



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIAS ENERGÉTICAS
E NUCLEARES

PEDRO EMANUEL MORAES SANTOS

**MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA BASEADA EM CFD PARA ESTUDO DE
REATORES DE PEQUENO PORTE DE ÁGUA PRESSURIZADA COM
COMBUSTÍVEIS MISTOS**

Recife

2022

PEDRO EMANUEL MORAES SANTOS

**MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA BASEADA EM CFD PARA ESTUDO DE
REATORES DE PEQUENO PORTE DE ÁGUA PRESSURIZADA COM
COMBUSTÍVEIS MISTOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Tecnologias Energéticas e Nucleares.

Área de concentração: Engenharia de Reatores.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira.

Coorientador: Dr. Leorlen Yunier Rojas Mazaira.

Recife

2022

Catálogo na fonte:
Bibliotecária Sandra Maria Neri Santiago, CRB-4 / 1267

S237m Santos, Pedro Emanuel Moraes.
Modelagem termohidráulica baseada em CFD para estudo de reatores de pequeno porte de água pressurizada com combustíveis mistos / Pedro Emanuel Moraes Santos. – 2022.
106 f.: il., figs., tabs., abrev. e siglas.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira.
Coorientador: Dr. Leorlen Yunier Rojas Mazaira.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.
Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares. Recife, 2022.
Inclui referências e apêndice.

1. Energia nuclear. 2. OpenFOAM. 3. SMR. 4. PWR. 5. Termohidráulica. I. Lira, Carlos Alberto Brayner de Oliveira (Orientador). II. Rojas Mazaira, Leorlen Yunier (Coorientador). III. Título.

UFPE

621.483 CDD (22. ed.) BCTG/2022-288

PEDRO EMANUEL MORAES SANTOS

**MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA BASEADA EM CFD PARA ESTUDO DE
REATORES DE PEQUENO PORTE DE ÁGUA PRESSURIZADA COM
COMBUSTÍVEIS MISTOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares da Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociências, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Tecnologias Energéticas e Nucleares. Área de concentração: Engenharia de Reatores.

Aprovada em: 15/03/2022.

BANCA EXAMINADORA

Dr. Daniel Gonzalez Rodriguez (Examinador Externo)
Comissão Nacional de Energia Nuclear

Prof. Dr. Mário Augusto Bezerra da Silva (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Jair de Lima Bezerra (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco

Dedico este trabalho à minha família

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente, a Deus, que me deu a força e a determinação para chegar aqui;

Agradeço aos meus pais, Pedro e Rivanda, pelo apoio e o amor incondicional, e pelos seus esforços e sacrifícios para que eu tivesse uma boa educação;

A minha irmã, Sarah, que sempre foi uma das pessoas que mais me incentivou a continuar;

A todos os meus familiares que sempre me deram suporte, me incentivaram e sonharam junto comigo;

A todos os amigos que fiz durante esta jornada de conhecimento, compartilhando alegrias, tristezas, frustrações e emoções;

Ao professor Carlos Brayner, pelo apoio, atenção, dedicação e paciência durante o decorrer deste trabalho;

A Leorlen, pelo apoio, atenção, dedicação e paciência durante o decorrer deste trabalho;

Aos membros da banca examinadora;

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação e contribuíram para que eu me tornasse a pessoa que sou hoje.

E agradeço a CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

A crescente demanda mundial por energia, junto com a preocupação com as mudanças climáticas levam ao aumento do interesse de utilização de fontes de energia mais limpas. Entre as fontes com baixas emissões de gás carbônico está a energia nuclear. No presente trabalho, foi realizado um estudo termohidráulico para um pequeno reator modular (SMR), do tipo reator de água pressurizada (PWR), a partir do desenvolvimento de um modelo tridimensional de um subcanal de um conjunto combustível do núcleo. Foram estudadas três configurações de núcleo cada uma com um combustível de óxido misto (MOX) e UO_2 , sendo os MOX estudados: $(\text{Th,U})\text{O}_2$, $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$. A análise termohidráulica foi feita baseada na fluidodinâmica computacional (CFD), para isso utilizou-se o OpenFOAM, um software livre e de código aberto. Para os materiais presentes no subcanal foram empregados modelos das propriedades dependentes da temperatura, nas barras de combustível foram definidas as maiores distribuições de densidade de potência, para se realizar a análise dos subcanais críticos. Foi calculado o fluxo de calor crítico (CHF) para todos os combustíveis com a correlação empírica W-3, com isso foi calculado o valor mínimo da razão da saída da ebulição nucleada (DNBR), os valores do DNBR obtidos variaram de 1,74 até 3,30 sempre acima do valor mínimo de 1,3 para os PWR. Para o combustível e seu revestimento os valores máximos de temperatura ficaram sempre abaixo do ponto de fusão.

Palavras-chave: OpenFOAM; SMR; PWR; termohidráulica.

ABSTRACT

The growing worldwide demand for energy, along with concerns about climate change, has led to increased interest in using cleaner energy sources. Among the sources with low carbon dioxide emissions is nuclear energy. In the present work, a thermal-hydraulic study for a small modular reactor (SMR) of the pressurized water reactor (PWR) type was carried out, starting with the development of a three-dimensional model of a subchannel of a fuel assembly of the core. Three core configurations each with a mixed oxide (MOX) and UO_2 fuel were studied, the MOX studied being: $(\text{Th,U})\text{O}_2$, $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ and $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$. The thermohydraulic analysis was done based on computational fluid dynamics (CFD), for which OpenFOAM, a free and open source software, was used. For the materials present in the subchannel, models of temperature-dependent properties were employed, in the fuel rods the largest power density distributions were defined, in order to perform the analysis of the critical subchannels. The critical heat flux (CHF) was calculated for all fuels with the empirical correlation W-3, with this the minimum value of the departure from nucleate boiling ratio (DNBR) was calculated, the DNBR values obtained ranged from 1.74 to 3.30 always above the minimum value of 1.3 for PWRs. For the fuel and its cladding the maximum temperature values were always below the melting point.

Keywords: OpenFOAM; SMR; PWR; Thermohydraulics.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Componentes do reator mPower.	29
Figura 2 –	Componente x da força, para um elemento fluido em movimento.	35
Figura 3 –	Componente x do fluxo de energia, para um elemento fluido em movimento.	37
Figura 4 –	Estrutura geral de um caso em OpenFOAM.	46
Figura 5 –	Algoritmo simplificado do <i>chtMultiRegionSimpleFoam</i> .	52
Figura 6 –	Esquema do núcleo e conjunto de combustível do reator	61
Figura 7 –	Características e dimensões das barras de combustível	62
Figura 8 –	Distribuição de combustível MOX no núcleo	62
Figura 9 –	Distribuição da densidade de potência para o UO_2 e $(\text{Th,U})\text{O}_2$ em núcleo com o MOX $(\text{Th,U})\text{O}_2$.	64
Figura 10 –	Distribuição da densidade de potência para o UO_2 e $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ em núcleo com o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$.	65
Figura 11 –	Distribuição da densidade de potência para o UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$ em núcleo com o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$.	66
Figura 12 –	Regimes de ebulição.	67
Figura 13 –	Geometria de um canal do reator mPower.	69
Figura 14 –	Malha utilizada para as simulações de um canal do reator mPower.	70
Figura 15 –	Gráfico do estudo de dependência das malhas.	71
Figura 16 –	Gráficos do DNBR ao longo da barra combustível de UO_2 para o MOX $(\text{Th,U})\text{O}_2$.	73
Figura 17 –	Gráficos do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de UO_2 para o MOX $(\text{Th,U})\text{O}_2$.	73
Figura 18 –	Gráficos do DNBR ao longo da barra combustível de $(\text{Th,U})\text{O}_2$.	74
Figura 19 –	Gráficos do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de $(\text{Th,U})\text{O}_2$.	74
Figura 20 –	Gráficos do DNBR ao longo da barra combustível de UO_2 para o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$.	75
Figura 21 –	Gráficos do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de UO_2 para o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$.	75
Figura 22 –	Gráficos do DNBR ao longo da barra combustível de $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$.	76
Figura 23 –	Gráficos do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra	76

	combustível de (Th,Pu)O ₂ .	
Figura 24 –	Gráficos do DNBR ao longo da barra combustível de UO ₂ para o MOX (Th,U,Pu)O ₂ .	77
Figura 25 –	Gráficos do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de UO ₂ para o MOX (Th,U,Pu)O ₂ .	77
Figura 26 –	Gráficos do DNBR ao longo da barra combustível de (Th,U,Pu)O ₂ .	78
Figura 27 –	Gráficos do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de (Th,U,Pu)O ₂ .	78
Figura 28 –	Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO ₂ em núcleo com o MOX (Th,U)O ₂	79
Figura 29 –	Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO ₂ e (Th,U)O ₂	80
Figura 30 –	Distribuição da temperatura radial para o UO ₂ em núcleo com o MOX (Th,U)O ₂	80
Figura 31 –	Distribuição da temperatura radial para o UO ₂ e (Th,U)O ₂	81
Figura 32 –	Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o UO ₂ em núcleo com o MOX (Th,U)O ₂ ,na fronteira com o revestimento	82
Figura 33 –	Distribuição da temperatura axial no centro da água para o UO ₂ em núcleo com o MOX (Th,U)O ₂	82
Figura 34 –	Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o MOX (Th,U)O ₂ ,na fronteira com o revestimento	83
Figura 35 –	Distribuição da temperatura axial no centro da água para o MOX (Th,U)O ₂	83
Figura 36 –	Distribuição da temperatura axial da água para o UO ₂ e (Th,U)O ₂	84
Figura 37 –	Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO ₂ em núcleo com o MOX (Th,Pu)O ₂	84
Figura 38 –	Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO ₂ e (Th,Pu)O ₂	85
Figura 39 –	Distribuição da temperatura radial para o UO ₂ em núcleo com o MOX (Th,Pu)O ₂	86
Figura 40 –	Distribuição da temperatura radial para o UO ₂ e (Th,Pu)O ₂	86
Figura 41 –	Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água	87

	para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$, na fronteira com o revestimento	
Figura 42 –	Distribuição da temperatura axial no centro da água para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$	87
Figura 43 –	Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$, na fronteira com o revestimento	88
Figura 44 –	Distribuição da temperatura axial no centro da água para o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$	88
Figura 45 –	Distribuição da temperatura axial da água para o UO_2 e $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$	89
Figura 46 –	Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	89
Figura 47 –	Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	90
Figura 48 –	Distribuição da temperatura radial para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	91
Figura 49 –	Distribuição da temperatura radial para o UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	91
Figura 50 –	Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$, na fronteira com o revestimento	92
Figura 51 –	Distribuição da temperatura axial no centro da água para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	92
Figura 52 –	Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$, na fronteira com o revestimento	93
Figura 53 –	Distribuição da temperatura axial no centro da água para o MOX $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	93
Figura 54 –	Distribuição da temperatura axial da água para o UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$	94

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Tipos de reatores nucleares	18
Tabela 2 –	Alguns SMR's atuais e seu projetista, país e status	26
Tabela 3 –	Principais parâmetros termohidráulicos do reator	28
Tabela 4 –	Composição em % de massa dos conjuntos de combustível MOX (Th,U)O ₂	62
Tabela 5 –	Composição em % de massa dos conjuntos de combustível MOX (Th,Pu)O ₂	63
Tabela 6 –	Composição em % de massa dos conjuntos de combustível MOX (Th,U,Pu)O ₂	63
Tabela 7 –	Tamanhos dos elementos da altura, máximo e mínimo do perfil para os domínios da malha	71
Tabela 8 –	Parâmetros de qualidade da malha	71
Tabela 9 –	Resultados valores mínimos do DNBR para os combustíveis	72
Tabela 10 –	Temperaturas máximas, em diferentes regiões, para todos os combustíveis estudados	94

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AGR	Advanced Gas Reactor
B&W	Babcock & Wilcox
BWR	Boiling Water Reactor
CAD	Computer-Aided Design
CANDU	Canada Deuterium Uranium
CHF	Critical Heat Flux
CFD	Computational Fluid Dynamics
CHT	Conjugated Heat Transfer
DNB	Departure from Nucleate Boiling
DNBR	Departure from Nucleate Boiling Ratio
EPR	European Pressurized Reactor
FOAM	Field Operation And Manipulation
GPL	General Public License
HTGR	High-Temperature Gas Reactor
IAEA	International Atomic Energy Agency
IPWR	integral Pressurized Water Reactor
LMFBR	Liquid Metal Fast Breeder Reactor
LOCA	Loss of Coolant Accident
MSR	Molten Salt reactor
MOX	Mixed Oxide
MWe	MegaWatt elétrico
OpenFOAM	Open-source Field Operation And Manipulation
PhD	Doctor of Philosophy
PHWR	Pressurized Heavy Water Reactor
PuO ₂	Dióxido de Plutônio
PWR	Pressurized Water Reactor
SCWR	Supercritical Water Reactor
SGHWR	Steam-Generating Heavy Water Reactor
SGI	Silicon Graphics International

SMR	Small Modular Reactor
ThO ₂	Dióxido de Tório
U-235	Urânio 235
U-238	Urânio 238
UO ₂	Dióxido de Urânio
VHTR	Very high temperature reactor

LISTA DE SÍMBOLOS

$\dot{q}$	Taxa de calor volumétrico
C_p	Calor específico
e	Energia interna
f	Força atuante no corpo
h	Entalpia
i	Vetor unitário no eixo x
j	Vetor unitário no eixo y
k	Vetor unitário no eixo z
K	Condutividade térmica
p	Pressão
$\vec{r}$	Fonte de calor específica
R_{ij}	Tensão de Reynolds
S_h	Termo de geração térmica
t	Tempo
T	Temperatura
u	Velocidade
ν_T	Viscosidade turbulenta
α	Difusividade Térmica
μ	Viscosidade
ρ	Densidade
τ	Tensão de Cisalhamento

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	18
1.1	OBJETIVO GERAL	20
1.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	20
2	REVISÃO DA LITERATURA	22
2.1	PEQUENOS REATORES MODULARES (SMR).....	23
2.1.1	Projetos de SMR	25
2.1.2	Integral Pressurized Water Reactors (IPWR)	26
2.2	O REATOR MPOWER.....	27
2.3	MISTURA DE COMBUSTÍVEL	29
2.4	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)	31
2.4.1	Equações Governantes	32
2.4.1.1	Equação da Continuidade	32
2.4.1.2	Equação do Momento	33
2.4.1.3	Equação da Energia.....	36
2.4.2	Modelos de Turbulência	39
2.4.2.1	Modelo $k - \varepsilon$ Padrão.....	40
2.4.3	OpenFOAM	41
2.5	SIMULAÇÃO TERMOHIDRÁULICA DE REATORES NUCLEARES	42
3	MATERIAIS E MÉTODOS.....	46
3.1	ESTRUTURA DOS CASOS NO OPENFOAM.....	46
3.1.1	Constant	47
3.1.2	System	47
3.1.3	Pasta do Tempo	47
3.2	GEOMETRIA	47
3.3	MALHA	48
3.3.1	Ansys Meshing.....	48
3.4	MODELOS TERMOFÍSICOS	49
3.5	CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	49
3.6	OPENFOAM EM PARALELO	51
3.7	SOLVER	51
3.7.1	<i>chtMultiRegionSimpleFoam</i>	52

3.7.1.1	Equações Governantes Região Do Fluido	52
3.7.1.2	Equação Governante Região Do Sólido	53
3.8	PARAVIEW	53
3.9	PARÂMETROS E PROPRIEDADES DO REATOR	54
3.9.1	Propriedades do UO₂ sólido.....	54
3.9.1.1	Ponto de Fusão.....	54
3.9.1.2	Densidade.....	54
3.9.1.3	Entalpia e Calor Específico	55
3.9.1.4	Condutividade Térmica	56
3.9.2	Propriedades do (Th,U)O₂	56
3.9.2.1	Densidade	56
3.9.2.2	Calor Específico	56
3.9.2.3	Condutividade Térmica	57
3.9.2.4	Ponto de Fusão.....	57
3.9.3	Propriedades do (Th, Pu)O₂	57
3.9.3.1	Condutividade Térmica	57
3.9.3.2	Calor Específico	58
3.9.3.3	Densidade.....	58
3.9.3.4	Ponto de Fusão.....	58
3.9.4	Propriedades do (Th,U,Pu)O₂	59
3.9.4.1	Condutividade Térmica	59
3.9.4.2	Calor Específico	59
3.9.4.3	Densidade.....	59
3.9.4.4	Ponto de Fusão.....	59
3.9.5	Propriedades Zircaloy-4	60
3.9.5.1	Calor Especifico	60
3.9.5.2	Condutividade Térmica	60
3.9.5.3	Densidade.....	61
3.9.6	Propriedades do Hélio	61
3.10	DISTRIBUIÇÃO DE DENSIDADE DE POTÊNCIA	61
3.11	PARTIDA DA EBULIÇÃO NUCLEADA (DNB).....	67
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	69
4.1	GEOMETRIA E MALHA	69
4.2	CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	71

4.3	RESULTADOS DNBR.....	72
4.4	ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA DO SUBCANAL COM CFD	78
4.4.1	Configuração do Núcleo com (Th,U)O ₂	79
4.4.2	Configuração do Núcleo com (Th,Pu)O ₂	84
4.4.3	Configuração do Núcleo com (Th,U,Pu)O ₂	89
5	CONCLUSÃO	96
	REFERÊNCIAS.....	98
	APÊNDICE A – CÓDIGO PYTHON DNBR	104

1 INTRODUÇÃO

Energia e disponibilidade energética são questões de importância para o futuro. A sempre crescente necessidade de fornecimento de energia de forma econômica e ecologicamente viável em um longo prazo (IAEA, 2018), representa um grande desafio para os pesquisadores. A energia nuclear fornece atualmente cerca de 10% da eletricidade do mundo, sendo a segunda maior fonte de energia com baixo teor de carbono, atrás apenas das fontes hídricas (WNA, 2020). Por mais de setenta anos a energia nuclear tem alimentado de maneira eficiente e limpa vários países ao redor do mundo. Atualmente existem cerca de 440 reatores operacionais com mais 50 em construção, com os reatores em construção representando o equivalente a cerca de 15% da capacidade existente (WNA, 2020). No Brasil, atualmente, se opera dois reatores que combinados forneceram uma capacidade de 1,9 GWe, em 2019. A energia gerada pelos reatores nucleares do Brasil, em 2019, foram responsáveis por cerca de 3% da eletricidade do país (WNA, 2020). Os dois reatores em operação no Brasil são Angra 1 e Angra 2, ambas do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor*, Reator refrigerado a água pressurizada) sendo o tipo mais utilizado no mundo. Existem diversos tipos de reatores nucleares no mundo, na Tabela 1 são mostrados alguns tipos de reatores nucleares.

Tabela 1– Tipos de reatores nucleares.

Tipo	Combustível	Moderador	Refrigerante
PWR (Reator refrigerado a água pressurizada)	UO ₂	H ₂ O	H ₂ O Pressurizada
BWR (Reator refrigerado a água fervente)	UO ₂	H ₂ O	H ₂ O Fervente
AGR (Reator avançado refrigerado a gás)	UO ₂	Grafite	CO ₂
HTGR (Reator refrigerado a gás de temperatura muito alta)	ThC ₂ + UC ₂	Grafite	He
PHWR (Reator refrigerado a água pesada pressurizada)	UO ₂	D ₂ O	D ₂ O
SGHWR (Reator gerador de vapor moderado a água pesada)	UO ₂	D ₂ O	H ₂ O Fervente
MSR (Reator de sal fundido)	UO ₂	Grafite	Sal Fundido
VHTR (Reator de temperatura muito alta)	UO ₂	Grafite	He

Fonte: Kerlin e Upadhyaya (2019).

A maioria dos reatores atualmente em operação são de geração II, para as próximas décadas, espera-se a implementação dos reatores de geração III, III+ e IV os quais se encontram na fase de desenvolvimento. A maioria destes reatores abrange o projeto e construção de centrais nucleares do tipo PWR (WNA, 2020).

O investimento em energia nuclear está paralisado em muitos países atualmente. Além da percepção pública sobre a energia nuclear, uma causa profunda para a sua rejeição é seu elevado custo inicial. Um avanço nessa questão está no desenvolvimento dos chamados pequenos reatores modulares (SMR). Os SMR's são bem mais compactos quando comparados aos reatores convencionais, além de possuírem aplicações mais diversificadas. Os SMR's tem projetos visando uma maior segurança e eficiência (INGERSOLL, 2009). Com projeto simplificado e inovador, os pequenos reatores têm o potencial de reduzir custos de investimento e riscos (BOARIN; RICOTTI, 2014). Além da viabilidade econômica, a maioria dos pequenos reatores modulares modernos são projetados com um elevado nível de segurança passiva para o caso de mau funcionamento, atraindo ainda mais a atenção da indústria em todo o mundo. Os projetos atuais de SMR em construção ou em consideração incluem reatores refrigerados a água, reatores refrigerados a gás de temperatura muito alta, bem como reatores resfriados com metal líquido (CARELLI; INGERSOLL, 2015).

Alguns dos SMR's são do tipo IPWR (*integral pressurized water reactor*, reator de água pressurizada integral). A água leve é utilizada como refrigerante no ciclo primário do reator. O reator inclui o núcleo do reator, geradores de vapor, pressurizador e linhas de suprimento de resfriamento. Todos estes componentes estão dentro de um grande vaso de pressão do reator. O ciclo de resfriamento de um IPWR é alimentado tanto por uma bomba dentro do vaso de pressão do reator ou por circulação natural (ZELIANG et al., 2020).

O combustível nuclear é o elemento mais importante das usinas nucleares sendo a substância onde se produz a fissão nuclear e se gera o calor. Durante a operação de reatores nucleares se obtêm o chamado rejeito nuclear que é composto pelos produtos de fissão do combustível. Um dos produtos de fissão encontrados normalmente em reatores que utilizam dióxido de urânio como combustível é o plutônio. O gerenciamento desses rejeitos nucleares, devido sua radioatividade e possibilidade de utilização para fins militares, é um grande desafio enfrentado pelos

países que operam reatores nucleares, sendo uma das opções para o gerenciamento o reprocessamento do combustível (JOYCE, 2018). De modo que se tem a alternativa de utilizar os produtos de fissão como combustíveis de óxidos mistos (MOX), alguns desses combustíveis com potencial de utilização para operação de reatores são os MOX de plutônio-urânio, tório-urânio e tório-plutônio. O uso dos MOX apresentam vantagens em comparação com o UO_2 tais como a redução da geração de rejeitos, além de estender a queima (*burnup*) do combustível no reator (CHEN et al., 2018).

A fluidodinâmica computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD) como ferramenta para análises termohidráulicas de reatores nucleares é amplamente reconhecida por estudiosos do mundo, para simulação dos aspectos termohidráulicos de forma econômica e, o que é importante, sem risco para a segurança (WANG et al., 2021). Com o aumento do uso do CFD na indústria nuclear, os novos projetos de reatores inovadores como os SMR's deverão fazer uso crescente de modelagens computacionais de processos termohidráulicos. Contudo, neste trabalho se utilizará o software de fluidodinâmica computacional, de código aberto, OpenFOAM, para a simulação dos aspectos termohidráulicos, de um SMR, com utilização de combustíveis MOX.

1.1 OBJETIVO GERAL

Desenvolver um modelo computacional que permita o cálculo dos parâmetros termohidráulicos do núcleo de um reator SMR IPWR com misturas de óxidos de Tório, Urânio e Plutônio, baseado em CFD.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Construir a geometria e malha de um elemento combustível do modelo de SMR IPWR, baseado no reator mPower.
- Definir as misturas de óxidos de Tório e Plutônio e as propriedades termofísicas que vão ser usadas no cálculo das misturas de óxidos de: Tório e Plutônio; Tório e Urânio; Tório, Urânio e Plutônio.

- Definir adequadamente as condições de fronteira, modelos e propriedades dos componentes do cálculo.
- Simular com OpenFOAM o núcleo do reator com combustíveis com misturas de óxidos, considerando diferentes proporções de combustível.
- Avaliar no comportamento termohidráulico a influência dessas misturas, e comparar os diferentes casos estudados.

2 REVISÃO DA LITERATURA

A mudança climática é um problema que não pode ser ignorado, desse modo para mitigar esse problema devem ser tomadas medidas. A atividade humana, por meio das emissões de gases de efeito estufa para a atmosfera, é altamente influente na mudança climática (MEDHAUG et al., 2017). O setor de energia é uma parte considerável das emissões de gases do efeito estufa, devido a produção de eletricidade em usinas elétricas movidas a combustíveis fósseis, que em seu processo de combustão vão produzir gases de efeito estufa (KNAPP; PEVEC, 2018). A energia nuclear apresenta o benefício de produzir menos emissões do que as fontes de energia convencionais, como os combustíveis fósseis (LOUDER, 2011).

É preciso diminuir o uso de combustíveis fósseis em larga escala nas próximas décadas, para isso com o mínimo de emissão de gases de efeito estufa, de maneira econômica, com energia limpa, de maneira sustentável e confiável tem-se as usinas nucleares como uma opção para atenuar a questão do clima, de modo que uma sociedade industrial funcione (BROOK et al., 2014). Desse modo, a energia nuclear seria parte importante para a redução das emissões de gases de efeito estufa e no problema da mudança climática, de modo a garantir uma não escalada no aquecimento global (KNAPP et al., 2010).

Por outro lado, existem os altíssimos custos que estão associados a construção da indústria nuclear. O custo de uma usina nuclear pode-se dividir em quatro categorias sendo elas os custos de construção, os custos de descomissionamento de uma usina, os custos de combustível e os custos de operação e manutenção, relacionados à administração e manutenção das usinas (KESSIDES, 2009). Outro grande problema são os elevados tempos de construção de uma usina nuclear, com o tempo médio de construção de usinas entre 1965 e 1970 sendo de sessenta meses passando para 116 meses entre 1995 e 2000, esses atrasos na construção acabam levando a um aumento do custo das usinas (KESSIDES, 2009).

2.1 PEQUENOS REATORES MODULARES (SMR)

Os reatores pequenos modulares (Small Modular Reactors, SMR's), recebem o termo pequeno em referência a potência do reator. A IAEA (International Atomic Energy Agency) define esses reatores como projetados para gerar energia elétrica até 300 MWe (IAEA., 2020). O termo "modular" é derivado do fato de que pequenos reatores podem ser fabricados completamente em uma indústria e entregues no local para instalação. A ideia é de se instalar unidades de acordo com a necessidade do local podendo se realizar expansões a medida em que ocorra um aumento na demanda de energia. A razão para a concepção e implementação de SMR's mantém-se igual à das grandes centrais nucleares, como redução das emissões de gás carbônico, de modo economicamente viável com a adição de benefícios adicionais propostos, incluindo projetos de novas centrais mais seguras e que requerem menos investimento (PEDRAZA, 2017).

As vantagens dos SMR's classificam-se em quatro agrupamentos:

- Fabricação e construção
- Segurança das instalações
- Flexibilidade operacional
- Economia

Fabricação e construção: Assim como a potência dos SMR's os seus componentes também são menores, atualmente são necessárias peças de grandes forjas que podem ser fornecidas apenas por poucos vendedores, a possibilidade de utilização de métodos convencionais de fabricação leva a uma simplificação de sua fabricação. Outro desafio que se relaciona ao uso de um grande reator é a limitação dos sistemas de transporte. O tamanho do vaso do reator leva a grandes restrições quanto a localização da usina, tendo que ser instalada próxima ao mar ou grandes rios. Por outro lado, os SMR's podem ser transportados por um navio, balsa, trem ou mesmo caminhão e serem instalados em áreas do interior ou mesmo em locais remotos. Por exigirem uma grande quantidade de trabalho no local de construção os grandes reatores podem levar a diversos atrasos no cronograma, aumentando o custo. Esse risco é mitigado com os SMR's pois uma fração maior da usina pode ser construída em fábricas e entregues no local de construção. Por serem construídos

em um ambiente de fábrica, aumenta a segurança e confiabilidade pelo uso do controle de qualidade de um ambiente industrial (INGERSOLL, 2009).

