



Centro Nacional de Tecnologías para la Fusión

Informe Científico – Técnico

Julio 2009

Autores y Contribuciones

Este documento no podría haberse preparado sin la contribución entusiasta de un grupo numeroso de investigadores de hasta siete Universidades y Centros de investigación diferentes a quienes estamos enormemente agradecidos por su ayuda y soporte durante estos dos últimos años:

Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas de Madrid (CIEMAT): J. M. Arroyo, F. Carbajo, N. Casal, P. Fernández, J. Ferreira, A. García, I. García-Cortés, M. González, M. Hernández, M. T. Hernández, A. Ibarra, D. Jiménez, A. Moroño, F. Mota, C. Ortiz, V. M. Queral, L. Ríos, R. Román, F. Tabarés, V. Tribaldos, J. P. de Vicente, R. Vila. *Universidad Politécnica de Madrid (UPM):* A. Abánades, R. Aracil, C. Arévalo, O. Cabellos, D. Díaz, S. Domingo, M. Ferré, L. Gámez, R. González, N. García, Y. Herreras, A. Lafuente, P. Martel, E. Martínez, J. M. Martínez-Val, E. Mínguez, J. Y. Pastor, M. Perlado, E. Río, J. Sanz, F. Sordo, M. Velarde, M. Victoria. *Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED):* M. García, D. López, A. Mayoral, F. Ogando, J. Sanz, P. Sauvan. *Universidad Carlos III de Madrid (UC3M):* D. Blanco, L. Moreno, M. A. Monge, R. Pareja. *Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC):* P. González, J. de No. *Universidad Autónoma de Madrid (UAM):* A. Climent, A. Muñoz. *Universidad de Alicante (UA):* M. J. Caturla

Coordinación General: A. Ibarra (CIEMAT), M. Perlado (UPM)
Coordinación Grupo de Producción y Procesado de Materiales: R. Pareja (UC3M)
Coordinación Grupo de Irradiación de Materiales: R. Vila (CIEMAT)
Coordinación Grupo de Interacción Plasma-Pared: F. Tabarés (CIEMAT)
Coordinación Grupo de Tecnología de Metales Líquidos: A. Abánades (UPM)
Coordinación Grupo de Técnicas de Caracterización: M. González (CIEMAT)
Coordinación Grupo de Tecnologías de Manipulación Remota: R. Aracil (UPM)
Coordinación Grupo de Simulación Computacional: J. Sanz (UNED, UPM)
Gestión de proyecto y Edición: D. Jiménez, R. Román, I. García-Cortés (CIEMAT)

Resumen Ejecutivo

El desarrollo de la fusión como una fuente de energía se está convirtiendo en una necesidad vital debido al continuo aumento del consumo energético mundial. La fusión es una de las pocas opciones energéticas inagotables, respetuosas con el medio ambiente y capaces de cubrir la demanda previsible de energía.

El desarrollo de la fusión es uno de los grandes retos tecnológicos de la humanidad. Para la Unión Europea (UE) este campo es uno de sus principales programas de investigación, como demuestra el que en junio de 2005 acordara junto a EE.UU., Rusia, China, Corea del Sur, Japón y la India, la construcción del proyecto ITER (*International Thermonuclear Experimental Reactor*). ITER, que significa camino en latín, es un reactor experimental cuyo propósito será demostrar la viabilidad científica de la fusión.

Con el diseño de ITER ya finalizado, en los próximos 20-30 años se producirá un gran aumento, **no tanto en la investigación básica en física de plasmas como en el desarrollo tecnológico de los componentes de los futuros reactores comerciales de fusión**. La selección, desarrollo y ensayo de los materiales y elementos de los diversos sistemas del reactor son el desafío más importante de la investigación en fusión, junto al diseño de los sistemas de extracción de energía y reproducción de tritio.

España tiene una oportunidad única de estar a la cabeza de la participación europea en este novedoso campo tecnológico y para ello requiere nuevas instalaciones en las que poder simular las condiciones extremas a las que se verán sometidos los materiales y/o componentes en el interior de un reactor de fusión.

El proyecto que se describe en este informe pretende la construcción, en la Comunidad de Madrid, de una Instalación Científico-Técnica Singular (Centro Nacional de Tecnologías para la Fusión – *TechnoFusión*) en la que se concentren infraestructuras apropiadas para el desarrollo de las tecnologías necesarias para los futuros reactores comerciales de fusión y garantizar una destacada participación española tanto de grupos de investigación como de empresas.

TechnoFusión no supondrá un salto en el vacío. La comunidad científica española ya cuenta con la masa crítica de expertos en la ciencia y las tecnologías necesarias para el desarrollo de este ambicioso proyecto, como sobradamente demuestra la experiencia de décadas que España posee en el campo de la fusión. *TechnoFusión* persigue precisamente aprovechar las capacidades existentes en grupos de investigación de universidades, OPIs y empresas y enfocarlos en las áreas que se consideran prioritarias como la creación, ensayo y análisis de los materiales que se precisan para el desarrollo de un reactor comercial de fusión termonuclear, o su compleja manipulación remota.

Las condiciones que deberán soportar los componentes del reactor y las propiedades que de ellos se esperan los sitúan en un terreno desconocido que

precisamente *TechnoFusión* pretende explorar. Por ello se propone la construcción de aquellas instalaciones necesarias para la fabricación, prueba y análisis de los materiales más críticos, así como para impulsar el desarrollo de simulaciones numéricas para el estudio del comportamiento de dichos materiales bajo condiciones tan exigentes.

Más concretamente los esfuerzos en *TechnoFusión* se concentrarán en la creación de infraestructuras para abordar las siguientes áreas de investigación: 1) *producción y procesamiento de materiales*, 2) *irradiación de materiales*, 3) *interacción plasma-pared (cargas térmicas sobre materiales y mecanismos atómicos de daño)*, 4) *tecnología de metales líquidos*, 5) *técnicas de caracterización*, 6) *tecnologías de manipulación remota* y 7) *simulación computacional*. Para ello se propone la construcción de un gran Centro científico-técnico de investigación, *TechnoFusión*, constituido como una única instalación singular con capacidades para desarrollar estas siete grandes áreas de investigación que a continuación se describen:

1) *Producción y Procesado de Materiales*. Los materiales con los que se fabricarán los futuros reactores de fusión aún no se han decidido, en parte debido a que todavía no se han reproducido las condiciones extremas que tendrán que soportar. Por lo tanto, es de la mayor importancia contar con instalaciones que permitan la fabricación de nuevos materiales a escala semiindustrial y a nivel de prototipo. Entre los de mayor prioridad identificados se encuentran los materiales metálicos tales como los aceros de baja activación reforzados del tipo ODS (*Oxide Dispersion Strengthened steels*) y las aleaciones de tungsteno. Para su fabricación se dispondrá de equipos que actualmente son escasos o no existen en España como por ejemplo un Horno de Inducción a Vacío (VIM), un Horno de Prensado Isostático en Caliente (HIP), un Horno de Sinterización Asistida por Corriente de Plasma Pulsada (SPS) o un Sistema de Proyección por Plasma en Vacío (VPS).

2) *Irradiación de Materiales*. Reproducir exactamente las condiciones del interior de un reactor sólo será posible en un verdadero reactor. Aún así es factible simular los efectos que los neutrones y la radiación *gamma* producirán sobre los materiales irradiando éstos con iones y electrones. La simulación de la radiación neutrónica se realizará mediante el uso simultáneo de tres aceleradores de iones: un acelerador de iones ligeros tipo tándem de 6 MV para la irradiación con He, un acelerador de iones ligeros tipo tándem de 5-6 MV para la irradiación con H (ó D) y un acelerador de iones pesados de tipo ciclotrón de $k = 110$ para la implantación de iones pesados (Fe, W, Si, C) o de protones de alta energía. Adicionalmente, se contará con un imán de alto campo (5-10 T) para el estudio del efecto simultáneo de la irradiación y el campo magnético sobre los materiales. La simulación del efecto de la radiación ionizante, *gamma*, se realizará mediante un acelerador de electrones de energía fija de tipo Rhodotron de 10 MeV, cuyo uso será compartido con otras áreas de la Instalación.

3) *Interacción Plasma-Pared*. En un futuro reactor de fusión, además de la radiación, algunos materiales estarán expuestos a enormes cargas térmicas por su interacción con el plasma. Debido a ello, será imprescindible no sólo reproducir las condiciones estacionarias de alta densidad, baja temperatura y alta potencia sino también probar los materiales ante eventos transitorios violentos (conocidos como ELM's en la literatura de física de plasmas). Se prevé contar con dos dispositivos de generación de plasma: una máquina lineal de plasma, encargada de reproducir las condiciones estacionarias, y un acelerador lineal de plasma cuasiestacionario QSPA

(*Quasi-Stationary Plasma Accelerator*) que simulará los transitorios. Ambos serán capaces de generar plasmas de H, D, He y Ar.

4) Tecnología de Metales Líquidos. La utilización de metales líquidos como el litio en distintos componentes de ITER e IFMIF¹, y a más largo plazo, en los futuros reactores de fusión, hace que las tecnologías asociadas tengan un interés creciente. Su uso como refrigerante, productor de tritio, reproductor neutrónico o como moderador en condiciones extremas no está suficientemente estudiado. Esta área de experimentación contará con varios circuitos de litio líquido acoplados al acelerador de electrones con los objetivos principales de estudiar la superficie libre de metales líquidos con deposición interna de calor y la compatibilidad de los materiales estructurales con el metal líquido en presencia de radiación. Además se podrá investigar la influencia de la presencia de campos magnéticos en dichos fenómenos y desarrollar las tecnologías asociadas a los métodos de purificación del metal líquido, técnicas de enriquecimiento del litio, sistemas de extracción de tritio y aspectos de seguridad del metal líquido.

5) Técnicas de Caracterización. Se propone para el Centro un conjunto amplio de técnicas para la caracterización exhaustiva de materiales comerciales o desarrollados en la propia instalación antes, durante y después de su exposición a la radiación o a las cargas térmicas. Se contará para ello con una gran variedad de métodos de caracterización mecánica (máquinas electromecánicas, minimáquinas de ensayos mecánicos, máquinas de fluencia térmica, técnicas de nanoindentación, etc.), composicional (Espectrometría de Masas de Iones Secundarios (SIMS) y Sonda Atómica Topográfica (APT)), estructural y microestructural (Microscopía Electrónica de Alta Resolución (HRTEM) y Difracción de Rayos X (DRX)) o de procesamiento de materiales (Sistemas de Haces de Iones Focalizados acoplado a un Microscopio Electrónico de Barrido (FIB/SEM)). Se dispondrá también de diversos sistemas para la caracterización de las propiedades físicas (eléctricas, dieléctricas, ópticas, etc.). *TechnoFusión* aspira a convertirse en el laboratorio nacional de referencia en la caracterización de materiales, ya que algunas de las técnicas anteriormente mencionadas, como el SIMS o la APT, no se encuentran fácilmente disponibles en España.

