desplazan a través de un medio permeable, de regiones de mayor concentración hacia regiones de menor concentración.

No es objeto del presente trabajo desarrollar la teoría de difusión y demostrar la ecuación de difusión, pero se cree conveniente presentar brevemente sus principales hipótesis e implicaciones de forma descriptiva.

Para empezar se realiza una integración sobre intervalos de energía de manera que los neutrones puedan ser separados por grupos. El caso más simple es discretizar en 2 grupos: neutrones térmicos y neutrones rápidos. Esto impone la aparición de la *sección eficaz de cambio de grupo*, $\Sigma_{s,g' \rightarrow g}(r)$.

Del mismo modo, se realiza una integración de (Ec. 3.1) sobre el ángulo sólido completo, de manera que aparecen los términos *flujo escalar neutrónico*, $\Phi_g(r, t)$ y *densidad de corriente neutrónica*, J_g .

La teoría de difusión sugiere que la densidad de corriente neutrónica es proporcional al gradiente del flujo, lo que implica la necesidad de definir un *coeficiente de difusión*:

$$J_g(r, t) = -D_g(r) \cdot \nabla \Phi_g(r, t) \quad \text{Ec.3.2}$$

donde,

$J_g(r, t)$: Densidad de corriente neutrónica para el grupo g .

$D_g(r)$: Coeficiente de difusión para el grupo g .

$\nabla \Phi_g(r, t)$: Gradiente del flujo escalar neutrónico para el grupo g .

Esta aproximación es conocida como la *ley de Fick*.

Según la demostración de la ley de Fick y de la teoría de difusión, la ecuación de difusión para G grupos de energía puede escribirse como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_g(r, t) - D_g(r) \cdot \nabla^2 \Phi_g(r, t) + \Sigma_{t,g} \Phi_g(r, t) \\ & = \sum_{g'=1}^G [\Sigma_{s,g' \rightarrow g}(r) \Phi_{g'}(r, t)] + \chi_g \sum_{g'=1}^G [v \Sigma_{f,g'}(r) \Phi_{g'}(r, t)] \end{aligned} \quad \text{Ec 3.3}$$

donde,

$g = 1, 2, \dots, G$

$D_g(r)$: Coeficiente de difusión para el grupo g .

χ_g : Espectro de fisiones para el grupo g , i. e. la probabilidad de que un neutrón

emitido pertenezca al grupo g .

$\Phi_g(\mathbf{r}, t)$: *Flujo escalar neutrónico para el grupo g .*

$\Sigma_{t,g}$: *Sección eficaz macroscópica total del medio para el grupo g .*

$\nu\Sigma_{f,g}(\mathbf{r})$: *Término de producción de neutrones por fisión.*

En cálculos de difusión para reactores de agua ligera, es típico considerar $G=2$, dividiendo así el espectro neutrónico en tan sólo dos grupos de energía. Los neutrones con una energía por encima de 0.625 [eV] se identifican como *grupo rápido* y los que no superan dicho límite forman el *grupo térmico*. Este límite se escoge de manera que, en el espectro neutrónico típico de un LWR, el pico térmico quede situado completamente por debajo de él.

Existen otros planteamientos más complejos que la teoría de difusión para resolver el transporte neutrónico de manera efectiva, y que implementan algunos códigos de cálculo deterministas, como:

- El Método de las Características.
- El Método de la Probabilidad de Colisión.
- El Método de las Ordenadas Discretas (S_n).
- Método de los Armónicos Esféricos (P_n).

La teoría de difusión es equivalente al primer orden de los armónicos esféricos (P_1).

3.1.3 Métodos de cálculo y estado del arte

En la práctica existen dos maneras fundamentales de realizar el cálculo del transporte neutrónico, o bien se resuelven un conjunto de ecuaciones analíticamente, o por iteración mediante un código determinista, haciendo uso de los fundamentos planteados en las secciones previas, o bien se utilizan métodos probabilistas basados en simular las interacciones de un gran número de partículas (neutrones) con el llamado método de Monte Carlo.

3.2 Códigos Deterministas

Los códigos deterministas se caracterizan por resolver analíticamente (aunque a menudo iterativamente) un conjunto de ecuaciones con base en unas hipótesis que se corresponden con alguno de los métodos enumerados anteriormente. Algunos hacen uso de la teoría de difusión, aunque los más extendidos suelen emplear métodos más avanzados.

Una característica intrínseca a la aproximación determinista es la necesidad de trabajar con grupos de energía, de manera que se pierde cierto contacto con la naturaleza continua de la variable energía del neutrón. Sin embargo, los códigos deterministas son empleados muy exitosamente en la tarea del cálculo neutrónico gracias al gran desarrollo y base científica que suele haber tras ellos y al hecho de que producen resultados con mucha velocidad, requiriéndose, por tanto, menos recursos computacionales a la hora de resolver un mismo problema, si se comparan con los métodos de Monte Carlo.

3.3 Datos nucleares evaluados^{24, 25}

Los datos de interacción neutrónica utilizados en cada uno de los códigos específicos, se derivan de ciertos archivos de referencia denominados librerías de datos nucleares evaluados (ENDF, por sus siglas en inglés). A continuación se describe el proceso de elaboración de estas librerías.

En primer lugar se realizan medidas experimentales de las interacciones fundamentales entre los neutrones y núcleos de los diferentes elementos. Esto se realiza mediante un dispositivo experimental formado por una fuente de neutrones, una muestra de material objetivo y múltiples detectores, y se determina, por diferentes técnicas, las secciones eficaces microscópicas de las reacciones pertinentes. Esta tarea se realiza en diversos laboratorios alrededor del mundo. En Europa uno de estos laboratorios es el *Institute for Reference Materials and Measurements* (IRMM) situado en Geel, Bélgica. Estos datos experimentales se almacenan en formato EXFOR y se mantienen y distribuyen a través de centros NRDC (*Nuclear Reaction Data Centres*) de la *International Atomic Energy Agency* (IAEA), como por ejemplo, el propio banco de datos de la Agencia de Energía Nuclear (NEA, por sus siglas en inglés).

En segundo lugar, se evalúan las medidas experimentales contrastándolas con los modelos nucleares teóricos y se eliminan los datos erróneos o poco confiables. La ausencia de datos para determinados materiales y/o regiones de energía se complementan con estos modelos teóricos. Se elaboran de este modo conjuntos de curvas para todas las secciones eficaces.

En tercer lugar se validan estos datos nucleares evaluados con herramientas puramente matemáticas y/o comparándolos con experimentos integrales. Algunas de

²⁴ TICSE TORRES, Royer Edson. Obtención de bibliotecas de datos nucleares para MCNP desde librerías ENDF/B-VII con NJOY adecuados para el RP-10. Facultad de Ciencias. Escuela Profesional de Física. Universidad Nacional de Ingeniería, diciembre 2010.

²⁵ LEPPÄNEN, J. *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*. D.Sc. Thesis, Helsinki University of Technology 2007.

estas herramientas son los *handbooks* del *International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project* (ICSBEP) y del *International Reactor Physics Experiment Evaluation Project* (IRPhEP). El primero se centra en cálculos de criticidad, mientras que el segundo cubre un espectro más amplio de parámetros físicos de reactores.

Tras validarlos, los datos se convierten a formato estándar para su distribución. Actualmente el formato utilizado mundialmente es el ENDF-7 americano. Este formato finalmente contiene información de las secciones eficaces, espectros, distribuciones angulares, decaimiento radiactivo, generación de productos de fisión, dispersión térmica, etc., poniendo énfasis en las reacciones producidas por neutrones. Los archivos están mantenidos por el *US Cross Section Evaluation Working Group* (CSEWG). Existen tres principales proyectos de evaluación en el mundo, el americano ENDF/B, el europeo occidental JEFF y el japonés JENDL.

La figura 3.2 muestra un diagrama que ilustra el proceso de creación y validación de los datos nucleares evaluados¹⁹.

El formato ENDF-7 mantiene toda la precisión de los datos originales. No es accesible directamente por los códigos de cálculo de transporte, sino que es necesario un pre-procesado para generar las librerías de datos específicas para cada código. El software más usado a tal propósito es NJOY que puede generar librerías de energía continua o multigrupo.

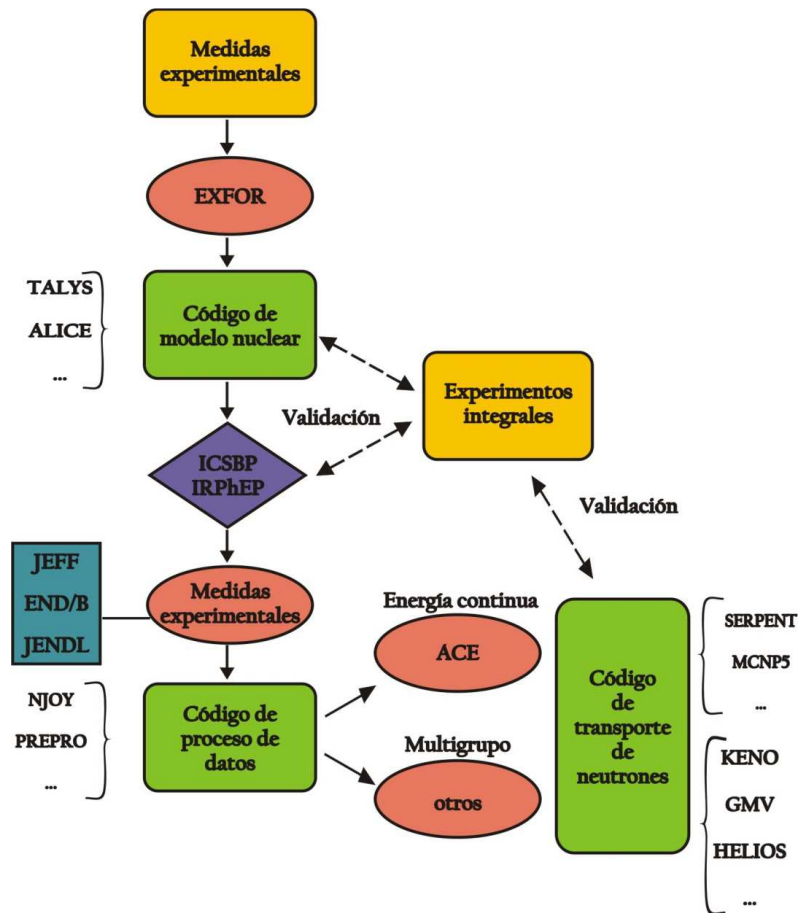


Figura 3. 2 Diagrama del proceso de creación y validación de los datos nucleares evaluados

Las librerías ENDF son datos nucleares que describen secciones eficaces de reacciones nucleares, la distribución en energía y ángulo de productos de reacción, la variedad de núcleos producidos durante las reacciones nucleares, los modos de decaimiento, el espectro de productos resultantes de la desintegración de los núcleos radiactivos, y los errores estimados en estas cantidades. Las primeras versiones estaban destinadas a reactores térmicos: ENDF/B-IV-V, luego incluyó reactores rápidos y aplicaciones de fusión. Para ENDF/B-VI posee extensiones para partículas cargadas y aplicaciones de aceleradores.

La librería ENDF/B-VII está dividida en 14 sub-librerías, por lo general representan los proyectiles:

N- librería de neutrones incidentes (393 materiales).
P- librería de protón incidente (48 materiales).
D- librería de deuterón incidente (5 materiales).
T- librería de tritio incidente (3 materiales).
HE3- librería de ^3He incidente (2 materiales).
GN- datos foto-nucleares (163 materiales).
GAI- datos de interacción foto-atómica (100 materiales).
RDD- datos de decaimiento radiactivo (3838 materiales).
TSL- datos de *scattering* térmico (20 materiales).
SFY- rendimiento de productos de fisión espontánea (9 materiales).
NFY- rendimiento de productos de fisión inducidos por neutrón (31 materiales).
STD- sección eficaz estándar (8 materiales).
EAD- datos de interacción electro-atómica (100 materiales).
AR- datos de relajación atómica (100 materiales).

Para la obtención de las librerías del código Serpent sólo se usaron las del tipo neutrón incidente.

3.4 Método Monte Carlo

El método Monte Carlo es un método numérico que permite resolver problemas físicos y matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias. El método Monte Carlo fue bautizado así por su clara analogía con los juegos de ruleta de los casinos, el más célebre de los cuales es el de Monte Carlo, casino cuya construcción fue propuesta en 1856 por el príncipe Carlos III de Mónaco, siendo inaugurado en 1861.

La importancia actual del método Monte Carlo se basa en la existencia de problemas que tienen difícil solución por métodos exclusivamente analíticos o numéricos, pero

que dependen de factores aleatorios o se pueden asociar a un modelo probabilístico artificial (resolución de integrales de muchas variables, minimización de funciones, etc.). Gracias al avance en el diseño de las computadoras, cálculos Monte Carlo que en otro tiempo hubieran sido inconcebibles, hoy en día se presentan como factibles para la resolución de ciertos problemas. En estos métodos el error es de $1/\sqrt{N}$, donde N es el número de pruebas y, por tanto, ganar una cifra decimal en la precisión implica aumentar N en 100 veces. La base es la generación de números aleatorios que nos ayuda a calcular probabilidades. Conseguir un buen generador de estos números, así como un conjunto estadístico adecuado para trabajar, son las primeras dificultades con las que hay que lidiar a la hora de utilizar este método.