Segurança das instalações: Segurança é algo fundamental para qualquer usina nuclear, independentemente do tamanho, elas devem atender a critérios de segurança para sua operação. Os SMR's oferecem características de segurança, sejam ativas ou passivas, que não são aplicadas em reatores maiores. Por possuírem uma menor capacidade de potência os SMR's também têm menos combustível no seu interior. Assim, em caso de acidente com emissão de produtos de fissão e gases radioativos, menos produtos danosos a saúde e ao meio ambiente serão lançados na atmosfera. Grandes reatores utilizam tubulações para a circulação do líquido refrigerante do núcleo do reator para o gerador de vapor, caso ocorra o rompimento dessas tubulações pode levar a graves acidentes. Para isso os SMR's buscam eliminar essas tubulações de modo a garantir a circulação do líquido refrigerante passivamente, pois com os trocadores de calor posicionados acima do núcleo se aumenta a altura do sistema facilitando a circulação natural do líquido refrigerante (INGERSOLL, 2009).

Flexibilidade operacional: Por necessitar de uma menor zona de planejamento de emergência e de uma área de construção menor o local de instalação pode ser mais próximo de zonas residenciais ou industriais, de modo que as perdas durante a transmissão sejam menores. As plantas menores também conseguem se adequar melhor as demandas de diferentes regiões. A facilidade de integração a rede elétrica é aumentada, pois necessita de menos obras para a sua ligação devido a sua menor geração elétrica. A necessidade de água para a remoção do calor desperdiçado é menor devido a menor geração, com isso a necessidade de grandes corpos de água é mitigada de modo que beneficia a seleção do local de instalação. Com isso, usinas menores favorecem uma maior adequação de um aumento da capacidade com o aumento da demanda (INGERSOLL, 2009).

Economia: O custo total de uma usina nuclear grande é bastante elevado, esse custo elevado acaba por impedir países menores de iniciarem o uso de energia nuclear em seus territórios bem como para companhias privadas. A economia de escala proporciona um interesse maior pelas grandes usinas nucleares, porém no estudo Boarin e Ricotti (2014) mostra que a economia de escala pode ser mitigada devido outros fatores como múltiplas unidades no mesmo local, o aprendizado do processo de construção, junto com a modularização e custo reduzido de cada

unidade de SMR instalada. Junto a isso se tem o reduzido risco de investimento pela possibilidade de se instalar reatores pequenos individualmente, de modo que quando o primeiro esteja operando e gerando receita se inicia a construção do próximo assim sucessivamente, diminuindo o custo inicial de construção.

2.1.1 Projetos de SMR

Existem diversos projetos de SMR's em diferentes fases de desenvolvimento, aqui um resumo sobre alguns projetos de SMR's e suas características, reportados por IAEA., 2020.

Os SMR's refrigerados a água têm diversos projetos, entre reatores de água leve e reatores de água pesada. Existem vinte e cinco projetos de reatores refrigerados a água, de diferentes países, entre reatores de água fervente e reatores de água pressurizada (IAEA., 2020).

Existem seis projetos para utilização em vias marítimas refrigerados a água, esses reatores são desenvolvidos para operação em navios ou em unidades subaquáticas (IAEA., 2020).

Reatores refrigerados a gás de temperatura muito alta produzem elevadas temperaturas e podem ser utilizados para produção de energia, diversas aplicações industriais ou cogeração. Existem quatorze desses reatores, sendo três deles reatores de testes (IAEA., 2020). Existem onze projetos de reatores de nêutrons rápidos com diversos tipos de refrigerantes como sódio, gás e metais líquidos (IAEA., 2020).

Os reatores de sal fundido contam com dez projetos, a utilização dos sais eliminam a necessidade de grandes contenções e as altas temperaturas que resultam em alta eficiência são algumas das várias vantagens prometidas por esses reatores (IAEA., 2020). Abaixo na Tabela são listados alguns dos projetos de SMR's com suas respectivas potências, projetistas, país e status de desenvolvimento:

Tabela 2– Alguns SMR's atuais e seu projetista, país e status.

Reator	Potência (MWe)	Projetista	País	Status
NuScale	12*60	NuScale Power Inc.	Estados Unidos	Em revisão regulatória
SMR-160	160	Holtech International	Estados Unidos	Projeto preliminar
ACP100	100	CNNC	China	Projeto detalhado
SMART	107	KAERI e K.A. CARE	Coreia do Sul e Arábia Saudita	Projeto certificado
Nuward	2*170	consorcio	França	Projeto conceitual
RITM-200	2*53	JSC Afrikantov OKBM	Rússia	Em desenvolvimento
CAREM	30	CNEA	Argentina	Em construção
Westinghouse SMR	225	Westinghouse	Estados Unidos	Projeto conceitual
VK-300	250	NIKIET	Rússia	Projeto detalhado
BWR-X300	270-290	GE-Hitachi	Estados Unidos e Japão	Pré-licenciamento
GTHTR300	100-300	JAEA	Japão	Pré-licenciamento
HTR-PM	210	INET, Universidade Tsinghua	China	Em construção
4S	10	Toshiba	Japão	Projeto detalhado
BREST-OD-300	300	NIKIET	Rússia	Projeto detalhado
SVBR	100	JSC AKME	Rússia	Projeto detalhado
Integral MSR	195	Terrestrial Energy Inc.	Canadá	Projeto conceitual

Fonte: IAEA (2020).

2.1.2 Integral Pressurized Water Reactors (IPWR)

Recentemente, a tendência no desenvolvimento da tecnologia SMR é para SMR's do tipo reator integral de água pressurizada (Integral pressurized water reactor, IPWR), pois como a maioria da experiência operacional e conhecimento técnico adquirido ao longo dos anos são em reatores refrigerados a água, e com a experiência de fabricantes que tiveram projetos inicialmente selecionados para financiamento. Soma-se a isso o foco dos IPWR na segurança do projeto, buscando a eliminação ou redução de iniciadores de acidentes por meio do uso de sistemas de

segurança passivos, confiáveis e simples acaba por tornar os IPWR atrativos para o desenvolvimento. Com a integração de seus principais componentes dentro do vaso do reator, tais como gerador de vapor, pressurizador e mecanismos de acionamento das hastes de controle, esse sistema integrado de refrigeração do reator é uma característica que distingue os projetos dos SMR's IPWR dos grandes reatores. Os sistemas passivos de segurança se utilizam de princípios físicos, como a convecção natural para movimentação do líquido refrigerante no vaso do reator, esses sistemas são uma tendência para se conseguir a segurança necessária em casos de operação normal e para cenários de acidentes. Com isso, pode-se dispensar a dependência de uma fonte de energia externa e se evita a necessidade de atuação de operadores externos. Assim acidentes devidos a falhas de componentes e erros humanos são minimizados consideravelmente (CARELLI; INGERSOLL, 2015; ZELIANG et al., 2020).

2.2 O REATOR MPOWER

Neste trabalho é utilizado um modelo de reator SMR IPWR com parâmetros operacionais similares aos do mPower, que apesar de ter sido descontinuado conta com diversos dados de operação publicamente disponíveis sendo um ótimo modelo para se tomar como base de estudo nos IPWR's.

A Babcock & Wilcox (B&W) anunciou seu projeto para um SMR em 2009, posteriormente se juntou a Bechtel Power Corporation para o projeto do mPower, formando a Generation mPower (CARELLI; INGERSOLL, 2015). O projeto consiste de um sistema integral, refrigerado a água para gerar 180MWe em seus módulos. O núcleo do reator consiste de 69 conjuntos de combustíveis de 17 x 17 elementos de combustível, sendo o comprimento do combustível ativo de 2.4 m, o combustível utilizado no núcleo é o dióxido de urânio (UO₂) com um enriquecimento de menos de 5% de U-235, com ciclo de combustível de 48 meses (IAEA., 2020).

Os principais parâmetros termohidráulicos de operação para o reator IPWR baseado no mPower tem seus valores apresentados na Tabela 3, esses valores servem de referência para uma operação segura do reator

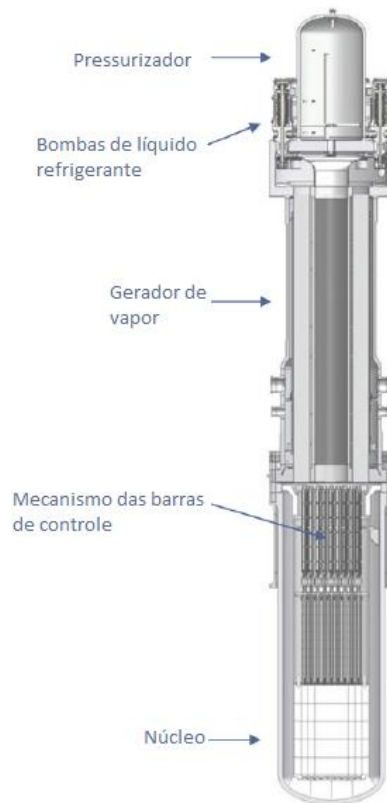
Tabela 3– Principais parâmetros termohidráulicos do reator.

Parâmetro	Valor
Potência térmica	530 MW
Pressão	14.8 MPa
Temperatura de entrada	290 °C
Temperatura de saída	318.8 °C
Fluxo mássico	3345 kg/s

Fonte: NRC (2020).

O projeto do mPower consiste em estrutura integral dentro do vaso de pressão do reator que contém o núcleo do reator, o gerador de vapor, as bombas de refrigeração, o pressurizador e as barras de controle (IAEA., 2020) como mostrado na Figura 1. O mPower não utiliza boro solúvel no refrigerante, diminuindo as chances de inadvertidamente inserir reatividade no reator pela diluição do boro, sendo o controle de reatividade realizado pelas barras de controle de Ag In-Cd (CARELLI; INGERSOLL, 2015; IAEA., 2020). O sistema primário de refrigeração do reator é feito por circulação forçada por meio de oito bombas, associado com uma baixa taxa linear de calor, reduzindo a temperatura do revestimento e do combustível durante eventos de acidentes. Como conta com um grande volume de água no seu sistema de refrigeração primário se obtém mais tempo para respostas a acidentes, e se tem mais refrigerante para o caso de um acidente de perda de refrigerante (loss-of-coolant accident, LOCA) (IAEA., 2020; INGERSOLL, 2009). O reator mPower é projetado para trabalhar com a temperatura do *bulk* do seu fluido refrigerante, no centro do subcanal, abaixo da temperatura de saturação, de modo que não ocorra ebulição no núcleo (ERIGHIN, 2012).

Figura 1—Componentes do reator mPower.



Fonte: Adaptado de Halfinger e Haggerty (2012).

Na análise de um reator nuclear se busca a operação dentro das margens de segurança do reator, isso pode ser feito através de um estudo termohidráulico do reator, com o auxílio de códigos computacionais, para saber se os limites operacionais sob diferentes condições são respeitados (YEOH, 2019). Para a análise de reatores nucleares é largamente utilizada a fluidodinâmica computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD) que será a ferramenta utilizada neste trabalho por meio do programa OpenFOAM, que serão comentados mais à frente.

2.3 MISTURA DE COMBUSTÍVEL

Apesar de não serem reabastecidos com uma frequência muito elevada os reatores nucleares utilizados para geração de energia, o combustível terá de ser trocado eventualmente mesmo que ainda contenha quantidades significativas de urânio e plutônio não utilizados, pois em determinado momento a quantidade de U-235 chega a um nível em que compromete a viabilidade econômica da produção de energia. No momento da troca do combustível existem duas opções para a

destinação do combustível retirado, serem armazenados em containers indefinidamente ou pode ser reprocessado para que o conteúdo físsil ainda presente no combustível possa ser reciclado para que seja novamente utilizado em um reator. A primeira opção é conhecida como ciclo de combustível nuclear aberto, onde o combustível nuclear é utilizado apenas uma vez, já a segunda é chamada de ciclo fechado onde o conteúdo físsil que não foi utilizado no reator e o produto da fissão do combustível, urânio e plutônio respectivamente, são reutilizados no processo de geração de energia (JOYCE, 2018).

Em reatores de água leve o MOX (*Mixed Oxide*) que é a mistura de óxidos utilizados como combustível, normalmente é utilizado como cerca de 30% do combustível, para isso são necessárias adaptações mínimas no reator geralmente apenas uma alteração na disposição das barras de controle sendo suficiente (JOYCE, 2018). No processo de reprocessamento o MOX é produzido a partir do plutônio, que é separado do urânio restante do combustível utilizado e adicionado a urânio empobrecido formando o MOX com a mistura $\text{UO}_2 + \text{PuO}_2$. O combustível MOX típico contém cerca de 5-9% de plutônio, o que corresponde a um enriquecimento de urânio de 3-5%, essa diferença é explicada pelo fato de nem todos os isótopos do plutônio serem físséis (CARBAJO et al., 2001).

A utilização de combustíveis MOX leva a uma redução do volume de combustível queimado de modo que pode levar a uma diminuição das reservas existentes de plutônio com o intuito de gerar eletricidade. O combustível MOX com plutônio pode ser produzido a partir de plutônio de grau militar, o objetivo com isto é converter o plutônio de grau militar em plutônio de grau de reator e assim reduzir a quantidade de material físsil adequado para uso em armas. Esses fatores acabam contribuindo para o crescente interesse em combustíveis MOX. Recentemente, o MOX de $\text{ThO}_2 + \text{UO}_2$ e o MOX de $\text{ThO}_2 + \text{PuO}_2$, tornaram-se disponíveis para aplicação como combustíveis nucleares (CHEN et al., 2018). O uso de tório como combustível para reatores nucleares é justificado pelo fato de que o tório é de 3 a 4 vezes mais abundante que o urânio no planeta (SCHAFER, 2013), e os reatores de tório podem ser configurados para minimizar a questão do armazenamento de resíduos, já que o plutônio não é produzido pelo tório, e a rota dos combustíveis com base no tório consomem o dobro do plutônio em relação a um combustível MOX de $\text{UO}_2 + \text{PuO}_2$ (IAEA., 2005). Assim, os reatores de tório são menos propícios à proliferação de materiais de grau militar, enquanto mantém as características

aceitáveis de segurança e controle do sistema de reatores (IAEA, 2003; KIM; DOWNAR, 2002).

2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

A fluidodinâmica computacional, também conhecida como CFD é uma técnica multifuncional não apenas utilizada para sistemas nucleares, mas para análise de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e outros fenômenos importantes, tais como reações químicas, por meio de simulação numérica em computadores. Algumas áreas de aplicação são aerodinâmica, hidrodinâmica, meteorologia, processos de engenharia química e medicina com o fluxo do sangue pelas veias e artérias (DEMAZIÈRE, 2020; SHAW, 1992; ZAWAWI et al., 2018).

Pode-se definir que um problema em CFD é resolvido em três etapas (SHAW, 1992; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- Pré-processamento, é a etapa onde se insere no programa os dados relacionados ao problema. É onde se define o domínio computacional, que é a geometria pela qual se tem interesse. Se gera a malha, que é a divisão da geometria dividida em vários volumes de controle. Vai se definir o modelo matemático que se utilizará para resolver o fenômeno de interesse, se insere as propriedades dos fluidos e as condições de contorno adequadas.
- Processamento, é a etapa onde é feita a solução numérica. Após as definições realizadas no pré-processamento as informações são carregadas no solver, então vai ocorrer a integração das equações governantes por todos os volumes de controle gerados anteriormente. Discretização das equações, as equações diferenciais resultantes são transformadas em equações algébricas. E por método iterativo as equações algébricas obtidas pela discretização são resolvidas para cada volume de controle.
- Pós-processamento, é a etapa de visualização e análise dos resultados. A visualização de diferentes variáveis pode ser realizada a partir de gráficos, superfícies bidimensionais e tridimensionais da

geometria e da malha, com utilização de escala de cores para facilitar a análise dos resultados, e animações.

O CFD tem o potencial para simular fluxos e transferência de calor em reatores nucleares, sendo importante para a melhoria de sistemas de segurança e análises termohidráulicas. O aumento das capacidades de processamento computacional para que os cálculos sejam realizados torna o CFD mais convidativo, sendo possível prever o fluxo de fluidos e características de transferência de calor para se ter um maior entendimento dos mecanismos termohidráulicos do sistema, para se estudar a segurança dos reatores nucleares, os cálculos normalmente são restringidos a partes menores do sistema nuclear, pois para se expandir o domínio computacional é necessário ter os recursos computacionais necessários e o tempo de espera para obtenção dos resultados das simulações (DEMAZIÈRE, 2020; WANG et al., 2021).

2.4.1 Equações Governantes

A base para a fluidodinâmica computacional são as equações governantes da dinâmica dos fluidos que se baseiam na conservação de massa, conservação de energia e na segunda lei de Newton (ANDERSON, 2009). Nesta seção se comenta as equações governantes da fluidodinâmica computacional.

2.4.1.1 Equação da Continuidade

A equação da continuidade, também conhecida como equação do balanço de massa, que é baseada no princípio de que massa não pode ser criada ou destruída, desse modo se conserva (ANDERSON, 2009). A conservação de massa afirma que a taxa de acumulação de massa em um volume V é exatamente equilibrada pelo fluxo de massa através de seu limite S ; com isso se expressa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_S \rho u dS = 0 \quad (1)$$

Onde ρ é a densidade, u a velocidade e t é o tempo. A equação (1) é a forma integral da equação da continuidade. Passando a derivada do tempo para dentro da expressão temos:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_S \rho u dS = 0 \quad (2)$$

Aplicando o teorema da divergência à integral da superfície pode ser expressa como uma integral de volume:

$$\int_S \rho u dS = \int_V \nabla \cdot (\rho u) dV \quad (3)$$

Substituindo (3) em (2):

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (\rho u) dV = 0 \quad (4)$$

ou

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) \right] dV = 0 \quad (5)$$

como V é arbitrário e a única forma de a integral da equação (5) ser zero é o integrando sendo zero em todos os pontos do volume, com isso temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (6)$$

Que é a equação da continuidade em sua forma conservativa.

2.4.1.2 Equação do Momento

A equação do momento diz que a soma das forças atuantes sobre um corpo é igual a taxa de mudança no seu momento, essas forças atuantes podem ser divididas nas forças do corpo (f), atuantes dentro do corpo, e as forças de

superfície, atuantes na superfície do corpo (ANDERSON, 2009). Tomando a segunda lei de Newton:

$$\vec{F} = m\vec{a} \quad (7)$$

Que quando aplicada a um fluido em movimento diz que a força no elemento fluido é igual a sua massa multiplicada pela aceleração do elemento, podendo ser dividida em três direções nos eixos x, y e z . Considerando o eixo x podemos reescrever a equação (7) como:

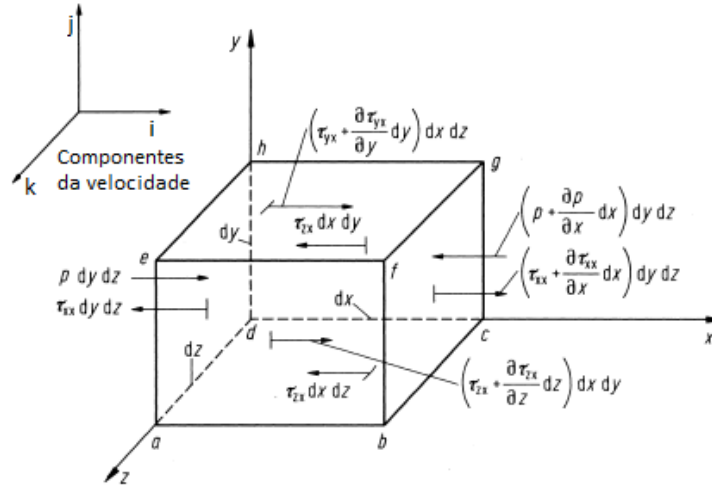
$$F_x = ma_x \quad (8)$$

Onde F_x e a_x são os componentes no eixo x da força e da aceleração. Sobre o elemento fluido atuam forças no corpo e de superfície, chamando de $\vec{f}$ as forças do corpo por unidade de massa atuantes sobre o fluido, sendo f_x sua componente em x . Com o volume do elemento fluido sendo $(dx \, dy \, dz)$, temos que:

$$\begin{aligned} &\text{Forças do corpo atuantes sobre o elemento fluido no eixo } x \\ &= \\ &\rho f_x (dx \, dy \, dz) \end{aligned} \quad (9)$$

As tensões normais e de cisalhamento em um fluido estão relacionados com a taxa de variação temporal da deformação do elemento fluido. A tensão de cisalhamento (τ_{xy}), está relacionada com a taxa de variação temporal da deformação de cisalhamento do elemento fluido, enquanto a tensão normal (τ_{xx}), está relacionada com a taxa de variação temporal do volume do elemento fluido. Com isso as tensões normal e de cisalhamento dependem do gradiente de velocidade do fluxo. Na **Figura 2** são mostradas as forças no componente x para o elemento fluido em movimento em questão.

Figura 2– Componente x da força, para um elemento fluido em movimento.



Fonte: Adaptado de Anderson (2009).

A partir das forças atuantes sobre a superfície de um elemento fluido pode-se escrever que:

Forças atuantes na superfície atuantes sobre o elemento fluido no eixo $x =$

$$\left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dydz + \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dydz + \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy \quad (10)$$

Então a força total na direção x (F_x) é dado pela soma das equações (9) e (10), obtendo:

$$F_x = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz + \rho f_x dx dy dz \quad (11)$$

Agora considerando o lado direito da equação (8). Como a massa do elemento fluido é dada por

$$m = \rho dx dy dz \quad (12)$$

E como a aceleração no componente x (a_x) é a taxa de mudança no tempo de i temos que:

$$a_x = \frac{Di}{Dt} \quad (13)$$

Combinando as equações (8), (11), (12) e (13) obtemos para a componente x e similarmente para as componentes y e z :

$$x: \quad \rho \frac{Di}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (14)$$

$$y: \quad \rho \frac{Dj}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (15)$$

$$z: \quad \rho \frac{Dk}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (16)$$

2.4.1.3 Equação da Energia

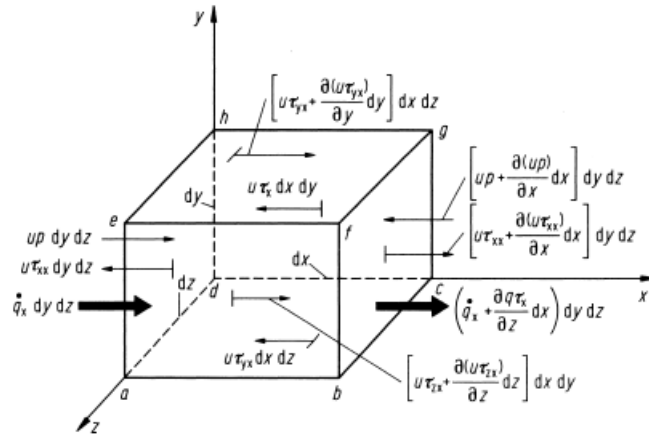
A equação da energia se baseia no princípio da conservação de energia, que diz que energia não pode ser criada ou destruída apenas alterada. Sua forma em termos da energia total é, a taxa de variação da energia é igual ao fluxo de calor (W/m^2) no elemento “B” mais a taxa de trabalho (W) realizado no elemento devido as forças de corpo e da superfície “C” (ANDERSON, 2009):

$$X_A = q_B + \tau_C \quad (17)$$

A taxa de realização de trabalho realizado pela força de corpo que age sobre o elemento fluido que se move a uma velocidade u é:

$$\rho \vec{f} \cdot \vec{u} (dxdydz)$$

Figura 3– Componente x do fluxo de energia, para um elemento fluido em movimento.



Fonte: Adaptado de Anderson (2009).

Considerando todas as forças de superfície atuantes sobre o elemento fluido, no componente x , mostrados na Figura 3, temos:

$$\left[-\frac{\partial(ip)}{\partial x} + \frac{\partial(i\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(i\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(i\tau_{zx})}{\partial z} \right] dx dy dz$$

Quando se considera os eixos y e z , e juntando todas as forças atuantes temos “C”:

$$\begin{aligned} C = & \left[-\left(\frac{\partial(ip)}{\partial x} + \frac{\partial(jp)}{\partial y} + \frac{\partial(kp)}{\partial z} \right) + \frac{\partial(i\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(i\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(i\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(j\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(j\tau_{yy})}{\partial y} \right. \\ & \left. + \frac{\partial(j\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(k\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(k\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(k\tau_{zz})}{\partial z} \right] dx dy dz \\ & + \rho \vec{f} \cdot \vec{u} (dx dy dz) \end{aligned} \quad (18)$$

Definindo $\dot{q}$ como a taxa de adição de calor volumétrico por unidade de massa temos:

$$\text{Aquecimento volumétrico no elemento} = \rho \dot{q} (dx dy dz) \quad (19)$$

O componente x do calor líquido transferido no para o elemento fluido por condução térmica é:

$$\left[\dot{q}_x - \left(\dot{q}_x + \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} dx \right) \right] dydz = - \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} dx dy dz \quad (20)$$

Levando em consideração as componentes y e z temos:

$$\text{Aquecimento do elemento fluido por condução térmica} = - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (21)$$

Como a transferência de calor por condução térmica é proporcional ao gradiente local de temperatura e fazendo somando-se as equações (21) e (19), temos com K sendo a condutividade térmica:

$$B = \left[\rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (22)$$

A energia total de um fluido em movimento por unidade de massa é a soma de sua energia interna por unidade de massa, e , e sua energia cinética por unidade de massa, $\frac{u^2}{2}$. Como é um elemento fluido em movimento, a taxa de variação temporal da energia por unidade de massa é dada pela derivada e como a massa do elemento fluido é $\rho dx dy dz$, nós temos:

$$A = \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{u^2}{2} \right) dx dy dz \quad (23)$$

Substituindo as equações (18), (22) e (23) em (17) temos:

$$\begin{aligned} & \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{u^2}{2} \right) \\ &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left(\frac{\partial(ip)}{\partial x} + \frac{\partial(jp)}{\partial y} + \frac{\partial(kp)}{\partial z} \right) + \frac{\partial(i\tau_{xx})}{\partial x} \\ &+ \frac{\partial(i\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(i\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(j\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(j\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(j\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(k\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(k\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(k\tau_{zz})}{\partial z} \\ &+ \rho \vec{f} \cdot \vec{u} \end{aligned} \quad (24)$$

2.4.2 Modelos de Turbulência

Os fluxos turbulentos são caracterizados por campos de velocidade flutuantes. Estas flutuações misturam quantidades transportadas, tais como momento e energia, e isso leva essas quantidades transportadas a flutuar também. Uma vez que estas flutuações podem ser de escala pequena, mas com uma alta frequência isso leva a um alto custo computacional. Em vez disso, as equações instantâneas que governam as equações podem ser medidas pela média do tempo, em conjunto ou manipuladas de outra forma para remover as pequenas escalas, resultando em um conjunto modificado de equações que tem um custo computacional muito menor. Entretanto, as equações modificadas contêm termos desconhecidas adicionais, e modelos de turbulência são necessários para determinar essas variáveis em termos de quantidades conhecidas.

Três dos modelos mais conhecidos para a modelagem de turbulência são o DNS (*Direct Numerical Simulation*), LES (*Large Eddy Simulation*) e o RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), entre esses métodos o RANS apresenta um menor custo computacional e é utilizado em diferentes áreas da engenharia (WILCOX, 2006). O cálculo da turbulência, na maioria dos casos práticos, é suficiente se resolver uma versão média das equações de Navier-Stokes, que são obtidas se fazendo a decomposição de Reynolds, que consiste em dividir a pressão e velocidade instantâneas em uma média (WILCOX, 2006). Porém ao fazer isso aparece o termo adicional, conhecido como tensão de Reynolds (R_{ij}) que representa correlações entre as flutuações da velocidade (ÇENGEL; CIMBALA, 2014). Este termo adicional, sem o aumento no número de equações leva a um problema de fechamento. Para resolver o problema do fechamento a tensão de Reynolds deve ser modelada, para isso um método comum é a hipótese da viscosidade turbulenta – introduzida por Boussinesq em 1877- para relacionar as tensões Reynolds com os gradientes médios de velocidade. Essa hipótese afirma que a tensão de Reynolds é proporcional à taxa de deformação, de modo que com o uso dessa hipótese se resolve o problema de fechamento do sistema (WILCOX, 2006). A hipótese Boussinesq é utilizada no modelo Spalart-Allmaras, nos modelos $k - \varepsilon$, e nos

modelos $k - \omega$. A vantagem desta abordagem é o custo computacional relativamente baixo associado ao cálculo da viscosidade turbulenta μ_T .

2.4.2.1 Modelo $k - \varepsilon$ Padrão

O modelo $k - \varepsilon$ padrão foi escolhido para este trabalho pois apresenta vantagens como um baixo custo computacional, robustez, de fácil entendimento e utilização, e serão comentados na seção 2.6 vários trabalhos que utilizam esse modelo, onde se obtiveram resultados coerentes e satisfatórios considerando os parâmetros dos reatores dos respectivos trabalhos (WILCOX, 2006).

