



COPPE/UFRJ

MODELO TERMOHIDRÁULICO PARA REALIMENTAÇÃO DO CÁLCULO  
DE SEÇÕES DE CHOQUE NEUTRÔNICAS EM REATORES PWR

Daniela Maiolino Norberto Santiago

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Antonio Carlos Marques  
Alvim  
Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro  
Fevereiro de 2011

MODELO TERMOHIDRÁULICO PARA REALIMENTAÇÃO DO CÁLCULO  
DE SEÇÕES DE CHOQUE NEUTRÔNICAS EM REATORES PWR

Daniela Maiolino Norberto Santiago

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE  
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
NUCLEAR.

Examinada por:

---

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

---

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

---

Prof. Sérgio de Queiroz Bogado Leite, Ph.D.

---

Prof. Paulo Augusto Berquó de Sampaio, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
FEVEREIRO DE 2011

Norberto Santiago, Daniela Maiolino

Modelo Termohidráulico para Realimentação do  
Cálculo de Seções de Choque Neutrônicas em Reatores  
PWR/Daniela Maiolino Norberto Santiago. – Rio de  
Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

XI, 55 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Antonio Carlos Marques Alvim

Fernando Carvalho da Silva

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de  
Engenharia Nuclear, 2011.

Referências Bibliográficas: p. 47 – 48.

1. Realimentação Termohidráulica. 2. Código  
Neutrônico. 3. PWR. I. Marques Alvim, Antonio Carlos  
*et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,  
Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Aos meus pais, António e Esther  
ao meu marido, Arnaldo  
aos meus filhos, Ísis e Agnus*

# Agradecimentos

Até aqui, aprendi muitas coisas. Principalmente aprendi, que não se chega a qualquer lugar, sem o apoio e a amizade de muitos. Deixo aqui registrado, meu sincero agradecimento às pessoas que muito contribuíram ao longo deste trabalho.

Aos meus queridos orientadores Alvim e Fernando, por aceitarem me orientar neste trabalho. Com eles, aprendi muito mais do que possa vir escrito em qualquer trabalho. A dedicação aos alunos, a seriedade em explicar a dúvida mais simples, o respeito com que tratam cada um, só demonstra o quão especiais são esses professores.

Aos meus pais, pela incansável dedicação, não só nesses dois últimos anos, mas ao longo de toda a minha vida.

Ao meu amado Arnaldo por ser, não apenas o meu marido, mas meu amigo e me apoiar nessa empreitada.

À Ísis e ao Agnus, por iluminarem meu caminho.

Às minhas amigas de tantos anos, Celina, Gabriela e Luciane por estarem sempre comigo.

Às minhas recentes amigas Carolina, Martha e Renata. Vocês tornaram este último ano mais leve.

Ao meu querido amigo Edgardo Cheb Terrab. Como você foi importante para o meu retorno aos estudos.

Ao meu irmão Paulo André, pelo apoio e torcida.

Aos alunos do PEN, em especial à esses amigos, que tornaram o nosso local de trabalho, um ambiente de verdadeira harmonia: Cláudia, Daniel, Fabiano, Rafael, Ramon, Samuel e Wanderson.

À todos os professores do PEN.

Aos funcionários do PEN, por terem me acolhido com muito carinho.

Aos Srs. Márcio Adriano e João da Silva Gonçalves, da INB, pela atenção e gentileza em nos fornecer dados da pastilha combustível.

Aos Professores Sérgio Bogado e Paulo Berquó, pelas correções e sugestões.

À Capes, pelo apoio financeiro

À Deus, por tudo.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## MODELO TERMOHIDRÁULICO PARA REALIMENTAÇÃO DO CÁLCULO DE SEÇÕES DE CHOQUE NEUTRÔNICAS EM REATORES PWR

Daniela Maiolino Norberto Santiago

Fevereiro/2011

Orientadores: Antonio Carlos Marques Alvim  
Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Em códigos neutrônicos, temos obrigatoriamente um módulo de realimentação termohidráulica. Este módulo de realimentação termohidráulica calcula a temperatura do combustível que alimenta as seções de choque neutrônicas. No simulador neutrônico desenvolvido no PEN/COPPE/UFRJ, a temperatura é obtida através de um modelo empírico. O presente trabalho apresenta um modelo físico para o cálculo desta temperatura. Foi usada a técnica de volumes finitos para discretizar a equação da distribuição de temperatura, enquanto que, o cálculo do coeficiente de transferência de calor do moderador, foi realizado fazendo-se uso da tabela ASME, e acoplado-se algumas de suas rotinas ao nosso programa.

O modelo permite calcular um valor médio radial de temperatura por nodo, uma vez que a realimentação termohidráulica deve seguir as condições impostas pelo código neutrônico. Os resultados foram comparados com os do modelo empírico. Nossos resultados mostram, que para os elementos combustíveis da periferia, o modelo empírico superestima as temperaturas no combustível, em relação ao nosso modelo, o que pode indicar que o modelo físico seja mais apropriado para o cálculo das temperaturas nas realimentações termohidráulicas. O modelo proposto, foi validado junto ao simulador neutrônico desenvolvido no PEN/COPPE/UFRJ para análise de reatores PWR.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

Daniela Maiolino Norberto Santiago

February/2011

Advisors: Antonio Carlos Marques Alvim  
Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

In neutronic codes, we must have a thermal-hydraulic feedback module. This module calculates the thermal-hydraulic feedback temperature on the fuel, that feeds the neutronic cross sections. In the neutronic code developed in the PEN / COPPE / UFRJ, the temperature is obtained through an empirical model. This work presents a physical model to calculate this temperature. We used the finite volume technique to discretizing the equation of temperature distribution, while calculating the coefficient of heat transfer from the moderator, was carried out using the table ASME, and mating some of their routines to our program.

The model allows one to calculate an average radial temperature per node, since the thermal-hydraulic feedback must follow the conditions imposed by the neutronic code. The results were compared with the empirical model. Our results show that the fuel elements to the periphery, the empirical model overestimates the temperature in the fuel, compared to our model, which may indicate that the physical model is more appropriate to calculate the thermal-hydraulic feedback temperatures. The proposed model was validated by the neutronic simulator developed in the PEN / COPPE / UFRJ for analysis of PWR reactors.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Um Panorama da Energia Nuclear . . . . .	1
1.2 Códigos Simuladores . . . . .	5
1.3 Objetivo . . . . .	8
1.4 Organização do Trabalho . . . . .	9
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>10</b>
<b>3 Geração de Calor em Reatores Nucleares</b>	<b>14</b>
3.1 Transferência de Calor . . . . .	16
3.2 Equação da Temperatura . . . . .	17
<b>4 Modelo Físico</b>	<b>19</b>
4.1 Introdução . . . . .	19
4.2 Modelo para as Seções de Choque para o Código Neutrônico . . . . .	21
4.3 Modelo de Realimentação Termohidráulica . . . . .	22
4.3.1 Temperatura no moderador . . . . .	22
4.3.2 Temperatura na Vareta Combustível . . . . .	23
4.3.3 Cálculo do Coeficiente de Transferência de Calor do Moderador . . . . .	25
4.4 Acoplamento da Realimentação Termohidráulica ao Código Neutrônico . . . . .	28
<b>5 Método Numérico</b>	<b>30</b>
5.1 Introdução . . . . .	30
5.2 Volumes Finitos . . . . .	30
5.2.1 Discretização da Equação . . . . .	30
5.3 Temperatura Média por Nodo . . . . .	38
<b>6 Resultados e Discussões</b>	<b>39</b>
6.1 Recomendações para Trabalhos Futuros . . . . .	46



<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>47</b>
<b>A Gráficos dos Elementos Combustíveis</b>	<b>49</b>

# Lista de Figuras

1.1	Tipos de Reatores Comerciais no Mundo . . . . .	1
1.2	Elemento Combustível . . . . .	2
1.3	Quadro Esquemático de uma Usina Nuclear . . . . .	3
1.4	Pastilha Combustível . . . . .	4
2.1	Esquema do Acoplamento dos Códigos . . . . .	11
2.2	Acoplamento Termohidráulico/Neutrônico no SIMTRAN . . . . .	12
3.1	Ilustração da Vareta Combustível . . . . .	15
3.2	Perfil da Geração de Calor ao Longo da Vareta . . . . .	16
3.3	Vareta Combustível . . . . .	16
4.1	Subcanais . . . . .	19
4.2	Esquema do Nodo . . . . .	20
4.3	Entalpia . . . . .	23
4.4	Regiões da Vareta . . . . .	24
4.5	Arranjo Quadrático . . . . .	25
4.6	Geometria Simples Equivalente ao Arranjo Quadrático . . . . .	26
4.7	Esquema da Realimentação TH no Simulador Neutrônico/PEN . . . . .	29
5.1	Representação dos Pontos nas Interfaces entre as Regiões . . . . .	31
5.2	Malha na Pastilha . . . . .	31
5.3	Malha de $0 < r < \delta/2$ . . . . .	32
5.4	Integração em Torno do Ponto $i$ . . . . .	32
5.5	Malha no Contorno da Pastilha . . . . .	33
5.6	Gap . . . . .	34
5.7	Malha no Revestimento . . . . .	35
6.1	Esquema Representativo de um Quarto do Núcleo do Reator . . . . .	40
6.2	Elementos Combustíveis - Periferia . . . . .	41
6.3	Elementos Combustíveis -Centrais . . . . .	41
6.4	Diferença Percentual entre as Temperaturas de Cada Modelo . . . . .	42

6.5	Diferença percentual entre as temperaturas de cada modelo para 210 dias de queima . . . . .	43
6.6	Diferença percentual entre as temperaturas de cada modelo para 360 dias de queima . . . . .	43
6.7	Refletores . . . . .	44
6.8	Tipos de <i>Baffle</i> . . . . .	45
6.9	Diferença Percentual dos Picos de Temperatura entre os Dois Modelos	45
A.1	Elementos Combustíveis - Primeira Linha . . . . .	50
A.2	Elementos Combustíveis - Segunda Linha . . . . .	50
A.3	Elementos Combustíveis - Terceira Linha . . . . .	51
A.4	Elementos Combustíveis - Quarta Linha . . . . .	52
A.5	Elementos Combustíveis - Quinta Linha . . . . .	53
A.6	Elementos Combustíveis - Sexta Linha . . . . .	54
A.7	Elementos Combustíveis - Sétima Linha . . . . .	55

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Um Panorama da Energia Nuclear

Com o crescente aumento do consumo de energia no mundo, a busca por fontes de energia que produzam menos impacto ambiental, sejam seguras, e autosustentáveis, fez com que a energia nuclear voltasse, desde o início deste século, a ser vista como a opção que melhor se enquadra nas necessidades mundiais. Tal fato tem impulsionado a construção de usinas nucleares, principalmente nos países mais desenvolvidos. O Brasil está entre os 31 países que possuem usinas nucleares e, encontra-se hoje, em fase de construção a sua terceira usina nuclear, Angra 3, sendo que o Comitê de Desenvolvimento do Programa Nuclear Brasileiro aponta ainda a necessidade da construção de pelo menos mais 4 usinas até 2030, com capacidade de 1.000 MW cada uma.

Segundo dados da IAEA (*International Atomic Energy Agency*), existem atualmente (dados de outubro de 2010), 441 usinas nucleares, sendo 269 do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor* - Reator à Água Pressurizada), e mais 61 usinas estão em construção, sendo 35 destas do tipo PWR, como procura ilustrar a Fig. (1.1).



Figura 1.1: Tipos de Reatores Comerciais no Mundo

Nas usinas Angra 1 e Angra 2, o Reator Nuclear é do tipo PWR. Este será também o tipo de reator que operará na futura Angra 3. Nesses reatores, o calor é gerado principalmente através da fissão do  $^{235}\text{U}$  ( Urânio 235), que é provocada por nêutrons térmicos. A fissão ocorre nas pastilhas combustíveis, que contém o urânio enriquecido. A geometria destas pastilhas é cilíndrica, e elas são colocadas nas varetas combustíveis. As varetas combustíveis, por sua vez, ficam acondicionadas na grade espaçadora, e o conjunto é denominado elemento combustível. A figura (1.2), retirada do site da INB (Indústrias Nucleares do Brasil), fabricante dos elementos combustíveis, permite sua visualização.



Figura 1.2: Elemento Combustível

O elemento combustível fica submerso em água pressurizada dentro do núcleo do reator, pois é nele que as reações de fissão nuclear ocorrem, havendo, portanto, liberação de grande quantidade de energia. O calor gerado dentro das varetas é removido pelo refrigerante, que em reatores do tipo Angra 1 é a água leve. O refrigerante, que está no circuito primário (cf. Figura 1.3), aquecerá o circuito secundário, que transformará o calor em energia elétrica. Aparentemente simples, o processo envolve uma sofisticada tecnologia, que está presente, desde o enriquecimento do  $U$  para o combustível, até o constante monitoramento do funcionamento da usina e dos inevitáveis rejeitos nucleares.

O núcleo do reator tem de ser formado por um número bem definido de elementos combustíveis, uma vez que eles definem a potência térmica nominal do reator, a qual é devida, em parte, à energia cinética dos produtos de fissão resultantes da reação nuclear. Tipicamente, a potência térmica nominal é transformada em energia elétrica com uma eficiência de aproximadamente 33%. Dito de outra maneira, duas pastilhas de urânio enriquecidas, usadas em reatores PWRs, como as mostradas na Figura 1.4, podem produzir uma quantidade de energia capaz de abastecer uma residência, com quatro moradores, durante 1 mês. Ou ainda, um quilo de urânio

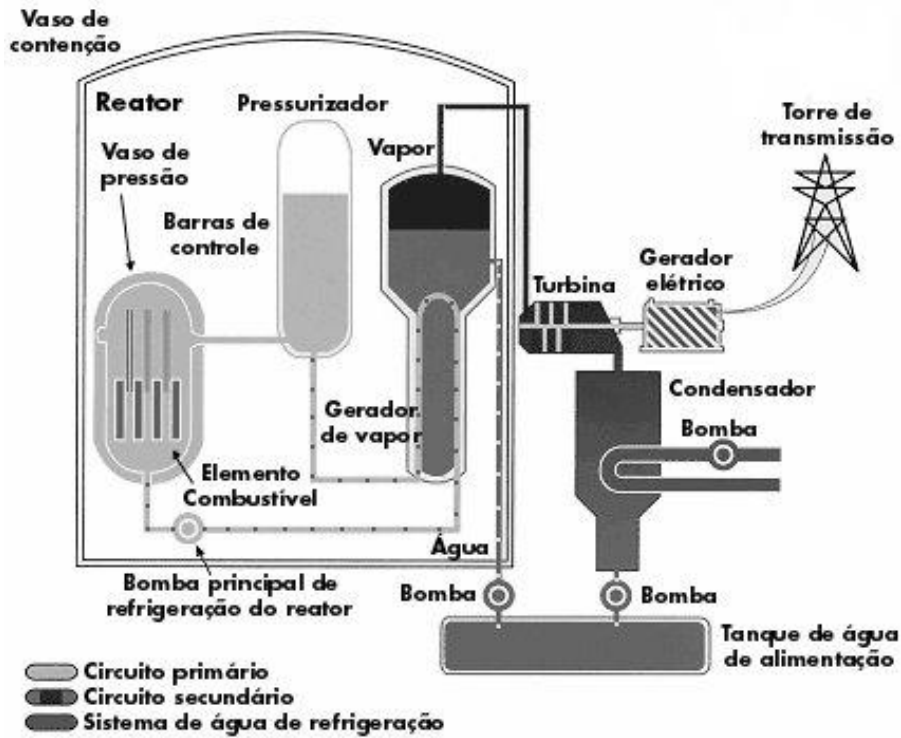


Figura 1.3: Quadro Esquemático de uma Usina Nuclear

enriquecido produz uma energia equivalente a 55 vagões carregados de carvão, ou seis caminhões cheios de óleo combustível, sem o inconveniente de emissão de gases do efeito estufa[1].

