



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR
COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR
CENTRO REGIONAL DE CIÊNCIAS NUCLEARES DO NORDESTE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIAS ENERGÉTICAS E
NUCLEARES

CAIO JÚLIUS CÉSAR MIRANDA RODRIGUES DA CUNHA

**ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA DE UM CONJUNTO COMBUSTÍVEL DO
REATOR AP1000 COM O USO DE ÓXIDOS MISTOS DE U/Th**

Recife

2019

CAIO JÚLIUS CÉSAR MIRANDA RODRIGUES DA CUNHA

**ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA DE UM CONJUNTO COMBUSTÍVEL DO
REATOR AP1000 COM O USO DE ÓXIDOS MISTOS DE U/Th**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares para obtenção do título de Mestre em Tecnologias Energéticas e Nucleares.

Área de Concentração: Engenharia de Reatores.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima

Co-orientador: Prof. Dr. Giovanni Laranjo de Stefanni

Recife

2019

Catálogo na fonte
Bibliotecário Carlos Moura, CRB-4 / 1502

C972a Cunha, Caio Július César Miranda Rodrigues da.
Análise termohidráulica de um conjunto combustível do reator AP1000 com o uso de óxidos mistos de U/Th. / Caio Július César Miranda Rodrigues da Cunha. - Recife, 2019.
82 f. : il.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima.
Coorientador: Prof. Dr. Giovanni Laranjo de Stefanni.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, 2019.
Inclui referências e apêndice.

1. Engenharia nuclear. 2. AP1000. 3. PWR. 4. Tório. 5. Termohidráulica. 6. CFX. I. Lima, Fernando Roberto de Andrade, orientador. II. Stefanni, Giovanni Laranjo de, coorientador. III. Título.

621.48 CDD (22. ed.)

UFPE/BDEN-2019/27

CAIO JÚLIUS CÉSAR MIRANDA RODRIGUES DA CUNHA

**ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA DE UM CONJUNTO COMBUSTÍVEL DO
REATOR AP1000 COM O USO DE ÓXIDOS MISTOS DE U/Th**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares para obtenção do título de Mestre em Tecnologias Energéticas e Nucleares.

Aprovada em: 29/07/2019.

BANCA EXAMINADORA

Prof^o. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^o. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira (Examinador Interno)
Centro Regional de Ciências Nucleares

Prof^a. Dr^a. Daniel González Rodríguez (Examinador Externo)
Centro Regional de Ciências Nucleares

Prof^o. Dr. Leorlen Yunier Rojas Mazaira (Examinador Externo)
Centro Regional de Ciências Nucleares

Dedico esse trabalho a pessoa que sempre acreditou nos meus sonhos, sendo eles possíveis ou impossíveis, que está sempre ao meu lado em todas as etapas da vida, que é meu porto seguro, que sozinha cumpre dignamente até os dias de hoje os papéis de mãe e pai. Dedico esta ao meu ponto referencial, MINHA MÃE.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus por me manter estável psicologicamente nos momentos de turbulência, sendo assim a chave principal para a conclusão deste trabalho. Alguns agradecimentos devem ser prestados aqueles docentes e amigos que estiveram presentes durante essa caminhada, sendo o primeiro deles meu orientador, professor Fernando Roberto de Andrade Lima a quem devo a honra de sua orientação, seu incentivo diário e por acreditar na minha vontade de aprender. Agradeço imensamente a oportunidade que me foi oferecida. Uma pessoa que dispensa qualquer comentário é Daniel González Rodríguez, um amigo que essa caminhada acadêmica me deu, além de ter me acompanhado a todo o momento durante a produção deste trabalho, também uma humildade em pessoa. Outra pessoa que com quem aprendi muito foi com um cara chamado Jesus, um monstro em conhecimento de reatores e que me auxiliou bastante durante o pontapé desta jornada, sou muito grato pelos poucos momentos que pude passar com esse ser humano incrível. Agradeço também a todos os demais professores que fizeram parte da minha formação, aos professores Mário e Jair pela formação de uma base bastante consolidada da engenharia nuclear, ao professor Vinicius pelo conhecimento compartilhado sobre proteção radiológica. Outra pessoa que não se pode esquecer é o professor Carlos Brayner de Oliveira Lira, que embora o pouco contato, sempre muito incisivo para a construção de um conhecimento sólido. Após essas autoridades, aos meus colegas de pós-graduação pelos bons momentos após etapas vencidas, como também por saber se já caiu ou não, se tinha mais alguém lecionando as aulas, piadas internas e por todos os outros momentos que marcaram essa etapa da vida. Agradeço a minha família, mais especificamente minha mãe e irmã, por estarem ao meu lado sempre, independente se o desafio é grande ou pequeno, na vitória ou na derrota. Obrigado família, amo vocês demais.

RESUMO

O cenário energético brasileiro está passando por mudanças desde os últimos cinco anos, no qual, as fontes renováveis de energia estão exercendo uma participação cada vez maior, apresentando um crescimento constante, ao contrário da nuclear que vive uma estagnação. Novas pesquisas veem sendo desenvolvidas desde a última década com relação ao uso do tório como possível alternativa para os problemas futuros em relação ao urânio, além da possibilidade de aplicação em reatores que estão em operação atualmente, bem como sua utilização em reatores inovativos (Geração IV). O tório possui características bastante atraentes para as centrais nucleares, como é o caso de suas propriedades termofísicas e suas características neutrônicas, que acarreta nos principais atrativos que são a capacidade de produção do U^{233} ; redução da produção de plutônio; bem como de actínídeos menores, destacando-se tanto no âmbito da geração de energia, quanto da sustentabilidade. No presente trabalho, um estudo termohidráulico do reator AP1000 foi desenvolvido com a finalidade de avaliar uma possível mudança no combustível, este por sua vez, deixando de operar com UO_2 e passando a ser formado por uma mistura de óxidos de $(U,Th)O_2$. Os resultados obtidos apresentam a possibilidade de conversão do combustível com relação aos valores encontrados para os limites térmicos, os quais estão dentro do intervalo de aceitação informado nos relatórios divulgados pela construtora Westinghouse, como também em relação à literatura. O acoplamento neutrônico/termohidráulico foi realizado através do software MCNP6 (para os cálculos neutrônicos) e do Ansys CFX (para a análise termohidráulica). Os resultados revelaram uma densidade de potência máxima inferior ao comumente obtido no AP1000, corroborando com os critérios de segurança. Em consonância com a densidade de potência, a temperatura máxima atingida no combustível também foi encontrada inferior, assim como para os demais elementos que compõem as varetas.

Palavras-chave: AP1000. PWR. Tório. Termohidráulica. CFX.

ABSTRACT

The Brazilian energy scenario has been changing since the last five years, in which renewable energy sources are playing an increasing share, presenting steady growth, unlike the nuclear one that is stagnating. New research has been underway since the last decade regarding the use of thorium as a possible alternative to future uranium problems, as well as the possibility of application in reactors that are currently in operation, as well as its use in innovative reactors (Generation IV). Thorium has very attractive characteristics for nuclear power plants, as in the case of its thermophysical properties and its neutron characteristics, which entails the main attractions that are the production capacity of U^{233} ; reduction of plutonium production; as well as smaller actinides, highlighting both energy generation and sustainability. In the present work, a thermohydraulic study of the AP1000 reactor was developed in order to evaluate a possible change in fuel, which in turn cases to operate with UO_2 and is formed by a mixture of $(U, Th)O_2$. The results show the possibility of fuel conversion in relation to the values found for the thermal limits, which are within the acceptance range informed in the reports released by the Westinghouse construction company, as well as in relation to the literature. The neutron/thermohydraulic coupling was performed using MCNP6 software (for the neutronic calculations) and Ansys CFX (for the thermohydraulic analysis). The results revealed a maximum power density lower than commonly obtained in the AP1000, corroborating the safety criteria. In line with the power density, the maximum temperature reached in the fuel was also found lower, as well as for the other elements that make up the rods.

Keywords: AP1000. PWR. Thorium. Thermohydraulic. CFX.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Matriz elétrica brasileira 2017/2018.....	14
Figura 2 –	Variação na geração elétrica entre os anos de 2017 e 2018 incluindo todas as fontes.....	15
Figura 3 –	Relação entre a produção e o consumo anual de Urânio.....	16
Figura 4 –	Comparação da radiotoxicidade dos rejeitos para diversos ciclos de combustível.....	21
Figura 5 –	Esquema simplificado de uma planta de geração de energia de reatores PWR.....	25
Figura 6 –	Perspectiva isométrica do circuito primário do reator AP1000.....	26
Figura 7 –	Vaso de pressão do reator AP1000.....	27
Figura 8 –	Configuração do conjunto combustível do reator AP1000.....	28
Figura 9 –	Associação das etapas de um modelo CFD.....	38
Figura 10 –	Tipos de elemento de controle.....	39
Figura 11 –	Volume de controle utilizado pelo código CFX.....	42
Figura 12 –	Condutividade térmica do UO_2 em dependência com a temperatura.....	50
Figura 13 –	Estudo da correlação da condutividade térmica para o MOX.....	52
Figura 14 –	Densidade do UO_2 e ThO_2 como uma função da temperatura.....	53
Figura 15 –	Estudo da variação térmica da densidade para o MOX.....	54
Figura 16 –	Estudo da variação térmica do calor específico para o MOX.....	56
Figura 17 –	Diagrama do acoplamento neutrônico – termohidráulico.....	58
Figura 18 –	Descrição do conjunto combustível utilizado para os cálculos neutrônicos e termohidráulicos.....	59
Figura 19 –	Esquema do núcleo do reator AP1000.....	60
Figura 20 –	Vista isométrica do conjunto combustível típico do reator AP1000.....	61
Figura 21 –	Vista superior de 1/8 do conjunto combustível do reator AP1000.....	61
Figura 22 –	Assimetria de faces ou células.....	63
Figura 23 –	Razões jacobianas para triângulos e quadriláteros.....	64
Figura 24 –	Limites para avaliação da qualidade da malha.....	64
Figura 25 –	Estudo da distribuição axial da densidade de potência.....	67
Figura 26 –	Comparação da distribuição axial da densidade de potência inicial e após o processo iterativo.....	68
Figura 27 –	Campo de temperaturas do fluido refrigerante na saída do conjunto.....	69
Figura 28 –	Distribuição axial da temperatura média do fluido refrigerante.....	69
Figura 29 –	Distribuição axial da temperatura do refrigerante.....	70

Figura 30 –	Distribuição axial da densidade do refrigerante para o MOX (U,Th)O ₂ e UO ₂	70
Figura 31 –	Varição da pressão no fluido refrigerante para o combustível MOX (U,Th)O ₂ e UO ₂	71
Figura 32 –	Plano de temperatura máxima no conjunto combustível.....	72
Figura 33 –	Distribuição axial da temperatura na linha central do combustível.....	72
Figura 34 –	Distribuição radial da temperatura na barra mais quente.....	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Uso da energia elétrica no Brasil em 2017 e 2018.....	13
Tabela 2 –	Evolução das fontes renováveis de energia de 2015 a 2018.....	13
Tabela 3 –	Geração elétrica (GWh) a partir de fontes renováveis no ano de 2017 e 2018.....	14
Tabela 4 –	Capacidade instalada (MW) das fontes renováveis entre 2017 e 2018.....	15
Tabela 5 –	Estimativa das reservas de tório no mundo.....	18
Tabela 6 –	Recursos potenciais do Th no Brasil.....	18
Tabela 7 –	Propriedades neutrônicas dos isótopos físséis U^{233} ; U^{235} ; Pu^{239} ; Pu^{241} no espectro térmico.....	19
Tabela 8 –	Produção relativa de actínídeos menores em diversos ciclos.....	20
Tabela 9 –	Comparação dos parâmetros de projeto dos reatores AP600 e AP1000....	28
Tabela 10 –	Dimensões do conjunto combustível do reator AP1000.....	29
Tabela 11 –	Vantagens e desvantagens do modelo k – epsilon (k-ε).....	47
Tabela 12 –	Parâmetros termofísicos do interstício, barra de controle e revestimento.	57
Tabela 13 –	Frações Mássicas do MOX.....	59
Tabela 14 –	Informações estruturais do reator AP1000.....	61
Tabela 15 –	Parâmetros utilizados para a avaliação da qualidade da malha.....	65
Tabela 16 –	Parâmetros introduzidos no software.....	65

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BOC	Begin of Cycle (reactor)
BOL	Begin of Life (reactor)
CFD	Computational Fluid Dynamics
EFPD	Effective Full Power Day
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
EOL	End of Life (reactor)
FIR	Fissile Inventory Ratio
IAEA	International Atomic Energy Agency
IFBA	Integral Fuel Burnable Absorber
LEU	Low Enriched Uranium
LOCA	Loss of Coolant Accident
MDNBR	Minimum Departure from Nucleate Boiling Ratio
MOX	Mistura de Óxidos
MSRE	Molten Salt Reactor Experiment
MSR	Molten Salt Reactor
NPP	Nuclear Power Plant
NRC	Nuclear Regulatory Commission
ORNL	Oak Ridge National Laboratory
PWR	Pressurized Water Reactor
SCWR	Supercritical Water Reactor
WNA	World Nuclear Association

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	13
1.1	OBJETIVO GERAL.....	23
1.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	23
2	REVISÃO DE LITERATURA.....	24
3	METODOLOGIA.....	37
3.1	MODELO DE DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL.....	37
3.1.1	Equações de conservação.....	39
3.1.2	Métodos de discretização.....	41
3.2	MODELOS FÍSICOS USADOS NA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	42
3.2.1	Modelos de turbulência.....	42
3.2.2	Modelos de transferência de calor.....	47
3.2.3	Modelos do fluxo próximo a uma parede.....	48
3.3	DESCRIÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL UTILIZADO PARA O CÁLCULO TERMOHIDRÁULICO DE UM CONJUNTO COMBUSTÍVEL TÍPICO DO REATOR AP1000.....	49
3.3.1	Avaliação das propriedades termofísicas do combustível (U,Th)O₂.....	49
3.3.1.1	Condutividade térmica.....	49
3.3.1.2	Densidade.....	52
3.3.1.3	Calor específico.....	55
3.3.2	Determinação da densidade de potência no conjunto combustível típico do reator AP1000.....	57
3.3.3	Descrição e modelagem do conjunto combustível típico do reator AP1000.....	60
3.3.3.1	Construção da geometria.....	60
3.3.3.2	Desenvolvimento da malha.....	62
3.3.3.3	Condições de contorno.....	65
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	67
4.1	ACOPLAMENTO NEUTRÔNICO – TERMOHIDRÁULICO.....	67
4.2	ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA.....	68
5	CONCLUSÃO.....	75
	REFERENCIAS.....	77
	APÊNDICE A – TAXA DE DISSIPACÃO VISCOSA.....	81

1 INTRODUÇÃO

Conforme o relatório simplificado do balanço energético brasileiro realizado pela empresa de pesquisa energética (EPE) no ano de 2019, com base em seu ano anterior, destaca-se uma redução de 1,7% na oferta interna de energia, isto é, a soma de todas as energias disponíveis no país. Em termos da energia elétrica foi verificado um avanço na oferta interna, com um percentual de 1,7% em relação a 2017 (EPE, 2019). Devido às condições hidrológicas favoráveis, observou-se um aumento de 4,1% na energia proveniente de recursos hídricos com relação ao seu ano anterior. Outro destaque no relatório é a participação das energias renováveis na matriz energética, que atingiu 83,3% em 2018. O consumo final referente à energia elétrica no Brasil no ano de 2018 registrou um avanço de 1,4%, isto foi devido a uma contribuição em valores absolutos de 1,8TWh (+1,3%) no consumo residencial, seguido de 1,7TWh (+5,4%) no energético, 1,2TWh (+0,6%) no setor industrial e 1,1TWh (+3,9%) referente ao agropecuário (EPE, 2019). Os valores referentes à oferta interna de energia elétrica e ao consumo final nos anos de 2017 e 2018 são apresentados na Tabela 1 (EPE, 2019).

Tabela 1 – Uso da energia elétrica no Brasil em 2017 e 2018

Valores em TWh	2017	2018
Oferta Interna de E. Elétrica	625,7	636,4
Consumo Final	528,1	535,4

Fonte: Adaptado de EPE (2019).

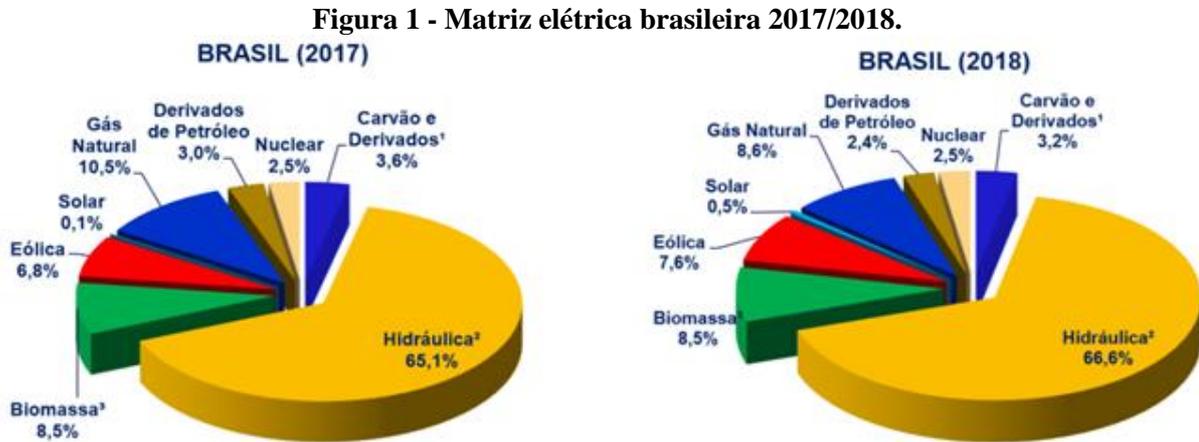
A matriz elétrica brasileira é bastante diversificada em termos de fontes, uma vez que possui meios para tais. Atualmente a fonte de maior relevância ainda é a hidroelétrica, esta é definida como energia de base, entretanto, ao passar dos anos as fontes renováveis vem demonstrando uma evolução significativa, como apresenta a Tabela 2 (EPE, 2019).

Tabela 2 – Evolução das fontes renováveis de energia de 2015 a 2018.

Fonte	Ano			
	2015	2016	2017	2018
Hidroelétrica	64,0%	68,1%	65,2%	66,6%
Eólica	3,5%	5,4%	6,8%	7,6%
Solar	0,0%	0,0%	0,1%	0,5%
Biomassa	8,0%	8,2%	8,5%	8,5%
Nuclear	2,4%	2,6%	2,5%	2,5%

Fonte: Adaptado de EPE (2019/2018/2017).

A evolução destas fontes renováveis entre os anos de 2017 e 2018 e a consequente redução das não renováveis, como é caso do gás natural, que apresenta uma diminuição de 1,9% é apresentada na Figura 1 (EPE, 2019).



Fonte: EPE (2019).

De acordo com a Figura 1, além do gás natural, outras fontes não renováveis apresentam uma redução promissora, como é o caso de derivados de petróleo que passaram a ter uma participação de apenas 2,4% no ano de 2018. O carvão ainda não apresentou uma redução significativa, entretanto mostrou que deve seguir na mesma tendência de redução das demais fontes não renováveis. A geração elétrica relatada no final do ano de 2018 mostra claramente a mudança no panorama energético brasileiro. A Tabela 3 apresenta os valores referentes à geração elétrica por fontes renováveis nos últimos dois anos (EPE, 2019).

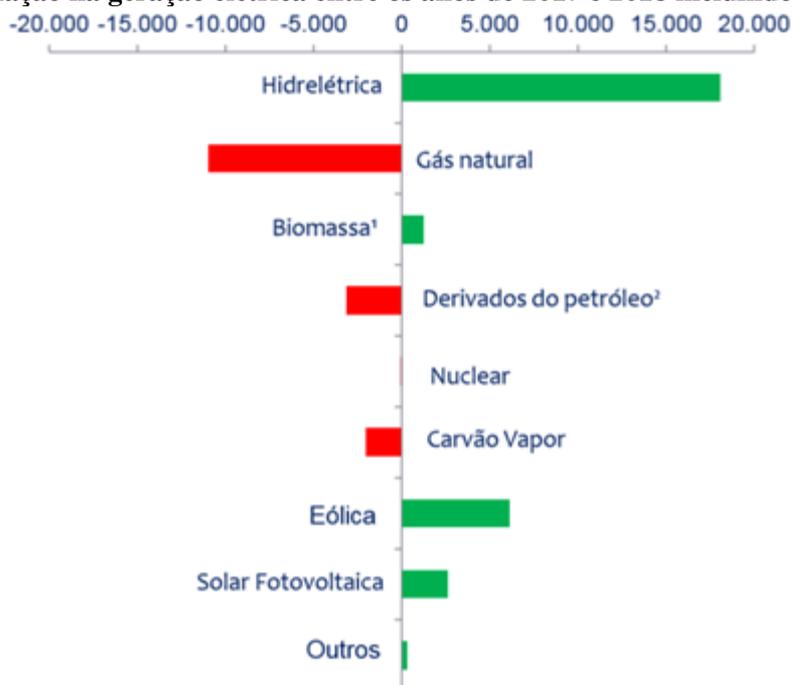
Tabela 3 – Geração elétrica (GWh) a partir de fontes renováveis no ano de 2017 e 2018.

Fonte	Ano	
	2017	2018
Hidroelétrica	370906	388971
Eólica	42373	48475
Solar	832	3461
Biomassa	51023	52267
Nuclear	15739	15674

Fonte: Adaptado de EPE (2019).

Neste mesmo informe da empresa de pesquisa energética do final do ano de 2018, é apresentada a variação da geração elétrica entre os anos de 2017 e 2018 incluindo todas as fontes como mostra a Figura 2, nela percebe-se o aumento das fontes renováveis e o consequente declínio das não renováveis.

Figura 2 – Variação na geração elétrica entre os anos de 2017 e 2018 incluindo todas as fontes.



Fonte: Adaptado de EPE (2019).

Outro parâmetro de análise energética é dado através da capacidade instalada, que para os dois últimos anos evidencia o crescimento das fontes renováveis de energia. A Tabela 4 apresenta valores (em MW) referentes a 2017 e 2018.

Tabela 4 – Capacidade instalada (MW) das fontes renováveis entre 2017 e 2018.

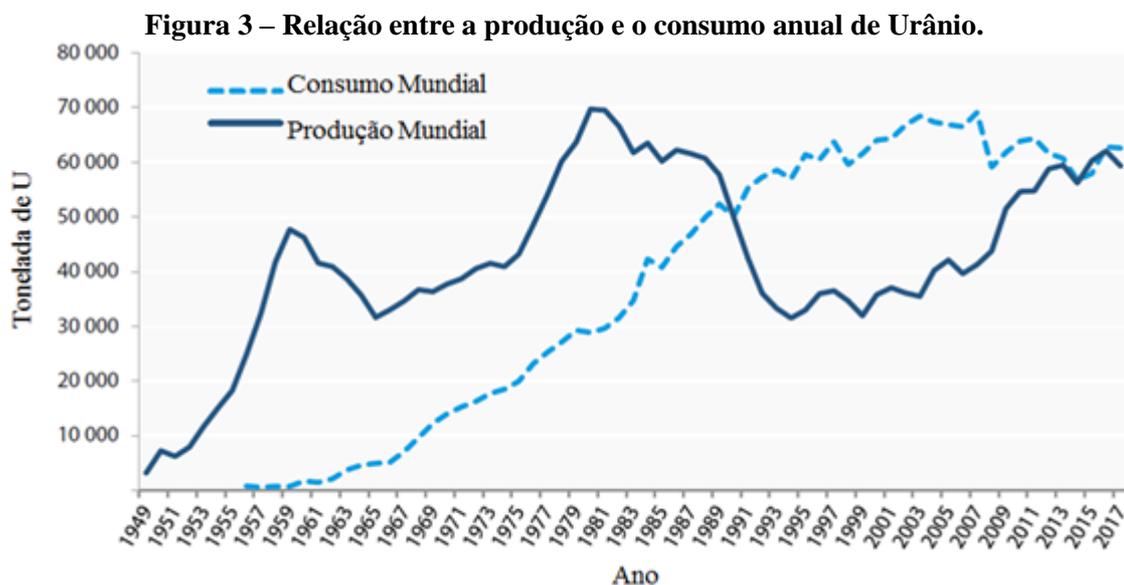
Fonte	Ano	
	2017	2018
Hidroelétrica	100275	104139
Eólica	12283	14390
Solar	935	1798
Nuclear	1990	1990

Fonte: Adaptado de EPE (2019).