O modelo $k - \varepsilon$ padrão é um modelo de duas equações de transporte em que a solução de duas equações de transporte separadas permite que velocidade turbulenta e escalas de comprimento sejam determinadas independentemente. O modelo $k - \varepsilon$ padrão se tornou um dos modelos mais utilizados para cálculos práticos de fluxo em engenharia desde que foi proposto por Launder e Spalding (1974).

O modelo $k - \varepsilon$ define a viscosidade turbulenta como $\mu_T = \frac{C_\mu k^2}{\varepsilon}$ (8), onde C_μ é uma constante do modelo. Com ε e k calculados pelas equações 25 e 26; com μ sendo a viscosidade e R_{ij} a tensão de Reynolds.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = R_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (25)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} R_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (26)$$

Para as constantes do modelo, comumente são atribuídos os seguintes valores: $C_{\varepsilon 1} = 1,44$; $C_{\varepsilon 2} = 1,92$; $C_\mu = 0,09$; $\sigma_k = 1,0$; $\sigma_\varepsilon = 1,3$

2.4.3 OpenFOAM

O OpenFOAM (*Open source Field Operation And Manipulation*) (JASAK, 2009; JASAK et al., 2007) é um pacote de simulação numérica, gratuito e de código aberto que utiliza a linguagem de programação C++, devido a esses fatores o OpenFOAM permite um ambiente de desenvolvimento colaborativo, pois com o livre acesso ao código, o usuário tem a possibilidade de analisar e estudar o algoritmo podendo alterar ou criar solvers para problemas específicos de engenharia, possibilitando a expansão de linhas de pesquisa. Utilizado para resolver problemas da mecânica dos meios contínuos, principalmente para a dinâmica dos fluidos computacional, tem-se disponível uma ampla gama de algoritmos para resoluções numéricas típicas de CFD. Devido à sua biblioteca é possível resolver desde escoamentos complexos envolvendo reações químicas, turbulência e transferência de calor, até acústica, mecânica dos sólidos e eletromagnetismo. Também tem presente utilitários para tarefas de pré e pós-processamento, atuantes principalmente sobre dados e malhas.

O OpenFOAM teve início no Imperial College de Londres, começando inicialmente com David Gosman e Radd Issa, porém seus principais contribuidores no desenvolvimento foram Henry Weller e Hrvoje Jasak, no início dos anos 90, no desenvolvimento do FOAM um grande número de estudantes de Ph.D. contribuíram para o projeto com suas teses (CHEN et al., 2014). Inicialmente o código utilizado era o FORTRAN, que era padrão na época, sendo depois mudada para a linguagem utilizada atualmente pelo OpenFOAM o C++. Weller e Jasak criaram então a empresa Nabla Ltd., com o FOAM (*Field Operation And Manipulation*) sendo seu produto, porém não tiveram sucesso na comercialização de seu produto, em 2004 Weller fundou a OpenCFD Ltd. e tornou a licença de domínio público para o software OpenFOAM, sob a GPL (*General Public License*). Em agosto de 2011 a OpenCFD foi adquirida pela Silicon Graphics International (SGI), e em setembro de 2012 a OpenCFD foi vendida para o grupo ESI que distribui o OpenFOAM pela OpenFOAM Foundation.

O OpenFOAM apresenta uma alta escalabilidade paralela, além de uma interface de programação de aplicação de alto nível de fácil utilização. Por ser bastante flexível o OpenFOAM é utilizado como uma ferramenta para se ter um rápido desenvolvimento e testagem de métodos numéricos e algoritmos (FIORINA et

al., 2022). O OpenFOAM também apresenta desvantagens como a não existência de uma interface gráfica se limitando a suas pastas e arquivos, o que pode dificultar o seu uso para novos usuários.

2.5 SIMULAÇÃO TERMOHIDRÁULICA DE REATORES NUCLEARES

Para a simulação termohidráulica de reatores nucleares utilizando o CFD existem diversos trabalhos na literatura, aqui discutimos alguns dos mais relevantes. Listando as publicações relacionadas à aplicação de CFD em reatores SMR e PWR, bem como o uso de combustíveis MOX, buscando se ter um embasamento no desenvolvimento do trabalho.

Em Zhang et al. (2011), foi modelado um conjunto combustível com 37 elementos em um reator resfriado a água supercrítica (SCWR), do tipo CANDU-SCWR. Com o uso do CFD, pelo software Ansys Fluent, se investigou o comportamento termohidráulico focando na temperatura da superfície do revestimento. Foi observado que as temperaturas nas superfícies do revestimento foram bastante desuniformes no conjunto combustível, as maiores temperaturas máximas previstas para os revestimentos se localizaram na parte superior do conjunto, resultando em uma maior velocidade do fluido na direção superior. O estudo mostrou que o CFD é capaz de calcular diversos parâmetros termohidráulicos importantes para o projeto de um reator, como a temperatura máxima do revestimento, e como esses parâmetros podem se relacionar, mesmo o estudo tendo negligenciado o uso da condução térmica das barras de combustível.

Em Li e Gao (2014), foi realizada a modelagem de um conjunto combustível típico de um PWR 17x17, por meio de simulação CFD, por meio do software Ansys Fluent, para avaliar o fluxo do fluido e a transferência de calor buscando um custo computacional razoável. Para isso foi aplicada uma condição de contorno cíclica, e se realizou a divisão do domínio para computação paralela com o uso de uma malha poliédrica. Com isso foi demonstrada a eficácia da utilização de técnicas de divisão de domínio e condições de contorno geométricas para diminuição do poder computacional necessário para a simulação.

Em In et al. (2015), foram realizados experimentos com a utilização de simulação CFD, utilizando o software STAR-CCM+, para prever a queda de pressão pela grade espaçadora em um conjunto combustível 12x12 do reator optimum power

reactor (OPR1000). Foi observado um aumento da queda de pressão com o aumento do fluxo, os resultados do modelo CFD utilizando os modelos SST $k - \omega$ e $k - \varepsilon$ padrão apresentaram uma diferença de 8% em relação ao valor experimental. Os cálculos CFD com o modelo $k - \varepsilon$ padrão apresentaram uma diferença de 10% com os resultados experimentais. O modelo $k - \varepsilon$ padrão utilizado se mostrou preciso para os cálculos CFD, de modo que se obtêm uma predição razoável da variável calculada.

Em Cheng et al. (2017), foi modelado um feixe de barras 5x5, de um PWR típico, com duas grades espaçadoras e uma grade de mistura, para entender características do campo de fluxo a partir de uma análise detalhada em CFD, pelo software Ansys Fluent. A partir do cálculo CFD foi observado o comportamento de parâmetros termohidráulicos do núcleo do reator, tais como velocidade, pressão e temperatura do fluido refrigerante para entendimento do comportamento ao longo das barras de combustível, mostrando ser uma ferramenta útil para otimizar projetos de reatores.

Em Sidi-Ali et al. (2019), foi analisado o canal de um reator pressurizado europeu (EPR), que é um modelo de PWR, por modelagem CFD para se estudar a temperatura do revestimento, a temperatura do fluido refrigerante e a pressão para diferentes velocidades do fluido para se verificar se os critérios de segurança são atingidos. Os cálculos do CFD em comparação com os dados do projeto mostraram resultados com diferenças de 3,3% para a temperatura de saída do reator, enquanto não houve grande variação para os outros parâmetros avaliados. Com isso se percebe que o cálculo CFD se aproxima bastante dos dados de projetos para reatores nucleares.

Em Wang et al. (2020), foi utilizado o CFD para modelagem de um conjunto combustível de 5x5 de um PWR avançado, se comparando diferentes modelos de turbulência. O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão foi escolhido como o melhor modelo para o estudo onde se investigou as características do fluxo como velocidade lateral e queda de pressão e a transferência de calor. Se observa a escolha do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão frente a outros modelos para a simulação do núcleo de um PWR.

Em Zhang et al. (2020), foi modelado o fluxo de calor crítico de um PWR com um conjunto combustível de 5x5, se comparando o CFD, código de subcanal e código de sistema. Foi observado que o cálculo do CFD mostrou boa concordância com os resultados experimentais, apresentando uma diferença de na potência de aquecimento de 5,06% e sua localização axial apresentou um desvio de 4 milímetros. O CFD apresentou ser uma ferramenta com resultados mais próximos dos resultados experimentais quando comparado aos outros códigos de simulação, principalmente para as características do campo de fluxo, demonstrando ser mais confiável para a simulação em conjuntos combustíveis.

Algumas dissertações e teses como os trabalhos de Silva (2016) e Sá da Costa (2016) fazem o uso do software livre OpenFOAM para estudos em reatores nucleares. Em Silva (2016) é realizado o acoplamento do cálculo neutrônico e termohidráulico, no cálculo termohidráulico é utilizado o *chtMultiRegionSimpleFOAM* para o cálculo de transferência de calor entre as fases fluida e sólida, e para a turbulência o modelo $k - \varepsilon$ padrão é utilizado. Já Sá da Costa (2016) estuda os acidentes de perda de refrigerante (LOCA) e não utiliza modelos de turbulência considerando apenas o fluxo laminar ao longo do núcleo do reator, e utiliza o *chtMultiRegionSimpleFOAM* para o cálculo da transferência de calor.

Em García et al. (2018), foi modelado um oitavo do conjunto combustível baseado no reator mPower, foi desenvolvido um modelo para o cálculo neutrônico dos conjuntos combustíveis e com a sua distribuição de potência se calculou a distribuição de temperatura da seção mais quente do elemento combustível em CFD. O cálculo da turbulência foi feito pelo modelo $k - \omega$ SST, e também se avaliou uma independência do resultado da malha utilizada, e se observou que a variação da temperatura máxima era de menos de 1% para malhas de diferentes tamanhos. Os parâmetros termohidráulicos observados na simulação ficaram dentro dos parâmetros de operação do reator, o referido estudo utiliza parâmetros similares aos do presente estudo.

Em Betancourt et al. (2021a), são avaliados combustíveis mistos em um reator IPWR com características próximas às do reator estudado. Para as diferentes composições de combustíveis se atingiu o ciclo completo, além de as restrições de segurança serem cumpridas. Foram avaliados os combustíveis mistos utilizados neste estudo são eles os combustíveis de Tório, Plutônio; Tório, Urânio; Tório,

Urânio, Plutônio.

Em Betancourt et al. (2021b) e Mazaira et al. (2020) são apresentados estudos neutrônicos do ciclo combustível para reatores IPWR, baseados em código Serpent a partir de modelos computacionais do núcleo. Avaliando diferentes configurações de hastes de controle e enriquecimento, mantendo-se dentro da faixa de segurança para o reator.

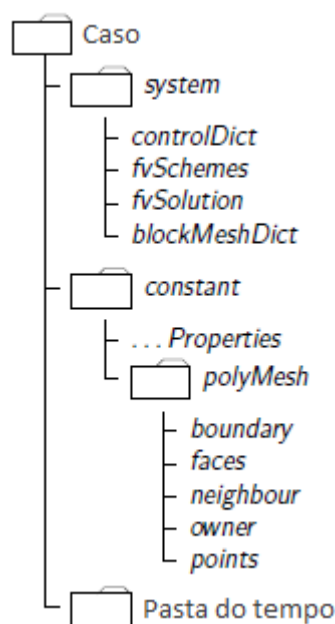
3 MATERIAIS E MÉTODOS

No OpenFOAM para resolver problemas, é preciso se criar uma pasta a qual chamamos de caso, a pasta caso pode ser nomeada como o usuário desejar, com um conjunto de arquivos e pastas cuja estrutura básica é determinada pelo OpenFOAM. Dentro do caso são dados os detalhes sobre qual solver será utilizado para a resolução das equações diferenciais parciais, e se encontram as definições sobre os parâmetros, condições de contorno, geometria, malha e resultados para o pós-processamento (OPENFOAM, 2018a). Nesta seção os casos no OpenFOAM são explicados.

3.1 ESTRUTURA DOS CASOS NO OPENFOAM

Os casos no OpenFOAM são, no geral, estruturados como na Figura 4, contendo três pastas que são a pasta “system”, “constant” e Pastas dos Tempos (OPENFOAM, 2018b).

Figura 4– Estrutura geral de um caso em OpenFOAM.



Fonte: Adaptado de OpenFOAM (2018b).

Estas pastas são onde se armazenam as informações necessárias para simular os casos, as informações ficam em arquivos de texto.

3.1.1 Constant

A pasta *constant* contém os arquivos de propriedades físicas, que descrevem as propriedades físicas do caso e outras propriedades pertinentes ao caso. Na pasta *polyMesh*, se tem a descrição completa da geometria e da malha do caso.

3.1.2 System

A pasta *system* é onde estão os arquivos relacionados aos procedimentos para solução do caso. Contendo ao menos três arquivos: *controlDict* que contém os parâmetros de controle de execução; *fvSchemes* onde são selecionados os esquemas de discretização utilizados na solução do problema; *fvSolution* onde se define os métodos para resolver as equações, tolerâncias e outros controles de algoritmos para a simulação.

3.1.3 Pasta do Tempo

A pasta do tempo pode ser formadas por um conjunto de pastas, onde cada pasta se refere ao instante simulado e contém os dados dos campos das variáveis tratados no caso, por exemplo a pasta “0” contém os arquivos individuais de valores iniciais e as condições de contorno definidas pelo usuário, enquanto uma pasta com uma outra numeração teria os arquivos individuais com os valores das variáveis simuladas no instante dado pela numeração da pasta.

3.2 GEOMETRIA

O OpenFOAM não possui um editor CAD (*Computer-Aided Design*) para construção da geometria do caso, para isso pode-se utilizar o software de código aberto e gratuito FreeCAD, por ser um software gratuito e aberto o FreeCAD é bastante interessante de se utilizar em conjunto com o OpenFOAM para a construção da geometria e exportação da mesma em formato STL. Sendo um modelador 3D paramétrico. O FreeCAD é uma ferramenta de modelagem de uso geral voltada para a engenharia, com ênfase no projeto paramétrico, baseado em características de sólidos tridimensionais. A modelagem paramétrica permite

modificar facilmente seu projeto, voltando ao histórico de seu modelo e alterando seus parâmetros (FREECAD, 2021).

O Design Modeler é um componente do software ANSYS. Sua interface de modelagem de CAD tem fortes capacidades de modificação da geometria para a preparação de simulações, tais como, operação de “preenchimento” ou mesmo extração de modelo de superfície. O uso do Design Modeler em conjunto com outros módulos do ANSYS permite uma rápida transferência de dados sem perdas para, por exemplo, se fazer a malha. O Design Modeler é relativamente simples de se trabalhar e como para a geometria deste estudo não apresenta um alto grau de complexidade, a licença de estudante é suficiente para se fazer a geometria.

3.3 MALHA

O método numérico que o OpenFOAM utiliza para resolver os casos de fluidodinâmica é o método dos volumes finitos. Portanto é preciso dividir a geometria do domínio em pequenos volumes cujos valores descrevem o fluxo. O OpenFOAM possui dois geradores de malha nativos que podem ser utilizados, que são o *blockMesh* e o *snappyHexMesh* (OPENFOAM, 2018b). Para este trabalho se utilizou o Ansys Meshing, em conjunto com o Ansys DesignModeler, pela facilidade de utilização que esses softwares integrados no pacote Ansys apresentam, bem como a experiência do grupo na utilização desses softwares, a seguir uma descrição das características e princípios funcionais desses geradores de malhas.

3.3.1 Ansys Meshing

O ANSYS Meshing ajusta automaticamente uma malha a uma determinada geometria usando uma ampla gama de configurações, ferramentas e controles locais. Todas as malhas são encaixadas no corpo e podem implementar diversas células como, entre outras, tetraédricas, hexaédricas e poliédricas. O usuário pode especificar diversas características da malha dependendo da complexidade e da geometria do modelo, como, por exemplo, escolher o tamanho dos elementos da malha em parte do modelo ou no modelo inteiro, para se ter um aumento na precisão das propriedades da malha.

3.4 MODELOS TERMOFÍSICOS

Os modelos termofísicos são usados para descrever casos que se necessitam de cálculos sobre energia, calor e propriedades físicas e são construídos em OpenFOAM como um sistema de pressão-temperatura (p-T) a partir do qual outras propriedades são computadas. Existe uma entrada obrigatória no dicionário chamado `thermoType` que especifica o pacote de modelagem termofísica que é usado na simulação. O OpenFOAM tem uma coleção de submodelos prontos que permitem cálculos básicos. Um modelo termofísico tem várias camadas ou submodelos, cada um com um propósito diferente. Por exemplo, um submodelo define a equação de estado, outro as propriedades de transporte tais como viscosidade e condutividade térmica e um terceiro cuida da avaliação das propriedades termofísicas básicas, como a capacidade térmica específica e a entalpia. Esta abordagem de codificação monta pacotes de modelagem termofísica, começando com a equação de estado para depois adicionar mais camadas de modelagem termofísica que derivam das propriedades de camadas anteriores (OPENFOAM, 2018b).

3.5 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Para que um sistema de equações diferenciais parciais tenha uma solução única, deve-se definir condições de contorno. As condições de contorno também são utilizadas para isolar o espaço para o qual a simulação numérica é realizada de seu entorno, elas têm que ser prescritas para cada variável no limite do domínio. A prescrição de condições de contorno requer uma compreensão do problema investigado. Cada condição de contorno tem um significado físico descrito matematicamente através de uma equação. O *inlet*, por exemplo, descreve um comportamento de fluxo de entrada conhecido onde a velocidade e a pressão satisfazem as condições físicas especificadas pelo usuário. As condições de contorno são organizadas em categorias classificadas como *basic* que são os tipos básicos, *constraint* que são as condições com restrições geométricas e *derived* que são as condições especializadas (MOUKALLED et al., 2016; OPENFOAM, 2018b).

As condições de contorno básicas (*basic*) incluem condições de Dirichlet e de Neumann, que devem ser definidos a fim de conectar o modelo matemático com as

condições de contorno do problema. A condição de contorno de Dirichlet, dá um valor fixo (*fixedValue*) para a variável escalar transportada no contorno especificado, a condição de contorno de Neumann, especifica o gradiente da variável escalar transportada normal ao contorno (*fixedGradient*). Normalmente o gradiente no contorno é definido como gradiente zero (*zeroGradient*), ou seja, sem fluxo. A condição de contorno mista (*mixed*) é uma combinação linear das duas condições de fronteira numéricas, Dirichlet (*fixedValue*) e Neumann (*fixedGradient*) (MOUKALLED et al., 2016).

As condições de contorno *constraint* permitem uma simplificação e redução do domínio computacional, o que diminui os recursos computacionais necessários. Estas condições de contorno são:

- A condição de plano de simetria (*symmetryPlane*), que pode ser usado quando a geometria investigada é simétrica. O fluxo deve ser constante e o padrão de fluxo esperado também deve ser simétrico. Se o problema satisfaz todas estas condições, então apenas uma parte do domínio original pode ser modelada.
- A condição de contorno cíclica (*cyclic*) é usada quando a geometria consiste em partes repetidas idênticas, onde uma parte pode representar a geometria inteira.

As condições de contorno *derived* incluem diversas condições de contorno especializadas que são derivadas das condições de contorno básicas, alguns exemplos das condições *derived* são:

- *fixedProfile*: Utilizada para se especificar o perfil de uma variável.
- *flowRateInletVelocity*: Esta condição de contorno cria um campo de velocidade uniforme ajustado para corresponder a taxa de fluxo especificada.
- *compressible::turbulentTemperatureCoupledBaffleMixed*: Esta condição de contorno é utilizada em regiões acopladas, para realizar a transferência de calor.

3.6 OPENFOAM EM PARALELO

A computação paralela pela decomposição do domínio é um bom uso do poder computacional no CFD. A idéia principal é subdividir o domínio em subdomínios e atribuir cada um a um processador. O programa pode ser executado em paralelo em subdomínios separados, com a comunicação entre processadores usando o protocolo de comunicação openMPI. O primeiro passo para permitir uma execução paralela em uma aplicação baseada no OpenFOAM é decompor o domínio da solução em subdomínios, com número de subdomínios sendo igual ou menor que o número de processadores disponíveis para execução. A execução paralela envolve a comunicação e sincronização entre os processadores em cada subdomínio (OPENFOAM, 2018b).

A malha e os campos são decompostos usando o utilitário `decomposePar`, para a decomposição é necessário se atribuir um método de decomposição de domínio no `decomposePar`, o OpenFOAM tem quatro métodos principais, estes métodos são o Simple, Hierarchical, Manual e Scotch. Neste trabalho o método utilizado é o Scotch pois requer como entrada do usuário apenas o número de subdomínios, que deve ser igual ou inferior ao número de núcleos físicos do processador, e é construído de forma a otimizar o processamento.

O método Scotch é utilizado para particionamento e ordenação de gráficos e malhas com tentativas de minimizar o número de limites internos, ou seja, esse método visa separar as bordas de modo a diminuir o número de fronteiras entre as partes que cada núcleo está processando, diminuindo a necessidade de comunicação entre os núcleos durante o processamento de forma a otimizar o processo.

Após rodar o caso em paralelo o usuário pode reconstruir o caso para o pós-processamento essa reconstrução é feita com o utilitário `reconstructPar` (OPENFOAM, 2018b).

3.7 SOLVER

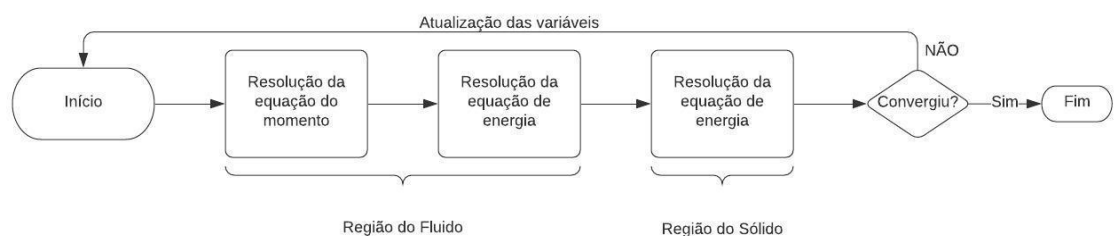
O OpenFOAM pode ser visto como uma caixa de ferramentas com muitos *solvers* independentes da qual o usuário tem a responsabilidade de escolher o mais apropriado para o modelo matemático definido. Para este trabalho se tem a

transferência de calor entre uma região fluida e uma região sólida. Desta forma se faz necessário o acoplamento entre as regiões fluida e sólida de modo que ocorra a troca de informações nas interfaces fluido/sólido para garantir a continuidade da temperatura e a conservação de energia. Sendo então um problema de calor conjugado (conjugate heat transfer, CHT), O solver *chtMultiRegionSimpleFoam* foi projetado para problemas de transferência de calor conjugado, sendo uma combinação de dois solvers independentes diferentes, o *HeatConductionFoam* e o *BuoyantSimpleFoam*. Desta forma se utilizará o solver *chtMultiRegionSimpleFoam*.

3.7.1 *chtMultiRegionSimpleFoam*

O solver *chtMultiRegionSimpleFoam* é utilizado para simulação de transferência de calor através de diferentes materiais, o solver considera apenas uma única fase para a região do líquido, não sendo considerado um sistema bifásico, de modo que não se considera o surgimento de bolhas. O solver funciona de maneira iterativa resolvendo as equações do momento e de energia para a região do fluido e depois calculando a equação de energia da região do sólido. Após o cálculo das regiões do sólido e do fluido é checada a convergência e caso a convergência não seja atingida as variáveis são atualizadas e o cálculo é reiniciado, como exemplificado na Figura 5. A seguir as equações utilizadas pelo solver *chtMultiRegionSimpleFoam* são mostradas.

Figura 5– Algoritmo simplificado do *chtMultiRegionSimpleFoam*.



Fonte: O Autor (2022).

3.7.1.1 Equações Governantes Região Do Fluido

A equação do momento utilizada pelo OpenFOAM é:

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau - \rho\vec{g} \quad (27)$$

Onde $\vec{u}$ é a velocidade do vetor, p é a pressão, g é a aceleração da gravidade e τ é a tensão de cisalhamento dado por:

$$\tau = \mu \left[(\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{u} \right] \quad (28)$$

Onde μ é a viscosidade.

A equação de energia usada pelo OpenFOAM é:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}H) = \nabla \cdot (\alpha\nabla h) - \nabla \cdot [\vec{u}(p - \rho\vec{g}\vec{r})] + S_h \quad (29)$$

Onde $\alpha = \frac{\mu C_p}{K}$ (30) é difusividade térmica, S_h é o termo de geração térmica, $\vec{r}$ é uma fonte de calor específica, h é a energia interna específica e $H = h + \frac{u^2}{2}$ (31) é a entalpia total.

3.7.1.2 Equação Governante Região Do Sólido

A equação utilizada pelo OpenFOAM para calcular a região sólida é:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha\nabla h) + S_h \quad (32)$$

Onde $\alpha = \frac{\mu C_p}{K}$ (30) é a difusividade térmica, S_h é o termo de geração térmica e h é a entalpia.

3.8 PARAVIEW

O ParaView é um software gratuito de código aberto, da empresa Kitware. ParaView é um software multiplataforma que funciona plenamente em sistemas

Windows, Mac OS X, Linux entre outros, bem como em qualquer sistema de computador, desde computadores pessoais para pequenas montagens de dados até supercomputadores, analisando conjuntos de dados extremamente grandes. O ParaView é utilizado para análise e visualização de dados, usuários do ParaView podem rapidamente criar visualizações para analisar seus dados utilizando técnicas qualitativas e quantitativas, por meio de construção de gráficos, verificações de fluxos a partir de vetores o que possibilita o pós-processamento a partir de uma visualização tridimensional interativa (PARAVIEW, 2020).

3.9 PARÂMETROS E PROPRIEDADES DO REATOR

Nesta seção são descritas as propriedades dos materiais e as densidades de potência utilizados na simulação.

3.9.1 Propriedades do UO_2 sólido

Abaixo são descritas as propriedades do UO_2 sólido utilizadas para os cálculos das simulações.

3.9.1.1 Ponto de Fusão

O valor do ponto de fusão do UO_2 sólido é (IAEA, 2006):

$$T_m = 3120 \pm 30 \text{ K} \quad (33)$$

3.9.1.2 Densidade

A densidade de UO_2 é considerada como 93.5% da densidade teórica. A densidade em função da temperatura é dada por (IAEA, 2008):

$$\rho(T) \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] = \rho(273) \left(\frac{L(273)}{L(T)} \right)^{-3} \quad (34)$$

Onde $\rho(273)$ é a densidade em 273 K; e para a razão $\frac{L(T)}{L(273)}$ se utiliza (IAEA,

2008):

$$73 \leq T \leq 923 \text{ K} \rightarrow$$

$$\frac{L(T)}{L(273)} = 0,99734 + 9,802 \cdot 10^{-6}T - 2,705 \cdot 10^{-10}T^2 + 4,291 \cdot 10^{-13}T^3 \quad (35)$$

$$923 \leq T \leq 3120 \rightarrow$$

$$K \frac{L(T)}{L(273)} = 0,99672 + 1,179 \cdot 10^{-5}T - 2,429 \cdot 10^{-9}T^2 + 1,219 \cdot 10^{-12}T^3 \quad (36)$$

3.9.1.3 Entalpia e Calor Específico

Para a entalpia $H(T)$ se utiliza (IAEA, 2008):

$$298,15 \text{ K} \leq T \leq 3120 \text{ K}$$

$$H(T) - H(298,15) \left[\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right] = -21,1762 + 52,1743\tau + 43,9753\tau^2 - 28,0804\tau^3 \\ + 7,88552\tau^4 - 0,5266\tau^5 + 0,7139\tau^{-1} \quad (37)$$

$$\text{Com } \tau = T/1000$$

Para o calor específico C_p se utiliza (IAEA, 2008):

$$c_p \left[\frac{\text{J}}{\text{mol.K}} \right] = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \\ = 52,1743 + 87,951\tau - 84,2411\tau^2 + 31,5421\tau^4 - 2,6334\tau^4 \\ - 0,7139\tau^{-2} \quad (38)$$

$$\text{Com } \tau = T/1000$$

3.9.1.4 Condutividade Térmica

Se considerando uma densidade teórica de 95% a condutividade térmica λ é dada por (IAEA, 2008):

$$\lambda_{95} \left[\frac{W}{m K} \right] = \frac{100}{7,5408 + 17,692t + 3,6142t^2} + \frac{6400}{t^{5/2}} e^{-\frac{16,35}{t}} \quad (39)$$

Onde $t = T/1000$, T é a temperatura em K.