Para que um reator nuclear possa funcionar com segurança, e possíveis falhas sejam minimizadas, é necessária a determinação prévia dos limites de projeto (o que é condição inclusive para o licenciamento) e ainda, que o controle do reator seja realizado dentro desses parâmetros. Assim, é de fundamental importância que os cálculos envolvidos sejam os mais realistas possíveis, quer por questões de segurança, quer por questões econômicas. Neste contexto, a determinação da temperatura alcançada dentro do reator, é um dos parâmetros de maior relevância, tanto no projeto quanto no monitoramento do reator em operação. Além disto, a seção de choque neutrônica, grandeza fundamental para obtenção das taxas das reações nucleares (fissões), é dependente da temperatura. Desta forma, uma representação precisa da distribuição de temperatura, no elemento combustível é essencial no monitoramento do reator, durante sua vida útil. Além disso, os gradientes de temperatura, que juntamente com as cargas mecânicas, controlam o nível de tensão térmica nos materiais, contribuem para determinar o potencial de deformação plástica e de trincas, que possam ocorrer, a altas e baixas temperaturas, respectivamente. A temperatura do refrigerante, junto à superfície sólida, controla as reações químicas e os processos de difusão, os quais afetam profundamente os processos corrosivos, principalmente no revestimento das varetas combustíveis, as quais, no contexto da análise



Figura 1.4: Pastilha Combustível

de segurança, são a primeira barreira aos produtos de fissão [2].

Finalmente, são as temperaturas, ou melhor dizendo, as limitações térmicas dos materiais que compõem o reator, que estabelecem limites sobre sua capacidade de geração de energia elétrica. Isto porque, o fluxo de nêutrons, e as reações de fissão se dão em cadeia, durante a queima do combustível. Desta forma, como o reator deve trabalhar dentro de limites específicos de segurança, o calor gerado tem de ser removido, e a taxa de transferência de calor para o fluido refrigerante controlada. Desta forma, os vínculos impostos pela temperatura afetam a performance térmica do reator, e em última análise, a própria geração de energia elétrica.

A determinação mais precisa da temperatura na vareta combustível, não só tem importância para a termohidráulica, no que diz respeito aos limites de projeto, mas também, para toda a física de reatores, uma vez que a seção de choque neutrônica depende diretamente desse valor. Neste sentido, um ponto particularmente crítico, é o da recarga nuclear. Isto porque, em geral, um reator de potência nuclear é projetado para operar durante aproximadamente um ano. Ao término desse período, o nível de reatividade dos elementos combustíveis presentes no núcleo, encontra-se reduzido, devido à queima ocorrida durante os meses de operação da planta, sendo então necessário o desligamento do reator para recarga.

A recarga é necessária devido, não somente à queima do combustível nuclear, como também, ao alto poder de degradação e os efeitos da radiação sobre os materiais que compõem o elemento combustível. Assim, há um tempo limite de exposição do arranjo à radiação, e conseqüentemente, de seu tempo de permanência no núcleo do reator. Em geral, a cada recarga, 1/3 dos elementos combustíveis são trocados, e os demais redistribuídos apropriadamente. O custo da parada do reator para a recarga é bastante alto, de forma que os limites de queima de combustível são extremamente importantes, porque permitem definir, de forma segura, o limiar de

operação para o material, permitindo que o operador decida o correto dimensionamento do desempenho do elemento combustível, e isto pode minimizar o tempo de inatividade do reator, impactando positivamente a geração de energia.

Para a escolha do melhor arranjo dos elementos combustíveis, contendo combustíveis novos e queimados dentro do núcleo, são feitas simulações computacionais, que vão determinar o desempenho de cada arranjo.

## 1.2 Códigos Simuladores

Já estão bem estabelecidos na literatura [3], os cálculos computacionais envolvidos na simulação de reatores nucleares, e em especial o PWR. Em geral, eles são bastante complexos, devido ao grande número de informações envolvidas e dos dados a se extrair, mas mesmo assim, a simulação computacional é um método fundamental, se se busca uma análise confiável do funcionamento de um reator.

Existem diversos códigos que simulam a operação da planta nuclear, que não necessariamente estão abertos à comunidade científica. Para esta simulação, há os códigos neutrônicos e os códigos termohidráulicos, alguns contemplam os transientes e estacionários, outros só transientes. Encontramos ainda, os códigos que fazem o acoplamento entre os códigos. Dentre os códigos termohidráulicos podemos destacar[11]:

- Relap5
- Cobra
- Trac, desenvolvido pela Westinghouse
- ATHLET (*Analysis of THERmal-hydraulics of LEaks and Transients*)
- CATHARE

Dentre os códigos Neutrônicos temos:

- CASMO-3,-4
- PHOENIX
- PARCS, *Purdue University*
- QUABOX
- NEM, *Pennsylvania State University*
- Smabre



- Nestle (*North Carolina State University*)
- X3D

e ainda, alguns códigos que fazem o acoplamento entre os códigos, como:

- POLCA -T
- SIMTRAN, *Polytechnic University of Madrid*
- BIPR8KN c/ ATHLET, *Kurchatov Institute in Moscow*
- SAPHYR

Muitos países, para garantir a independência operacional e de monitoramento, além de evitar os altos custos envolvidos, optaram por desenvolver seus próprios códigos, ficando esses, restritos aos grupos responsáveis pelo seu desenvolvimento. O Brasil ainda utiliza os códigos dos fabricantes dos reatores, no caso o da Siemens e o da Westinghouse, e se vê obrigado a desembolsar milhares de dolares pela licença de uso.

Um código neutrônico é responsável por toda análise das reações de fissão, dentro do núcleo do reator. Fazendo parte do código neutrônico, está o subcódigo de realimentação termohidráulica, que depende da termohidráulica do núcleo do reator, e que vai realimentar o próprio código neutrônico. Um dos objetivos do presente trabalho é justamente efetuar um cálculo mais realista para a temperatura na pastilha combustível, no âmbito do subcódigo de realimentação termohidráulica. Este por sua vez, realimentará o próprio código neutrônico. A expectativa é que resultados mais reais para a temperatura permitam melhores previsões para o código neutrônico, e conseqüentemente, maior eficiência operacional do reator.

Nos dias de hoje, pode-se notar que o desenvolvimento dos códigos termohidráulicos segue duas linhas de teóricas distintas[5]:

1. Aqueles fundamentados em conceitos estritamente matemáticos
2. Aqueles que utilizam-se do conceito de canal paralelo, ou subcanal

No primeiro caso, o núcleo do reator é tratado como um todo, ele não é subdividido, e não são feitas aproximações, usando-se então, as equações básicas de conservação de energia, massa e momento, e, quando possível, as equações são resolvidas a três dimensões. No segundo, o núcleo do reator é subdividido em canais paralelos, para isso as equações são aproximadas e resolvidas em uma dimensão, são impostas condições para o tratamento em subcanais e assim, o balanço das grandezas envolvidas, baseado nas leis de conservação, são feitas para cada subcanal.

Os códigos termohidráulicos comerciais, disponíveis na literatura, na sua maioria, usam o conceito de canal paralelo, e a distribuição de temperatura na vareta combustível, será obtida de acordo com as finalidades necessárias. O que queremos dizer com isso, é que esse valor pode ser obtido de várias maneiras, e o que vai determinar a maneira deste cálculo, será onde ou para quê este valor será empregado.

Nos reatores tipo PWR, o refrigerante tem também a função de moderador de nêutrons, i.e., a água diminui a energia dos nêutros produzidos na fissão, através das colisões, além disso no refrigerante (ou moderador), é inserido ácido bórico, processo este, conhecido como boração. Por ser o Boro um absorvedor de nêutrons, ele faz o controle da população de nêutrons dentro do reator. Inversamente, se se quer aumentar o número de nêutrons, deve-se diminuir a concentração de Boro retirando-o, e neste caso o moderador deve ser trocado, o que é conhecido como diluição.

Do ponto de vista prático, controla-se a concentração de boro em função da queima de combustível, porque esta concentração é uma grandeza representativa, do tempo que um determinado esquema de carregamento permite a operação do núcleo do reator, em caráter estacionário. Quando a concentração de boro cai a determinado valor, a recarga tem de ser realizada.

O ácido bórico é dissolvido no circuito primário do reator, em elevada concentração ( $\sim 1.500ppm$ ), junto com os venenos queimáveis, para compensar a alta reatividade do carregamento, que provoca uma brusca queda da concentração inicial. Durante a operação da usina, a concentração continua a cair, até chegar a valores tão baixos quanto  $10ppm$ . Neste ponto, considera-se encerrado o ciclo de operação para o carregamento em questão, e a recarga tem de ser feita. Para Angra1, por exemplo, estes valores correspondem a cerca de 380 dias efetivos de plena potência de operação, findo os quais, a recarga nuclear é necessária. Esta recarga, por questões de segurança, econômicas, e para atender as necessidades de geração da rede, deverá ser feita da forma mais otimizada possível.

A otimização de um núcleo de reator requer, entre outras coisas, tal como explicitado em [1], resolver a equação de difusão de nêutrons multigrupo, e resolver, ainda que de forma aproximada, a equação de transporte de nêutrons, por todo o volume do núcleo, para que se possa conhecer as propriedades físicas de cada carregamento em questão. Diversos métodos, usando as mais variadas aproximações, têm sido usados para a solução da equação de difusão de nêutrons, e o assunto é ainda motivo de intensa pesquisa.

A equação de difusão de nêutrons multigrupo, é uma expressão aproximada, obtida da equação de transporte de nêutrons, e na maioria das situações de interesse, é usada na sua forma estacionária. Naturalmente, ela depende fortemente das seções de choque neutrônicas, as quais, por sua vez, dependem da distribuição de

temperatura na vareta combustível.

O cálculo da distribuição de temperatura na vareta combustível, para o caso estacionário e com a condutividade térmica constante, tem solução analítica [2]. Todavia, este não é o caso das situações reais, em que a condutividade térmica é, em geral, uma função bastante complexa da temperatura. Neste último caso, a equação de calor torna-se não linear, e de difícil solução. Em algumas situações específicas temos a solução exata para as equações não lineares [6], em outras é possível uma linearização, utilizando a transformação de Kirchoff, como proposto em [7]. Nos casos mais gerais, contudo, ela tem de ser resolvida numericamente.

Assim, é bem fundamentada a motivação dos diversos trabalhos que foram, e que continuam sendo realizados nesta área. A expectativa é obter modelos, cada vez mais realistas, que possam fornecer subsídios importantes sobre a queima do combustível e a operação do reator, e que possam ser usados para aumentar a eficiência na retirada de energia, a economia e a segurança dos processos.

### 1.3 Objetivo

Este trabalho tem como objetivo principal, o estudo e o desenvolvimento de um módulo computacional, dentro do módulo de realimentação termohidráulica, para o cálculo da distribuição de temperatura na vareta combustível, fundamentado nos conceitos físicos do problema, e o acoplamento entre os módulos de realimentação termohidráulica e o código neutrônico desenvolvidos no PEN/COPPE/UFRJ, substituindo, então, as rotinas que anteriormente alimentavam esses módulos.

O módulo neutrônico está baseado conceitualmente no método nodal, enquanto que o módulo termohidráulico é fundamentado no conceito de canal paralelo. Este fato, traz como consequência, a necessidade de uma nodalização dos subcanais. Desta forma, será, então, calculado o valor médio radial e axial da temperatura, na pastilha combustível.

Usando uma equação experimental para a condutividade térmica, a equação da temperatura será resolvida numericamente pelo método de volume finito. A distribuição de temperatura obtida, irá alimentar o módulo que calcula as seções de choque neutrônicas.

Finalmente, fazendo o acoplamento dos módulos neutrônico e de realimentação termohidráulica, com o módulo proposto, veremos que os valores encontrados para a quantidade de dias efetivos a plena potência, o chamado fator de aumento de entalpia ( $f\Delta h$ ), e as concentrações de boro ao final do ciclo, no limite das aproximações envolvidas, condizem com os valores esperados para a operação de uma planta nuclear, baseada em um reator tipo PWR.

## 1.4 Organização do Trabalho

Este trabalho está organizado da seguinte maneira. No Capítulo 2 é feita uma breve revisão bibliográfica. No Capítulo 3, discutimos a geração de calor no reator. No capítulo 4, é apresentado o modelo para realimentação termohidráulica. No capítulo 5 discute-se o método numérico usado neste trabalho, e finalmente no capítulo 6 apresentamos os resultados e conclusões e algumas recomendações para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Os códigos, neutrônico e termohidráulico, usados na simulação de uma planta nuclear, são independentes em sua concepção de modelagem, mas têm que estar interligados, tanto para troca de informações, quanto para a extração de resultados. Neste contexto, muito esforço vem sendo empregado para uma melhora nos acoplamentos entre esses códigos. Para o funcionamento perfeito de um código neutrônico, existe a necessidade das informações termohidráulicas reais do núcleo do reator, que alimentarão o código, bem como para o código termohidráulico que necessita de informações neutrônicas, mais especificamente da densidade de potência. Neste sentido, os códigos neutrônicos apresentam dentro deles, obrigatoriamente, uma realimentação termohidráulica, para os cálculos das seções de choque. O cálculo da temperatura na vareta combustível é bem conhecido, como já mencionamos. Existem diversos códigos[4] para este cálculo, com propósitos distintos. Nosso interesse específico, é a realimentação termohidráulica, e neste contexto, a adequação deste cálculo ao código neutrônico.

