



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ
PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL
EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA

ALEXANDRO DOS SANTOS SILVA

MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA DE SISTEMAS NUCLEARES DE
TEMPERATURA MUITO ELEVADA DO TIPO LEITO DE BOLAS USANDO
DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

ILHÉUS-BA
2016

ALEXANDRO DOS SANTOS SILVA

**MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA DE
SISTEMAS NUCLEARES DE TEMPERATURA
MUITO ELEVADA DO TIPO LEITO DE BOLAS
USANDO DINÂMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia
da Universidade Estadual de Santa Cruz, como parte
das exigências para obtenção do título de Mestre em
Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Dany Sanchez Dominguez

ILHÉUS-BA
2016

S586

Silva, Alexandre dos Santos.

Modelagem termohidráulica de sistemas nucleares de temperatura muito elevada do tipo leito de bolas usando dinâmica de fluidos computacional / Alexandre dos Santos Silva. – Ilhéus, BA: UESC, 2016.

87f. : il.

Orientador: Dany Sanchez Dominguez.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Santa Cruz. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Inclui referências.

1. Reatores nucleares.
 2. Métodos de simulação.
 3. Fluidodinâmica computacional.
- I. Título.

CDD 621.483

ALEXANDRO DOS SANTOS SILVA

**MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA DE
SISTEMAS NUCLEARES DE TEMPERATURA
MUITO ELEVADA DO TIPO LEITO DE BOLAS
USANDO DINÂMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL**

Ilhéus-BA, 26/02/2016

Comissão Examinadora

Dany S. Sanchez Dominguez
Prof. Dr. Dany Sanchez Dominguez
UESC
(Orientador)

Francisco Bruno Souza Oliveira
Prof. Dr. Francisco Bruno Souza Oliveira
UESC

Márcio Rentes Borges
Prof. Dr. Márcio Rentes Borges
Laboratório Nacional de Computação
Científica (LNCC)

À memória de Donatila Rosa Silva, matriarca da família Silva, mas cuja imagem permanecerá viva em nossos corações e mentes.

Agradecimentos

- Ao Prof. Dr. Dany Sanchez, minha eterna gratidão pela disponibilidade, confiança, ensinamentos, orientações e, principalmente, pela paciência;
- Ao Prof. Msc. Leorlen Rojas, pelo suporte fornecido no domínio de técnicas de Dinâmica de Fluidos Computacional;
- Aos membros da banca de defesa, pela disposição em ler e em tecer comentários e críticas sobre esta dissertação;
- Ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia (PPGMC), da Universidade Estadual de Santa Cruz (UESC), na figura de seu corpo docente e dos servidores técnicos da secretaria, pelo acolhimento e por abrigar meu projeto de pesquisa;
- Ao Núcleo de Biologia Computacional e Gestão de Informações Biotecnológicas (NBCGIB), pela disponibilidade de sua plataforma computacional de alto desempenho para a realização deste trabalho;
- Aos colegas com os quais ingressei no PPGMC, pela proveitosa interação ao longo da realização do curso, com destaque especial ao também colega de trabalho Diego Habib;
- Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Bahia (IFBA), Campus Vitória da Conquista, pelo abrigo profissional e por viabilizar minha participação no já aludido programa de pós-graduação, além do apoio na divulgação deste trabalho. Em particular, aos colegas da Coordenação de Informática (COINFO) e da Coordenação de Sistemas de Informação (CBSI);
- Por último (mas os últimos são sempre os primeiros), à Sofia, pela alegria e ternura manifestadas apesar dos reincidentes "débitos" de atenção. E à Ana Cláudia, pela sua enorme paciência, por seu incentivo e por nosso amor.