3.9.2 Propriedades do (Th,U)O₂

Abaixo são descritas as propriedades do (Th,U)O₂ sólido utilizadas para os cálculos das simulações.

3.9.2.1 Densidade

Para a faixa 298 até 1600K se utiliza (IAEA, 2006):

$$\rho_{th} \left[\frac{g}{cm^3} \right] = 10,087 - 2,891 \cdot 10^{-4}T - 6,354 \cdot 10^{-7}xT + 9,279 \cdot 10^{-3}x + 5,111 \cdot 10^{-6}x^2 \quad (56)$$

Onde x é o teor de UO₂.

3.9.2.2 Calor Específico

A equação utilizada em função da composição (y) e da temperatura (T) é (IAEA, 2006):

$$\begin{aligned}
c_p \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] = & y(55,9620 + 0,05126T - 3,6802 \cdot 10^{-5}T^2 + 9,2245 \cdot 10^{-9}T^3 - 5,74031 \\
& \cdot 10^5T^{-2}) \\
& + (1 - y)(52,1743 + 0,08795T - 8,4241 \cdot 10^{-5}T^2 + 3,1542 \cdot 10^{-8}T^3 \\
& - 2,633 \cdot 10^{-12}T^4 - 7,1391 \\
& \cdot 10^5T^{-2})
\end{aligned} \tag{57}$$

3.9.2.3 Condutividade Térmica

Entre 873 a 1873K, em função da composição (y) e da temperatura (T) se utiliza (IAEA, 2006):

$$\lambda_{95} (W/mK) = \frac{1}{-0,0464 + 0,0034y + (2,5185 \cdot 10^{-4} + 1,0733 \cdot 10^{-7}y)T} \tag{58}$$

3.9.2.4 Ponto de Fusão

O valor do ponto de fusão do (Th,U)O₂ sólido é aproximadamente (PETERSON; CURTIS, 1970):

$$T_m [K] = 3220 \tag{59}$$

3.9.3 Propriedades do (Th, Pu)O₂

Abaixo são descritas as propriedades do (Th,Pu)O₂ sólido utilizadas para os cálculos das simulações.

3.9.3.1 Condutividade Térmica

Entre 873 a 1873K, em função da composição (y) e da temperatura (T) se utiliza (IAEA, 2006):

$$\lambda_{95} (W/mK) = \frac{1}{-0,08388 + 1,7378y + (2,62524 \cdot 10^{-4} + 1,7405 \cdot 10^{-7}y)T} \tag{60}$$

3.9.3.2 Calor Específico

A equação utilizada para o calor específico da mistura $(Th_{1-y}Pu_y)O_2$ foi calculado a partir dos valores da literatura de calores específicos de ThO_2 e PuO_2 e, posteriormente, usando a lei de Vegard (assumindo um comportamento de solução sólida ideal) foi calculado o calor específico (IAEA, 2006).

$$Cp_{(Th_{1-y}Pu_y)O_2} \left[\frac{J}{mol K} \right] = (1 - y)Cp_{ThO_2} + yCp_{PuO_2} \quad (61)$$

$$Cp_{ThO_2} = 55,9620 + 51,2579 * 10^{-3}T - 36,8022 * 10^{-6}T^2 + 9,22452 * 10^{-9} * T^3 - 5,7403 * 10^5 T^{-2} \quad (62)$$

$$Cp_{PuO_2} = \frac{347,4 * 571^2 e^{(571/T)}}{T^2 \left[e^{(571/T)} - 1 \right]^2} + 3,95 * 10^{-4}T + \frac{3,860 * 10^7 * 1,967 * 10^5}{RT^2} * e^{(-1,965 * 10^5 / RT)} \quad (63)$$

3.9.3.3 Densidade

Para os casos onde não se tinha uma correlação com a temperatura foi utilizado valor constante de acordo com as composições de seus óxidos constituintes (IAEA, 2006):

$$\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right] = 9534 \quad (64)$$

3.9.3.4 Ponto de Fusão

O valor do ponto de fusão do $(Th,Pu)O_2$ sólido é aproximadamente (PETERSON; CURTIS, 1970):

$$T_m [K] = 3000 \quad (65)$$

3.9.4 Propriedades do (Th,U,Pu)O₂

Se utilizou valores constantes obtidos pela composição de seus óxidos constituintes: 0,8128 ThO₂; 0,1372 PuO₂; 0,05 UO₂. Com os valores de (IAEA, 2006) (IAEA, 2008).

3.9.4.1 Condutividade Térmica

Para a condutividade térmica foi utilizado um valor constante pela composição de seus óxidos pela falta de uma correlação:

$$\lambda_{(Th_{1-y-z}U_zPu_y)O_2} [W/mK] = (1 - y - z)\lambda_{ThO_2} + z\lambda_{UO_2} + y\lambda_{PuO_2} \quad (66)$$

$$\lambda_{(Th_{1-y-z}U_zPu_y)O_2} [W/mK] = 5,2236$$

3.9.4.2 Calor Específico

Para o calor específico foi utilizado um valor constante pela composição de seus óxidos pela falta de uma correlação:

$$Cp_{(Th_{1-y-z}U_zPu_y)O_2} [J/mol K] = (1 - y - z)Cp_{ThO_2} + zCp_{UO_2} + yCp_{PuO_2} \quad (67)$$

$$Cp_{(Th_{1-y-z}U_zPu_y)O_2} [J/mol K] = 78,6381$$

3.9.4.3 Densidade

Para a densidade foi utilizado um valor constante pela composição de seus óxidos pela falta de uma correlação:

$$\rho_{(Th_{1-y-z}U_zPu_y)O_2} [kg/m^3] = (1 - y - z)\rho_{ThO_2} + z\rho_{UO_2} + y\rho_{PuO_2} \quad (68)$$

$$\rho_{(Th_{1-y-z}U_zPu_y)O_2} [kg/m^3] = 9823,4716$$

3.9.4.4 Ponto de Fusão

Para o ponto de fusão foi utilizado um valor constante pela composição de seus óxidos:

$$T_{m(\text{Th}_{1-y-z}\text{U}_z\text{Pu}_y)\text{O}_2}[\text{K}] = (1 - y - z) * 3651 + z * 3120 + y * 2663 \quad (69)$$

$$T_{m(\text{Th}_{1-y-z}\text{U}_z\text{Pu}_y)\text{O}_2}[\text{K}] = 3488,89 \quad (70)$$

3.9.5 Propriedades Zircaloy-4

Abaixo são descritas as propriedades do Zircaloy utilizadas para os cálculos das simulações.

3.9.5.1 Calor Especifico

Equações do calor específico para as faixas de temperatura do zircaloy-4 (STUCKERT; PALAGIN, 2002):

$$273 \leq T \leq 1093 \text{ K} \rightarrow C_p \left[\frac{\text{J}}{\text{kg K}} \right] = 260,85 + 0,1371T \quad (71)$$

$$1093 \leq T \leq 1173 \text{ K} \rightarrow C_p = 260,85 + 0,1371T + f(T) \quad (72)$$

$$f(T) = 565 \cdot \exp \left[-\frac{(T - 1163)^2}{1100} \right] \quad (73)$$

$$1173 \leq T \leq 1293 \text{ K} \rightarrow C_p = 634,6 - 0,4T + 1,6 \cdot 10^{-4}T^2 + f(T) \quad (74)$$

$$f(T) = 530 \cdot \exp \left[-\frac{(T - 1183)^2}{2390} \right] \quad (75)$$

$$1320 \leq T \leq 2000 \text{ K} \rightarrow C_p = 634,6 - 0,4T + 1,6 \cdot 10^{-4}T^2 \text{ [J/kg K]} \quad (76)$$

3.9.5.2 Condutividade Térmica

Para a condutividade do zircaloy utiliza-se (IAEA, 2006):

$$300 \leq T \leq 1800 \text{ K}$$

$$\lambda_{\text{ZIRLO}} = 12,767 - 5,4348 \cdot 10^{-4} T + 8,9818 \cdot 10^{-6} T^2 [\text{W/mK}] \quad (77)$$

3.9.5.3 Densidade

Para a densidade (IAEA, 2006):

$$T \leq 1083 \text{ K} \rightarrow \rho [\text{kg/m}^3] = 6595,2 - 0,1417 T \quad (78)$$

$$1144 \leq T \leq 1800 \text{ K} \rightarrow \rho [\text{kg/m}^3] = 6690 - 0,1855 T \quad (79)$$

3.9.6 Propriedades do Hélio

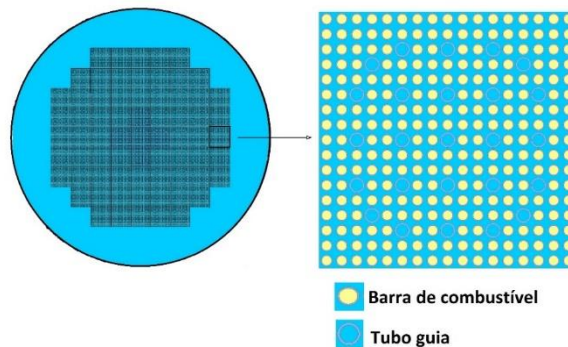
A densidade do hélio foi considerada constante e igual a $0,1785 \text{ kg/m}^3$, o calor específico pode ser considerado constante e igual a $5,193 \text{ kJ/kg.K}$ (IAEA, 2008). A condutividade do hélio pode ser calculada a partir da relação de Von Ubisch (ALMENAS, 1982):

$$\lambda [\text{W/mK}] = 2,517 \cdot 10^{-3} T^{0.72} \quad (80)$$

3.10 DISTRIBUIÇÃO DE DENSIDADE DE POTÊNCIA

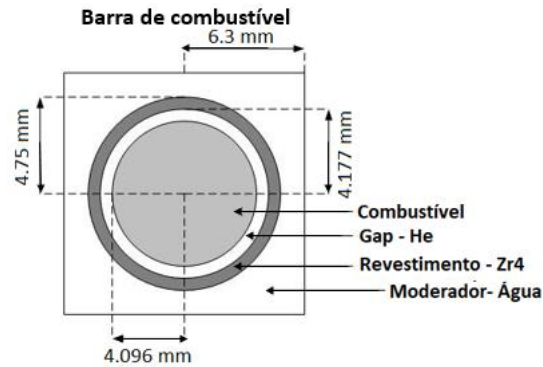
A distribuição dos conjuntos de combustível dentro do núcleo é mostrada na Figura 6 e as características e dimensões das barras de combustível são mostrados na Figura 7.

Figura 6– Esquema do núcleo e conjunto de combustível do reator.



Fonte: Adaptado de Betancourt et al. (2021a).

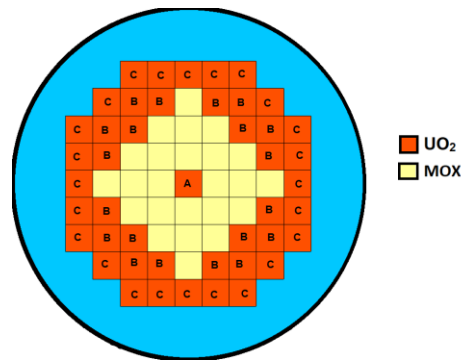
Figura 7– Características e dimensões das barras de combustível.



Fonte: Adaptado de Maiorino et al. (2017).

É tomado como parâmetro o ciclo padrão do urânio combustível com enriquecimento inferior a 5%. Para o uso de misturas MOX foi considerado o núcleo parcialmente carregado com combustível MOX, para garantir um ciclo prolongado de 48 meses. A distribuição do combustível no núcleo se dá da seguinte forma, um terço do núcleo carregado com o combustível MOX, e o restante carregado com UO_2 como mostrado na Figura 8 (BETANCOURT et al., 2021a).

Figura 8– Distribuição de combustível MOX no núcleo.



Fonte: Betancourt et al. (2021a).

Para o MOX $(Th,U)O_2$ é utilizada uma mistura com proporção de 6,97% de U e 93,03% de Th como descrito na Tabela 4.

Tabela 4– Composição em % de massa dos conjuntos de combustível MOX $(Th,U)O_2$.

MOX $(Th,U)O_2$	
U 232	0,31
U 233	49,79
U 234	29,63
U 235	7,21
U 236	12,97

U 238	0,09
Total de U %	6,97
Total de Th %	93,03

Fonte: Betancourt et al. (2021a).

Para o MOX (Th,Pu)O₂ é utilizada uma mistura com proporção de 13,14% de Pu e 86,86% de Th como descrito na Tabela 5.

Tabela 5– Composição em % de massa dos conjuntos de combustível MOX (Th,Pu)O₂.

MOX (Th,Pu)O₂	
Pu 238	2,70
Pu 239	51,05
Pu 240	24,22
Pu 241	12,80
Pu 242	7,30
Am 241	1,92
Total de Pu %	13,14
Total de Th %	86,86

Fonte: Betancourt et al. (2021a).

Para o MOX (Th,U,Pu)O₂ é utilizada uma mistura com proporção de 13,72% de Pu, 81,28% de Th e 5,00% de U como descrito na Tabela 6.

Tabela 6– Composição em % de massa dos conjuntos de combustível MOX (Th,U,Pu)O₂.

MOX (Th,U,Pu)O₂	
Pu 238	5,58
Pu 239	23,91
Pu 240	24,51
Pu 241	11,16
Pu 242	33,80
Am 241	1,04
Total de Pu %	13,72
U 232	0,21
U 233	52,59
U 234	26,45
U 235	11,69
U 236	9,03
U 238	0,03
Total de U %	5,00
Total de Th %	81,28

Fonte: Betancourt et al. (2021a).

Para a simulação termohidráulica é necessária a utilização da distribuição da densidade de potência no combustível para os combustíveis estudados, sendo calculado o valor máximo para o núcleo utilizando o MOX (Th,U)O₂, tanto para os conjuntos com (Th,U)O₂ tanto para os conjuntos com UO₂. Com os resultados dos cálculos neutrônicos sendo mostrados na Figura 9 (BETANCOURT et al., 2021a).

Para o canal do conjunto com UO₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left[\frac{W}{m^3} \right] = 7,1 * 10^7 * x^6 - 5 * 10^8 * x^5 + 1,39 * 10^9 * x^4 - 1,97 * 10^9 * x^3 + 1,12 * 10^9 * x^2 + 3,12 * 10^8 * x + 1,05 * 10^8 \quad (81)$$

Onde x = altura da barra combustível (m)

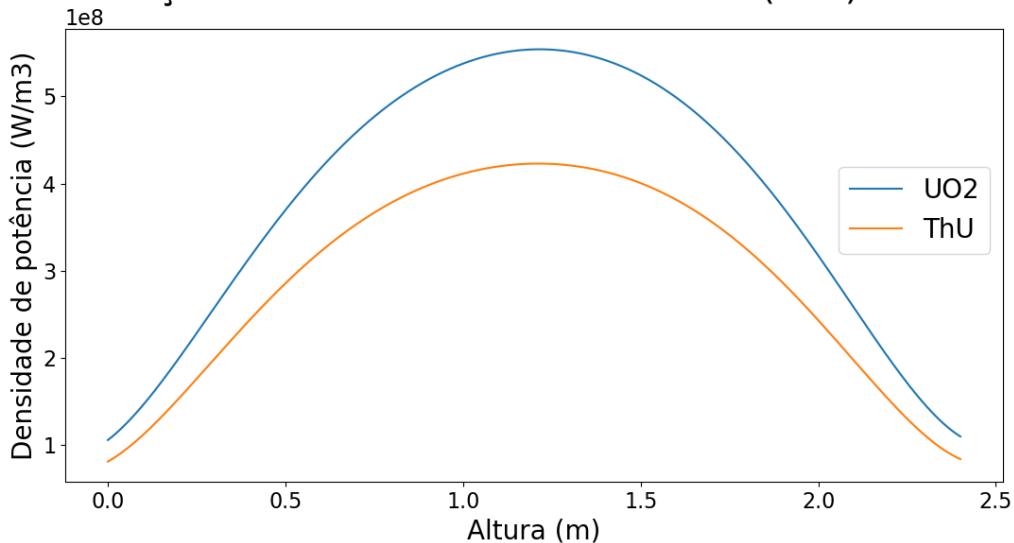
Para o canal do conjunto com (Th,U)O₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left[\frac{W}{m^3} \right] = 6,24 * 10^7 * x^6 - 4,41 * 10^8 * x^5 + 1,22 * 10^9 * x^4 - 1,7 * 10^9 * x^3 + 9,5 * 10^8 * x^2 + 2,53 * 10^8 * x + 8,12 * 10^7 \quad (82)$$

Onde x = altura da barra combustível (m)

Figura 9– Distribuição da densidade de potência para o UO₂ e (Th,U)O₂ em núcleo com o MOX (Th,U)O₂.

Distribuição de Densidade de Potência do (ThU)O₂ e UO₂



Fonte: O Autor (2022).

Para a simulação termohidráulica é necessária a utilização da distribuição da densidade de potência no combustível para os combustíveis estudados, sendo

calculado o valor máximo para o núcleo utilizando o MOX (Th,Pu)O₂, tanto para os conjuntos com (Th,Pu)O₂ tanto para os conjuntos com UO₂. Com os resultados dos cálculos neutrônicos sendo mostrados na Figura 10 (BETANCOURT et al., 2021a).

Para o canal do conjunto com UO₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left[\frac{W}{m^3} \right] = 8,77 * 10^7 * x^6 - 6,32 * 10^8 * x^5 + 1,79 * 10^9 * x^4 - 2,54 * 10^9 * x^3 + 1,51 * 10^8 * x^2 + 1,77 * 10^8 * x + 1,14 * 10^8 \quad (83)$$

Onde x = altura da barra combustível (m)

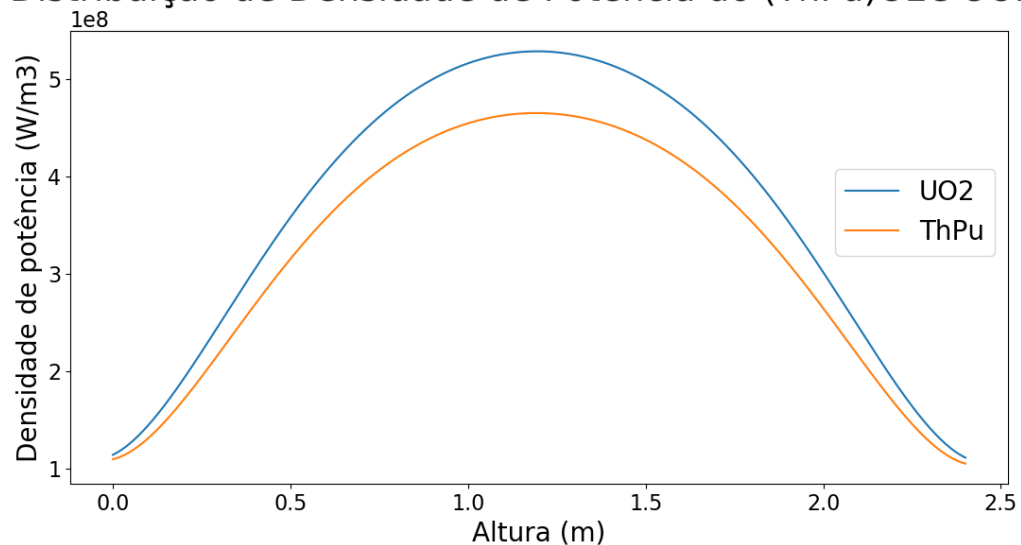
Para o canal do conjunto com (Th,Pu)O₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left[\frac{W}{m^3} \right] = 8,56 * 10^7 * x^6 - 6,18 * 10^8 * x^5 + 1,76 * 10^9 * x^4 - 2,49 * 10^9 * x^3 + 1,52 * 10^9 * x^2 + 8,86 * 10^7 * x + 1,1 * 10^8 \quad (84)$$

Onde x = altura da barra combustível (m)

Figura 10– Distribuição da densidade de potência para o UO₂ e (Th,Pu)O₂ em núcleo com o MOX (Th,Pu)O₂.

Distribuição de Densidade de Potência do (ThPu)O₂e UO₂



Fonte: O Autor (2022).

Para a simulação termohidráulica é necessária a utilização da distribuição da densidade de potência no combustível para os combustíveis estudados, sendo calculado o valor máximo para o núcleo utilizando o MOX (Th,U,Pu)O₂, tanto para os

conjuntos com (Th,U,Pu)O₂ tanto para os conjuntos com UO₂. Com os resultados dos cálculos neutrônicos sendo mostrados na Figura 11 (BETANCOURT et al., 2021a).

Para o canal do conjunto com UO₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left[\frac{W}{m^3} \right] = 6,31 * 10^7 * x^6 - 4,65 * 10^8 * x^5 + 1,39 * 10^9 * x^4 - 2,15 * 10^9 * x^3 + 1,35 * 10^9 * x^2 + 3,04 * 10^8 * x + 1,28 * 10^8 \quad (85)$$

Onde x = altura da barra combustível (m)

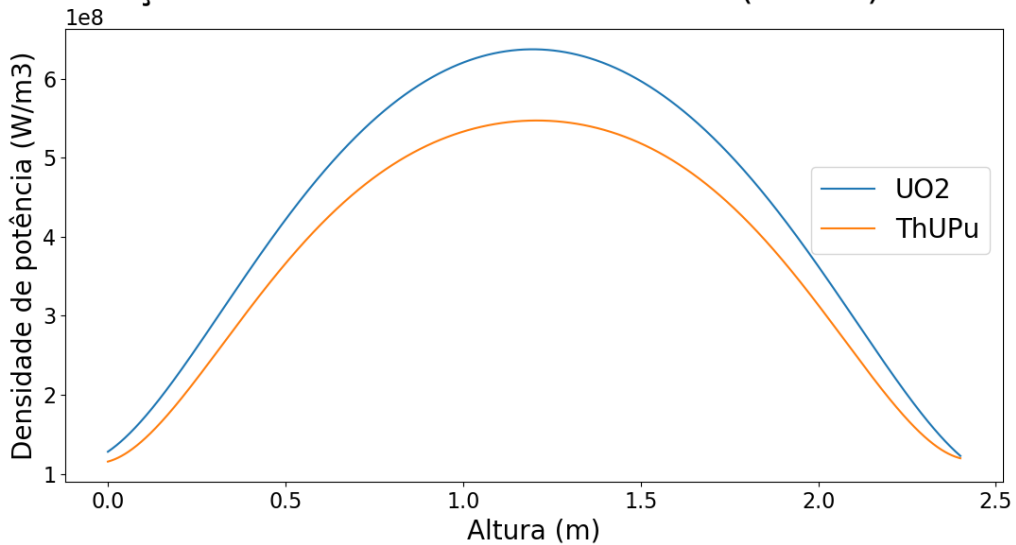
Para o canal do conjunto com (Th,U,Pu)O₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left[\frac{W}{m^3} \right] = 1,08 * 10^8 * x^6 - 7,78 * 10^8 * x^5 + 2,19 * 10^9 * x^4 - 3,06 * 10^9 * x^3 + 1,83 * 10^9 * x^2 + 1,2 * 10^8 * x + 1,15 * 10^8 \quad (86)$$

Onde x = altura da barra combustível (m)

Figura 11– Distribuição da densidade de potência para o UO₂ e (Th,U,Pu)O₂ em núcleo com o MOX (Th,U,Pu)O₂.

Distribuição de Densidade de Potência do (ThUPu)O₂ e UO₂



Fonte: O Autor (2022).

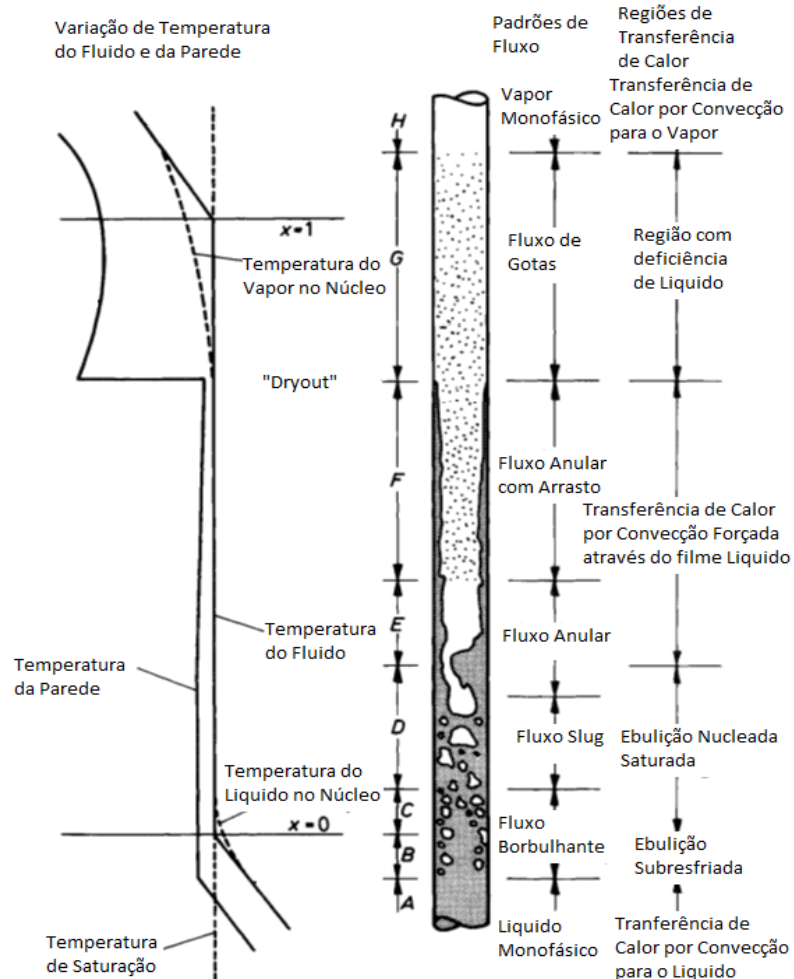
É utilizado o ajuste polinomial para as distribuições das densidades de potencias para poder se definir estas propriedades no OpenFOAM, que requer as equações polinomiais.

3.11 PARTIDA DA EBULIÇÃO NUCLEADA (DNB)

A potência máxima que deve ser produzida no núcleo de um reator deve ter dependência com a capacidade de remoção de calor do canal mais quente bem como com os limites de temperatura do combustível. Para reatores resfriados a água se deseja evitar a ocorrência do fluxo de calor crítico (CHF) ou saída da ebulição nucleada (DNB), que produz uma queda da transferência de calor na superfície diminuindo a eficiência da troca de calor no núcleo (TONG; TANG, 1997).

Um dos objetivos de um projeto de reator nuclear é manter a temperatura menor que a temperatura onde o fluxo de calor se torna crítico, de modo a se evitar qualquer dano ao revestimento do combustível devido a um aumento excessivo da temperatura. Na Figura 12 pode-se os diversos padrões dos regimes de ebulição (TONG; TANG, 1997).

Figura 12– Regimes de ebulição.



Fonte: Adaptado de Todreas e Kazimi (1990).

O limite para o DNB é o chamado DNBR (*Departure from Nucleate boiling Ratio*) que mede a performance do DNB e é definido como sendo o fluxo de calor crítico (q''_{CHF}) pelo fluxo de calor local (q''_{local}):

$$DNBR = \frac{q''_{CHF}}{q''_{local}} \quad (87)$$

O fluxo de calor crítico é encontrado por meio de correlações empíricas. Neste trabalho foi adotado a correlação W-3 para avaliação do DNBR para os cálculos dos canais com diversos combustíveis estudados, visto que para o reator estudado se utilizam desta correlação (KITCHER; CHIRAYATH, 2016). Estando o reator estudado dentro dos limites da correlação, além de ser amplamente utilizada para reatores PWR a bastante tempo.

A correlação W-3 é dada por Mostafa Ghiaasiaan (2008):

$$\begin{aligned} \frac{q''_{CHF}}{10^6} = & \left\{ (2,022 - 0,0004302P) + (0,172 - 0,0000984P) e^{[(18,177 - 0,004129P) * x_e]} \right\} * \\ & \left[(0,1484 - 1,596x_e + 0,1729x_e |x_e|) \frac{G}{10^6} + 1,037 \right] (1,157 - 0,869x_e) [0,2664 + 0,8357 \\ & * e^{(-3,151D_H)}] [0,825 \\ & + 0,000794(h_f - h_{in})]. \end{aligned} \quad (88)$$

As faixas dos parâmetros para utilização da correlação são dadas a seguir:

Pressão	$1000 < P < 2300 \text{ psia}$
Fluxo mássico	$10^6 < G < 5 \times 10^6 \text{ lb/hr.ft}^2$
Diâmetro hidráulico aquecido	$0,2 < D_H < 0,7 \text{ in.}$
Qualidade	$-0,15 < x_e < +0,15$
Entalpia de entrada	$h_{in} \geq 400 \text{ Btu/lb}$
Comprimento da barra	$10 < L_{heat} < 144 \text{ in.}$

Nesta seção foram comentadas as ferramentas utilizadas neste trabalho, valores e equações utilizadas para os cálculos. Agora são apresentados os resultados dos cálculos termohidráulicos realizados.