É notório o aumento nas já citadas fontes, uma vez que se tem crescido o investimento nas mesmas, todavia, vale salientar que o Brasil tem um grande potencial para a utilização da energia nuclear, contudo, a partir dos dados apresentados verifica-se a estagnação deste tipo de tecnologia, desde a parada na construção da usina de Angra III no ano de 2015. Mesmo tendo uma participação de apenas 2,5% na matriz elétrica brasileira, esta mudança de panorama que está se desenhando, traz esperança para este tipo de fonte, como é o caso do término na construção de Angra III que está previsto para o ano de 2026, bem como o novo projeto de

impulsionamento da energia nuclear no Brasil, que prevê a construção de seis usinas, sendo três na região nordeste (Recife e Bahia) e as outras três na região sudeste (Rio de Janeiro). Outro ponto importante é que o Brasil detém o conhecimento e uma tecnologia única do enriquecimento do urânio, além de possuir uma grande reserva deste se comparada com o restante do mundo.

Desde o início da exploração comercial da energia nuclear no final dos anos de 1950 até 1990, a produção de urânio consistentemente superou as exigências comerciais. Este período de superprodução criou um estoque de urânio potencialmente disponível para o uso em usinas comerciais. Depois de 1990, a produção caiu bem abaixo da demanda e os suprimentos secundários alimentaram o mercado. No entanto, essa lacuna foi fechada nos últimos dois anos, à medida que a produção da mina está aumentando e as necessidades de urânio estão diminuindo, pelo menos temporariamente. O declínio nas exigências em 2008 provavelmente estava relacionado a utilidades especificando testes de caudas menores em instalações de enriquecimento e um número reduzido de reatores sendo abastecidos. Desde 2008, os requisitos aumentaram ligeiramente antes de diminuir novamente nos últimos anos devido ao fechamento de reatores não planejados na Alemanha e no Japão, seguido do acidente de Fukushima Daiichi em 2011. A produção de urânio desde 2007 aumentou em geral e diminuiu as exigências de produção e de reator, como apresentado na Figura 3.



Fonte: IAEA (2018).

Como descrito pela IAEA no início do ano de 2019, a base de recursos de urânio é mais do que suficiente para atender as necessidades projetadas de crescimento até 2035. Dada a

maturidade limitada e cobertura geográfica da exploração de urânio em todo o mundo, há um potencial considerável para a descoberta de novos recursos de interesse econômico. A partir do que vem sendo demonstrados nos últimos anos com relação a sinais de mercados apropriados, novos recursos de urânio podem ser prontamente identificados e explorados. A implantação de tecnologias avançadas de reatores e ciclos de combustível também poderia aumentar significativamente o suprimento mundial de energia em longo prazo. Mudar para reatores de tecnologia avançada e reciclar combustível pode aumentar a disponibilidade em longo prazo da energia nuclear de centenas a milhares de anos (IAEA, 2018).

O tório é um elemento metálico da classe dos actínídeos e que se encontra em grande abundância na crosta terrestre, de tal forma que se tem em média três vezes mais que a quantidade de urânio disponível, chegando a 6000 partes por bilhão (ppb). Este elemento é comumente encontrado como o isótopo Th^{232} (100%) com uma meia vida de $1,4 \times 10^{10}$ anos e tendo a produção de vários isótopos oriundos de seu processo natural de decaimento até tornar-se estável em Pb^{208} (IAEA, 2002). O tório natural consiste apenas em Th^{232} , o qual é fértil, mas não físsil.

As formas em que o tório é normalmente encontrado são: óxidos, fosfatos e silicatos. Uma das características interessantes deste elemento é seu elevado ponto de fusão, cujo valor é de 3300°C , sendo bem maior que os 2800°C do UO_2 sinterizado. Outro ponto importante é a diminuição na liberação de gases provenientes das fissões (WNA, 2017). O dióxido de tório (ThO_2) é relativamente inerte e não chega a se oxidar mais, ao contrário do UO_2 , além de ter uma alta condutividade térmica e baixo coeficiente de expansão comparado ao UO_2 . De acordo com essas propriedades, a utilização do tório na forma de óxidos mistos leva a uma melhoria nos padrões termohidráulicos e mecânicos, tornando-o atrativo em termos de aplicação como combustível de uma central nuclear (WNA, 2018).

A disponibilidade de recursos relacionados a tório na superfície terrestre é vasta, de maneira que tende a ser maior do que as de urânio e dos combustíveis fósseis juntas. As estimativas da quantidade destes recursos são feitas com relação ao urânio e também de terras denominadas raras. As Tabelas 5 e 6 mostram as estimativas das reservas de tório em todo o mundo (IAEA, 2016) e no Brasil (LAINETTI et al, 2014), respectivamente.

O dióxido de urânio tradicional é enriquecido para aumentar o teor do isótopo U^{235} , o qual é um material físsil. A maioria dos isótopos de urânio (U^{238}) pode fissionar a altas energias, contudo, também são férteis e produzem como isótopos físseis Pu^{239} e Pu^{241} (TRELLUE et al., 2011). O U^{233} é um isótopo com características bastante atraentes para as

centrais de geração de potência, em virtude da possibilidade de produção a partir do material fértil Th^{232} pelo processo de captura neutrônica (STEFANI, 2016).

Tabela 5 – Estimativa das reservas de tório no mundo.

Região	País	Reservas de tório (Kt)
Europa	Turquia	374
	Noruega	87
	Dinamarca	86 - 93
Américas	Brasil	632
	Estados Unidos	595
	Venezuela	300
África	Egito	380
	África do Sul	148
Ásia	Índia	846,5
	China	>100
Oceania	Austrália	595
Total no Mundo		6355,3 - 6372,3

Fonte: IAEA (2016).

Tabela 6 – Recursos potenciais do Th no Brasil.

Localização	Mineral associado	teor (%)	Avaliado (kt ThO₂)	Estimado (kt ThO₂)	Total das reservas (avaliado + estimado)
Depósitos costeiros (ES)	Monazita	5	2,25	-	
Depósitos INB	Areia Monazítica		3,5		
Morro do Ferro (MG)	Thorite e outros	1 para 2	35	-	
Barreiro, Araxá (MG)	Pyrochlore	0,09	-	1200	1276,25
Área Zero, Araxá (MG)	Pyrochlore	0,09	30	-	
Aluvial e Pegmatite	Monazita	5	3	2,5	
Total			73,75	1202,5	

Fonte: Adaptado de LAINETTI et al (2014).

O combustível de tório possui propriedades neutrônicas diferentes do fundamentado em urânio. Um grande atrativo em termos de geração de potência atrelado a uma baixa produção de actínídeos é a razão entre o número de nêutrons produzidos por nêutrons absorvidos (η) que é maior para o U^{233} do que para qualquer outro isótopo no espectro térmico. A seção de choque de absorção Th^{232} é maior que a do U^{238} , o que significa que a eficiência da produção de U^{233}

é maior que a do Pu^{239} , fazendo do Th^{232} um material fértil melhor que o U^{238} (TRELLE et al., 2011).

Outro parâmetro neutrônico que chama atenção e que pode interferir no balanço total de nêutrons e por consequência afetar o sistema de segurança do reator, é a fração de nêutrons atrasados (STEFANI, 2016). Uma planta nuclear de potência não pode sustentar a criticidade tendo um núcleo apenas com um combustível composto de tório, pois o U^{233} deve ser produzido durante a irradiação. Como o U^{233} se forma dentro do sistema Th/LEU a fração média de nêutrons atrasados e a energia recuperável por fissão diminui (TRELLE et al., 2011).

A Tabela 7 apresenta quatro propriedades neutrônicas de isótopos físséis de urânio e plutônio, sendo a quantidade de nêutrons emitidos por nêutrons absorvidos (η), a quantidade de nêutrons emitidos por fissão (ν), a fração de nêutrons atrasados (β) e a energia média por fissão (Q), respectivamente.

Tabela 7 – Propriedades neutrônicas dos isótopos físséis U^{233} ; U^{235} ; Pu^{239} ; Pu^{241} no espectro térmico.

Isótopo	η	ν	β	Q
U^{233}	2,287	2,492	0,0026	200,29
U^{235}	2,068	2,418	0,0065	202,61
Pu^{239}	2,108	2,871	0,0021	211,41
Pu^{241}	2,145	2,927	0,0050	213,41

Fonte: LAMARSH (1983); KNIEF (1992); WILSON et al. (1995).

A seção transversal de captura radioativa do U^{233} para nêutrons térmicos é muito menor (46b) que a do U^{235} (101b) e do Pu^{239} , uma vez que a seção transversal de fissão dos isótopos de urânio é da mesma ordem e maior para o Pu^{239} (525,577,742b para U^{233} , U^{235} e Pu^{239} respectivamente). Por tanto, adsorção sem fissão que conduz a isótopos mais pesados (U^{234} , U^{236} e Pu^{240}) com seções transversais de absorção mais altas é muito menos provável no ciclo de tório.

Desde o início do desenvolvimento da energia nuclear o tório foi considerado como um combustível potencial, principalmente devido a sua capacidade de produção do isótopo físsil U^{233} (MAIORINO et al., 2003). Os ciclos de combustível de tório podem oferecer além das apresentadas durante este tópico, certas vantagens em relação aos ciclos de combustíveis atuais em uso comercial, uma vez que produzem uma quantidade menor de plutônio e actínídeos menores do que os fundamentados em U^{235} e Pu^{239} , de maneira que o plutônio ainda pode ser combinado com tório para atingir uma eliminação ainda maior. A Tabela 8 compara a geração de actínídeos menores para diversos tipos de ciclos de combustível.

Tabela 8 – Produção relativa de actínídeos menores em diversos ciclos.

Actínídeos menores	Diversos ciclos de combustível			
	U5 + U8 (ciclo de referência) (gramas por tonelada HM)	U5 + Th2 (%)	U3 + U8 (%)	U3 + Th2 (%)
Np-237	360*	92	20	1
	900**	107	13	3
Am (241 + 242 + 243)	160*	0,04	106	$6,3 \times 10^{-5}$
	470**	0,28	117	$1,8 \times 10^{-3}$
Cm (243 até 246)	36	0,01	111	$1,68 \times 10^{-5}$
	220	0,14	132	$6,37 \times 10^{-4}$

* Queima de descarga : 30GW d/t

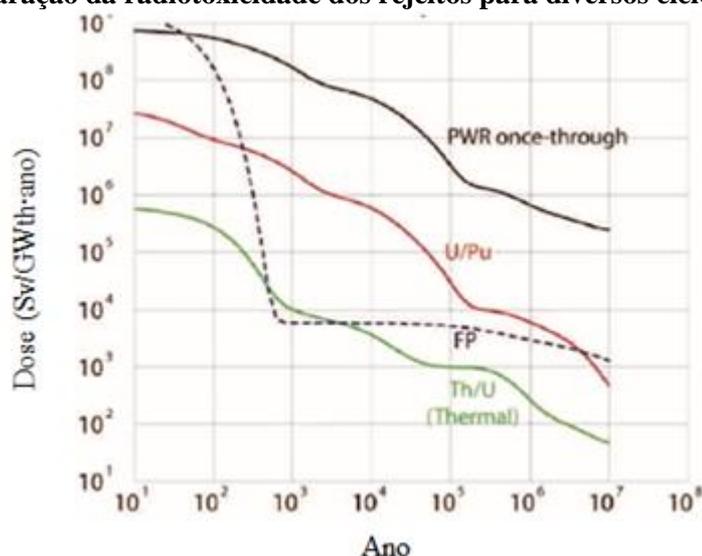
** Queima de descarga : 60GW d/t

Fonte: IAEA (1990).

Outro ponto importante na utilização de ciclos de combustível de tório é a questão da radiotoxicidade, a qual é definida como o potencial risco biológico de um material nuclear com base na sua qualidade radioativa e não apenas na sua toxicidade química ou radioatividade. Após alguns séculos, a radiotoxicidade dos rejeitos radioativos é devida principalmente aos núcleos radioativos emissores alfa pesados ($Z > 92$) que são produzidos pela captura sucessiva de nêutrons em elementos pesados presentes no combustível nuclear. Em reatores queimadores baseados no ciclo urânio-plutônio após o processamento do combustível, o urânio e o plutônio são normalmente usados completamente, de forma que suas contribuições com a radiotoxicidade é pequena, como mostra a Figura 4 (DAVID et al., 2007).

Também fica evidente na Figura 4, que o ciclo tório-urânio possui uma contribuição ainda menor na questão da radiotoxicidade, uma vez que a massa do tório é seis unidades a menos que a do urânio, de maneira que a produção de actínídeos menores (neptúnio, amerício e cúrio) os quais são os detentores da maior contribuição para a radiotoxicidade dos rejeitos no ciclo urânio-plutônio é drasticamente reduzida (DAVID et al., 2007).

Figura 4 – Comparação da radiotoxicidade dos rejeitos para diversos ciclos de combustível.



Fonte: DAVID et. al (2007)

No âmbito dos reatores da geração III+ a classe mais consagrada em termos de tecnologia é a de reatores de água pressurizada (PWR), onde dentre eles, está um dos que mais se destaca em termos de segurança e confiabilidade, que é o AP1000 (WESTINGHOUSE ELETRIC COMPANY, 2016). Outro fator de interesse é a questão econômica no tocante à vida útil dos reatores PWR, que está situada em uma faixa entre 40 a 60 anos (BUSSE et al., 2014) tornando-os assim, vantajosos para desenvolver um melhor aproveitamento dos recursos naturais disponíveis.

A utilização do tório no ciclo de combustível nuclear como complemento ao ciclo de urânio-plutônio pode ter potencial para melhorar a flexibilidade em médio prazo da energia nuclear e em longo prazo a questão da sustentabilidade. Mais especificamente, as seguintes opções para a sua introdução no ciclo do combustível nuclear poderiam continuar a ser investigadas:

- O uso do tório como meio de queimar o plutônio (e possivelmente outros actínídeos maiores) como uma opção para o manejo do plutônio;
- A possibilidade de alcançar fatores de conversão mais altos nos espectros térmicos ou epitérmicos nos sistemas de geração evolutiva III+ que utilizam combustíveis à base de tório, com o objetivo de recuperar o material físsil do combustível usado;

- As promissoras propriedades físico-químicas do dióxido de tório, que podem permitir um melhor desempenho dos combustíveis baseados em tório, em comparação com os atuais projetos de combustível.

Deve-se notar, no entanto, que o desenvolvimento de novos combustíveis ou novos conceitos de reatores é um processo que consome tempo e recursos e pode durar várias décadas. Além disso, qualquer aplicação industrial de tório como combustível nuclear continuaria a exigir a entrada de material físsil do ciclo de urânio-plutônio existente até que as quantidades necessárias de U^{233} pudessem ser produzidas e, finalmente, tornar o ciclo de tório autossustentável.

Tendo em vista as ótimas características que o tório apresenta para ser utilizado como combustível em centrais nucleares, assim como também, seu vasto estoque natural e as vantagens que um ciclo de combustível utilizando o mesmo pode oferecer, vários trabalhos foram desenvolvidos ao longo dos anos, sendo os mais relevantes destes apresentados no item “Revisão de Literatura” deste trabalho.

1.1 OBJETIVO GERAL

Esta dissertação tem por objetivo realizar uma análise termohidráulica de um conjunto combustível do reator nuclear AP1000, utilizando como combustível uma mistura de óxido de urânio e tório (U,Th) O₂, através da dinâmica de fluidos computacional (CFD, da sigla em inglês).

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Calcular a distribuição axial da densidade de potência no conjunto combustível utilizando o MCNP6;
- Elaborar um modelo tridimensional de um conjunto combustível do reator AP1000 utilizando o código ANSYS – CFX 19.2;
- Obter as distribuições de temperatura tanto axiais quanto radiais;
- Obter a distribuição axial da densidade e da pressão;
- Verificar os limites térmicos de segurança de projeto;
- Comparação dos resultados com resoluções obtidas em simulações de outros autores.

Para alcançar os objetivos citados acima, algumas etapas deverão ser seguidas, sendo-as apresentadas a seguir.

1. Obtenção das características estruturais (dimensionamento do conjunto combustível);
2. Obtenção das condições de operação (condições de contorno e propriedades dos materiais);
3. Desenvolvimento da geometria do problema;
4. Estudo da malha;
5. Aplicação das configurações do problema abordado;
6. Obtenção dos resultados;
7. Comparação dos resultados.

2 REVISÃO DE LITERATURA

No final do ano de 1999, a Comissão Reguladora Nuclear (NRC – sigla em inglês) dos Estados Unidos concedeu a certificação de projeto ao reator AP600, tornando-o, na época o único projeto de reator nuclear a usar tecnologia de segurança passiva licenciada, no ocidente e Ásia (CUMMINS, et al., 2003). Mesmo com todas as vantagens referentes ao AP600, em termos de custo de geração da energia gerada (MWh) o reator não demonstrava competitividade na matriz energética do país, com uma avaliação situada entre 41 e 46\$MWh (dólar americano por MWh). Visando tornar acessível à construção do seu reator, a Westinghouse através da redução de custo desenvolveu o reator AP1000, o qual é tido como uma evolução do reator AP600, visto que, mantiveram-se as características de segurança, foi alcançada uma potência maior, além da diminuição no custo para uma faixa de 30 a 35\$MWh (STEFANI, 2016).

A característica principal do projeto do AP1000 era a acessibilidade, visando à redução do custo de produção, operação e manutenção. As simplificações realizadas no projeto mitigaram a quantidade de válvulas em 60%; comprimento das tubulações e cabos em 75% e 80% respectivamente, além do volume de construção com requisitos sísmicos em 50% em relação a um reator convencional. Para um aumento considerável de energia no reator AP1000, a ideia da planta e os sistemas auxiliares do reator AP600 permaneceram inalterados (CUMMINS et al., 2003).

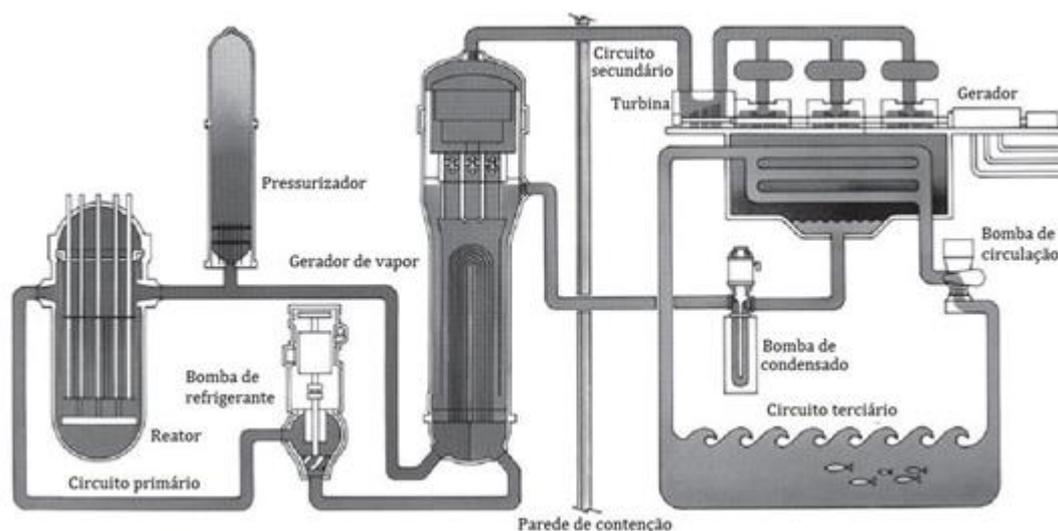
No âmbito de reatores de geração III+ (onde se encaixa o AP1000) um dos principais aspectos desta é a melhoria em termos de segurança, a qual é obtida de duas maneiras distintas. A primeira é através das simplificações feitas nos projetos (para o caso do AP1000 essas alterações foram citadas acima) que acarretaram em uma redução do número de elementos suscetíveis a falhas. A outra maneira é como uma característica proeminente, através da opção de um projeto de sistemas de emergência que não exigem elementos ativos (ex: bombas de circulação). De maneira que, ao invés disso, é desenvolvida uma estrutura que permite que o reator seja resfriado passivamente e sem intervenção externa, através do uso de fenômenos físicos inerentes, como gravidade, convecção natural ou condensação (MARTÍNEZ, 2018).

Devido o reator AP1000 ser um dos mais seguros e modernos da atualidade (os chamados, reatores de geração III+), bem como o aumento das pesquisas relacionadas à utilização do tório em reatores de água pressurizada (PWR's) e em ciclos simbióticos de combustível, o AP1000 apresentasse como um forte candidato a possíveis mudanças nos combustíveis utilizados em plantas futuras (MAIORINO; STEFANI, 2017).

O AP1000 é um reator nuclear do tipo PWR, que mantém a água de resfriamento sob pressão suficiente para limitar a geração de vapor na saída do núcleo (ou seja, garantir a fase líquida no circuito primário), onde neste, o calor é gerado e em seguida transferido para um gerador de vapor, o qual é o ponto de divisão entre os circuitos primário e secundário (IAEA, 2011). O circuito secundário tem a função de gerar energia elétrica através da utilização do vapor seco que sai do gerador de vapor, de maneira que essa geração de energia elétrica ocorre através de um processo de expansão desse vapor seco, para que haja a conversão de energia térmica em mecânica em uma turbina-gerador, e posteriormente a conversão em energia elétrica. O vapor expandido flui até um condensador e lá o calor latente de vaporização é transferido para o sistema de arrefecimento e então sofre o processo de condensação. Uma vez no estado líquido, retorna-se ao gerador de vapor através de bombeamento, continuando o ciclo (KOK, 2009).

Existe mais um circuito, este chamado de terciário e que tem a função de eliminação de calor, de maneira que o calor latente de vaporização é direcionado ao meio ambiente através da água utilizada para refrigerar o condensador. Este calor pode ter vários destinos, tais como: rios, lagos, mares ou torres de resfriamento (KOK, 2009). A Figura 5 esquematiza o projeto de uma planta de potência nuclear de reatores PWR's.

Figura 5 – Esquema simplificado de uma planta de geração de energia de reatores PWR.

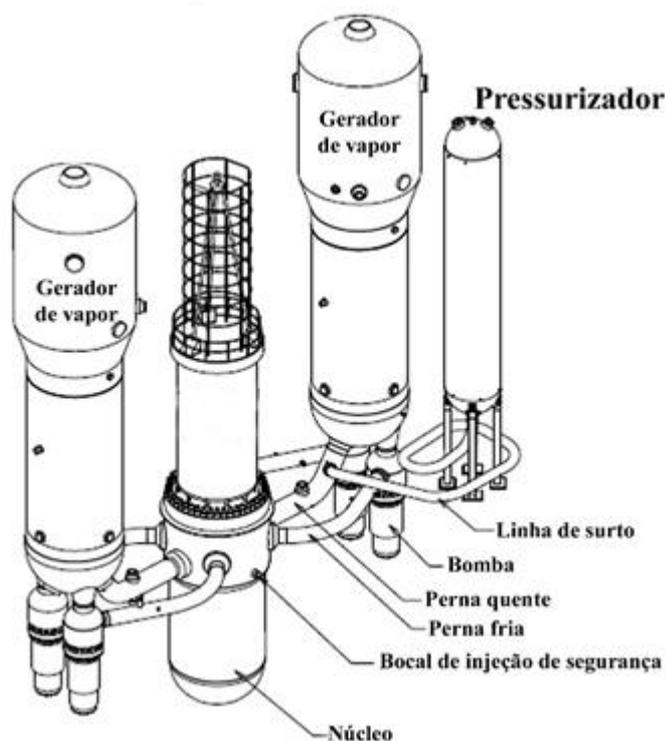


Fonte: Adaptado de LAMARSH & BARATTA (2001).