Apesar da grande quantidade de pesquisas envolvidas na engenharia nuclear, os códigos simuladores de reator são, em geral, de cunho comercial, tornando-os assim indisponíveis ao conhecimento público. Contudo, podemos citar alguns poucos trabalhos publicados, que fazem o tratamento específico para realimentação termohidráulica de reator tipo PWR.

Em [5], os autores apresentam uma integração entre os códigos termohidráulico e neutrônico, nomeado de X3D. A densidade de potência é calculada por nodos homogeneizados e esta, alimenta o código que calcula a temperatura na vareta combustível. Este código, por sua vez, recalcula a densidade de potência, com os novos valores que alimentam as seções de choque, e alimenta o código termohidráulico. O código termohidráulico alimenta o código de cálculo da vareta combustível com a temperatura do moderador e o código neutrônico, com a densidade do moderador. Neste modelo, o código do cálculo da temperatura na vareta combustível, é o responsável por fazer o acoplamento entre os códigos. Aqui a condutividade térmica

do material é considerada dependente da temperatura, a discretização da equação é feita por diferenças finitas, e o sistema de equações é resolvido usando o Algoritmo de Thomas. Para o cálculo do coeficiente de transferência de calor, os autores usam o pacote HETREC. O esquema, apresentado por Jewer [5], e adaptado na fig 2.1, procura ilustrar esta interdependência. Onde  $q$  é a densidade de potência,  $T_m$  a temperatura no moderador,  $T_f$  a temperatura no combustível e  $\rho$  a densidade do moderador.

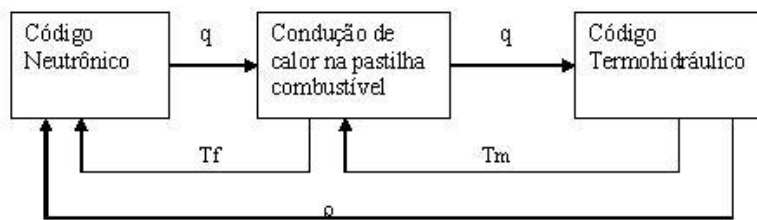


Figura 2.1: Esquema do Acoplamento dos Códigos

Em [9], é apresentado um modelo de realimentação termohidráulica para as seções de choque neutrônicas, onde a equação da temperatura na pastilha é discretizada por diferenças finitas e a condutividade térmica dada por [19], a qual também será usada em nosso trabalho.

Em [11] encontramos, de uma maneira genérica, o acoplamento feito entre alguns códigos comerciais. Naquele relatório, não está detalhado a metodologia usada para o acoplamento, mas é citado em que momento os acoplamentos são feitos.

O código neutrônico DYN3D é baseado no método de expansão nodal, e é acoplado ao código termohidráulico ATHLET, através da transferência dos valores da densidade de potência do DYN3D, para o ATHLET, e este informa ao primeiro, os parâmetros de realimentação, que são a temperatura do combustível, a temperatura do moderador, a densidade do moderador e a concentração de ácido bórico. A transferência de informação se dá nodo a nodo no processo, que foi denominado acoplamento interno.

O código PARCS, é um simulador tridimensional do núcleo do reator, que resolve equação de difusão de nêutrons no estado estacionário e em transientes. Este



neutrônicas, foi montada uma tabela da queima do combustível versus densidade de potência. O valor encontrado, corresponde à diferença entre a temperatura do moderador e a do combustível. Esses pontos (valores) obtidos desta tabela, são então interpolados, obtendo-se assim, um perfil da diferença de temperatura. A temperatura do moderador, é determinada como será apresentado no Cap.4. Pode-se então, fazer uma diferença da temperatura do moderador e obter desta maneira a temperatura do combustível. Este modelo empírico, apresenta bons resultados nas simulações, mas não podemos considerar este o melhor método a ser adotado, uma vez que esta tabela contempla apenas um determinado intervalo. Para valores fora do intervalo, há necessidade de extrapolação.



## Capítulo 3

# Geração de Calor em Reatores Nucleares

A geração de calor na pastilha combustível, ocorre quando o Urânio absorve um nêutron térmico e torna-se instável, fissionando-se em dois nuclídeos menores de tamanhos aproximadamente iguais. A reação envolve ainda a produção de nêutrons rápidos, em média em número de três, neutrinos (partícula sem carga e acredita-se, também sem massa), radiação beta e gama. Na fissão nuclear ocorre liberação de grande quantidade de energia, cerca de  $1MeV/nucleon$ , ou aproximadamente  $200MeV$  por núcleo de Urânio fissionado, que resulta em abundante produção de calor.

A geração de calor e sua transferência para o fluido refrigerante, ocorrem no sistema composto pela vareta combustível e o respectivo canal refrigerante. Embora possa haver alguma pequena transferência de energia, devido à colisões de partículas e radiação, nas regiões próximas, neste trabalho admitimos que toda a geração de calor ocorre nas pastilhas combustíveis, que compõem a vareta.

A vareta combustível é formada pelo tubo de revestimento (*cladding*), pastilha combustível (*pellet*), gás de enchimento que forma o gap, mola e tampões, como ilustrado na figura 3.1.

As soluções das equações envolvidas no código neutrônico de simulação do reator, fornecem as distribuições do fluxo de nêutrons em termos de coordenadas espaciais. Estas distribuições afetam diretamente a distribuição da geração de energia, logo, são de extrema importância ao projeto térmico do reator. A distribuição de calor é consequência da distribuição do fluxo neutrônico.

O fluxo de nêutrons térmicos, ou seja, aquele de baixas energias (ordem de grandeza de  $eV$ ), decresce dentro de cada pastilha combustível, porque o combustível absorve nêutrons térmicos para que o processo de fissão tenha lugar. A fissão, contudo, gera nêutrons rápidos, que possuem alto nível energético, e consequentemente, há aumento do fluxo de nêutrons rápidos dentro do combustível. Os

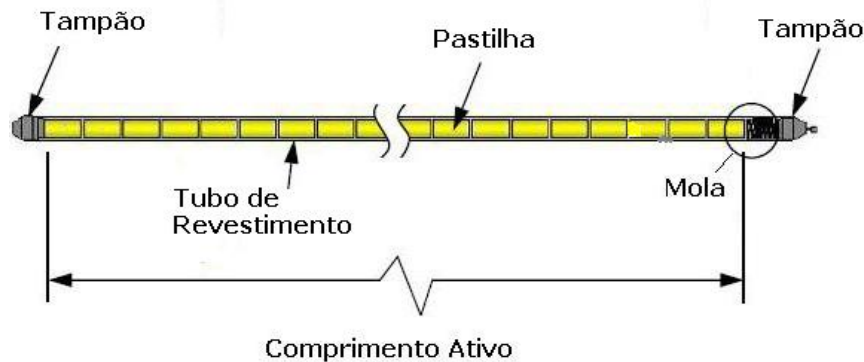


Figura 3.1: Ilustração da Vareta Combustível

nêutrons rápidos transferem energia a cada colisão com o moderador, gerando calor e nêutrons térmicos de menor nível energético, os quais, então, são absorvidos pelo urânio combustível, para que nova fissão ocorra.

A fissão nuclear, pode ser induzida ou espontânea. No reator ela ocorre de maneira induzida, mas, ao mesmo tempo controlada pela população de nêutrons existente no reator. Este controle é realizado em função das seções de choque neutrônica dos elementos físeis, além da absorção ressonante devido ao alargamento Doppler das ressonâncias[12].

Por outro lado, tanto a seção de choque quanto a absorção ressonante, carregam dependência direta com a temperatura da vareta combustível, o que torna indispensável o conhecimento da real temperatura alcançada na vareta, para o efetivo cálculo das seções de choque neutrônicas.

A fig.3.2 retirada da ref.[7], ilustra o perfil da geração de calor, para uma vareta composta de pastilhas combustíveis, todas com mesmo nível de enriquecimento, durante a operação inicial, e sem a inserção de barras de controle.

Esta distribuição corresponde a variação do fluxo de nêutrons na direção axial. Pode-se notar que a curva exhibe o comportamento cossenoidal ao longo do comprimento ativo ( $z$ ), com valor de pico centrado na origem  $z = 0$ , a qual foi fixada a meia altura da vareta.

Ao fluxo de calor gerado, está associada a variação de temperatura. A distribuição de temperatura na vareta combustível, é importante não apenas do ponto de vista operacional, mas também pela segurança, uma vez que a pastilha combustível e a estrutura da vareta (tubo de revestimento e tampões) são consideradas barreiras de segurança. Os maiores valores de temperatura encontrados estão ao longo do comprimento ativo, onde se encontram as pastilhas combustíveis, e que foi tomada como a direção  $z$ . Isto quer dizer, que devemos esperar um máximo de temperatura em  $z = 0$ .

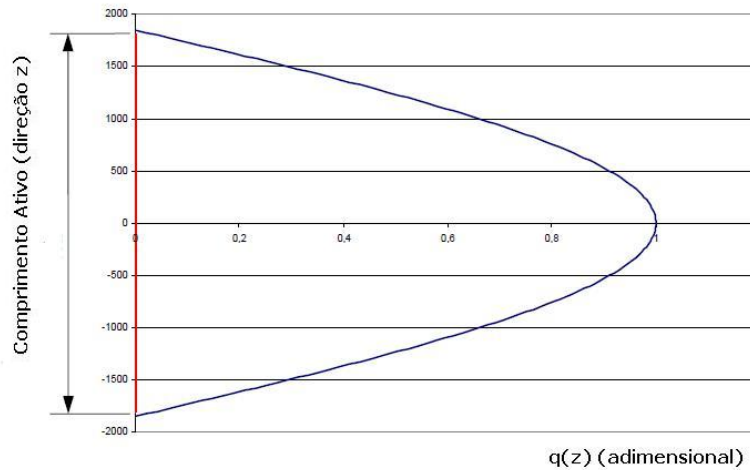


Figura 3.2: Perfil da Geração de Calor ao Longo da Vareta

No procedimento que se segue, os valores que serão obtidos para a temperatura na vareta combustível, alimentarão as seções de choque do código neutrônico, e este código, por sua vez, irá calcular a distribuição de densidade de potência, que é usada no código de realimentação termohidráulico.

### 3.1 Transferência de Calor

A Vareta Combustível de um reator tipo PWR, é composta por três regiões distintas, como mostra a figura 3.3:

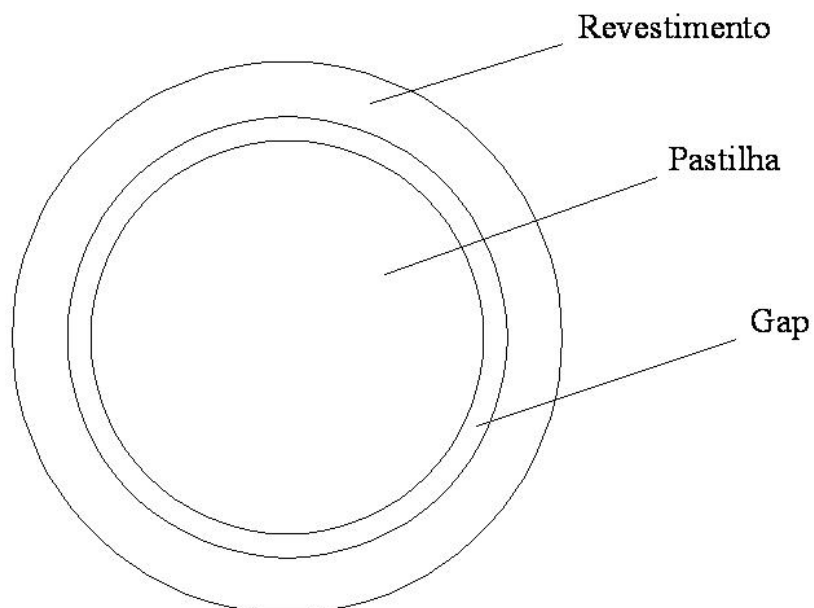


Figura 3.3: Vareta Combustível

A região 1 é formada por pastilhas cilíndricas do composto dióxido de urânio  $UO_2$ , a região 3 é formada por um cilindro de zircalloy-4, e a região 2 é o preenchimento entre as regiões 1 e 3, o qual é feito com gás hélio, e esta região é conhecida como gap.

A transferência de calor entre essas 3 regiões até o moderador, dá-se por condução, mas, por uma questão de simplificação e conveniência, usa-se o conceito de convecção na região 2. Por definição, a convecção é o mecanismo de transferência de calor de um corpo para um fluido em movimento. Esta simplificação é adotada, devido a existência de muitos graus de liberdade na equação de distribuição de calor, o que torna muito difícil a descrição junto à superfície de contato, dos campos hidrodinâmicos e de temperaturas [13]. Desta forma, neste trabalho, é considerado a transferência de calor por condução e por convecção, adotando o procedimento convencional que consiste na introdução do coeficiente de transferência de calor ( $h$ ), que é definido através de:

$$q'' = h(T_{sup} - \bar{T}_{fluido}). \quad (3.1)$$

A eq.3.1, é conhecida como *Lei do Resfriamento de Newton*,  $q''$  é o fluxo de calor na superfície,  $T_{sup}$  é a temperatura na superfície e  $\bar{T}_{fluido}$  é o valor da temperatura média do fluido.

Na condução térmica, o fluxo de calor está relacionado com a variação da temperatura do meio. O fluxo de calor foi determinado empiricamente por Fourier, como proporcional ao gradiente da temperatura [8], sendo escrito:

$$q'' = -K\nabla T \quad (3.2)$$

que é conhecida como *Lei de Fourier*. Na eq.(3.2)  $K$  é a condutividade térmica do meio. Neste ponto, podemos observar que a condutividade térmica, é o coeficiente de proporcionalidade do fluxo de calor no meio, e tem dependência não só da posição, como também da temperatura no meio. Porém, quando o meio é considerado isotrópico, ou o é efetivamente, a condutividade térmica tem dependência da temperatura somente.