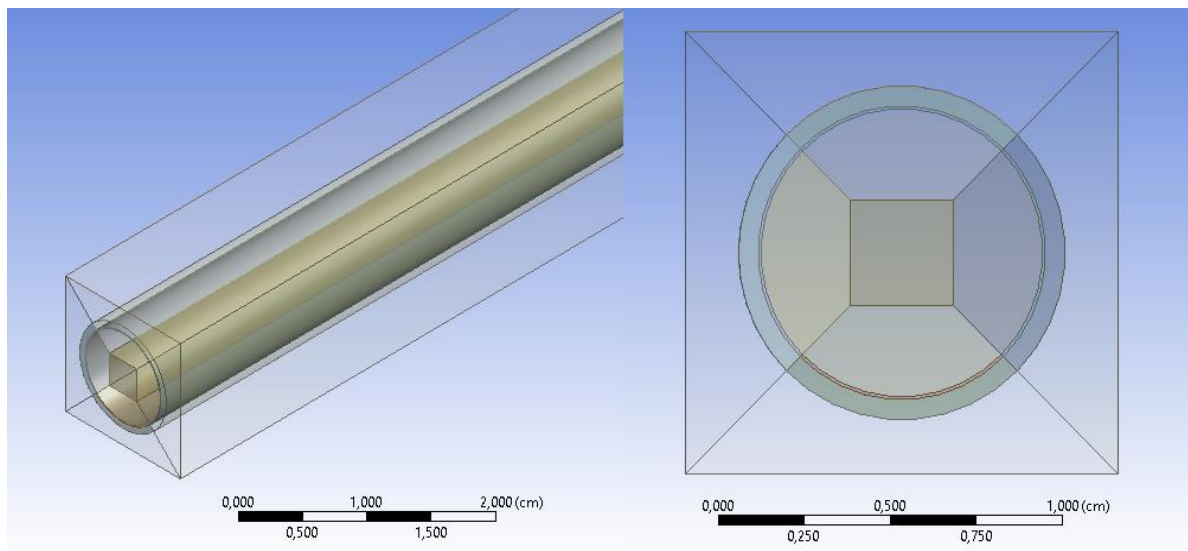
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

São apresentados os resultados obtidos das análises termohidráulicas e discussões sobre os mesmos. Foram avaliados os perfis axial e radial da temperatura no núcleo para as variações de combustíveis estudados.

4.1 GEOMETRIA E MALHA

Foi construído um modelo geométrico para o estudo de um único subcanal do um conjunto do núcleo do reator. A geometria utilizada para a análise do canal é mostrada na Figura 13. Utilizou-se o Design Modeler do software Ansys para o desenvolvimento da geometria deste trabalho.

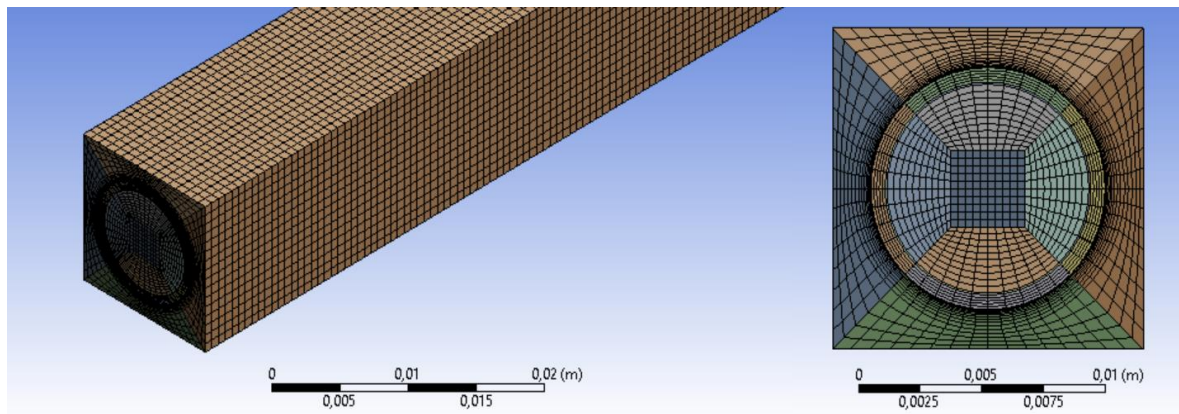
Figura 13– Geometria de um canal do reator mPower.



Fonte: O Autor (2022).

Com a geometria do domínio do estudo, é realizada sua discretização, por meio de uma malha mostrada na Figura 14.

Figura 14– Malha utilizada para as simulações de um canal do reator mPower.

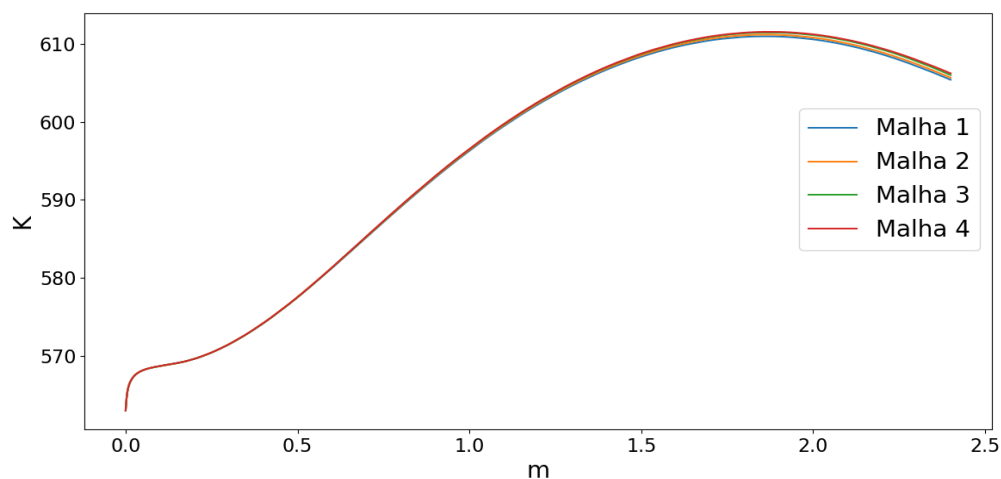


Fonte: O Autor (2022).

A malha foi construída com o Ansys Meshing, a forma da malha e a quantidade de elementos usados para discretizar o espaço depende da geometria e da precisão necessária para a solução. Foi utilizada uma malha estruturada para se realizar o ajuste à geometria do canal, para isso se decompôs a geometria em diversas partes. Próximo as paredes foram realizados refinamentos na malha usando a ferramenta de Boundary Layer de modo que se garanta que os gradientes de velocidade e temperatura sejam resolvidos corretamente. Foi realizada uma análise de dependência da malha, onde se utilizou malhas com diferentes números de elementos para se analisar a variação dos resultados com o tamanho da malha, mostrado na Figura 15. Levando-se em consideração o custo computacional e uma variação máxima de 0,058% entre as malhas foi escolhida a ‘malha 2’ para o estudo.

Figura 15– Gráfico do estudo de dependência das malhas.

Estudo de dependência das malhas



Fonte: Autor (2022).

A malha foi feita com elementos hexaédricos e os tamanhos máximos e mínimos dos elementos de perfil e da altura para cada domínio é sumarizado na Tabela 7 abaixo:

Tabela 7– Tamanhos dos elementos da altura, máximo e mínimo do perfil para os domínios da malha.

	Máximo	Mínimo	Altura
Água	$8,0553 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	$3,8455 \cdot 10^{-5} \text{ m}$	$6,8571 \cdot 10^{-4} \text{ m}$
Zirlo	$7,4537 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	$1,14 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	$2,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
Hélio	$6,5593 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	$8,4 \cdot 10^{-5} \text{ m}$	$2,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
Combustível	$6,4274 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	$1,9747 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	$2,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}$

Fonte: O Autor (2022).

São apresentados os parâmetros de qualidade da malha dos indicadores de qualidade Skewness, Aspect Ratio e Orthogonal Quality da malha final usada, com 3876000 elementos e 4202801 nós. Os parâmetros para avaliação da qualidade da malha são apresentados na Tabela 8. Se observa que os valores para o Aspect Ratio ficaram longe do valor ideal, contudo se trata de um valor ideal teórico, atingido apenas em uma malha bidimensional perfeita, para o caso em OpenFOAM se indica que o valor seja menor que 100, estando os valores do Aspect Ratio muito bons.

Tabela 8– Parâmetros de qualidade da malha.

Parâmetro	Valor			
	Mínimo	Médio	Máximo	Ideal
Orthogonal Quality	0,63214	0,95615	1	1
Aspect Ratio	1,2383	8,4952	28,66	1
Skewness	1,31E-10	0,13533	0,5	0

Fonte: O Autor (2022).

4.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Neste trabalho, são consideradas condições de contorno para as regiões de entrada e de saída de escoamento, além de condições de contorno simétricas e de troca entre as regiões. Para as condições de contorno de entrada se determinam as propriedades da temperatura de entrada do refrigerante no núcleo (563,15K), pressão do sistema (14,8MPa) e o fluxo mássico (0,18kg/s) do canal estudado sendo utilizada a condição flowRateInletVelocity. Para o cálculo do fluxo mássico se

utiliza a vazão total do núcleo (3345kg/s) com a área total de líquido no núcleo e a área de líquido de um subcanal (GARCÍA et al., 2018).

As condições de contorno da interface entre as regiões de contato entre o refrigerante e a superfície do revestimento é de não deslizamento (noSlip), isso significa velocidades nulas de escoamento sobre as superfícies sólidas do revestimento. Para a troca de calor entre as diferentes regiões do modelo é utilizada a condição compressible::turbulentTemperatureCoupledBaffleMixed.

4.3 RESULTADOS DNBR

Foi desenvolvido um código em linguagem Python para o cálculo do DNBR e plotagem dos gráficos. O código vai abrir um arquivo Excel escolhido pelo usuário a partir de uma caixa de diálogo. Os valores da pressão (P), qualidade (x_e) e o fluxo de calor local (q''_{local}) são lidos e utilizados no cálculo do CHF pela correlação W-3. Os valores do DNBR pelo comprimento da barra combustível e os valores do CHF e do fluxo de calor local também são plotados ao longo da barra combustível. O código é disponibilizado no Apêndice A.

Com o canal mais quente dos conjuntos combustíveis, utilizou-se o ponto onde o DNBR é mínimo e os resultados para cada combustível estudado são apresentados na Tabela 9.

Tabela 9– Resultados valores mínimos do DNBR para os combustíveis.

Combustível	DNBR Mínimo
UO2_(Th,U)	2,16
Th,U	3,30
UO2_(Th,Pu)	2,35
Th,Pu	2,91
UO2_(Th,U,Pu)	1,74
Th,U,Pu	2,21

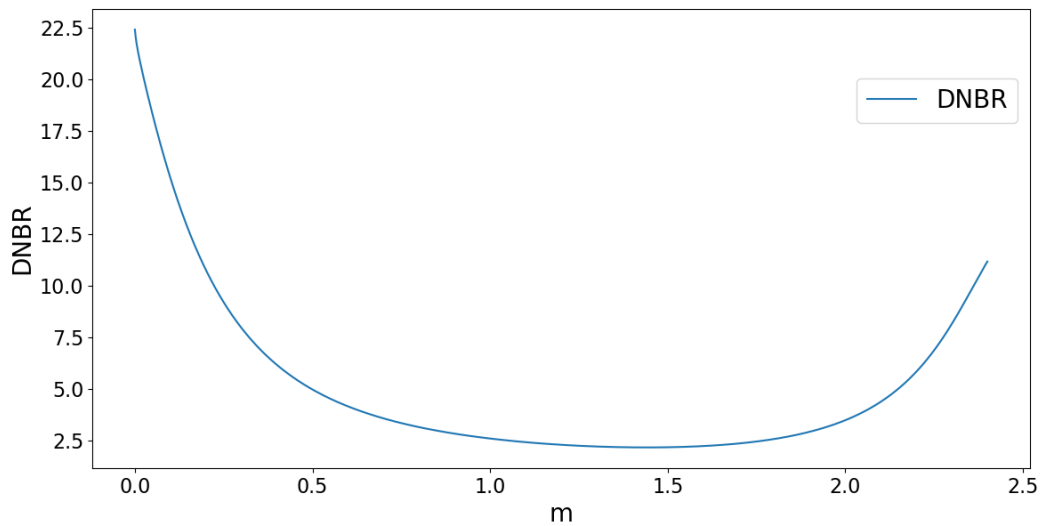
Fonte: O Autor (2022).

Se observa que todos os valores ficam acima de 1,3, que é o valor mínimo do DNBR para reatores PWR (LAMARSH; BARATTA, 2001). Sendo o DNBR a relação do fluxo de calor necessário para provocar a saída da ebulição nucleada com o fluxo de calor local da barra de combustível, temos os valores mínimos que representam o

ponto mais próximo de ocorrer o DNB no subcanal. Os valores obtidos para os valores mínimos são elevados, isso mostra uma baixa chance de ocorrer um DNB.

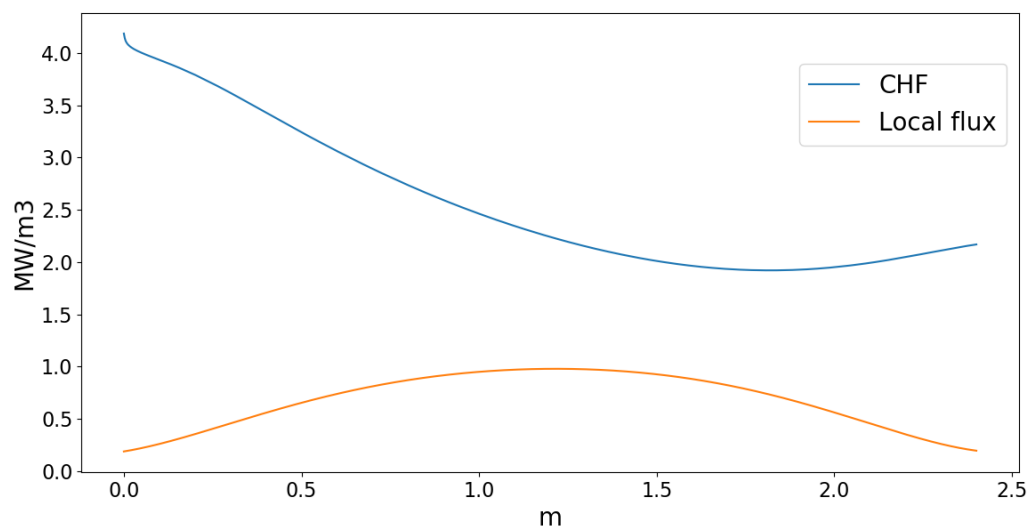
Com o uso da correlação W-3 e os parâmetros do reator foram calculados os valores do DNBR, CHF e fluxo de calor local, para todos os combustíveis estudados foram plotados os gráficos.

Figura 16– Gráfico do DNBR ao longo da barra combustível de UO₂ para o MOX (Th,U)O₂.



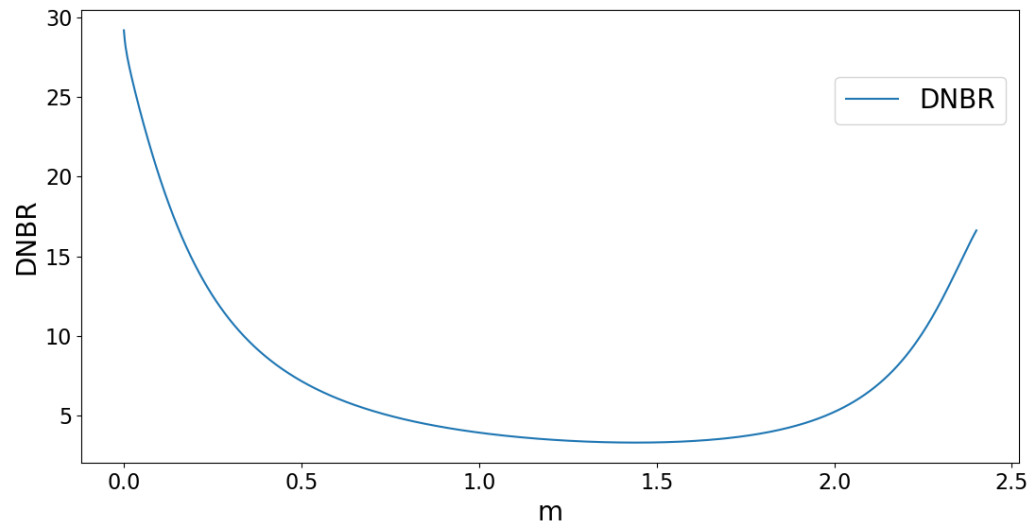
Fonte: O Autor (2022).

Figura 17– Gráfico do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de UO₂ para o MOX (Th,U)O₂.



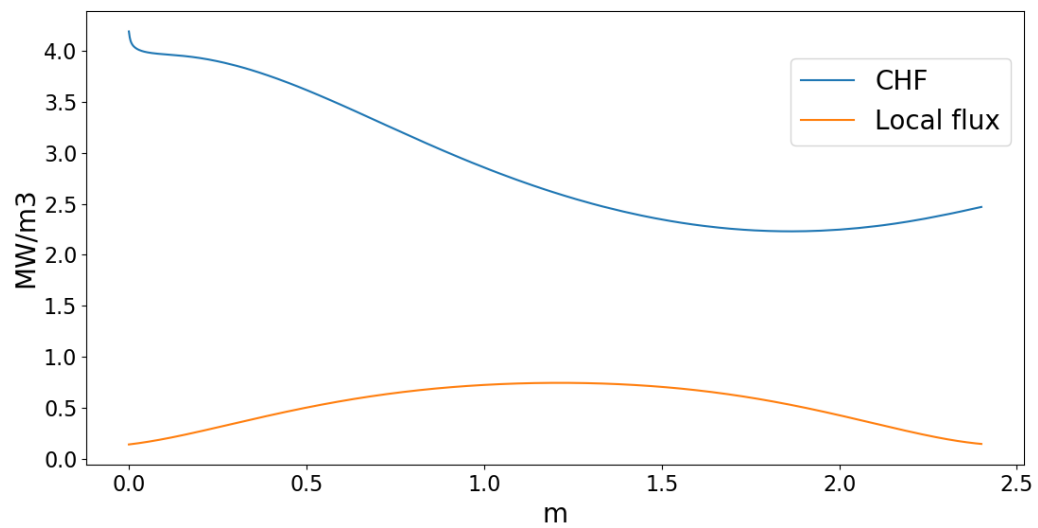
Fonte: O Autor (2022).

Figura 18– Gráfico do DNBR ao longo da barra combustível de (Th,U)O₂.



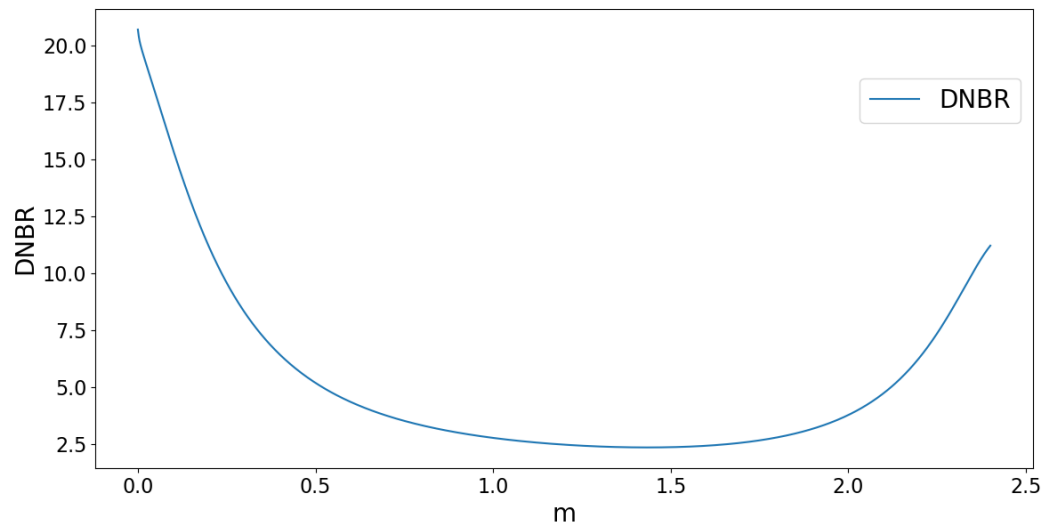
Fonte: O Autor (2022).

Figura 19– Gráfico do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de (Th,U)O₂.



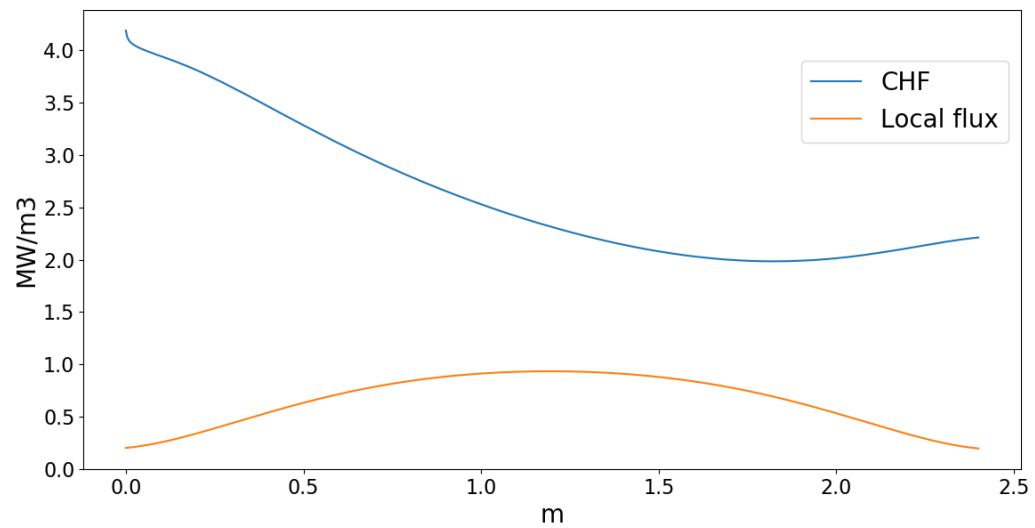
Fonte: O Autor (2022).

Figura 20– Gráfico do DNBR ao longo da barra combustível de UO₂ para o MOX (Th,Pu)O₂.

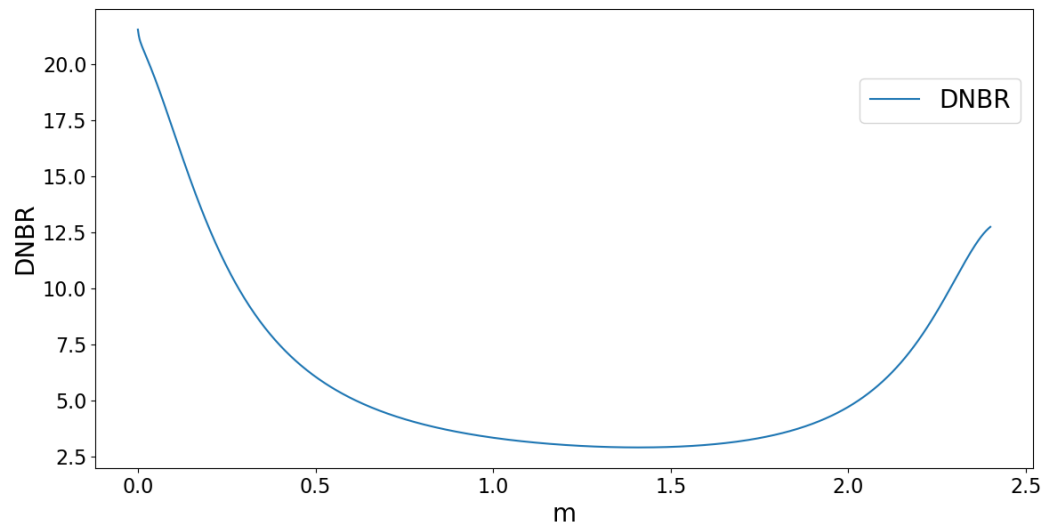


Fonte: O Autor (2022).

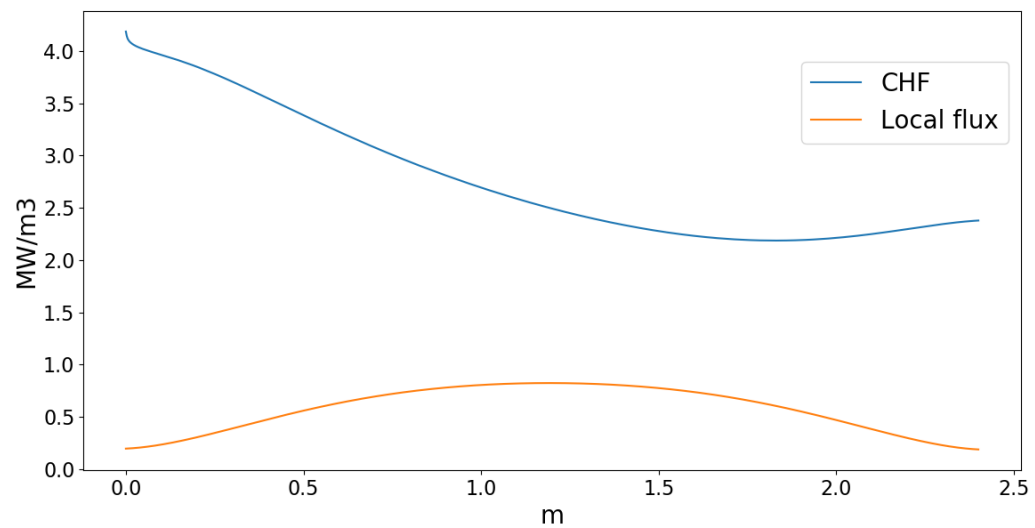
Figura 21– Gráfico do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de UO₂ para o MOX (Th,Pu)O₂.



Fonte: O Autor (2022).

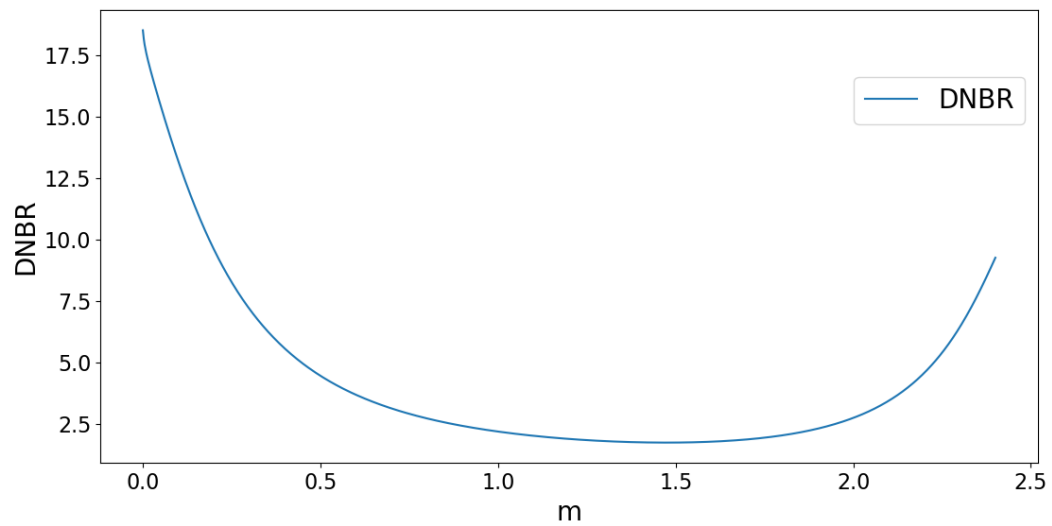
Figura 22– Gráfico do DNBR ao longo da barra combustível de (Th,Pu)O₂.

Fonte: O Autor (2022).

Figura 23– Gráfico do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de (Th,Pu)O₂.