6) Tecnologías de Manipulación Remota. Las condiciones en el interior de un reactor de fusión serán incompatibles con la reparación o sustitución de sus componentes manualmente, siendo imprescindible su manejo por manipulación remota. Así, es de la máxima importancia no sólo el desarrollo de nuevas técnicas robóticas, compatibles con estas condiciones hostiles, sino también la acreditación de las existentes para su uso en instalaciones como ITER o IFMIF. El tamaño de los componentes que se van a usar y las dificultades de su disposición en el espacio del que se dispone provoca la necesidad de desarrollos hasta ahora no considerados en las técnicas de manipulación. Se contará con una instalación, acoplada al acelerador de electrones, donde los prototipos experimentarán condiciones de trabajo con radiación *gamma* similares a las esperadas durante las tareas de mantenimiento de un reactor. Por otra parte, algunos de los prototipos considerados para la demostración de la manipulación remota son: los *Port Plugs* (PP) de diagnóstico y los *Test Blanket Modules* (TBM) de ITER, o los módulos de irradiación de IFMIF.

¹ IFMIF es una fuente de neutrones de alta intensidad y espectro equivalente al de un reactor de fusión. En el diseño final consta de dos aceleradores de deuterones que inciden sobre un blanco de Li líquido donde por reacciones nucleares de *stripping* se genera un espectro neutrónico de características similares a las del reactor)

7) Simulación Computacional. Estos estudios teóricos son imprescindibles para llegar allí donde las condiciones experimentales no alcanzan y para acelerar el ciclo de desarrollo de los nuevos sistemas completos de una futura planta comercial de fusión. *TechnoFusión* se propone impulsar un ambicioso plan de simulación computacional aunando la experiencia existente en el ámbito de la fusión con los recursos de la Red Nacional de Supercomputación. Sus objetivos abarcan desde la integración de un entorno de simulación global de un reactor comercial de fusión, la interpretación de resultados, pasando por la validación de herramientas numéricas, o el desarrollo de nuevas herramientas. Un objetivo también imprescindible es la creación de sistemas de adquisición de datos y visualización de resultados asociados.

Partiendo de la contrastada experiencia existente en grupos de investigación de Universidades, Organismos Públicos de Investigación y departamentos de investigación de empresas, *TechnoFusión* propone la construcción de una gran infraestructura científica que persigue contribuir significativamente al desarrollo de las tecnologías necesarias para la construcción de los reactores comerciales de fusión. El proyecto que aquí se describe permitirá la generación de conocimiento tecnológico de gran impacto para cualquier tipo de reactor de fusión, independientemente del concepto en el que esté basado (magnético o inercial). *TechnoFusión* pretende agrupar recursos humanos y materiales suficientes con el objetivo de contribuir al desarrollo de una fuente segura, limpia e inagotable de energía para las generaciones venideras. España no puede desaprovechar la oportunidad única que representa *TechnoFusión* y que sin lugar a dudas situaría a la Comunidad de Madrid como uno de los referentes internacionales en la ciencia y tecnología de materiales.

10. Área de Simulación Computacional

10.1. Introducción

En ciencia es norma habitual la complementariedad entre el conocimiento teórico especulativo-demostrativo y la experiencia directa de los fenómenos observables. La teoría, desarrollada en sus formas más ó menos complejas con la ayuda de una matemática cada vez más potente, ha permitido explicar los fenómenos que aparecían en la naturaleza pero además ha predicho en tantas ocasiones lo que luego, cuando las herramientas experimentales han sido las adecuadas, se ha observado y se ha podido repetir con una metodología sistemática. El conocimiento aplicable y demostrado acaba en el nivel de repetición sistemática del mismo dadas las mismas condiciones.

Cuando la computación ha ido permitiendo realizar simulaciones, que respondían a los modelos creados por la teoría, se ha podido no sólo inducir o demostrar comportamientos sino calcular con precisión creciente los fenómenos físicos. Hoy en día nadie discute el valor complementario e insustituible de la Simulación Computacional (SC) y la experimentación en un plano comparable. En la investigación con un ansia de nuevo conocimiento y en la ingeniería con el conocimiento asentado (validación experimental) en la computación para diseñar la tecnología de nuevas instalaciones.

Existe hoy en día un claro consenso internacional de que los diseños de los componentes de las instalaciones como ITER, IFMIF, DEMO, etc. deben ser apoyados por simulaciones computacionales de los procesos físicos y de ingeniería, con una adecuada comprobación experimental de las teorías usadas en dichas simulaciones. Estos modelos computacionales en algunos casos cubren dimensiones espacio-tiempo lo suficientemente grandes como para requerir de modelos multiescala que demandan a su vez de una gran experiencia en la programación avanzada de ordenadores y el empleo de máquinas con enormes capacidades de cálculo y herramientas especiales de visualización. Estos requisitos no están generalmente accesibles a todos los grupos de investigación por lo que a un investigador sin experiencia previa en simulación le resulta muy difícil aprovechar las indudables potencialidades de esta tecnología. El **Área de Simulación Computacional (ASC)** que se propone para *TechnoFusión* pretende poner a disposición de las empresas o grupos de investigación españoles un conjunto integrado de expertos (incluyendo las herramientas necesarias) capaces de abordar un problema de simulación multiescala en un plazo de tiempo breve, basándose en un esquema de colaboración multidisciplinar entre dicha Área y el usuario externo. Es importante señalar que no se pretende la instalación de un nuevo gran ordenador en el Centro, sino que se utilizarán grandes ordenadores nacionales e internacionales.

Las principales aplicaciones del Área ASC se pueden agrupar en dos grandes categorías: i) aquellos problemas asociados a los cálculos de ingeniería necesarios para el diseño detallado de instalaciones complejas (a veces con millones de componentes); y ii) los asociados al análisis de los fenómenos físicos que tienen lugar en un reactor de fusión.

En España existe una amplia experiencia en la mayor parte de estos aspectos que, sin embargo, está distribuida en diferentes Universidades (UPM, UA, UNED,

UAM, UAB, UV, etc.) y Centros de investigación (CSIC, CIEMAT, etc.), por lo que existen los cimientos necesarios para consolidar un grupo que permita un enfoque integrado de las diferentes técnicas implicadas y ponerlo a disposición de los posible usuarios interesados en su utilización en los distintos aspectos de la tecnología de fusión.

10.2. Objetivos

El Área ASC de *TechnoFusión* se plantea tres objetivos fundamentales. Como objetivo inmediato se pretende poder abordar la simulación computacional integral de los componentes de las instalaciones de *TechnoFusión*, lo que a nivel de simulación plantea ya en muchos casos retos de gran novedad y relevancia científico-tecnológica. El segundo objetivo, fundamental en el medio y largo plazo, es el de llegar a disponer de un equipo capaz de desarrollar el trabajo de simulación/cálculo computacional (con desarrollos teóricos incluidos cuando se precise) necesario para abordar de forma integrada todas las labores computacionales requeridas en el diseño de las tecnologías enmarcadas en el camino desde ITER hasta un reactor comercial, pasando por DEMO, así como de otras instalaciones fundamentales para el logro del mismo, tales como IFMIF. El tercer objetivo que debe cubrir el Área ASC es el de poseer la capacidad para la gestión de los datos (adquisición, almacenamiento, visualización/interpretación) obtenidos de los experimentos que se vayan a realizar en las instalaciones de *TechnoFusión*, así como de utilizar el software de control necesario para el funcionamiento adecuado de las mismas.

Las actividades a realizar para el logro de los objetivos mencionados se pueden agrupar en los siguientes bloques:

- I) Disponer y/o desarrollar y/o adaptar la metodología computacional necesaria (y suficientemente validada) para asegurar que el diseño de las instalaciones de *TechnoFusión* (aceleradores, lazo de litio, etc.) va a permitir obtener la respuesta esperada en la operación de dichas instalaciones.
- II) Disponer y/o desarrollar y/o adaptar la metodología computacional necesaria (y suficientemente validada) para asegurar que las instalaciones de *TechnoFusión* (aceleradores, lazo de litio, etc.) van a satisfacer todos los requisitos exigidos respecto a los temas de protección radiactiva y seguridad.
- III) Disponer y/o desarrollar y/o adaptar la metodología computacional necesaria (y suficientemente validada) para la gestión de los datos obtenidos en los experimentos y para las funciones de control necesario de las instalaciones de *TechnoFusión*.
- IV) Capacidades de simulación necesarias para la definición de las tecnologías a incorporar en instalaciones de irradiación tipo IFMIF, basadas en aceleradores de alta intensidad.
- V) Capacidades de simulación necesarias para la definición de las tecnologías a incorporar en los diseños ITER-DEMO-Reactor Comercial.

En las tecnologías de fusión aparecen diversos campos en los que la simulación puede jugar un papel significativo. Algunos de los más importantes son:

- La identificación de la emisión de partículas y radiación del plasma y su interacción con la materia.
- Los efectos de la radiación sobre los materiales.
- La interacción de los neutrones con el *blanket*, lo que en esencia supone la descripción de los procesos de deposición de energía y generación de tritio.
- El conocimiento de la fluidodinámica de los refrigerantes (cuya misión es la extracción de energía) y sus efectos en los componentes del sistema (corrosión, difusión, impurificación, etc.).
- La identificación de los caminos de posible liberación de tritio y otros elementos activados al exterior.
- El transporte de la radiación, predicción de inventario radiactivo y el cálculo de dosis inmediata y residual, con implicaciones de seguridad y medioambientales (clasificación de los materiales de la planta, definición de su manejo, cálculo de blindajes, etc.).
- La interacción del plasma con la primera pared y su efecto en las propiedades del plasma y de los materiales.
- La realización de cálculos termomecánicos de componentes complejos para la validación de los diseños.