## 3.2 Equação da Temperatura

A equação da distribuição de temperatura em um meio, é resultado do princípio de conservação de energia [2]. No caso de um fluido incompressível, a energia interna é  $e = C_p T$ . Finalmente, se desconsiderarmos o aquecimento devido à dissipação,

chega-se à seguinte equação:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \nabla(K\nabla T) + q''' \quad (3.3)$$

onde,  $\frac{D}{Dt}$  é o operador derivada substancial, definido como:

$$\frac{D}{Dt} = \left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}grad \right). \quad (3.4)$$

No caso de um sólido, onde os campos de velocidades são nulos, chega-se à:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(K\nabla T) + q''' \quad (3.5)$$

Para o caso estacionário, foco de interesse deste trabalho, a distribuição de temperatura pode ser escrita na notação vetorial como:

$$\nabla(K\nabla T) + q''' = 0. \quad (3.6)$$

com  $q'''$  sendo o calor gerado.

O calor gerado dentro das varetas, é removido pelo refrigerante, que passa para o gerador de vapor, sendo, em seguida, transformado em energia elétrica.

# Capítulo 4

## Modelo Físico

### 4.1 Introdução

A análise termohidráulica do núcleo do reator, é baseada no conceito de canal paralelo. Neste caso, o núcleo do reator é dividido em subcanais verticais, do tamanho do elemento combustível, como procuramos esquematizar na Fig 4.1, onde a seta indica o sentido do escoamento no subcanal.

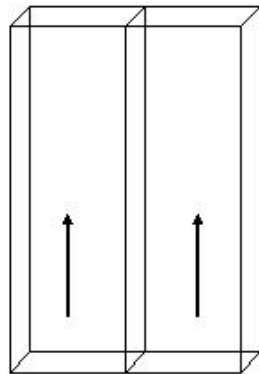


Figura 4.1: Subcanais

Na divisão do núcleo do reator em subcanais, por questão de simplicidade, são feitas as seguintes hipóteses e considerações para cada um deles:

1. são isolados, ou seja, não há escoamento transversal
2. são considerados adiabáticos
3. o fluido refrigerante é monofásico
4. não há gradiente de pressão radial e axial, o que leva à uma pressão constante.

Para a realimentação termohidráulica das seções de choque neutrônicas no PWR, no estado estacionário, essas considerações são válidas, uma vez que durante a

operação normal do reator, efeitos de escoamento transversal não interferem na neutrônica, o que leva aos canais comportarem-se como adiabáticos. Na operação normal do PWR, não existe uma quantidade significativa de geração de vazios nos subcanais, podendo então ser considerado um escoamento monofásico. O gradiente de pressão tanto axial, como radial é muito pequeno em relação à pressão de operação normal do reator, o que não acarreta em erro significativo, considerar a pressão constante.

Já a análise neutrônica do núcleo do reator, é baseada no método nodal [14], ou seja, o núcleo, além de ser subdividido em subcanais verticais do tamanho do elemento combustível, é também dividido horizontalmente de acordo com suas propriedades físicas. Desta forma, formam-se cubos, denominados nodos, como procuramos mostrar na Fig. 4.2. Esses nodos são então homogeneizados, isto é, admite-se que cada nodo apresenta propriedades físicas uniformes, o que permitirá tornar mais rápido os cálculos computacionais, sem perda significativa das características do problema. Cabe ainda ressaltar que, não necessariamente os nodos tem a mesma altura, mas têm sempre seção transversal do elemento combustível.

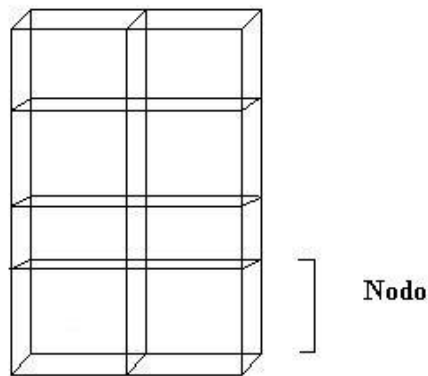


Figura 4.2: Esquema do Nodo

Além das considerações acima, o modelo ainda admite algumas hipóteses adicionais. O calor gerado pode causar alguma variação na área da pastilha, mas admitiremos que esta variação pode ser desprezada, e que a vazão mássica é constante. Assumimos também, que os percentuais de energia gerados no gap, no revestimento e no moderador, são muito pequenos quando comparados ao total, de forma que, a geração de energia é considerada estar, na sua totalidade, concentrada na pastilha combustível.

Levando-se em conta estas hipóteses e aproximações, desenvolvemos um programa computacional, em Fortran 90, que calcula a temperatura em cada nodo da vareta. Pelo fato da análise neutrônica ser feita através de nodos, vemo-nos obrigados a obter a temperatura da vareta combustível por nodo. A hipótese de nodos homogeneizados, contudo, impõe obter um valor médio de temperatura para

a pastilha combustível, que é representativo para cada nodo, e acarreta um esforço computacional relativamente pequeno.

Este programa é, então, incorporado ao módulo de realimentação termo-hidráulica, que por sua vez é acoplado ao código neutrônico, como discutiremos a seguir.

## 4.2 Modelo para as Seções de Choque para o Código Neutrônico

No modelo do simulador usado no PEN/COPPE/UFRJ, a seção de choque neutrônica é dada por uma expansão em série de Taylor da concentração de boro, da raiz quadrada da temperatura do combustível, da temperatura do moderador, da densidade do moderador, e da quantidade de xenônio, com aproximação até terceira ordem da temperatura do moderador e da raiz quadrada da temperatura do combustível. Os demais termos são trabalhados com aproximação de primeira ordem. Assim, tem-se a seguinte expressão para a seção de choque neutrônica  $\Sigma$  [1]:

$$\begin{aligned} \Sigma(C_B, \sqrt{T_F}, T_M, d_M, N_{Xe}) = & \Sigma^{ref} + \frac{\partial \Sigma}{\partial C_B}(C_B - C_B^{ref}) + \frac{\partial \Sigma}{\partial \sqrt{T_F}}(\sqrt{T_F} - \sqrt{T_F^{ref}}) + \\ & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \sqrt{T_F}^2}(\sqrt{T_F} - \sqrt{T_F^{ref}})^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \Sigma}{\partial \sqrt{T_F}^3}(\sqrt{T_F} - \sqrt{T_F^{ref}})^3 + \\ & \frac{\partial \Sigma}{\partial T_M}(T_M - T_M^{ref}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial T_M^2}(T_M - T_M^{ref})^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \Sigma}{\partial T_M^3} \times \\ & (T_M - T_M^{ref})^3 + \frac{\partial \Sigma}{\partial N_{Xe}}(N_{Xe} - N_{Xe}^{ref}) + \frac{\partial \Sigma}{\partial d_M}(d_M - d_M^{ref}) \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde  $T_F$  é a temperatura do combustível,  $C_B$  denota a concentração de boro,  $T_M$  é a temperatura do moderador, e  $N_{Xe}$  a concentração isotópica de xenônio e seus respectivos valores de referência.

Neste modelo é levado em conta até o terceiro grau nas temperaturas, para se tratar os efeitos de ir de frio à quente. O Xenônio também é considerado nesta expansão, para tratar mudanças da potência de 0 à 100%.

Conhecendo-se a seção de choque neutrônica de fissão, é possível calcular a distribuição de potência, a qual é dada por:

$$q^n = \sum_g \omega_{\Sigma_{fg}^n} \phi_g^n \quad (4.2)$$

onde o somatório é feito em  $g$ , que são os grupos de energia do nêutron,  $\phi$  o fluxo



de nêutrons,  $n$  o nodo,  $\Sigma_f$  a seção de choque de fissão e  $w$  a quantidade de energia liberada por fissão.

Finalmente, a distribuição de potência alimentará a realimentação termohidráulica que fornecerá a temperatura do combustível, que como visto acima, influencia a seção de choque neutrônica.

## 4.3 Modelo de Realimentação Termohidráulica

No modelo usado no simulador do PEN/COPPE/UFRJ, no que concerne à realimentação termohidráulica, é calculada a temperatura média no moderador, a densidade do moderador e a temperatura do combustível. Apresentamos como é feito o cálculo da temperatura no moderador e o nosso modelo para temperatura no combustível.

### 4.3.1 Temperatura no moderador

Ao longo de um dado subcanal, o moderador vai sendo aquecido, e esta variação na temperatura é calculada pela equação de conservação de energia, expressa em função da entalpia. A entalpia é obtida fazendo-se uso da tabela de vapor ASME[15], de onde, para um dado valor de temperatura e pressão, pode-se obter a respectiva entalpia. Desta forma, partindo-se dos dados de entrada, conhecidos na operação do reator nuclear, como a temperatura de entrada do moderador e a pressão de operação, a entalpia fica determinada.

Com efeito, para as condições apresentadas, e na análise no estado estacionário, em que a pressão e a vazão são constantes, escoamento monofásico, e sem fonte no moderador, a equação de energia fica:

$$\dot{m} \frac{dh_m}{dz} = q'(z) \quad (4.3)$$

onde,  $\dot{m}$  é a vazão mássica,  $h$  a entalpia no moderador, e  $q'(z)$  é a taxa linear de geração de calor no eixo axial.

Integrando na direção axial, que foi tomada ao longo de cada nodo, temos:

$$h_{out}^n - h_{in}^n = \frac{q^n}{\dot{m}} \quad (4.4)$$

onde  $n$  denota o nodo,  $h_{out}$  e  $h_{in}$  as entalpias de saída e entrada, respectivamente e  $q^n$  potência térmica por nodo.

A potência térmica do nodo é calculada no código neutrônico. Então para cada nodo, a partir da entalpia de entrada no primeiro nodo, é calculada a entalpia para os nodos seguintes, sendo que, como mostra a figura 4.3, a entalpia de saída de um

nodo, é definida como a entalpia de entrada do nodo seguinte, uma vez que não há fontes nem sorvedouros na interface.

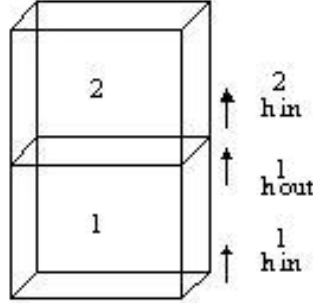


Figura 4.3: Entalpia

Para determinar a temperatura do refrigerante, representativa de cada nodo, é feita uma média aritmética sobre as entalpias de entrada e de saída, no respectivo nodo.

$$\bar{h}^n = \frac{h_{in} + h_{out}}{2}. \quad (4.5)$$

À esta entalpia média, corresponderá uma temperatura média do moderador por nodo ( $\bar{T}_m$ ), a qual pode ser obtida fazendo-se uso, novamente, da Tabela ASME.

### 4.3.2 Temperatura na Vareta Combustível

Para obtermos o valor de temperatura alcançada na vareta combustível, se faz necessário conhecer as propriedades do material. Como já havíamos mencionado, a vareta combustível do reator PWR, pode ser dividida em três regiões distintas, cada uma correspondendo a uma determinada composição. Na fig.4.4 enumeramos cada uma destas regiões. Note-se que na figura não nos preocupamos em representar a vareta nas suas reais dimensões, de modo que ela serve apenas para ilustrar as regiões da pastilha, gap, revestimento e moderador.

A região 1, que é a pastilha combustível, é formada pelo composto dióxido de Urânio ( $UO_2$ ), a 95% de densidade. Uma certa porosidade é necessária, para que os gases produzidos na fissão, possam escapar sem romper a estrutura da pastilha. Em relação a este aspecto, muitos estudos têm sido desenvolvidos na área dos combustíveis nucleares [16,17,18], com o objetivo de se obter um maior detalhamento na descrição das propriedades termofísicas do dióxido de urânio.

A região 2, o gap, é formada por gás Hélio, e, por se tratar de fluido, precisamos conhecer seu coeficiente de transferência de calor ( $h_g$ ). Contudo, nas condições da

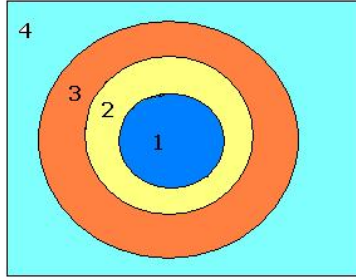


Figura 4.4: Regiões da Vareta

vareta combustível, por ser muito pequeno, e por estarmos trabalhando em regime estacionário,  $h_g$  será considerado constante. Vale ressaltar ainda, que em muitos casos transientes,  $h_g$  também é considerado constante [2].

A região 3, constitui o revestimento, e é formada pelo composto Zircaloy-4. A condutividade térmica do revestimento ( $K_r$ ) é aqui considerada constante, devido a sua diminuta espessura, e por não haver variação significativa da condutividade na faixa de temperatura em que estamos interessados.

Finalmente, a região 4, é constituída pelo moderador ou refrigerante.

Códigos computacionais, como o COSMO, foram desenvolvidos para a análise da distribuição de temperatura na pastilha, gap e revestimento, durante o estado estacionário e transiente. Nestes códigos, leva-se em consideração o efeito nas bordas da pastilha (*Rim effect*), bem como a análise da porosidade nessas regiões. Um dos objetivos de tais estudos, é estabelecer critérios e modelos de queima, de forma que seja possível um reaproveitamento do material já queimado, o que resultaria em menos rejeitos radioativos.

Apesar da importância destes estudos, nosso interesse é obter uma temperatura média representativa no nodo, de forma que podemos apropriadamente desconsiderar os efeitos de bordas, e excentricidades, com perda de informação relativamente pequena para os nossos objetivos.

Em nossos cálculos, a propriedade termofísica relevante é a condutividade térmica ( $K_f$ ). Infelizmente, não existe uma equação que forneça  $K_f$  em função da temperatura, obtida de princípios fundamentais. Assim, tomamos a expressão obtida empiricamente por Fink [19], que é apropriada para o intervalo de 550 até 2600 Kelvin.

$$K_f = \frac{100}{7.5408 + 17.692t + 3.6142t^2} + \frac{6400}{t^{5/2}} \exp\left(\frac{-16,35}{t}\right) \quad (4.6)$$

onde  $t = T(K)/1000$ , e  $K_f$  é a condutividade no combustível em  $Wm^{-1}K^{-1}$ .

Na obtenção desta equação, Fink também não levou em conta os efeitos das bordas, e da porosidade.

Com a condutividade térmica é, então, possível o cálculo da temperatura na vareta, cuja variação dependerá da quantidade de calor que é trocado com o moderador. O refrigerante, sendo um fluido, terá um determinado coeficiente de transferência de calor, cujo cálculo apresentamos a seguir.

### 4.3.3 Cálculo do Coeficiente de Transferência de Calor do Moderador

A obtenção do coeficiente de transferência de calor  $h$ , requer uma análise mais detalhada da termohidráulica do núcleo do reator, visto ser esta uma variável essencialmente empírica, e introduzida para simplificação da condução de calor no fluido.