El código de Monte Carlo, cuya base es la teoría de probabilidades, se puede usar para simular el camino y las interacciones de un gran número de partículas, en este caso neutrones, recolectando los resultados individualmente como si se tratara de un experimento físico. Así pues la fortaleza del método reside en que permite realizar estimaciones estadísticas de las tasas de reacción integrales sin necesidad de calcular la distribución del flujo.

Básicamente la idea es simular el movimiento de un neutrón a través de la geometría del sistema y asociar una probabilidad a cada evento posible durante toda su vida, ya sea una reacción de dispersión elástica, fisión, captura, etc. Mediante la generación de números pseudoaleatorios, y utilizados al azar, se evalúa cuál de estos eventos sucede en cada caso.

Un proceso estocástico relacionado con una variable aleatoria x , se caracteriza por una función de distribución $f(x)$, de manera que la probabilidad de que un suceso tenga lugar entre x y $x+dx$ viene dada por:

$$dP = f(x) dx$$

Así la probabilidad de que el suceso tenga lugar en un intervalo $[a,b]$ de la variable es:

$$P(a < x < b) = \int_a^b f(x) dx$$

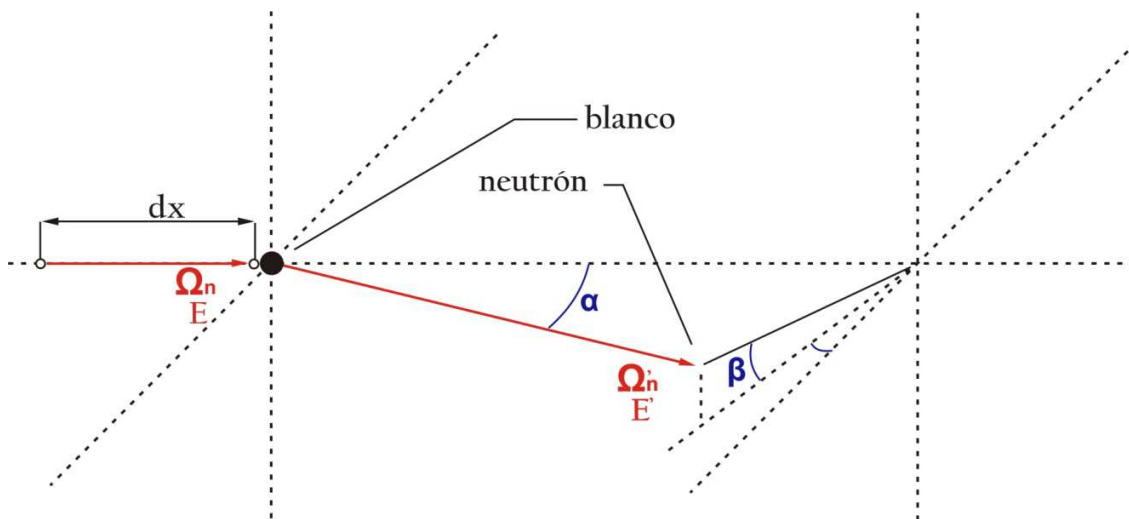


Figura 3.3 Reacción de dispersión elástica de un neutrón recorriendo una longitud dx en un medio.

Es evidente que aunque el método se basa en la simulación de sucesos discretos, el tratamiento estadístico de un elevado número de éstos proporciona la información necesaria para determinar las magnitudes físicas que interesan para el cálculo del transporte neutrónico.

Una de las ventajas es la posibilidad de trabajar con una resolución de la energía de los neutrones tan precisa como se desee, o como permitan los datos de interacción neutrónica, dado que a cada neutrón que es simulado se le asocia un valor de energía determinado por una función de distribución de probabilidad y un número pseudoaleatorio, y tras cada colisión que sufre el neutrón, la energía de éste se vuelve a determinar de igual forma. De esta manera no hay una posible pérdida de la información durante la simulación.

La principal desventaja es que requiere recursos de computación, ya sea en tiempo o hardware, varios órdenes de magnitud por encima de los métodos deterministas, por lo que su aplicación ha quedado tradicionalmente limitada a cálculos a pequeña y media escala o como herramienta de validación de códigos deterministas.

El método Monte Carlo permite simular cualquier sistema físico mediante un procedimiento matemático con gran precisión para aplicaciones en Protección Radiológica, Física Médica y en particular en Radioterapia. De hecho, el número creciente de publicaciones en este campo lo refrenda como un método de cálculo disponible en muchos servicios de Física Médica. El código Monte Carlo utilizado varía según la aplicación, sin embargo, el costo del aprendizaje hasta alcanzar un punto de efectividad adecuado hace que el código sea más dependiente del grupo investigador más que de la aplicación concreta o el tipo de simulación.

3.5 Código SERPENT

SERPENT es el código que utilizamos en esta tesis, y un software de cálculo de transporte neutrónico y de quemado, basado en el método de Monte Carlo en energía continua. Fue desarrollado en el *VTT Technical Research Centre of Finland* y está especializado en cálculos para geometrías bidimensionales que se encuentran generalmente en la física de reactores (*lattices*), como barras y elementos de combustible. Sin embargo, la descripción geométrica que implementa, está basada en universos, y permite modelar geometrías tridimensionales complejas.

Es un código que inició su desarrollo en 2004 como tesis doctoral de Leppänen, J. y es accesible públicamente en la *Nuclear Energy Agency (NEA)* a través del *OECD / NEA Data Bank* desde mayo de 2009. Las principales características que componen el núcleo del código, y que permiten realizar el presente trabajo, están validadas, aunque su desarrollo continúa hoy en día añadiendo nuevas funcionalidades y subrutinas sugeridas por los usuarios, siendo la experiencia acumulada tanto por éstos como por los desarrolladores, mutuamente enriquecedora.

Las aplicaciones más usuales de SERPENT son:

- Generación de constantes de grupo homogeneizadas para cálculos con simuladores de reactores deterministas.
- Estudios de ciclo de combustible que involucra cálculos detallados de quemado a nivel de elemento de combustible.
- Validación de códigos de transporte deterministas.
- Física de reactores de núcleo completo y cálculos de quemado para reactores de investigación.
- Propósitos académicos y demostración de fenómenos de física de reactores.

Debido a que SERPENT no resuelve la ecuación del transporte de neutrones, sino que simula el camino recorrido y las interacciones de un gran número de éstos utilizando complejas variaciones en espacio y energía, almacena individualmente los resultados como si de un experimento físico real se tratase.

Algunas de sus características fundamentales son:

- Características geométricas específicas para el diseño del combustible. Estas características incluyen definiciones simplificadas de pin de combustible, partículas esféricas de combustible, reticulados cuadrados y hexagonales para reactores de agua ligera (LWR) y matrices circulares para reactores CANDU. También se incluyen subrutinas para modelar partículas de combustible de reactores de alta temperatura (HTR) y de cama de esferas (*pebble-bed reactor*).
- Transporte de neutrones basado en el método convencional *ray-tracking* en combinación con el método *Woodcock delta-tracking*. Esta metodología permite reducir considerablemente el tiempo de cálculo en comparación con otros códigos.
- Tratamiento continuo de la energía de los neutrones. SERPENT lee secciones eficaces de energía continua en formato ACE (ascii) basadas en la cinemática de

colisión clásica y en las leyes de reacción ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*). Esto permite usar las mismas librerías que emplean códigos similares pero más extendidos, como el MNCP.

- Formato de red de energía modificado. Tras leer las secciones eficaces de las librerías de energía continua se reconstruye una única red de energía para todos los tipos de reacción y material. Ésta será usada durante todo el cálculo en lugar de reconstruir la red para cada material cada vez que un neutrón se encuentra en una región de dicho material. Esta técnica reduce considerablemente el tiempo de computación pero hace un uso más intensivo de la memoria física del hardware.
- Rutina de ensanchamiento Doppler. Ésta permite convertir las secciones eficaces leídas en formato ACE (ascii) a una temperatura mayor definida por el usuario permitiendo una mejor descripción de las interacciones físicas.
- Cálculos de quemado de combustible resolviendo las ecuaciones de *Bateman* por dos métodos diferentes. El primero se basa en la solución analítica de las cadenas de desintegración linealizadas, llamado análisis de trayectoria de transmutación (TTA). El segundo es el método de aproximación racional *Chebyshev* (CRAM), una solución de matrices exponenciales avanzada desarrollada en el propio *VTT*.
- Posibilidad de paralelizar los cálculos empleando varios CPU's. El protocolo que emplea SERPENT es el estándar MPI (*Message Passing Interface*).
- *Output* escrito en formato ".m" (interpretable por MATLAB u OCTAVE).

Capítulo 4

SIMULACIÓN DE MODELOS

En este capítulo se presentan las simulaciones realizadas con el código de Monte Carlo SERPENT, así como los resultados obtenidos de los diferentes casos analizados. La primera tarea fue la de validar el uso de SERPENT.

4.1 Validación

Con el fin de verificar la conveniencia de usar el código SERPENT para garantizar resultados favorables en este trabajo, se realizaron algunos ejercicios comparativos con otros códigos previamente validados. Concretamente se comparan resultados obtenidos con el código MCNPX²⁶ para combustibles analizados en trabajos previos*.

La primera comparación se realizó con el combustible de un reactor rápido enfriado por sodio.

El diseño de la sección horizontal del ensamblaje combustible está basado en una malla hexagonal con 91 varillas de combustible incrustadas en un prisma hexagonal. Los ensamblajes hexagonales, que forman el núcleo del reactor, están configurados como se muestra en la Figura 4.1.

²⁶ Los Alamos National Laboratory. <https://mcnpx.lanl.gov>.

* “Desarrollo de modelos para el diseño y optimización de combustible de un reactor nuclear modular de helio con turbina de gas”. Dionisio Telésforo Reyes. Doctorado en Ingeniería en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México. Octubre 10, 2012.

“Diseño y análisis de combustible de un reactor nuclear rápido de onda viajera”. Roberto Carlos López Solís. Doctorado en Ingeniería en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México.

“Desarrollo de modelos para el diseño de combustible de un reactor nuclear rápido enfriado por gas”. Ricardo Reyes Ramírez. Doctorado en Ingeniería en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México.

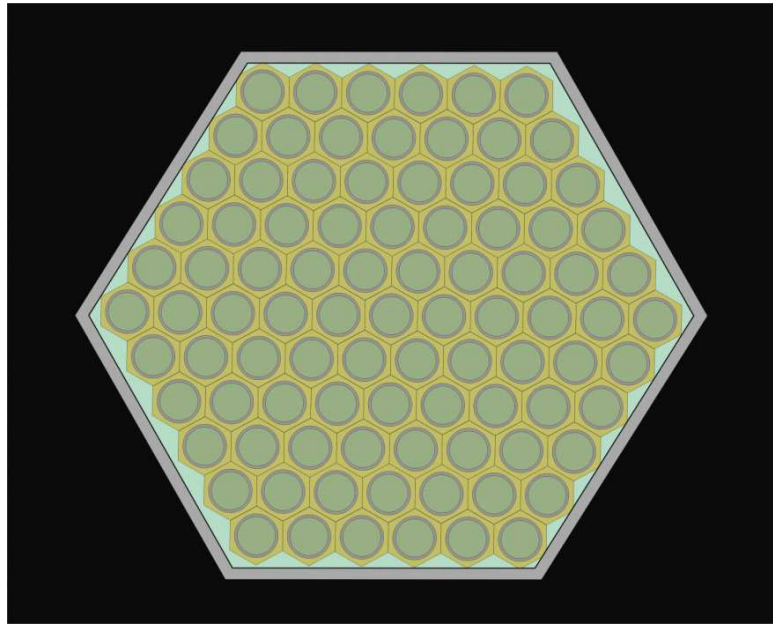


Figura 4. 1 Descripción geométrica del modelo SFR (SERPENT).

Con el objetivo de simplificar los cálculos de quemado del combustible y disminuir el tiempo requerido en la corrida de los ejercicios, los cálculos del quemado se realizaron para un modelo homogéneo. El núcleo consta de una mezcla homogénea de combustible, refrigerante y material estructural. La razón de estas proporciones, se debe, a que los ejercicios realizados previamente con el código MCNPX, tenían esta composición.

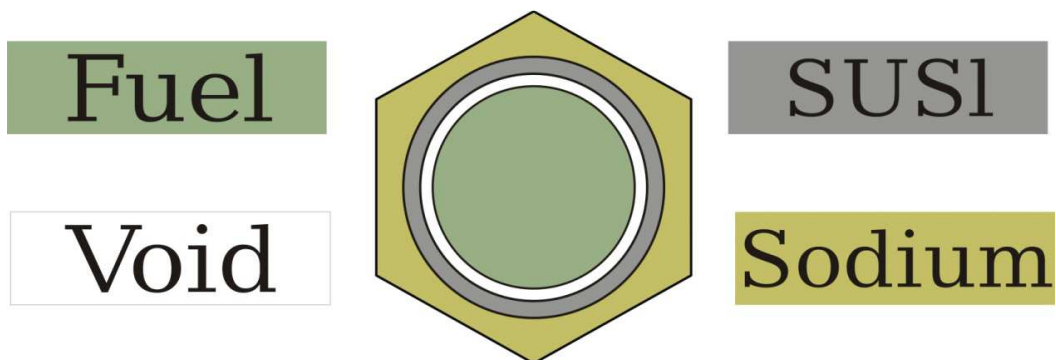


Figura 4. 2 Celda básica del combustible del modelo SFR.