O circuito primário do reator AP1000 mantém a maioria das características gerais de projeto dos projetos atuais, com recursos evolutivos adicionais para aumentar a segurança e a capacidade de manutenção do sistema. O sistema consiste de dois sistemas de transferência de

calor, cada um com uma única perna quente e duas pernas frias, um gerador de vapor e duas bombas de refrigeração do reator instaladas diretamente no gerador de vapor; eliminando a tubulação primária entre bombas e gerador de vapor. Uma estrutura de suporte simplificada para os sistemas primários reduz as inspeções em serviço e melhora a acessibilidade para manutenção. O limite de pressão do sistema de refrigeração do reator fornece uma barreira contra a liberação de radioatividade e é projetada para fornecer um alto grau de integridade durante a operação da planta (IAEA, 2011). A Figura 6 esboça o circuito primário do reator AP1000.

Figura 6 – Perspectiva isométrica do circuito primário do reator AP1000.

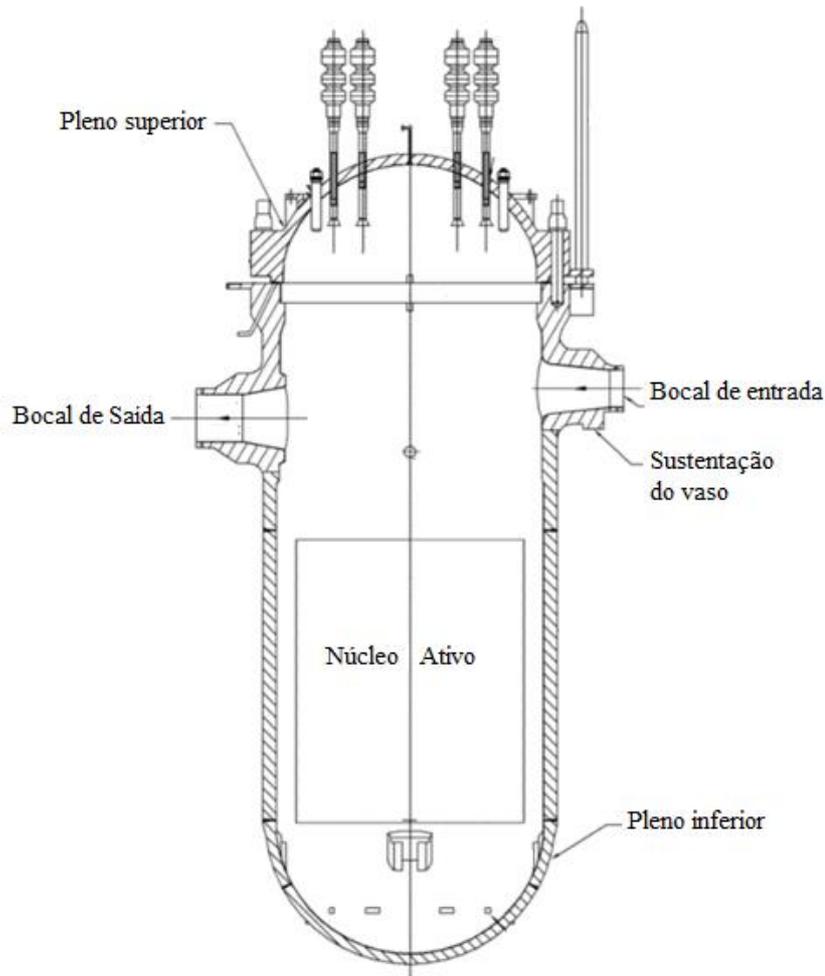


Fonte: Adaptado de (CUMMINS, et al., 2003).

O vaso do reator é a contenção limite, cuja alta pressão é usada para suportar e enclausurar o núcleo do reator. O vaso do reator tem aproximadamente 12m de comprimento e um diâmetro na região do núcleo de 4,039m. Uma vez que as superfícies podem ficar molhadas durante a operação e reabastecimento, estas então são revestidas com aço inoxidável, como ilustra a Figura 7. A pressão e temperatura do projeto do vaso do reator AP1000 é de 17,1MPa e 343°C, respectivamente, além de uma vida útil projetada para 60 anos. Como reforço de segurança, não há penetração no vaso do reator abaixo do topo do núcleo. Esse recurso faz parte da estratégia de acidentes graves do AP1000 para reter os resíduos principais dentro do vaso do

reator, seguindo os cenários postulados que resultam em fusão do núcleo. O núcleo é posicionado para minimizar o tempo de refluxo, seguindo grandes LOCA's postulados e também suporta a retenção de detritos do núcleo no interior do mesmo após a fusão (IAEA, 2011).

Figura 7 – Vaso de pressão do reator AP1000.



Fonte: WESTINGHOUSE ELETRIC COMPANY (2011)

O núcleo, o vaso do reator e os elementos internos do reator AP1000 são similares aos dos projetos de reatores PWR convencionais da Westinghouse. Diversas melhorias, todas fundamentadas na tecnologia existente, foram usadas para melhorar as características de projeto. O núcleo consiste de três regiões de enriquecimento distintas, variando de 2,35% a 4,8% de U^{235} . O coeficiente de reatividade por temperatura é altamente negativo. O núcleo é projetado para um ciclo de combustível de 18 meses com um fator de capacidade de 93%, além de uma queima de descarga média em regiões tão altas quanto 60000 MWd/t (IAEA, 2011). O AP1000 incorpora um projeto de baixo núcleo de boro para aumentar as margens de segurança

para cenários de acidentes, como transientes antecipados sem Scram. Melhorias no desempenho do combustível incluem grades ZIROOTM, bicos superiores removíveis e recursos de queima mais longos. O núcleo do AP1000 incorpora o projeto de conjunto de combustível ROBUST da Westinghouse em comparação com o design Vantage 5-H do AP600 (CUMMINS et al., 2003). A Tabela 9 apresenta uma comparação entre os dados de projeto de ambos os reatores, AP600 e AP1000.

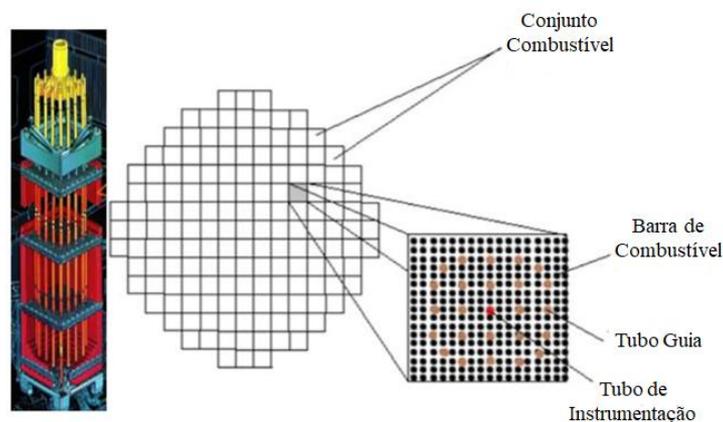
Tabela 9 – Comparação dos parâmetros de projeto dos reatores AP600 e AP1000.

Parâmetro	Reator	
	AP600	AP1000
Potência elétrica líquida (MWe)	610	1117
Potência do reator (MWt)	1933	3400
Temperatura da perna quente, °C (°F)	316 (600)	321 (610)
Número de arranjos combustível	145	157
Matriz do arranjo combustível	17x17	17x17
Comprimento ativo do combustível, m (ft)	3,7 (12)	4,3 (14)
Taxa linear de calor, kW/ft	4,1	5,71
Barras de controle	45	53

Fonte: Adaptado de (CUMMINS et al., 2003)

Como apresentado na Tabela 9, o núcleo do reator AP1000 é composto por 157 arranjos combustíveis com um total de 289 cilindros distribuídos axialmente, sendo 264 barras de combustível, 24 tubos guias e 1 tubo de instrumentação, conforme ilustra a Figura 8.

Figura 8 – Configuração do conjunto combustível do reator AP1000.



Fonte: MARTÍNEZ (2018)

Além dos dados mostrados na Tabela 9, outros parâmetros de projeto do núcleo do reator AP1000 são apresentados na Tabela 10.

Tabela 10 – Dimensões do conjunto combustível do reator AP1000.

Parâmetro	Grandeza (unidade)
Diâmetro do revestimento	9,5 mm
Diâmetro do interstício	8,36 mm
Diâmetro do combustível	8,2 mm
Dimensões do conjunto	
Longitude	4267,2 mm
Forma quadrada	214,02 mm x 214,02 mm

Fonte: Adaptado de MARTÍNEZ (2018)

Além do embasamento sobre o reator AP1000, também foram listadas algumas publicações relacionadas à aplicação do tório em todo o mundo, visando estabelecer uma base consistente para o desenvolvimento do trabalho. Foi dado um enfoque maior para os estudos realizados em reatores de água pressurizada (PWR's), como é o caso do reator da Westinghouse AP1000, demonstrando a situação atual de pesquisas relacionadas ao tema na última década.

Bae e Kim (2005) estudaram uma forma alternativa de conceito de projeto para PWR's objetivando uma melhor resistência à proliferação e economia no ciclo de combustível, utilizando o conceito *Kyung-hee Thorium Fuel* com um elemento combustível heterogêneo *Seed – Blanket* e utilizando tório como combustível. Os resultados apresentaram um desempenho neutrônico muito similar ao dos reatores que utilizam o elemento combustível baseado no modelo convencional UO_2 . Por outro lado, um fator muito importante destacado foi o pico de potência mais elevado frente aos reatores de água pressurizada comumente utilizados. A aplicação do ciclo de combustível *Once – Through* em arranjos de combustíveis heterogêneos utilizando o tório demonstrou boa competitividade econômica quando comparado com o UO_2 .

Permana et al. (2008) investigaram a viabilidade da aplicação do $Th-U^{233}$ como combustível de reatores reprodutores de grandes e pequenos sobre condições de equilíbrio e utilizando água leve como refrigerante e material moderador. A avaliação dos resultados mostrou que há viabilidade para ambos os tipos de reatores (grandes e pequenos), de maneira que a capacidade de reprodução cresce com o aumento da potência, além deste combustível fornecer uma densidade de potência mais baixa. Outra conclusão foi que para pequenos reatores, a condição de reprodução pode ser alcançada quando a densidade de potência das pastilhas de combustível é atingida de $22,5W/cm^3$ e a queima de $20GWd/t$.

Tsige – Tamirat (2011) em seu estudo, indicou que os ciclos de combustível utilizando o tório podem substituir os ciclos atuais de urânio – plutônio para melhorar o desempenho operacional e as considerações de gastos de combustível, nos PWR's atuais sem modificações no núcleo e montagem. Os parâmetros neutrônicos de segurança calculados em núcleos PWR

com tório como combustível estão dentro dos limites dos atuais reatores à água pressurizada. Foi observado que os tipos de combustível com tório apresentam relações de conversão significativamente maiores quando comparados com o combustível convencional. Isto poderia permitir a utilização eficiente de combustível em PWR's através de altas queimas no tório fértil. Concluiu-se também que o ciclo de combustível baseado em tório, tem o potencial de aprimorar as considerações relacionadas à gestão de resíduos nos PWR's em funcionamento. Mostrou também que o uso do tório como material fértil pode reduzir a geração de actínídeos e a radiotoxicidade de combustível usados.

Csom et al. (2012) propôs um combustível de $(Th - U^{233})O_2$ em um reator de água supercrítica (SCWR, da sigla em inglês) e um arranjo de dois passos, para eliminar a necessidade de moderador extra. Determinou os parâmetros geométricos (diâmetro da vareta, pitch, etc.) do arranjo, baseado em cálculos unidimensionais e bidimensionais. Os cálculos mostram que para um ponto de vista neutrônico é favorável ter uma densidade de refrigerante alta na entrada e baixa na saída, além disso, a fim de alcançar uma razão de inventário físsil (FIR) maior que 1, a densidade de potência média do refrigerante do arranjo deve-se manter a mais baixa possível. Através de cálculos tridimensionais de um acoplamento Neutrônico – Termohidráulico, concluíram que a configuração do arranjo proposto é viável a partir de um ponto de vista neutrônico, isto é, o ponto de equilíbrio de um $FIR > 1$ é alcançado para uma queima (queima) acima de 40,0 MWd/KgHM. Devido ao diâmetro excepcionalmente grande do pino de combustível da região interna, a temperatura na linha central do combustível foi avaliada usando um acoplamento tridimensional neutrônico – termohidráulico incluindo o efeito Doppler, e foi visto que este valor fica abaixo de 1900K. Ademais, os coeficientes de temperatura e de reatividade foram determinados, sendo ambos negativos, comprovando a segurança inerente do reator.

Guo et al. (2013) analisaram o comportamento neutrônico/termohidráulico de um reator de sal fundido experimental (MSRE, da sigla em inglês) através do desenvolvimento de um código de análise multi – canal (MAC – em inglês) acoplado com o MCNP4c. O MAC calculou os parâmetros termohidráulicos, tais como, distribuição de temperatura; distribuição de escoamento e queda de pressão, enquanto que o MCNP4c obteve os resultados do fator de multiplicação efetivo; fluxo de nêutrons e distribuição de potência. Os resultados obtidos se mostraram razoavelmente de acordo com as soluções analíticas dadas a partir do ORNL (Oak Ridge National Laboratory). Para análise de projetos futuros, os estudos paramétricos foram realizados para prover informações valiosas visando novos projetos de reator de sal fundido (MSR, da sigla em inglês).

Chaudri et al. (2013) realizaram uma análise em um reator de água supercrítica (SCWR, da sigla em inglês) com espectro de nêutrons térmicos, utilizando combustíveis baseados em tório, assumindo dois papéis. O primeiro é de substituto do combustível de dióxido de urânio convencional, enquanto que o segundo de queimador de plutônio do reator. Foram realizadas análises em acoplamento neutrônico/termohidráulico devido a grande variação da densidade do refrigerante sobre o comprimento ativo do combustível. Os resultados revelaram que combustíveis MOX de tório – urânio conduzem a valores de queima inferiores se comparado com o enriquecimento equivalente de dióxido de urânio, entretanto, possuem vantagens de menor excesso de reatividade no início da vida do combustível. Valores menores da temperatura média do combustível foram obtidos para o combustível de Th–U se comparado com a opção do UO_2 . Em termos de resistência à proliferação, o MOX de tório e urânio produz cerca de aproximadamente 40% menos plutônio que o combustível de UO_2 , em porcentagens de enriquecimento equivalentes. Os combustíveis baseados em tório com alto enriquecimento podem ser uma ótima opção de substituição dos combustíveis convencionais de UO_2 , produzindo quantidades muito pequenas de plutônio.

Ashley et al. (2014) determinaram as vantagens e desvantagens, bem como a viabilidade de sistemas de energia nuclear de ciclo aberto, utilizando um combustível de Th–U. O estudo foi desenvolvido através de três desses sistemas, cada um dos quais requerendo um enriquecimento de urânio de 20% (U^{235}), comparando com um sistema utilizando um combustível apenas de U sobre as vertentes de indicadores de desempenho, abrangendo fluxos de material, composição de resíduos, questões econômicas e resistência à proliferação. Os valores destes indicadores foram determinados usando um código de modelagem de ciclo de combustível da UK National Nuclear Laboratory's (ORION). Este código requer os resultados dos cálculos físicos para o modelo neutrônico de cada sistema de energia nuclear, os quais foram obtidos através de vários códigos de física de reatores e rotinas de queima (burn-up). Foram observadas vantagens e desvantagens, negligenciáveis para a quantidade e propriedades do combustível nuclear usado, gerado pelos sistemas considerados. Dois dos sistemas carregados com Th–U mostraram alguns benefícios em termos de resistência à proliferação dos combustíveis nucleares usados. De maneira geral, concluíram que há pouco mérito na incorporação do tório em sistemas de energia nuclear operando com ciclos de combustível aberto.

Baldova et al. (2014a) exploraram a possibilidade de projeto de um núcleo de alta conversão a partir da mistura de Th– U^{233} como combustível nos reatores de água pressurizada atuais. Uma melhora potencial na utilização dos recursos naturais pode ser alcançada com o

aumento da relação de conversão nos PWR's existentes, através da exploração das vastas reservas de tório e conseqüentemente a redução na demanda do urânio. A alta conversão pode ser alcançada por meio de um projeto de arranjo de combustível heterogêneo *Seed – Blanket* (SB) de Th–U²³³, no qual a região *Seed* é supercrítica e funciona como um provedor de nêutrons, enquanto que a região denominada de *Blanket* é subcrítica e atua como um queimador de U²³³. O estudo foi realizado em três partes; na primeira foi apresentado um projeto de desenvolvimento de um arranjo combustível adaptável diretamente nos reatores de água pressurizada utilizados atualmente. Cálculos paramétricos de queima foram realizados em um arranjo de combustível simples 2D, assumindo diferentes níveis de densidade de potência e temperaturas de entrada do refrigerante. Em todos os casos a quantidade de U²³³ foi ajustada para que se pudesse alcançar o tamanho requerido do ciclo de combustível, sendo este de 330 EFPD (Effective Full Power Day – em inglês). Os valores observados de FIR em EOL (End of Life – em inglês) foram muito próximos da unidade, indicando a viabilidade do ciclo de combustível de alta conversão. Os resultados dos cálculos paramétricos foram utilizados para selecionar a configuração mais promissora de acordo com o seu potencial para maximizar o FIR na descarga e atender os critérios de segurança especificados.

Baldova et al. (2014b) determinaram os possíveis níveis de densidade de potência, de maneira que os limites de segurança sejam mantidos. Isso foi feito executando uma análise completa em 3D de um núcleo tipicamente PWR completamente carregado com combustível heterogêneo de alta conversão, utilizando o arranjo SB de Th–U²³³. Um grande núcleo de um reator de água pressurizada da Westinghouse com dados operacionais avaliados foi adotado com um núcleo de referência para comparação. Os resultados de simulações detalhadas em 3D de um núcleo completo realizadas com o código DYN3D, demonstraram, em princípio, a viabilidade de um núcleo PWR de Th–U²³³ quase perfeito, operando a uma densidade de potência de 60 W/cc em um ciclo de combustível anual de três cargas. Um dos importantes recursos de segurança do projeto proposto é claramente um coeficiente de temperatura do moderador (MTC, da sigla em inglês) negativo. Em comparação com o PWR tomado como referência (baseado-se apenas em U), saídas térmicas mais baixas e a menor duração do ciclo de combustível são as principais compensações necessárias para alcançar tal desempenho. Neste estudo, todos os cálculos foram realizados assumindo condições de estado estacionário.

Lau et al. (2014) estudaram a viabilidade da introdução de uma pequena fração de combustível Th/MOX em um núcleo tradicional de combustível UOX, sendo 1/3 de Th/MOX e o restante da forma tradicional UOX. O reator tomado como base foi o PWR sueco Ringhals – 3. Os resultados mostraram que as características do núcleo proposto são muito similares ao

núcleo tradicional UOX, assim como a fração de nêutrons atrasados está dentro dos limites de aceitação. Além disso, o amortecimento das oscilações axiais do xenônio induzido pela inserção das barras de controle é quase 5 vezes mais efetivo para o núcleo estudado, se comparado com o núcleo padrão.

Baldova et al. (2015) investigou uma série de aspectos de disponibilidade e utilização de combustível associado, com o uso do combustível Th–U²³³ de alta conversão em PWR's. As propriedades neutrônicas e o desempenho de conversão do combustível HC (high conversion em inglês) Th–U foram estimadas de maneira mais realística, considerando a evolução da composição isotópica do U com o número de estágios de reciclo. O desempenho do núcleo HC Th–U foi reavaliado através de uma análise completa do núcleo pelo acoplamento Neutrônico – Termohidráulico. De acordo com os resultados obtidos, os principais parâmetros de desempenho do núcleo HC Th–U PWR se aproximam do núcleo idealizado HC Th–U²³³ PWR. Entretanto, diferente da configuração de alta conversão utilizando Th–U²³³, a quantidade de U no combustível Th–U necessária para alcançar a mesma duração do ciclo de combustível é quase o dobro. Por fim, notaram que os variados tipos de ciclos de combustível utilizando o tório compartilham uma série de questões adicionais (reprocessamento, manipulação, eliminação de resíduos, etc.) que precisam ser abordadas para aproveitar ao máximo os benefícios em potencial.

Wang e Cao (2016) investigaram o comportamento espacialmente dependente das flutuações nos fluxos de nêutrons; da densidade precursora dos nêutrons atrasados; da temperatura do sal do combustível e da velocidade em todo o combustível do reator de sal fundido (MSR, da sigla em inglês), através de um código de acoplamento neutrônico/termohidráulico. Os resultados em estado estacionário mostraram que, a distribuição dos fluxos de nêutrons é quase que independente da circulação do combustível, assim como a distribuição dos precursores não é tão sensível à mudança de velocidade do combustível. Verificou-se também que o efeito da recirculação térmica é importante apenas em baixas frequências, isto é, quando o efeito cinético pontual é proeminente e a densidade de potência é significativamente perturbada. Esse efeito de fase inicial foi observado pela primeira vez no caso de reatores tradicionais e reconfirmado no presente estudo para um sistema de MSR de ciclo fechado.

Santos (2016) desenvolveu uma rotina computacional para um estudo simplificado dos limites de segurança de reatores do tipo água pressurizada, utilizando UO₂ e uma mistura dos óxidos de urânio e tório (U, Th)O₂ como combustível. O código é capaz de calcular tanto a distribuição de temperaturas ao longo do fluido refrigerante e da vareta de combustível, como

também, a parte hidráulica, a qual é tratada de maneira simplificada, uma vez que o código foi desenvolvido apenas para a análise do canal mais quente do núcleo do reator. Para ambos os combustíveis, foi abordado o caso de início do ciclo, entretanto, o código também é capaz de calcular os casos de queima de combustível, tanto meio, quanto final da vida, contudo, apenas para o UO_2 devido a dificuldade de correlações existentes na literatura sobre o coeficiente de condutividade térmica do $(\text{U, Th})\text{O}_2$. A validação do código foi feita a partir dos dados da usina de Angra 2 (como dados de entrada no programa) e seus resultados foram comparados através do Relatório Final de Análise de Segurança da Eletronuclear e do documento emitido pela Westinghouse sobre o reator AP1000.

Stefani (2016) apresentou a viabilidade da conversão de reatores de água pressurizada em termos da utilização de uma mistura de óxidos de urânio e tório $(\text{U, Th})\text{O}_2$ como combustível, em oposição ao óxido de urânio utilizado atualmente, tendo como um dos principais objetivos a redução da produção de plutônio (ou seja, actínídeos de longa vida) e a criação de um estoque de U^{233} visando sua aplicação em ciclos de combustíveis avançados no futuro. A implantação desses possíveis novos combustíveis acarreta em uma produção de energia menos agressiva ao meio ambiente. O autor também destacou que o Brasil está entre os três países com as maiores reservas de tório no mundo. No estudo foi considerado como referência o reator da Westinghouse AP1000, sendo este, um reator de terceira geração e um dos mais modernos e seguros da atualidade, assim como também, sua semelhança com os reatores já conhecidos e utilizados no Brasil. Os resultados mostraram a possibilidade de aplicação do conceito proposto sem nenhuma alteração no núcleo do reator AP1000. Os cálculos neutrônicos foram realizados pelo código SERPENT e seus resultados favoreceram os quesitos de segurança do reator, tendo uma densidade de potência linear máxima menor do que a convencional, além disso, ambas a fração de nêutrons atrasados e os coeficientes de reatividade também estiveram dentro dos limites para garantir a segurança do conceito.