No modelo proposto, onde não há mudança de fase, é necessário a determinação dos números adimensionais de Reynolds, Prandtl e Nusselt para o escoamento. A geometria do canal do escoamento é não apenas importante, mas determinante para a escolha das relações empíricas a serem usadas.

O arranjo das varetas combustíveis, no elemento combustível, é quadrático. A fig. 4.5 mostra um conjunto com quatro varetas combustíveis.

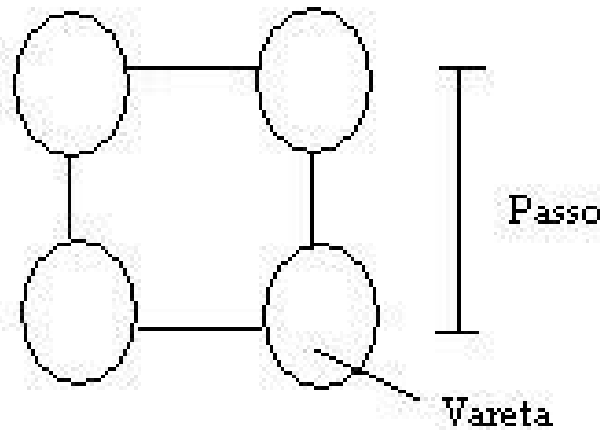


Figura 4.5: Arranjo Quadrático

Este mesmo conjunto pode ser representado como ilustrado na fig 4.6, que tem a mesma geometria e o mesmo canal, com uma maneira simples de visualização.

Uma das relações empíricas é o número de Nusselt  $Nu$ , que proporciona uma medida da transferência convectiva de calor na superfície, devido ao movimento de

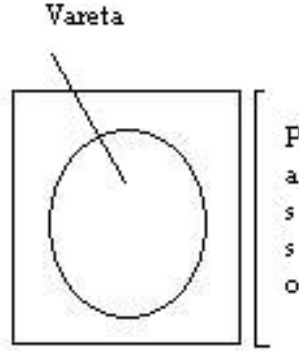


Figura 4.6: Geometria Simples Equivalente ao Arranjo Quadrático

um fluido, e é dado por:

$$Nu \equiv \frac{hD_H}{K_{agua}} \quad (4.7)$$

onde  $D_H$  é o diâmetro hidráulico equivalente, e  $K_{agua}$  a condutividade térmica da água.

O diâmetro hidráulico equivalente é definido como:

$$D_H = \frac{4A_{canal}}{P_m} \quad (4.8)$$

onde  $A_{canal}$  é a área do canal, e  $P_m$  o perímetro molhado de uma seção transversal do canal analisado.

$$A_{canal} = p^2 - \pi \frac{d^2}{4} \quad (4.9)$$

$$P_m = 2\pi r_{raio_{ext}} \quad (4.10)$$

com,  $d$  o diâmetro da vareta,  $r_{raio_{ext}}$  o raio externo da vareta, e  $p$  o passo - distância entre os centros de uma vareta e outra.

O número de Reynolds, dependerá não somente da geometria do escoamento, que é bem definida, como também das propriedades físicas do fluido. Este número mede a importância entre os efeitos de inércia e os efeitos da viscosidade no fluido, e é dado por:

$$Re = \frac{\rho V D_H}{\mu} \quad (4.11)$$

com  $\rho$  e  $V$ , sendo a densidade e a velocidade da água respectivamente.

Rearranjando para os dados de entrada disponíveis para o Reator ficamos com:

$$Re = \frac{\dot{m}D_H}{\mu A_{canal}} \quad (4.12)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido.

Por último, temos o número adimensional de Prandtl, que aproxima a razão de difusividade de momento (viscosidade cinemática) e difusividade térmica de um fluido, expressando a relação entre a difusão de quantidade de movimento e a difusão de quantidade de calor dentro do próprio fluido. É uma medida da eficiência destas transferências, e, por exemplo, se  $Pr$  é pequeno, significa que o calor difunde-se muito facilmente comparado à velocidade da massa (momento).

O número de Prandtl é dado por:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_P}{K_{agua}} \quad (4.13)$$

onde,  $\nu$  é a viscosidade cinemática e  $\alpha$  a difusividade térmica,  $C_P$  o calor específico à pressão constante e  $K_{agua}$  a condutividade térmica do fluido.

Desta forma, três propriedades do fluido precisam ser determinadas, a saber:

- Condutividade Térmica
- Viscosidade dinâmica
- Prandtl.

Com este objetivo, fizemos uso da Tabela Asme ( Versão 1.1, Abril 2003) que usa rotinas em Fortran 77. As rotinas de interesse para o cálculo das propriedades acima, foram acopladas ao nosso programa e fornecem os valores necessários para o cálculo. Neste ponto cabe ressaltar que os valores são específicos para a água. No reator, o refrigerante é composto, além da água, de Boro, o que de certa maneira altera as propriedades da água pura, mas esta alteração, não é significativa nestes cálculos.

Para um determinado subcanal, a relação empírica utilizada para o número de Nusselt é a de Dittus-Boelter[2], a qual é dada por:

$$Nu = 0,023Re^{0,8}Pr^{0,4} \quad (4.14)$$

desde que  $0,7 < Pr < 100$  e  $Re > 10.000$ , para o fluido aquecido. Cabe lembrar, que como neste trabalho o escoamento ao longo do canal é considerado monofásico, não será feita análise de fluxo de calor crítico, e portanto, se o reator inicia ou não uma ebulição nucleada (DNB - *Departure from Nucleate Boiling*). Nos limites desta

fase, em que a nucleação está presente, seriam necessárias mudanças nas correlações para o coeficiente de transferência de calor.

A seguir, com essas informações implementadas, determina-se o coeficiente de transferência de calor do moderador para cada nodo, e assim, como será apresentado mais adiante, os valores encontrados para  $h$  alimentarão a subrotina que calcula a temperatura na pastilha combustível .

A equação de calor na pastilha combustível é:

$$-\nabla K_f(T)\nabla T = q''' \quad (4.15)$$

A equação de calor no revestimento é:

$$-\nabla K_c \nabla T = 0 \quad (4.16)$$

Como a condutividade térmica da pastilha é uma função da temperatura, ficamos com uma equação não linear. Já a condutividade térmica no revestimento é considerada constante. Será usada a técnica de volumes finitos para a discretização das equações.

## 4.4 Acoplamento da Realimentação Termohidráulica ao Código Neutrônico

Para uma melhor compreensão do objetivo do módulo proposto, é importante notar como se dá a interdependência e realimentação, entre os códigos neutrônico e de realimentação termohidráulica.

O módulo de realimentação termohidráulica, como foi visto, calcula uma temperatura média no refrigerante para cada nodo. Esta temperatura é usada para o cálculo da temperatura na vareta combustível, onde também é obtido um valor médio por nodo, que será apresentado no cap.5. As temperaturas são usadas no código neutrônico, para o cálculo das seções de choque. Com as seções de choque, obtém-se a densidade de potência, a qual, por sua vez, alimenta o módulo da temperatura da vareta.

Na fig.4.7, onde RTH, é o módulo de realimentação termohidráulica,  $\rho$  é a densidade do moderador,  $T_M$  a temperatura do moderador e  $T_F$  a temperatura do combustível, procuramos esquematizar como se dá a realimentação termohidráulica no modelo usado para o simulador desenvolvido no PEN/COPPE/UFRJ. Simulador este, utilizado neste trabalho com o propósito de alimentar e ser alimentado pelo módulo proposto. A estrutura independente de cada código permanece inalterada, e a conexão entre eles ocorre somente através dos dados gerados por cada um.

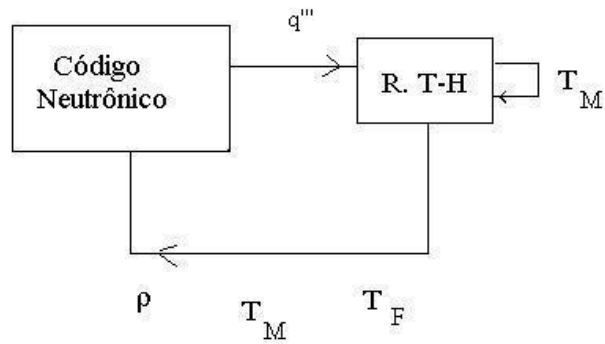


Figura 4.7: Esquema da Realimentação TH no Simulador Neutrônico/PEN

Ao calcularmos a temperatura do combustível com um modelo físico, foi necessário o cálculo do coeficiente de transferência de calor no moderador, com o uso das rotinas da ASME, como foi mencionado. Essas rotinas foram incluídas no próprio módulo de realimentação termohidráulica. A temperatura do moderador alimenta a temperatura do combustível, dentro da própria realimentação termohidráulica, como mostra a esquema da fig. 4.7.

A realimentação termohidráulica, dentro de um código neutrônico, tem a função de alimentar as seções de choque neutrônicas. Aqui, preocupamo-nos somente em descrever esta parte do código, que gerará os dados para alimentar o módulo proposto. Contudo, cabe ressaltar ainda, que o código neutrônico é muito mais extenso e complexo que o módulo ora implementado, e tem objetivos de cálculos muito mais amplos.



# Capítulo 5

## Método Numérico

### 5.1 Introdução

Podemos classificar os métodos numéricos quanto a estratégia usada, i.e., temos os métodos que procuram uma solução aproximada da equação, que são os métodos dos Elementos Finitos e os métodos sem malha, e os que aproximam a equação diferencial que são os métodos de Diferenças Finitas e Volumes Finitos.

Em [20], o problema da distribuição de temperatura na vareta combustível com condutividade térmica constante, é resolvido numericamente, usando o método das diferenças finitas, e utilizando o conceito de ponto fictício para as fronteiras. Em [21] é abordado a transferência de calor numa barra usando diferenças finitas com a condutividade térmica dependente da temperatura.

### 5.2 Volumes Finitos

O método de volumes finitos é um dos mecanismos usados para discretizar uma Equação Diferencial Parcial (EDP), e é o método que será adotado neste trabalho. Esta técnica consiste em integrar a EDP num volume entre as fronteiras de interesse. Para este método, pode-se usar com facilidade uma malha de espaçamento não-uniforme. De acordo com Fortuna [10], este método está diretamente relacionado ao conceito de fluxo entre regiões, o que o torna interessante para este problema.

Como pode ser observado nas equações a seguir, ao usar o método de volumes finitos, obtemos equações de diferenças finitas, que são resolvidas para obter a solução numérica da equação.

#### 5.2.1 Discretização da Equação

A geometria do problema é cilíndrica e chamaremos as interfaces, como mostra a fig 5.1, de pontos M, N e P, respectivamente, raio da pastilha, raio do revestimento

interno e raio do revestimento externo.

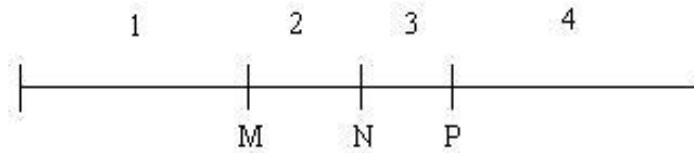


Figura 5.1: Representação dos Pontos nas Interfaces entre as Regiões

para as condições de interface usamos:

- Lei de Fourier (eq.3.2)  $q'' = -K \frac{dT}{dr}$
- Lei de Resfriamento de Newton (eq.3.1)  $q''_{sup} = h(T_{sup} - T_{fluido})$
- $\left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=0} = 0$

A fig 5.2 mostra a discretização na pastilha, onde  $\delta$  é o espaçamento da malha, com  $\delta$  constante e  $i$  um ponto qualquer da malha.

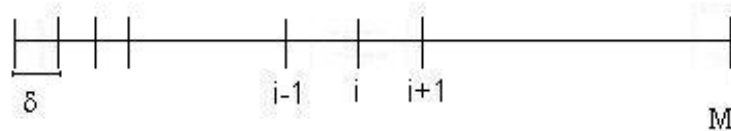


Figura 5.2: Malha na Pastilha

Na primeira região que será integrada, para  $0 < r < \delta/2$ , como mostra a Fig 5.3, usa-se a condição de que a temperatura é finita e integra-se (4.15) neste volume:

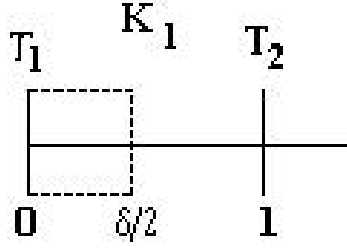


Figura 5.3: Malha de  $0 < r < \delta/2$

$$\int_0^{\delta/2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r K_f \frac{dT}{dr} \right) 2\pi r dr = - \int_0^{\delta/2} q''' 2\pi r dr \quad (5.1)$$

e fazendo a seguinte aproximação por diferenças finitas, com a condutividade térmica no centro da malha, e as temperaturas nos pontos da malha:

$$r K_f \frac{dT}{dr} \Big|_{\delta/2} \cong K_1 \frac{\delta}{2} \frac{T_2 - T_1}{\delta} \quad (5.2)$$

chega-se à:

$$K_1 T_1 - K_1 T_2 = q''' \frac{\delta^2}{4} \quad (5.3)$$

A segunda região à ser discretizada é a parte interna da pastilha. Integra-se (4.15), de  $r_{i-\frac{1}{2}} < r < r_{i+\frac{1}{2}}$ , i.e., em torno do ponto  $i$ , como mostra a fig.(5.4):

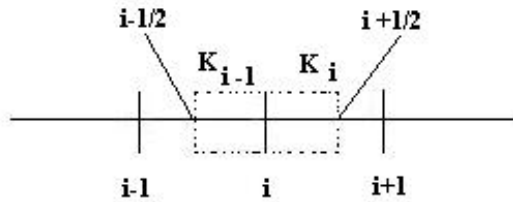


Figura 5.4: Integração em Torno do Ponto  $i$

$$\int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r K_f \frac{dT}{dr} \right) 2\pi r dr = - \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} q''' 2\pi r dr \quad (5.4)$$

$$rK_f \frac{dT}{dr} \Big|_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} = -q''' \frac{r^2}{2} \Big|_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} \quad (5.5)$$

Fazendo a mesma aproximação por diferenças finitas, que a feita em (5.2), chega-se à:

$$r_{i+\frac{1}{2}} K_f^i \frac{T_{i+1} - T_i}{\delta} - r_{i-\frac{1}{2}} K_f^{i-1} \frac{T_i - T_{i-1}}{\delta} = -\frac{q'''}{2} (r_{i+\frac{1}{2}})^2 + \frac{q'''}{2} (r_{i-\frac{1}{2}})^2. \quad (5.6)$$

