

TRITIUM, SIMULACIÓN DE TRANSPORTE DE ISÓTOPOS DE HIDRÓGENO EN ECOSIMPRO



ALMUDENA RUEDA FERREIRO
Ingeniero de simulación
EMPRESARIOS AGRUPADOS



JENIFER SERNA PÉREZ
Ingeniero de simulación
EMPRESARIOS AGRUPADOS



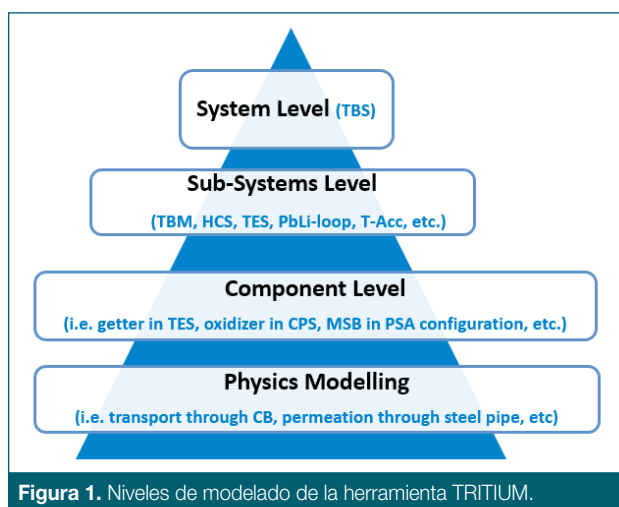
CARLOS MORENO TEJERA
CEO
HEFFEN TECHNOLOGIES

DESCRIPCIÓN DE LA HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN TRITIUM

El presente artículo se centra en TRITIUM, una herramienta de simulación desarrollada en EcosimPro [1]. Su objetivo es el cálculo dinámico de concentración, inventario y permeación de isótopos de hidrógeno, variables de interés en cualquier instalación en la que se trabaje con tritio para asegurar su operación dentro de los límites de seguridad establecidos por las distintas agencias nucleares.

Al tratarse de instalaciones experimentales que manejan tritio o instalaciones no construidas aún, la mejor y única forma de estudiar la evolución del inventario de tritio es a través de modelos de simulación. En el caso de la herramienta TRITIUM estos modelos están basados en primeros principios y su implementación se ha realizado en el lenguaje propio de EcosimPro que es un lenguaje no-causal orientado a objetos. Estas características permiten tener modelos abiertos en el sentido de que se pueden ir introduciendo más fenómenos y así tener modelos más detallados a medida que requiera estudiar nuevos fenómenos [2].

El objetivo con el que se han diseñado los modelos de la herramienta TRITIUM es que se puedan llegar a tener modelos de sistema, entendidos como modelos en los que se simula la unión de distintos subsistemas del proceso global (Figura 1). Así, por ejemplo, en su aplicación a modelado de las distintas configuraciones de las envolturas regeneradoras de ITER, nos permite no solo determinar dinámicamente la cantidad de tritio que hay en cada subsistema, TBM (Test Blanket Module), lazo de refrigeración, lazo de extracción... sino calcular las interacciones que se dan entre estos subsistemas.



Los tipos de simulaciones que se puede analizar se centran en:

- Simulaciones transitorias, por ejemplo durante un escenario de generación, o partiendo de una concentración inicial dentro del sistema. Se calculan las concentraciones, los flujos de difusión, los inventarios y las tasas de permeación para su análisis.
- Las condiciones estables de los modelos de transporte pueden alcanzarse después de un transitorio con límites fijos.

La formulación incluida en la herramienta TRITIUM representa los fenómenos físicos involucrados en el transporte de hidrógeno a través de los materiales con las siguientes características:

- Las especies disponibles incluyen isótopos de hidrógeno (H, T, D) y sus moléculas (Q_2) homonucleares (H_2 , T_2 , D_2) y heteronucleares (HT, HD...), así como moléculas poliatómicas por combinación en moléculas diatómicas y de oxígeno (Q_2O).
- La generación puede establecerse para cualquiera de las especies del sistema.
- Esta generación puede ser definida con diferentes formas con el tiempo, incluyendo diferentes escenarios de generación y la posibilidad de trabajar con escenarios definidos por el usuario.
- El perfil de generación puede establecerse en flujos con parámetros configurables para una forma exponencial en la dirección del flujo.
- Cálculo de difusión 1D en materiales a lo largo de la dirección de difusión.
- Se considera la copermeación de isótopos de hidrógeno entre corrientes de gas.
- Se considera la ley de Sievert entre diferentes materiales en las interfaces de materiales.
- Tuberías 1D para la circulación de líquidos y gases, que permiten transportar isótopos en forma atómica o molecular en función de la naturaleza del fluido.
- Reacciones químicas cuando están presentes las especies Q_2 y Q_2O .
- Fenómenos de superficie que implican la recombinación de los átomos que difunden a través de un material en las moléculas presentes en el fluido adyacente y la disociación de estas moléculas en sus átomos constituyentes.
- Los modelos pueden ejecutarse imponiendo un régimen de limitado por difusión en que estos fenómenos de superficie no afectan a la velocidad de permeación.
- Es posible tratar con múltiples pozos de atrapamiento permitiendo diferentes tasas de captura para atrapar diferentes especies y diferentes tasas de liberación.
- Amplio conjunto de materiales disponibles con sus propiedades de transporte (coeficiente de difusión, constante de Sievert, coeficientes de recombinación y disociación) y posibilidad de trabajar con materiales definidos por el usuario.

En la Figura 2 aparecen representados los distintos fenómenos que pueden ocurrir cuando se genera tritio en un fluido generador, como puede ser PbLi o Li, y se pone en contacto con un fluido refrigerante a través de un material.

La velocidad a la que ocurre cada uno de estos procesos viene definida por unos parámetros característicos de cada fenómeno que son específicos de cada material para cada especie isotópica y cuyo valor en operación dependerá de

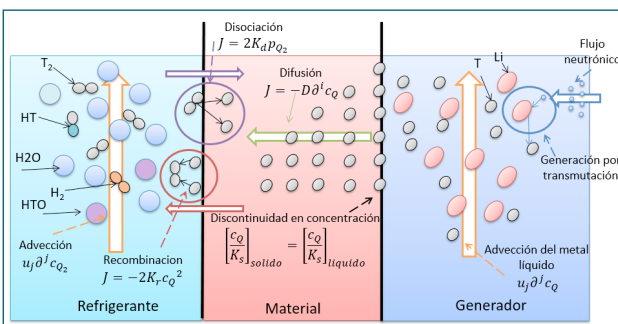


Figura 2. Procesos básicos en la modelización de transporte de isótopos de hidrógeno.

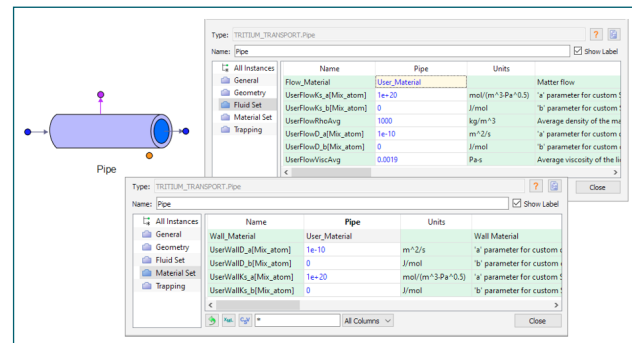


Figura 3. Editor de atributos del componente Pipe: selección de "User Material".

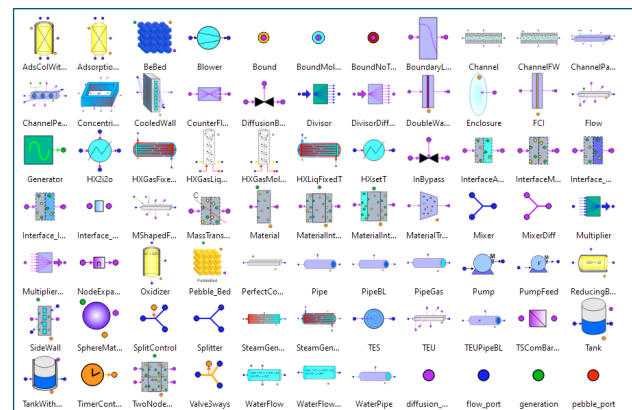


Figura 4. Componentes modelados en la herramienta TRITIUM.