Maiorino et al. (2016) apresentaram a viabilidade neutrônica e termohidráulica de conversão de um núcleo de UO_2 em $(\text{U, Th})\text{O}_2$ para o reator AP1000 da Westinghouse, através de um estudo paramétrico variando o tipo de geometria dos pinos no elemento combustível, usando o modelo homogêneo e o heterogêneo *Seed – Blanket*. Toda a geometria e materiais para os “venenos queimáveis” foram mantidos os mesmos que o do AP1000 e a única variável foi o material do pino do combustível, o qual, foram usadas várias proporções em massa de urânio e tório, mas mantendo baixo (20w/o) o enriquecimento do U^{235} . Os cálculos neutrônicos foram realizados através do código SERPENT, para validar os limites térmicos foi utilizado um código próprio. O critério de otimização foi para maximizar o U^{233} , o fator de conversão para

minimizar a produção de plutônio. Os resultados obtidos mostraram que o conceito homogêneo com três diferentes zonas de proporções mássicas, satisfazem o critério de otimização, bem como, atende todas as restrições térmicas. A partir dos resultados obtidos, puderam concluir a viabilidade da conversão do AP1000 para uma mistura de óxidos de tório e urânio, sem realizar praticamente nenhuma alteração na estrutura do núcleo e o sistema de controle da reatividade, apenas modificando o material da pastilha.

Maiorino et al. (2017) abordaram a utilização do tório em reatores nucleares e em ciclos de combustível associados. A ênfase é dada na utilização de reatores de água pressurizada (PWR's), de maneira a discutir os resultados oriundos do estudo voltado para o reator AP1000. Os resultados mostraram que a conversão para o núcleo $(U, Th)O_2$ possui vantagens mesmo quando comparado com o núcleo de UO_2 , tais como: menor densidade linear de potência e menor concentração de boro solúvel, além de evitar a necessidade de envenenamento integral do queimador de combustível (IFBA, da sigla em inglês). Outro ponto é que o novo núcleo foi otimizado para produzir a quantidade máxima de U^{233} e a quantidade mínima de plutônio, de tal forma que seria utilizado como núcleo de transição para produzir pilhas de estoque de U^{233} , podendo ser utilizado futuramente em ciclos de combustível fechados.

Martínez (2018) determinou o comportamento termohidráulico de um arranjo de combustível típico do núcleo do reator AP1000 através da dinâmica de fluidos computacional (CFD, da sigla em inglês). Um acoplamento neutrônico e termohidráulico foi realizado, de modo a obter a distribuição de potência axial no conjunto típico de combustível. Os cálculos termohidráulicos foram realizados com o programa Ansys CFX e considerando apenas 1/8 do arranjo combustível, já os cálculos neutrônicos foram obtidos a partir da ferramenta MCNPX versão 2.6. O comportamento da temperatura e a transferência de calor nas diferentes zonas do conjunto de combustível foram observados e seus valores estão de acordo com os dados reportados na literatura, verificando assim a consistência do modelo proposto. O autor considerou o núcleo do reator AP1000, utilizando UO_2 como combustível.

Baskara et al. (2019) avaliou a aplicação de um combustível MOX de $ThO_2 - UO_2$ variando o enriquecimento de U^{235} para determinar a condição de criticalidade do reator nuclear avançado da Westinghouse, o AP1000. Os cálculos neutrônicos foram realizados através do sistema de código SRAC 2006 com a biblioteca de dados nucleares JENDL 4,0. De acordo com os resultados obtidos, o reator AP1000 pode alcançar a criticalidade com um enriquecimento mínimo de UO_2 de 4,45% e com um máximo de barra de combustível de ThO_2 no conjunto combustível, de 1,5%. A razão de conversão para o combustível $ThO_2 - UO_2$ tende

a aumentar e os espectros de nêutrons tornam-se mais duros com o aumento na quantidade de ThO_2 .

Selim et al. (2019) examinou a viabilidade da utilização de óxidos mistos de tório – plutônio no reator de água pressurizada passivo avançado da Westinghouse AP1000 sob situação de estado estacionário e em condições de início de ciclo (BOC, da sigla em inglês). Neste estudo, 1/3 dos conjuntos combustíveis de UO_2 é substituído por $(\text{Th, Pu})\text{O}_2$ em dois tipos de arranjos: o primeiro assume um blanket com combustível de $(\text{Th, Pu})\text{O}_2$ que substitui os conjuntos de combustível enriquecidos com 4,45% em torno dos conjuntos combustível UO_2 de baixo enriquecimento, já no segundo arranjo alguns dos conjuntos combustíveis de UO_2 de maneira a criar um anel de combustível de $(\text{Th, Pu})\text{O}_2$ no núcleo. A modelagem do reator foi feita através do código computacional QUARK e os dados de seção de choque necessários para o cálculo no código QUARK, foram gerados usando o código WIMSD5. Os resultados mostraram que a introdução do combustível MOX de $(\text{Th, Pu})\text{O}_2$ no AP1000 não afetaram negativamente a segurança do reator, uma vez que atende os critérios de projeto reportados pela Westinghouse. Para ambos os arranjos propostos o fator de pico de potência calculado é menor ou igual ao limite de projeto, e ao longo do canal mais quente o MDNBR varia com um mínimo acima do limite de projeto, também para ambos os arranjos.

Com base nesta revisão de literatura é perceptível o desenvolvimento nos estudos relacionados à utilização de combustíveis de óxidos mistos de urânio e tório em reatores de água pressurizada (PWR), objetivando um processo mais sustentável e a reciclagem do combustível. Em relação a estudos referentes ao reator AP1000 utilizando como combustível essa mistura de óxidos e o combustível convencional, é importante ressaltar que Stefani em 2016 construiu uma base consistente e abrangente referente à parte neutrônica com relação a uma possível viabilidade de mudança de combustível de UO_2 para $(\text{U, Th})\text{O}_2$; Santos também em 2016 realizou alguns estudos, entretanto, na parte termohidráulica para o canal mais quente; já em 2018, Martínez utilizando o código CFX realizou um estudo termohidráulico do AP1000 apenas com o dióxido de urânio como combustível.

Uma vez que, para estabelecer uma metodologia consistente em termos de engenharia de reatores (termohidráulica), o presente trabalho tem por objetivo geral, avaliar a viabilidade da aplicação da mistura de óxidos de urânio e tório como combustível ao invés do óxido de urânio utilizado convencionalmente nos reatores PWR. Para alcançar tal objetivo, limites térmicos e hidráulicos de segurança do reator AP1000 serão avaliados através da metodologia que será descrita no capítulo 3 deste trabalho.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo será abordada a maneira com que o trabalho será conduzido, primeiramente, através da descrição do modelo de dinâmica dos fluidos computacional, definição das equações de conservação, assim como também, o método de resolução das mesmas, o qual é realizado pelo processo de discretização. Em seguida, serão apresentados os modelos físicos usados na dinâmica de fluidos computacional, os quais englobam os modelos de turbulência, de transferência de calor, como também, do fluxo próximo a uma parede.

Na terceira parte deste capítulo, serão definidas as propriedades termofísicas do combustível MOX (U,Th) O₂ em estado estacionário, como: condutividade térmica (K); densidade (ρ); calor específico à pressão constante (C_p). Em seguida será feita a determinação dos parâmetros termohidráulicos, tais como: distribuição axial da densidade de potência no conjunto combustível; distribuições de temperatura no conjunto. Por fim tem-se a descrição do conjunto combustível típico do reator nuclear AP1000 que será o reator utilizado para o desenvolvimento do presente trabalho.

3.1 MODELO DE DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

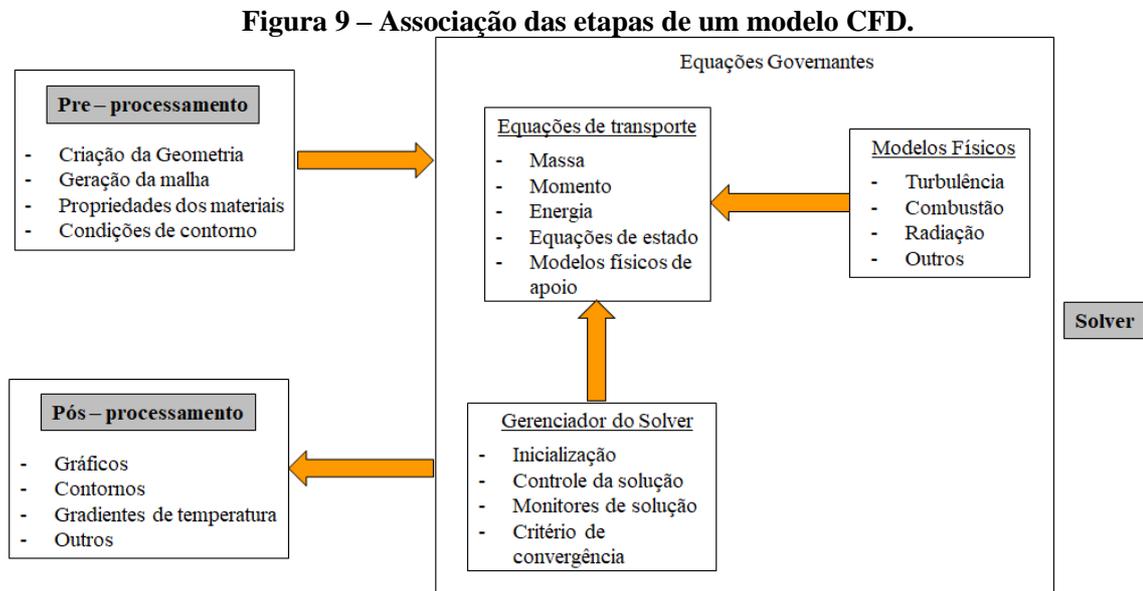
Graças aos avanços e desenvolvimentos da tecnologia da computação, nos últimos anos muitas das técnicas para analisar diferentes setores foram melhoradas. Um deles está relacionado à análise de fluxo de diferentes fluidos graças às técnicas da dinâmica de fluidos computacional (CFD). Os códigos CFD representam uma ferramenta auxiliar de projeto que oferece precisão científica ao mesmo tempo em que um custo monetário e de tempo menor que o da ferramenta experimental.

O ANSYS CFX é um software fundamentado nas técnicas da dinâmica de fluidos computacional de uso geral, que combina um “solucionador” avançado com recursos avançados de pré e pós – processamento, que inclui os seguintes recursos:

- Um avançado solucionador acoplado que é confiável e robusto;
- Integração total de definição de problemas, análise e apresentação de resultados;
- Um processo de configuração intuitivo e iterativo, usando menus e gráficos avançados.

De maneira geral, o desenvolvimento da geometria, malha e da configuração da simulação são feitos na etapa de pré-processamento. O estágio de processamento é

caracterizado pela resolução numérica das equações fundamentais, já a visualização e análise dos resultados são realizadas na etapa de pós – processamento. Em suma, a Figura 9 esquematiza a interconectividade dos processos dentro do software.



Para dar início a uma simulação em CFD, é necessário definir o local de análise, ou seja, o domínio de estudo, sendo este, podendo ser desenvolvido no próprio software a partir da ferramenta “Geometry” ou através da importação advinda de outros programas de desenho (ex: CAD) (ANSYS, 2018a). Uma vez definido o domínio do qual se deseja obter informações, analisar e prever seu comportamento deve ser feita a mudança de um domínio analítico para um numérico através da divisão do mesmo em células que juntas formam o que chamamos de malha. As malhas se dividem entre regulares e irregulares, onde a primeira é definida por células em formas quadradas (2D) ou hexaédricas (3D), já as irregulares definem-se em triangulares (2D) ou tetraedros (3D).

Feita a geometria e desenvolvida a malha, o próximo passo é estabelecer os materiais, condições de contorno (temperatura, pressão, velocidade etc.) e modelos adicionais para a análise. Ao fim da etapa de pré – processamento tem-se em seguida o estágio de processamento onde ocorre a solução das equações. Um fator importante é o tempo computacional, que depende de vários outros fatores, entre eles, o número de elementos, a configuração da simulação, bem como, as especificações do equipamento utilizado, o qual, para o presente estudo fez-se o uso de um processador Intel Xeon com 16gb de memória RAM, além de utilizar a versão 19.2 do software ANSYS. Depois de concluída a solução, prossegue-se para a análise

dos resultados, onde comumente ocorrem retornos à etapa de processamento para ajustes e a consequente redução dos erros.

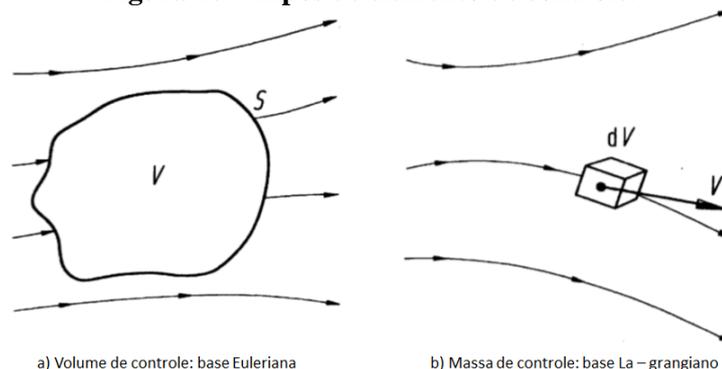
3.1.1 Equações de conservação

Como mencionado no item anterior, o objetivo de um código de fluido dinâmica computacional é a resolução das equações de Navier-Stokes, estas por sua vez, tem como base três princípios fundamentais:

- Conservação da massa;
- Conservação do momento;
- Conservação da energia.

Nos fluxos, esses princípios são aplicados em uma região espacial chamada volume de controle, ao invés de seguir certa quantidade de partículas (massa de controle) como é caso da dinâmica dos sólidos. A diferença básica entre os dois conceitos é apresentada na Figura 10. Esse volume de controle é geralmente considerado finito e fixo no espaço. As equações gerais podem ser expressas diferencialmente (em um elemento diferencial do volume de controle) ou integralmente (para todo o volume).

Figura 10 – Tipos de elemento de controle.



Fonte: ANDERSON (2009)

A equação da conservação de massa (ou equação da continuidade) em um volume de controle é expressa na forma diferencial de acordo com a Equação 1:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

Onde ρ representa a densidade do fluido, \mathbf{u} representa o vetor de velocidade do fluxo e t é o tempo. Para a equação de conservação de momento, devem ser incluídas todas as forças que são aplicadas no volume de controle, que se resume em dois grupos, o primeiro são as forças mássicas que atuam diretamente na massa volumétrica do elemento fluido (ex: forças gravitacionais e inerciais) e as forças de superfície, as quais atuam diretamente na superfície do elemento fluido (ex: forças de pressão e forças viscosas). A equação da conservação do momento é expressa se acordo com a Equação 2:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{S}_M \quad (2)$$

De maneira que, o tensor $\boldsymbol{\tau}$ está relacionado com a taxa de deformação através da seguinte expressão:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \quad (3)$$

A cerca das Equações 2 e 3, tem-se que P é a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor dos esforços viscosos, a viscosidade dinâmica é representada por μ e no termo \mathbf{S}_M é onde estão as fontes de momento. A equação de conservação da energia pode ser representada de várias maneiras (energia cinética, entalpia, etc.), uma delas é pela temperatura, como apresentado na Equação 4.

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = -p \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + S_i \quad (4)$$

Na equação acima, tem-se T como a temperatura, k como a condutividade térmica, Φ representando a taxa de dissipação viscosa e S_i chamado de termo fonte. Todos os efeitos devido a estresses viscosos na equação da energia são descritos pela função dissipação Φ , a qual, após algumas manipulações algébricas (ver Apêndice A) tem a seguinte forma:

$$\Phi = \quad (5)$$

$$\mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right\} + k(\nabla \cdot \mathbf{u})^2$$

Como o método de resolução fundamenta-se uma análise numérica das equações de conservação, uma vez definidas, o próximo passo é a compreensão de como essa análise numérica será desenvolvida. A resolução numérica de uma equação diferencial é chamada de discretização, para tal, existem vários métodos, os quais serão abordados no item 3.1.2 a seguir.

3.1.2 Métodos de discretização

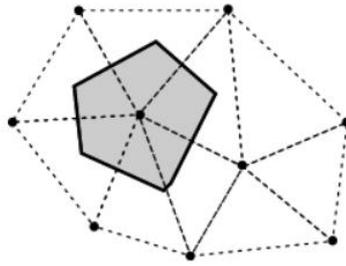
A discretização é um processo de transformação que consiste em escrever equações diferenciais parciais (EDP's) na forma de equações algébricas dentro de um volume elementar com um erro associado. Então, o conjunto de todas as equações obtidas para todos os elementos é organizado em um sistema de equações lineares do tipo $Ax = B$, onde A é a matriz dos coeficientes, x é o vetor solução e B o vetor fonte.

Existem inúmeros métodos para discretização de domínios, entretanto, o método das diferenças finitas (FDM), o método dos volumes finitos (FVM) e o método dos elementos finitos (FEM), são os mais populares (baseado no número de códigos comerciais disponíveis de CFD). A fundamentação básica do FVM está centrada no tratamento numérico através de balanços das propriedades em estudo em um nível de volume elementar para obtenção das equações algébricas. Este tratamento é feito pela integração das equações de conservação juntamente com o auxílio de funções de interpolação para a determinação das propriedades nas interfaces quando necessário.

Para que seja possível a resolução digital das equações de conservação apresentadas no começo dessa seção, é necessário realizar a discretização das mesmas. O código CFX utiliza o método dos volumes finitos para a discretização de um domínio utilizando uma malha, de maneira que, valores variáveis para as quantidades de massa, momento e energia são armazenados nestes volumes de controle, construídos com a ajuda da malha.

Quando se trata da utilização do método de volumes finitos, o código utiliza o método "vertex-centred" (centrado no vértice), de maneira que, o volume de controle é formado pela combinação de volumes menores de subcontrole em torno do vértice, sendo neste, armazenado o valor da variável. A Figura 11 esquematiza como é baseado o método usado pelo CFX, para discretizar as equações governantes.

Figura 11 – Volume de controle utilizado pelo código CFX.



Fonte: ACHARYA (2016)

De maneira geral existe uma forma diferencial comum entre as equações de escoamento o qual é também chamada de equação de transporte. Desenvolvendo-a na forma integral, o qual é a forma abordada pelo método de volumes finitos, a equação de transporte na sua forma geral em volumes finitos pode ser escrita para o caso de estado estacionário de acordo com a Equação 6.

$$\int_A n \cdot (\rho \phi u) dA = \int_A n \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA + \int_{CV} S_\phi dV \quad (6)$$

E para processos transientes, retorna-se a parcela transiente que foi negligenciada e realiza-se a integração no tempo em todas as parcelas, como mostra a Equação 7.

$$\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} (\rho \phi) dV \right) dt + \int_{\Delta t} \int_A n \cdot (\rho \phi u) dA = \int_{\Delta t} \int_A n \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA + \int_{\Delta t} \int_{CV} S_\phi dV \quad (7)$$

No item seguinte, serão abordados os modelos físicos que são utilizados em uma análise envolvendo a fluidodinâmica computacional, tais como: turbulência, transferência de calor, etc.

3.2 MODELOS FÍSICOS USADOS NA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

3.2.1 Modelos de turbulência

A turbulência pode ser caracterizada pelo movimento caótico ou desordenado do fluido. Um movimento turbulento do fluido ocorre com a presença de redemoinhos, entretanto, quando estes estão ausentes o movimento do fluido é laminar. O surgimento da turbulência está

relacionado com a relação entre as forças de inércia e as forças viscosas no fluido: quando as forças viscosas são suficientemente grandes em relação às inerciais, elas são capazes de amortecer os pequenos turbilhões e o fluido tende a ser laminar. Em caso contrário, esse processo de amortecimento não ocorre e os redemoinhos ocorrem tanto em pequenas, quanto em grandes escalas.

O modo mais preciso de previsão de um fluxo turbulento é através da resolução direta das equações de Navier-Stokes, ou DNS (*“Direct Numerical Simulation”*), no qual, todas as escalas espaciais e temporais do fluxo turbulento são resolvidas sem usar valores médios ou aproximações; os únicos erros vêm de discretizações numéricas. A ideia é tão simples quanto difícil de ser colocada em prática devido ao seu alto custo computacional. No entanto, seu uso prático é limitado a geometrias simples com números baixos de Reynolds.

Dentro da ampla gama de escalas espaciais e temporais dos fluxos turbulentos, as grandes escalas são as mais eficazes no transporte de propriedades, enquanto que as escalas menores são mais fracas e sua capacidade de transporte é menor. Com base nisso, origina-se a simulação dos grandes vórtices, ou LES (*“Large Eddy Simulation”*). Devido à maior universalidade e homogeneidade das pequenas escalas, espera-se que estes modelos sejam simples e que os ajustes necessários quando aplicados a diferentes fluxos sejam escassos. Mesmo assim, esse tipo de simulação também é exigente em termos de capacidade computacional e tempo de cálculo.

Os tipos de abordagens mais utilizados em aplicações de engenharia para prever fluxos turbulentos são aquelas embasadas em métodos estatísticos. A partir disso, surgem os modelos fundamentados no uso das equações de Navier-Stokes mediadas por Reynolds, também chamados RANS (*“Reynolds – Averaged Navier – Stokes equations”*). Os modelos RANS baseiam-se na média das equações de fluido, para as quais todas as magnitudes são substituídas pela soma de seu valor médio e um componente flutuante. Depois de calcular a média, são obtidos termos adicionais que requerem a adição de outras equações para fechar o sistema. Duas variantes principais são apresentadas para a média das equações: Reynolds e Favre.

Em todos os casos a dificuldade para fechar o sistema de equações é derivada da escolha de equações para representar o tensor de tensão (que representa as tensões turbulentas de Reynolds), de maneira que, para isso utiliza-se a equação 3. Nesta equação existe um termo que demanda um tratamento mais cauteloso, conhecido como o coeficiente de viscosidade dinâmica, o qual é considerado médio ao aplicar o método RANS.

Existem atualmente diferentes métodos ou modelos de solução para as RANS destinadas a calcular este coeficiente de viscosidade, os grandes grupos podem ser divididos no modelo de zero equações e o modelo de duas equações.

– Modelo de zero equações.

É o método mais simples para encontrar o coeficiente de viscosidade dinâmica, pois o mesmo consiste em um modelo que não requer o cálculo de qualquer equação adicional. Esta é a base do modelo de comprimento misto de Prandtl que estabelece uma ligação μ e o gradiente de velocidade através de uma expressão algébrica.

$$\mu_t = \bar{\rho} l_{\min}^2 \left| \frac{du}{dy} \right| \quad (8)$$

l_{\min} sendo um comprimento de mistura que é calculado de acordo com a geometria do fluxo. Existem outros modelos de zero equações mais complexos fundamentados nesse como o modelo de Baldwin – Lomax e o de Cebeci – Smith.

– Modelo de duas equações.

Os modelos de duas equações são os mais utilizados nos modelos RANS para uso em CFD. Existem diferentes modelos dentro desta seção, sendo os mais conhecidos o modelo $k - \varepsilon$ e $k - \omega$.

O modelo $k - \varepsilon$ incorpora duas equações de balanço em derivadas parciais nas quais a energia cinética do fluido turbulento k e sua velocidade de dissipação ε estão inter-relacionadas ao sistema de equações de fluido. Por meio dessas duas equações, os valores dessas variáveis são calculados para depois calcular o μ_t .