Como  $r_i = (i-1)\delta$ , temos  $r_{i+1/2} = (i-1/2)\delta$  e  $r_{i-1/2} = (i-3/2)\delta$ . Substituindo, então em (5.6) chega-se à equação discretizada no interior da pastilha:

$$(i-3/2)K_f^{i-1}T_{i-1} - \left( (i-1/2)K_f^i + (i-3/2)K_f^{i-1} \right) T_i + (i-1/2)K_f^i T_{i+1} = -q''' \delta^2 (i-1) \quad (5.7)$$

A última região na pastilha a ser integrada é a interface de  $r_{M-\frac{1}{2}} < r < r_M$ . Usando novamente a (4.15), integramos o contorno como mostra a fig. (5.5) :

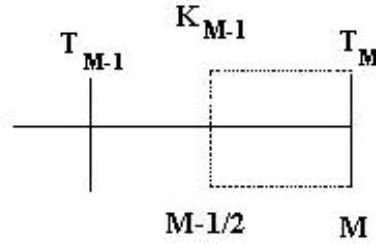


Figura 5.5: Malha no Contorno da Pastilha

$$\int_{r_{M-\frac{1}{2}}}^{r_M} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( rK_f \frac{dT}{dr} \right) 2\pi r dr = - \int_{r_{M-\frac{1}{2}}}^{r_M} q''' 2\pi r dr \quad (5.8)$$

como,

- $r_{M-\frac{1}{2}} = (M - \frac{3}{2})\delta$
- $r_M = r_c = (M - 1)\delta$

ficamos no lado esquerdo desta integral com:

$$rK_f \frac{dT}{dr} \Big|_{(M-1)\delta} - rK_f \frac{dT}{dr} \Big|_{(M-3/2)\delta} \quad (5.9)$$

No primeiro termo da eq.5.9,  $(M - 1)\delta$  é o raio do combustível  $r_c$ , e usamos a lei de resfriamento de Newton para calcular o fluxo de calor neste ponto. Fazemos aqui a consideração de que, por ser o Gap pequeno, usamos a aproximação de que a temperatura do Gap é a mesma da parede interna do revestimento. Com esta consideração, a informação do gap, vem através do coeficiente de transferência de calor do Gap,  $h_g$ . Assim temos:

$$q'' \Big|_M = h_g(T_M - T_N) \quad (5.10)$$

fazendo-se uso da lei de Fourier, podemos agora reescrever este primeiro termo como:

$$(M - 1)\delta K_f \frac{dT}{dr} \Big|_{(M-1)\delta} \cong -r_c h_g (T_M - T_N) \quad (5.11)$$

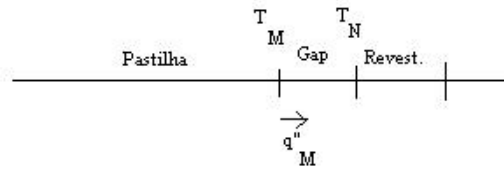


Figura 5.6: Gap

Na fig.5.6  $T_N$ , é a temperatura na parede interna do revestimento, que será determinada.

No segundo termo da eq.5.9, ponto  $(M - \frac{1}{2})$ , é usada a mesma aproximação por diferenças finitas feita anteriormente, como segue:

$$r K_f \frac{dT}{dr} \Big|_{(M-3/2)\delta} \cong (M - \frac{3}{2})\delta K_{M-1} \frac{(T_M - T_{M-1})}{\delta} \quad (5.12)$$

Ficamos então, com a seguinte equação na interface:

$$(M - \frac{3}{2})K_{M-1}T_{M-1} - (r_c h_g + (M - \frac{3}{2})K_{M-1})T_M + r_c h_g T_N = (M - \frac{5}{4})\delta^2 q'' \quad (5.13)$$

Para obtermos o valor de  $T_N$ , utilizaremos o mesmo desenvolvimento feito até agora, isto é, discretizar a equação de distribuição de temperatura, no revestimento,

usando o método dos volumes finitos, sendo que, o tamanho da malha será o próprio tamanho do revestimento,  $\delta_{rev}$ . A Fig (5.7) apresenta o esquema da malha no revestimento.

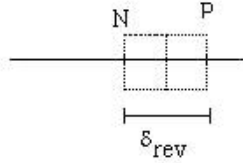


Figura 5.7: Malha no Revestimento

O revestimento, será dividido em duas regiões, e faremos a integração em cada uma delas separadamente. Na primeira região, de  $r_{rev} < r < r_{rev} + \frac{\delta_{rev}}{2}$  tem-se:

$$\int_{r_{rev}}^{r_{rev} + \frac{\delta_{rev}}{2}} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (K_c r \frac{dT}{dr}) 2\pi r dr = 0 \quad (5.14)$$

onde  $r_{rev}$  é o raio interno do revestimento e  $K_c$  é a condutividade térmica do revestimento.

$$K_c r \frac{dT}{dr} \Big|_{r_{rev} + \frac{\delta_{rev}}{2}} - K_c r \frac{dT}{dr} \Big|_{r_{rev} = N} = 0 \quad (5.15)$$

Fazendo uma aproximação por diferenças finitas para o primeiro termo da equação tem-se:

$$\frac{dT}{dr} \Big|_{r_{rev} + \frac{\delta_{rev}}{2}} \cong \frac{T_P - T_N}{\delta_{rev}} \quad (5.16)$$

Para o segundo termo da equação, usa-se a Lei de Fourier para o fluxo de calor no ponto  $N$ :

$$q_N'' = -K_c \frac{dT}{dr} \Big|_N \quad (5.17)$$

e como  $q_N' = q_M'$ , usando a lei de resfriamento de Newton:

$$r_{rev} q_N'' = h_g (T_M - T_N) r_c = q_M'' \quad (5.18)$$

chega-se à:

$$K_c (r_{rev} + \frac{\delta_{rev}}{2}) \frac{(T_P - T_N)}{\delta_{rev}} + h_g (T_M - T_N) r_c = 0 \quad (5.19)$$

Rearranjando esta equação:

$$K_c A T_P - (K_c A + h_g r_c) T_N + h_g r_c T_M = 0 \quad (5.20)$$

onde  $A \equiv \frac{r_{rev} + \delta_{rev}/2}{\delta_{rev}}$

A segunda parte do revestimento é integrada, o que nos leva ao valor da temperatura no ponto  $P$ . O procedimento é o mesmo já adotado, e chega-se à seguinte expressão para a temperatura neste ponto:

$$T_P = \frac{r_{ext} h_m \bar{T}_m + K_c A T_N}{r_{ext} h_m + A K_c} \quad (5.21)$$

Substituindo (5.21) em (5.20) encontra-se o valor da temperatura no ponto  $N$ :

$$T_N = \frac{K_c A r_{ext} h_m \bar{T}_m + h_g r_c B T_M}{K_c A B + h_g r_c B - (K_c A)^2} \quad (5.22)$$

onde  $B \equiv r_{ext} h_m + K_c A$ .

Substituindo então, o valor encontrado para  $T_N$  em (5.13):

$$K_M (M - 1/2) T_{M-1} - \left\{ r_c h_g + K_M (M - 1/2) - \frac{r_c^2 h_g^2 B}{K_c A B + h_g r_c B - (K_c A)^2} \right\} T_M = \quad (5.23)$$

$$-q \frac{\delta^2}{2} (M - 1/4) - \frac{r_c h_g K_c A r_{ext} h_m \bar{T}_m}{K_c A B + h_g r_c B - (K_c A)^2}$$

As equações (5.3), (5.7) e (5.25) formam um sistema linear de equações na pastilha, que tem a matriz de coeficientes  $\mathbf{G}$  dada por:

$$G = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & a_i & b_i & c_i & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_M & b_M \end{pmatrix}$$

onde:

$$b_1 = K_1$$

$$c_1 = -K_1$$

$$a_i = (i - \frac{3}{2}) K_{i-1}$$

$$b_i = -\left(\left(i - \frac{1}{2}\right)K_i + \left(i - \frac{3}{2}\right)K_{i-1}\right)$$

$$c_i = \left(i - \frac{1}{2}\right)K_i$$

$$a_M = K_M(M - 1/2)$$

$$b_M = \frac{r_c^2 h_g^2 B}{K_c AB + h_g r_c B - K_c^2 A^2} - r_c h_g - K_M(M - 1/2)$$

Esta matriz é multiplicada pela matriz coluna T, cujos elementos são os valores da temperatura nos pontos da malha:

$$T = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_i \\ \vdots \\ T_M \end{pmatrix}.$$

A matriz coluna P, com os termos fontes é dada por:

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}q''' \delta^2 \\ \vdots \\ (i-1)q''' \delta^2 \\ \vdots \\ -q''' \frac{\delta^2}{2}(M-1/4) - \frac{r_c h_g K_c A r_{ext} h_m \bar{T}_m}{K_c AB + h_g r_c B - K_c^2 A^2} \end{pmatrix}.$$

A matriz dos coeficientes é uma matriz tridiagonal, e, como está demonstrado em [22], a solução deste sistema linear é obtido aplicando-se a redução de Gauss, obtendo-se um sistema equivalente, representado pela matriz S, mostrada abaixo, que com uma substituição retrógada, permite chegar à solução do sistema.

$$S = \begin{pmatrix} 1 & s_1 & 0 & \vdots & 0 \\ 0 & 1 & s_2 & \vdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & \vdots & \ddots & 1 & s_{n-1} \\ 0 & 0 & \vdots & & 1 \end{pmatrix}$$

Observa-se que a matriz dos coeficientes fica reduzida à matriz S, cuja a diagonal principal tem todos os seus elementos iguais a 1, e a diagonal superior, que carrega as informações das condutividades térmicas na pastilha combustível. Com isto, pela última linha desta matriz podemos, por substituição reversa ou retrógada, resolver este sistema linear. Este algoritmo é o conhecido Algoritmo de Thomas, um método direto para resolver o sistema.



Como neste modelo, temos a condutividade térmica em função da temperatura, fica-se com duas incógnitas em cada ponto, isto é, a condutividade térmica e a temperatura. Para resolver isto, usamos o método iterativo, que consiste numa inicialização para os valores de temperatura para todos os pontos, achando assim, as respectivas condutividades térmicas. Feito isto, encontra-se agora novos valores para a temperatura na pastilha, que novamente alimentarão as condutividades térmicas. Este processo irá se repetir até que se atinja o critério de convergência imposto. O critério de convergência usado foi:

$$\max \text{val}_l \left| \frac{T_{f,l}^i - T_{f,l}^{i-1}}{T_{f,l}^{i-1}} \right| \leq \epsilon \quad (5.24)$$

onde,  $\epsilon$  é o chamado parâmetro de convergência e para este programa usamos o valor de 0,001,  $T_{f,l}$  é a temperatura do combustível em cada ponto da malha,  $i$  representa cada iteração.

Este sistema converge em poucas iterações.

### 5.3 Temperatura Média por Nodo

Como vimos, para a representação do núcleo do reator em nodos, precisamos de um valor representativo da temperatura no nodo, que alimentará as seções de choque. Foram calculados  $M$  (número de divisões da malha) valores de temperatura na pastilha. Usando a mesma discretização feita anteriormente, fazemos agora uma média, para cada nodo. Note aqui, que tomamos somente os valores da temperatura dentro da pastilha, visto ser na pastilha que as fissões ocorrem, e esta temperatura influenciará as seções de choque.

$$\bar{T} = \frac{\int_0^{r_{comb}} T(r) 2\pi r dr}{\int_0^{r_{comb}} 2\pi r dr} \quad (5.25)$$

onde o numerador da (5.25) acima será reescrito da seguinte maneira:

$$\int_0^{r_{comb}} T(r) r dr = \int_0^{\frac{\delta}{2}} T(r) r dr + \sum \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} T(r) r dr + \int_{r_{comb-1/2}}^{r_{comb}} T(r) r dr \quad (5.26)$$

# Capítulo 6

## Resultados e Discussões

O modelo proposto foi implementado em Fortran 90, e testado na rotina de realimentação termohidráulica, que alimenta o código neutrônico do simulador desenvolvido no PEN/COPPE/UFRJ. As antigas rotinas existentes, para o cálculo da temperatura média na pastilha combustível, foram então substituídas, e acrescentou-se ao simulador a rotina que calcula o coeficiente de transferência de calor no moderador. Estas rotinas constituem, bem como o modelo físico da realimentação termohidráulica, os principais resultados e a contribuição deste trabalho.

O modelo empírico do simulador do PEN/COPPE/UFRJ, usava uma correlação da diferença de temperatura entre o elemento combustível e o moderador, como função da queima e da densidade de potência, como foi comentado no Cap. 2. Os valores encontrados em nossas rotinas são então, comparados com os resultados obtidos pelo modelo empírico.

O programa foi usado para simular situações reais de operação de um reator PWR. A solução numérica das equações foram obtidas usando o método de volumes finitos, tal como apresentado no Cap.5. As equações de diferenças finitas foram resolvidas, tomando-se como valores iniciais o conjunto apresentado abaixo:

- raio da pastilha
- raio interno e externo do revestimento
- comprimento da vareta
- passo
- vazão mássica
- temperatura de entrada no moderador
- pressão

Testes de convergência para a temperatura no combustível, foram realizados com resultados bastante satisfatórios. Em particular, apenas umas poucas iterações (de 3 à 5) são necessárias para que o critério de convergência imposto (0,001) seja atingido.

Como resultado da simulação, são gerados valores para a temperatura média, para cada nodo dos elementos combustíveis. Os estudos foram realizados sobre uma amostra representativa de elementos combustíveis, que correspondem à 1/4 do total do núcleo do reator. Esta situação encontra-se ilustrada na Fig.6.1, onde cada elemento combustível encontra-se numerado de forma usual.

31	32	33	34	35	36	37
24	25	26	27	28	29	30
	18	19	20	21	22	23
	12	13	14	15	16	17
		7	8	9	10	11
			3	4	5	6
					1	2

Figura 6.1: Esquema Representativo de um Quarto do Núcleo do Reator

Cada um destes elementos combustíveis, foi dividido em 16 nodos. Os resultados obtidos para as distribuições de temperatura média por nodo, para as condições iniciais, e no caso de início de operação (queima zero), para cada elemento combustível da amostra, encontram-se no Apêndice A . Aqui apresentamos, alguns elementos representativos. Nestas figuras, EC denota Elemento Combustível. Os resultados obtidos pelo nosso modelo estão em linhas sólidas.