SERPENT admite la definición de la composición de los materiales en fracción másica o en fracción atómica, pero no una descripción mixta, esto, en algunas ocasiones puede presentar algún inconveniente debido al tipo de datos disponibles respecto a la composición del combustible.

Este modelo de ensamble de combustible consta de un arreglo de varillas de combustible en forma de malla hexagonal. Cada varilla es la parte fundamental del combustible y está compuesta por los siguientes materiales (ver Figura 4.2):

- "Fuel", compuesto por la mezcla del combustible, centrado en la celda con forma de un cilindro circular recto.
- "Void", es un volumen vacío, también con forma de cilindro circular recto, que rodea al combustible y ayuda a dar un espacio a los gases de fisión y a la dilatación de las partículas de combustible generadas por la irradiación y las altas temperaturas.
- "Susl", es el encamisado, un volumen cilíndrico compuesto de acero cuya función es la de contener al combustible y a los productos de fusión.
- "Sodium", es el refrigerante de sodio que se asimila como un volumen con forma de prisma hexagonal, que se asocia a cada varilla de combustible, y que fluye por el interior del ensamble hexagonal.

En la siguiente tabla se presentan las características de cada uno de los materiales del combustible, y que fueron utilizadas en la simulación con Serpent.

Tabla 4.1 Características de los materiales del combustible utilizados en el modelo SFR (SERPENT).

	Material	Densidad atómica [átomos/b*cm]	Fracciones atómicas	Temperatura [°C]	Geometría	Radio/apotema (exteriores) [cm]
Combustible (fuel)	U ²³⁵	4.8059E-02	0.15363	1200	Varilla cilíndrica	0.449433
	U ²³⁸		0.79637			
	Zr		0.05	600		
Huelgo (void)	vacío	0			Tubo cilíndrico	0.468052
Encamisado (SUSI)	C	8.3924E-02	0.0092885	300	Tubo cilíndrico	0.557939
	Si		0.0079001			
	V		0.0032730			
	Cr		0.1220374			
	Fe		0.8399668			
	Ni		0.0047192			
	Mn ⁵⁵		0.0055452			
	Mo		0.0057631			
W	0.0015069					
Refrigerante (sodium)	Na	2.541E-02	1	300	Prisma hexagonal	1.24557
Canal del ensamble	SUSI			300	Prisma hexagonal	8.3107917

4.2 Simulaciones con quemado de combustible

4.2.1 Factor de multiplicación de neutrones

Se realizaron 21 pasos de quemado; por cada paso se calcularon los valores del factor infinito de multiplicación de neutrones (K_{inf}), en función del quemado del combustible. Se compararon los resultados obtenidos con MCNPX y SERPENT. De este último se tomaron dos resultados diferentes, teniendo como única diferencia en los datos de entrada, diferentes librerías: para el caso "SFR20" se utilizó la librería jeff31u, la cual es una librería europea, y para el caso "SFR30" la endfb68u, que es una librería norteamericana, y que es la misma que utiliza MCNPX, por lo que los resultados de este último caso son los más parecidos a los de MCNPX. En la Figura 4.3 y en la Tabla 4.2 se muestra la comparación:

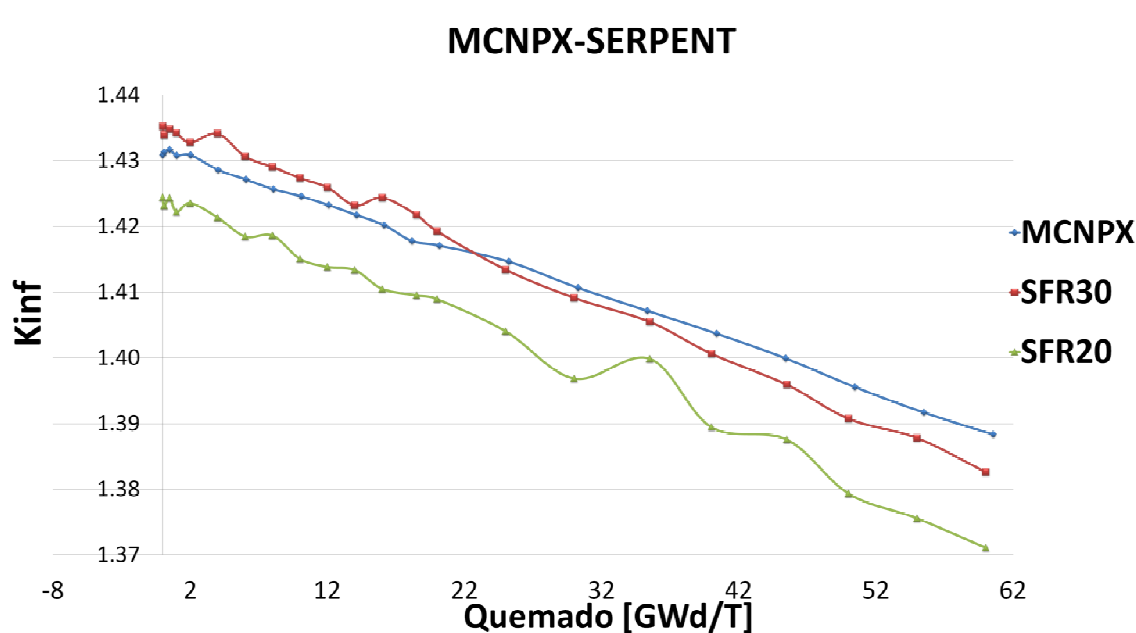


Figura 4.3 Comparación de los valores de K_{inf} para MCNPX y SERPENT (SFR20 y SFR30).

Tabla 4.2 Valores de K_{inf} para el reactor rápido refrigerado por sodio, simulado en MCNPX y SERPENT (SFR20 y SFR30)

Quemado (GWd/T)	MCNPX	SERPENT		%EE	
	K_{inf}	K_{inf} SFR20	K_{inf} SFR30	SFR20	SFR30
0	1.43092	1.42439	1.43521	0.2998	0.2998
0.1	1.4313	1.42315	1.43392	0.5694	0.1831
0.5	1.43167	1.42434	1.43485	0.5120	0.2221
1	1.43081	1.42219	1.43425	0.6025	0.2404
2	1.43088	1.42355	1.4328	0.5123	0.1342
4	1.42861	1.42136	1.43413	0.5075	0.3864
6	1.42715	1.41847	1.43065	0.6082	0.2452
8	1.42568	1.41863	1.42905	0.4945	0.2364
10	1.42458	1.41507	1.42737	0.6676	0.1958
12	1.42323	1.41383	1.42594	0.6605	0.1904
14	1.42173	1.41339	1.42321	0.5866	0.1041
16	1.42019	1.4105	1.42438	0.6823	0.2950
18.5	1.41779	1.40952	1.42176	0.5833	0.2800

20	1.41709	1.40895	1.41927	0.5744	0.1538
25	1.41464	1.40405	1.41344	0.7486	0.0848
30	1.41067	1.39688	1.40914	0.9775	0.1085
35.5	1.40719	1.3999	1.4055	0.5181	0.1201
40	1.40372	1.38947	1.40066	1.0152	0.2180
45.5	1.39996	1.38757	1.39594	0.8850	0.2872
50	1.39559	1.37935	1.39077	1.1637	0.3454
55	1.39171	1.37558	1.38781	1.1590	0.2802
60	1.38836	1.3711	1.38263	1.2432	0.4127

Donde

$$\%EE = \left| \frac{K_{\text{inf}}(\text{MCNPX}) - K_{\text{inf}}(\text{SERPENT})}{K_{\text{inf}}(\text{MCNPX})} \right| 100$$

En la figura 4.3 cabe notar la variabilidad de los resultados producidos por un mismo código mediante evaluaciones con diferentes datos; está en el mismo orden de magnitud que la propia variabilidad entre los dos códigos. De donde se destaca la importancia de la librería utilizada

Se observa que los factores de multiplicación infinita (k_{inf}) de los tres modelos son muy similares y tienen un comportamiento lineal con el tiempo de quemado, teniendo que la curva de SFR30 se asemeja más a la obtenida con MCNPX. Los valores más alejados se encuentran en los últimos pasos de quemado. Esto puede ser causado por el acarreo de las diferencias del cálculo de las composiciones de los actínidos, y de los productos de fisión, que se van acumulando con el quemado del combustible.

Para este caso, k_{inf} y el factor efectivo de multiplicación de neutrones (k_{eff}) son equivalentes ($k_{\text{eff}} = k_{\text{inf}} = \eta \cdot f \cdot p \cdot \epsilon$) debido a que los factores restantes son iguales a 1, ya que se trata de la probabilidad de no-fuga de neutrones rápidos y térmicos respectivamente, puesto que el ensamble está simulado en medio infinito y no hay fugas.

Para poder realizar los cálculos se necesitan datos de control de criticidad, para el transporte de neutrones. Para esto se siguieron 5000 historias de neutrones durante 230 ciclos, de los cuales, por fines estadísticos del cálculo de la criticidad, los primeros 30 no se tomaron en cuenta, por lo cual, en total se simularon un millón de historias. También se utilizó la condición de frontera de reflexión en el ensamble, práctica habitual en los cálculos de criticidad, con lo que se simula un medio multiplicativo infinito.

Durante un cálculo de quemado de combustible, el código en primer lugar plantea un problema de criticidad en el que se simulan las sucesivas generaciones de neutrones en el sistema y se recogen los resultados según el método habitual de Monte Carlo. De esta manera se obtiene un estimador del flujo neutrónico y de las tasas de las distintas reacciones para todos los isótopos definidos en el sistema, con los cuales se realiza el cálculo del paso de quemado.

4.2.2 Densidades atómicas

Además del cálculo del factor de multiplicación de neutrones, se le dio seguimiento a algunos isótopos representativos, para los tres conjuntos de datos. Si se consideran todos los isótopos generados durante el quemado se utiliza una gran cantidad de recursos computacionales, corriendo el riesgo de saturar y no hacer posible el cálculo, esto depende de la complejidad de composiciones y de la geometría del sistema. Los isótopos analizados se pueden agrupar en tres clasificaciones:

- Elementos del combustible, que son los isótopos que componen el combustible (U^{235} y U^{238}).
- Actínidos, los cuales se forman a partir de la captura de neutrones hecha por el combustible (Np^{239} , Pu^{239} y Pu^{241}).
- Productos de fisión, resultantes de las reacciones de fisión (Xe^{135} , Cs^{137} y Sm^{147}).

Se consideraron estos isótopos con el fin de darle seguimiento a la composición del combustible, isótopos que puedan generar nuevo combustible, y productos de fisión importantes, ya que son venenos neutrónicos, y su presencia puede llevar a la imposibilidad de alcanzar la criticidad en algunas situaciones.

En las siguientes figuras se presentan las gráficas de las comparaciones de algunos isótopos representativos, en donde se observa que en todos los isótopos el acuerdo entre MCNPX y SERPENT es muy bueno, y aún mejor con la librería JEFF31.

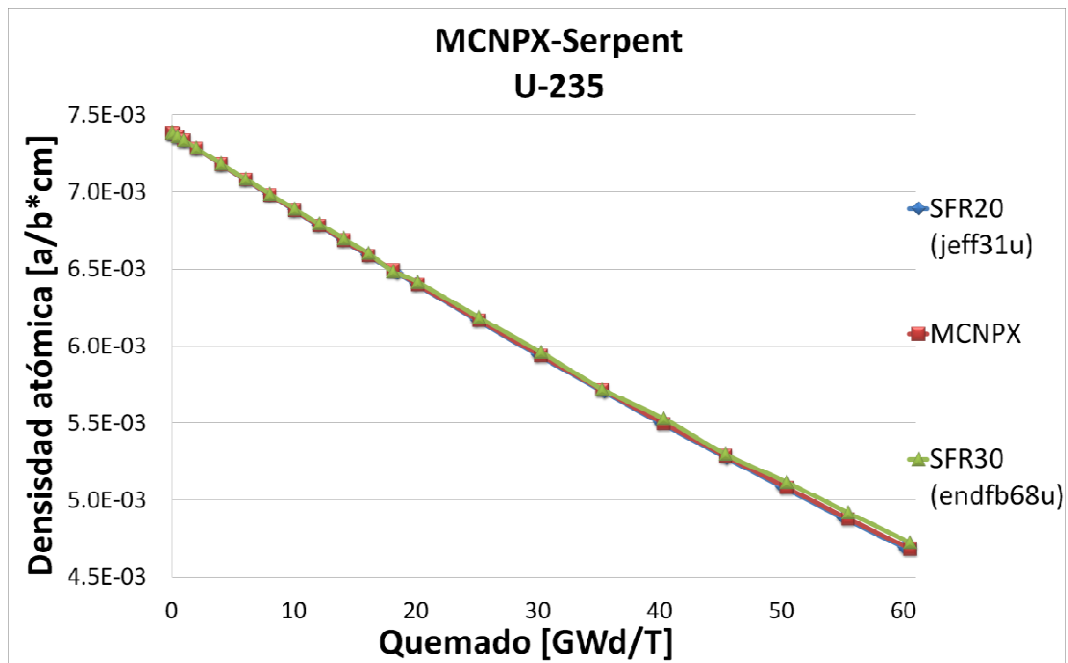


Figura 4. 4 Variación de la densidad atómica del U235 en función del quemado del quemado del combustible.