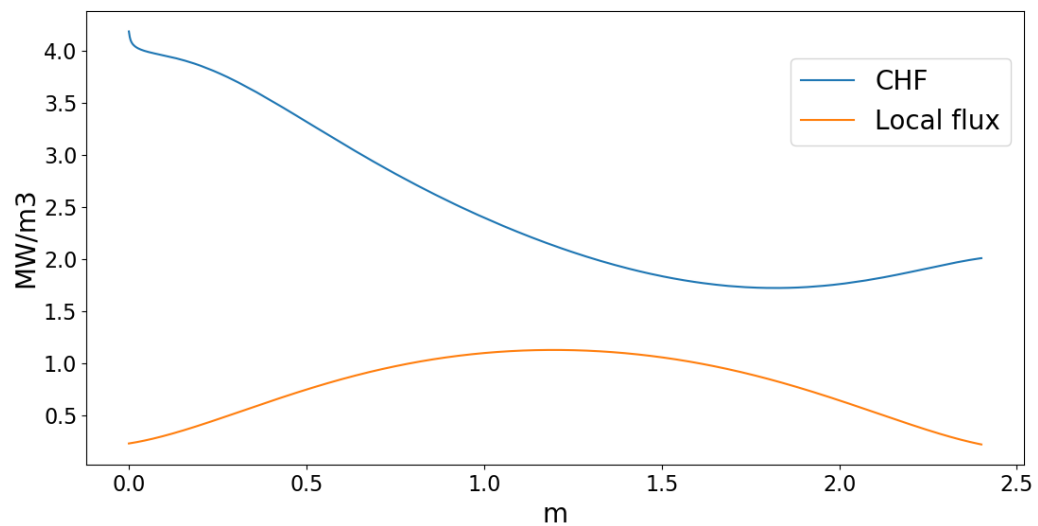
Fonte: O Autor (2022).

Figura 24– Gráfico do DNBR ao longo da barra combustível de UO₂ para o MOX (Th,U,Pu)O₂.



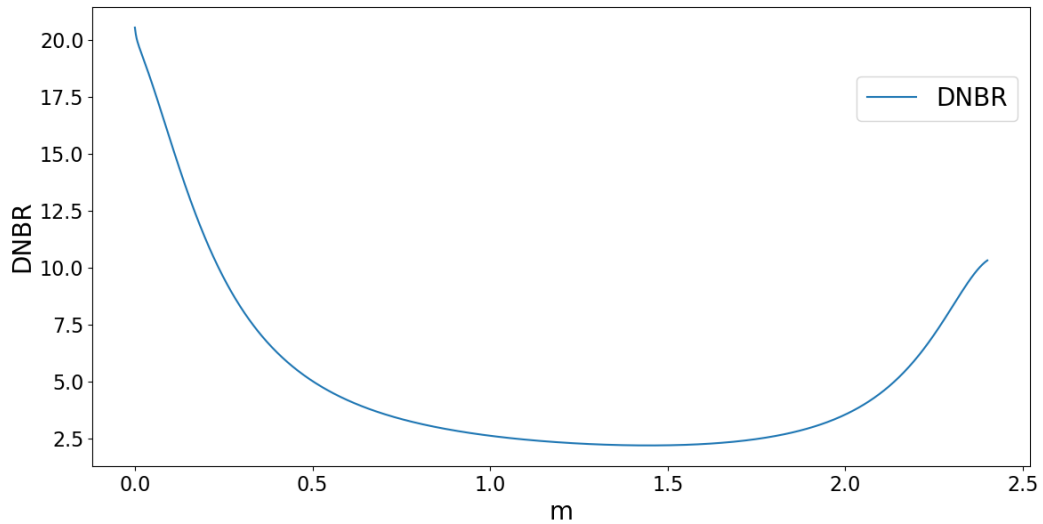
Fonte: O Autor (2022).

Figura 25– Gráfico do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de UO₂ para o MOX (Th,U,Pu)O₂.



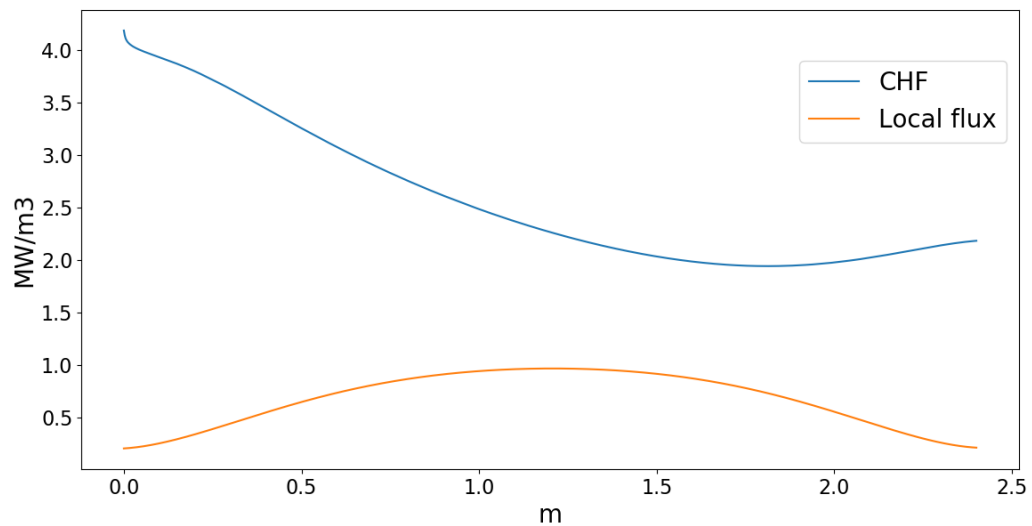
Fonte: O Autor (2022).

Figura 26– Gráfico do DNBR ao longo da barra combustível de (Th,U,Pu)O₂.



Fonte: O Autor (2022).

Figura 27– Gráfico do CHF e fluxo de calor local ao longo da barra combustível de (Th,U,Pu)O₂.



Fonte: O Autor (2022).

4.4 ANÁLISE TERMOHIDRÁULICA DO SUBCANAL COM CFD

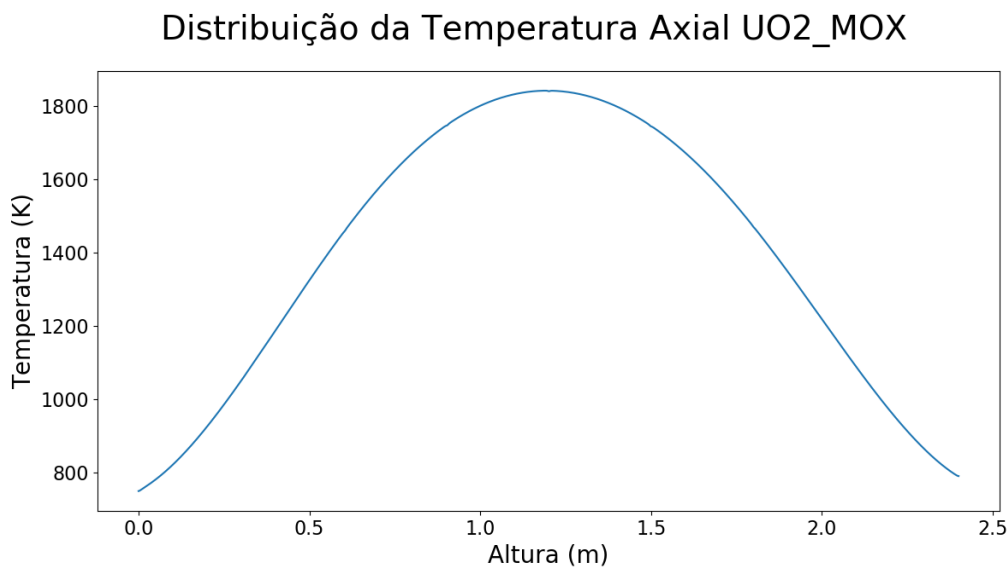
Foi realizado o estudo termohidráulico dos subcanais com as maiores potências das três configurações com misturas de combustíveis escolhidos nesse estudo. É considerado o início do ciclo (BOC) para o combustível, ou seja, com combustível novo, e sem considerar o uso de absorventes queimáveis de modo que a potência de operação será menor, portanto as temperaturas são sobrestimadas.

É considerado para cada núcleo com combustível MOX o caso do conjunto com o combustível MOX, bem como o caso do conjunto com o combustível UO_2 , uma vez que o subcanal de maior potência do UO_2 apresenta uma potência maior que o subcanal com MOX, sendo assim fundamental sua análise.

4.4.1 Configuração do Núcleo com $(\text{Th,U})\text{O}_2$

A distribuição axial da temperatura no combustível é apresentada passando pelo ponto de máxima da temperatura, o centro do elemento combustível. Na Figura 28 é apresentada a distribuição axial da temperatura do combustível ao longo da altura para o subcanal com UO_2 , a temperatura máxima obtida foi de 1842,71K, bem abaixo dos 3120K do ponto de fusão.

Figura 28– Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,U})\text{O}_2$

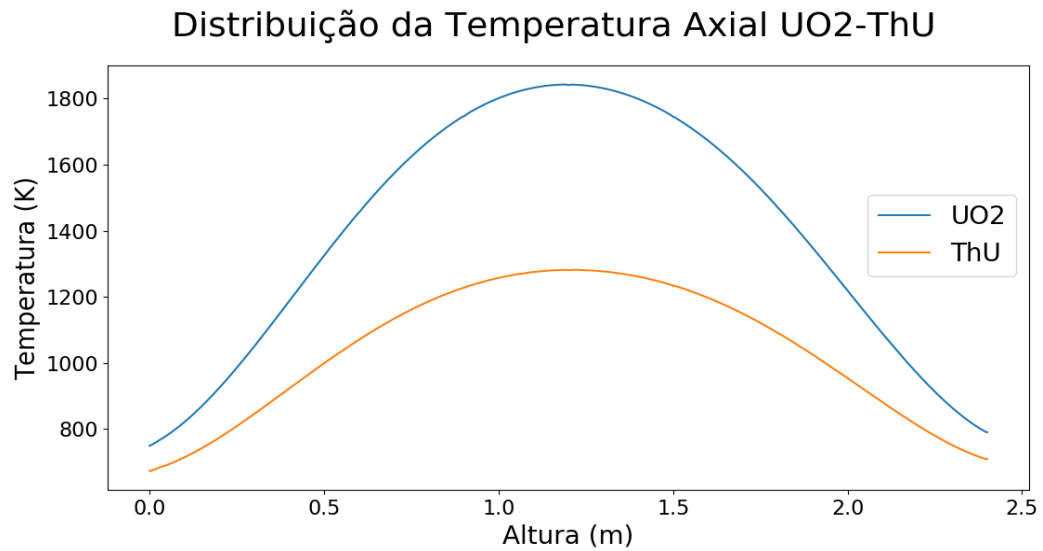


Fonte: O Autor (2022).

Para o subcanal com $(\text{Th,U})\text{O}_2$, a temperatura máxima obtida foi de 1281,6K, bem abaixo dos 3220K do ponto de fusão do $(\text{Th,U})\text{O}_2$. Se observa que próximo ao final do subcanal ocorre um aumento na temperatura do combustível, isso se deve a distribuição de potência do combustível que próximo ao mesmo ponto apresenta um aumento da potência. A temperatura do combustível vai aumentando à medida que passa pelo subcanal até próximo da metade, seguindo a distribuição de potência do combustível. A diferença entre as distribuições de temperatura para os subcanais de

maior potência para os conjuntos carregados com UO_2 e $(\text{Th,U})\text{O}_2$ é mostrado na Figura 29, a diferença entre as temperaturas máximas dos combustíveis é de 561,11K.

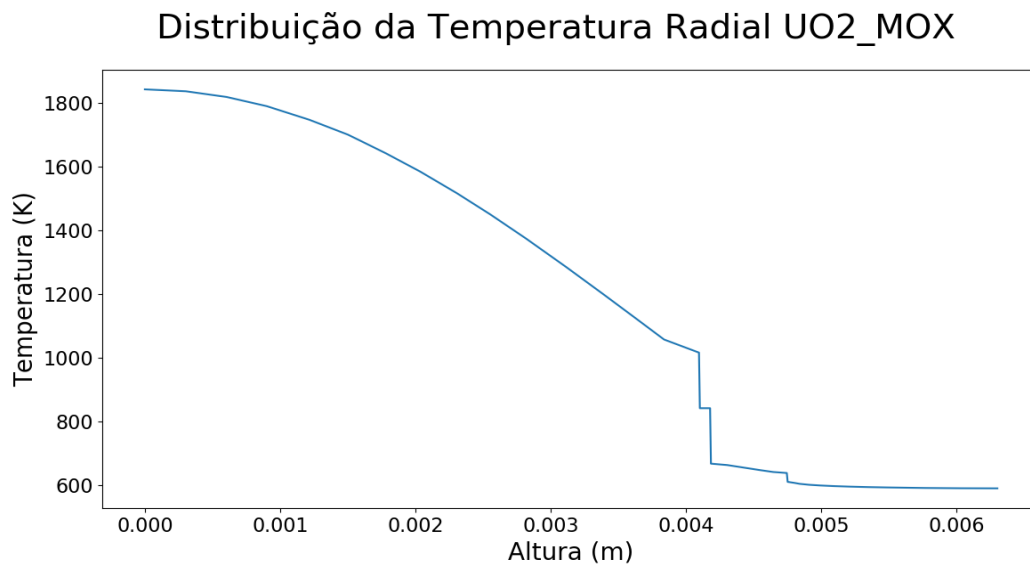
Figura 29– Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 e $(\text{Th,U})\text{O}_2$



Fonte: O Autor (2022).

A distribuição radial da temperatura no subcanal é apresentada passando pelo ponto de máxima da temperatura do combustível, do centro do combustível até o refrigerante. Na Figura 30 é apresentada a distribuição radial da temperatura para o subcanal com UO_2 .

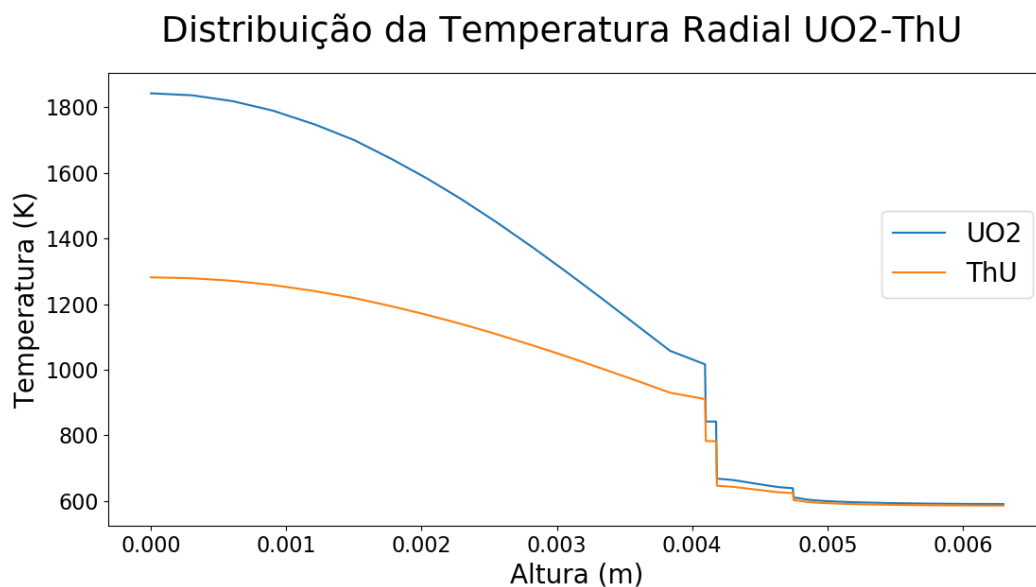
Figura 30– Distribuição da temperatura radial para o UO_2 em núcleo com o MOX $(\text{Th,U})\text{O}_2$



Fonte: O Autor (2022).

Se observa que a temperatura apresenta diferenças entre os diferentes materiais que compõem o subcanal, independentemente do combustível. Comparando-se as distribuições se percebe que, mesmo com uma grande diferença na temperatura máxima no centro dos combustíveis, à medida que se aproxima do hélio essa diferença vai se reduzindo, de modo que a diferença na temperatura do refrigerante é relativamente pequena. A diferença entre as distribuições de temperatura radial para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO_2 e $(\text{Th,U})\text{O}_2$ é mostrado na Figura 31.

Figura 31– Distribuição da temperatura radial para o UO_2 e $(\text{Th,U})\text{O}_2$

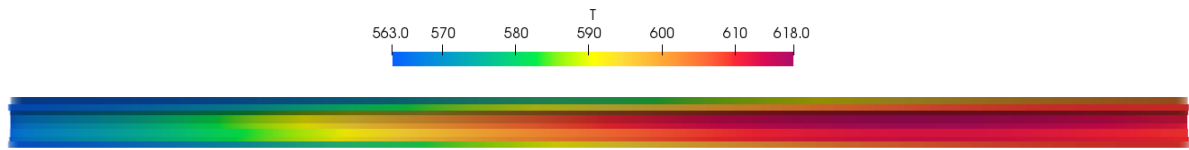


Fonte: O Autor (2022).

Para o revestimento em ambos os combustíveis a temperatura ficou bem abaixo dos 1477,59K, que é a temperatura reportada como limite para casos de acidente (HACHE; CHUNG, 2001).

É apresentada a distribuição axial da temperatura do refrigerante ao longo do subcanal com maior potência no conjunto contendo $(\text{Th,U})\text{O}_2$ e no conjunto com UO_2 , passando pelo ponto de maior temperatura do refrigerante, ou seja, no revestimento. Para o refrigerante na pressão do reator a temperatura de saturação é de 614,23K. Na Figura 32 é mostrada a distribuição axial da água para o subcanal com UO_2 , a temperatura máxima obtida foi de 618,04K na fronteira com o revestimento.

Figura 32– Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o UO_2 em núcleo com o MOX (Th,U) O_2 , na fronteira com o revestimento.

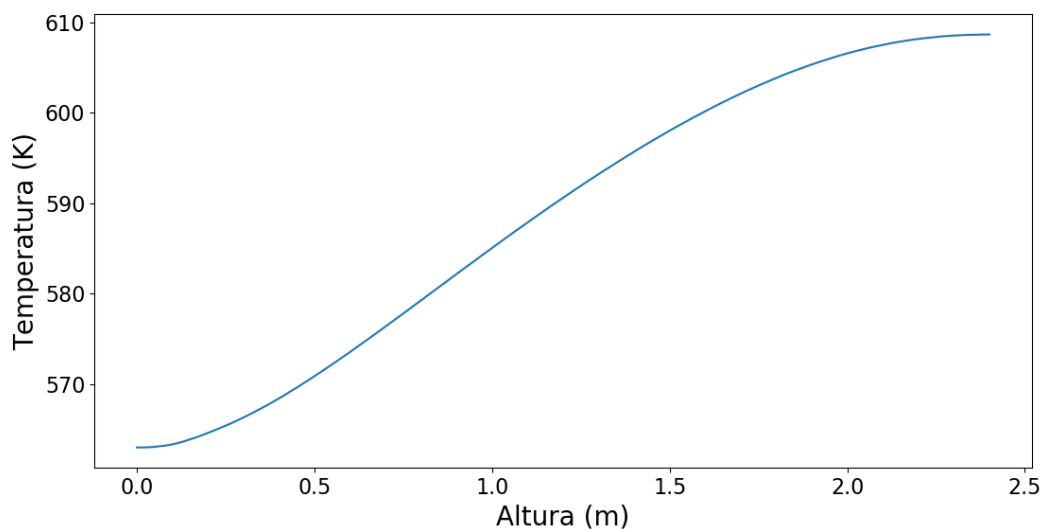


Fonte: O Autor (2022).

A distribuição axial da temperatura no centro da água, ou seja, entre duas barras combustíveis a uma distância de 0,0063m do centro do combustível, na região do *bulk* da água, é apresentada. Na Figura 33 é apresentada a distribuição axial da temperatura no centro da água, ao longo da altura para o subcanal com UO_2 , a temperatura máxima obtida foi de 608,68K, abaixo da temperatura de saturação da água. Aqui a temperatura máxima foi observada no final do subcanal, diferente do comportamento próximo a parede do revestimento.

Figura 33– Distribuição da temperatura axial no centro da água para o UO_2 em núcleo com o MOX (Th,U) O_2 .

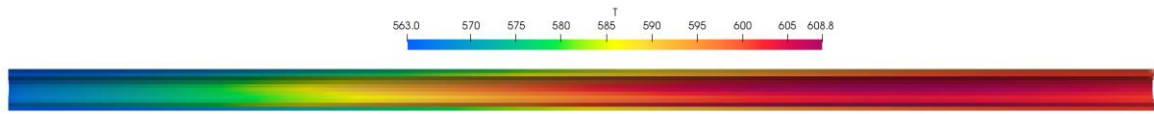
Distribuição da Temperatura Axial no Centro da Água_ UO_2 _ThU



Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 34 é mostrada a distribuição axial da temperatura da água para o subcanal com (Th,U) O_2 , a temperatura máxima obtida foi de 608,8K.

Figura 34– Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o MOX (Th,U)O₂, na fronteira com o revestimento.

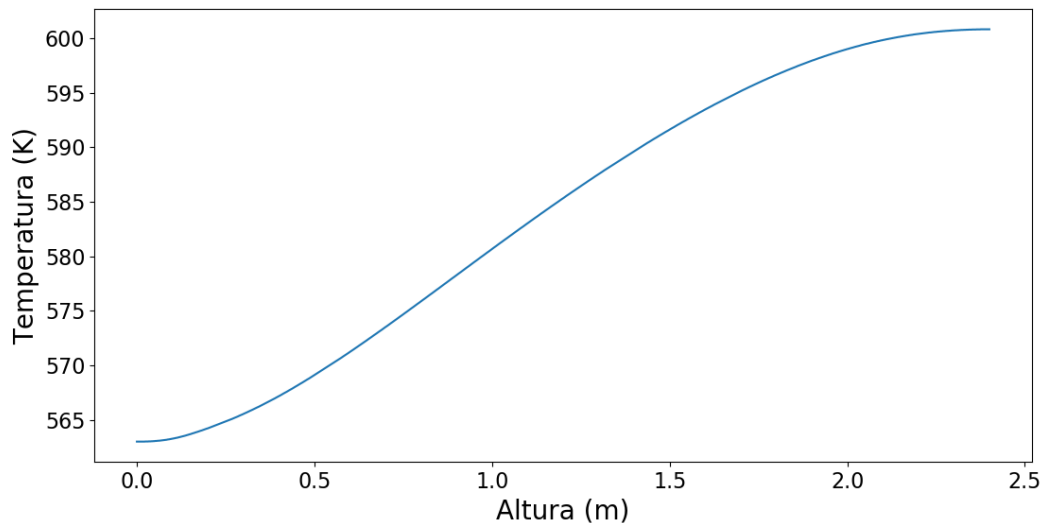


Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 35 é apresentada a distribuição axial da temperatura no centro da água, ao longo da altura para o subcanal com (Th,U)O₂, a temperatura máxima obtida foi de 600,8K.

Figura 35– Distribuição da temperatura axial no centro da água para o MOX (Th,U)O₂

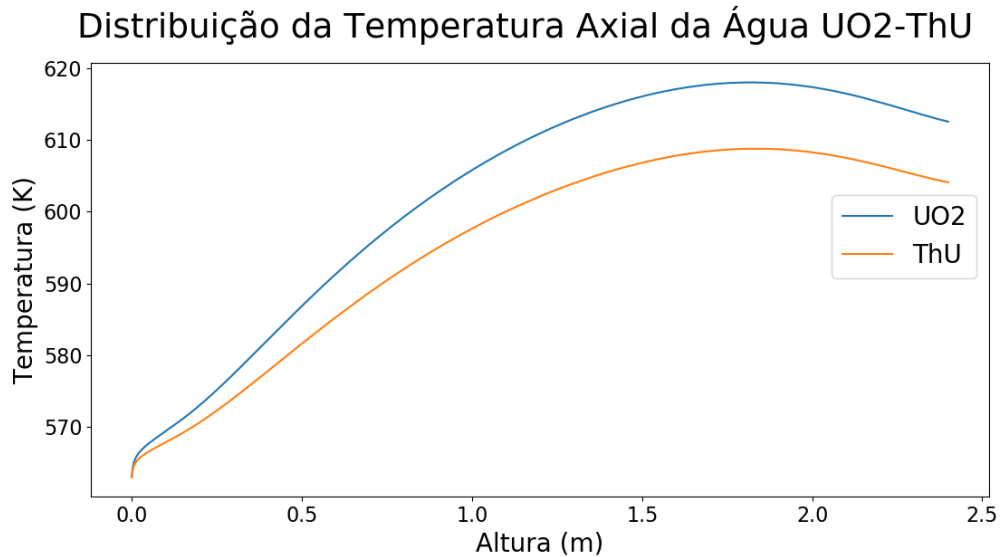
Distribuição da Temperatura Axial no Centro da Água_ThU



Fonte: O Autor (2022).

A temperatura do refrigerante vai aumentando à medida que passa pelo subcanal retirando o calor gerado pelo combustível. A diferença entre as distribuições de temperatura para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO₂ e (Th,U)O₂ é mostrado na Figura 36, a diferença entre as temperaturas máximas do refrigerante é de 9,24K.

Figura 36– Distribuição da temperatura axial da água para o UO_2 e $(\text{Th,U})\text{O}_2$

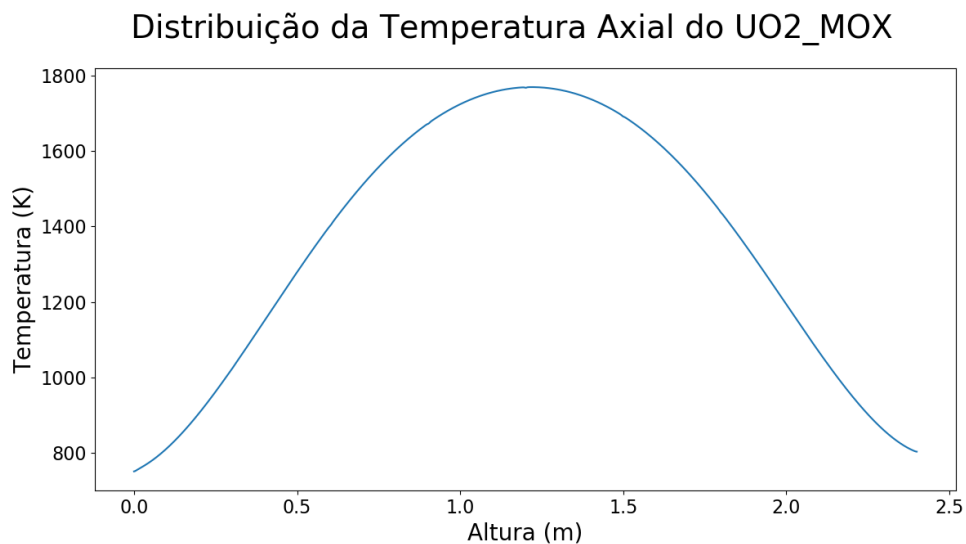


Fonte: O Autor (2022).

4.4.2 Configuração do Núcleo com $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$

A distribuição axial da temperatura no combustível é apresentada passando pelo ponto de máxima da temperatura, o centro do combustível. Na Figura 37 é apresentada a distribuição axial da temperatura do combustível ao longo da altura para o subcanal com UO_2 , a temperatura máxima obtida foi de 1769,04K, bem abaixo do ponto de fusão do UO_2 .

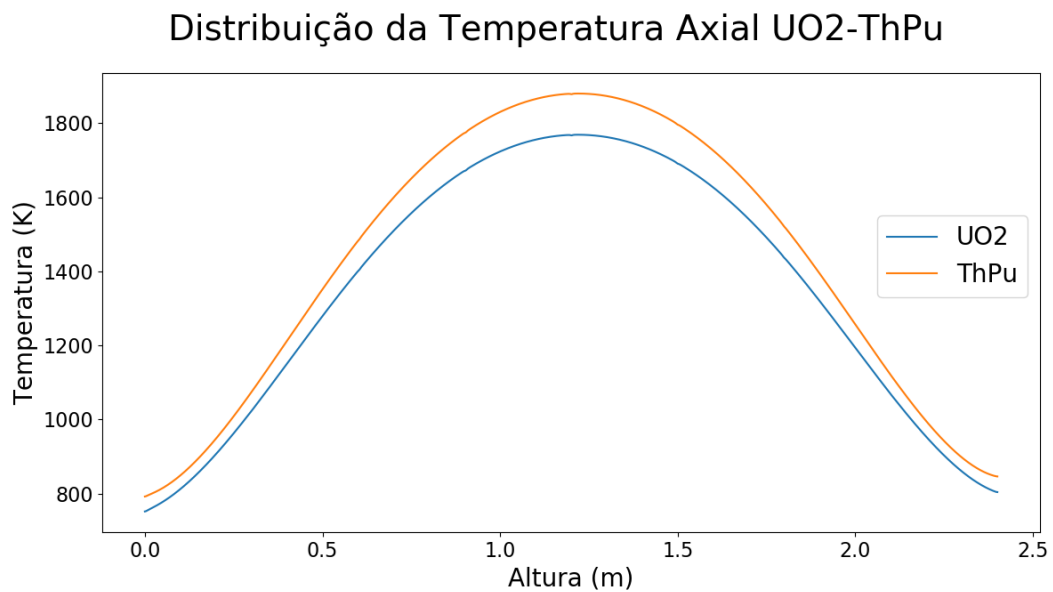
Figura 37– Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 em núcleo com o $\text{MOX} (\text{Th,Pu})\text{O}_2$



Fonte: O Autor (2022).