MODELAGEM TERMOHIDRÁULICA DE SISTEMAS NUCLEARES DE
TEMPERATURA MUITO ELEVADA DO TIPO LEITO DE BOLAS USANDO
DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Resumo

Reatores VHTRs (do inglês *Very High Temperature Reactor*, Reatores de Temperatura Muito Elevada), devido ao seu desempenho inerentemente seguro por usar uma grande quantidade de grafite, pelo projeto de baixa densidade de potência e pela alta eficiência de conversão, são sérios candidatos para a geração de energia em um futuro próximo. Entretanto, a viabilidade destes reatores para a indústria da energia nuclear depende da segurança na operação das plantas nucleares. Neste ínterim, a investigação das características termohidráulicas pode contribuir de forma bastante significativa para o projeto de segurança e a operação dos VHTRs. No momento, esforços estão sendo empregados com alguns reatores experimentais do gênero, como o HTR (High Temperature Reactor)-10, um reator do tipo leito de bolas (do inglês *Pebble Bed Reactor*, PBR) que é usado como estudo de caso neste trabalho para a realização da simulação termohidráulica do núcleo do reator com o uso de técnicas de CFD (do inglês *Computational Fluid Dynamics*, Dinâmica de Fluidos Computacional). O reator utiliza elementos combustíveis constituídos por partículas TRISO (do inglês *TRIstructural ISOtropic*, Triestrutural Isotrópico) revestidas por camadas de carbono pirolítico e de carboneto de silício, para reter os produtos de fissão em elevadas temperaturas. É adotada uma abordagem realística para a simulação da seção central do núcleo do reator, na qual cada elemento combustível é modelado de forma realística, com o tratamento individualizado da camada de grafite e do material físsil. Para simplificação da disposição dos elementos combustíveis no interior do núcleo, são usados arranjos cúbicos centrados na face (do inglês *Face Centered Cubic*, FCC) e centrados no corpo (do inglês *Body Centered Cubic*, BCC). Parâmetros de projeto do reator disponíveis no relatório técnico de problemas de benchmark divulgado pela IAEA (TECDOC-1694) também foram considerados. Entre os resultados obtidos, estão os perfis de temperatura e de escoamento do refrigerante no núcleo, além da distribuição de temperatura nas esferas de combustível. De modo geral, tais resultados apresentam boa concordância com outros trabalhos correlatos. As temperaturas máximas alcançadas não excederam o nível de tolerância designado para o combustível nuclear usado no HTR-10.

Palavras-chave: VHTR, PBR, HTR-10, CFD.

THERMOHYDRAULICS MODELING OF PEBBLE BED VERY HIGH TEMPERATURE NUCLEAR SYSTEMS USING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Abstract

Very High Temperature Reactors (VHTR), due to its inherently safe performance by using a large amount of graphite, low power density design and high conversion efficiency, are serious candidates for energy generation in the near future. However, the viability of these reactors for the nuclear energy industry depends on the operation safety of these nuclear plants. In the meantime, the investigation of thermohydraulic characteristics may contribute quite significantly to the safety design and operation of VHTRs. At present, efforts are being made with some experimental reactors, such as HTR-10, a reactor of type pebble bed (PBR) which is used as case study in this work for the realization of the thermohydraulic simulation of the reactor core using techniques of CFD (Computational Fluid Dynamics). The reactor uses fuel elements of TRISO (TRIstructural ISOtropic) particles coated with pyrolytic carbon and silicon carbide layers, to retain fission products at high temperatures. A realistic approach is adopted for the simulation of the central section of the reactor core, in which each fuel element is modeled realistically with individualized treatment of graphite layer and fissile material. To simplify the arrangement of fuel elements within the core, they are used face centered cubic (FCC) and body centered cubic (BCC) arrangements. We also considered the design parameters of HTR-10 reactor available in the technical report of benchmark issues published by IAEA (TECDOC-1694). Among the obtained results, we report the temperature distribution and refrigerant flow profiles in the core, and the temperature distribution in the fuel spheres. Overall, these results show good agreement with another modeling and experimental results. The maximum temperatures of the fuel did not exceed the critical level projected to the nuclear fuel used in the HTR-10.