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (9)$$

O modelo $k - \omega$ também utiliza duas equações de interação para o cálculo subsequente de μ_t , neste caso a energia cinética do fluido turbulento k e a dissipação específica ω . Esta última variável determina a escala de turbulência, enquanto que k determina a energia da turbulência.

$$\mu_t = \bar{\rho} \frac{k}{\omega} \quad (10)$$

Ainda existem modelos que utilizam um número maior de equações para calcular o valor de μ_t . Os chamados modelos de quatro equações são similares aos modelos $k - \varepsilon$ padrão, embora também incorporem alguma anisotropia turbulenta nas proximidades da parede e efeitos não locais da pressão-torção. Os modelos de estresse de Reynolds (Reynolds Stress Model (RSM)) são modelos que utilizam sete equações para o cálculo de μ_t . Este modelo tenta resolver as equações de transporte para as tensões de Reynolds. Isso significa a introdução de várias equações de transporte para todas as tensões de Reynolds e portanto, um maior custo computacional.

Dentre os modelos de tratamento da turbulência acima apresentados, o modelo admitido para o presente trabalho foi o $k - \varepsilon$ padrão, ele é um método semi-empírico que se baseia nas equações do modelo de transporte para a sua energia cinética turbulenta (k) e sua taxa de dissipação (ε), como descritas pelas equações 11 e 12.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (12)$$

Onde G_k é a parcela referente a energia cinética turbulenta oriunda dos gradientes de velocidade média; G_b representa a geração de energia cinética turbulenta em consequência das flutuações das velocidades; Y_M representa a contribuição na taxa de dissipação total devido à variação volumétrica para o caso compressível. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ e $C_{3\varepsilon}$ são constantes; σ_k e σ_ε representam os números de Prandtl turbulentos para k e ε , respectivamente. Launder, B. E. atribui à estas constantes os seguintes valores:

- $C_{1\varepsilon} = 1,44$;
- $C_{2\varepsilon} = 1,92$;
- $C_\mu = 0,09$;
- $\sigma_k = 1,00$;
- $\sigma_\varepsilon = 1,30$.

Um caso particular é a determinação de $C_{3\varepsilon}$ depende da literatura a ser seguida, um possível valor é -0,33, outro ponto, é que ele é destinado a ser utilizado apenas com o termo G_b .

Dentre os vários modelos turbulentos existentes, este é o mais utilizado, além de ser tido como padrão em aplicações industriais. Esta popularidade é devida à sua estabilidade e robustez numérica, de maneira que para simulações de propositos gerais tem bons resultados em relação a precisão, robustez e economia. Embora seja um método que oferece uma boa qualidade de resultado, possui algumas limitações quanto à sua aplicação. As limitações podem ser divididas em quatro, sendo-as:

- escoamentos com desprendimento da camada limite;
- escoamentos com mudanças repentinas na taxa de cisalhamento;
- escoamentos de fluidos em rotação;
- escoamentos sobre superfícies curvadas.

Oriundo destas limitações, em casos de escoamentos com repentinas mudanças na taxa de cisalhamento ou em rotação, o modelo Reynolds Stress é uma opção que pode ser mais adequada. Já em situações onde ocorre o desprendimento da camada limite, um possível modelo a ser aplicado é o modelo SST. O modelo $k - \varepsilon$ é dividido basicamente em três tipos: Standard $k - \varepsilon$, RNG $k - \varepsilon$ e Realizable $k - \varepsilon$, as principais diferenças entre esses três submodelos são:

- Método de calcular a viscosidade turbulenta;
- Os números de Prandtl que governam a difusão turbulenta de k e ε ;
- Termos de geração e destruição na equação de ε .

Como mencionado anteriormente, o modelo utilizado neste trabalho é embasado no $k - \varepsilon$ padrão, este se caracteriza por ser válido apenas para escoamentos turbulentos, com efeitos da viscosidade molecular desprezíveis e tendo sua aplicação com altos números de Reynolds. O modelo $k - \varepsilon$ possui muitas vantagens, bem como suas desvantagens, estas descritas na Tabela 11.

Tabela 11 – Vantagens e desvantagens do modelo k – epsilon (k-ε).

Vantagens	Desvantagens
Leva bons resultados para muitos escoamentos industriais	Resultados ruins para escoamentos com forte curvatura
Simples e robusto	Pouco acurado nas proximidades das paredes
Barato computacionalmente	

Fonte: Autor.

A literatura apresenta uma gama de trabalhos que utilizam o modelo k – epsilon (k-ε) no estudo de reatores nucleares, muitos deles envolvendo até mesmo a comparação dos três tipos desse modelo, os quais foram apresentados neste tópico, como é o caso por exemplo, do artigo publicado por Zhao em 2019, que realizou um estudo das características hidráulicas do reator AP1000 sobre condições de entupimento do tubo do gerador de vapor. Outro exemplo é o trabalho desenvolvido por Martinez em 2018, que utilizou o k – epsilon ($k - \epsilon$) padrão no tratamento da turbulencia em um estudo termohidráulico do reator AP1000 utilizando o combustível convencional. Estes são apenas dois trabalhos da vasta literatura referente a este modelo na aplicação em plantas de energia nuclear (NPP, da sigla em inglês) realizados através dos códigos da ANSYS. A aplicação destes modelos em outros códigos também é tida como viável, como porexemplo o trabalho de Cho e Yoon em 2019, que realizaram um estudo referente à diluição de boro através do código CUPID, neste foram avaliados vários modelos de turbulência, não só os $k - \epsilon$ como também os $k - \omega$. Em suma, a partir das definições apresentadas, bem como a massiva aplicação do mesmo em trabalhos na área de reatores nucleares, foi escolhido o modelo k – epsilon ($k - \epsilon$) padrão para o tratamento da turbulência no presente estudo.

3.2.2 Modelos de transferência de calor

O modelo de transferência de calor é usado para prever a temperatura ao longo do fluxo. Isto inclui o processo de transferência de calor por condução convecção, mistura turbulenta e trabalho viscoso. O modelo de energia total modela o transporte de entalpia através do domínio, o qual difere do modelo de energia térmica (*Thermal Energy*) em que os efeitos da energia cinética do fluxo também são levados em conta. Para o caso em que o aquecimento viscoso e

os efeitos da turbulência são importantes, é aconselhável utilizar o modelo “*Total Energy*” (ANSYS, 2018b).

Ele deve ser usado para fluxos de gás nos quais o número de Mach é maior que 0,2 e para fluxos líquidos de alta velocidade onde os efeitos do aquecimento viscoso aumentam na fronteira e os efeitos da energia cinética são significativos. No presente estudo foi aplicado o modelo *Thermal Energy* para a modelagem do fenômeno de transferência de calor.

3.2.3 Modelos do fluxo próximo a uma parede

Nas proximidades de uma parede antiderrapante existem fortes gradientes em diferentes variáveis e os efeitos viscosos nos processos de transporte são grandes. A representação desses processos dentro de uma simulação numérica implica levar em conta os efeitos viscosos na parede e resolver as variações rápidas das variáveis de fluxo que ocorrem dentro da região da camada limite.

A região perto da parede pode ser subdividida em duas camadas. Uma interna, chamada de subcamada viscosa, onde o fluxo é laminar e a viscosidade molecular desempenha um papel dominante no momento e na transferência de calor. Além da parede está a camada logarítmica onde a turbulência domina o processo de mistura. Há uma região intermediária onde os efeitos da viscosidade molecular e da turbulência são de igual importância, também chamada de camada de amortecimento.

Dois métodos são usados para modelar o fluxo próximo à parede. O primeiro é o método de função de parede que usa fórmulas empíricas que não resolvem a camada limite, de modo que economizam recursos computacionais. Esta é a sua maior vantagem, pois não precisam de malhas computacionais extremamente refinadas e também evitam a necessidade de levar em conta os efeitos viscosos no modelo de turbulência. O segundo método é chamado de Método do baixo número de Reynolds, que resolve os detalhes da camada limite usando comprimentos muito pequenos de malha na direção normal da parede.

Uma variável intimamente relacionada aos modelos de turbulência e também muito importante para a geração da malha é o y^+ . Está é uma distância adimensional, medida a partir da parede, que é usada para verificar a localização do primeiro nó longe da parede. É mais importante quando se utilizam funções de parede, já que se devem evitar valores menores de 15 para y^+ , uma vez que essa redução pode resultar em erros ilimitados nos esforços cortantes e na transferência de calor.

$$y^+ = \frac{\Delta y Re_L^{13/14}}{L\sqrt{74}} \quad (13)$$

Onde Δy é a distância da parede até o primeiro nó, Re_L o número de Reynolds e L a escala longitudinal do fluxo.

3.3 DESCRIÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL UTILIZADO PARA O CÁLCULO TERMOHIDRÁULICO DE UM CONJUNTO COMBUSTÍVEL TÍPICO DO REATOR AP1000

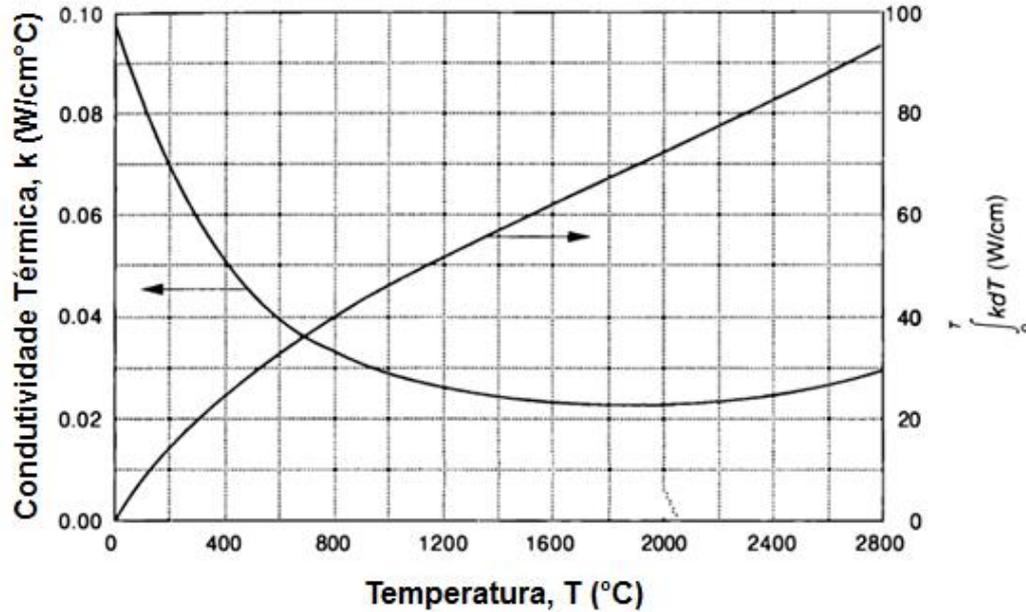
3.3.1 Avaliação das propriedades termofísicas do combustível (U, Th)O₂

3.3.1.1 Condutividade térmica

É a habilidade que um material possui de transferir calor a partir de uma região de maior temperatura para uma região de menor temperatura. Em condições normais, a condutividade térmica e a potência linear determinam a temperatura máxima de funcionamento do combustível. Sob as condições de acidente, a condutividade térmica do combustível determina a máxima taxa linear admissível, x_{\max} , se a fusão central deve ser evitada.

Os combustíveis dos reatores de água leve são compostos comumente por UO₂ e muitos fatores podem afetar a sua condutividade térmica. Os principais fatores são a temperatura; porosidade; relação átomo de oxigênio para metal; quantidade de PuO₂; rachadura da pastilha e a queima do combustível (burnup). Pelo ponto de vista da temperatura, tem sido observado experimentalmente que a condutividade térmica decresce com o aumento da temperatura até aproximadamente 1750°C e a partir daí tende a aumentar, como pode ser visto na Figura 12.

Figura 12 – Condutividade térmica do UO_2 em dependência com a temperatura.



Fonte: Adaptado de TODREAS & KAZIMI (1990).

Também pode ser observado na Figura 12, a integral que é frequentemente usada para obtenção dos valores de $k(T)$, sendo a mesma representada pela Equação 14.

$$\int_0^T k dT \quad (14)$$

Além da vasta literatura atual no tocante a determinação da condutividade térmica do dióxido de urânio, os fabricantes de reatores também possuem suas próprias expressões. A Westinghouse, por exemplo, construtora do reator AP1000, utiliza a Equação 15 para o cálculo da condutividade térmica com relação a temperatura.

$$k_{\text{UO}_2} = \frac{1}{11,8 + 0,0238T} + 8,775 \times 10^{-13} T^3 \quad (15)$$

Como já mencionado nos capítulos passados, o tório é um forte candidato para a utilização em reatores nucleares devido a suas propriedades físico químicas, neutrônicas etc. O tório possui uma condutividade térmica maior que o UO_2 (combustível utilizado nas atuais centrais nucleares). Isto implica em uma redução do gradiente de temperatura em uma pastilha combustível que o tenha em sua composição. A Equação 16 apresenta a correlação proposta

por Belle e Berman (1984) para determinar a condutividade térmica do dióxido de tório (100%) em um intervalo de temperaturas de 25 e 2677 °C.

$$k_{\text{ThO}_2} = \frac{1}{A + [B(T + 273)]} \quad (16)$$

Onde A e B são constantes e T é a temperatura em °C. $A = 0,0213 \text{ [m} \cdot \text{K/W]}$ e $B = 1,597 \times 10^{-4} \text{ [m/W]}$ (SANTOS, 2016).

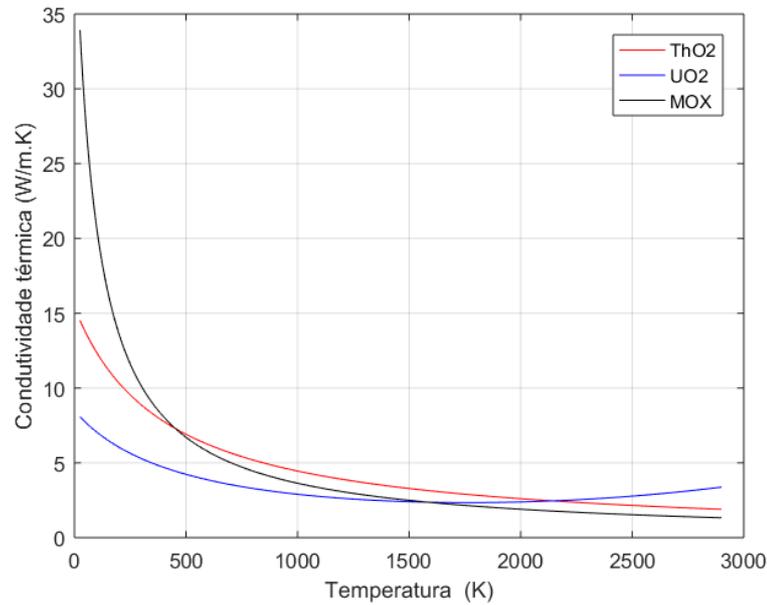
Além das várias publicações voltadas para a determinação das propriedades termofísicas do dióxido de tório separado, existem muitas pesquisas desenvolvidas à cerca da mistura de óxidos (MOX), tanto de urânio e tório ($\text{Th}_{1-x}\text{U}_x\text{O}_2$), quanto de tório e plutônio ($\text{Th}_{1-x}\text{Pu}_x\text{O}_2$). De maneira que, correlações para a condutividade térmica envolvendo combustíveis MOX de U-Th veem sendo reportadas desde a metade da década de 50 até os dias atuais, entretanto, alguns trabalhos como o de Das & Bharadwaj (2013) e um relatório da agencia internacional de energia atômica IAEA (2006) trazem um conteúdo abrangente em relação a essas correlações.

Dentre esses vários trabalhos, Das & Bharadwaj (2013) fornece uma correlação que relaciona a condutividade térmica tanto com a temperatura, quanto com as frações mássicas das misturas e que é utilizada no presente trabalho. A forma dessa correlação está representada pela Equação 17.

$$k_{\text{U-Th}} = [-0,0464 + 0,0034 * x + (2,5185 \times 10^{-4} + 1,0733 \times 10^{-7} * x)T]^{-1} \quad (17)$$

Onde x é a fração mássica de UO_2 no MOX, que para o presente estudo é 24%. É importante salientar que a equação acima está situada em um intervalo de 873 à 1873K, podendo então, ser utilizada no presente trabalho, uma vez que, no núcleo, só ocorrem variações significativas no combustível em temperaturas por volta de 800K. Para melhor compreensão da variação da condutividade térmica dada pela Equação 17, a Figura 13 compara seu comportamento com as Equações 15 e 16.

Figura 13 – Estudo da correlação da condutividade térmica para o MOX.



Fonte: Autor.

A partir da Figura 13, pode-se observar a sensibilidade da Equação 17 perante a determinação da condutividade térmica para temperaturas abaixo de 800K, como a acima de 1873K, entretanto, como no presente trabalho o estudo não é focado em transientes operacionais com aumento na temperatura do combustível, logo se torna válida a aproximação realizada na escolha desta equação, visto que não excede o limite máximo de temperatura de projeto. O segundo parâmetro avaliado acerca do combustível foi a Densidade, esta descrito na seção 3.3.1.2.

3.3.1.2 Densidade

A densidade do combustível é uma propriedade importante e é uma função dos seguintes fatores: composição do combustível; temperatura; quantidade de porosidade; razão O/M e queima (Das & Bharadwaj, 2013). A densidade de um material como uma função da temperatura pode ser calculada usando dados de expansão térmica linear, que mede o alongamento térmico do material com respeito à temperatura. Para determinar a densidade do UO_2 , utilizou-se a correlação do relatório da IAEA (2006), a qual é expressa pela Equação 18.

$$\rho(T) = \rho(273) \left(\frac{L(273)}{L(T)} \right)^3 \quad (18)$$

Onde $\rho(273)$ e $L(273)$ são a densidade e o comprimento à 273K, já $L(T)$ o comprimento à temperatura T em Kelvin (K). A partir da equação acima, Martínez (2018) estimou uma expressão para a densidade do UO_2 de acordo com os dados da IAEA (2018), como é representada pela Equação 19, esta, admite 1% de incerteza para um intervalo de 273 – 3120K.

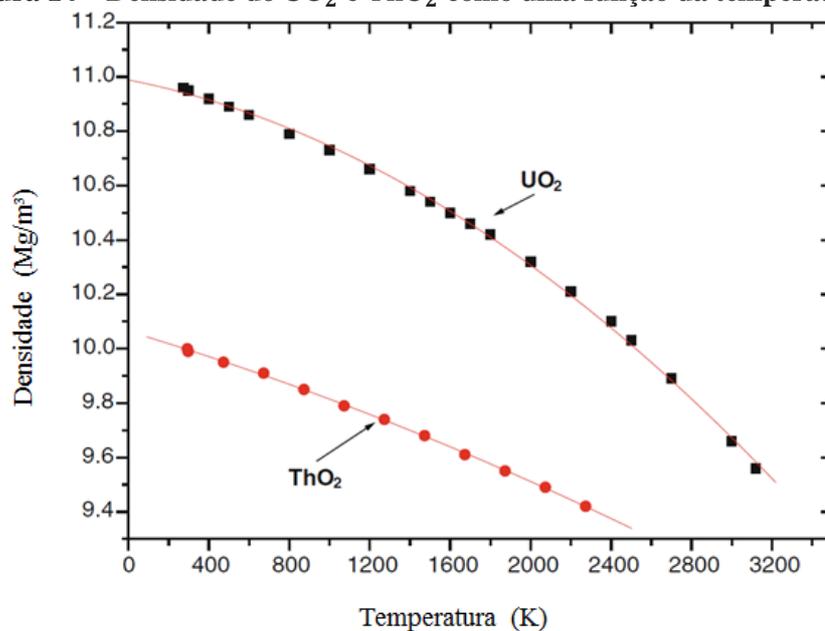
$$\rho_{UO_2} = 11063,3350 - 0,3520 * T + 5,2700 \times 10^{-5} * T^2 - 3,0300 \times 10^{-8} * T^3 \quad (19)$$

Para estimar uma correlação para a densidade do dióxido de tório, foi feito um ajuste numérico dos dados reportados pela IAEA (2006), a qual fornece resultados tanto para o ThO_2 , quanto para mistura com o UO_2 . A correlação encontrada para a densidade do ThO_2 tem a forma da Equação 20, para o intervalo de 298 – 2273K.

$$\rho_{ThO_2} = 10047,0285 - 0,1690 * T - 7 \times 10^{-5} * T^2 + 1 \times 10^{-8} * T^3 \quad (20)$$

Para visualizar a diferença das equações 19 e 20, a Figura 14 apresenta uma comparação da variação da densidade com relação à temperatura para ambos os óxidos.

Figura 14 – Densidade do UO_2 e ThO_2 como uma função da temperatura.



Fonte: DAS & BHARADWADJ (2013)

A fim de obter uma correlação para a densidade do combustível com uma mistura de óxidos (MOX) de urânio e tório (U, Th)O₂ foi proposto uma ponderação entre as expressões da densidade dos óxidos, a qual é representada pela Equação 21.

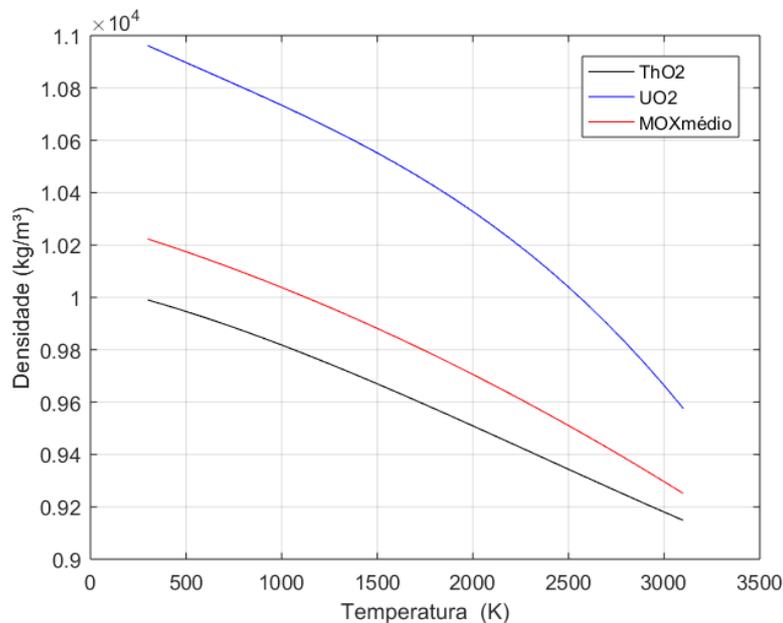
$$\rho_{(U_x, Th_{1-x})O_2} = x * \rho_{UO_2} + (1 - x) * \rho_{ThO_2} \quad (21)$$

Onde x é a fração mássica de UO₂ no MOX. Para o presente trabalho foi considerado uma composição com 24% de UO₂ e 76% de ThO₂, de maneira que a correlação utilizada para expressar a densidade do MOX é descrita pela Equação 22.

$$\rho_{(U_{0,24}, Th_{0,76})O_2} = 10290,9204 - 0,2129 * T - 4,0552 \times 10^{-5} * T^2 + 3,2800 \times 10^{-10} * T^3 \quad \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (22)$$

Para a melhor compreensão do estudo da obtenção de uma correlação que representasse a variação da densidade com a temperatura do MOX, a Figura 15 descreve essa variação para o UO₂, ThO₂ e para a correlação proposta (Eq. 22).

Figura 15 – Estudo da variação térmica da densidade para o MOX.



Fonte: Autor.

De acordo com a Figura 15, observa-se que há uma variação significativa por parte da densidade com relação à temperatura, contudo, para o presente estudo um valor médio poderia ter sido utilizado como aproximação (um teste inicial), pois dentro do intervalo de temperatura

do reator, não foram evidenciadas variações significativas, entretanto, é um fator importante para a análise termohidráulica. Em casos de transientes operacionais, como por exemplo, um possível aumento brusco da temperatura, a densidade então, torna-se um parâmetro de certa relevância. Além da condutividade térmica e da densidade outro parâmetro avaliado foi o calor específico, este é abordado no item 3.3.1.3.