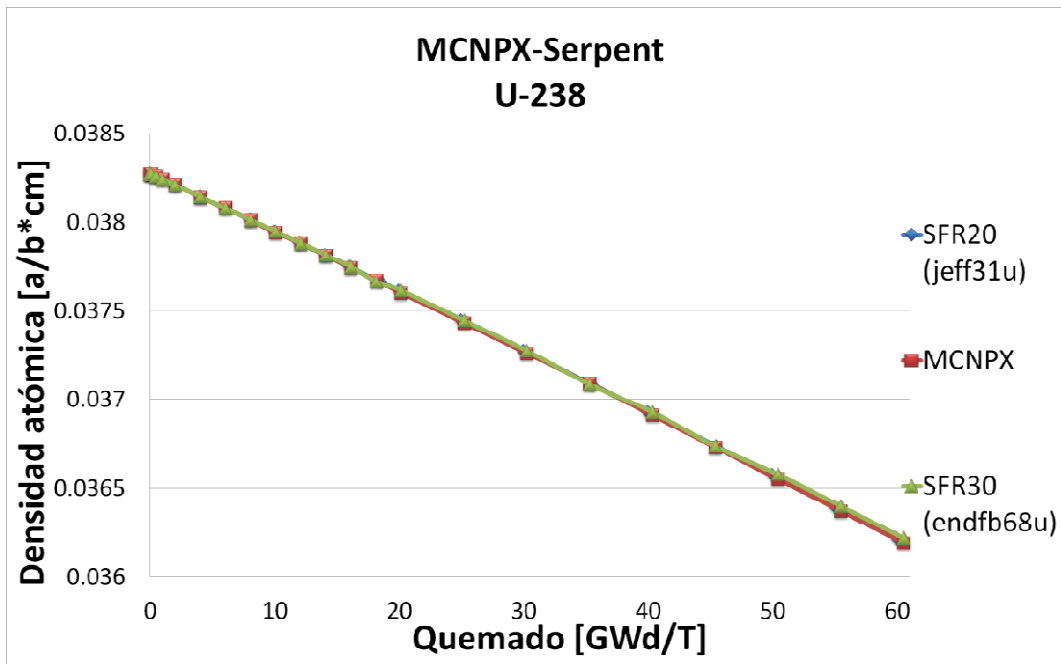


Figura 4.5 Variación de la densidad atómica del U238 en función del quemado del quemado del combustible.

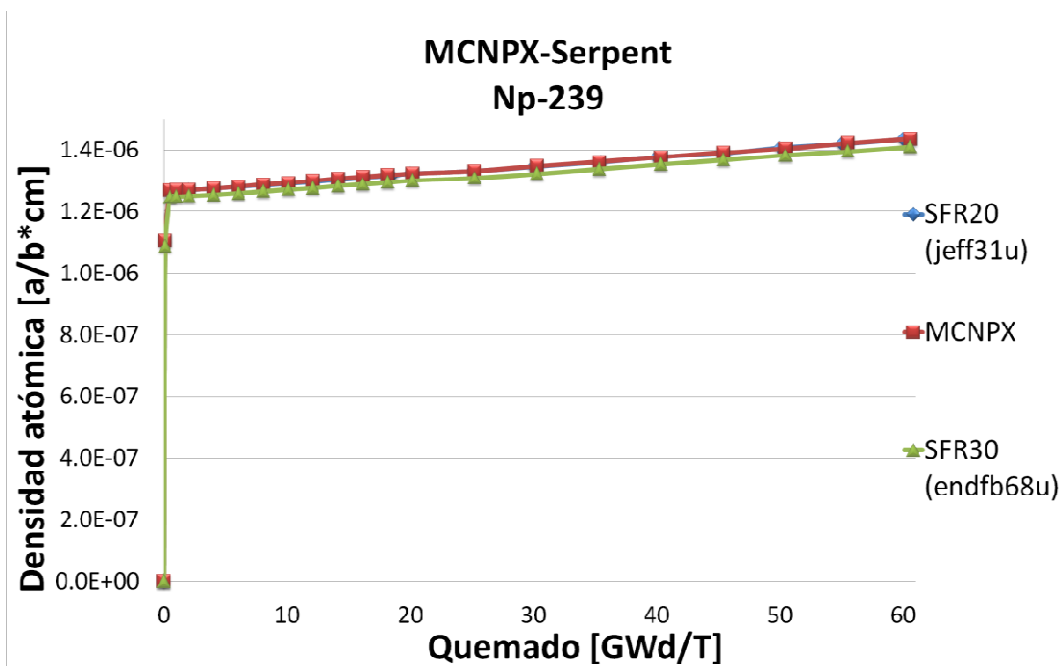


Figura 4.6 Variación de la densidad atómica del Np239 en función del quemado del quemado del combustible.

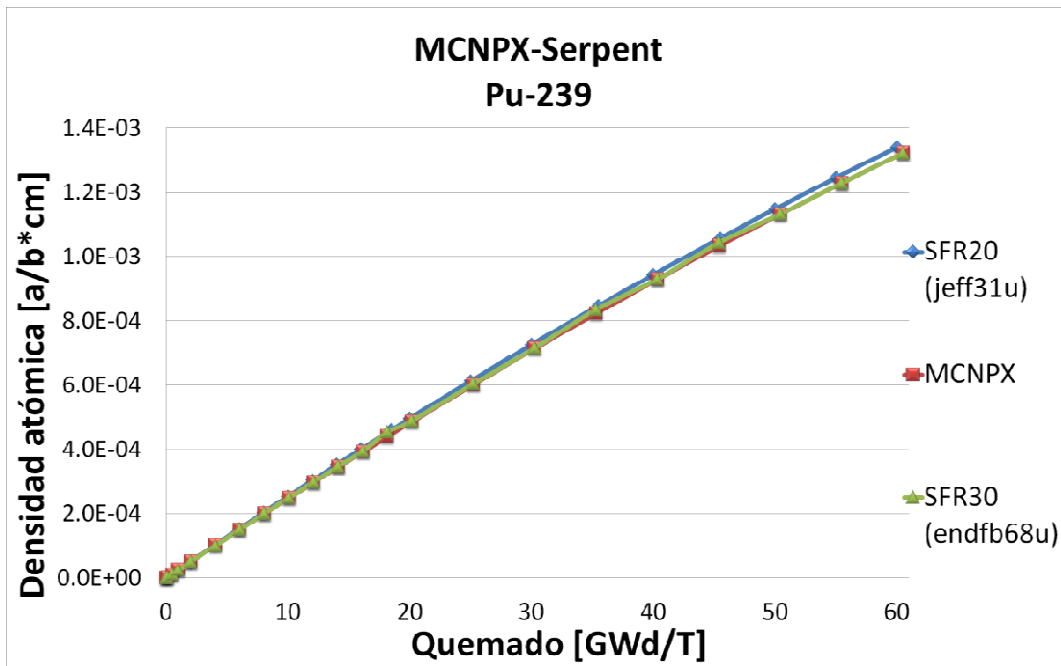


Figura 4. 7 Variación de la densidad atómica del Pu239 en función del quemado del quemado del combustible.

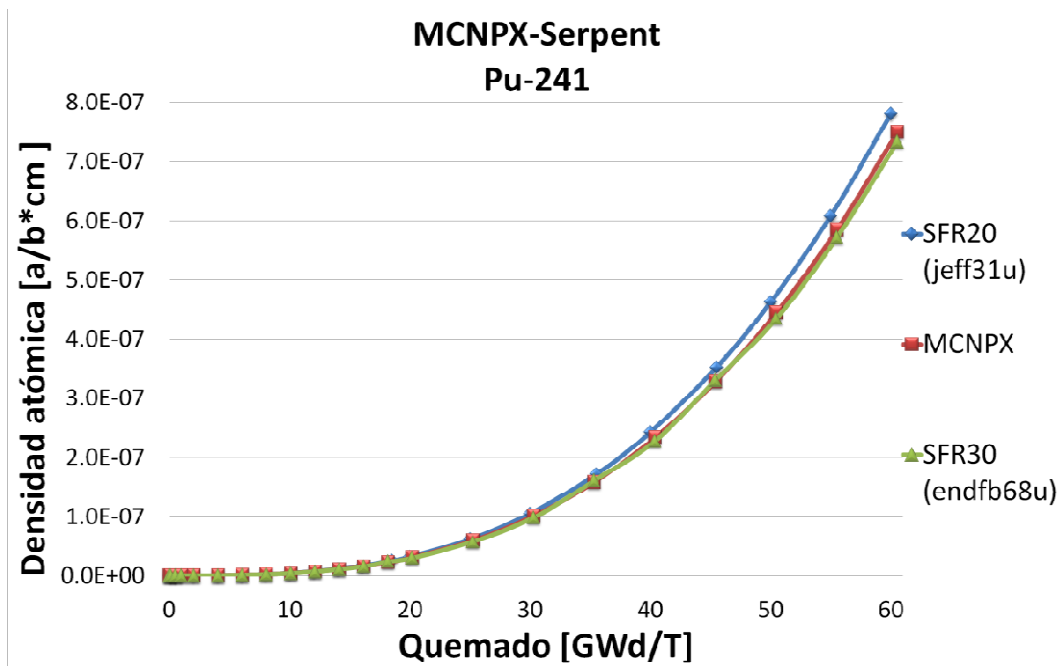


Figura 4. 8 Variación de la densidad atómica del Pu241 en función del quemado del quemado del combustible.

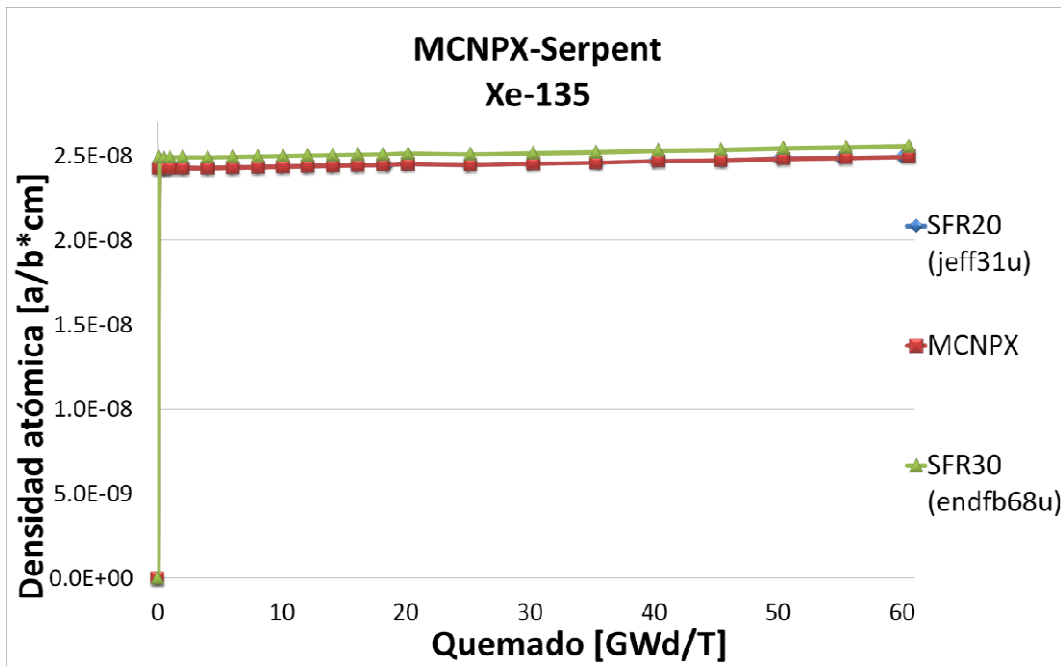


Figura 4. 9 Variación de la densidad atómica del Xe135 en función del quemado del quemado del combustible.

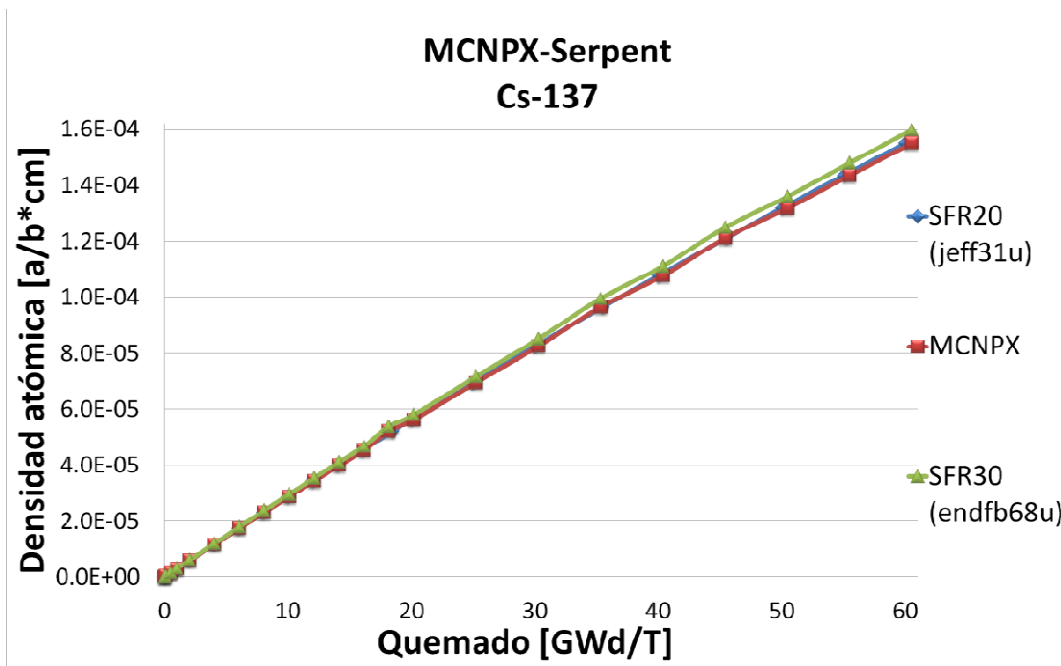


Figura 4. 10 Variación de la densidad atómica del Cs137 en función del quemado del quemado del combustible.