la temperatura. Estos parámetros han de obtenerse experimentalmente y, en muchos casos, no hay experimentos suficientes que permitan concluir una correlación oficial para cada isótopo en determinados materiales. Esta baja disponibilidad de experimentos unida a la dificultad de controlar las condiciones de medida resultan en una gran dispersión entre las correlaciones disponibles que hacen que sea necesario disponer de una base de datos de parámetros con claras referencias bibliográficas. TRITIUM dispone de un conjunto de materiales para los que se calculan las propiedades de transporte (coeficiente de difusión, constante de Sieverts, coeficiente de disociación y de recombinación): EUROFER, acero inoxidable 316, incoloy 800... de acuerdo con determinadas referencias. Además, existe la opción de introducir directamente las correlaciones de cálculo de las propiedades de transporte seleccionando la opción "User Material" tanto para el material como para el fluido (Figura 3).

Los componentes presentes en la herramienta TRITIUM se presentan en la Figura 4.

Dentro de esta paleta de componentes, hay componentes básicos, componentes agregados y componentes auxiliares.

Los componentes básicos contienen la formulación de los fenómenos de transporte, como por ejemplo el componente "Material" que define la difusión a través de una pared o el "Flow" que representa un flujo de fluido con el correspondiente fenómeno de advección y reacciones en su seno.

Los componentes agregados hacen uso de las características de EcosimPro de orientación a objetos y agregación para generar componentes complejos mediante la conexión de estos elementos básicos y, por tanto, de sus ecuaciones.

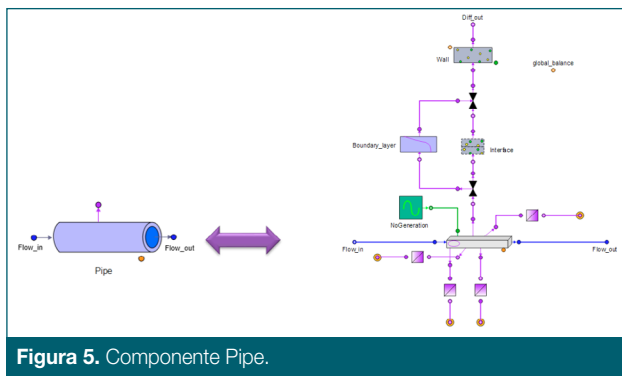


Figura 5. Componente Pipe.

Un ejemplo de esta agregación es el componente “Pipe”, que se ha construido conectando el componente “Flow” al componente “Material” y entre ellos un componente que modela la interface material – material, “Interface Materials”, tal como se muestra en la Figura 5.

Los componentes auxiliares tienen como objetivo apoyar en la generación de componentes agregados o modelos de simulación, ya sea por representar elementos de conexión, como “Mixer” o “Splitter”, o por facilitar la construcción de modelos complejos, como “Multiplier” o “Divisor”.

VALIDACIÓN DE LA HERRAMIENTA

La validación de los modelos de simulación resulta siempre una etapa fundamental en el desarrollo de una herramienta de simulación. Más aun cuando, como en este caso, los resultados obtenidos pueden emplearse para toma de decisiones en instalaciones en proyecto. Esta validación puede realizarse empleando datos experimentales (no muy abundantes por tratarse de procesos donde se maneja tritio) o frente a otras herramientas de simulación ya validadas.

Para nuestro caso se han realizado ambos tipos de validación: se escogió TMAP7 [3], desarrollado en Idaho National Engineering and Environmental Laboratory, como *software*

para comparar resultados, y se tomaron los resultados experimentales denominados LIBRETTO 4 [4] (*Liquid Breeder Experiment with Tritium Transport Option*), experimentos de irradiación de muestras de PbLi y se realizan medidas de transporte de tritio. La validación se ha realizado centrada en los fenómenos de transporte y en el inventario de isótopos de hidrógeno.

Para la validación frente a TMAP7 se realizaron un conjunto de casos (difusión en material, atrapamiento, reacciones en serie/paralelo, generación...) con resultados satisfactorios. Algunos de estos casos cuentan con solución analítica por lo que se han reproducido del mismo modo que se hace con TMAP7, tomando como referencia para la validación los resultados teóricos. Como ejemplo de este grupo de casos de validación se muestra a continuación un caso de difusión a través de una placa de un material hipotético con difusividad de $1 \text{ m}^2/\text{s}$, donde la concentración de tritio en un extremo permanece constante y en el otro extremo su supone nula. La construcción del modelo con la herramienta TRITIUM resulta sencilla e intuitiva gracias a la interfaz gráfica de EcosimPro que permite conectar los componentes necesarios y parametrizarlos según los datos del caso a simular (Figura 6).