Resulta imprescindible el desarrollo y establecimiento de un área de SC que cubra aspectos relacionados con las propias instalaciones planteadas en *TechnoFusión* y, además como objetivo fundamental, disponer de un equipo capaz de desarrollar y distribuir el trabajo necesario de cálculo (con desarrollos teóricos incluidos cuando se precise) en las diversas facetas de lo que va a suponer el camino desde el ITER hasta reactores comerciales. Otro aspecto que debe de cubrir la SC es el de poseer la capacidad de equipo y personal para el manejo de los datos (y su visualización) obtenidos de los experimentos que se vayan a realizar.

En el perfeccionamiento de un sistema de planta y sus pasos previos de investigación y desarrollo de un futuro reactor de fusión se encuentran áreas bien definidas que se describen a continuación: generadas las reacciones de fusión nuclear se dispone de energía en forma de neutrones, partículas cargadas y radiación. Cada una de estas partículas tiene una interacción con el medio circundante que permite la generación de saltos entálpicos extraídos por un refrigerante en circulación y generar el tritio necesario en el ciclo de combustible. Pero ellas son también responsables de los problemas de muy altos gradientes de temperatura y el daño de las estructuras cristalinas ó amorfas de los materiales utilizados, condicionando y poniendo en riesgo la vida operativa de los mismos, la generación de material activado. Se necesita por tanto conocer dada la fuente de fusión y para un diseño dado (a modificar iterativamente):

- El flujo y fluencia de radiación con dependencia espacio 3D-tiempo:
 - Datos atómicos y nucleares.
 - Métodos de transporte e interacción de partículas (neutrones, partículas cargadas y radiación).
- Consecuencias de la deposición de calor y su extracción de la Planta:
 - Métodos de deposición de energía.
 - Fluido dinámica computacional de gran detalle espacio-tiempo.
 - Modelos termomecánicos.
- Consecuencias de la irradiación con neutrones de los materiales:
 - Simulación multiescala de materiales bajo irradiación.
- Consecuencias del tratamiento del tritio:
 - Modelos de difusión en materiales.
 - Fuentes de escape del sistema.
 - Evaluación de su dispersión atmosférica y consecuencias.
- Consecuencias de las radiaciones en la protección radiológica de la instalación así como de la activación inducida por neutrones y otros tipos de radiaciones:
 - Modelos de inventario muy detallados capaces de simular escenarios de operación con diversos tipos de radiación, espectros energéticos y en dependencia temporal.
 - Métodos para cálculo de dosis inmediata y residual.
 - Generación y clasificación de residuos.
- Consecuencias de Planta:
 - Modelos de ingeniería de planta capaces de simular el sistema de conversión de energía sus puntos críticos y las situaciones operacionales y accidentales que pudieran darse en la Planta (seguridad).

En cada una de estas propuestas el trabajo desarrollado en esta fase preliminar pretende identificar cuales son los modelos de los que ya se dispone, o se puede disponer, y su grado de adecuación a resolver las preguntas que se plantean de manera integral en instalaciones de fusión (ITER, IFMIF, etc.) así como las necesidades computacionales. Este planteamiento de conocimiento integral es clave

en la idea de esta Área de *TechnoFusión*, algo que sería único en el mundo en este momento.

Las instalaciones experimentales de *TechnoFusión* precisarán de un sistema bien adecuado de adquisición, control, visualización e interpretación de datos:

- El Área de visualización e interpretación permite:
 - Apoyo en la adquisición de datos.
 - Apoyo en el almacenamiento y salvaguarda de datos.
 - Apoyo en el acceso a los datos.
 - Muchos experimentos requerirán complejos sistemas de control en tiempo real (experiencia TJ-II).
 - La centralización facilita el control de calidad.
 - Tanto los experimentos como las simulaciones requieren de nuevas técnicas de análisis debido:
 - Volumen de datos (algo que sólo empeorará)
 - Complejidad de los sistemas estudiados
- El Área de visualización e interpretación permite:
 - Extraer la máxima cantidad de información posible.
 - Presentar la información de forma útil.

Por otra parte el Área ASC de *TechnoFusión* debería incluir aspectos de soporte informático, dado que alguien tiene que encargarse de las labores de:

- Adquisición
- Mantenimiento
- Apoyo
- Formación
- Redes

10.3. Capacidades

El Área ASC de *TechnoFusión* estará dotada de un conjunto amplio de medios (personal e infraestructura) capaces de abordar la simulación computacional integral

de los componentes de las instalaciones y su comportamiento dinámico en un futuro reactor de fusión. Esta Área cubrirá:

- Modelos de simulación para el conocimiento de los flujos de partículas (neutrones, partículas cargadas y radiación) en los componentes del sistema. Para ello se necesita contar con códigos de Monte Carlo y Ordenadas Discretas en tres dimensiones como MCNP en sus últimas versiones ó ATILA (SN). Será fundamental desarrollar herramientas que permitan el acoplamiento de la descripción gráfica de la Planta (que se desarrolla en muchos casos -por ejemplo ITER - en formato CATIA) con la descripción de entrada de los modelos usados.
- Modelos de simulación de fenómenos de interacción de partículas cargadas con la materia provocando fenómenos de *sputtering* y erosión de paredes usando códigos básicos en el nivel de TRIM y SRIM y otros más detallados como los de colisiones binarias o dinámica molecular debidamente acoplados a códigos de simulación del comportamiento del plasma desde el punto de vista electrodinámico. Este aspecto es fundamental para la descripción de fenómenos tecnológicos en primera pared.
- Modelos simulación de fluidodinámica de metales líquidos con el uso de códigos como FLUENT, STAR-CD ó CFX, capaces de permitir el diseño del *blanket* y la evaluación de su fiabilidad para DEMO dentro del marco de ITER e IFMIF.
- Modelos de simulación de estructuras basados en programas como CATIA o ANSYS.
- Modelos de simulación del daño por irradiación de materiales como metales, cerámicos y aislantes. Para ello se completarán los actuales esquemas de simulación multiescala que abarcan:
 - Cálculos *ab initio* mecano-cuánticos a desarrollar con los códigos como SIESTA (UAM) y VASP.
 - Dinámica molecular, con códigos como MDCASK y otros aún más flexibles en los que estén incorporados los potenciales interatómicos fundamentales, algunos de los cuales (incluso para metales) quedan aún en entredicho y que deben ser capaces de describir las cascadas de desplazamiento y algunos de los parámetros y mecanismos básicos involucrados en el daño por irradiación.
 - Difusión de defectos, mediante técnicas de cinética de Monte Carlo, o teoría de tasas, incorporando desarrollos actuales en la paralelización de dichos modelos (como en BIGMAC) permitiendo de manera fiable describir irradiaciones largas.
 - Dinámica de Dislocaciones (*Dislocation Dynamic*, DD), con el desarrollo de modelos para materiales de distinto tipo (fcc, bcc, etc.) sobre la base de códigos como DD3D o PARADIS, y la incorporación de la interacción de dislocaciones y defectos.

- Modelos de elementos finitos que permitan calcular las propiedades macroscópicas del material a partir de parámetros determinados mediante los anteriores procesos.
- Modelos de simulación para el cálculo de dosis (protección radiológica):
 - Dosis inmediata: a obtener en unos casos mediante simple utilización de los códigos de simulación para transporte y bases de datos más modernos; en otros mediante la integración de los elementos de simulación más apropiados; y en un número importante de aplicaciones en *TechnoFusión* mediante desarrollo de metodología propia. Es muy importante desarrollar actividades de validación de la metodología para las aplicaciones que se plantean en el Centro.
 - Dosis residual: usando el modelo ACAB que incorpora la determinación de la activación de los materiales mediante neutrones, radiación, o partículas cargadas, para espectros de energía cualesquiera, con respuestas que incorporan las incertidumbres en esos resultados debidos a las incertidumbres de las secciones eficaces usadas en el cálculo, además de permitir cualificar los materiales irradiados desde el punto de vista de su gestión post-irradiación (manejo manual o reciclado, enterramiento superficial, desclasificación, etc.).

A continuación se detallan algunas de las principales capacidades en el Área ASC de *TechnoFusión* a desarrollar debido a su importancia en el desarrollo de instalaciones de fusión y la interpretación y análisis de resultados entre otros.

10.3.1. Área de seguridad

Es necesario realizar una evaluación por medio de simulaciones computacionales de los requisitos asociados al área de seguridad, simulaciones que se consideran actualmente fundamentales en las tareas de diseño y establecimiento de parámetros de operación de una instalación. El requisito de mayor aceptación sería la no necesidad de evacuación en el peor escenario accidental posible. El objetivo de un análisis de seguridad es predecir los efectos sobre la salud en condiciones accidentales. Para ello, las tres tareas básicas a considerar son:

- Cálculo de inventario radiactivo.
- Determinación del término fuente en emisiones accidentales.
- Evaluación de consecuencias o respuestas finales.

Las herramientas identificadas para llevar a cabo dichas tareas serán:

- i) **Cálculo de inventario radiactivo:** permite calcular la evolución del inventario isotópico inducida por la irradiación neutrónica, irradiación con partículas cargadas o con fotones. Asimismo se pueden modelar regímenes de irradiación/enfriamiento prácticamente arbitrarios. Se emplearán para estos cálculos los códigos *ACAB*, *FISPACT*, *ORIGEN*. *ACAB*

- ii) **Determinación del término fuente** representativo de la radiactividad liberada al exterior: se precisa caracterizar escenarios de accidentes de forma suficientemente detallada, y realizar el análisis de los mismos con códigos de transmisión de calor y termohidráulicos apropiados. Las herramientas claves para ello serían el código de transmisión de calor *CHEMCON* y el de termohidráulica *MELCOR*. *CHEMCON* se utiliza para simular la evolución de la temperatura debida al calor residual de desintegración y a las reacciones de oxidación. Las historias tiempo-temperatura calculadas permiten identificar el término fuente de radiactividad susceptible de movilización. Este término se utilizaría como dato de entrada a *MELCOR*, el cual permite simular los fenómenos termohidráulicos, incluyendo la física y transporte de aerosoles y la liberación de los productos radiactivos. La migración del tritio se puede simular mediante el código *TMAP* (*Tritium Migration Analysis Program*).
- iii) **Evaluación de consecuencias:** se precisa una metodología capaz de generar librerías de FCD (factor de conversión a dosis expresado en Sv/Bq liberado) para los radionucleidos liberados, que permitan obtener las dosis y consecuencias a la salud asociadas como consecuencia de la liberación. Estas librerías de FCD se obtienen mediante códigos como *MACCS* y sus librerías de datos asociadas.