Para o subcanal com $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$, a temperatura máxima obtida foi de 1880,28K, bem abaixo dos 3000K do ponto de fusão do $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$. A temperatura do combustível vai aumentando à medida que passa pelo subcanal até próximo da metade, seguindo a distribuição de potência do combustível. A diferença entre as distribuições de temperatura para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO_2 e $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ é mostrado na Figura 38, a diferença entre as temperaturas máximas dos combustíveis é de 111,24K.

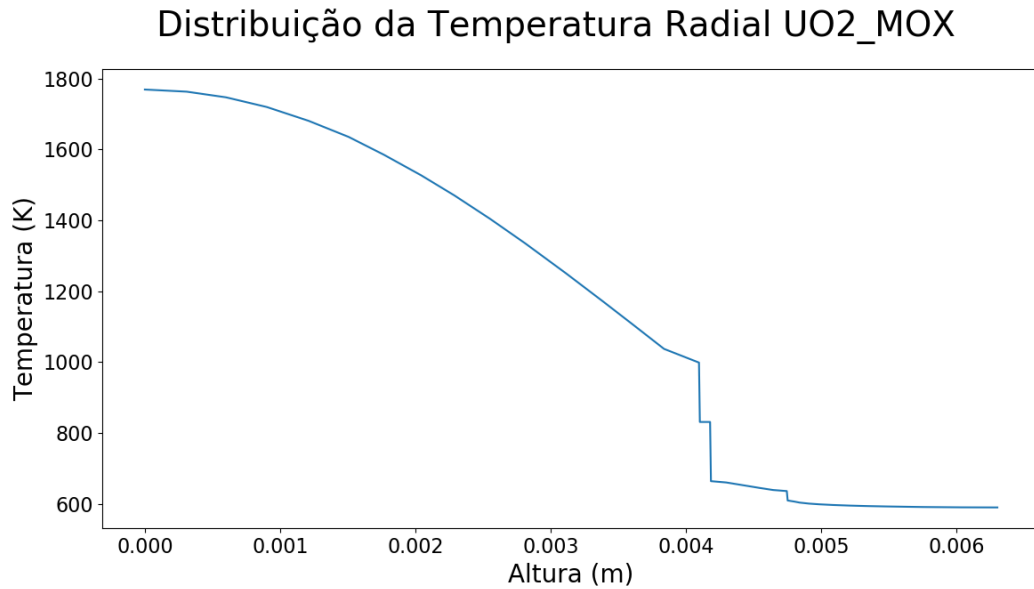
Figura 38– Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 e $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$



Fonte: O Autor (2022).

A distribuição Radial da temperatura no subcanal é apresentada passando pelo ponto de máxima da temperatura do combustível, do centro do combustível até o refrigerante. Na Figura 39 é apresentada a distribuição radial da temperatura para o subcanal com UO_2 .

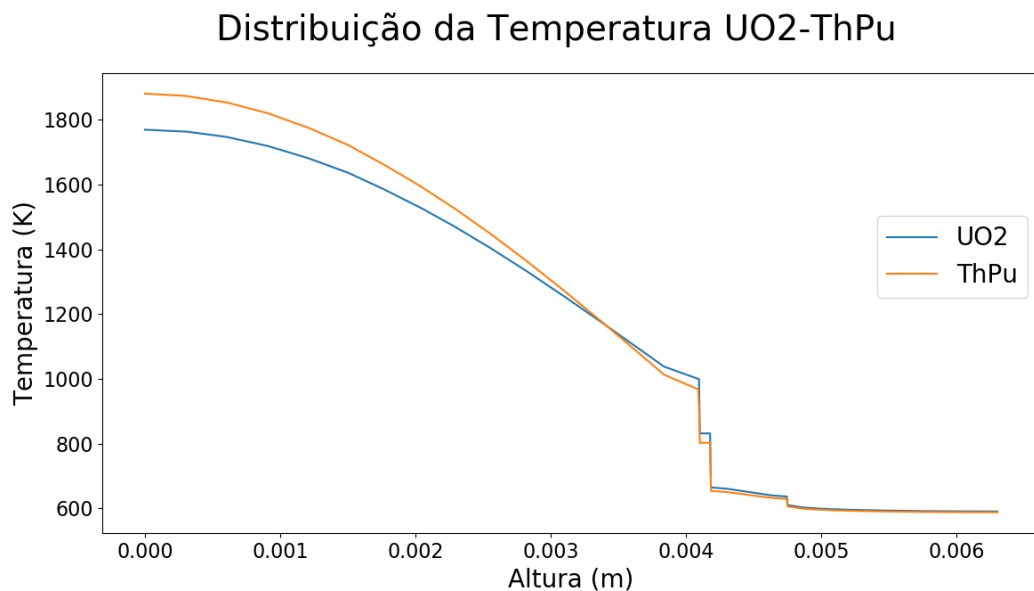
Figura 39– Distribuição da temperatura radial para o UO₂ em núcleo com o MOX (Th,Pu)O₂



Fonte: O Autor (2022).

Comparando-se as distribuições se percebe que, apesar de a temperatura máxima do combustível do (Th,Pu)O₂ ser maior que a do UO₂, se percebe que a temperatura do refrigerante no subcanal com (Th,Pu)O₂ é menor, isso se deve pois próximo ao revestimento a temperatura do combustível do (Th,Pu)O₂ é menor que a do UO₂. A diferença entre as distribuições de temperatura radial para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO₂ e (Th,Pu)O₂ é mostrado na Figura 40.

Figura 40– Distribuição da temperatura radial para o UO₂ e (Th,Pu)O₂

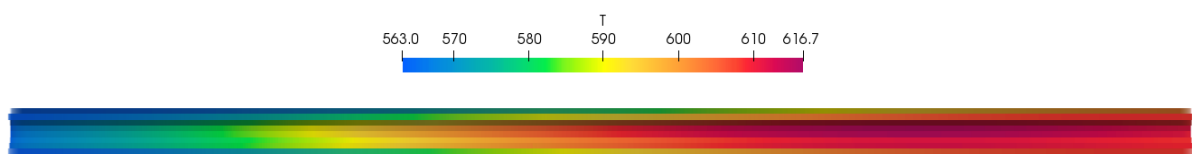


Fonte: O Autor (2022).

Para o revestimento em ambos os combustíveis a temperatura ficou bem abaixo dos 1477,59K, que é a temperatura reportada como limite para casos de acidente.

É apresentada a distribuição axial da temperatura do refrigerante ao longo do subcanal com maior potência no conjunto contendo (Th,Pu)O₂ e no conjunto com UO₂, passando pelo ponto de maior temperatura do refrigerante, ou seja, no revestimento. Na Figura 41 é mostrada a distribuição axial da água para o subcanal com UO₂, a temperatura máxima obtida foi de 616,65K.

Figura 41– Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o UO₂ em núcleo com o MOX (Th,Pu)O₂,na fronteira com o revestimento.

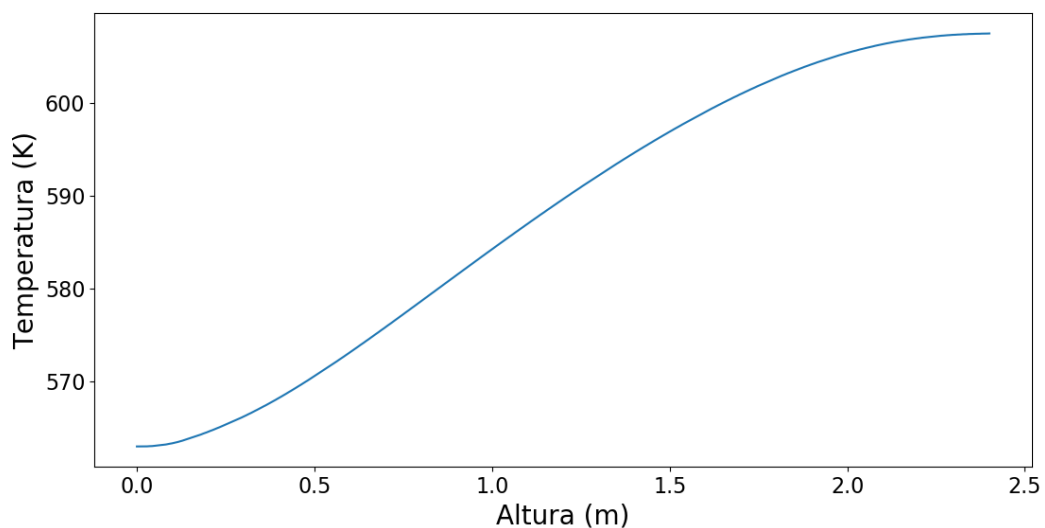


Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 42 é apresentada a distribuição axial da temperatura no centro da água, ao longo da altura para o subcanal com UO₂, a temperatura máxima obtida foi de 607,43K.

Figura 42– Distribuição da temperatura axial no centro da água para o UO₂ em núcleo com o MOX (Th,Pu)O₂.

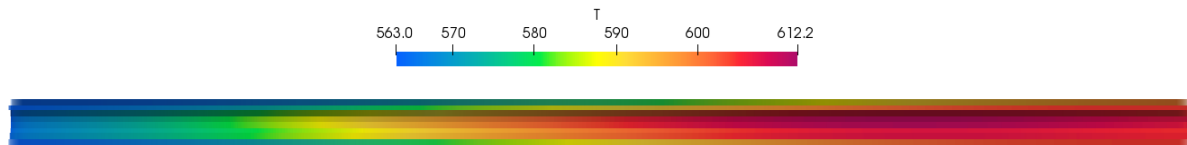
Distribuição da Temperatura Axial no Centro da Água_UO₂_ThPu



Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 43 é mostrada a distribuição axial da temperatura da água para o subcanal com $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$, a temperatura máxima obtida foi de 612,16K.

Figura 43– Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$, na fronteira com o revestimento.

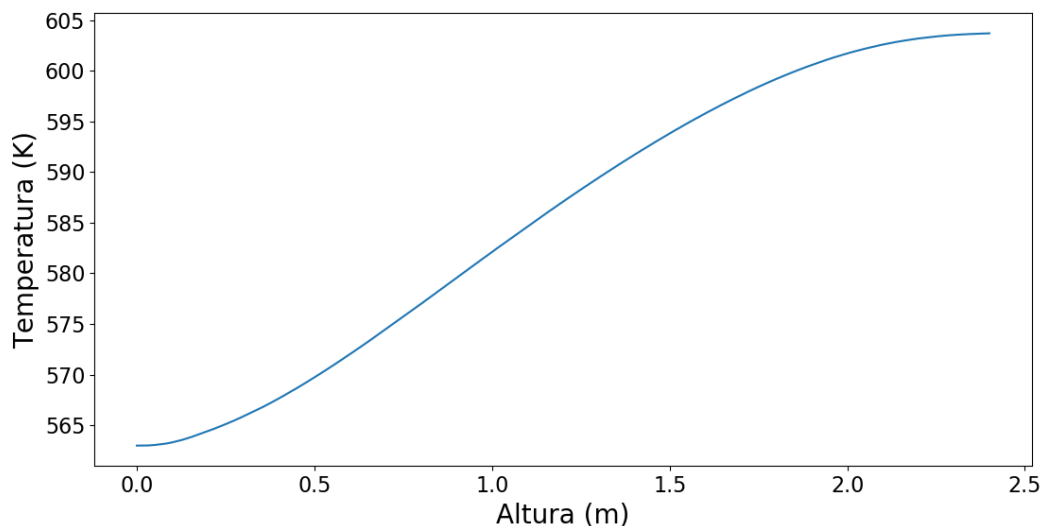


Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 44 é apresentada a distribuição axial da temperatura no centro da água, ao longo da altura para o subcanal com $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$, a temperatura máxima obtida foi de 603,69K.

Figura 44– Distribuição da temperatura axial no centro da água para o MOX $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$.

Distribuição da Temperatura Axial no Centro da Água_ThPu

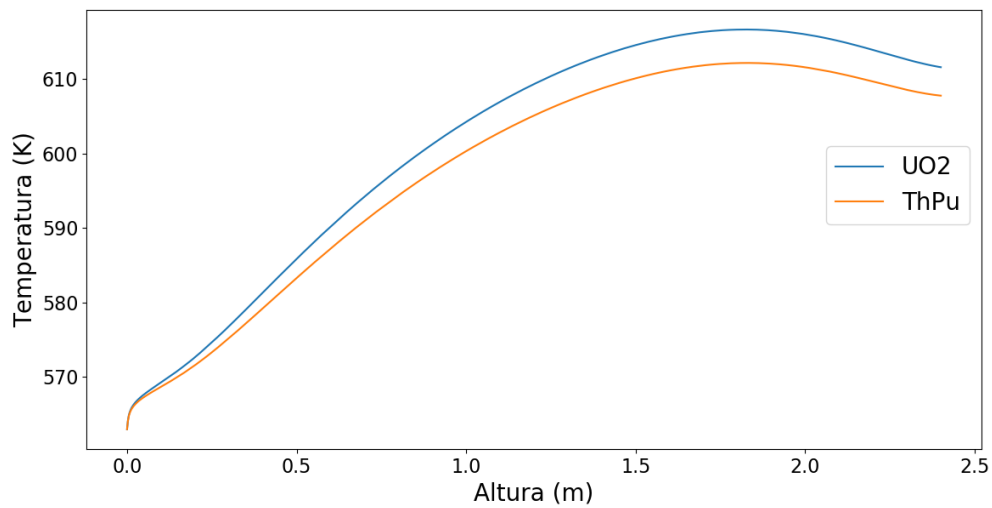


Fonte: O Autor (2022).

Se observa novamente o comportamento da temperatura do refrigerante que aumenta à medida que passa pelo subcanal retirando o calor gerado pelo combustível. A diferença entre as distribuições de temperatura para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO_2 e $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ é mostrado na Figura 45, a diferença entre as temperaturas máximas do refrigerante é de 4,49K.

Figura 45– Distribuição da temperatura axial da água para o UO_2 e $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$

Distribuição da Temperatura Axial da Água $\text{UO}_2\text{-ThPu}$



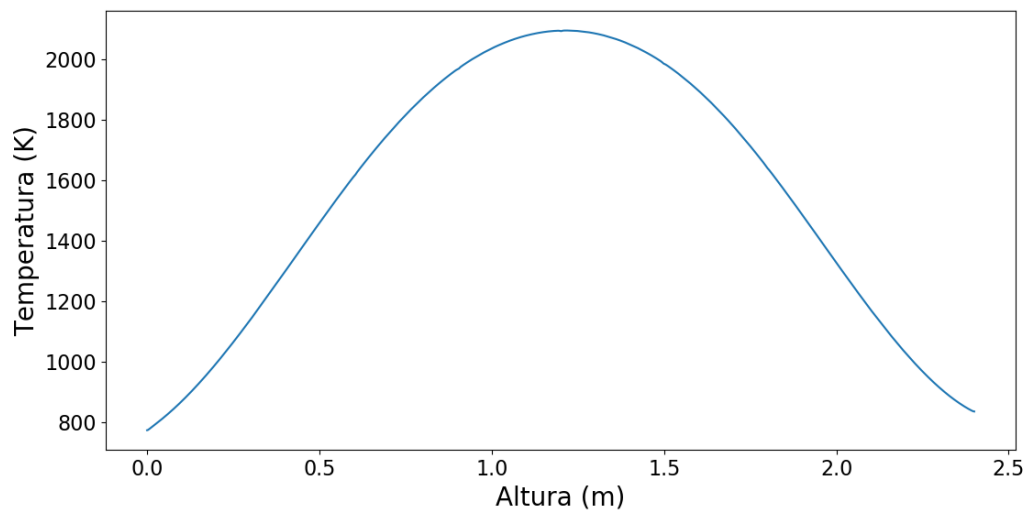
Fonte: O Autor (2022).

4.4.3 Configuração do Núcleo com $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$

A distribuição axial da temperatura no combustível é apresentada passando pelo ponto de máxima da temperatura, o centro do combustível. Na Figura 46 é apresentada a distribuição axial da temperatura do combustível ao longo da altura para o subcanal com UO_2 , a temperatura máxima obtida foi de 2094,18K, bem abaixo do ponto de fusão do UO_2 .

Figura 46– Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 em núcleo com o $\text{MOX } (\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$

Distribuição da Temperatura Axial do $\text{UO}_2\text{-MOX}$

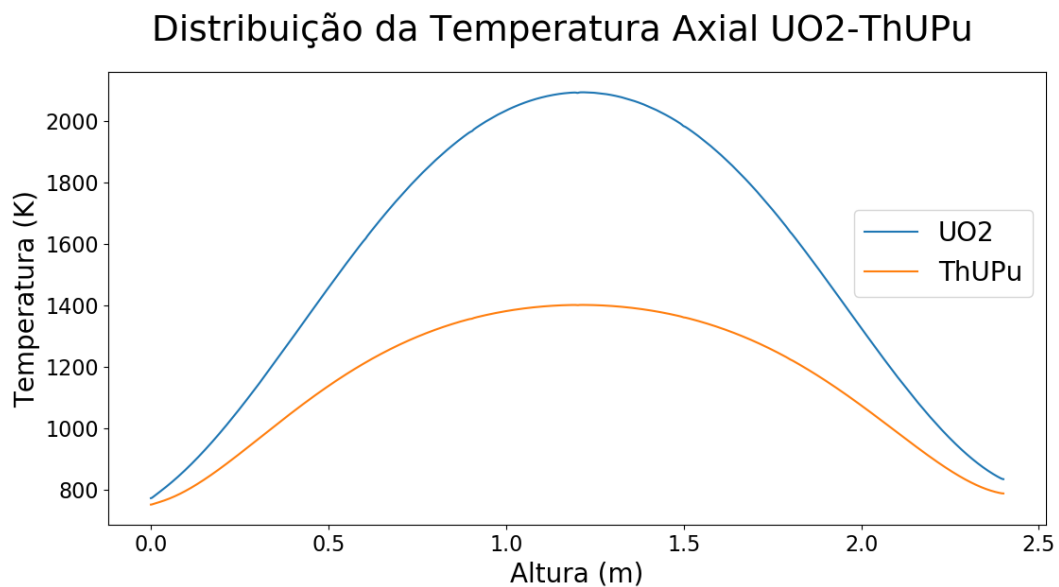


nte: O Autor (2022).

Para o subcanal com $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$, a temperatura máxima obtida foi de 1401,78K, bem abaixo dos 3488,89K do ponto de fusão do $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$.

A temperatura do combustível $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$ durante um trecho da altura é maior que a temperatura do combustível UO_2 , seguindo a distribuição de potência. A diferença entre as distribuições de temperatura para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$ é mostrado na Figura 47, a diferença entre as temperaturas máximas dos combustíveis é de 692,4K.

Figura 47– Distribuição da temperatura axial do combustível para o UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$

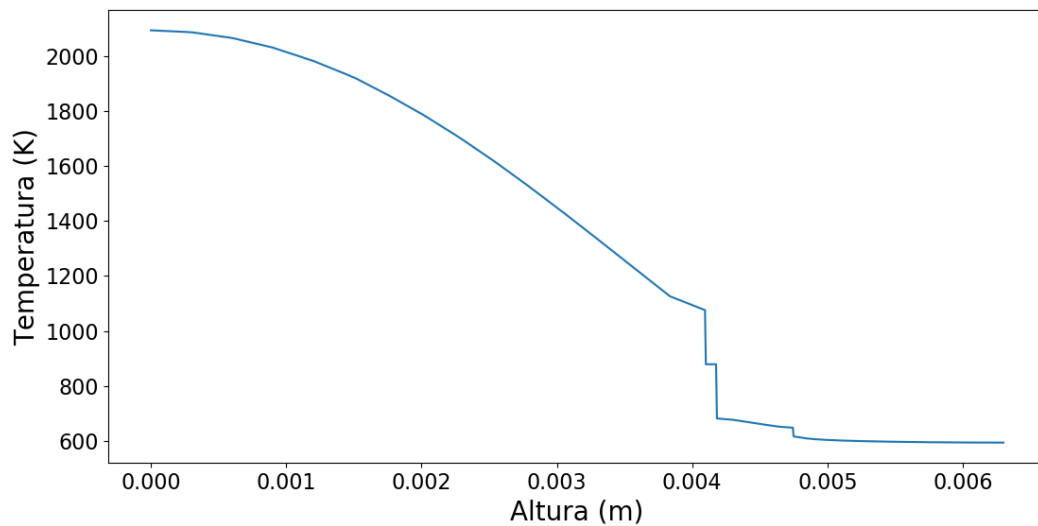


Fonte: O Autor (2022).

A distribuição Radial da temperatura no subcanal é apresentada passando pelo ponto de máxima da temperatura do combustível, do centro do combustível até o refrigerante. Na Figura 48 é apresentada a distribuição radial da temperatura para o subcanal com UO_2 .

Figura 48– Distribuição da temperatura radial para o UO₂ em núcleo com o MOX (Th,U,Pu)O₂

Distribuição da Temperatura Radial do UO₂_MOX

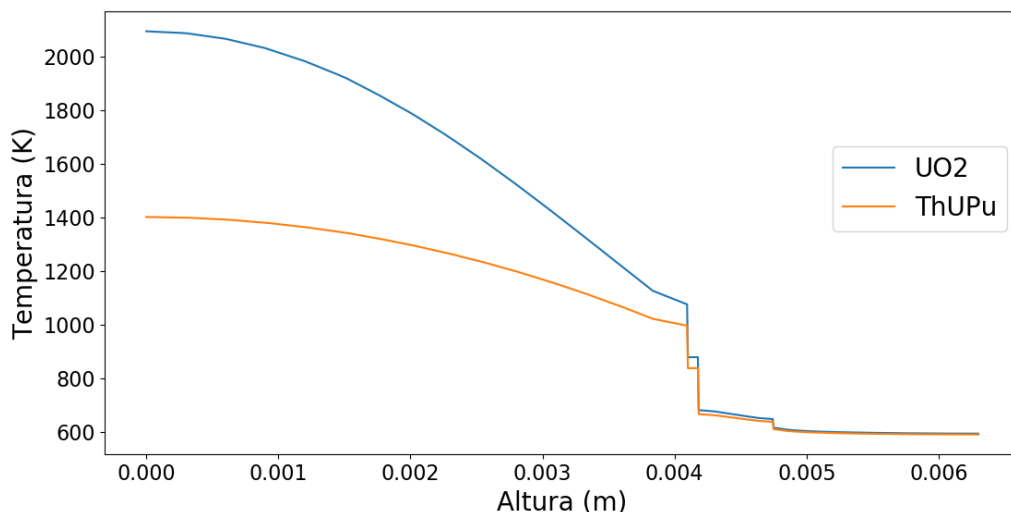


Fonte: O Autor (2022).

Comparando-se as distribuições se percebe que, mesmo com uma grande diferença na temperatura máxima no centro dos combustíveis, à medida que se aproxima do hélio essa diferença vai se reduzindo, de modo que a diferença na temperatura do refrigerante é relativamente pequena, assim como ocorre com o caso do (Th,U)O₂. A diferença entre as distribuições de temperatura radial para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO₂ e (Th,U,Pu)O₂ é mostrado na Figura 49.

Figura 49– Distribuição da temperatura radial para o UO₂ e (Th,U,Pu)O₂

Distribuição da Temperatura Radial UO₂-ThUPu

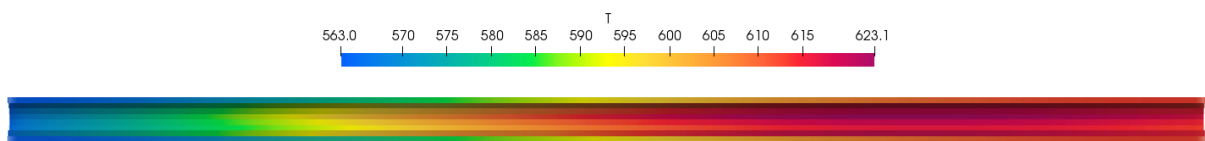


Fonte: O Autor (2022).

Para o revestimento em ambos os combustíveis a temperatura ficou bem abaixo dos 1477,59K, que é a temperatura reportada como limite para casos de acidente.

A distribuição axial da temperatura do refrigerante ao longo do subcanal com maior potência no conjunto contendo (Th,U,Pu)O₂ e no conjunto com UO₂, passando pelo ponto de maior temperatura do refrigerante, ou seja, no revestimento, é apresentada. Na Figura 50 é mostrada a distribuição axial da água para o subcanal com UO₂, a temperatura máxima obtida foi de 623,07K.

Figura 50– Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o UO₂ em núcleo com o MOX (Th,U,Pu)O₂,na fronteira com o revestimento.

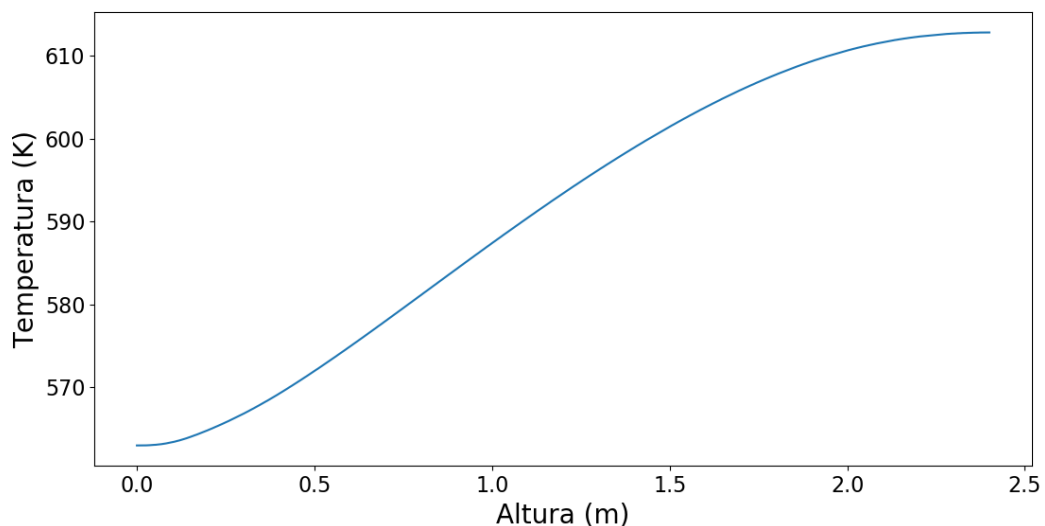


Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 51 é apresentada a distribuição axial da temperatura no centro da água, ao longo da altura para o subcanal com UO₂, a temperatura máxima obtida foi de 612,85K.

Figura 51– Distribuição da temperatura axial no centro da água para o UO₂ em núcleo com o MOX (Th,U,Pu)O₂.

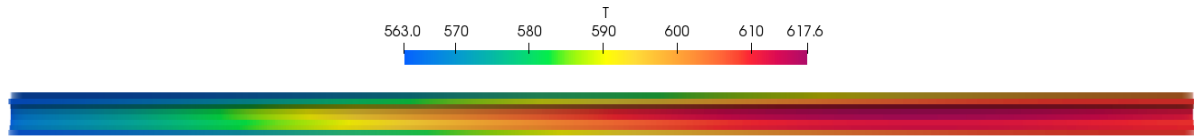
Distribuição da Temperatura Axial no Centro da Água_UO2_ThUPu



Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 52 é mostrada a distribuição axial da temperatura da água para o subcanal com $(Th,U,Pu)O_2$, a temperatura máxima obtida foi de 617,57K.

Figura 52– Contorno do subcanal para a temperatura da água axial da água para o MOX $(Th,U,Pu)O_2$, na fronteira com o revestimento.