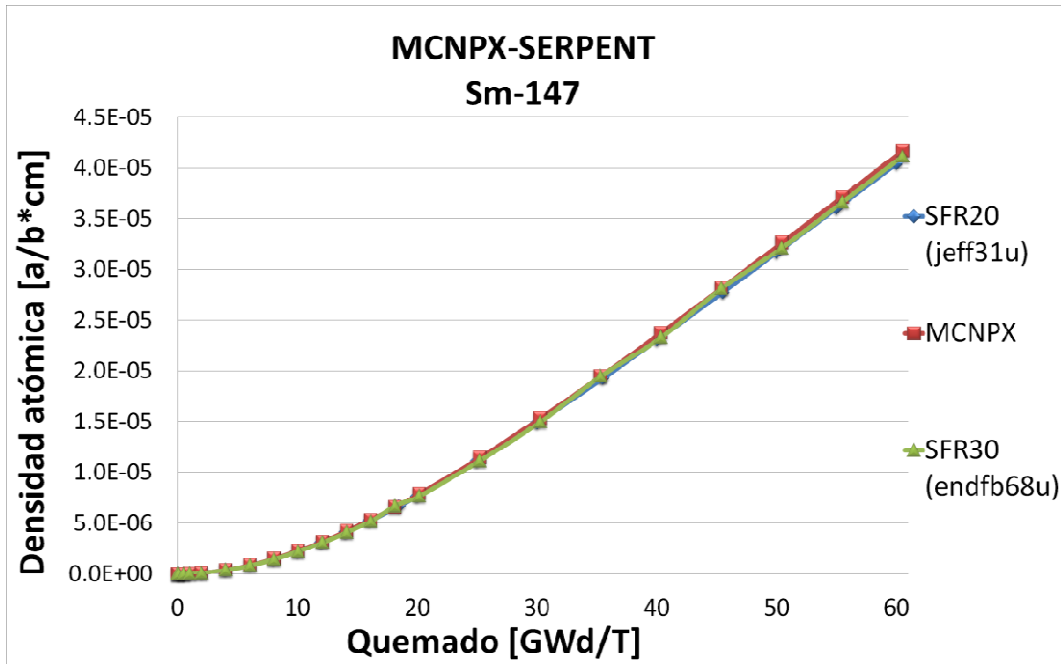


Figura 4. 11 Variación de la densidad atómica del Sm-147 en función del quemado del quemado del combustible.

4.2.3 Distribución de potencia

Para la elaboración de este trabajo, SERPENT se compiló en el sistema operativo LINUX, en concreto en la distribución Fedora17 (instalado en una computadora Hewlett Packard Pavilion p3530la con procesador Intel Core i3 540, 3.06 [GHz], disco duro de 1 [Tb] y memoria RAM de 4 [Gb]), dicho código proporciona como resultados diferentes archivos con software de código libre, entre ellos archivos con extensión “.m”

Para poder interpretar mejor algunos resultados se elaboró un pequeño programa utilizando el programa Octave para obtener la distribución de potencia en el ensamble combustible. Dicho programa se muestra a continuación:

```

clear;

sfr_res;

a=max(BURN_STEP);

z=POWDISTR110(a,:);

b=max(max(LAT110));

c=b*b*2

w=z(1,1:2:c);

t=reshape([w],b,b);

x = 1:1:b;

y = x ;

[X,Y]=meshgrid(x,y);

mesh(X,Y,t);
shading interp;
view(2);

```

El programa consiste en hacer una malla ó cuadrícula con la cantidad de elementos establecidos en la geometría del combustible de la simulación y asignar el valor de la potencia obtenido.

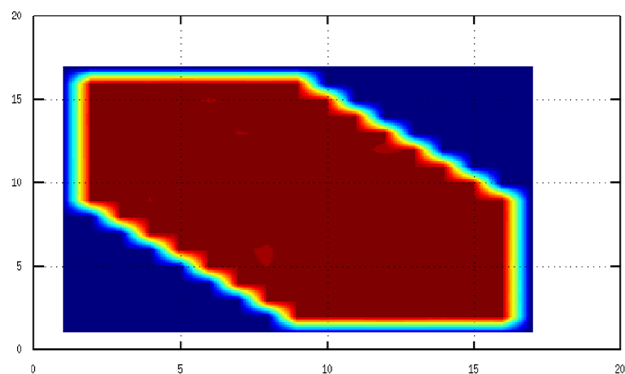


Figura 4. 12 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo SFR, en el plano XY.

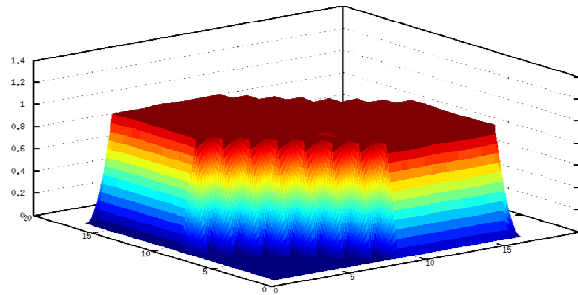


Figura 4. 13 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo SFR.

En las figuras se observa que la distribución de potencia de fisión del núcleo queda aplanada, es decir, los valores de las fisiones se distribuyen uniformemente manteniendo sin picos de potencia en la región de combustible. Esto se debe a que, en la simulación, la condición de frontera es de reflexión, las condiciones de todo el sistema son homogéneas y la distribución de potencia viene determinada por las propiedades neutrónicas de cada elemento.

4.3 Casos de estudio

Las siguientes simulaciones se hicieron para comparar los diferentes resultados que tendría el mismo reactor con la misma geometría, pero cambiando la composición del combustible, así como del refrigerante. Se utilizaron dos composiciones diferentes de combustible, una con uranio enriquecido y otra con una mezcla de uranio y plutonio, mientras que los refrigerantes alternados fueron sodio y helio. Las siguientes tablas muestran la distribución y composición de los materiales:

Tabla 4.3 Distribución de los materiales para los distintos modelos de SFR.

	SFR20	SFR22	SFR23	SFR24
Combustible	fuel 1	fuel 2	fuel 1	fuel 2
Refrigerante	Sodio	Sodio	Helio	Helio
Librería	jeff31u	jeff31u	jeff31u	jeff31u

Tabla 4.4 Composición del combustible y refrigerante utilizados en los modelos de SFR (at/b-cm).

fuel 1		fuel 2	
mat fuel	4.8059E-02	mat fuel	0.096359
92235.12c	0.15363	92234.12c	2.07E-06
92238.12c	0.79637	92235.12c	5.66692E-05
40000.06c	0.05	92238.12c	0.007935346
		94238.12c	3.07E-05
		94239.12c	0.001745045
		94240.12c	0.000792664
		94241.12c	0.000333962
		94242.12c	0.00015117
		b6012.12c	0.085311869
mat sodium	2.541E-02	mat helium	-0.01
11023.03c		2003.09c	0.00000137
		2004.09c	0.99999863

De la misma forma que en el ejercicio anterior, se siguieron 5000 historias de neutrones durante 230 ciclos, omitiendo en el cálculo de la criticidad los primeros 30 resultados, utilizando la condición de frontera de reflexión en el reactor.

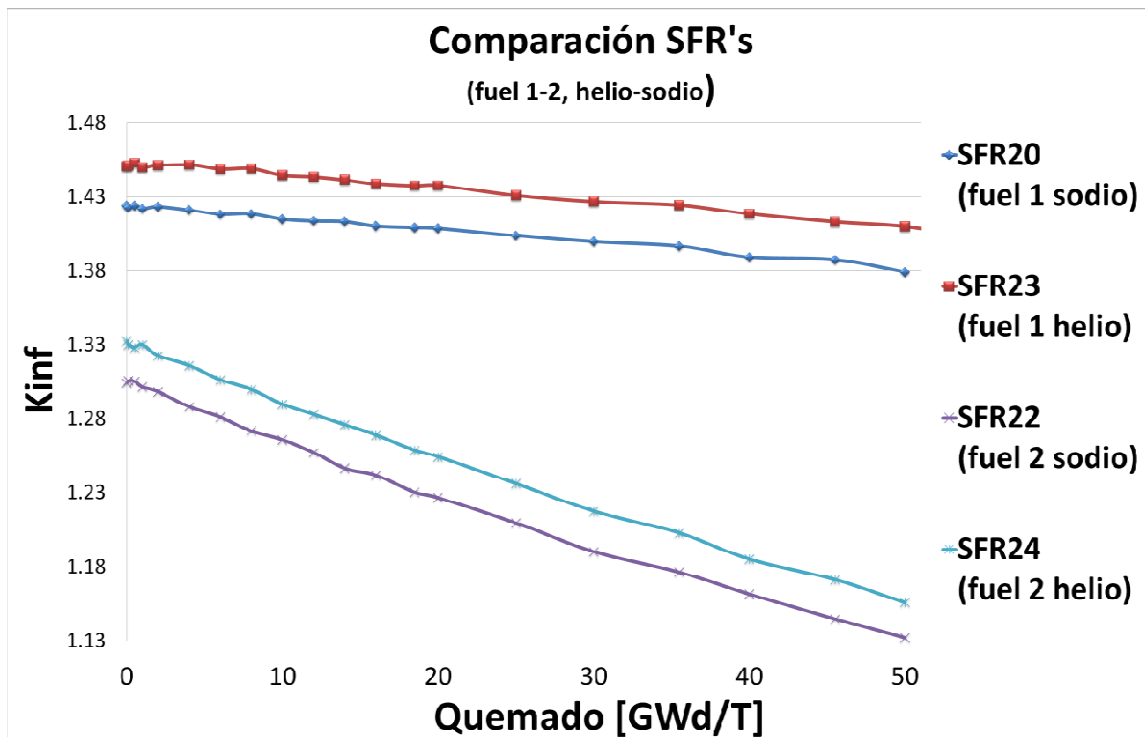


Figura 4. 14 Comparación de K_{inf} en función de los pasos de quemado para los distintos modelos de SFR.

La gráfica 4.14 ilustra los valores obtenidos, en la cual se observa las trayectorias con las que decae la criticidad del combustible en función de los días de quemado simulados, apreciando que existen dos pares con comportamientos similares. Primero se puede observar cómo los valores de k_{inf} de los elementos que contienen plutonio decaen más rápido, comparado con los que tienen uranio enriquecido. Esto se debe a que el combustible de uranio tiene mucho U^{238} , con lo cual produce Pu^{239} , lo que compensa el quemado del U^{235} . Por otro lado, también se observa que los ensambles refrigerados con helio presentan valores más altos de criticidad que los refrigerados con sodio, lo que nos indica que el helio interactúa menos con los neutrones que el sodio, y mejora la economía de los neutrones.

Además del cálculo del factor infinito de multiplicación, se realizaron y compararon las gráficas, correspondientes a cada arreglo, del flujo en función de la energía, el cual

representa el espectro de neutrones en el reactor.

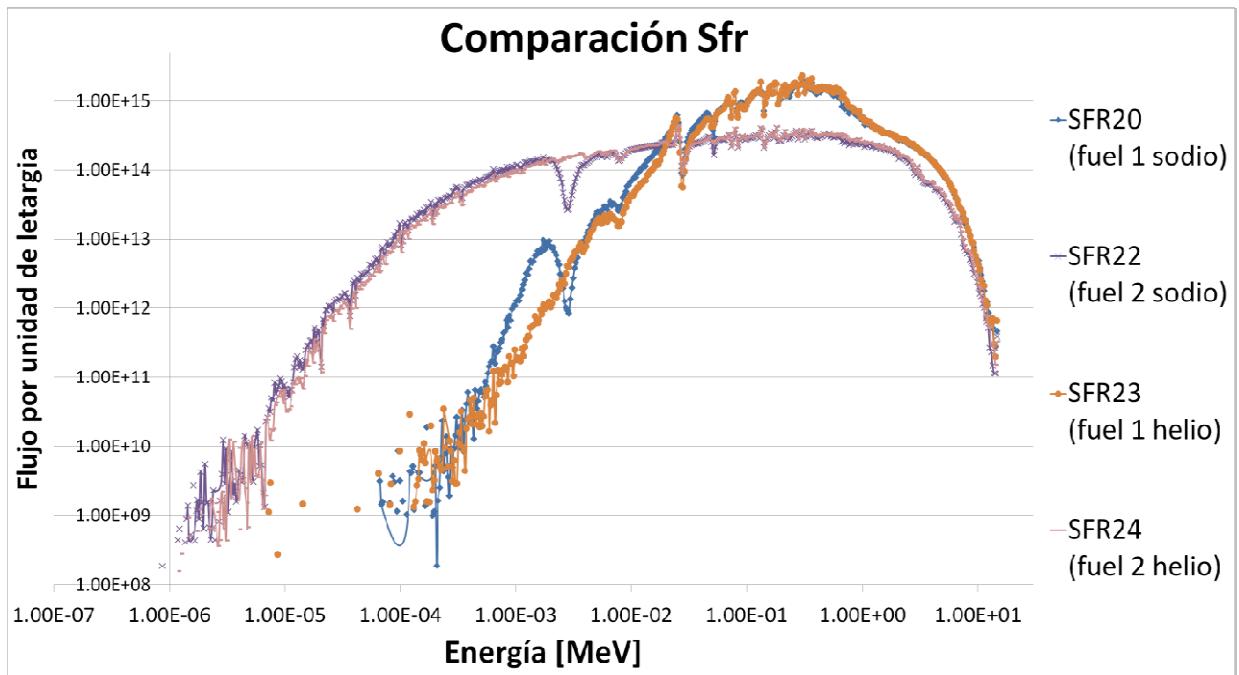


Figura 4. 15 Gráfica comparativa del espectro de neutrones en el reactor correspondiente a cada modelo SFR.