10.3.2. Área de gestión de residuos

Con relación a la gestión de residuos en instalación de fusión, el requisito de mayor aceptación es la no necesidad de enterramiento geológico profundo de residuos. Los códigos *ACAB* y *FISPACT* permiten evaluar el inventario radiactivo generado de cara a la gestión de residuos. Calculan la cantidad de residuos generados y evalúan su categoría de acuerdo a las estrategias/criterios de gestión que pueden ser consideradas: enterramiento superficial, reciclado dentro de la industria nuclear y desclasificación.

10.3.3. Incertidumbre

La valoración de un sistema nuclear depende de la capacidad de comprender la física que subyace en todo el proceso, desde la física fundamental de las reacciones nucleares, pasando por la neutrónica, respuestas termomecánicas, termohidráulicas, comportamiento de materiales, etc. La producción de energía, el daño por irradiación, la radioactividad, el calor residual y otras magnitudes relacionadas resultan de la interacción de partículas y núcleos. Por lo tanto, para conocer en un mayor detalle las manifestaciones a nivel macroscópico de estas magnitudes es necesario un preciso conocimiento de estos valores.

En la física actual de simulación de sistemas nucleares el estudio de las incertidumbres de los datos nucleares juega un papel cada vez más importante. El objetivo marcado sería realizar la propagación de incertidumbres en todas las etapas del cálculo, desde la generación de datos nucleares, procesamiento de datos, predicción del inventario, transporte de partículas, análisis térmicos y termohidráulicos, etc. Mediante la implementación, por ejemplo, de técnicas de perturbaciones de primer orden y Monte Carlo es posible realizar análisis completos de sensibilidad/incertidumbre en cada una de las etapas.

10.3.4. Área de protección radiológica

En el área de radio-protección las herramientas básicas son los códigos de transporte de partículas (y las secciones eficaces y/o modelos para describir la interacción nuclear que utilicen) capaces de determinar la distribución espacial de las fuentes y flujos de partículas. Una vez determinada la fluencia de partículas, se obtiene la clasificación radiológica mediante los factores de conversión de fluencia a dosis, dependiente de la energía y tipo de partícula.

Los códigos de transporte de referencia son:

- **MCNPX:** Código de transporte con método de Monte Carlo. Permite transportar neutrones, fotones y partículas cargadas. La versión 2.5 sólo transporta partículas ligeras (electrones, protones, deuterones, tritones, alfas). La versión 2.6 que no está oficialmente disponible, sino que está en fase de desarrollo, ha mejorado los modelos nucleares para la determinación de las secciones eficaces de las reacciones. Además permite el transporte de iones más pesados.
- **PHITS:** Código de transporte con método de Monte Carlo. Permite transportar neutrones, fotones y partículas cargadas ligeras y pesadas. Las secciones eficaces para las reacciones nucleares son también calculadas a partir de modelos nucleares incorporados en el código.
- **FLUKA:** Código de Monte Carlo para cálculo de transporte e interacciones de partículas con la materia. Puede simular la interacción y propagación en la materia de unos 60 tipos distintos de partículas. Una prioridad fundamental en el diseño y desarrollo del código ha sido la implementación y mejora de los modelos físicos para descripción de las interacciones nucleares.

En el caso de transporte de iones será fundamental determinar sus niveles de implantación y difusión en los materiales. Los códigos seleccionados son:

- **SRIM:** Código de transporte con método de Monte Carlo para transportar iones. Este código transporta las partículas cargadas teniendo en cuenta únicamente los procesos de dispersión tanto por interacción electrostática *Stopping Power*, como por interacción nuclear. No se considera las reacciones nucleares que puedan ocurrir durante el transporte de partículas. Este código es muy útil para determinar perfiles de implantación de iones o deposición de energía en un material.
- **TMAP:** Código de difusión determinista. Es un código 1D que permite determinar la evolución de perfiles de concentración de iones implantados en un material. Es un código muy útil a la hora de determinar qué cantidad de iones han quedado en el material y qué cantidad ha salido del material. Este código es conveniente para determinar la difusión del tritio dentro de un material y su eventual emisión hacia el exterior del material, o también para determinar la acumulación de deuterones dentro del material, dando lugar a reacciones nucleares D-D con los deuterones de alta energía del acelerador.

Dado que algunos de las Áreas experimentales de *TechnoFusión* tendrán carácter radiactivo, los “Estudios de radioprotección y seguridad” necesarios para su diseño y elaboración de documentos de licenciamiento ocuparán el lugar relevante en la primera fase del Área de Simulación Computacional. La situación actual es que para los aceleradores y módulos de irradiación asociados que se conciben en *TechnoFusión* (así como en otras instalaciones de irradiación basadas en el uso de aceleradores, tales como IFIMF-EVEDA) no existe una metodología computacional fiable capaz de llevar a cabo la labor de predicción de dosis. En este sentido, uno de los objetivos fundamentales es desarrollar e implementar una metodología computacional capaz de abordar los estudios de radioprotección necesarios en *TechnoFusión* de una manera razonable, así como llevar a cabo la evaluación y validación de los elementos que la integren. El segundo objetivo será aplicar esta metodología de cara al diseño y operación de los aceleradores y módulos de irradiación, con objeto de demostrar que se ha dado una solución adecuada a todos los problemas de radioprotección que pudieran presentarse.

10.3.5. Análisis de datos nucleares: identificación de posibles necesidades

(I) Librerías de datos nucleares

- Librerías de transporte de neutrones, protones y deuterones. Hasta ahora, la librería FENDL-2.1 era suficiente para realizar cálculos en instalaciones de fusión (ITER). Sin embargo, el diseño de nuevas fuentes de neutrones como IFMIF requerirá datos de transporte de partículas de energías superiores a 20 MeV (IFMIF necesitará información hasta 60 MeV). No obstante, si hubiera datos disponibles, este rango se podría extender hasta los 150 MeV. Para conseguir el desarrollo de estas librerías se requerirán códigos para predecir este tipo de reacciones nucleares, aprovechando en lo posible los valores de experimentos contenidos en la librería EXFOR. Será necesario desarrollar herramientas que permitan la actualización de las librerías actuales y su extensión en este rango de energías. Además, se deben completar con información de covarianzas, basadas en modelos de cálculo teórico o experimental. Y por último se deben desarrollar los programas o procedimientos adecuados para generar librerías específicas mediante el código NJOY.
- Librerías de activación de neutrones, protones y deuterones. La librería de activación más completa actualmente existente es la EAF2007, incluyendo las sub-librerías de neutrones, protones, deuterones y de desintegración. Se deberían completar las herramientas adecuadas para transformar estas librerías en formato ENDF, e incluir las incertidumbres o covarianzas de las reacciones de activación en un mayor rango de energías.
- Actividades experimentales. Valoración y estudio de los datos experimentales existentes, e identificación de las necesidades para nuevas medidas experimentales.

(II) Códigos de generación de secciones eficaces

Los códigos de transporte como MCNPX o PHITS, utilizan para calcular la probabilidad de una reacción nuclear librerías de secciones eficaces o bien el modelo nuclear propio de cada código cuando no se dispone de librerías de sección eficaz. Se ha observado, en el caso de la utilización de modelos nuclear, que los resultados obtenidos por unos u otros códigos pueden variar significativamente debido a la evaluación de sección eficaz que se hace en cada modelo.

De esta observación se concluye que es necesario comprobar la validez de los modelos nucleares comparando sus secciones eficaces a secciones eficaces experimental o evaluadas.

- Talys 1.0, EMPIRE-II 2.18. Estos códigos permiten calcular secciones eficaces de reacciones nucleares utilizando varios modelos nucleares como el modelo óptico, reacciones directas, modelos de núcleo compuesto, pre-equilibrio, etc. Estos códigos permiten obtener las secciones eficaces para un canal de reacción determinado o bien las secciones eficaces de producción de una partícula dada (neutrones, protones, etc.), así como determinar las secciones eficaces diferenciales. En la medida de lo posible estas secciones eficaces han de ser comparadas con datos experimentales disponibles en librerías como la EXFOR.

10.3.6. Códigos de simulación termomecánicos

Generalmente son códigos de elementos finitos. Los códigos de simulación desarrollados durante los últimos años, tienden a unificar los procesos de cálculos termohidráulicos y mecánicos, de forma que sea posible analizar de forma simultánea las condiciones de refrigeración de un cuerpo y su distribución de tensiones mecánicas. Los mayores exponentes de este tipo de códigos, son los desarrollados por las compañías START-CD y ANSYS.

- Código ANSYS, es una amplísima plataforma de cálculo, que unifica módulos derivados de varios códigos inicialmente independientes. Cada uno de los módulos permite resolver una rama de problemas físicos claramente definida. A continuación se procede a describir de forma somera los diferentes módulos de cálculo del programa y sus posibles aplicaciones:
 - *Ansys Fatigue Module:* este módulo permite, partiendo de una geometría estándar Ansys, realizar cálculos de fatiga en las siguientes condiciones: amplitud constante y cargas proporcionales, amplitud variable y cargas proporcionales y amplitud constante y cargas no proporcionales.
 - *Ansys Mecánica:* es el módulo original sobre el que se sustenta el resto del código. Permite la simulación de sólidos mediante elementos finitos. Es posible resolver de forma acoplada los siguientes procesos físicos: acústica, piezoeléctricos, análisis termomecánicos,

análisis termoeléctricos, campos electromagnéticos en alta y baja frecuencia y análisis mecánico de sólido elástico.