Keywords: VHTR, PBR, HTR-10, CFD.

Lista de figuras

Figura 1 – Capacidade de geração da energia nuclear e número de reatores em operação no mundo (1965-2011) (OECD, 2012)	5
Figura 2 – Histórico e demanda mundial prevista de energia primária (OECD, 2012)	6
Figura 3 – Emissões diretas e indiretas de gases de efeito estufa para diversos sistemas de geração elétrica (OECD, 2012)	7
Figura 4 – Projeções de cenários para a produção global de eletricidade (OECD, 2012)	8
Figura 5 – Gerações de reatores nucleares (OECD, 2012)	9
Figura 6 – Um VHTR modular para produção de hidrogênio e geração de eletricidade	11
Figura 7 – Partículas TRISO e tipos de elementos combustíveis mais utilizados em reatores VHTRs	11
Figura 8 – Principais componentes de um framework CFD, e estágios para solução de um problema usando CFD	14
Figura 9 – Visão geral das etapas e processos do solver CFD	15
Figura 10 – Sistema primário do reator HTR-10, incluindo o vaso do reator e o gerador de vapor (IAEA, 2013)	22
Figura 11 – Seção transversal do núcleo e refletor lateral do reator HTR-10. Adaptado de Terry et al. (2005)	23
Figura 12 – Vaso de pressão do reator e passagens de escoamento do refrigerante pelo circuito primário.	24
Figura 13 – Estrutura dos elemento combustíveis e das partículas TRISO usadas na operação do reator HTR-10	25
Figura 14 – Influência da temperatura na fração de colapso das partículas TRISO. Adaptado de Brossard et al. (2009)	26
Figura 15 – Regiões do núcleo do reator HTR-10 em sua configuração inicial. Adaptado de Terry et al. (2005)	26
Figura 16 – Sistema de monitoramento térmico do reator HTR-10	27
Figura 17 – Transiente com desligamento de circulador de hélio sem scram do reator (com potência inicial de 10 MW). Adaptado de Hu et al. (2006)	28
Figura 18 – Tipos de arranjos regulares cúbicos utilizados na simulação	32
Figura 19 – Geometria das células unitárias FCC e BCC adotadas para o leito de bolas do núcleo do HTR-10	33
Figura 20 – Modelo geométrico das colunas FCC e BCC do núcleo do reator HTR-10.	35
Figura 21 – Esquema da malha de uma célula unitária FCC.	36

Figura 22 – Inflação de malha nas faces das esferas de uma célula unitária FCC	37
Figura 23 – Modelo de transferência de calor por condução no núcleo do reator HTR-10. Adaptado de (IAEA, 2013)	38
Figura 24 – Modelo de transferência de calor por convecção no núcleo do reator HTR-10. Adaptado de (IAEA, 2013)	39
Figura 25 – Agrupamento dos elementos combustíveis em camadas para a distribuição efetiva de potências.	41
Figura 26 – Volume de controle fixado no plano cartesiano	44
Figura 27 – Definição de média e flutuação da variável turbulenta de velocidade. Adaptado de White (2009)	46
Figura 28 – Extensão da coluna FCC para garantir a condição de fluxo desenvolvido na especificação das condições de contorno de saída.	54
Figura 29 – Especificação das condições de contorno da simulação para a coluna FCC	55
Figura 30 – Definição de volume de controle, quando da discretização das equações de governança. Adaptado de ANSYS Inc. (2011)	56
Figura 31 – Elemento de malha em duas dimensões. Adaptado de ANSYS Inc. (2011)	57
Figura 32 – Estratégias de ciclos de <i>multigrid</i> utilizado para aceleração da convergência no Ansys CFX. Adaptado de Versteeg e Malalasekera (2007)	59
Figura 33 – Geometria da coluna parcial com arranjo FCC do núcleo do reator HTR-10	62
Figura 34 – Distribuição axial de temperaturas na seção central da coluna parcial FCC	64
Figura 35 – Distribuição de temperaturas do gás hélio na saída da coluna parcial FCC	65
Figura 36 – Distribuição de temperaturas na superfície do último elemento combustível da coluna parcial FCC	65
Figura 37 – Distribuição axial de temperaturas na seção central da coluna FCC completa, pelo uso dos modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)	66
Figura 38 – Evolução da convergência da solução com o modelo $k-\omega$ SST	67
Figura 39 – Distribuição de temperaturas do gás hélio na saída da coluna FCC completa, pelo uso dos modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)	68
Figura 40 – Distribuição de temperaturas na superfície da última esfera de combustível da coluna FCC usando os modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)	68
Figura 41 – Contornos de velocidade do fluido no plano central da coluna FCC completa usando os modelos $k-\epsilon$ (acima) e $k-\omega$ SST (abaixo)	69