El componente *Material* tiene la posibilidad de discretizarse en la dirección de la difusión con el fin de obtener resultados más precisos. En las Figura 7 y Figura 8 se muestra cómo los resultados obtenidos con la herramienta TRITIUM son iguales a la solución teórica.

La validación frente a resultados experimentales resulta de especial importancia para garantizar la aplicabilidad de los resultados y conclusiones obtenidos con la herramienta a los sistemas reales. Para realizar este proceso, se ha seleccionado el experimento LIBRETTO 4 por la disponibilidad de resultados. Se ha reproducido la instalación experimental mediante la combinación de los materiales e interfaces pertinentes. Los resultados de simulación obtenidos se ajustan a los experimentales como se muestra en la Figura 9.

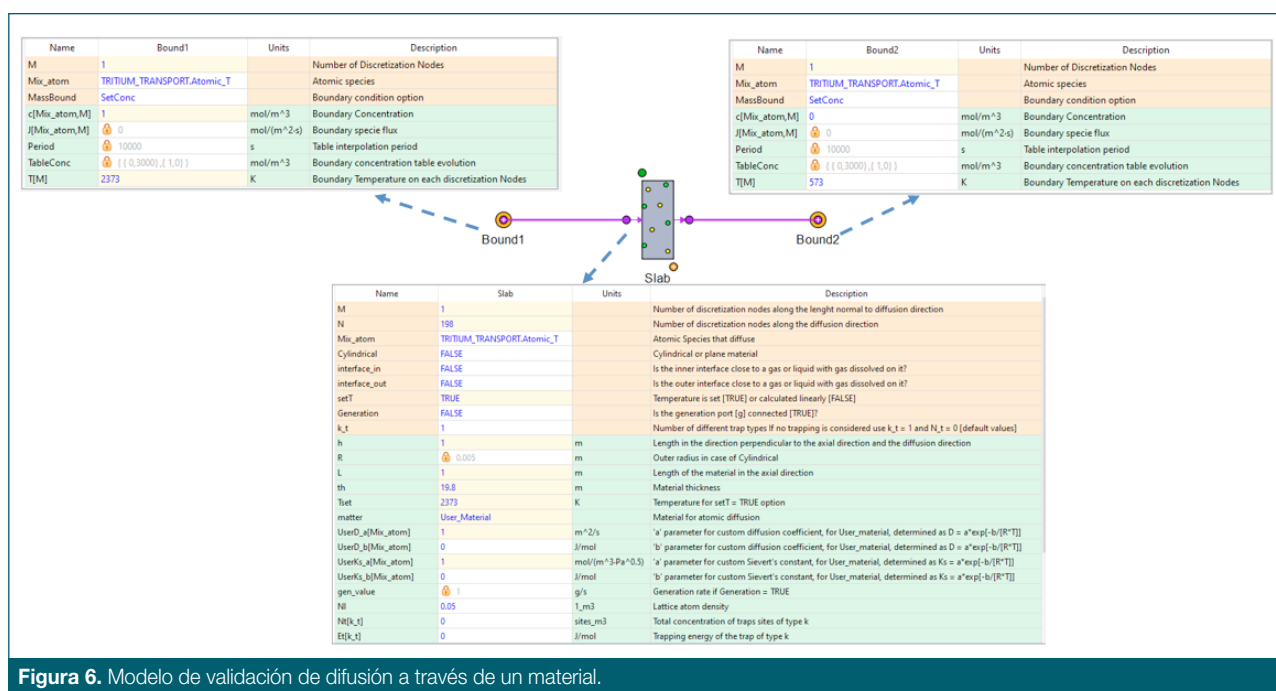


Figura 6. Modelo de validación de difusión a través de un material.