En la gráfica se observa el diferente comportamiento causado por la diferencia de la composición del combustible utilizado y la semejanza de las curvas sin importar con qué elemento fueron refrigerados. Destacando que los valores de los elementos que utilizan como combustible la mezcla de uranio-plutonio (fuel 2), están más cargados a la izquierda de la gráfica, es decir, la distribución energética, o espectro de fisión, de los neutrones de dichos elementos poseen una energía más baja en comparación con los suministrados con uranio enriquecido.

Tomando como referencia los arreglos del reactor rápido refrigerado por sodio, *SFR* y *SFR 22*, se realizaron comparaciones, en esta ocasión, con un reactor rápido refrigerado por gas, en este caso específico con helio (caso *GFR*).

Para este modelo de ensamble de combustible, se tiene un arreglo de 307 varillas de combustible distribuidas en una malla hexagonal. De la misma forma que en el reactor de sodio se tiene una distribución homogénea del combustible, con la misma forma de

la celda básica:

- *Fuel*, compuesto por la mezcla del combustible, centrado en la celda con forma de un cilindro circular recto.
- *Huelgo*, también con forma de cilindro circular recto que rodea al combustible y ayuda a dar un espacio al gas de fisión y a la dilatación de las partículas de combustible generadas por la irradiación y las altas temperaturas.
- *Susl*, el encamisado, un volumen cilíndrico compuesto de un material cuya función es la de contener al combustible y productos de fusión.
- *Refrigerante*, volumen con forma de prisma hexagonal por donde fluye el refrigerante, en este caso, helio.

En la figura 4.16 se muestran las características de composición de los materiales, así como la geometría de las celdas de combustible.

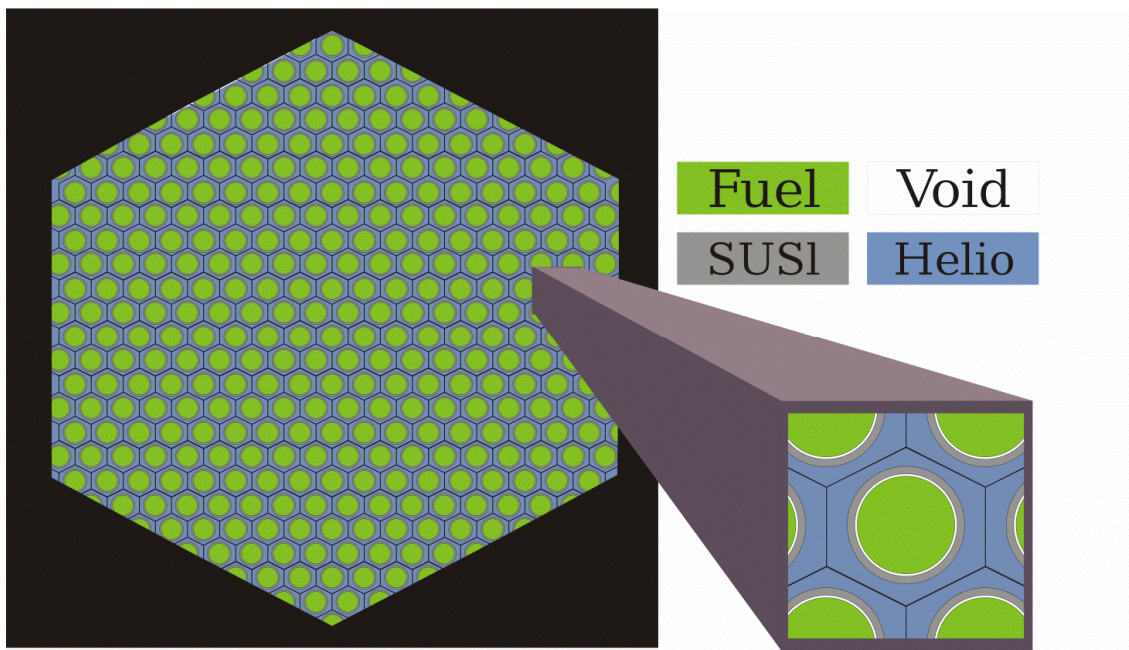


Figura 4. 16 Descripción geométrica del modelo y celda básica del combustible para el modelo GFR (SERPENT).

También se utilizó la condición de frontera de reflexión en el ensamble, y se siguieron 5000 historias de neutrones durante 230 ciclos, descartando los primeros 30, para un total de un millón de historias simuladas.

Cabe señalar que los modelos son diferentes respecto a sus geometrías, como se puede ver en las figuras 4.1 y 4.16, los hexágonos que circunscriben los arreglos tienen diferente orientación, a diferencia de los hexágonos que contienen las varillas de combustible. Además de que en estas simulaciones se utilizó la librería endfb7u.

La siguiente tabla muestra el material y refrigerante utilizado en cada caso.

Tabla 4.5 Composición y distribución de los materiales utilizados en el ensamble del combustible para los casos GFR, GFR2, SFR y SFR22.

	GFR	SFR	GFR2	SFR22
Combustible	mat fuel 0.0963595453876468 92234.12c 2.07E-06 92235.12c 5.66692E-05 92238.12c 0.007935346 94238.12c 3.07E-05 94239.12c 0.001745045 94240.12c 0.000792664 94241.12c 0.000333962 94242.12c 0.00015117 6012.12c 0.085311869	mat fuel 4.8059E-02 92235.12c 0.15363 92238.12c 0.79637 40000.06c 0.05	mat fuel 4.8059E-02 92235.12c 0.15363 92238.12c 0.79637 40000.06c 0.05	mat fuel 0.0963595453876468 92234.12c 2.07E-06 92235.12c 5.66692E-05 92238.12c 0.007935346 94238.12c 3.07E-05 94239.12c 0.001745045 94240.12c 0.000792664 94241.12c 0.000333962 94242.12c 0.00015117 6012.12c 0.085311869
Refrigerante	helio	sodio	helio	sodio
Librería	endfb7u	endfb7u	endfb7u	endfb7u

Los primeros resultados obtenidos fueron los correspondientes al factor de multiplicación de neutrones en función de los pasos de quemado. La siguiente tabla muestra los resultados obtenidos para cada caso, la primera columna contiene el valor obtenido del factor de multiplicación y en la segunda la desviación estándar correspondiente.

Tabla 4.6 K_{inf} en función de los pasos de quemado, modelo de ensamble de combustible en medio infinito.

Quemado (GWd/T)	GFR U235/238 helio		SFR U/Pu sodio		GFR2 U/Pu helio		SFR22 U235/238 sodio	
	K_{inf}	Desviación estándar	K_{inf}	Desviación estándar	K_{inf}	Desviación estándar	K_{inf}	Desviación estándar
0	1.42	0.00089	1.42	0.00086	1.46	0.00086	1.30	0.00109
0.1	1.42	0.00093	1.43	0.00089	1.46	0.00090	1.31	0.00101
0.5	1.42	0.00090	1.42	0.00088	1.46	0.00087	1.31	0.00110
1	1.41	0.00109	1.43	0.00084	1.46	0.00084	1.30	0.00108
2	1.42	0.00102	1.42	0.00090	1.46	0.00085	1.30	0.00106
4	1.41	0.00096	1.42	0.00084	1.46	0.00085	1.29	0.00116
6	1.40	0.00103	1.42	0.00093	1.46	0.00090	1.28	0.00104
8	1.39	0.00094	1.41	0.00089	1.46	0.00089	1.27	0.00106
10	1.39	0.00092	1.42	0.00089	1.46	0.00089	1.27	0.00112
12	1.38	0.00098	1.41	0.00097	1.45	0.00083	1.26	0.00122
14	1.37	0.00106	1.41	0.00096	1.45	0.00087	1.25	0.00116
16	1.37	0.00097	1.41	0.00089	1.45	0.00089	1.24	0.00106
18.5	1.36	0.00113	1.41	0.00086	1.45	0.00089	1.23	0.00105
20	1.36	0.00095	1.41	0.00083	1.44	0.00094	1.23	0.00118

25	1.34	0.00104	1.41	0.00086	1.44	0.00083	1.21	0.00111
30	1.33	0.00104	1.40	0.00092	1.44	0.00088	1.19	0.00123
35.5	1.31	0.00105	1.40	0.00094	1.43	0.00091	1.18	0.00109
40	1.30	0.00105	1.39	0.00095	1.43	0.00088	1.16	0.00115
45.5	1.28	0.00119	1.38	0.00097	1.42	0.00090	1.14	0.00116
50	1.27	0.00112	1.38	0.00096	1.42	0.00087	1.13	0.00132

En las siguientes gráficas se muestran las diferentes comparaciones del comportamiento del factor infinito de multiplicación para los distintos casos.

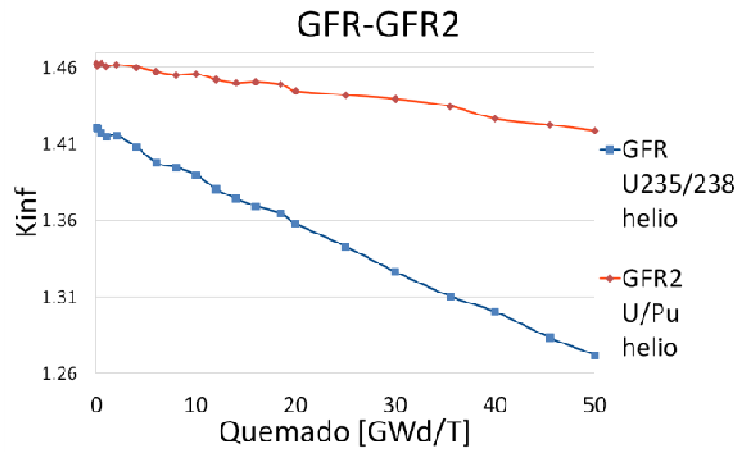


Figura 4. 17 Kinf en función de los pasos de quemado para los modelos GFR y GFR2

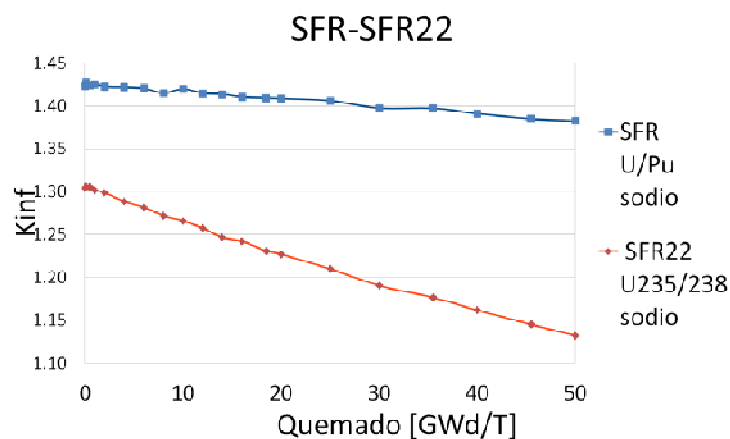


Figura 4. 18 Kinf en función de los pasos de quemado para los modelos SFR y SFR22

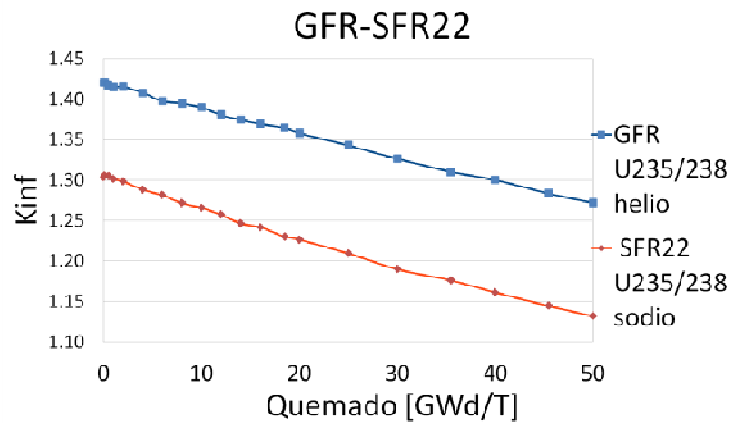


Figura 4. 19 Kinf en función de los pasos de quemado para los modelos GFR y SFR22

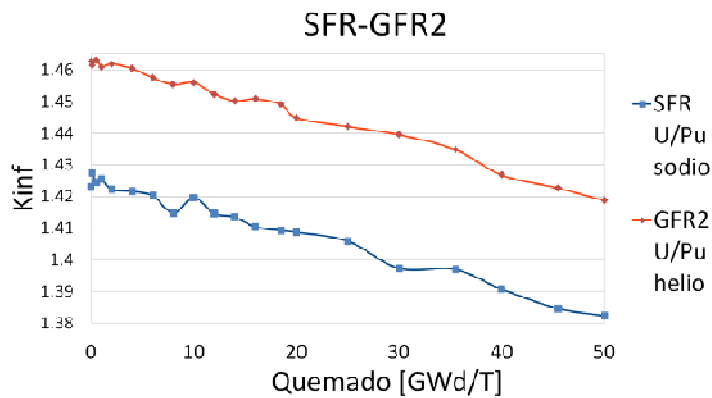


Figura 4. 20 Kinf en función de los pasos de quemado para los modelos SFR y GFR2

Se puede apreciar que, tanto en los reactores refrigerados por helio como en los refrigerados por sodio, presentan valores de criticidad más altos los que contienen la mezcla de uranio y plutonio en comparación con los compuestos de uranio enriquecido, así como los refrigerados por gas (helio) por encima de los de sodio, lo que confirma lo encontrado en los resultados anteriores acerca de la menor interacción del helio con los neutrones, comparado con el sodio.