- *AutoRegas*: es un módulo CFD desarrollado para resolver problemas de explosiones de gas con geometrías complejas de tuberías y cámaras de confinamiento.
 - *CFX*: el módulo CFD completamente acoplado a los mallados genéricos de Ansys. La utilización de mallados Ansys permite interactuar con el módulo de mecánica sin interpolaciones en las superficies de los sólidos. Permite la resolución de las siguientes simulaciones: turbulencia, reacciones químicas, transmisión de calor y radiación y multifase.
 - *Fluent*: es un código CFD desarrollado de forma independiente al resto de los módulos Ansys. La compañía propietaria del código ha sido comprada recientemente por Ansys por lo que es de prever que en un futuro el código se encuentre plenamente integrado. En la actualidad Fluent es un programa separado, que puede utilizar mallados realizados para Ansys y exportar soluciones en formato Ansys genérico. permite resolver los siguientes problemas: turbulencia, acústica, reacciones químicas, transmisión de calor y radiación, cambios de fase, multifase, magnetohidrodinámica.
 - *Polyflow*: es un módulo de Ansys que permite simular materiales viscoelásticos. Permite la simulación de procesos de conformado por extrusión, soplado y similares.
 - *Tgrid y Gambit*: son dos malladores genéricos disponibles en el paquete Ansys. En principio ambos son capaces de importar geometrías realizadas en CAD y mallar con hexaedros y tetraedros.
- *Código STARCT-CD*, es un programa de elementos finitos de propósito general, que permite calcular de forma simultánea, sobre un mismo mallado tanto sólidos (termomecánica y transmisión de calor) y fluidos. Permite resolver los siguientes problemas: análisis térmico, análisis mecánico, reacciones químicas, superficie libre, multifase, turbulencia.
 - *Código OpenFoam*, es un *solver* genérico de elementos finitos escrito en código abierto. Dispone de una serie de módulos preprogramados que resuelven problemas genéricos tales como: análisis térmico, turbulencia, multifase, superficie libre, análisis mecánico, magnetohidrodinámica y electromagnetismo, reacciones de combustión. A diferencia de los códigos anteriores, su nivel de desarrollo es inferior, con una interfase gráfica bastante pobre, por lo que el usuario necesita disponer de una amplia base de conocimientos de programación en C++. Una vez superada esta barrera, la introducción de modelos adicionales resulta muy simple, por lo que puede ser aplicado a prácticamente cualquier disciplina. La única limitación del código es que resuelve un único volumen de control con las mismas ecuaciones en todos los nodos, por lo que no es posible simular de forma simultánea sólidos y líquidos.

- Código Flow3D, es un CFD con prestaciones similares a CFX, Fluent o Start-CD. Entre sus capacidades destacan: Turbulencia, Transmisión de calor y radiación, Acústica, cambios de fase, multifase, superficie libre, tensiones mecánicas en sólidos, electro-ósmosis, dieléctricos, calentamiento joule, sólidos viscoelásticos.

10.3.7. Análisis de transitorios térmicos

Los códigos de análisis de transitorios térmicos (tipo Relap), son una herramienta fundamental para el análisis del comportamiento de instalaciones complejas durante transitorios de tipo térmico. Aunque dentro de los objetivos de *TechnoFusión* no se contemple la posibilidad de realizar estudios detallados de planta completa, sí podrían resultar de utilidad en el análisis de instalaciones experimentales como el lazo de litio de *TechnoFusión*.

- Relap5, es la última versión de una familia de códigos para analizar transitorios en centrales nucleares desarrollado por el gobierno de UE durante los últimos 30 años. En los últimos años ha sido utilizado para el estudio de los accidentes base de diseño de los reactores de la serie AP600. Entre sus capacidades destacan: modelos termohidráulicos 1d para los lazos y 3d para las estructuras complejas, transmisión de calor, modelos para sistemas complejos (vasija, generadores de vapor...), conducción de calor 1d y 2d en estructuras complejas, modelos de componentes genéricos como bombas, válvulas, resistencias eléctricas..., posibilidad de implementar en el modelo sistemas de control. Como contrapartida de la utilización este código destaca la ausencia de modelos para fluidos distintos al agua, por lo que no es posible analizar lazos de metales líquidos.
- Melcor, es un programa desarrollado por *Sandia National Laboratories* y financiado por la U.S.N.R.C que permite el estudio de accidentes severos en centrales nucleares. Entre sus capacidades destacan: modelos termohidráulicos, transmisión de calor, reacciones químicas en el combustible, generación de hidrógeno tanto dentro como fuera de la vasija, generación de aerosoles con material radiactivo y su difusión.

10.3.8. Evaluación de impacto ambiental de emisiones atmosféricas

En caso de accidente en un futuro reactor de fusión, los gases emitidos a la atmósfera, entre ellos el tritio, sufren una dispersión atmosférica cuya evolución está sujeta a las condiciones ambientales cercanas al lugar de la descarga. El modelo empírico utilizado para la evaluación del impacto ambiental es la ecuación Gaussiana basada en la trayectoria rectilínea que sigue la pluma desde el momento de su liberación a la atmósfera. Es un modelo de difusión en una atmósfera ideal de una distribución normal alrededor del eje central de la pluma radiactiva en todas direcciones. Esta situación poco realista necesita la introducción de las

correspondientes modificaciones para establecer un modelo realista en el comportamiento del tritio en el medio que rodea a una instalación nuclear de fusión.

Las formas químicas más frecuentes de descarga de tritio al medio son: tritio gas o también llamado tritio elemental (HT) y vapor de agua tritiada (HTO). Sobre estas dos formas se establecen todos los caminos posibles desde la fuga del tritio a atmósfera hasta su incorporación a la población expuesta o al personal de mantenimiento. Según los datos de términos fuente emitidos a la atmósfera en el estudio del ITER, el tritio elemental (HT), supera en algunos casos en un orden de magnitud a la posible liberación de vapor de agua tritiada (HTO). Por esta razón se hace imprescindible el análisis y valoración de la dosis crónica.

Los modelos de situación establecidos son: condiciones de operación rutinaria, casos eventuales o casos accidentales de liberación de tritio. En cualquiera de ellos se valoran las concentraciones de HT o HTO o ambas a la vez. Para el caso de operación normal se utilizó el código NORMTRI. Está basado en el modelo de dispersión ISOLA V para eventos de larga duración, con tasas de emisión constantes durante el tiempo que se contabilice. Calcula durante la consecuencia climatológica considerada todas las diferentes situaciones de dispersión, considerando la frecuencia de que ocurra esa situación climatológica. En los casos accidentales se utiliza el código UFOTRI que hace uso del modelo MUSEMET de dispersión calculando cada hora todos los parámetros atmosféricos basados en bases de datos reales.

Para el estudio completo de la difusión, remoción e incorporación del tritio hasta el hombre se consideran dos fases, en algunos casos paralelos en el tiempo.

- Fase primaria. Cronológicamente se inicia en el momento de la descarga a la atmósfera y concluye en el momento que el tritio se deposita en el medio (superficie del suelo, animales o vegetales). Durante esta fase han de establecerse las condiciones de contorno. Esta evaluación estadística consta de 4 parámetros: velocidad y dirección del viento, intensidad de precipitación y clase de estabilidad. Estos 4 parámetros se subdividen a su vez en varias clases (por ejemplo, la dirección del viento se clasifica en sectores de 10% y 30% de amplitud sobre 36 ó 12 sectores). Considerando las 6 clases de estabilidad, se establecen 7 rangos de velocidad del viento y 4 grupos de intervalos de precipitación considerando todas las condiciones de contorno. La geometría se establece utilizando el centro de coordenadas donde se ha producido la emisión de tritio. Se analizará la dispersión de la nube, según los parámetros descritos y los efectos de la altura de emisión, rugosidad del terreno y duración de los vertidos contaminantes a la atmósfera. Para comprender la importancia de estos factores se analiza de forma determinística cada evento comparándolo con los datos reales probabilísticos medidos cada hora combinando la meteorología para un estudio global que proporcionan la dinámica de todo el transporte y difusión del tritio en el medio.
- Fase secundaria. El descenso de la pluma hasta situarse cerca del suelo marca el inicio de la fase secundaria, que arranca secuencialmente después del inicio de la fase primaria o en alguno de sus procesos, paralelos a la fase primaria. El flujo de tritio, en cada sector de la malla depende de la velocidad de intercambio aire-suelo. La concentración en cada punto de la malla hay que volver a considerar en función del tiempo todos los parámetros meteorológicos reales (intensidad solar, humedad, tipo y velocidad de

deposición, porosidad del suelo, rugosidad del terreno, etc.) medidos en la fase temprana y crónica de la descarga.

El tritio depositado en el suelo, agua o vegetación, puede volver a la atmósfera por procesos de evaporación o transpiración, estos mecanismos de movilización del tritio se denominan procesos de re-emisión. Este fenómeno afecta a ambas formas químicas del tritio, sin embargo, el comportamiento es bien distinto: el HT procedente de la pluma primaria vuelve a la atmósfera como vapor de agua tritiada, mientras que el HTO simplemente sufre una evapo-transpiración, sin ningún proceso de conversión. La magnitud total de esta re-emisión está fuertemente ligada a la oxidación del HT en el suelo por acción bacteriana en los primeros 5 cm del subsuelo. A través de la re-emisión se aumentan los niveles de tritio en el aire, con lo que, a la dosis por inhalación y absorción por la piel que proviene directamente de la pluma primaria, hay que añadir el recuento debido a la re-emisión. Los niveles de HT se verán muy reducidos en favor de un incremento del HTO. Pero el origen del aumento de este tritio no se debe al óxido de tritio primario, sino a una conversión del HT en HTO. El proceso de pérdida de concentración del tritio inicial depositado está representado por la tasa de empobrecimiento traducida como la tasa de transferencia o pérdida del tritio de la superficie en otros niveles del subsuelo o bien a otros componentes como raíces y tubérculos, que se analizarán posteriormente. En la práctica es muy dependiente del entorno de la deposición, suelo y/o vegetal, parámetros como: tipo de suelo, porosidad, leyes de Darcy, actividad fotosintética, humedad e intensidad solar. El tritio no permanece en las zonas superficiales del suelo si no que, o bien se evapora, o penetra en las capas inferiores pudiéndose encontrar finalmente en la capa freática. Una vez que el tritio se ha depositado en el suelo, el óxido de tritio compite con el agua libre contenida en el propio suelo donde se intercambia con el hidrógeno del agua. El recuento de la concentración de tritio en el subsuelo se establece por capas de 15 cm hasta la longitud normal de las raíces de las plantas. Mediante ascenso capilar, el agua, y en su caso el agua tritiada, asciende debido a las diferencias de potencial matricial, pero la velocidad de ascenso se va haciendo cada vez más pequeña a medida que se reducen las diferencias de potencial. El agua puede ser absorbida por el sistema de raíces hasta alcanzar un límite (punto de marchitamiento) en el cual las raíces no pueden incorporar más agua. Todo este transporte del agua es fuertemente dependiente de la estructura del propio suelo, en especial de su porosidad.