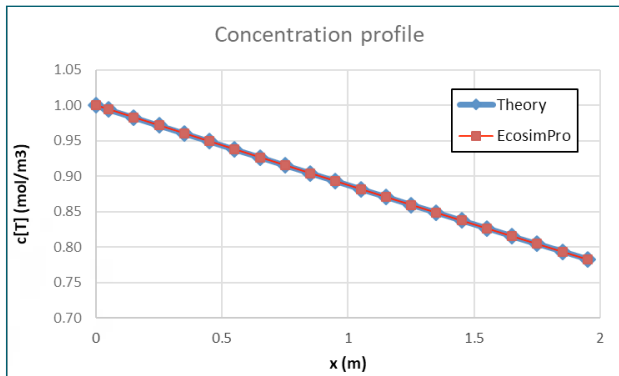


Figura 7. Perfil de concentración de tritio en el material a tiempo 30 s.

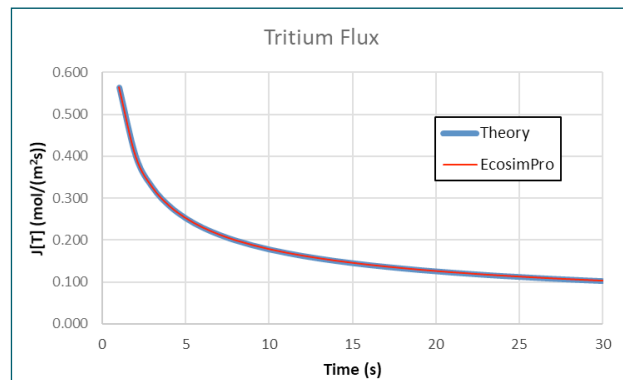


Figura 8. Evolución de la permeación de tritio.

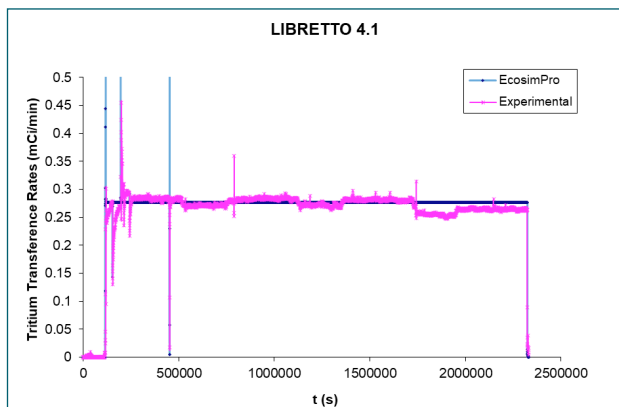


Figura 9. Comparación de flujo de permeación experimental (LIBRETTO 4.1) y simulado con la herramienta TRITIUM.

Como resultado de los distintos casos de validación realizados, la herramienta TRITIUM se considera válida para modelar los fenómenos de transporte que ocurren en procesos donde se opera con isótopos de hidrógeno.

CASO DE APLICACIÓN

Como se ha mencionado en la introducción, la herramienta TRITIUM se está usando actualmente en diversos proyectos de EUROfusion, DONES y programa Misiones Ciencia e

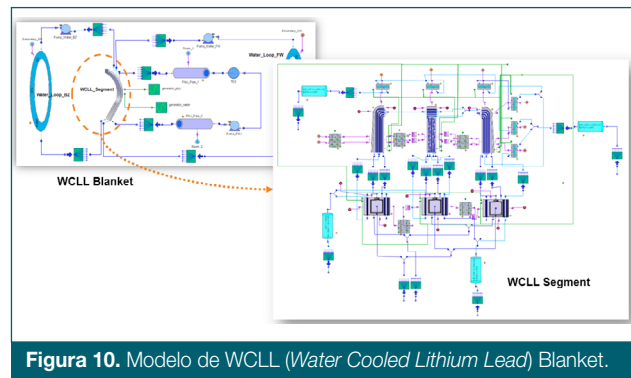


Figura 10. Modelo de WCLL (Water Cooled Lithium Lead) Blanket.

Innovación del CDTI (Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial) como software de simulación a nivel de sistema de procesos en los que es importante predecir el inventario y permeación de isótopos del hidrógeno. Así por ejemplo se han llegado a simular varias configuraciones de envolturas generadoras de tritio con sus sistemas auxiliares tanto para ITER como para DEMO (Figura 10).