Tomando los dos conceptos con mejores resultados para cada tipo de estructura (GFR2 y SFR22) se realizaron y compararon las gráficas correspondientes al flujo de neutrones en función de la energía, las cuales se muestran en la siguiente gráfica:

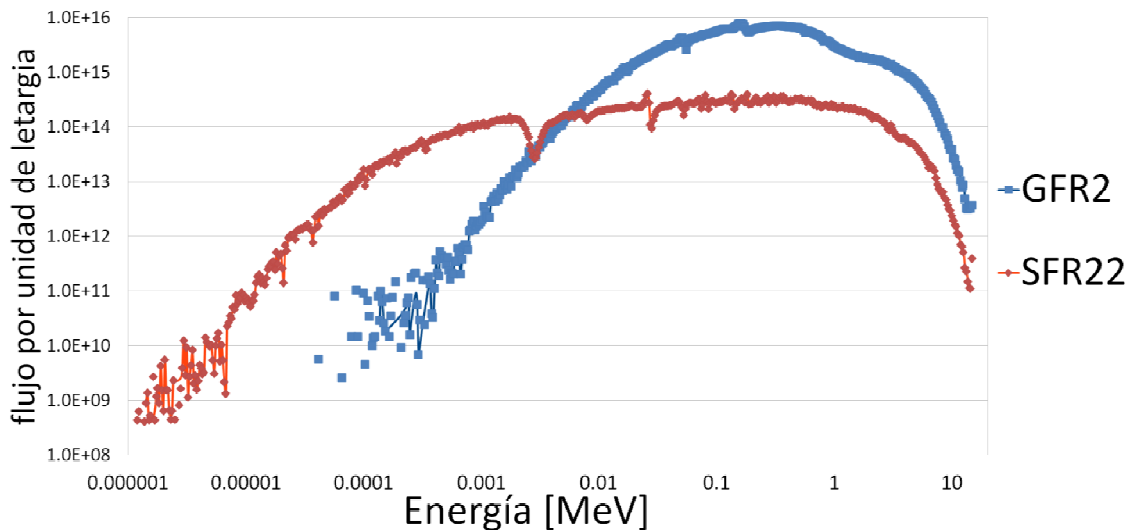


Figura 4. 21 Gráfica comparativa del espectro de neutrones en el reactor correspondiente a los conceptos SFR22 y GFR2

Se pueden apreciar ambos espectros de energía de neutrones rápidos, los cuales están formados por los neutrones de fisión que no han sufrido colisiones con un moderador para reducir su energía hasta los rangos térmicos, teniendo al espectro del reactor refrigerado por gas con valores más altos de energía, por la menor interacción del helio con los neutrones.

En las siguientes figuras se muestra la distribución de potencia de fisión del combustible para el modelo del reactor refrigerado por gas (GFR). Al igual que para el reactor refrigerado por sodio, la gráfica de la distribución queda aplanada, debido a que todas las barras de combustible tienen la misma composición y el ensamble combustible se simula en medio infinito.

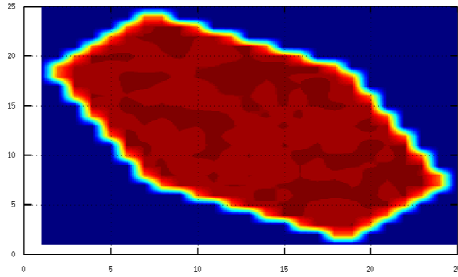


Figura 4. 22 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo GFR, en el plano XY.

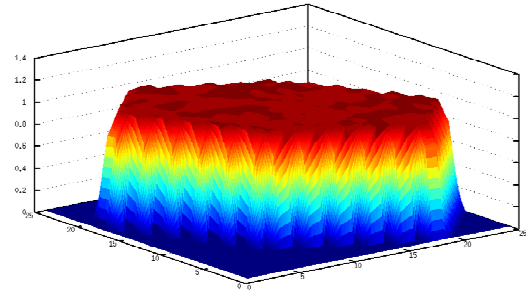


Figura 4. 23 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo GFR

La última simulación se hizo para un reactor térmico, con moderador de grafito y refrigerante helio, el HTGR, el cual está compuesto por un arreglo hexagonal, que a su vez está formado por prismas hexagonales, los cuales algunos contienen varillas de combustible y otras de helio, todas rodeadas de grafito. La forma y distribución se puede ver en la figura 4.24.

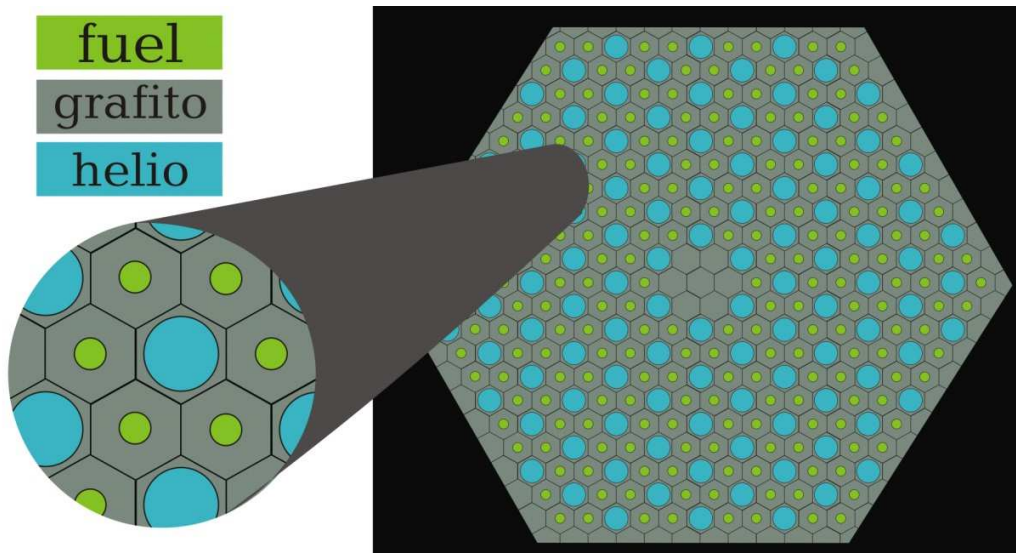


Figura 4. 24 Descripción geométrica del modelo y celdas básicas del combustible para el modelo HTGR (SERPENT).

Las composiciones de los elementos que conforman el modelo se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 4.7 Características físicas del ensamble de combustible del modelo HTGR.

	Combustible					Moderador	Refrigerante
Densidad	15.67846 [gr/cm ³]					1.74 [gr/cm ³]	3.2E-03 [átomos/b*cm]
Material	U ²³⁵	Th ²³²	O ¹⁶	C	Zr	C (grafito)	He ⁴
Fracciones atómicas	7.86534E-04	2.10616E-02	3.71372E-02	7.34855E-01	2.0616E-01	1	1
Temperatura [°C]	1200	1200	1200	1200	1200	900	900
Geometría	Varilla cilíndrica					Tubo cilíndrico	Prisma hexagonal
Radio/apotema (exteriores) [cm]	0.2					0.795	1.8796

Se realizaron las gráficas de distribución de potencia para este modelo, en las cuales se puede apreciar claramente cómo los niveles de potencia se presentan con la forma del arreglo del combustible, manteniendo con valores nulos los elementos que contienen al refrigerante.

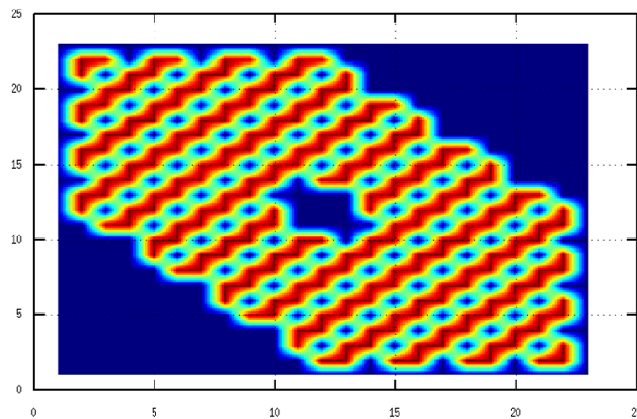


Figura 4. 25 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo HTGR, en el plano XY

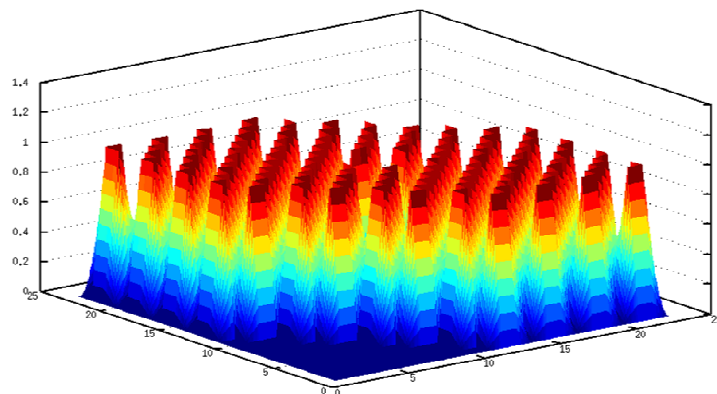


Figura 4. 26 Distribución de potencia en el ensamble combustible para el modelo HTGR.

Para concluir con las simulaciones y el análisis de resultados se compararon los tres diferentes tipos de reactor; el reactor rápido enfriado por sodio (SFR), el reactor rápido enfriado por gas (GFR) y el reactor térmico de alta temperatura refrigerado con gas (HTGR).

Tabla 4.8 Composición del combustible para los diferentes reactores.

	SFR		GFR		HTGR	
	Material	Fracciones atómicas	Material	Fracciones atómicas	Material	Fracciones en peso
C O M B U S T I B L E	U ²³⁵	6.37376E-02	U ²³⁴	2.07E-06	U ²³⁵	7.86534e-4
	U ²³⁸	2.10804E-01	U ²³⁵	5.66692E-05	Th ²³²	2.10616e-2
	Pu ²³⁸	5.87609E-05	U ²³⁸	0.007935346	O ¹⁶	3.71372e-2
	Pu ²³⁹	4.49566E-02	Pu ²³⁸	3.07E-05	C	7.34855e-1
	Pu ²⁴⁰	1.12054E-02	Pu ²³⁹	0.001745045	Be	2.0616e-1
	Pu ²⁴¹	1.54390E-03	Pu ²⁴⁰	0.000792664		
	Pu ²⁴²	3.17831E-04	Pu ²⁴¹	0.000333962		
	Am ²⁴¹	3.71016E-04	Pu ²⁴²	0.00015117		
	O ¹⁶	6.67005E-01	C ¹²	0.085311869		
	6.3578E-02 [átomos/b*cm]		0.09635954 [átomos/b*cm]		15.67846 [gramos/cm ³]	
Refrigerante	Sodio		Helio		Helio	
	Na ²³	1	He ³	0.00000137	He ⁴	1
			He ⁴	0.99999863		
2.21737E-02 [átomos/b*cm]		0.01 [gramos/cm ³]		3.2e-03 [gramos/cm ³]		
Librería	endfb7u		endfb7u		endfb7u	

La primera comparación consiste en el factor de multiplicación de neutrones que se obtuvo en los tres modelos. La figura 4.27 muestra los valores obtenidos. En esta figura se puede destacar el efecto de los venenos productos de fisión (xenón y samario) al inicio del quemado del combustible, en el reactor térmico (HTGR), que provoca que la k_{inf} disminuya rápidamente, y una vez que la concentración de estos venenos se ha saturado, la disminución de la k_{inf} es debida al consumo del U-235; esto a pesar de que en el combustible hay torio, el cual produce U-233 (isótopo fisible). Sin embargo, en un reactor térmico el factor de conversión, de material fértil a fisible, es menor al que se tiene en los reactores rápidos, razón por la cual, como se observa en la figura, el decremento de la k_{inf} es mayor en el reactor térmico, comparado con los rápidos. En el caso de los reactores rápidos, la curva del GFR decrece más rápido con respecto a la del SFR, puesto que el GFR tiene menos U-238 (material fértil) y el ritmo del consumo del material fisible (Pu-239, principalmente) es mayor, comparado al SFR, el cual al tener más U-238 va produciendo Pu-239 y compensando el consumo del U-235 y del propio Pu-239, que contiene originalmente, con lo que la k_{inf} decrece más lentamente en función del quemado.