3.3.1.3 Calor específico

A entalpia do combustível e sua derivação com a temperatura, o calor específico, são parâmetros importantes na avaliação do comportamento do combustível durante condições normais de operação e transientes antecipados. O calor específico é função da temperatura, composição do combustível (frações mássicas), razão O/M e também a queima do combustível.

As Equações 23 e 24 descrevem de acordo com a IAEA (2006), a expressão para o calor específico do UO_2 e ThO_2 , respectivamente.

$$C_{p_{UO_2}} = 52,1743 + 0,08795 * T - 8,4241 \times 10^{-5} * T^2 + 3,1542 \times 10^{-8} * T^3 - 2,6334 \times 10^{-12} * T^4 - 7,1391 \times 10^5 * T^{-2} \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] \quad (23)$$

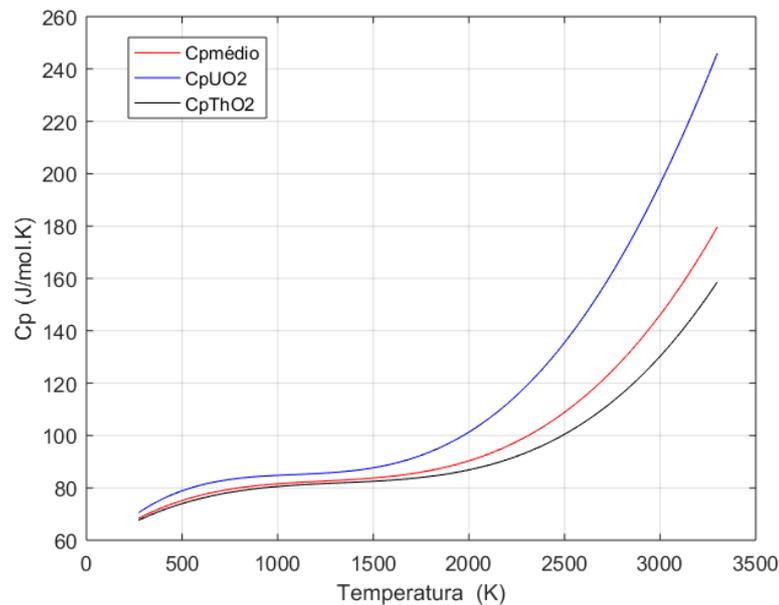
$$C_{p_{ThO_2}} = 55,9620 + 0,05126 * T - 3,6802 \times 10^{-5} * T^2 + 9,2245 \times 10^{-9} * T^3 - 5,7403 \times 10^5 * T^{-2} \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] \quad (24)$$

Ambas as equações estão situadas em um intervalo de 298,15 – 3120K, sendo que dentre o range de 298,15 à 1800K tem-se uma incerteza de 4%, já de 1800 à 3120K esta incerteza sobe para 13%. A avaliação do calor específico para um combustível com uma mistura de óxidos de (U,Th) O_2 , foi a mesma abordada para os parâmetros acima citados, neste tópico, a qual foi feita uma ponderação das Equações 23 e 24 com relação a fração mássica de UO_2 na mistura (24%), como apresenta a Equação 25. Utilizou-se a massa molar do MOX para a conversão de $\left[\frac{J}{mol \cdot K} \right]$ para $\left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$ em virtude das dimensões utilizadas no CFX.

$$C_{p(U_{0,24},Th_{0,76})O_2} = 207,4842 + 0,2264 * T - 1,8161 \times 10^{-4} * T^2 + 5,4952 \times 10^{-8} * T^3 - 2,3819 \times 10^{-13} * T^4 - 2,2899 \times 10^6 * T^{-2} \quad \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (25)$$

Da mesma forma que para a condutividade térmica e para a densidade foram plotados a variação de seus respectivos parâmetros com relação à temperatura, a variação do calor específico do MOX com relação temperatura, através da admissão de uma ponderação entre as expressões do UO_2 e do ThO_2 , é descrita conforme a Figura 16.

Figura 16 – Estudo da variação térmica do calor específico para o MOX.



Fonte: Autor.

O calor específico não varia significativamente no intervalo de temperatura de operação normal esperado para o reator AP1000, contudo, em casos de transitórios operacionais, este parâmetro possui uma influencia significativa no estudo termohidráulico do reator, uma vez que a temperatura estará acima dos limites de projeto, logo irá situar-se na região exponencial como ilustra a Figura 16. Sendo assim, não pode ser feita a mesma consideração que é estipulada para a região não exponencial, na qual, faz-se uma aproximação inicial definindo um valor médio para o calor específico.

Para os demais materiais que constituem a estrutura do elemento combustível, sendo-os: interstício (Hélio), revestimento (Zircaloy) e barras de controle (considerando ar) seus respectivos parâmetros termofísicos são apresentados na Tabela 12.

Tabela 12 – Parâmetros termofísicos do interstício, barra de controle e revestimento.

Domínio	Material	Temperatura Média	Densidade	Calor Específico	Condutividade Térmica
Interstício	hélio	500	3,702	5,193	303,1
Barra de controle	ar	100	0,916	1,01	324,0
Revestimento	Zircaloy	400	6550	0,290	17,0

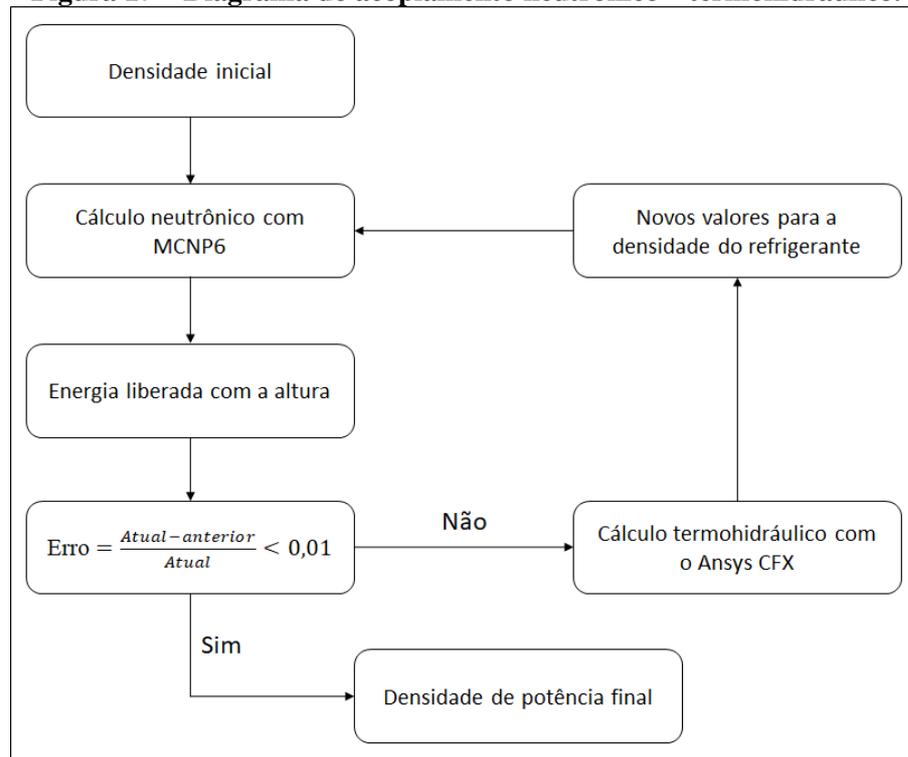
Fonte: Adaptado de MARTÍNEZ (2018)

Em detrimento de um estudo com algumas simplificações, algumas propriedades dos demais materiais admitidas constantes, todavia, uma análise mais detalhada e robusta deve ser feita para investigar se é necessário e ou viável realizar um estudo variante dessas propriedades.

3.3.2 Determinação da densidade de potência no conjunto combustível típico do reator AP1000

A determinação do fluxo volumétrico de calor no elemento combustível típico do reator AP1000 foi feita a partir de um cálculo neutrônico – termohidráulico acoplado utilizando o MCNP6 para os cálculos neutrônicos e o CFX para os termohidráulicos, estando acoplados em série, pois os resultados de um código são utilizados como dados iniciais para o cálculo no outro. A conexão entre esses códigos é feita a partir de três parâmetros: distribuição axial de energia nos elementos combustíveis que é obtida através do MCNP6, distribuição axial tanto da temperatura, quanto da densidade da água obtidos através do CFX.

Inicialmente calcula-se a distribuição axial de energia liberada nos elementos combustíveis com o código MCNP6, considerando uma variação linear da temperatura do refrigerante em uma faixa de 288°C a 325°C, obtendo assim os valores iniciais da densidade da água ao longo da altura do conjunto combustível. Oriundo deste cálculo obtém-se a primeira distribuição de densidade axial de potência, a qual é inserida no CFX, para que com isso seja obtida uma nova distribuição axial de temperatura do refrigerante e, por conseguinte, uma nova distribuição axial da densidade da água, que é novamente definida no MCNP6, até que a variação da energia liberada atinja um erro estabelecido e com isso obtém-se a distribuição da densidade axial de potência definitiva para ser usada no CFX. A Figura 17 apresenta um fluxograma de como foi realizado o cálculo acoplado.

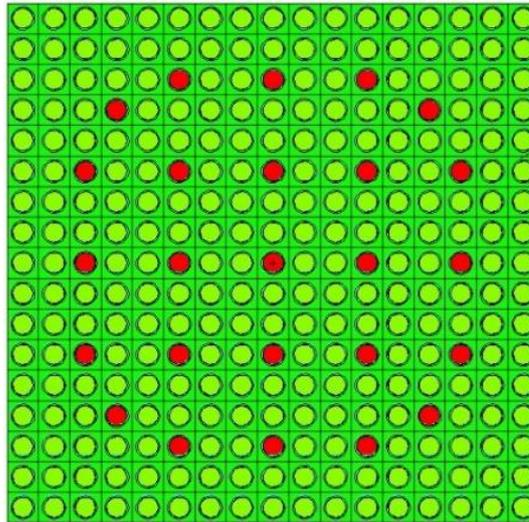
Figura 17 – Diagrama do acoplamento neutrônico – termohidráulico.

Fonte: Autor.

A obtenção da potência ao longo da altura do elemento combustível é feita dividindo a potência térmica total do reator (3400MW_t) entre a quantidade de conjuntos combustíveis (157), entre a quantidade de elementos combustíveis (264) e pelo volume de cada célula ao longo da altura, que é o volume do combustível dividido pela quantidade de células (11 células). Em seguida este valor é multiplicado por um coeficiente de potência normalizado obtido no cálculo em cada célula por altura no MCNP6.

A modelagem neutrônica do reator AP1000 foi realizada de maneira simplificada, de maneira que, para o presente estudo foram considerados os dados estruturais do reator, entretanto, não foi levado em consideração a presença de nenhum veneno queimável. Visando estabelecer um modelo confiável para posterior aperfeiçoamento, nos locais referentes às barras de controle, foi considerado ar, devido a implicações na implementação de vácuo nestes locais, tanto na neutrônica, quanto na termohidráulica. A Figura 18 descreve a orientação do conjunto combustível que foi utilizado para no presente trabalho.

Figura 18 – Descrição do conjunto combustível utilizado para os cálculos neutrônicos e termohidráulicos.



Fonte: Autor.

A Figura 18 apresenta a forma do conjunto combustível do reator AP1000, sendo os círculos verdes a representação das barras de combustível, os círculos vermelhos as barras de controle (onde é considerado ar ao invés dos venenos queimáveis) e os demais espaços o fluido refrigerante. Para o estudo neutrônico, foram inseridas as frações mássicas do MOX na linha de código do MCNP6, estas frações são apresentadas na Tabela 13.

Tabela 13 – Frações Mássicas do MOX.

Isótopo	Nomenclatura utilizada no MCNP6	Fração Mássica
$^{16}_8\text{O}$	8016.83c	0,120577439
$^{235}_{92}\text{U}$	92235.83c	0,042300954
$^{238}_{92}\text{U}$	92238.83c	0,169203814
$^{232}_{90}\text{Th}$	90232.83c	0,667917794

Fonte: Autor.

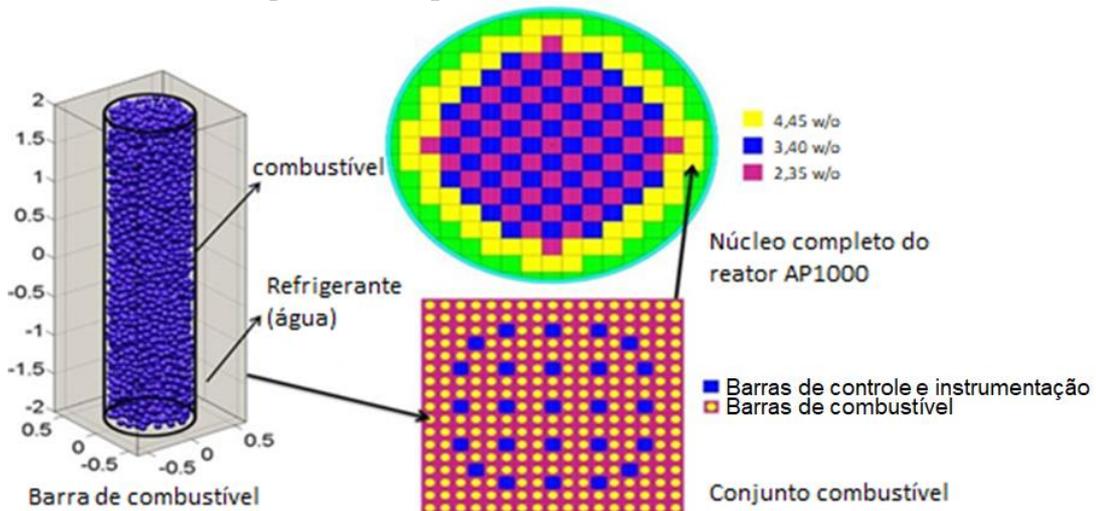
A especificação das frações mássicas do combustível a ser estudado é necessária para a caracterização do mesmo no código MCNP6, uma vez que isso interfere diretamente na neutrônica e conseqüentemente na termohidráulica, pois tem influência direta na densidade de potência.

3.3.3 Descrição e modelagem do conjunto combustível típico do reator AP1000

3.3.3.1 Construção da geometria

O núcleo do reator AP1000, como qualquer outro reator nuclear, é composto de várias barras (cilindros), sejam elas, de combustível, de controle ou de instrumentação. Quando delimitamos uma área e formamos um grupo estruturado de barras, o qual varia de reator para reator, chamamos de conjunto combustível, em que, a depender do tipo de reator varia-se a quantidade e o formato desses conjuntos. O núcleo do reator AP1000 é composto por uma matriz de 17x17 cilindros orientados verticalmente, totalizando 289 cilindros, sendo 24 destes tubos guias para a inserção de barras de controle ou venenos queimáveis, além de um tubo de instrumentação. Os elementos combustíveis possuem um comprimento ativo de 426,72cm. Uma forma estratificada do núcleo do reator AP1000 pode ser observada através da Figura 19.

Figura 19 – Esquema do núcleo do reator AP1000.



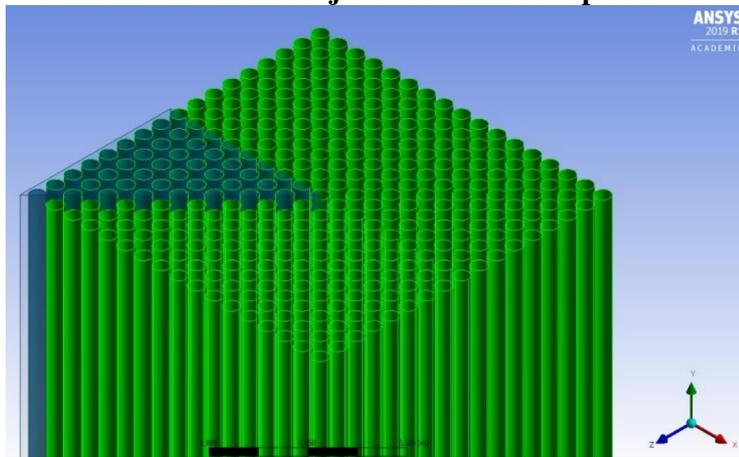
Fonte: Adaptado de Stefani et. al (2015).

Uma vez definido os parâmetros estruturais do reator, o primeiro passo para realizar a simulação termohidráulica do conjunto combustível típico do reator AP1000 é a construção da geometria do conjunto combustível do reator. Esta geometria foi desenvolvida no software ANSYS versão 19.2, a partir da ferramenta Design Modeler como ilustra a Figura 20, utilizando as mesmas dimensões de projeto de acordo com os manuais reportados pela construtora do reator Westinghouse, as quais são apresentadas na Tabela 14.

Tabela 14 – Informações estruturais do reator AP1000.

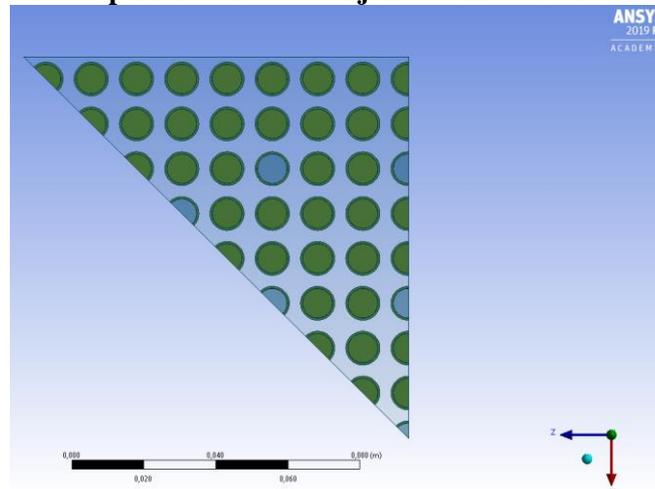
Elementos Combustíveis		Conjunto de Elementos Combustíveis	
N°	41448	N°	157
Raio do combustível	0,409575 cm	Matriz	17x17
Espessura do interstício	0,008175 cm	Pitch	1,26 cm
Espessura do revestimento	0,05715 cm	Quantidade de varetas de combustível por arranjo	264
Raio do centro (Bulk) do refrigerante	0,15525 cm	Dimensões transversais do arranjo	21,40 cm x 21,40 cm

Fonte: Adaptado de Stefani (2016).

Figura 20 – Vista isométrica do conjunto combustível típico do reator AP1000.

Fonte: Autor.

A fim de simplificar os cálculos e otimizar os recursos computacionais disponíveis, devido às características de simetria da geometria foi possível a redução para 1/8 do conjunto combustível completo, conforme a Figura 21.

Figura 21 – Vista superior de 1/8 do conjunto combustível do reator AP1000.

Fonte: Autor.

As dimensões de projeto foram mantidas, entretanto passou-se a ter apenas 28 cilindros completos, 16 metades de cilindros e um cilindro com 1/8 de seu comprimento radial, formando um total de 45 elementos, onde destes, 39 correspondem a barras de combustível e 6 barras de controle. Em concordância com o item anterior, para que não haja incompatibilidade de resultados entre o estudo neutrônico e o termohidráulico, também foi considerado ar nos locais onde seriam as barras de controle no CFX, assim como fora modelado no MCNP6.

3.3.3.2 Desenvolvimento da malha

A geração da malha é uma das etapas mais importantes no estágio de pré-processamento. Uma análise em CFD consiste fundamentalmente em uma mudança de domínio, onde se passa a analisar a mesma situação, entretanto, subdividida em partes. Em outras palavras é a saída de um domínio analítico para um numérico, feita através de vários elementos pequenos e não sobrepostos, de maneira que a precisão da solução é determinada por dois fatores, o primeiro é pela quantidade de elementos e o segundo pela distribuição dos mesmos no domínio.

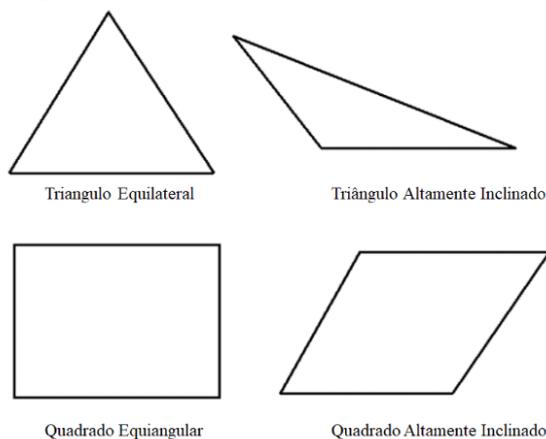
A forma da malha e a quantidade de elementos utilizados para discretizar o domínio, dependem da geometria e da precisão necessária da solução. Para o presente trabalho, a construção da malha foi feita através do método multizona, que se fundamenta no entrelaçamento de zonas independentes, proporcionando uma decomposição automática da geometria em regiões planas (sweepables) e regiões livre. Quando o método multizona é selecionado, todas as regiões se entrelaçam formando uma malha puramente hexaédrica, se possível. Visando um melhor ajuste da malha à geometria, foi determinado que a forma dos elementos para alcançar a estrutura projetada, seja de prisma. Esta opção é útil quando a face de origem não pode ser definida e, por tanto, o método de varredura não pode ser aplicado.

No presente estudo, uma malha estruturada é usada para se adaptar à geometria do canal. Na vizinhança das paredes, a malha é refinada para garantir que os gradientes de velocidade e temperatura sejam resolvidos corretamente, além de atender a todos os requisitos do modelo de turbulência com tratamento especial próximo às paredes, que desempenha um papel significativo na precisão do cálculo das forças de cisalhamento e do coeficiente de transferência de calor. No ambiente Ansys Meshing, a geometria previamente construída é importada e a malha é gerada especificando todas as características da malha (tipo, dimensão mínima das arestas e outros parâmetros existentes no programa).

A malha admitida para o objeto de estudo atual possui 2948000 elementos, e cada elemento tendo 41mm na direção axial e 0,8mm na direção radial com um valor médio de y^+ de 32,43. Após a definição da malha, no próprio ambiente Meshing existe uma opção para avaliarmos a qualidade da malha, a qual deve ser utilizada, pois esta desempenha um papel significativo na precisão e estabilidade do cálculo numérico. Existem alguns parâmetros que avaliam a qualidade da malha, dentre eles, a assimetria (skewness), a razão jacobiana (jacobian ratio) e a qualidade ortogonal (orthogonal quality) são os mais comumente utilizados.

A assimetria é uma das principais medidas de qualidade para uma malha, uma vez que determina o quão próximo do ideal (isto é, equilátero ou equiangular) uma face ou célula é, como ilustrado na Figura 22. Faces e células altamente inclinadas são inaceitáveis porque as equações que estão sendo resolvidas assumem que as células são relativamente equiláteras/equiangulares.

Figura 22 – Assimetria de faces ou células.



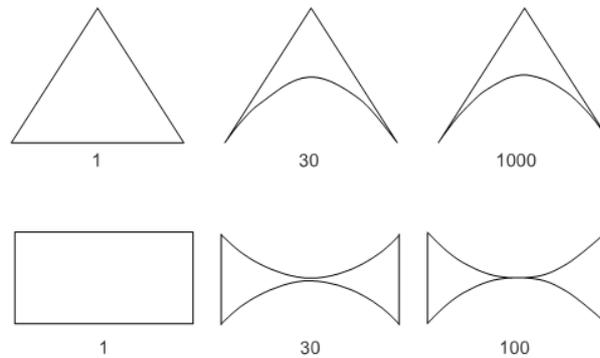
Fonte: Autor.

De acordo com a definição de assimetria, entende-se que para 0 uma célula é dita como equilátera (melhor), já para 1, a mesma é completamente degenerada (pior), porém, é importante destacar que embora estes sejam os valores extremos, existe uma faixa aceitável de aplicação, que varia de 0,80 para boa e 0 para excelente.