La fuente de irradiación interna, una vez el tritio ha penetrado y se ha incorporado es continua aumentando la dosis local hasta que es eliminado por el cuerpo mediante sudoración, excreción, exhalación. El remanente de actividad dentro del cuerpo debido al tritio es difícil de cuantificar ya que todo el proceso desde la entrada del tritio al cuerpo, su retención o incorporación celular es muy complejo. Todos los tejidos blandos del organismo humano son candidatos a ser irradiados por la desintegración del tritio. Estos tejidos constituyen el 90% del peso del cuerpo, con lo que la dosimetría del tritio se considera a efectos de protección radiológica como dosis equivalente a todo el cuerpo. A todo esto se añade las propiedades químicas del tritio que hacen que se sustituya con facilidad por el hidrógeno interno en una gran cantidad de moléculas no solo de las células somáticas sino también del material genético. El tritio en sus dos formas químicas, HT y HTO puede incorporarse al tracto respiratorio por inhalación directa desde la pluma o a través de su absorción por la piel. La conversión del tritio a OBT (*Organically Bound Tritium*) establece la dosimetría en los cálculos de dosis por ingestión. Estos se realizan a partir de superar la fase temprana donde la deposición, oxidación y re-emisión han comenzado. Por todo, ello la forma

oxidada de tritio es la que se utiliza para el recuento de la dosis interna, tanto si la emisión es de HT o de HTO.

10.3.9. Daño por irradiación

El daño que la radiación puede producir sobre los materiales se puede estudiar desde dos puntos vista:

- Experimentalmente mediante una serie de pruebas que analicen el daño que la irradiación puede producir sobre la microestructura y las propiedades mecánicas de los materiales, o
- Teóricamente mediante simulación computacional.

Durante los últimos años los estudios de simulación por ordenador han ido creciendo en importancia en la investigación en todas las áreas de las ciencias debido a las posibilidades que ofrecen, no siendo una excepción el estudio de los materiales.

Entre los métodos de simulación que están teniendo un mayor impacto en la investigación de materiales se encuentra el que nos permite su estudio desde un punto de vista atomístico, tratando de adquirir conocimiento de las propiedades macroscópicas del material a partir de los datos obtenidos a nivel atómico. Precisamente esta es la metodología usada actualmente para crear modelos que nos permitan y faciliten el estudio de la respuesta de los materiales expuestos a condiciones de fusión. Este método recibe el nombre de Simulación Multiescala.

La Simulación Multiescala abarca desde cálculos *ab initio* que utilizan los modelos de la Mecánica Cuántica hasta modelos de elementos finitos que permiten calcular las propiedades macroscópicas del material pasando por dinámica molecular, difusión de defectos y dinámica de dislocaciones.

10.3.9.1. Física a resolver

El punto de partida en la Simulación Multiescala serían los cálculos mecanocuánticos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (*Density Functional Theory*, DFT). A partir de los resultados obtenidos a este nivel se crean parámetros que alimentan los siguientes métodos en la escala espacio-temporal. Por ello, la precisión de los datos logrados a escala macroscópica depende en gran medida de la precisión de los datos con los que se hayan creado los parámetros que cada método necesita. Y en última medida de poder contar con datos obtenidos a partir de cálculos mecanocuánticos de primeros principios. Dado que los electrones son en última medida los responsables de los enlaces entre los átomos que constituyen las moléculas y que finalmente forman el material, la naturaleza de los estados electrónicos determina las propiedades y la respuesta del material ante distintas situaciones externas. Sin embargo, este tipo de cálculos sólo se pueden realizar hoy en día para unos pocos cientos de átomos debido al enorme costo computacional que conllevan. Los resultados conseguidos por este método se utilizan en la obtención de los parámetros necesarios para construir los potenciales

interatómicos que se necesitan en el siguiente modelo de la escala espacio-temporal, la Dinámica Molecular.

A partir de cálculos DFT se obtienen propiedades fundamentales tales como la energía total del estado fundamental. Con sólo conocer como varía esta energía con las posiciones atómicas se consiguen datos como la geometría de equilibrio, la energía de activación para la difusión de los átomos, estabildades de los diferentes tipos de defectos o dislocación de estructuras. También las fuerzas y sus tensores, lo cual nos permite realizar simulaciones de Dinámica Molecular.

Uno de los códigos disponibles en le mercado y también de los más utilizados para este tipo de cálculos es el SIESTA (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms*).

SIESTA es tanto un método como un programa computacional para poder llevar a cabo cálculos de estructura electrónica y simulaciones de dinámica molecular *ab initio* para moléculas y sólidos. Las principales características de este programa son:

- Se basa en el método estándar del funcional de la densidad autoconsistente de Kohn-Sham y se pueden utilizar tanto la aproximación de la densidad local (LDA-LSD) como la del gradiente generalizado (GGA).
- Utiliza orbitales atómicos como funciones de base. Esto permite momentos angulares y funciones de base múltiple-zeta ilimitados así como tener en cuenta la polarización y orbitales deslocalizados.
- Proyecta la función de onda y densidad electrónicas en una red del espacio real, lo cual permite calcular los potenciales *Hartree* y de correlación-intercambio.
- Permite el uso de combinaciones lineales localizadas de orbitales ocupadas. Gracias a ello el tiempo de computación y la memoria se pueden escalar linealmente con el número de átomos.
- Está escrito en Fortran90 y la memoria se asigna dinámicamente.
- Puede compilarse para su uso en serie o en paralelo.

Las posibilidades de cálculo que este programa nos ofrece son:

- Energías totales y parciales.
- Fuerzas atómicas.
- Tensor de fuerza.
- Momento dipolar eléctrico.
- Poblaciones atómicas, de orbitales y de enlaces (*Mulliken*).

- Densidad electrónica.
- Geometrías.
- Cálculos de polarización de spin.
- Estructura de bandas.
- K-sampling de la zona de *Brillouin*.

Las necesidades computacionales para llevar a cabo cálculos *ab initio* con miles de átomos en lugar de cientos como se realizan actualmente, con el objetivo de estudiar defectos creados por irradiación de tamaños en el rango de los que se pueden observar experimentalmente.

Los cálculos típicos con esta metodología necesitan entre 10.000 y 100.000 horas de computación de un procesador convencional.

Un estudio del código SIESTA en términos de comunicación, escalabilidad con el número de procesadores, requerimientos de memoria y número total de horas de computación necesarias para un cálculo típico, nos muestra los siguientes datos:

i) Dinámica molecular

En química y física del estado sólido la Dinámica Molecular (DM) es una técnica de simulación en la que se permite que átomos y moléculas interactúen por un periodo de tiempo. En general, los sistemas moleculares son complejos y consisten de un gran número de partículas, por lo cual sería imposible encontrar sus propiedades de forma analítica. Para evitar este problema, la DM utiliza métodos numéricos. Representa un punto intermedio entre los experimentos y la teoría. Puede ser entendida como un experimento en la computadora.

La dinámica molecular es un campo interdisciplinario. Sus leyes y teorías provienen de las Matemáticas, Física y Química. Emplea algoritmos de las Ciencias de la computación y Teoría de la información. Permite entender a los materiales y las moléculas no como entidades rígidas, sino como cuerpos animados. Originalmente fue concebida dentro de la física teórica, aunque hoy en día se le utiliza sobre todo en biofísica y ciencia de materiales. Su campo de aplicación va desde superficies catalíticas hasta sistemas biológicos.

Esta técnica presenta un compromiso entre costo computacional y fiabilidad en los resultados, ya que se utilizan las ecuaciones de Newton, que son menos costosas que las de la mecánica cuántica. Es por ello que muchas propiedades que pueden resultar de interés, como por ejemplo la formación o ruptura de enlaces no puedan ser estudiadas mediante este método ya que no contempla estados excitados o reactividad.

Existen métodos híbridos denominados QM/MM (*Quantum Mechanics/Molecular Mechanics*) en los que un centro reactivo es tratado de modo cuántico mientras que el

ambiente que lo rodea se trata de modo clásico. El desafío en este tipo de métodos resulta en la definición de manera precisa de la interacción entre las dos formas de describir el sistema.

Conjunto microcanónico (NVE), la forma más simple de dinámica molecular ocurre en el conjunto microcanónico. En él, el sistema está aislado: su volumen no se altera (V) y no intercambia masa (N) ni energía (E) con el entorno. Para un sistema de N partículas con coordenadas X y velocidades V , se puede plantear el siguiente par de ecuaciones diferenciales de primer orden. La función de energía potencial $U(X)$ son las atracciones y repulsiones que sienten los átomos entre sí debido a los enlaces químicos, interacciones electrostáticas, Van der Waals, etc. de las moléculas. A $U(X)$ también se le conoce como campo de fuerza y es una función de las coordenadas de las partículas X . Normalmente proviene de cálculos de química cuántica y/o experimentos espectroscópicos. Sin embargo, el campo de fuerza generalmente tiene una forma funcional que lo hace pertenecer a la mecánica clásica. La trayectoria de las partículas es discreta en el tiempo. Normalmente se elige un paso de tiempo suficientemente pequeño (por ejemplo 1 femtosegundo) para evitar errores numéricos de discretización. Para cada paso de tiempo, se integra la posición X y velocidad V con un método simpléctico como la integración de Verlet. Dadas las posiciones iniciales (por ejemplo la estructura de rayos X de una proteína) y las velocidades iniciales (por ejemplo aleatorias y Gaussianas), es posible calcular todas las posiciones y velocidades en el futuro.

Otros Conjuntos (NVT, NPT), existen otros métodos para simular sistemas con otras características, como podría ser un sistema a temperatura fija o a presión constante. Este tipo de métodos incrementan en gran medida las posibilidades de la DM en cuanto a las propiedades de los sistemas a estudiar.

Los principales softwares utilizados para la realización de simulación computacional de Dinámica Molecular son:

- Los códigos de computación más ampliamente utilizados en la ciencia de materiales son el código LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) desarrollado en los laboratorios Sandia de Estados Unidos, y el código MDCASK, desarrollado en el laboratorio Nacional Lawrence Livermore, también en EE.UU. Ambos códigos son códigos en paralelo, pudiendo hacer uso de múltiples procesadores para realizar un cálculo, lo que amplía las posibilidades de los sistemas estudiados tanto en tiempo como en dimensiones. Su escalabilidad, es decir, su eficiencia a la hora de realizar dichos cálculos paralelos, es casi lineal por lo que empleando un número mayor de procesadores se pueden realizar cálculos con mayor número de partículas interactuando más tiempo, ganando en ergodicidad y estadística.
- *Monte Carlo Cinético*. El método de Monte Carlo cinético (KMC) es una simulación computacional basada en un Monte Carlo que tiene la intención de simular la evolución temporal de algunos procesos que ocurren en la naturaleza. Típicamente estos procesos son los que ocurren con una probabilidad por unidad de tiempo dada. Es importante entender que estas probabilidades son entradas al algoritmo KMC, el método en sí mismo no puede predecirlos.