El caso de aplicación que se presenta a continuación modela una unidad generadora de tritio (Breeder Unit) donde se produce la generación de tritio en el metal líquido que discurre por su interior (PbLi) siguiendo un recorrido en forma de U (Figura 11). Los canales de PbLi están representados por:

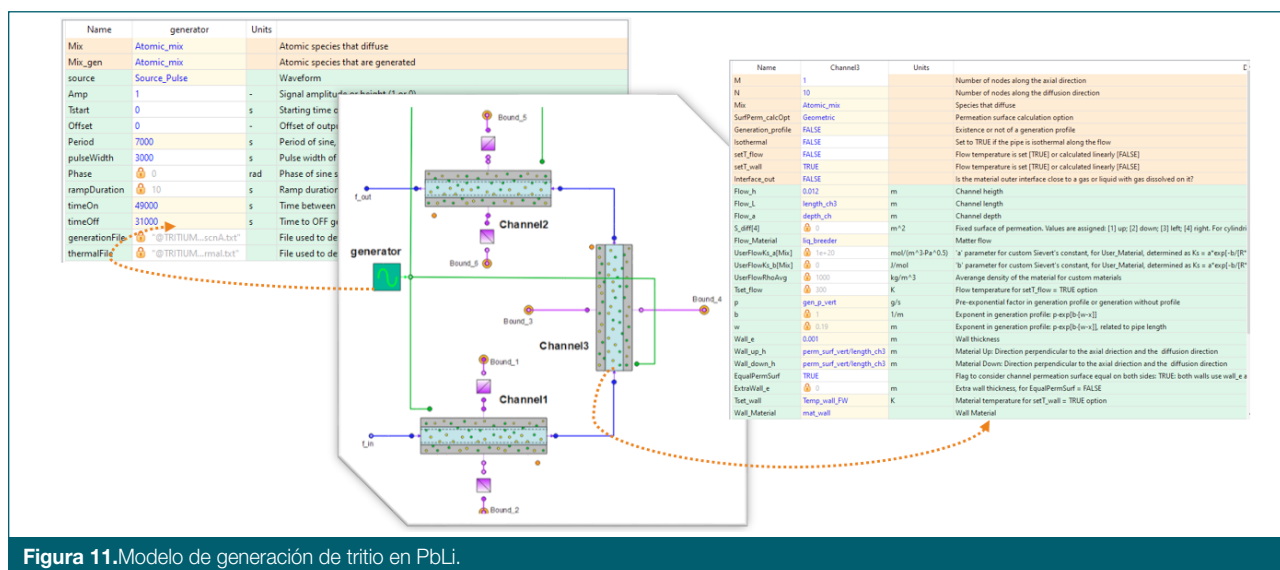


Figura 11. Modelo de generación de tritio en PbLi.

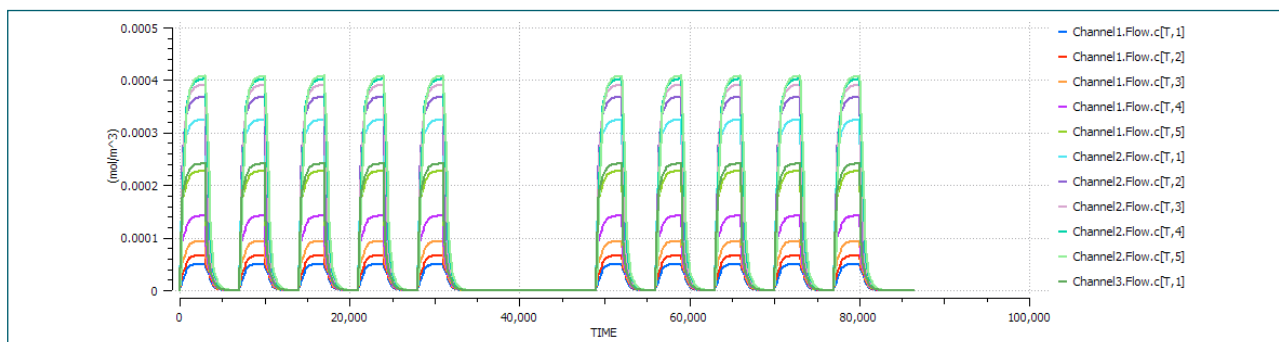


Figura 12. Evolución de la concentración de tritio en los canales.