Outro parâmetro de avaliação da qualidade da malha é a razão jacobiana (Jacobian ratio), que mensura a forma de um dado elemento comparada com a de um elemento ideal, conforme a Figura 23. Se um elemento tiver uma proporção jacobiana de qualidade ruim, o elemento pode não mapear bem o espaço do elemento para o espaço real, tornando os cálculos baseados na forma do elemento menos confiáveis. A forma ideal de um elemento depende do

tipo de elemento. Para que a malha esteja dentro dos limites de aceitação deste parâmetro, é esperado que seu valor seja próximo da unidade.

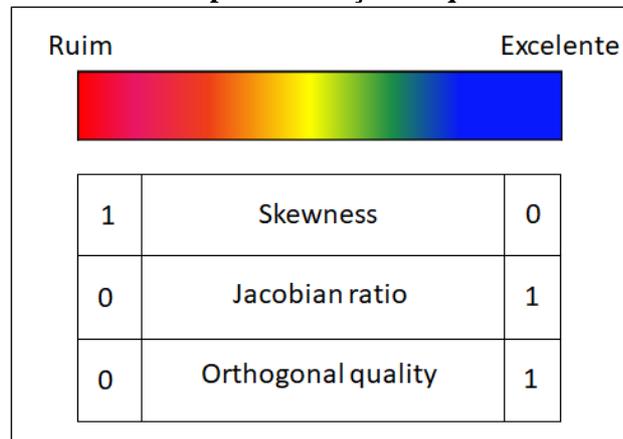
Figura 23 – Razões jacobianas para triângulos e quadriláteros.



Fonte: Adaptado de ANSYS (2018c).

O último e principal parâmetro da qualidade citado é a qualidade ortogonal (Orthogonal Quality), a qual é considerada excelente quando seu valor tende a 1, entretanto, a partir de 0,20 já é admitida como boa. A Figura 24 esquematiza os limites extremos aplicados para o estudo da qualidade da malha envolvendo os três parâmetros citados acima.

Figura 24 – Limites para avaliação da qualidade da malha.



Fonte: Adaptado de ANSYS (2018c).

A partir da fundamentação acima, foi realizado um estudo da qualidade da malha aplicando os três parâmetros citados e foram encontrados ótimos valores, tornando a modelagem consistente para ser aplicada no estudo proposto para o presente trabalho. Os valores obtidos na avaliação da qualidade da malha são apresentados na Tabela 15.

Tabela 15 – Parâmetros utilizados para a avaliação da qualidade da malha.

Parâmetro	Mínimo	Máximo	Médio	Valor ideal
Orthogonal Quality	0,23675	0,99962	0,94886	1
Jacobian Ratio	0,25993	1	0,98372	1
Skewness	0,00092283	0,766325	0,1	0

Fonte: Autor.

De acordo com os dados apresentados na Tabela 15 verifica-se uma boa qualidade da malha, uma vez que seus valores mínimos e máximos estão dentro do intervalo de aceitação. Embora existam valores mínimos, estes representam uma pequena quantidade de elementos se comparado com a quantidade total de elementos da malha.

3.3.3.3 Condições de contorno

Após a definição do domínio de estudo e a forma de discretização, em seguida foram definidas as condições de contorno que serão inseridas na etapa de pré-processamento. Estas condições foram estabelecidas de acordo com os parâmetros obtidos nos manuais de projeto do reator. Por sua vez, para simular apenas 1/8 do conjunto combustível típico, condições de simetria foram estabelecidas para reduzir o tempo e esforço computacional. Os valores introduzidos no software para estes parâmetros estão apresentados na Tabela 16.

Tabela 16 – Parâmetros introduzidos no software.

Parâmetro	Valor
Pressão do sistema	15,5 MPa
Temperatura de entrada do refrigerante	288 °C
Vazão de entrada do refrigerante	10,71 kg/s

Fonte: Autor.

A temperatura de entrada do refrigerante é admitida igual da entrada no núcleo, sendo uma aproximação, uma vez que a referida temperatura deve aumentar alguns graus a partir do bocal de entrada para os canais entre os elementos de combustível. As propriedades da água foram tomadas de acordo com a Associação Internacional para as Propriedades da Água. A partir da biblioteca de materiais fornecida pelo software, foi escolhido o IAPWS-IF97, que é uma formulação de propriedades de água e vapor preparadas para usos industriais onde as formulações devem ser projetadas para cálculos rápidos e complexos. Estas propriedades da água são tomadas para o material Steam51 que é um tipo de água líquida que está nesta

biblioteca para uma faixa de temperatura que varia entre 450 e 900K, o que corresponde a um intervalo de pressão de 1MPa à 30MPa. Por fim, o fluxo mássico do refrigerante através de 1/8 do conjunto combustível típico foi determinado dividindo o fluxo mássico total do fluido refrigerante que entra no núcleo do reator (13457 kg/s) pela quantidade total de conjuntos combustíveis (157) e também divididos por oito.

Após a definição da estrutura a ser seguida, os capítulos seguintes apresentaram a validação desta metodologia a partir dos resultados obtidos, seguidos de suas respectivas discussões.

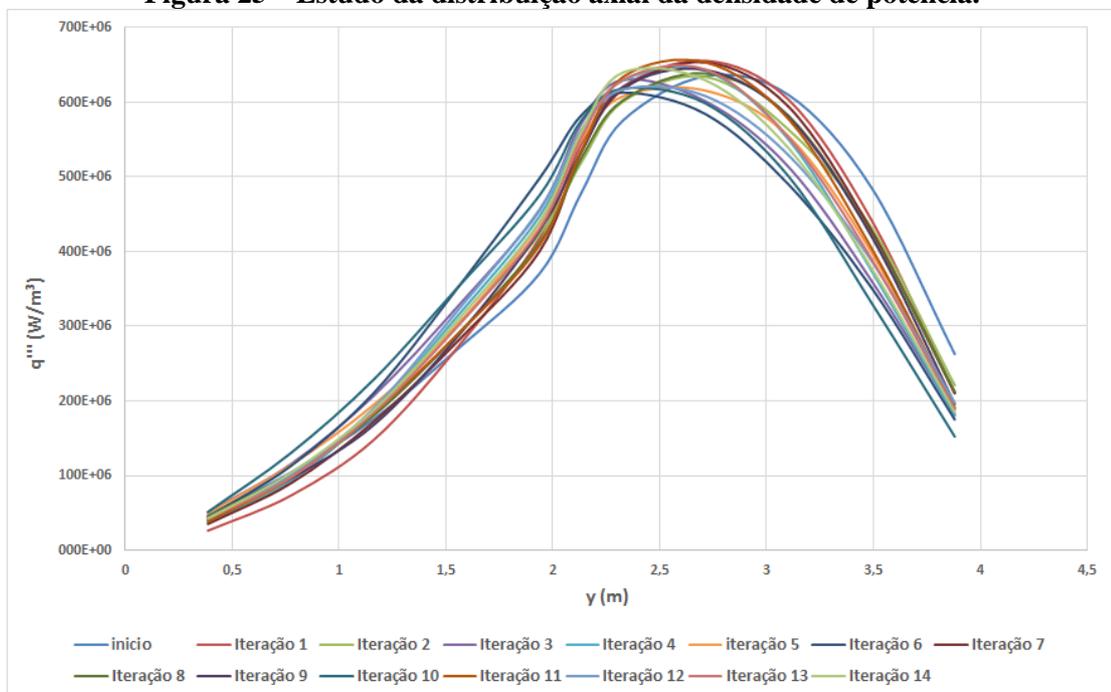
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O presente capítulo contempla os resultados obtidos através das análises neutrônica e termohidráulica, além de suas respectivas discussões acerca dos mesmos. No item 4.1 é apresentada a resposta do acoplamento neutrônico-termohidráulico, fornecendo uma distribuição da densidade de potência (q'''), já no item 4.2 são expostos os resultados referentes à análise termohidráulica, em que, nesta, foram avaliados os perfis axial e radial de temperatura no núcleo, bem como a variação da densidade do fluido refrigerante e a queda de pressão.

4.1 ACOPLAMENTO NEUTRÔNICO – TERMOHIDRÁULICO

Admitindo inicialmente uma variação linear da temperatura, a determinação do perfil da densidade de potência seguiu um estudo iterativo alcançando sua convergência após 14 iterações, como mostrado na Figura 25. Uma vez que o estudo foi desenvolvido não considerando a densidade do refrigerante constante, ou seja, não ideal, faz com que a forma da distribuição da densidade de potência não seja exatamente um cosseno.

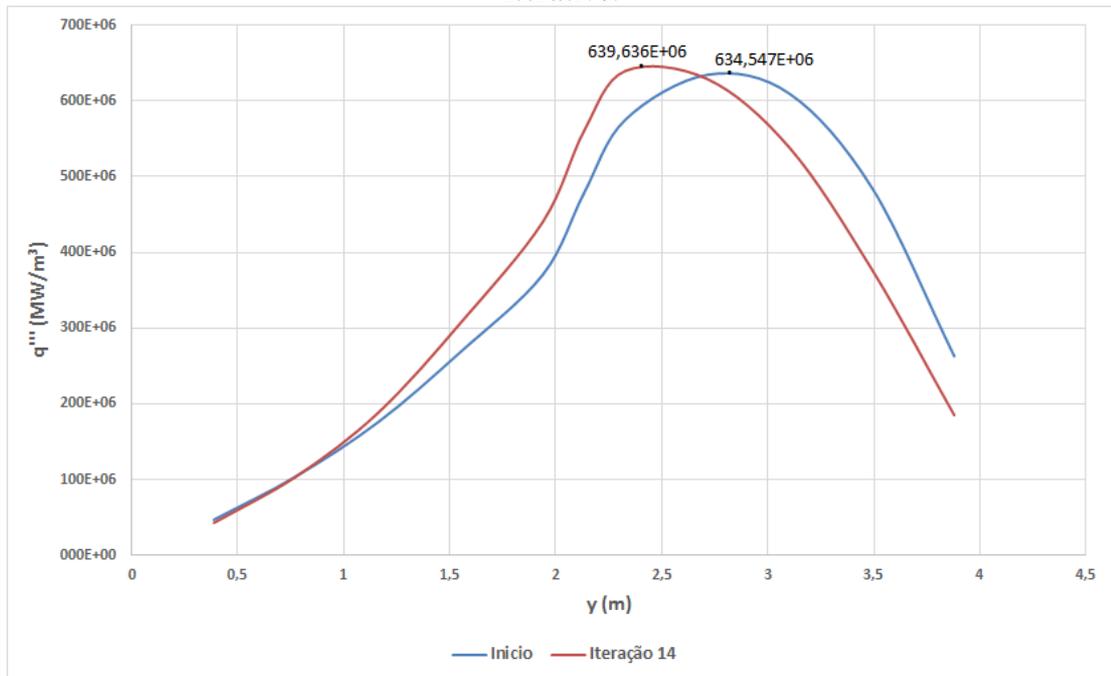
Figura 25 – Estudo da distribuição axial da densidade de potência.



Fonte: Autor.

Esta forma não ideal pôde ser visualizada a partir da Figura 25, bem como pela Figura 26, contudo, ainda que o perfil da densidade de potência não tenha a forma de um cosseno, este ainda tende a aproximar-se do centro da barra ao decorrer das iterações.

Figura 26 – Comparação da distribuição axial da densidade de potência inicial e após o processo iterativo.



Fonte: Autor.

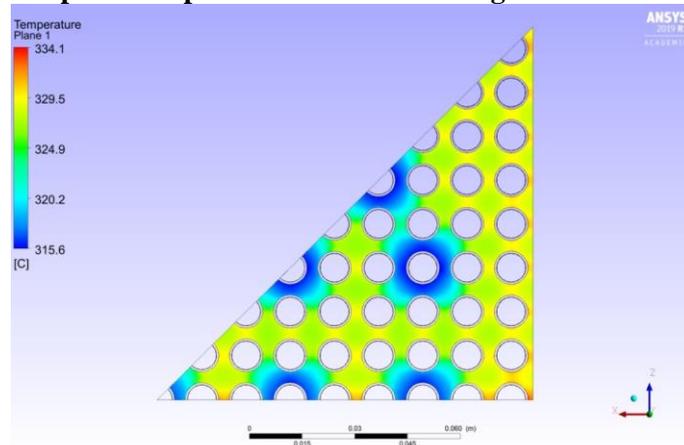
Através da Figura 26, a qual ilustra o estado inicial e o final do processo iterativo, foi verificado que inicialmente a maior geração de energia ocorria a 2,71m de altura na barra de combustível, tendo como valor máximo de 634,547E+06 MW/m³, já após o final das iterações, obteve-se um valor máximo para a geração de energia de 639,636E+06, este por sua vez, localizado a 2,33m. Após a determinação da densidade de potência, esta foi utilizada como dado de entrada para a análise termohidráulica (descrita no item 4.2).

4.2 ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA

A análise termohidráulica realizada no presente trabalho levou em consideração a situação de início da vida (BOL, da sigla em inglês) do reator, ou seja, com o combustível fresco (não queimado), ausência de venenos queimáveis e de grades espaçadoras. Inicialmente foi observado o campo de temperaturas na saída do conjunto combustível, como apresentado na Figura 27, este por sua vez, apresenta uma variação de 315,6°C, para regiões próximas dos

tubos guias das barras de controle, até 334,1°C para as zonas adjacentes as barras de combustível.

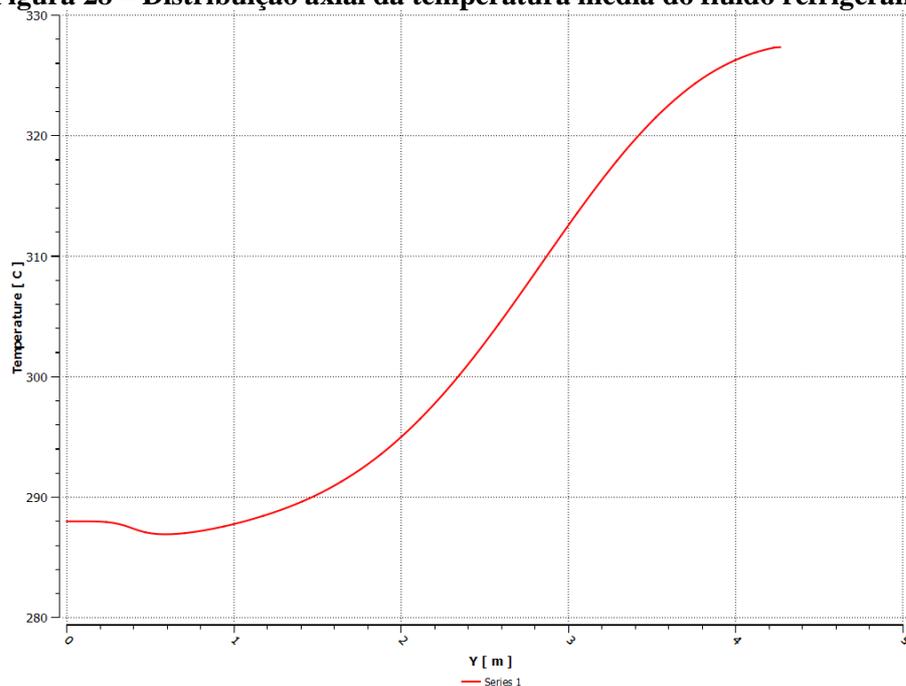
Figura 27 – Campo de temperaturas do fluido refrigerante na saída do conjunto.



Fonte: Autor.

Como mencionado anteriormente, ficam evidentes os dois tipos de zonas existentes a partir da Figura 27, as circundadas em azul ilustram as regiões próximas aos tubos guias das barras de controle (com uma temperatura menor, pois não retiram calor, uma vez que não há combustível), já as demais circundam as barras de combustível. A Figura 28 apresenta o comportamento da temperatura média do fluido refrigerante ao longo da altura do conjunto.

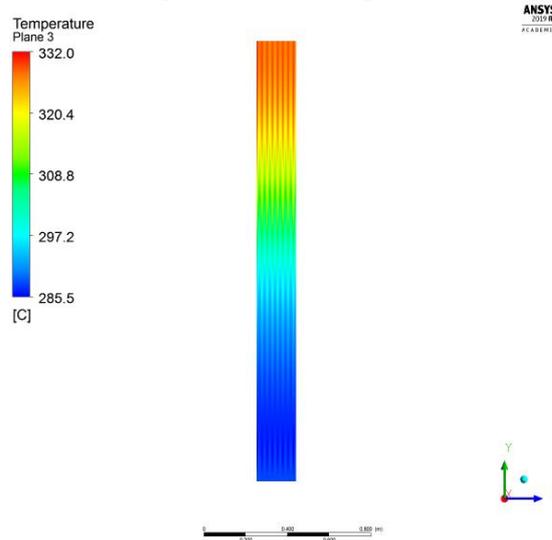
Figura 28 – Distribuição axial da temperatura média do fluido refrigerante.



Fonte: Autor.

O fluido refrigerante ascende no conjunto aumentando sua temperatura, uma vez que retira o calor gerado nas barras de combustível, alcançando uma temperatura máxima de 332°C, esta variação axial pode ser mais bem compreendida através da Figura 29.

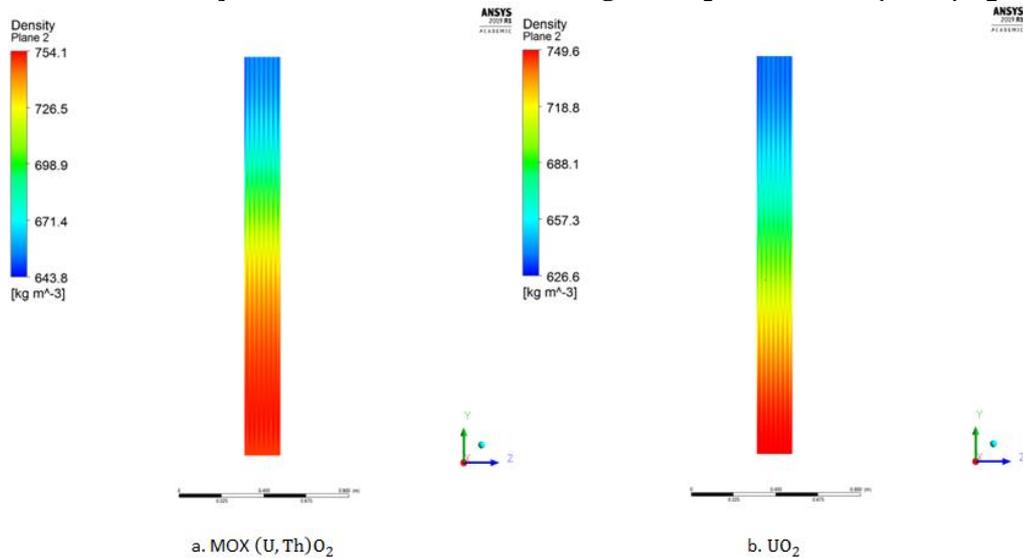
Figura 29 – Distribuição axial da temperatura do refrigerante.



Fonte: Autor.

Esta variação na temperatura da água acarreta em uma consequente diminuição de sua densidade, a qual se distribui ao longo do conjunto conforme ilustrado na Figura 30, nesta é feita uma comparação entre os valores obtidos no presente estudo com os resultados obtidos por MARTÍNEZ (2018).

Figura 30 – Distribuição axial da densidade do refrigerante para o MOX (U, Th)O₂ e UO₂.

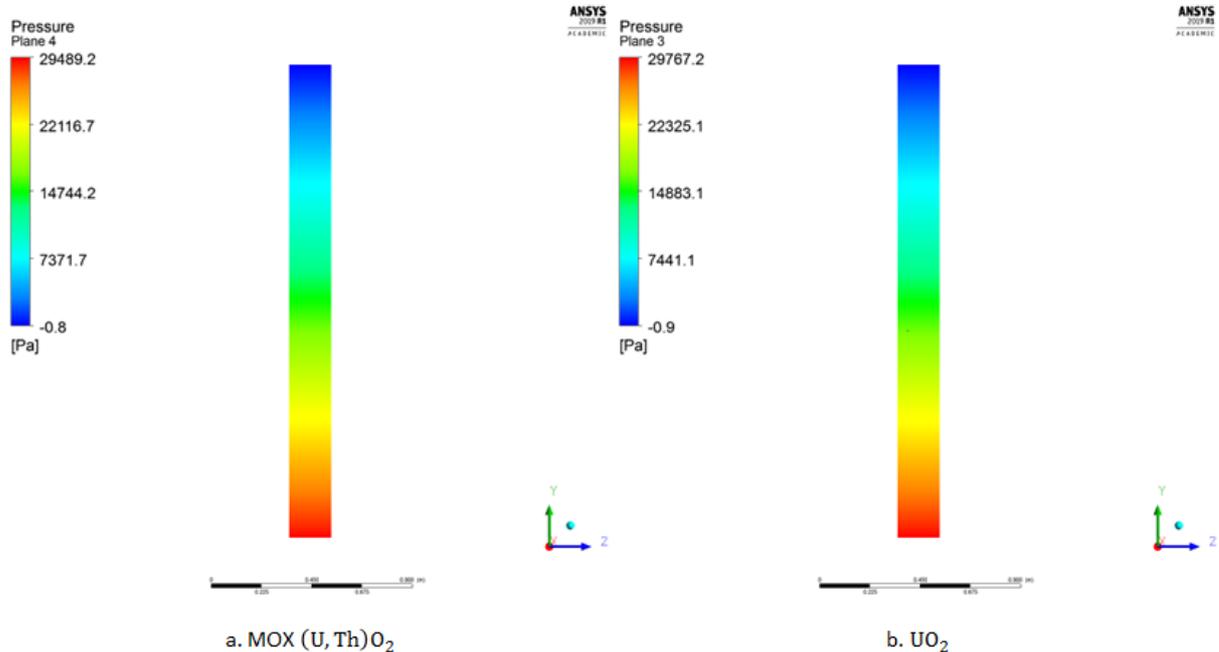


Fonte: Autor.

Foi verificado que a água apresentou uma variação de $110,3\text{kg/m}^3$ ao longo do conjunto para o AP1000 com uma mistura de óxidos (MOX) de urânio e tório $(\text{U,Th})\text{O}_2$ como combustível, como ilustra a Figura 30.a. Martínez em 2018 observou uma variação de 123kg/m^3 , para o AP1000 utilizando combustível convencional de dióxido de urânio UO_2 . A partir desses dados, foi possível atestar que a variação da densidade do refrigerante apresentou resultados dentro do esperado, uma vez que se situa próximo ao valor usualmente encontrado, ou seja, sem nenhuma discrepância quanto aos valores.

A variação da densidade do fluido refrigerante implica em uma variação da pressão no conjunto, esta também foi avaliada e os resultados estão apresentados na Figura 31. Para a situação em que o combustível considerado é o MOX a queda de pressão encontrada foi de $29489,2\text{Pa}$ (Figura 31.a), que está próximo ao relatado por Martínez em 2018, que encontrou um valor de $29767,2\text{Pa}$ (Figura 31.b) para o combustível convencional de UO_2 .

Figura 31 – Variação da pressão no fluido refrigerante para o combustível MOX $(\text{U,Th})\text{O}_2$ e UO_2 .

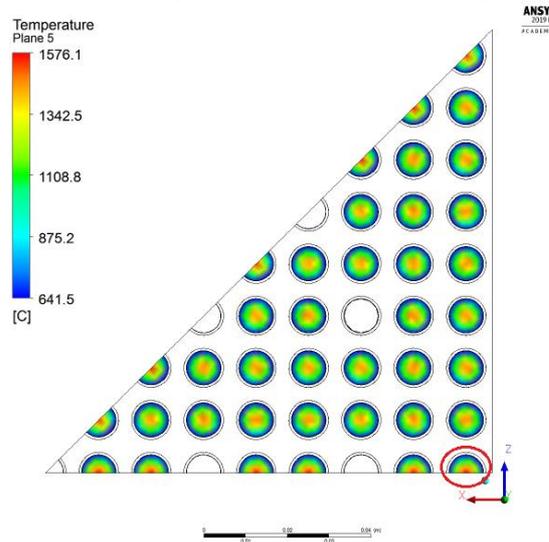


Fonte: Autor.