El método KMC es esencialmente el mismo que el método de Monte Carlo dinámico y el algoritmo Gillespie, la diferencia principal parece estar en la terminología y las áreas de uso: KMC es utilizado principalmente en la física mientras el método "dinámico" sobre todo se usa en la química.

El algoritmo KMC para simular la evolución temporal de un sistema donde algunos procesos pueden ocurrir con la probabilidad por unidad de tiempo r conocida puede ser escrito por ejemplo así:

- i. Inicializar el tiempo $t = 0$.
- ii. Crear una lista con todos los eventos posibles en el sistema con tasa r_i
- iii. Calcular la función acumulativa donde N es el número total de posibles transiciones.
- iv. Obtener un número aleatorio de una distribución uniforme u' $[0, 1]$
- v. Encontrar el evento que se va a llevar a cabo i encontrando el i para el cual $R_{i-1} < u'R \leq R_i$.
- vi. Llevar a cabo el evento i .
- vii. Recalcular todas las probabilidades r_i que hayan podido cambiar. Si es necesario, añadir o quitar transiciones i . Actualizar la lista de eventos.
- viii. Obtener un Nuevo número aleatorio de una distribución uniforme u $[0, 1]$.
- ix. Actualizar el tiempo siguiendo una distribución de Poisson $t = t + \Delta t$ donde $\Delta t = -\log u/R$
- x. Continuar al paso 2.

Este algoritmo se conoce en fuentes diferentes de forma diversa como el algoritmo de tiempo de residencia o el *n-fold way* o el Bortz-Kalos-Liebowitz (BKL) el algoritmo o simplemente el algoritmo de Monte Carlo cinético (KMC).

Como ejemplo de uso el KMC se ha empleado en las simulaciones de, por ejemplo, los sistemas siguientes físicos: la difusión superficial, el crecimiento superficial, la difusión de vacante en aleaciones (esto era el empleo original en (1966 *Young*), La movilidad de defectos y *clustering* en sólidos irradiados.

Para dar una idea de lo que "los objetos" y "eventos" pueden ser en la práctica, aquí está un ejemplo concreto, correspondiente al ejemplo 2 de crecimiento superficial.

Se considera un sistema donde átomos individuales se depositan sobre una superficie uno por uno (típico de deposición de vapor física), pero también pueden emigrar sobre la superficie con algún salto conocida la tasa w . En este caso "los objetos" del algoritmo KMC son simplemente los átomos individuales.

Si dos átomos llegan a estar directamente el uno al lado del otro, ambos pasan a ser inmóviles. Entonces el flujo de átomos entrantes determina una tasa r_{deposit} , y el sistema puede ser simulado con KMC considerando todos los átomos depositados móviles si aún no han encontrado a un vecino y se han

hecho inmóviles. En este modelo existen los siguientes posibles eventos en cada paso de KMC:

- Un nuevo átomo entra con la tasa r_{deposit}
- Un átomo ya depositado salta un paso con probabilidad w .

Después de que un evento se ha seleccionado y realizado con el algoritmo KMC, se necesita comprobar si el nuevo átomo o el átomo que ha saltado se ha situado inmediatamente adyacente a algún otro átomo. Si esto ha pasado, el átomo(s) que es ahora adyacente tiene que ser sacado de la lista de átomos móviles, y en proporción sus posibles eventos de salto quitados de la lista de posibles eventos.

Naturalmente, en la aplicación de KMC a problemas en la física y la química, se tiene que considerar si el verdadero sistema sigue las suposiciones que son la base de KMC. Los procesos en un sistema real no necesariamente tienen probabilidades bien definidas, los procesos de transición pueden ser correlacionados, en caso de que el átomo o la partícula salte, el salto podría no ocurrir en direcciones arbitrarias, etcétera. Simulando escalas de tiempo extensamente dispares también ha de tenerse en cuenta si nuevos procesos pueden estar presentes en ese lapso de tiempo. Si alguno de estos problemas está presente en una simulación, los resultados pueden diverger de la realidad o ser completamente erróneos.

El método KMC puede ser subdividido por como los objetos se mueven o las reacciones tienen lugar. Al menos las subdivisiones siguientes son usadas:

- *Lattice KMC* (LKMC): significa KMC realizado sobre una red atómica. A menudo también llamada *atomistic KMC*, (AKMC). Un ejemplo típico es la simulación de difusión de vacante en aleaciones, donde se permiten a una vacante saltar por los sitios de red con las probabilidades de salto dependientes de la composición local. El código más ampliamente utilizado siguiendo este modelo es el LAKIMOCA, desarrollado por EDF en Francia.
- *Object KMC* (OKMC): quiere decir KMC realizado para defectos o impurezas, que saltan en direcciones arbitrarias o específicas de la red. Sólo las posiciones de los objetos que saltan son incluidas en la simulación, no aquellos de los átomos de la red 'de fondo'. El paso básico de KMC es el salto de un objeto. El código que se usa en este caso es el BIGMAC desarrollado en LLNL, USA.
- *Event KMC* (*Event Kinetic Monte Carlo*, EKMC) o *First-passage KMC* (FPKMC) se aplica a una variedad de OKMC donde la reacción siguiente entre objetos (por ejemplo el *clustering* de dos impurezas o la aniquilación intersticial-vacante) es escogida con el algoritmo KMC, tomando las posiciones de objeto en consideración, y este evento se realiza entonces inmediatamente¹⁵⁸. El código más conocido para resolver este modelo es JERK, desarrollado por el CEA, Francia.

¹⁵⁸ Dalla Torre 2005, Opplestrup 2006

- *Parallel KMC* (PKMC). Es una modificación del algoritmo de OKMC que hace posible la resolución de este tipo de modelos en máquinas paralelas, haciendo posible así el estudio de sistemas durante un periodo de tiempo superior y de un mayor tamaño. El algoritmo y su implementación han sido recientemente desarrollados en la UPM, España en colaboración con LLNL, USA.

Sin embargo, en la práctica las simulaciones de Monte Carlo están limitadas a pequeños volúmenes (del orden de un cubo de $1 \mu\text{m}$, dependiendo de las condiciones) y resultan ser computacionalmente muy caras cuando las dosis de irradiación son muy altas y/o las escalas temporales de los tiempos de vida en un reactor nuclear quieren ser investigadas.

Estas limitaciones pueden ser eliminadas usando la Teoría de Tasas (o *Rate Theory*, RT en adelante). En estos modelos, basados en la aproximación de campo medio, se modela la difusión de defectos mediante un sistema de ecuaciones de difusión-reacción, en donde se describe la nucleación o crecimiento de los clusters mediante la llamada ecuación maestra. En este modelo, la evolución de la concentración media de una impureza o de un cluster de un tamaño dado está gobernada por una ecuación de continuidad. El sistema se representa entonces mediante un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas (de cientos a decenas de miles de ecuaciones). Las tasas, como los coeficientes de difusión o las frecuencias de disociación, se calculan a partir de los mismos datos de entrada usados en cinética de MonteCarlo (KMC), por tanto, los dos métodos se basan en los mismos parámetros.

Los bajos recursos computacionales requeridos por la RT permiten explorar la evolución de los defectos a lo largo de escalas temporales y espaciales grandes, cercanas a las alcanzadas experimentalmente, lo que la convierte en una técnica muy atractiva. Sin embargo, una de las suposiciones fundamentales de la aproximación de campo medio es que la producción de defectos es uniforme en el espacio y el tiempo. En otras palabras, la teoría de tasas no guarda un registro de la posición de cada defecto, sino que calcula la concentración media de un tipo de defecto dado. Por tanto, cuando se han de tener en cuenta mecanismos complejos, los resultados obtenidos mediante RT pueden no coincidir con los alcanzados mediante KMC. Por ejemplo, el método RT no puede tratar la recombinación de defectos I-V correlacionados generados por irradiación.

Los métodos KMC y RT son, por tanto, complementarios, y pueden usarse englobados dentro de una estrategia de simulaciones multiescala.

El código de Teoría de Tasas PROMIS 1.5 ha sido desarrollado por S. Selberherr y P. Pichler en la Universidad de Tecnología de Viena (TU Vienna). Permite resolver las ecuaciones generales de difusión en 1D o 2D con condiciones de contorno generales. Los términos de generación-recombinación, las condiciones de contorno y los flujos de difusión dirigidos o inducidos por un campo eléctrico pueden implementarse fácilmente si es necesario. Los parámetros de entrada requeridos para el cálculo de las tasas son los mismos que se usan en KMC.

Debido a que el método KMC almacena la posición de cada defecto, las necesidades computacionales aumentan enormemente cuando el número de defectos se incrementa (por ejemplo, a altas dosis de irradiación). Un problema típico puede demandar desde unos pocos días de tiempo de computación hasta miles de horas. Existe por tanto unas importantes necesidades computacionales a la hora de realizar cálculos de KMC.

El método RT necesita muy pocos recursos computacionales. Un experimento típico de desorción de He, que consta de varios miles de ecuaciones diferenciales parciales, requiere solo unos minutos de computación en un típico procesador Pentium. Por otro lado, la obtención de parámetros libres de datos experimentales puede requerir cientos o miles de simulaciones. Por ello, en algunos casos, el método RT puede demandar unas necesidades computacionales moderadas.

ii) Dinámica de Dislocaciones

La plasticidad de cristal en materiales deformados es gobernada por el comportamiento colectivo de los conjuntos grandes de dislocaciones. Aunque las leyes de continuo basadas en la densidad de dislocaciones eficaz puedan ser formuladas para describir la respuesta macroscópica del material bajo una variedad de condiciones de carga, el movimiento de dislocaciones y las interacciones entre ellas son los fenómenos heterogéneos que muestran una dependencia intrincada en la microestructura subyacente. Los detalles de estas interacciones, que son a menudo importantes en muchos casos, se pierden en modelos de continuo basados en la densidad de dislocación media. En este sentido, métodos atomísticos se han utilizado ampliamente para estudiar mecanismos de interacción de dislocación aislados. No obstante, estos sufren limitaciones en la escala espacio y tiempo y por lo tanto fallan en capturar correctamente el carácter de largo alcance de campos de tensión de dislocación, sin hablar de la naturaleza estadística de la plasticidad del cristal.