- 2 Componentes “Channel”: representan el flujo de fluido en los canales horizontales incluyendo el material estructural como paredes del canal. Este canal incluye un LMBL (*Liquid Metal Boundary Layer*) entre el flujo de líquido y las paredes para tener en cuenta la velocidad más lenta o incluso nula del fluido en contacto con las paredes del canal, que representará una resistencia adicional a la permeación.
- 1 componente “ChannelFW”: se utiliza para el flujo de fluido (paredes del canal incluidas) en la base de la U. Representa la parte del generador más cercana a la primera pared del reactor, que es la parte con mayor flujo de neutrones.

Los canales están discretizados en el sentido del movimiento del fluido, y su pared también lo está en la dirección de difusión.

La generación en el fluido se ajusta a un valor constante en el canal vertical y con un perfil exponencial en los canales horizontales. El perfil de generación es pulsado con un periodo de descanso entre 30000 y 50000s

A través del editor de atributos de cada componente, se parametriza su geometría, material, fluido, temperatura, etc.

En el escenario de simulación del que se presentan los resultados se fija la presión y el caudal de a 1e5 Pa y 0,5 kg/s respectivamente. En cuanto a las condiciones de entrada, se considera que el 10 % de la concentración de salida vuelve en el flujo de entrada.

La evolución de la concentración en el interior del fluido generador se presenta en Figura 12. Dicha evolución se ve afectada por los pulsos de generación, pero también por el perfil dentro del canal (más generación cuanto más cerca esté el fluido del canal vertical).

Por último, las variables de los balances de masa se muestran conjuntamente en la Figura 13 para ver los efectos en el sistema y dónde se encuentra el tritio en cada momento.

CONCLUSIONES

Se ha presentado una herramienta de simulación, TRITIUM, realizada sobre EcosimPro, que tiene como potenciales aplicaciones el análisis del inventario de tritio en materiales y fluidos, así como de su permeación al ambiente. El modelo está basado en primeros principios y recoge los principales fenómenos de transporte de isótopos de hidrógeno

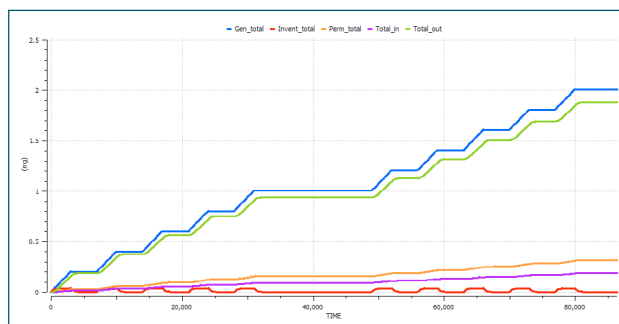


Figura 13. Evolución de la masa de tritio: generada (azul), inventario total (roja), permeado total (naranja), alimentada (morada) y extraída (verde) del proceso

(generación, difusión, reacción, recombinación, disociación, atrapamiento...). Dispone de una interfaz gráfica que hace fácil y amigable la creación de modelos más grandes a partir de la conexión de componentes ya existentes, y también de un conjunto de robustos algoritmos de resolución de ecuaciones algebraico-diferenciales.

Se ha realizado una validación de los modelos de transporte frente a otra herramienta de simulación, TMAP7, así como frente a datos experimentales.

Como conclusión, se dispone de herramienta de modelado de transporte de isótopos de hidrógeno fiable que actualmente ya se está empleando de forma satisfactoria en números proyectos dentro de los programas EUROfusion (para ITER y DEMO) y Misiones (para IFMIF-DONES).

REFERENCIAS

- [1]. EcosimPro 6.4.0 Dynamic Simulation Tool. User Manual. EA Internacional 2022.
- [2]. TRITIUM TRANSPORT Library. Reference Manual. EA Internacional. 2022.
- [3]. G. R. Longhurst, TMAP7 User Manual, INEEL/EXT04-02352 Rev.1, Idaho National Laboratory, Idaho Falls, Idaho 83415-3860 (Sept. 2006).
- [4]. Alexander V. Fedorov, Lida Magielsen, Analysis of in-pile operation and modeling of tritium transport in lead-lithium irradiation experiments Libretto 4/1, 4/2 and 5, Fusion Engineering and Design, Volume 86, Issues 9–11, 2011, Pages 2370-2373.■