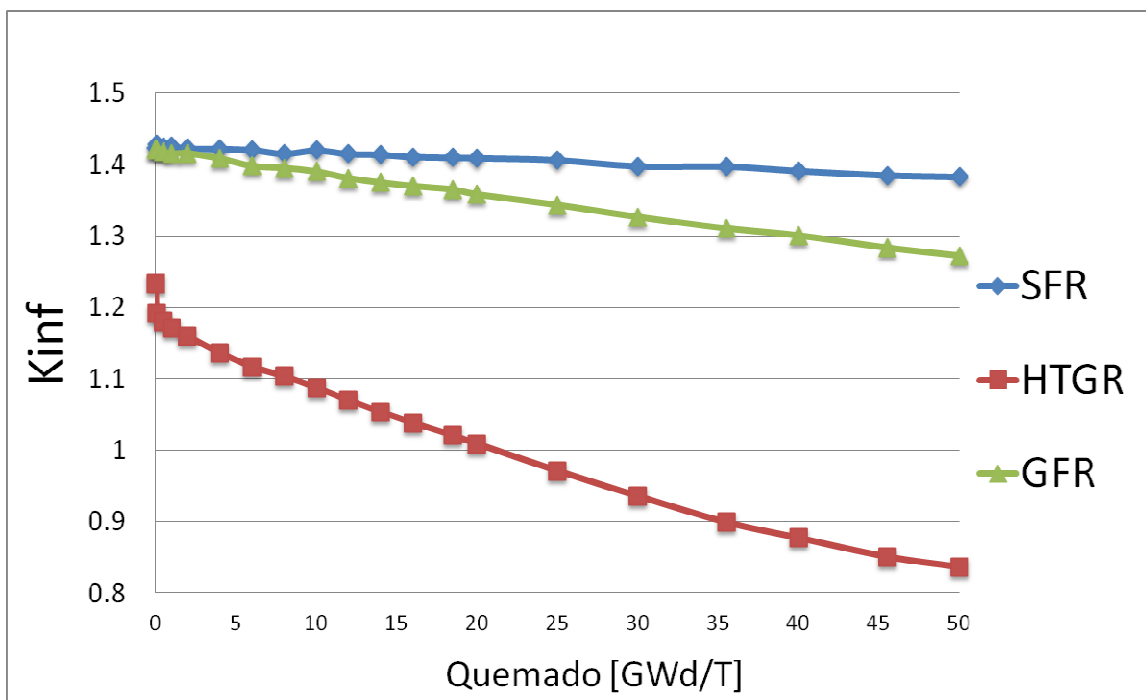
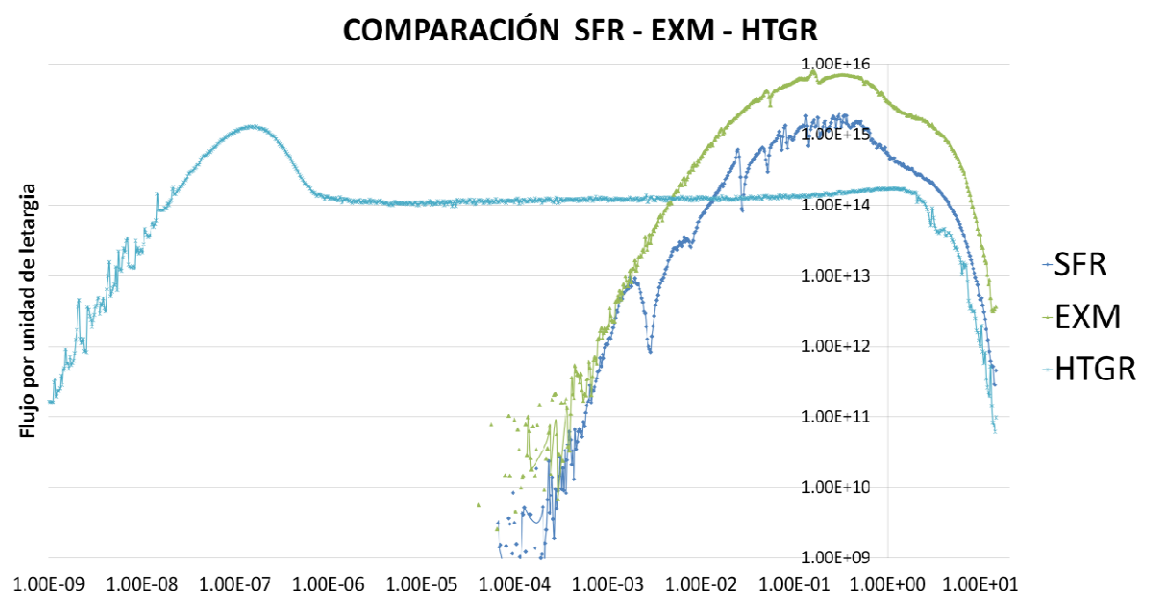


Figura 4. 27 Comparación de K_{inf} en función de los pasos de quemado de los reactores SRF, GFR y HTGR.

También se obtuvo el espectro de energía de neutrones para los tres reactores. La figura 4.28 muestra el comportamiento de dichos valores.



Falta poner que la energía está en MeV

Figura 4. 28 Espectro de neutrones en el reactor correspondientes a los conceptos SFR, GFR y HTGR.

La figura 4.28 compara el espectro de neutrones del reactor térmico y el de los rápidos obtenidos mediante cálculos utilizando el código SERPENT. Se puede decir que los valores de flujo corresponden a los de un elemento combustible representativo de cada uno de los núcleos de los reactores analizados. En la figura se observa, claramente, el espectro de neutrones del reactor térmico (HTGR) desplazado hacia la región de menor energía, comparado con el de los reactores rápidos, esto debido al proceso de moderación de los neutrones que tiene lugar en los reactores térmicos.

Conclusiones

Los resultados presentados en esta tesis muestran la versatilidad existente en diferentes diseños de reactores nucleares de alta temperatura, tanto rápidos como térmicos, basados en los cálculos de criticidad de los diferentes modelos, así como el comportamiento de los neutrones a través del espectro de energía, integrados con diferentes composiciones en el combustible y refrigerados con diferentes elementos.

Para esta tarea se hizo uso del código SERPENT, el cual está basado en el método de Monte Carlo, con lo que la primera tarea fue hacer una validación del código mediante la comparación con los resultados obtenidos previamente haciendo uso del código MCNPX, de un modelo de un ensamble de combustible de un reactor rápido enfriado con sodio. Los resultados obtenidos en la comparación fueron satisfactorios.

Respecto al rendimiento del código se puede decir que, aunque está basado en el método Monte Carlo, y no es un código determinista, presenta mejoras notables en el tiempo de simulación que el código MCNPX, sin diferencias significativas en los resultados; además de que, aunque no fue tema de esta trabajo, se puede apreciar que posee una gran versatilidad para poder modelar distintos arreglos con bastantes variables sin la necesidad de incorporar nuevos bloques o datos adicionales.

Con respecto a los resultados obtenidos para los diferentes modelos se puede concluir que:

Para los reactores rápidos (SFR y GFR) se observan altos factores de conversión, de material fértil a físil, con respecto al reactor térmico. Esto se observa, principalmente, en el combustible que tiene una mayor cantidad de U-238. El combustible que tiene una mayor concentración de plutonio se consume más rápidamente.

En los reactores rápidos, el refrigerante helio interactúa menos que el sodio con los neutrones, por lo que se tiene una mejor economía de neutrones y un menor efecto de moderación, siendo este último un efecto no deseado en los reactores rápidos.

Existe un comportamiento similar entre los valores del flujo neutrónico de los reactores rápidos. Los valores del espectro neutrónico muestran la diferencia del comportamiento del flujo de neutrones térmicos y del flujo de neutrones rápidos; estos valores son los esperados.

El espectro de neutrones térmicos está constituido por aquellos neutrones que han sufrido suficientes colisiones con el moderador y han alcanzado el equilibrio térmico con el medio; así, la temperatura del moderador determinará la velocidad más probable de los neutrones, haciendo notablemente que el espectro del HTGR esté más cargado hacia la izquierda (con valores más bajos de energía) que los espectros de energía correspondientes a los reactores rápidos. La aproximación anterior es aplicable a un sistema completamente termalizado; si bien los neutrones en el moderador se aproximan a ella, no llegan nunca al equilibrio térmico debido a las absorciones que se producen en el moderador. Sin embargo, cuanto menor es el grado de absorción en el moderador, más cerca se está de alcanzar este equilibrio.

Referencias

- ¹ <http://www.gen-4.org/> [Citado el: 17 de abril de 2013]
- ² Serpent. *a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*. <http://montecarlo.vtt.fi/> [Citado el: 16 de abril de 2013]
- ³ <http://www.redhidrogenocytetd.com.ar/esp/upload/Publicaciones/La%20energia%20del%20hidrogeno.pdf> [Citado el: 16 de abril de 2013]
- ⁴ <http://www.lenntech.es/periodica/elementos/h.htm>. [Citado el: 17 de abril de 2013]
- ⁵ LÓPEZ, Natalia, *Usos de la electricidad para la obtención de hidrógeno a través de la electrólisis de agua*. Bachiller en Ingeniería Eléctrica, Universidad de Costa Rica, 2006.
- ⁶ *Nuclear Hydrogen R&D Plan*. DOE, March 2004. http://www.hydrogen.energy.gov/pdfs/nuclear_energy_h2_plan.pdf [Citado el: 17 de abril de 2013]
- ⁷ MARTINEZ S, ORDEN A, ROEB M, LE DUIGOU A, DECHELOTTE S, CERRI G, Aplicaciones de la energía nuclear para la generación de hidrógeno. Conclusiones proyecto HYTHEC. 34^º Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española, Murcia 2008. http://www.empre.es/0E_Autores.pdf [Citado el: 17 de abril de 2013]
- ⁸ MARTÍNEZ, P. E. y PASQUEVICH, D. M. Estudio de los ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno nuclear, Instituto de Energía y Desarrollo Sustentable, Comisión Nacional de Energía Atómica
- ⁹ FERNÁNDEZ Clara y BOLAÑOS Badia, Energética del hidrógeno. Contexto, Estado Actual y Perspectivas de Futuro.
- ¹⁰ ¿Qué es la teoría de cuerdas? <http://athena.nucleares.unam.mx/~alberto/physics/cuerdas.html> [Citado el: 16 de abril de 2013].
- ¹¹ FRANÇOIS, Juan Luis. Apuntes de la asignatura Fundamentos de Energía Nuclear. Facultad de Ingeniería UNAM.
- ¹² FERNÁNDEZ PÉREZ, Álvaro. Análisis de la Viabilidad Técnica-económica de Futuros Reactores Nucleares HTGR para la producción de electricidad y calor. Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Niversidad Pontificia Comillas, 2008.
- ¹³ Diario de León. *Reactores nucleares más seguros, eficientes y con menos residuos*. 08 de marzo del 2009 [http://www.diariodeleon.es/noticias/revista/reactores-nucleares-mas-seguros-eficientes-y-con-menos-residuos_439911.html] [Citado el: 17 de abril de 2013]
- ¹⁴ <http://www.gen-4.org/> [Citado el: 17 de abril de 2013]
- ¹⁵ QUENTIN, Moyart. Seguridad del acoplamiento de un reactor VHTR a una planta de producción de hidrógeno. Memoria de PFC 2008.
- ¹⁶ <http://www.gen-4.org/> [Citado el: 17 de abril de 2013]

¹⁷ MARTÍNEZ, P. E. y PASQUEVICH, D. M. Estudio de los ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno nuclear, Instituto de Energía y Desarrollo Sustentable, Comisión Nacional de Energía Atómica

¹⁸ <http://www.gen-4.org/> [Citado el: 17 de abril de 2013]

¹⁹ Fieras de la ingeniería. *La próxima generación de la energía nuclear*.

<http://www.fierasdelaingenieria.com/la-proxima-generacion-de-la-energia-nuclear/> [Citado el: 17 de abril de 2013].

²⁰ Energía Nuclear. *Fusión Nuclear*. http://energia-nuclear.net/como_funciona/fusion_nuclear.html. [Citado el: 17 de abril de 2013]

²¹ <http://www.iter.org/> [Citado el: 16 de abril de 2013]

²² SAMUEL GLASSTONE, Alexander Sesonske. Ingeniería de los reactores nucleares. Editorial Reverté, 1990.

²³ MODREGO CELDRAN, Jose Luis. Determinación de parámetros neutrónicos de los elementos de combustible de un PWR para uso en códigos acoplados NKTH y códigos TH con cinética puntual. Universitat Politècnica de Catalunya, abril 2010.

²⁴ TICSE TORRES, Royer Edson. Obtención de bibliotecas de datos nucleares para MCNP desde librerías ENDF/B-VII con NJOY adecuados para el RP-10. Facultad de Ciencias. Escuela Profesional de Física. Universidad Nacional de Ingeniería, diciembre 2010.

²⁵ LEPPÄNEN, J. *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*. D.Sc. Thesis, Helsinki University of Technology 2007.

²⁶ Los Alamos National Laboratory. <https://mcnpx.lanl.gov> [Citado el: 17 de abril de 2013]