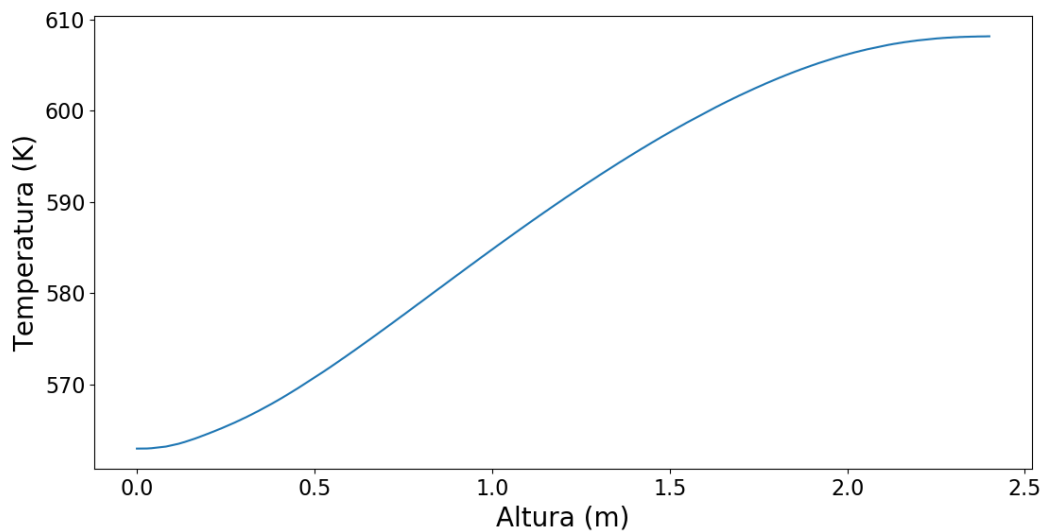


Fonte: O Autor (2022).

Na Figura 53 é apresentada a distribuição axial da temperatura no centro da água, ao longo da altura para o subcanal com $(Th,U,Pu)O_2$, a temperatura máxima obtida foi de 608,15K.

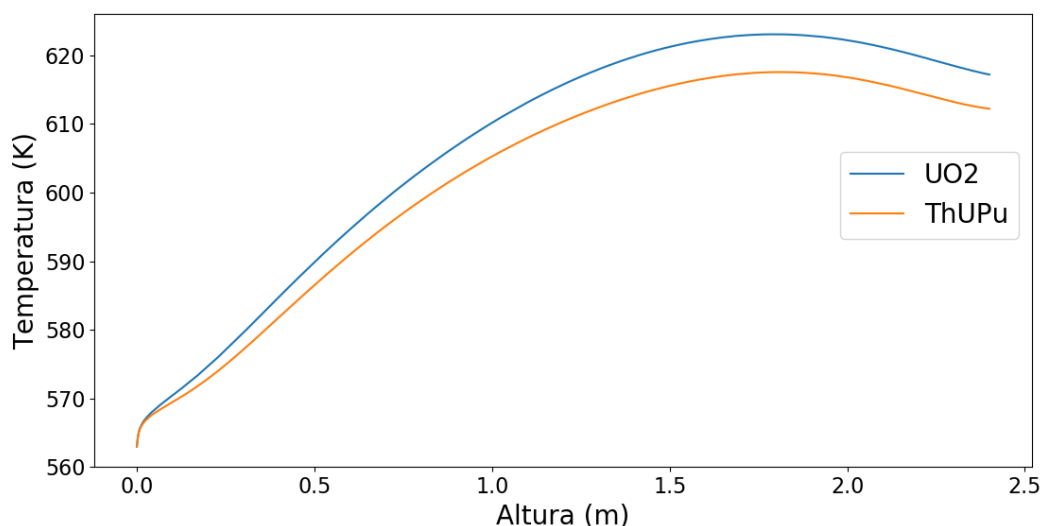
Figura 53– Distribuição da temperatura axial no centro da água para o MOX $(Th,U,Pu)O_2$

Distribuição da Temperatura Axial no Centro da Água_ThUPu



Fonte: O Autor (2022).

Se observa que a temperatura do refrigerante para o $(Th,U,Pu)O_2$ é maior que a temperatura do refrigerante para o UO_2 . A diferença entre as distribuições de temperatura para os subcanais de maior potência para os conjuntos carregados com UO_2 e $(Th,U,Pu)O_2$ é mostrado na Figura 54, a diferença entre as temperaturas máximas do refrigerante é de 5,5K.

Figura 54– Distribuição da temperatura axial da água para o UO_2 e $(\text{Th,U,Pu})\text{O}_2$ Distribuição da Temperatura Axial da Água UO_2 -ThUPu

Fonte: O Autor (2022).

Abaixo na Tabela 10 são apresentados, para os diferentes combustíveis utilizados, os valores máximos de temperaturas para diferentes regiões do subcanal.

Tabela 10– Temperaturas máximas, em diferentes regiões, para todos os combustíveis estudados.

Combustível	Temperatura Máxima do Combustível	Temperatura Máxima da Água no Revestimento	Temperatura Máxima no Centro da Água	Temperatura Máxima do Revestimento
UO_2_(Th,U)	1842,71K	618,04K	608,68K	667,85K
Th,U	1281,6K	608,8K	600,8K	647,9K
UO_2_(Th,Pu)	1769,04K	616,65K	607,43K	664,28K
Th,Pu	1880,28K	612,16K	603,69K	653,58K
UO_2_(Th,U,Pu)	2094,18K	623,07K	612,85K	683,32K
Th,U,Pu	1401,78K	617,57K	608,15K	666,70K

Fonte: O Autor (2022).

Os resultados obtidos, a partir de um modelo monofásico, mostram que para a água são atingidas temperaturas no centro do canal inferiores à temperatura de saturação, mas na parede ligeiramente superiores. Como não se considera a formação de bolhas, o que poderia acontecer nessas condições de início do regime de ebulição sub-resfriada, pode-se subestimar as temperaturas atingidas pelo combustível. Uma proposta é continuar este trabalho considerando um modelo bifásico que considere a formação de bolhas em regime de ebulição sub-resfriada.

5 CONCLUSÃO

Foi desenvolvido um modelo tridimensional de um subcanal, levando-se em consideração a variabilidade das propriedades termofísicas dos materiais em relação com a temperatura, e então implementado através do código de CFD para avaliar o comportamento termohidráulico do núcleo de um reator SMR, a partir de seu subcanal crítico de combustível usando as misturas de combustíveis $(Th,U)O_2$, $(Th,Pu)O_2$ e $(Th,U,Pu)O_2$ bem como seus subcanais críticos dos conjuntos contendo UO_2 .

Foram utilizadas expressões das propriedades termofísicas dos materiais disponíveis em dados da literatura, para os casos em que não se tinham as expressões foram utilizados valores constantes e para o caso do $(Th,U,Pu)O_2$ foi utilizado uma ponderação entre os valores de cada óxido.

Os resultados do CHF obtidos com a correlação W-3, para o modelo do subcanal crítico de um conjunto combustível do núcleo, utilizada para o cálculo do DNBR mostram que o menor valor se mantém acima do valor mínimo de 1,30, sendo o menor valor obtido de 1,74 para o caso do subcanal do conjunto com dióxido de urânio no núcleo com o MOX $(Th,U,Pu)O_2$, enquanto o maior valor obtido foi 3,30 para o caso do subcanal do conjunto com o MOX $(Th,U)O_2$ indicando que a ocorrência de fluxo de calor crítico no núcleo, para os combustíveis estudados, do reator será muito pouco provável.

Foi avaliado o fluido refrigerante, onde se fez a distribuição axial da temperatura do mesmo passando pelo ponto da temperatura máxima para os diversos combustíveis, ou seja, na fronteira com o revestimento. Os resultados dos valores máximos de temperatura do fluido refrigerante, em relação a temperatura de saturação nas condições do reator ficaram bastante próximas, com a temperatura de 623,07K para o subcanal crítico com UO_2 do reator com o MOX $(Th,U,Pu)O_2$ e 608,8K para a temperatura do subcanal crítico com $(Th,U)O_2$.

Os resultados das temperaturas da água nos centros dos subcanais foram todos abaixo da temperatura de saturação, variando desde 600,8K para o subcanal crítico com $(Th,U)O_2$ até 612,85K para o subcanal crítico com UO_2 do reator com o MOX $(Th,U,Pu)O_2$, condizendo com o projeto do reator que prevê a temperatura bulk do fluido refrigerante abaixo da temperatura de saturação, de modo que não ocorra ebulição no núcleo.

Nos elementos combustíveis foi avaliado a distribuição axial de temperatura, se obtendo os comportamentos da temperatura ao longo das barras dos combustíveis e suas respectivas temperaturas máximas. Foi avaliado a distribuição radial da temperatura para se ter os valores da temperatura nos diferentes materiais do subcanal, e foi possível se observar a diferença que os diferentes materiais dos combustíveis têm sobre a temperatura na distribuição radial.

Os combustíveis apresentaram temperaturas máximas variadas, sendo para os subcanais com o UO_2 , no núcleo carregado com o MOX (Th,U,Pu)O_2 2094,18K, para o núcleo carregado com o MOX (Th,Pu)O_2 1769,04K e para o núcleo carregado com o MOX (Th,U)O_2 1842,71K. Os subcanais carregados com o combustível MOX foram obtidas as temperaturas máximas de 1401,78K para o MOX (Th,U,Pu)O_2 , 1880,28K para o MOX (Th,Pu)O_2 e 1281,6K para o MOX (Th,U)O_2 . Se observou que os combustíveis MOX apresentaram temperaturas máximas menores que os UO_2 com uma variação pequena na temperatura da água, mostrando uma distribuição radial mais uniforme, exceto pelo (Th,Pu)O_2 .

Nos revestimentos foram obtidas temperaturas máximas próximas, sendo para os subcanais com UO_2 , no núcleo carregado com o MOX (Th,U,Pu)O_2 683,32K, para o núcleo carregado com o MOX (Th,Pu)O_2 664,28K e para o núcleo carregado com o MOX (Th,U)O_2 667,85K. Os subcanais carregados com o combustível MOX foram obtidas as temperaturas máximas do revestimento de 666,70K para o MOX (Th,U,Pu)O_2 , 653,58K para o MOX (Th,Pu)O_2 e 647,9K para o MOX (Th,U)O_2 . Para todos os casos a temperatura máxima do revestimento estava bem abaixo da temperatura limite do mesmo.

REFERÊNCIAS

- ALMENAS, K. Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors. v. 56, n. 2, 1982.
- ANDERSON, J. D. Governing Equations of Fluid Dynamics. In: **Computational Fluid Dynamics: An Introduction**. 3rd. ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. p. 15–51.
- BETANCOURT, M. C.; GARCÍA HERNÁNDEZ, C. R.; DOMINGUEZ, D. S.; ROJAS MAZAIRA, L. Y.; BRAYNER, C. A.; ROSALES GARCÍA, J. A.; IGLESIAS, S. M. Mixed-oxide fuel strategies in an integral pressurized water reactor. **Progress in Nuclear Energy**, v. 139, n. February, 2021a.
- BETANCOURT, M. C.; MAZAIRA, L. R.; HERNÁNDEZ, C. R. G.; DOMINGUEZ, D.; LIRA, C. A. B. DE O. Simulação Neutrônica do Núcleo de um Reator Nuclear do Tipo iPWR Usando o Código SERPENT. **VETOR - Revista de Ciências Exatas e Engenharias**, v. 31, n. 1, p. 84–93, 2021b.
- BOARIN, S.; RICOTTI, M. E. An Evaluation of SMR Economic Attractiveness. **Science and Technology of Nuclear Installations**, v. 2014, n. i, p. 1–8, 2014.
- BROOK, B. W.; ALONSO, A.; MENELEY, D. A.; MISAK, J.; BLEES, T.; VAN ERP, J. B. Why nuclear energy is sustainable and has to be part of the energy mix. **Sustainable Materials and Technologies**, v. 1, p. 8–16, 2014.
- CARBAJO, J. J.; YODER, G. L.; POPOV, S. G.; IVANOV, V. K. A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels. **Journal of Nuclear Materials**, v. 299, n. 3, p. 181–198, dez. . 2001.
- CARELLI, M. D.; INGERSOLL, D. T. **Handbook of Small Modular Nuclear Reactors**. Elsevier, 2015. 1–516 p.
- ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. **Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications**. 3rd. ed. New York: McGraw-Hill, 2014. 1031 p.
- CHEN, B.; YU, N.; FU, L.; ZHU, Y.; VAN REE, T.; WU, Y. Mixed oxides in nuclear fuels. In: **Metal Oxides in Energy Technologies**. Elsevier, 2018. v. cp. 73–89.
- CHEN, G.; XIONG, Q.; MORRIS, P. J.; PATERSON, E. G.; SERGEEV, A.; WANG, Y.-C. OpenFOAM for Computational Fluid Dynamics. **Notices of the American Mathematical Society**, v. 61, n. 4, p. 354, 2014.
- CHENG, S.; CHEN, H.; ZHANG, X. CFD analysis of flow field in a 5 × 5 rod bundle with multi-grid. **Annals of Nuclear Energy**, v. 99, p. 464–470, 2017.
- DEMAZIÈRE, C. **Transport phenomena in nuclear reactors**. Elsevier, 2020. p. 13–71
- ERIGHIN, M. A. A 48-month extended fuel cycle for the B&W mPower™ small modular nuclear reactor. **International Conference on the Physics of Reactors**

2012, PHYSOR 2012: Advances in Reactor Physics, v. 2, p. 1315–1330, 2012.

FIORINA, C.; CLIFFORD, I.; KELM, S.; LORENZI, S. On the development of multi-physics tools for nuclear reactor analysis based on OpenFOAM®: state of the art, lessons learned and perspectives. **Nuclear Engineering and Design**, v. 387, n. December 2021, p. 111604, 2022.

FREECAD. **FreeCad Main Page**. 2021. Disponível em:
<<https://www.freecadweb.org/>>. Acesso em: 15 jan. 2021.

GARCÍA, J. A. R.; ROJAS, L.; BEZERRA, J. D. L.; LIRA, C. A. B. D. O.; HERNÁNDEZ, C. R. G.; BETANCOURT, M. C. New stage on the neutronics and thermal hydraulics analysis of a small modular reactor core. **International Journal of Nuclear Energy Science and Technology**, v. 12, n. 4, p. 400, 2018.

HACHE, G.; CHUNG, H. M. The History of LOCA Embrittlement Criteria. **Conference: 28th Water Reactor Safety Information Meeting**, p. 1–32, 2001.

HALFINGER, J. A.; HAGGERTY, M. D. The B&W mPower™ scalable, practical nuclear reactor design. **Nuclear Technology**, v. 178, n. 2, p. 164–169, 2012.

IAEA. **Thorium fuel cycle: Potential benefits and challenges**. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2005.

IAEA. **Advances in Small Modular Reactor Technology Developments**. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2020. 150 p.

IAEA. **Potential of thorium based fuel cycles to constrain plutonium and reduce long lived waste toxicity**. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2003.

IAEA. Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors. **laea-Tecdod**, v. 1496, n. June, p. 1–404, 2006.

IAEA. Thermophysical Properties of Materials for Nuclear Engineering: A Tutorial and Collection of Data. **Atomic Energy**, p. 200, 2008.

IAEA. **Energy, Electricity and Nuclear Power Estimates for the Period up to 2050**. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2018.

IN, W. K.; SHIN, C. H.; KWACK, Y. K.; LEE, C. Y. Measurement and CFD calculation of spacer loss coefficient for a tight-lattice fuel bundle. **Nuclear Engineering and Design**, v. 284, p. 153–161, 2015.

INGERSOLL, D. T. Deliberately small reactors and the second nuclear era. **Progress in Nuclear Energy**, v. 51, n. 4–5, p. 589–603, 2009.

JASAK, H. OpenFOAM: Open source CFD in research and industry. **International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering**, v. 1, n. 2, p. 89–94, 2009.

JASAK, H.; JEMCOV, A.; TUKOVIC, Z. OpenFOAM: A C++ Library for Complex

Physics Simulations. **International Workshop on Coupled Methods in Numerical Dynamics**, p. 1–20, 2007.

JOYCE, M. Nuclear Fuel Reprocessing. **Nuclear Engineering**, v. 1976, p. 307–321, 2018.

KERLIN, T. W.; UPADHYAYA, B. R. Nuclear reactor designs. In: **Dynamics and Control of Nuclear Reactors**. Elsevier, 2019. p. 5–16.

KESSIDES, I. N. Nuclear power and sustainable energy policy: Promises and perils. **World Bank Research Observer**, v. 25, n. 2, p. 323–362, 2009.

KIM, T. K.; DOWNAR, T. J. Thorium fuel performance in a tight-pitch light water reactor lattice. **Nuclear Technology**, v. 138, n. 1, p. 17–29, 2002.

KITCHER, E. D.; CHIRAYATH, S. S. Neutronics and thermal hydraulics analysis of a small modular reactor. **Annals of Nuclear Energy**, v. 97, n. December 2013, p. 232–245, 2016.

KNAPP, V.; PEVEC, D. Promises and limitations of nuclear fission energy in combating climate change. **Energy Policy**, v. 120, n. November 2017, p. 94–99, 2018.

KNAPP, V.; PEVEC, D.; MATIJEVIĆ, M. The potential of fission nuclear power in resolving global climate change under the constraints of nuclear fuel resources and once-through fuel cycles. **Energy Policy**, v. 38, n. 11, p. 6793–6803, nov. . 2010.

LAMARSH, J.; BARATTA, A. **Introduction to Nuclear Engineering**. 3^a ed. New Jersey: Prentice Hall, v. 23. 2001.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269–289, mar. . 1974.

LI, X.; GAO, Y. Methods of simulating large-scale rod bundle and application to a 17 × 17 fuel assembly with mixing vane spacer grid. **Nuclear Engineering and Design**, v. 267, p. 10–22, 2014.

LOUDER, M. J. **Small Nuclear Reactors and US Energy Security: Concepts, Capabilities, and Costs**. 2011. Disponível em:
<http://www.ensec.org/index.php?option=com_content&view=article&id=314:small-nuclear-reactors-and-us-energy-security-concepts-capabilities-and-costs&catid=116:content0411&Itemid=375>. Acesso em: 20 dez. 2020.

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, n. November, p. 47–55, 2017.

MAZAIIRA, L. Y. R.; BETANCOURT, M. C.; GARCÍA HERNÁNDEZ, C. R.; ROSALES GARCÍA, J. A.; LIRA, C. A. B. DE O. Estratégias de gerenciamento de reatividade para um reator nuclear de água pressurizada integral. **Revista Cereus**, v. 12, n. 4, p. 26–45, 2020.

MEDHAUG, I.; STOLPE, M. B.; FISCHER, E. M.; KNUTTI, R. Reconciling controversies about the “global warming hiatus”. **Nature**, v. 545, n. 7652, p. 41–47, 2017.

MOSTAFA GHIAASIAAN, S. **Two-phase flow, boiling and condensation: In conventional and miniature systems**. New York: Cambridge University Press, v. 9780521882. 2008. 1–613 p.

MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. Boundary Conditions in OpenFOAM® and uFVM. In: **Fluid Mechanics and its Applications**. [s.l: s.n.]2016. v. 113p. 745–759.

NRC. **Design-Specific Review Standard (DSRS) for the BWXT mPower™ Design**. 2020. Disponível em: <<https://www.nrc.gov/reactors/new-reactors/smr/mpower/dsrs.html>>. Acesso em: 13 jan. 2021.

OPENFOAM. **OpenFOAM: Programmers Guide v1812**. 2018a. Disponível em: <<https://iweb.dl.sourceforge.net/project/openfoam/v1812/ProgrammersGuide.pdf>>. Acesso em: 26 dez. 2020.

OPENFOAM. **OpenFOAM: User Guide v1812**. 2018b. Disponível em: <<https://phoenixnap.dl.sourceforge.net/project/openfoam/v1812/UserGuide.pdf>>. Acesso em: 26 dez. 2020.

PARAVIEW. **ParaView User's Guide**. 2020. Disponível em: <<http://www.paraview.org/>>. Acesso em: 28 dez. 2020.

PEDRAZA, J. M. **Small Modular Reactors for Electricity Generation**. Cham: Springer International Publishing, 2017. 1–267 p.

PETERSON, S.; CURTIS, C. E. **Thorium Ceramics Data Manual, VOL.1**. ORNL-4503, 1970.

SÁ DA COSTA, P. P. **Validation of a mathematical model for the simulation of loss of coolant accidents in nuclear power plants**. Universidade de Lisboa, 2016.

SCHAFFER, M. B. Abundant thorium as an alternative nuclear fuel Important waste disposal and weapon proliferation advantages. **Energy Policy**, v. 60, p. 4–12, 2013.

SHAW, C. T. **Using Computational Fluid Dynamics**. Prentice Hall, 1992.

SIDI-ALI, K.; AILEM, D.; MEDOURI, E. M.; BELMRABET, T. **Thermal Hydraulic Modeling of a Nuclear Reactor Core Channel Using CFD; Application for an EPR**. Springer International Publishing, 2019. p. 9–16

SILVA, V. V. A. **Acoplamento neutrônico e termo-hidráulico usando os códigos milonga e OpenFOAM: uma abordagem com software livre**. Universidade Federal de Minas Gerais, 2016.

STUCKERT, J.; PALAGIN, A. On the thermo-physical properties of Zircaloy-4 and ZrO₂ at high temperatures Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft FZKA 6739 **On the thermo-physical properties of Zircaloy-4 and ZrO₂ at high temperatures Part 1 : Experimental and model**. n. January, 2002.

TODREAS, N. E.; KAZIMI, M. S. **Nuclear Systems I Thermal Hydraulic Fundamentals**. 1^a ed. ed. New York: Taylor & Francis Group, v. 20. 1990.

TONG, L. S.; TANG, Y. S. **Boiling Heat Transfer and Two-Phase Flow**. 2^a ed. ed. Boca Raton: Taylor & Francis Group, 1997.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**. 2nd. ed. Harlow: Pearson Education Limited, 2007.

WANG, M.; WANG, Y.; TIAN, W.; QIU, S.; SU, G. H. Recent progress of CFD applications in PWR thermal hydraulics study and future directions. **Annals of Nuclear Energy**, v. 150, 2021.

WANG, Y.; WANG, M.; JU, H.; ZHAO, M.; ZHANG, D.; TIAN, W.; LIU, T.; QIU, S.; SU, G. H. CFD simulation of flow and heat transfer characteristics in a 5×5 fuel rod bundles with spacer grids of advanced PWR. **Nuclear Engineering and Technology**, v. 52, n. 7, p. 1386–1395, 2020.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modelling for CFD**. 3rd. ed. San Diego: DCW Industries, 2006.

WNA. **World Nuclear Performance Report 2020 Produced by: World Nuclear Association**. London: [s.n.]2020. p. 1–68

YEOH, G. H. Thermal hydraulic considerations of nuclear reactor systems: Past, present and future challenges. **Experimental and Computational Multiphase Flow**, v. 1, n. 1, p. 3–27, 2019.

ZAWAWI, M. H.; SALEHA, A.; SALWA, A.; HASSAN, N. H.; ZAHARI, N. M.; RAMLI, M. Z.; MUDA, Z. C. A review: Fundamentals of computational fluid dynamics (CFD). **AIP Conference Proceedings**, v. 2030, 2018.

ZELIANG, C.; MI, Y.; TOKUHIRO, A.; LU, L.; REZVOI, A. Integral PWR-Type Small Modular Reactor Developmental Status, Design Characteristics and Passive Features: A Review. **Energies**, v. 13, n. 11, p. 2898, 5 jun. . 2020.

ZHANG, R.; CONG, T.; SU, G.; WANG, J.; QIU, S. Investigation on the critical heat flux in typical 5 by 5 rod bundle at conditions prototypical of PWR based on CFD methodology. **Applied Thermal Engineering**, v. 179, p. 115582, 2020.

ZHANG, Y.; ZHANG, C.; JIANG, J. Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat

Transfer of Supercritical Fluids in Fuel Bundles. **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 48, n. 6, p. 929–935, jun. . 2011.

APÊNDICE A – CÓDIGO PYTHON DNBR

```

from pandas import read_excel
from matplotlib import pyplot
from tkinter.filedialog import askopenfilename
from tkinter import Tk, font
from tkinter import Label
from tkinter import StringVar
from tkinter import Entry
from tkinter import RIGHT
from tkinter import Button
from tkinter import W
import numpy as np

class PlotarGráfico:

    def __init__(self):
        window = Tk()
        window.title("Plotagem de gráfico DNBR")

        Label(window, text="Unidade do eixo-x").grid(row=2, column=1,
sticky=W)
        Label(window, text="Unidade do eixo-y").grid(row=3, column=1,
sticky=W)
        Label(window, text="Nome do gráfico").grid(row=4, column=1, sticky=W)

        # salvar as entradas da caixa de diálogo
        self.eixo_x = StringVar()
        self.eixo_y = StringVar()
        self.titulo_graf = StringVar()

        # caixas de diálogo e botão
        Entry(window, textvariable = self.eixo_x,
justify=RIGHT).grid(row=2, column=2, padx=(0,5))
        Entry(window, textvariable = self.eixo_y,
justify=RIGHT).grid(row=3, column=2, padx=(0,5))
        Entry(window, textvariable = self.titulo_graf,
justify=RIGHT).grid(row=4, column=2, padx=(0,5))
        Button(window,
command=self.plotagem).grid(row=7, column=2, padx= (60,5), pady=5)
        window.mainloop()

    def plotagem(self):
        # recebe as entradas do usuário em variáveis
        eixo_x = str(self.eixo_x.get())
        eixo_y = str(self.eixo_y.get())

```

```

titulo_graf = str(self.titulo_graf.get())

# seleção do arquivo com os dados
filename = askopenfilename()
df = read_excel(filename, sheet_name=0)
# definição do eixo x

x = list(df['x'])

#Ajustar tamanho da figura
pyplot.rcParams['figure.figsize'] = [6, 4]

# colocar os nomes dos eixos e do gráfico
pyplot.xlabel(eixo_x, fontsize=10)
pyplot.ylabel(eixo_y, fontsize=10)
pyplot.suptitle(titulo_graf, fontsize=14, horizontalalignment = 'center')

#Sistema Internacional conversão para o sistema inglês
G = 2040.35 * 737.3381 #G em Kg/m²s
Dh = 0.0118 * 39.3701 #Dh em metros
hf = 1602260 * 0.000429923 #hf em J/Kg
hin = 1283780 * 0.000429923 #hin em J/Kg
DNBRmin=[]
DNBR_1sta=[]
CHF_1sta=[]
local_flux_1sta=[]
lstx_e = list(df['y'])
lstP = list(df['z'])
lstQ = list(df['w'])

j=0
while j < 1003:
    x_e=lstx_e[j]
    P=lstP[j] * 145.038 #P em MP
    Q=lstQ[j]
    q = ((2.022 - 0.0004302 * P) + (0.1722 - (0.0000984 * P)) *
(np.exp((18.177 - 0.004129 * P) * x_e)))
    w = ((0.1484 - (1.596 * x_e) + (0.1729 * x_e * abs(x_e))) * (G /
pow(10,6)) + 1.037)
    e = (1.157 - (0.869 * x_e))
    r = (0.2664 + 0.8357 * np.exp(-3.151 * Dh))
    t = (0.8258 + 0.000794 * (hf - hin))
    qchf = (q*w*e*r*t) * pow(10,6)
    qchfMW=qchf/316998.3306 #Conversão para MW/m²
    Dic=0.0095 #Diametro clad (m)
    Rfu=0.004096 #Raio Fuel (m)
    ql=Q*(Rfu*Rfu)/Dic
    DNBR = qchfMW / ql
    DNBR_1sta.append(DNBR)

```

```

CHF_Ista.append(qchfMW)
local_flux_Ista.append(ql)
DNBRmin.append(DNBR)
j=j+1
pyplot.plot(x, DNBR_Ista) #Plot DNBR
#pyplot.plot(x, CHF_Ista) #Plot CHF
#pyplot.plot(x, local_flux_Ista) #Plot local flux
print(min(DNBRmin))
#Colocar o nome das séries:
pyplot.legend(labels=['DNBR'],loc=7,      bbox_to_anchor=(1,      0.8),
fontsize=10)
#pyplot.legend(labels=['CHF','Local flux'],loc=7, bbox_to_anchor=(1, 0.8),
fontsize=10)
pyplot.show()
PlotarGráfico()

```