Pode-se notar que as curvas exibem um comportamento cossenoidal ao longo do comprimento ativo da vareta combustível, com valor de pico próximo a meia altura da vareta, e correspondem à variação do fluxo de nêutrons na direção axial, e com o mesmo perfil da geração de calor (cf. Fig.3.2).

Para comparação foram também plotados nos gráficos, os resultados obtidos usando-se o modelo empírico para a realimentação do código neutrônico, e corres-

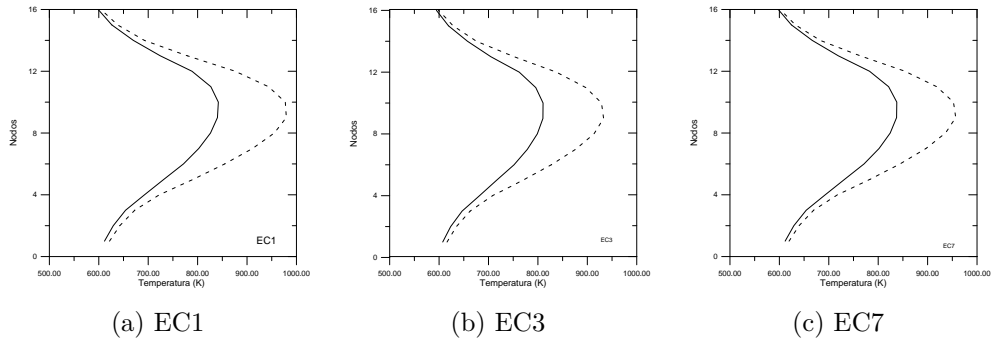


Figura 6.2: Elementos Combustíveis - Periferia

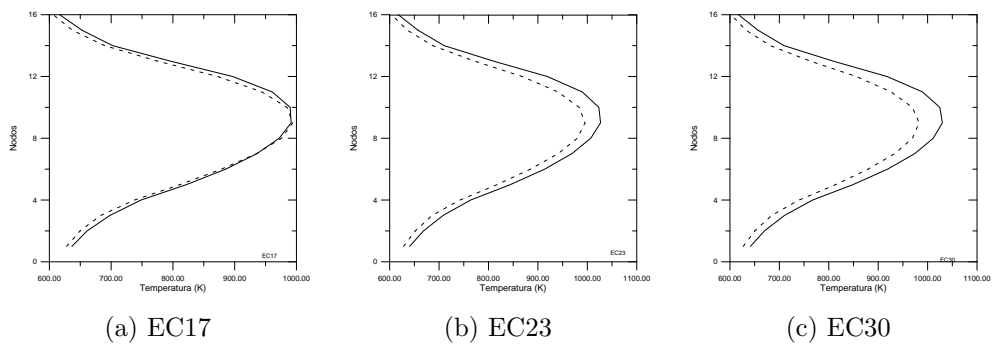


Figura 6.3: Elementos Combustíveis -Centrais

pondem às linhas tracejadas nas figuras.

Pode-se notar que, embora o modelo empírico seja capaz de reproduzir os principais comportamentos qualitativos das curvas, algumas importantes diferenças são observadas entre os dois modelos. Em particular, há uma diferença significativa nos elementos combustíveis da periferia. Afim de tornar mais claro o que dissemos, apresentamos na Fig.(6.4) a diferença percentual entre os picos de temperatura média, em cada elemento combustível.

-12,81	-2,37	-1,47	-0,30	3,04	4,56	5,77
-16,25	-4,88	-2,53	0,24	2,18	4,35	4,57
	-10,58	-3,51	-1,17	1,27	2,20	3,06
	-15,14	-5,47	-2,68	-1,14	0,27	-0,26
		-14,24	-5,43	-3,45	-2,46	-1,38
			-15,11	-10,35	-4,80	-2,31
					-12,78	-16,34

Figura 6.4: Diferença Percentual entre as Temperaturas de Cada Modelo

Nesta figura, o sinal menos indica que a temperatura obtida pelo modelo empírico está superestimada em relação ao modelo físico usado no cálculo de realimentação termohidráulica. Pode-se observar que essas situações ocorrem em toda periferia do arranjo dos elementos combustíveis. Os números positivos, mostram as regiões onde a interpolação subestima esta temperatura.

Fazendo a mesma análise, da diferença percentual entre as temperaturas do oitavo nodo dos dois modelos, para 210 dias de operação (Fig. 6.5) e para 360 dias de operação (Fig. 6.6), observa-se que a diferença entre as temperaturas previstas pelos dois modelos, apesar de uma redução, continua acentuada na periferia. A escolha do oitavo nodo deve-se ao fato de que, para queima zero, este é o nodo cuja temperatura atinge o maior valor.

Como a diferença percentual permanece muito superior, também ao longo da queima, isto sugere que este erro está relacionado com os refletores.

-6,47	-1,47	-0,42	0,58	0,60	0,53	0,60
-8,28	-2,57	-0,41	0,19	1,10	0,65	0,53
	-5,63	-1,64	0,19	0,38	1,10	0,60
	-8,62	-2,71	-1,25	0,19	0,19	0,58
		-8,31	-2,70	-2,13	-0,40	-0,42
			-8,66	-5,53	-2,56	-1,47
					-8,36	-6,48

Figura 6.5: Diferença percentual entre as temperaturas de cada modelo para 210 dias de queima

-5,17	0,25	1,21	2,26	1,97	1,78	1,80
-7,16	-0,88	1,45	1,76	2,59	1,95	1,78
	-3,73	0,02	2,03	1,91	2,60	1,98
	-7,32	-0,62	0,50	2,03	1,77	2,22
		-6,71	-0,61	0,02	1,46	1,22
			-7,36	-3,64	-0,87	0,25
					-5,18	-3,49

Figura 6.6: Diferença percentual entre as temperaturas de cada modelo para 360 dias de queima

Apresentamos abaixo, no esquema de 1/4 de núcleo, uma visualização dos refletores, representados pela letra R. O cálculo das seções de choque nos refletores, apesar de não ter uma dependência direta com a temperatura do combustível, é feito, levando-se em conta os efeitos da seção de choque do elemento combustível vizinho, o que leva, então, à uma dependência indireta com a temperatura do combustível. Portanto as densidades de potência calculadas para alimentar a temperatura do combustível dos elementos combustíveis da periferia, carregam informações do cálculo nos refletores.

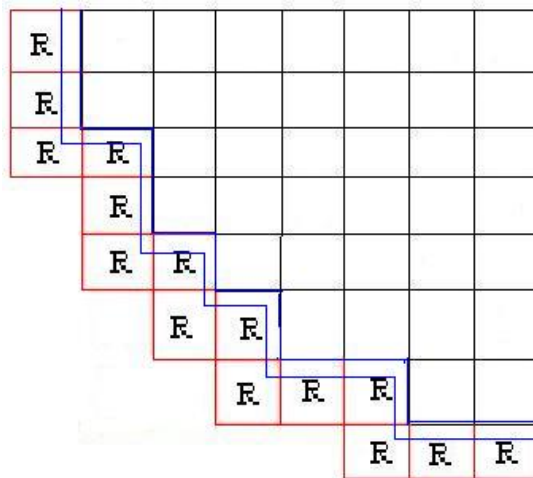


Figura 6.7: Refletores

No simulador neutrônico, é usado simetria de 1/4 no núcleo. Tal fato, como já é bem conhecido [4], introduz significantes erros no cálculo das seções de choque dos elementos combustíveis da periferia. A homogeneização dos nodos do refletor acarreta erros na determinação do fluxo de nêutrons. Apesar de estarmos fazendo a comparação entre dois modelos, o que não necessariamente levaria à erros na periferia, esta comparação nos indica que possíveis erros gerados na periferia, propagam-se de maneira diferente nos dois modelos, causando esta diferença.

O método nodal, necessita que as seções de choque no refletor sejam bem calculadas. Este primeiro modelo usado para o cálculo dessas seções de choque do refletor, no simulador do PEN/COPPE/UFRJ é simplificado. Os elementos combustíveis de toda periferia do núcleo, são envolvidos pelo *baffle*, feito em aço inox. Para a homogeneização do refletor, foi considerado somente um tipo de geometria de *baffle*.

Para testar a hipótese acima, foi feita nova simulação com um cálculo melhorado

para as seções de choque no refletor, considerando 3 tipos de *baffle*, incluindo-se o lateral, em forma de L, e o de canto (cf. Fig.6.8).

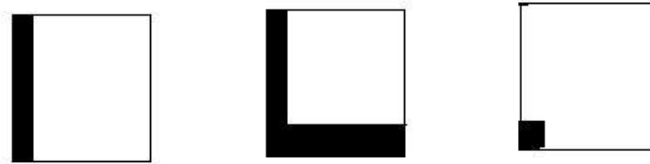


Figura 6.8: Tipos de *Baffle*

Os testes foram realizados com os dois modelos, agora com seções de choque no refletor, melhor calculadas, i.e., levando-se em conta os três tipos de *baffle*, e também um dimensionamento mais realista. Obtivemos para queima zero, a seguinte diferença entre os picos de temperatura, como está representado na Fig. 6.9.

-2,17	1,78	-0,25	-1,65	-1,11	-1,11	-0,60
-3,35	0,21	-0,74	-1,06	-1,26	-0,88	-1,11
	-1,39	-1,01	-1,15	-1,08	-1,26	-1,10
	-3,54	-0,85	-1,12	-1,15	-1,06	-1,65
		-3,32	-0,85	-1,00	-0,74	-0,24
			-3,54	-1,37	0,22	1,79
					-3,36	-2,17

Figura 6.9: Diferença Percentual dos Picos de Temperatura entre os Dois Modelos

Podemos notar, que apesar de encontrarmos ainda uma diferença entre os dois modelos, os resultados se aproximaram muito. As maiores diferenças entre os resultados dos dois modelos, encontram-se nos elementos combustíveis que têm dois



refletores como vizinhos, o que é mais um indicativo que a diferença encontrada é proveniente dos refletores.

Os resultados apresentados, leva-nos então, a acreditar que o uso de uma correlação empírica aliado à um tratamento simplificado do cálculo das seções de choque no refletor, possa conduzir à temperaturas mais elevadas do que aquelas previstas por um modelo cuja a física está mais próxima da realidade.

Os resultados finais gerados pela simulação, que validaram o modelo junto ao simulador, foram os dias efetivos a plena potência, o fator de diferença de entalpia e a concentração final de boro, que não apresentaram alterações significativas em relação aos resultados originais.

Nossos resultados sugerem que uma maior precisão nos cálculos da realimentação termohidráulica é importante para o cálculo das seções de choque neutrônicas. O modelo empírico parece amplificar os erros provenientes de um modelo simplificado no refletor, superestimando as temperaturas nos elementos da periferia. Nesse sentido, o modelo físico apresentado parece ser mais apropriado para o cálculo da temperatura na realimentação termohidráulica do código neutrônico.

## 6.1 Recomendações para Trabalhos Futuros

Para a melhoria do trabalho apresentado, destacamos a seguir algumas sugestões:

- Análise de DNBR
- Análise de novas correlações para o coeficiente de transferência de calor no moderador.

Como neste modelo foi calculada a temperatura dentro da pastilha, bem como no revestimento, com pequenos ajustes o programa estaria preparado para fazer uma análise de DNBR, bem como para usar novas correlações para o coeficiente de transferência de calor no moderador. Esta seria uma extensão natural para este trabalho.

# Referências Bibliográficas

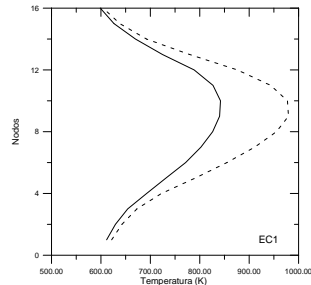
- [1] F.S.FREIRE. *Aperfeiçoamento do Modelo de um Grupo Modificado Para Aplicação na Recarga do Núcleo*. Tese de Doutorado PEN/UFRJ, 2009.
- [2] N.TODREAS, M. KAZIMI. “Thermal Hydraulic Fundamentals - Nuclear System I”, *Hemisphere Publishing Corporation*, 1989.
- [3] J.DUDERSTADT, J., J.HAMILTON, L. *Nuclear Reactor Analysis*. 1 ed. , John Wiley & Sons, 1976.
- [11] NEA4452/OECD *Neutronics/Thermal-hydraulics Coupling in LWR Technology*. Vol. 1 , Crissue -S - WP1, Nuclear Science, 2004.
- [5] S. JEWER, A. THOMPSON, A. HOELD, P.A. BEELEY. “Initial version of an integrated thermal hydraulics and neutron kinetics 3D code X3D”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 236, n.1533-1546,2006.
- [6] A.D. POLYANIN, A.I.ZHUROV,A.V.VYAZ’MIN “Exact Solutions of Nonlinear Heat - and Mass - Transfer Equations”, *Theoretical Foundations Engineering*, vol. 34, n. 5, pp 403-415,2000.
- [7] J.C.A. GASPAS JR “Cálculo da Distribuição de Temperatura em Varetas Combustíveis: Estudo do Efeito da Excentricidade no Posicionamento das Pastilhas de  $UO_2$ ”, Dissertação de mestrado, CNEN/IEN -2010.
- [8] LANDAU E LIFSHITZ “course of Theoretical Physics V.6 - Fluid Mechanics ”, *Pergamon Press*, 2nd edition.
- [9] KOCHUNAS, B.M. “Advanced Simulations of Heterogeneous Light Water Reactor Core for Transuranic recycle”, Thesis of Master Science - University of California, 2008.
- [10] A.O.FORTUNA “Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos Conceitos Básicos e Aplicações” São Paulo - Edusp , 2000.