Para ambas as situações, o valor referente à queda de pressão no conjunto é desprezível se comparado com a pressão total do sistema, entretanto, vale salientar que no presente estudo não foram consideradas grades espaçadoras, que podem ter influência nessa queda de pressão. Logo, após um breve estudo em relação ao fluido refrigerante, em sequência foi realizada uma

avaliação do combustível, de maneira que primeiro foi determinada a região de maior geração de energia no conjunto, está descrita pela Figura 32.

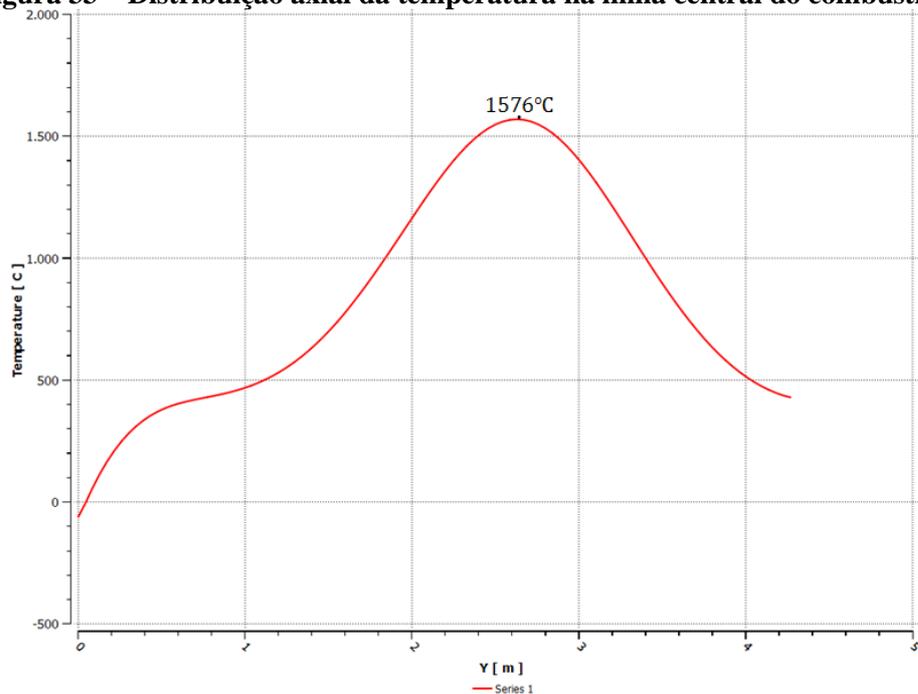
Figura 32 – Plano de temperatura máxima no conjunto combustível.



Fonte: Autor.

Uma vez definida a região de análise, o primeiro resultado em relação ao combustível foi a obtenção da distribuição axial da temperatura na barra de maior geração de calor. Esta variação ao longo da altura do conjunto é apresentada pela Figura 33.

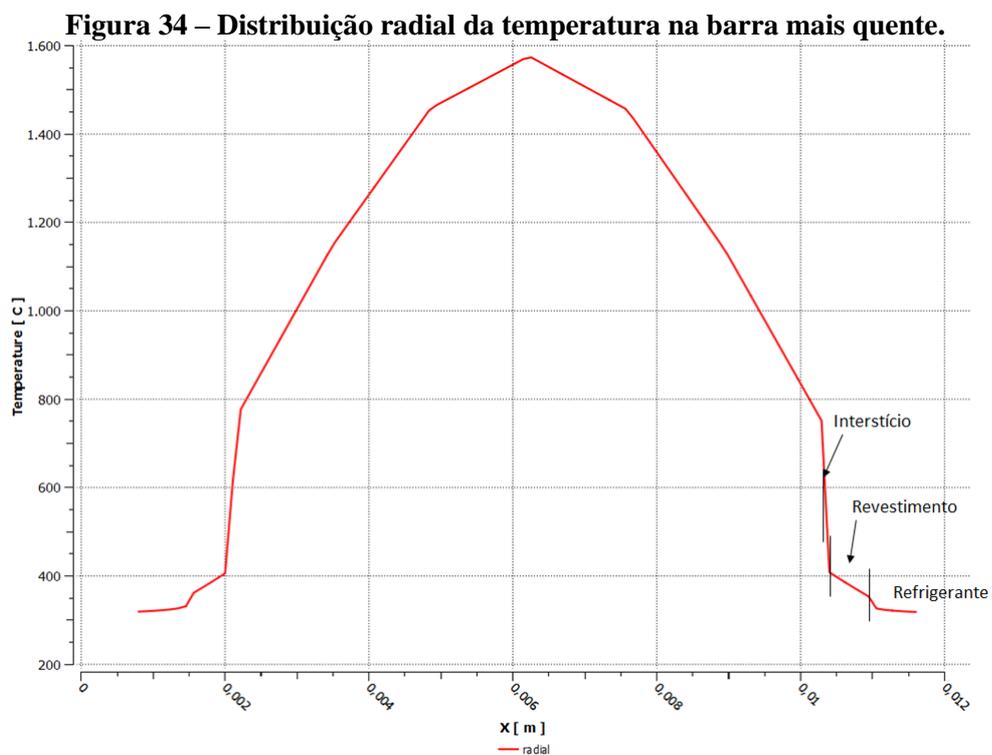
Figura 33 – Distribuição axial da temperatura na linha central do combustível.



Fonte: Autor.

A partir do perfil apresentado na Figura 33, foi obtido o valor da temperatura máxima na linha central do combustível, cujo valor foi de 1576°C . Em termos de fusão do núcleo do reator, este resultado torna-se bastante atrativo, uma vez que a fusão com o combustível MOX ocorre com temperaturas por volta de 3000°C , além de que este valor situa-se abaixo do usualmente encontrado para o reator com o combustível convencional utilizando dióxido de urânio que é de 1778°C segundo os manuais de projeto. Contudo, espera-se que esse valor seja ainda menor, caso sejam considerados os venenos queimáveis ao invés de ar em uma análise mais detalhada, visto que a inserção destes leva a uma diminuição da potência, logo, uma redução da temperatura máxima atingida no combustível.

Outro fator de destaque é que o comportamento da temperatura ao longo da altura do combustível é esperado, uma vez que os poucos dados existentes na literatura também apresentam distribuições similares. Visando avaliar as condições estruturais dos demais componentes da barra de combustível (interstício e gap) bem como o fluido refrigerante que a circunda, foi feita uma distribuição radial da temperatura na barra de combustível. O objetivo principal desta análise foi identificar a maior temperatura atingida no revestimento, que por sua vez, para o reator AP1000 é feito de Zircaloy. Visto que sua integridade é crucial para o funcionamento do reator, a temperatura máxima atingida no revestimento pôde ser observada através da Figura 34.



Fonte: Autor.

De acordo com a Figura 34, a temperatura máxima alcançada no revestimento foi de 413°C, que é um ótimo valor, visto que seu limite é de 1204°C, evitando assim uma possível oxidação e conseqüentemente sua degradação.

Diante dos resultados obtidos, a mudança no tipo de combustível com algumas simplificações do projeto original do reator, como é o caso da não inserção dos venenos queimáveis, bem como das grades espaçadoras, apresentou resultados consistentes e dentro dos limites de projeto. As considerações finais e suas perspectivas futuras são abordadas no capítulo seguinte.

5 CONCLUSÃO

Foi desenvolvido e implementado um modelo tridimensional através do código de dinâmica de fluidos computacional, para avaliar o comportamento termohidráulico de um conjunto combustível típico do reator AP1000 utilizando uma mistura de óxidos de urânio e tório (U, Th)O₂.

Foram avaliadas as expressões referentes às propriedades termofísicas do combustível por meio de uma avaliação dos dados informados na literatura. Por não existir expressões para as condições impostas no presente trabalho, para o caso da densidade e do calor específico, foi admitida uma ponderação entre as expressões de cada óxido, de acordo com os informes da agência internacional de energia atômica. Já para a condutividade térmica, foi estabelecida uma expressão também informada nos relatórios da IAEA.

Obteve-se a distribuição axial de potência no conjunto combustível típico do reator AP1000 através de um cálculo acoplado neutrônico-termohidráulico utilizando os códigos MCNP6 e Ansys-CFX. A partir desta distribuição foi possível notar que seu valor máximo tende ao centro da barra ao longo das iterações, situando-se um pouco acima do mesmo ao atingir a convergência, que por sua vez se deu após 14 iterações, além de um comportamento esperado frente a outras publicações na literatura.

Foi realizado um estudo acerca do fluido refrigerante, a partir do qual se determinou a distribuição axial da temperatura média, apontando como valor médio máximo uma temperatura um pouco acima de 325°C, bem como, obteve-se o campo de temperaturas do refrigerante na saída do conjunto evidenciando os pontos máximo e mínimo no mesmo. Para o refrigerante também foi avaliada a variação da densidade e da pressão no conjunto, estes tendo uma diferença de 110,3 kg/m³ e 30kPa, respectivamente. A queda de pressão não apresentou influência significativa quando comparada com a pressão do sistema, uma vez que não foram considerados alguns elementos geométricos, como por exemplo as grades espaçadoras.

A avaliação térmica acerca do combustível embasou-se na determinação da distribuição axial da temperatura do combustível visando determinar o comportamento da temperatura no mesmo, ao longo da altura do conjunto, como também sua temperatura máxima e o local para tal. Outro estudo em relação ao combustível foi a delimitação da distribuição radial de temperatura, com o objetivo de determinar os valores máximos nos outros componentes da barra, como interstício e revestimento, para que assim possam ser avaliados seus respectivos limites térmicos.

O combustível apresentou uma temperatura máxima situando-se um pouco acima do centro da barra com um valor de 1576°C , sendo um ótimo resultado visto que se distancia bastante do limite de fusão do material que é por volta de 3000°C , além deste valor estar abaixo do usualmente encontrado nos reatores que utilizam o combustível convencional de dióxido de urânio que é de 1778°C , esta redução na temperatura máxima é esperada visto que a introdução do tório como combustível acarreta numa diminuição da potência e conseqüentemente sua temperatura máxima. De acordo com a distribuição radial de temperatura obtida na barra de maior geração de energia, pôde ser observado que a temperatura máxima alcançada no revestimento é de aproximadamente 400°C , demonstrando um ótimo resultado visto que seu limite é de 1204°C , eliminando uma possível degradação do material.

O presente trabalho estudou uma situação de início de ciclo (BOC, da sigla em inglês) para um conjunto combustível típico do reator AP1000 utilizando um MOX de $(\text{U, Th})\text{O}_2$, realizando algumas simplificações em seu projeto original, conseguindo obter uma metodologia capaz de representar numericamente, uma situação a que o reator foi submetido. Em detrimento do desenvolvimento de uma metodologia base, almeja-se para trabalhos futuros, um refinamento desta levando em consideração outros elementos geométricos, como venenos queimáveis e grades espaçadoras, visando realizar estudos de transitórios operacionais com perda de refrigerante, bem como situações de ebulição.

REFERÊNCIAS

- ACHARYA R. **Investigation of differences in ANSYS solvers CFX and Fluent**. Estocolmo: KTH, School of Engineering Sciences (SCI), 2016, 48p.
- ANDERSON, J. D. **Computational fluid dynamics: The basics with applications**. 1^a ed. New York: McGraw-Hill, Inc., 2009.
- ANSYS. **ANSYS CFX – Introduction**. 9^a ed. ANSYS, 2018a.
- ANSYS. **ANSYS CFX – Solver Theory Guide**. 9^a ed. ANSYS, 2018b.
- ANSYS. **ANSYS Meshing User’s Guide**. 9^a ed. ANSYS, 2018c.
- ASHLEY S. F.; LINDLEY, B. A.; PARKS G. T.; NUTTALL W. J.; GREGG R.; HESKETH K. W.; KUNNAN, U.; KRISHNANI P. D.; SINGH B.; THAKUR A.; COWPER M.; TALAMO A. Fuel cycle modelling of open cycle thorium – fueled nuclear energy systems. **Annals of Nuclear Energy**, v. 69, p. 314 – 330, Julho 2014.
- BAE K. M.; KIM M. H. Core design for heterogeneous thorium fuel assemblies for PWR(I) – nuclear design and fuel cycle economy. **Nuclear Engineering and Technology**, v. 37, n. 1, p. 91 – 100, Fevereiro 2005.
- BALDOVA D.; FRIDMAN E.; SHWAGERAUS E. High conversion TH – U233 fuel for current generation of PWRs: Part I – Assemblies level analysis. **Annals of Nuclear Energy**, v. 73, p. 552 – 559, Novembro 2014a.
- BALDOVA D.; FRIDMAN E.; SHWAGERAUS E. High conversion TH – U233 fuel for current generation of PWRs: Part II – 3D full core analysis. **Annals of Nuclear Energy**, v. 73, p. 560 – 566, Novembro 2014b.
- BALDOVA D.; FRIDMAN E.; SHWAGERAUS E. High conversion TH – U233 fuel for current generation of PWRs: Part III – Fuel availability and utilization considerations. **Annals of Nuclear Energy**, v. 87, p. 517 – 526, Outubro 2015.
- BASKARA, R. F.; WARIS, A.; KURNIADI, R.; BASAR, K.; WIDAYANI; SAHIN, S. Advanced Nuclear Reactor AP1000 with ThO₂ – UO₂ Fuel. **Journal of Physics**, v 1204, conference series 012135, Maio 2019.
- BELLE, J.; BERMAN, R. M. Thorium dioxide: Properties and nuclear applications. **U.S. Department of Energy Publication**, DOE/NE-0060, 1984.
- BUSSE, A. L.; MOREIRA, J. M. L.; MAIORINO, J. R. **Rejeitos radioativos em reatores PWR quando do descomissionamento**. In: IX Congresso Brasileiro de Planejamento Energético, Florianópolis, 2014.
- CHAUDRI K, S.; TIAN W.; SU G.; QIU S. Coupled neutronics/thermal hydraulics evaluation for thorium base fuel in thermal spectrum SCWR. **Progress in Nuclear Energy**, v 68, p 55 – 64, Setembro 2013.

CSOM G.; REISS T.; FEHÉR S.; CZIFRUS S. Thorium as an alternative fuel for SCWRs. **Annals of Nuclear Energy**, v. 41, p. 67 – 78, Março 2012.

CUMMINS W.; CORLETTI M. & SCHULZ T. **Westinghouse AP1000 Advanced Passive Plant**. In: International Congress on Advanced in Nuclear Power Plants, Córdoba, Espanha, 2003.

DAVID S.; HUFFER E.; NIFENECKER H. Revisiting the thorium-uranium nuclear fuel cycle. **Europhysics News**, v. 38, n. 2, p. 24–27, 2007.

DAS, D.; BHARADWADJ, S. R. **Thoria – based Nuclear Fuels: Thermophysical and Thermodynamics Properties, Fabrication, Reprocessing, and Waste Management**, 1ª ed. Springer – Verlag London, 2013.

EPE. Empresa de Pesquisa Energética. **Balanco Energético Nacional**, 2019. Disponível em: <<http://www.epe.gov.br/pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/balanco-energetico-nacional-2019>>. Acesso em: 10 Jul. 2019.

EPE. Empresa de Pesquisa Energética. **Balanco Energético Nacional 2018: Ano base 2017**, Rio de Janeiro 2018.

EPE. Empresa de Pesquisa Energética. **Balanco Energético Nacional 2017: Ano base 2016**, Rio de Janeiro 2017.

GUO Z.; ZHOU J.; ZHANG D.; CHAUDRI K, S.; TIAN W.; SU G.; QIU S. Coupled neutronics/thermal – hydraulics for analysis of molten salt reactor. **Nuclear Engineering and Design**, v 258, p 144 – 156, Maio 2013.

IAEA. International Atomic Energy Agency. **Consultancy meeting on the use of thorium-based fuels**. Viena, 1990. Disponível em:< <https://www.iaea.org/>>. Acesso em: 11 out. 2018.

IAEA. International Atomic Energy Agency. **Thorium fuel utilization: Options and trends**, IAEA-TECDOC-1319, Viena, 2002.

IAEA. International Atomic Energy Agency. **Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors**, IAEA-TECDOC-1496, Viena, 2006.

IAEA. International Atomic Energy Agency. **Advanced Reactors Information System (ARIS) – Advanced passive PWR (AP1000)**, 2011. Disponível em: < <https://aris.iaea.org/pdf/ap1000.pdf>>. Acesso em: 23 abr. 2019.

IAEA. International Atomic Energy Agency. **Uranium 2016: Resources, Production and Demand**, NEA#7301, 2016.

IAEA. International Atomic Energy Agency. **Uranium 2018: Resources, Production and Demand**, NEA#7413, 2018.

KNIEF, R. A. **Nuclear Engineering: Theory and Technology of Commercial Nuclear Power**. 2ª ed. Washington: Hemisphere Publishing Corporation, 1992.

KOK, K. D. **Nuclear Engineering Handbook**. 2^a ed. New York: Taylor & Francis Group, LLC, 2009.

LAINETTI, P. E. O.; FREITAS, A. A.; MINDRISZ, A. C. Review of Brazilian Activities Related to the Thorium Fuel Cycle and Production of Thorium Compounds at IPEN-CNEN/SP. **Journal of Energy and Power Engineering**, v. 8, p. 1983 – 1990, Dezembro 2014.

LAMARSH, J. R. **Introduction to nuclear engineering**. 2^a ed. Massachusetts: Addison Wesley Publishing Company, 1983.

LAMARSH, J. R.; BARATTA, A. J. **Introduction to nuclear engineering**. 3^a ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, Inc., 2001.

GONZALEZ, L. C.; HERNANDEZ, C. G.; MAZAIRA, L. R.; LIRA, C. B. O. Metodología para el cálculo acoplado neutrónico-termohidráulico del reactor nuclear de agua ligera de alto desempeño. **Ingeniería Energética**, v. 37, p. 124 – 134, 2016.

LAU C. W.; NYLÉN H.; BJORK K. I.; SANDBERG U. Feasibility study of 1/3 thorium – plutonium mixed oxide core. **Science and Technology of Nuclear Installations**, v. 2014, p. 1 – 10, Março 2014.

MAIORINO, J. R.; SANTOS, A.; PEREIRA, S. A. The utilization of accelerators in subcritical systems for energy – R&D program. **Brazilian Journal of Physics**, v. 33, n. 2, p. 267–272, Junho 2003.

MAIORINO J. R.; STEFANI G. L.; MOREIRA J. M. L.; ROSSI P. C. R.; SANTOS T. A. Feasibility to convert an advanced PWR from UO₂ to a mixed U/ThO₂ core – Part I: Parametric studies. **Annals of Nuclear Energy**, v. 102, p. 47 – 55, Dezembro 2016.

MAIORINO J. R.; STEFANI G. L.; D'ÁURIA F. S. **Utilization of thorium in PWR reactors – first step toward a Th – U fuel cycles**. In: 26th International Conference Nuclear Energy for New Europe, Slovênia, Setembro 11 – 14, 2017.

MARTÍNEZ, L. A. **Simulación termohidráulica de un conjunto combustible del reactor nuclear AP1000**, Havana: Universidad de La Habana, 2018, 83p.

PERMANA S.; TAKAKI N.; SEKIMOTO H. Preliminary study on feasibility of large and small water-cooled thorium breeder reactor in equilibrium states. **Progress in Nuclear Energy**, v. 50, p. 320 – 324, Março – Agosto 2008.

SANTOS, T. A. **Desenvolvimento de um código mono canal para análise termo hidráulica de reatores PWR**, Santo André: UFABC, 2016, 96p.

SELIM, H. K.; AMIN, E. H.; ROUSHDY, H. E. Using thorium based fuel in AP1000: Steady state analysis. **Arab Journal of Nuclear Sciences and Applications**, v. 51, p. 9-21, Julho 2019.

STEFANI, G. L.; ROSSI, P. R. MAIORINO, J. R. **Neutronic and thermal-hydraulic calculations for the AP1000 npp with the MCNP6 and Serpent codes**. In: International Nuclear Atomic Conference, São Paulo, Outubro 4 – 9, 2015.

STEFANI, G. L. **Sobre a viabilidade de conversão de um reator avançado PWR com núcleo de UO₂ para (Th,U)O₂**, Santo André: UFABC, 2016, 275p.

TODREAS N. E.; KAZIMI M. S. **Nuclear systems I – Thermal hydraulic fundamentals**. 1ª ed. New York: Taylor & Francis Group, 1990.

TRELLUE H. R.; BATHKE C. G.; SADASIVAN P. Neutronics and material attractiveness for PWR thorium systems using monte Carlo techniques. **Progress in Nuclear Energy**, Los Alamos, v. 53, n. 6, p. 698-707, mai. 2011.

TSIGE – TAMIRAT H. Neutronics assessment to the use of thorium fuels in current pressurized water reactors. **Progress in Nuclear Energy**, v. 53, p. 717 – 721, Agosto 2011.

WANG J.; CAO X. Investigation on fluctuations in fuel – size molten salt reactor with coupled neutronic/thermal – hydraulic model. **Annals of Nuclear Energy**, v. 92, p. 262 – 276, Junho 2016.

WESTINGHOUSE ELETRIC COMPANY. **AP100 Pressurized Water Reactor**, 2016. Disponível em: <<http://www.westinghousenuclear.com/New-Plants/AP1000-PWR>>. Acesso em: 11 out. 2018.

WESTINGHOUSE ELETRIC COMPANY. **Westinghouse AP1000 Design Control Document Rev.19**, ML11171A500, 2011.

WILSON, W. B.; COWELL, S. T.; ENGLAND, T. R.; HAYES, A. C; MOLLER, P. A **manual for CINDER'90 version 07,4 codes and data**. Los Alamos National Laboratory document 07-8412. 1995.

WNA. World Nuclear Association. **Advanced Nuclear Power Reactors**. Outubro 2018. Disponível em: <<http://www.world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/nuclear-power-reactors/advanced-nuclear-power-reactors.aspx>>. Acesso em: 9 out. 2018.

WNA. World Nuclear Association. **Thorium**, Fevereiro, 2017. Disponível em: <<http://world-nuclear.org/information-library/current-and-future-generation/thorium.aspx>>. Acesso em: 04 out. 2018.

APÊNDICE A – TAXA DE DISSIPACÃO VISCOSA

$$\tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z}$$

Onde:

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + k \times \text{div } \mathbf{u}$$

Analogamente:

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + k \times \text{div } \mathbf{u}$$

$$\tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + k \times \text{div } \mathbf{u}$$

Os demais termos são dados da seguinte forma:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

Substituindo todos os termos tem-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} & \left[\left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + k \times \text{div } \mathbf{u} \right) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial u}{\partial z} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial v}{\partial x} \right] \\ & + \left[\left(2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + k \times \text{div } \mathbf{u} \right) \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial v}{\partial z} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial w}{\partial x} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial w}{\partial y} \right] \\ & + \left[\left(2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + k \times \text{div } \mathbf{u} \right) \frac{\partial w}{\partial z} \right] \end{aligned}$$

Expandindo cada termo:

$$2\mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + (\mathbf{k} \times \text{div } \mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z}$$

$$\mu \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2\mu \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + (\mathbf{k} \times \text{div } \mathbf{u}) \frac{\partial v}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z}$$

$$\mu \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + 2\mu \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + (\mathbf{k} \times \text{div } \mathbf{u}) \frac{\partial w}{\partial z}$$

Organizando os termos:

$$2\mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + 2\mu \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + 2\mu \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}$$

$$\mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}$$

$$\mu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}$$

$$\mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}$$

$$(\mathbf{k} \times \text{div } \mathbf{u}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

Logo:

$$\Phi = \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right\} + k(\nabla \cdot \mathbf{u})^2$$