Figura 42 – Vetores de velocidade em uma seção transversal da coluna FCC completa usando os modelos $k-\epsilon$ (a e b) e $k-\omega$ SST (c e d)	70
Figura 43 – Distribuição axial de pressão no plano central da coluna FCC completa usando os modelos $k-\epsilon$ (esquerda) e $k-\omega$ SST (direita)	71
Figura 44 – Distribuição axial de temperaturas no plano central da coluna BCC completa utilizando os modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)	72
Figura 45 – Distribuição de temperaturas do gás hélio na saída da coluna BCC completa, pelo uso dos modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)	73
Figura 46 – Distribuição de temperaturas na superfície da última esfera de combustível usando os modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)	74
Figura 47 – Contornos de velocidade axial no plano central da coluna BCC completa com os modelos $k-\epsilon$ (acima) e $k-\omega$ SST (abaixo)	75
Figura 48 – Vetores de velocidade em uma seção transversal da coluna BCC completa com os modelos $k-\epsilon$ (a e b) e $k-\omega$ SST (c e d)	76
Figura 49 – Distribuição axial de pressão no plano central da coluna BCC completa com os modelos $k-\epsilon$ (esquerda) e $k-\omega$ SST (direita)	77
Figura 50 – Perfis de temperatura axial no eixo central ($R = 0$) para as diversas simulações desenvolvidas neste trabalho	78
Figura 51 – Comparação dos perfis de temperatura axial ($R = 0$ cm) fornecidos pelas simulações com alguns dos resultados do benchmark da IAEA (2013)	79
Figura 52 – Comparação das temperaturas máximas fornecidas pelas simulações com os resultados do benchmark da IAEA (2013)	80

Lista de tabelas

Tabela 1 – Parâmetros principais de projeto do reator HTR-10	21
Tabela 2 – Especificações da geometria dos arranjos FCC e BCC	34
Tabela 3 – Dimensões dos arranjos FCC e BCC	34
Tabela 4 – Distribuição da potência gerada no núcleo do reator HTR-10 no início da operação (MW/m ³) (IAEA, 2013)	39
Tabela 5 – Distribuição efetiva de potências nas colunas FCC e BCC da seção central	41
Tabela 6 – Especificações da geometria da coluna parcial FCC	62

Lista de abreviaturas e siglas

ABWR	Advanced Boiling Water Reactor
ACM	Additive Correction Multigrid
ACR	Advanced CANDU Reactor
APWR	Advanced Pressurized Water Reactor
BCC	Body Center Cubic
BWR	Boiling Water Reactor
CACAU	Centro de Armazenamento de dados e Computação Avançada da UESC
CAD	Computer Aided Design
CANDU	CANada Deuterium Uranium
CPU	Central Processing Unit
CFD	Computational Fluid Dynamics
DES	Detached Eddy Simulation
DNS	Direct Numerical Simulation
EbFVM	Element based Finite Volume Method
EPR	Evolutionary Power Reactor
ESBWR	Economic Simplified Boiling Water Reactor
FCC	Face Center Cubic
GFR	Gas-cooled Fast Reactor
GIF	Generation IV International Forum
GPU	Graphics Processing Unit
GUI	Graphical User Interface
HTGR	High Temperature Gas-cooled Reactor
HTR-10	High Temperature Reactor 10MW