- [11] NEA5436/OECD *Neutronics/Thermal-hydraulics Coupling in LWR Technology: State - of - art Report*. Vol. 1 , Crissue -S - WP2, Nuclear Science, 2004.
- [12] PALMA D. A. P.. “Formulações Analíticas para as funções de Alargamento Doppler”, *Tese de Doutorado* - PEN/COPPE/UFRJ -2007
- [13] PONTES, J.R.M. E MANGIAVACCHI, N.. “Fenômenos de Transferência Com Aplicações às Ciências Físicas e à Engenharia”. *Apostila do Curso - UFRJ*, Março de 2009.
- [14] H.S.KHALIL.. “The Application of Nodal Methods to PWR Analysis”. *Tese de Doutorado*, MIT, 1983
- [15] ASME STEAM PROPERTIES FOR INDUSTRIAL USE. “The American Society of Mechanical Engineers”, Professional Version, 04/2003
- [16] Y.KOO, B. LEE, D. SOHN “ Cosmos: a computer code to analyze LWR  $UO_2$  and MOX fuel up to high burnup”, *Annals of Nuclear Energy* V. 26 pp. 47-67,1999.
- [17] J.C. RAMIREZ, M. STAN, P. CRISTEA “Simulations of Heat and Oxygen Diffusion in  $UO_2$  Nuclear Fuel Rods” *Journal of Nuclear Materials* ,359 ,174-184(2006).
- [18] B. LEE, Y.KOO, D. SOHN. “ Rim Characteristics and Their Effects on the Thermal Conductivity in High Burnup  $UO_2$  Fuel”. *Journal of Nuclear Science and technology*,vol 38, 45-52,2001.
- [19] J.K. FINK.. “Thermophysical properties of uranium dioxide”. *Journal of Nucl. Mat.* 279, 1-18,2000.
- [20] OZISIK, M.N.. “Heat Conduction”. *John Wiley & Sons*, New York, USA., 1980.
- [21] C.R.ANDRAD,E.L.ZAPAROLI. “Condução de Calor Bidimensional com Condutividade Térmica Dependente da Temperatura”. *Instituto Tecnológico de Aeronáutica* - Depto de Energia -IEME,2004.
- [22] A.C.M ALVIM “ Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear”, *Ed. Certa*,1ed., Curitiba,PR.

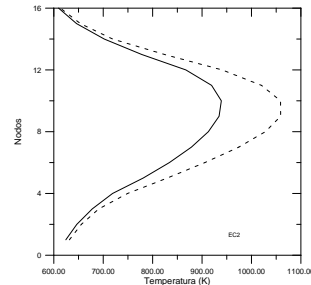
# Apêndice A

## Gráficos dos Elementos Combustíveis

Apresentamos aqui os gráficos de todos os elementos combustíveis de 1/4 de núcleo, com as temperaturas médias por nodo, obtidas pelo modelo empírico (linha tracejada) e pelo modelo físico proposto (linha sólida), para queima zero. Os gráficos estão apresentados segundo as linhas do arranjo ilustrado na Fig. 6.1, na ordem de baixo para cima.

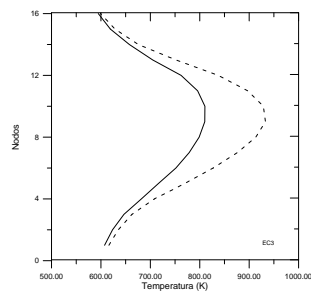


(a) EC1

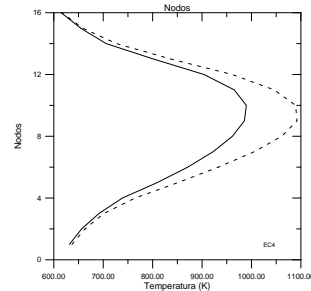


(b) EC2

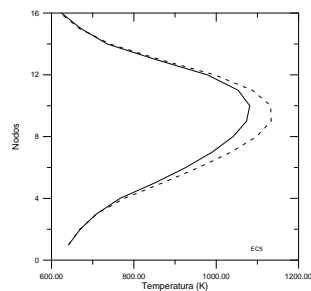
Figura A.1: Elementos Combustíveis - Primeira Linha



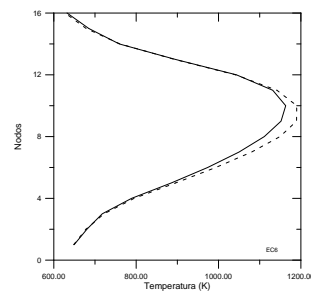
(a) EC3



(b) EC4

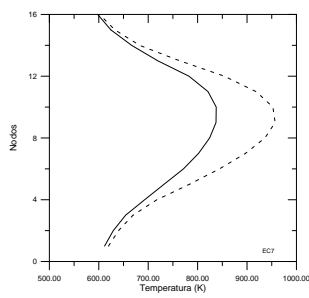


(c) EC5

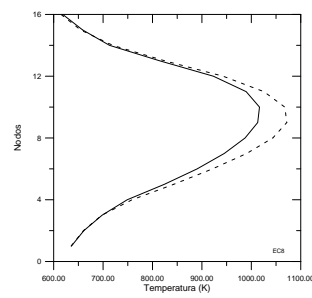


(d) EC6

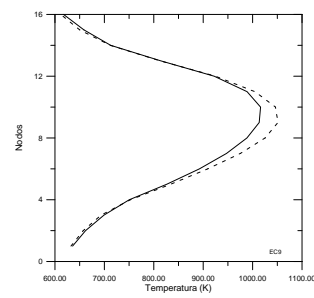
Figura A.2: Elementos Combustíveis - Segunda Linha



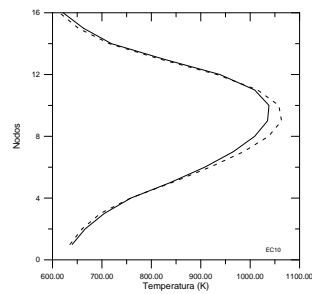
(a) EC7



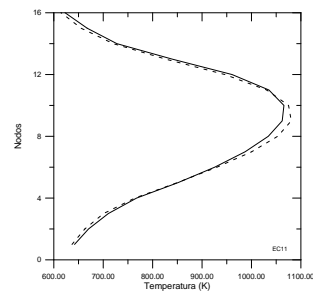
(b) EC8



(c) EC9

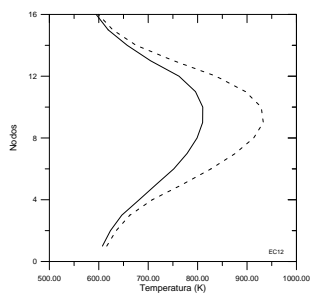


(d) EC10

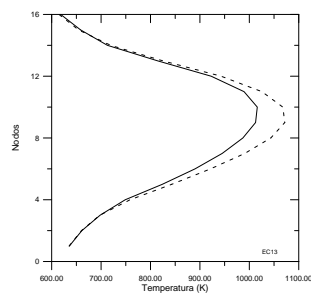


(e) EC11

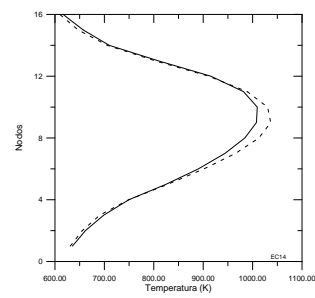
Figura A.3: Elementos Combustíveis - Terceira Linha



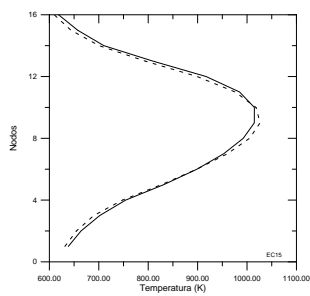
(a) EC12



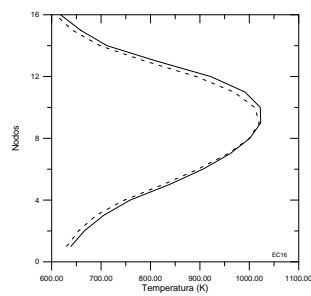
(b) EC13



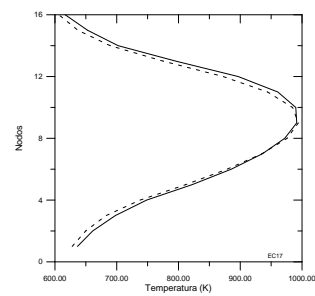
(c) EC14



(d) EC15

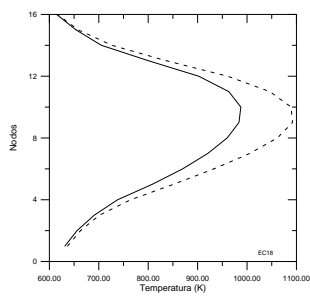


(e) EC16

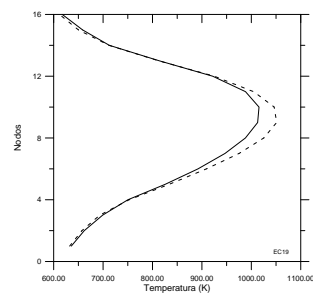


(f) EC17

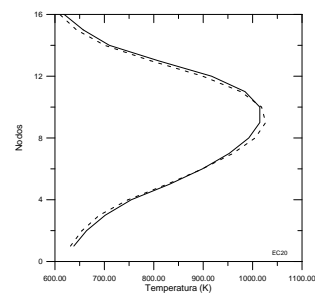
Figura A.4: Elementos Combustíveis - Quarta Linha



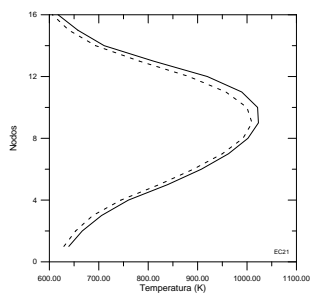
(a) EC18



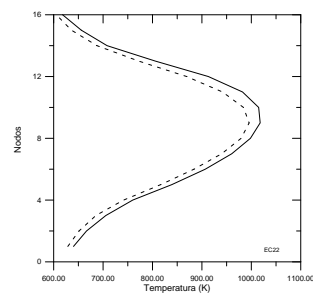
(b) EC19



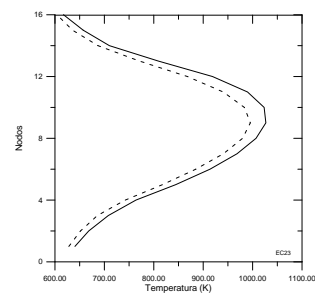
(c) EC20



(d) EC21



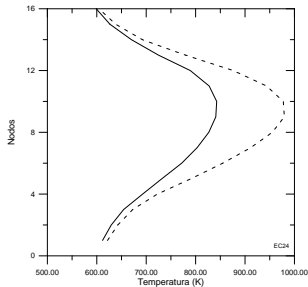
(e) EC22



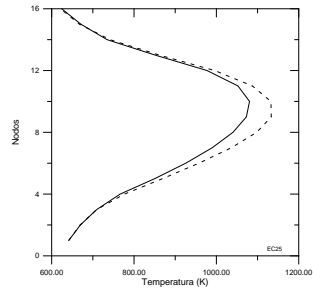
(f) EC23

Figura A.5: Elementos Combustíveis - Quinta Linha

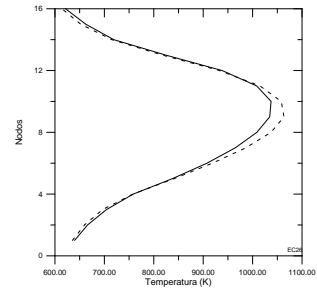




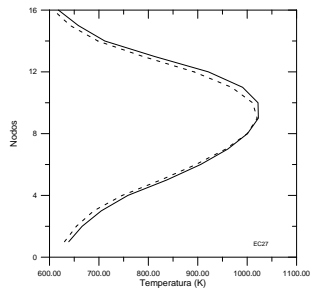
(a) EC24



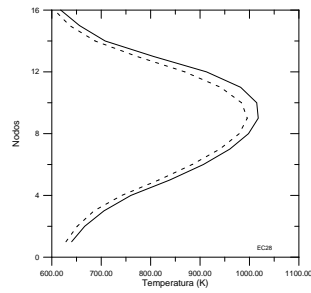
(b) EC25



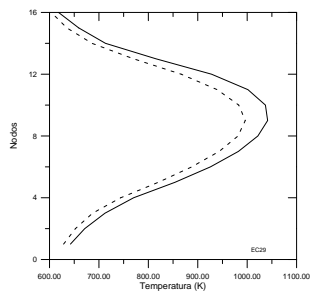
(c) EC26



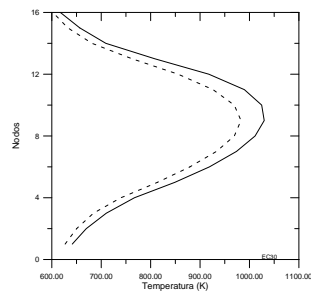
(d) EC27



(e) EC28

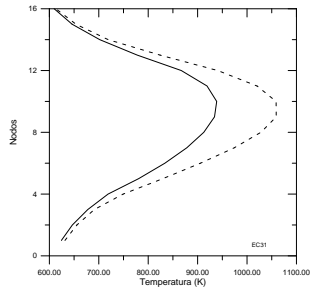


(f) EC29

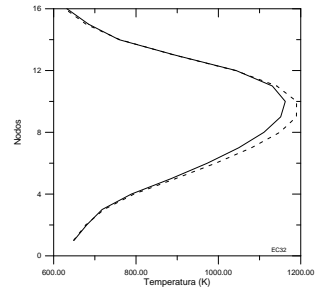


(g) EC30

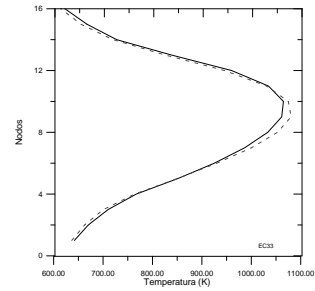
Figura A.6: Elementos Combustíveis - Sexta Linha



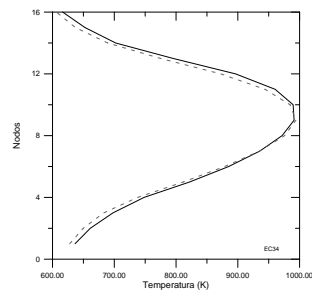
(a) EC31



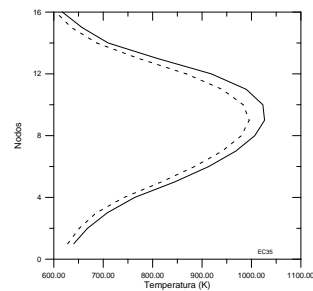
(b) EC32



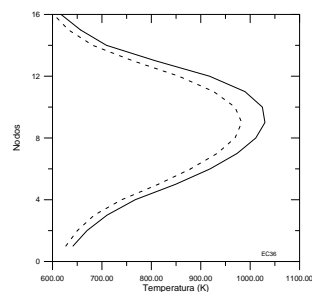
(c) EC33



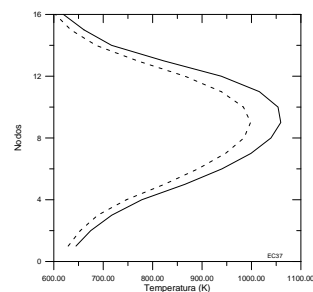
(d) EC34



(e) EC35



(f) EC36



(g) EC37

Figura A.7: Elementos Combustíveis - Sétima Linha