Alternativamente, la dinámica de dislocación es un acercamiento directo que intenta simular el comportamiento agregado de conjuntos de dislocación grandes en la mesoscala, descomponiendo las líneas de dislocación de curvatura y carácter arbitrarios en segmentos rectilíneos¹⁵⁹. Sin embargo, el número de segmentos, N , puede hacerse bastante grande para simulaciones significativas, y el cómputo de fuerzas de largo alcance es una $O \sim N^2$, por lo que el problema puede hacerse computacionalmente intenso para sistemas grandes.

El uso de DD para modelar un aspecto u otro de la plasticidad de un cristal en metales en 3D comenzó a finales de los años 1980 con el trabajo pionero de Kubin et al.¹⁶⁰ y Ghoniem et al.¹⁶¹. Sin embargo, no ha sido hasta hace poco que estudios detallados que implican geometría compleja y una densidad de dislocaciones relativamente grande han sido realizados¹⁶².

Las dislocaciones se representan como un conjunto "de nodos" conectados el uno con el otro por segmentos rectos. La posición de nodos, juntos con su

¹⁵⁹ Kubin et al., 1992; Devincere y Kubin, 1997; Kubin et al., 1998; Zbib et al., 1998; Schwarz, 1999; Ghoniem y Sol, 1999; Zbib et al., 2000; Bulatov et al., 2001; Cai et al., 2004.

¹⁶⁰ Lepinoux y Kubin, 1987; Kubin et al., 1992

¹⁶¹ Ghoniem y Amodeo, 1988; Amodeo y Ghoniem, 1991.

¹⁶² Verdier et al., 1998; Shenoy et al., 2000; Espinilla et al., 2001; Dupuy y Fivel, 2002; Madec et al., 2002; Kubin et al., 2003; Depres et al., 2003; Shehadeh et al., 2005; Devincere et al., 2006.

conectividad, se conoce como los grados fundamentales de libertad. Si un nodo está conectado con un número n de otros nodos, se le conoce como un nodo de conectividad n . En general, un ciclo computacional va como el siguiente:

- i. Calcular la fuerza motriz $\sim f_i$ sobre cada nodo.
- ii. Calcular la velocidad $\sim v_i$ de cada nodo basado en $\sim f_i$ y el carácter de dislocación local.
- iii. Determinar el paso de tiempo conveniente Δt .
- iv. Desarrollar todos los nodos de dislocación a la t de tiempo $+ \Delta t$, manejando cambios topológicos que ocurren durante $[t, t + \Delta t]$.
- v. $t = t + \Delta t$. Continúa a 1.

Existen dos softwares o códigos ampliamente utilizados en la comunidad de la física de materiales, ParaDis y Micro3D. Ambos códigos son masivamente paralelos, lo que amplía enormemente el número de segmentos de dislocación que pueden ser tratados.

En resumen, las principales capacidades experimentales del Área de Simulación Computacional de *TechnoFusión* se pueden enumerar como:

- **Simulación**
 - Componente de investigación básica.
 - Imprescindible para un Centro de prestigio.
 - Expertos nacionales de reconocido prestigio ya existen y se pueden incorporar.
 - Colaboración con grupos universitarios garantizada.
 - Plataformas de cálculo disponibles (Europa y España).
 - Plataformas propias (desarrollo, independencia).
 - Valor añadido (propio centro y usuarios externos).

- **Adquisición y Control**
 - Un centro experimental requiere un servicio de control y adquisición de datos centralizados.
 - Acceso, coherencia, escalabilidad, seguridad, etc.
 - Posibles desarrollos propios (I+D+i).
 - Colaboraciones con otros grupos e industrias.
 - Libera a los usuarios de dificultades y simplifica la operación del Centro.

- **Análisis y Visualización**
 - Nuevo paradigma científico.
 - Adquisición y generación nunca vistas.
 - Procesos de análisis mucho menos desarrollados.
 - Extracción de toda la información disponible.
 - Desarrollo de técnicas propias.
 - Colaboración con otros grupos (biomedicina, etc.)
 - Retornos a la industria nacional.

- **Soporte**
 - Se va a necesitar redes y puestos de ofimática.

- Adquirir, mantener y *soportar* bienes informáticos (hardware y software).
- Por coherencia su gestión debe estar centralizada.
- Redes privadas de control, adquisición y almacenamiento.
- Redes para la conexión con otros centros e Internet.
- Seguridad.

- **Recursos Humanos**
 - Científicos incluyendo Ciencia de materiales, Plasma nuclear, Ingeniería, Fluidodinámica, Robótica y Electrónica (simulaciones, etc.), además de Ciencia computacional (algoritmos, etc.)
 - Técnicos.
 - Sistemitas, operadores, analistas y programadores.
 - Diseño, pruebas y fabricación (laboratorios, etc.).
 - Administración (gestión, compras, formación, etc.).
 - Colaboraciones y Contactos imprescindibles.

- **Recursos Materiales Informáticos**
 - Genéricos.
 - Redes internas y externas (seguras).
 - Puestos de ofimática (eficaces).
 - Específicos.
 - Almacenamiento (seguro y masivo).
 - Procesamiento (acceso, análisis y visualización).
 - Cálculo (desarrollo y producción).Nuevos Desarrollos (control, adquisición, tiempo real, etc.)

A continuación, en la Tablas de 10.1 a 10.5 se muestra el estado de conocimiento de los diferentes modelos de simulación detallados anteriormente, así como la experiencia, desarrollo, validación y uso final de los mismos llevados a cabo por las organizaciones participantes en el Área de Simulación Computacional de *TechnoFusión*.

Tabla 10.1. Estado del arte de modelos de simulación, experiencia (E), desarrollo (D), validación (V), uso final (U) por áreas temáticas y códigos de simulación.

Área	Código	Nivel de conocimiento	Área	Código	Nivel de conocimiento
Datos nucleares			TH Sistema		
Librerías de Activación	EAF2003/05/07	E	RELAP INEL-NRC.USA		E, D, V, U
Librerías de Transporte	JEFF31 ENDF/B-VII JENDL-HE FENDL HENDL	E	Sensibilidad e incertidumbres		
			SUSD3D Uncertainty code package. NEA/Kodeli I.		E, D, V, U
Códigos de procesamiento de datos nucleares			Contención		
NJOY LANL.USA/JEFF.NEA Librerías de ENDF/JEFF		E, D, V, U	CONTAIN Sandia/NRC.USA. Termohidráulica de contención		E, D, V, U
PREPRO2000 LLNL/D.E. Cullen		E, D, V, U	Accidentes severos		
Códigos de física nuclear			MELCOR Sandia/NRC.USA. Código integral de accidentes severos		E, D, V, U
TALYS Simulation of nuclear reactions NRG/A. Koning		E, D, V, U	MAAP/SCDAP NRC.USA. Severe Accident Phenomena and Plant Evaluations – FAI		E, D, V, U
EMPIRE-II Nuclear Reaction Model Code IAEA		E, D, V, U	Daño por irradiación		
Cálculo de transporte: Monte Carlo			PERFECT/GETMAT EU-FP6/FP7		E, D, V, U
TRIPOLI EU-NURESIM (CEA.fr)		E, D, V, U	MDCASK (dinámica molecular clásica)		E, D, V, U
MCNP LANL.USA		E, D, V, U	BIGMAC (Difusión defectos – MonteCarlo)		E, D, V, U
PHITS Particle & Heavy-Ion Transport (KEK.jp)		E, D, V, U	SIESTA ("ab-initio")		E, D, V, U
FLUKA/GEANT CERN		E, D, V, U	LAMMPS (Dinámica Molecular Clásica)		E, D, V, U
PENELOPE NEA/Univ. Barcelona.es		E, D, V, U	DD3D (Dinámica dislocaciones)		E, D, V, U
Cálculo de transporte: SN			TBSIC (DM Tight Binding para SiC)		E, D, V, U
TORT-DORT neutron & gamma SN Transport ORNL		E, D, V, U	Evaluación, emplazamiento, dosis ambiental, tritio		
ATILA neutron & gamma			GASPAR/LADTAP/XOQDOQ NRC.USA (Dosis de efluyentes)		E, D, V, U
TWODANT/THREEDANT			MACCS2 RSICC.usa Consecuencias radiológicas y económicas de accidentes		E, D, V, U
Interfaz geométrica			PC-CREAM Metodología Comisión Europea Dosis de Efluyentes		E, D, V, U
MCAM		E, D, V, U	COSYMA FZK y NRPB, Comisión Europea. Consecuencias Radiológicas y Económicas de accidentes		
McCAD					E, D, V, U
GEOMIT			Interfaz gráfica		
DAGMC			VisualBUS		
SNAM			MORITZ		E, D, V, U
Interfaz gráfica			SABRINA		
Inventario isotópico y activación			Análisis de probabilidad estadística		
ORIGEN/SCALE ORNL+LANL.USA		E, D, V, U	SHAPHYRE 6.0 INEL para la NRC, USA		E, D, V, U
ACAB UNED.es		E, D, V, U	TH CFD		
FISPACT UKAEA		E, D, V, U	ANSYS-CFX Comercial (ANSYS.USA)		E, D, V, U
MONTEBURNS MCNP+ORIGEN/CINDER LANL.USA		E, D, V, U	FLUENT Comercial (ANSYS.USA)		E, D, V, U

10.4. Requerimientos de espacios físicos, instalaciones y seguridad

(I) Espacios físicos e instalaciones requeridas

Al pretender ser usuario de los grandes ordenadores nacionales ya existentes el Área ASC de *TechnoFusión* no requerirá contar con grandes infraestructuras. En concreto necesitará de los siguientes espacios físicos:

- 1 sala de 30 m² para albergar los equipamientos de análisis y sistemas de adquisición.
- 1 sala de 30 m² para la instalación de los instrumentos y máquinas auxiliares.
- 1 almacén de 20 m².
- 100 m² para despachos del personal y servicios.

(II) Seguridad

Las actuales simulaciones pueden llegar a demandar grandes tiempos de procesamiento y operación en los ordenadores actuales, siendo necesario el trabajando ininterrumpido evitando posibles cortes o subidas de tensión en la red eléctrica local, por lo es necesario contar con sistemas de protección denominados *Uninterruptible Power Supply (UPS)*, capaces de suministrar corriente durante el corte en el suministro eléctrico hasta su reanulación o al menos hasta varias horas. De esta manera, al mismo tiempo, se pueden proteger frente a pérdidas de ficheros a los servidores generales de almacenamiento de datos del sistema de adquisición y procesado