HTR-PM	High Temperature Reactor-Pebble-bed Modules
IAEA	International Atomic Energy Agency
IDDES	Improved Delayed Detached Eddy Simulation
IEA	International Energy Agency
INET	Institute of Nuclear and New Energy Technology
KTA	KernTechnischer Ausschuss
LES	Large Eddy Simulation
LFR	Lead-cooled Fast Reactor
LOCA	LOss of Coolant Accident
NBCGIB	Núcleo de Biologia Computacional e Gestão de Informações Biotecnológicas
MPI	Message Passing Interface
MSR	Molten Salt Reactor
OECD	Organisation for Economic Co-Operation and Development
P&D	Pesquisa e Desenvolvimento
PBR	Pebble Bed Reactor
PVM	Parallel Virtual Machine
PWR	Pressurized Water Reactor
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RMS	Root Mean Square
SC	Simple Cubic
SCWR	Supercritical Water-Cooled Reactor
SFR	Sodium-cooled Fast Reactor
SPMD	Single Program, Multiple Data
SST	Shear Stress Transport
TRISO	TRIstructural ISOtropic
VHTR	Very High Temperature Reactor

Lista de símbolos

CO_2	Dióxido de Carbono
Mpa	Megapascal
$^{\circ}C$	Grau Centígrado
MW	Megawatt
GW	Gigawatt
Mtep	Milhões de Toneladas Equivalentes de Petróleo
GWh	Gigawatts-hora
Kg	Quilograma
TWh	Terawatts-hora
GWd/tMP	Gigawatts-dia por Tonelada de Metal Pesado
Kg/s	Quilogramas por Segundo
mg	Miligrama
rpm	Rotações por Minuto
kW	Quilowatt
cm	Centímetro
m	Metro
MW/m ³	Megawatts por Metro Cúbico
J/Kg·K	Joules por Quilograma Kelvins
Kg/Kmol	Quilograma por Quilomol
η	Viscosidade
ρ	Densidade
λ	Segundo Coeficiente de Viscosidade
Kg/m ³	Quilograma por Metro Cúbico
T	Temperatura

C	Capacidade de Calor
q	Condutividade térmica
P	Pressão
u	Componente de velocidade na direção x
v	Componente de velocidade na direção y
w	Componente de velocidade na direção z
δ	Delta Kronecker
Γ	Coeficiente de Difusão
Γ_t	Difusão Turbulenta
k	Produção de Energia Cinética Turbulenta
ϑ	Escala de Velocidade de Turbulência
ℓ	Comprimento de Turbulência
μ_t	Viscosidade Turbulenta Dinâmica
κ	Constante de von Karman
u_t	Tensão de Cisalhamento da Parede
u^+	Velocidade próxima à Parede
y^+	Distância Adimensional à Parede
ω	Frequência de Turbulência
ϵ	Dissipação da Energia Cinética Turbulenta
ϕ	Propriedade de Transporte
τ	Tensão de Viscosidade

Sumário

1 – Introdução	1
2 – Revisão da Literatura	5
2.1 Energia Nuclear	5
2.2 Reatores VHTRs	9
2.3 Dinâmica de Fluidos Computacional	13
2.4 Estado da Arte	17
3 – O Reator HTR-10	21
3.1 Características do Reator	21
3.2 Elementos Combustíveis	24
3.3 Operação e Resultados	27
4 – Modelagem Termohidráulica do Núcleo do Reator HTR-10	30
4.1 Domínio Computacional	30
4.2 Construção da Malha	34
4.3 Fenômenos Físicos e Parâmetros	37
4.4 Modelo Matemático	43
4.5 Condições de Contorno	51
4.6 Esquema Numérico	56
5 – Resultados	61
5.1 Resultados Preliminares	61
5.2 Resultados com o Arranjo FCC	66
5.3 Resultados com o Arranjo BCC	72
5.4 Comparação e Validação dos Resultados	76
6 – Conclusões	81
Referências	84

1 Introdução

Como resultado do desenvolvimento econômico e do crescimento populacional, é esperado um aumento contínuo e significativo da demanda mundial de energia nas próximas décadas. Neste cenário, a energia nuclear se credencia para desempenhar um papel preponderante a médio e longo prazo, a começar por se constituir em uma importante contribuição em meio aos esforços para a descarbonização da matriz energética atual (amplamente dominada por combustíveis fósseis), já que os ciclos de energia nuclear apresentam níveis de emissão de CO_2 compatíveis com aqueles observados em ciclos de energias renováveis. A alta densidade energética também representa outro atrativo, quando se compara a fissão do combustível nuclear com a combustão de combustíveis fósseis.

A experiência com a exploração industrial da energia nuclear acumula mais de 60 anos, período em que foram incorporadas lições, levando aos projetos mais recentes de plantas nucleares, conhecidos como reatores da Geração III e III+. Ainda assim, a expansão da energia nuclear nas próximas décadas depende do enfrentamento de várias questões, tais como a plena implementação de planos de gerenciamento de resíduos radioativos, o melhoramento dos níveis de segurança em plantas nucleares e o fortalecimento da aceitação pública da energia nuclear como parte de uma estratégia para cumprimento de metas energéticas e ambientais.

Em resposta a estas questões, fóruns de cooperação internacional foram realizados com o objetivo de discutir o desenvolvimento dos futuros sistemas nucleares. Ao final destes fóruns, seis sistemas conceituais de reatores nucleares foram escolhidos, sendo eles conhecidos como sistemas da Geração IV: reatores rápidos refrigerados a sódio (*Sodium-cooled Fast Reactor*, SFR), reatores de temperatura muito elevada (*Very High Temperature Reactor*, VHTR), reatores refrigerados a água supercrítica (*Supercritical Water-cooled Reactor*, SCWR), reatores rápidos refrigerados a gás (*Gas-cooled Fast Reactor*, GFR), reatores rápidos refrigerados a chumbo (*Lead-cooled Fast Reactor*, LFR) e reatores de sais fundidos (*Molten Salt Reactor*, MSR). Os primeiros reatores comerciais da Geração IV não são esperados para antes da década de 2030.

Os reatores SFRs e VHTRs se encontram conceitualmente mais maduros e são os principais candidatos para projetos de demonstração em larga escala. Em particular, os VHTRs são reatores refrigerados com gás hélio e moderados com grafite que podem operar a uma pressão que varia de 4 MPa a 8 MPa. Devido às altas temperaturas de saída do refrigerante (até 1.000 °C) presentes nestes reatores, eles também podem ser projetados para uso em processos de calor e de produção de hidrogênio.

Um dos conceitos de projeto que está sendo adotado para a construção de reatores VHTRs experimentais é o reator PBR (do inglês *Pebble Bed Reactor*, Reator de Leito de Bolas). Neste tipo de reator, o núcleo é constituído por uma coluna anular alimentada de forma contínua com esferas de combustível no topo do núcleo que são descarregadas na seção inferior. O recarregamento constante do combustível reduz a frequência das interrupções de operação do reator e permite operar com um pequeno excesso de reatividade. O hélio circula pelo vazio intersticial existente entre as esferas de combustível, extraíndo a energia gerada pela fissão nuclear dos materiais físseis. Como as temperaturas de saída do hélio são bastante elevadas, os materiais físseis usados no combustível destes reatores devem suportar temperaturas mais elevadas ainda. Entretanto, elas não podem ultrapassar 1.600 °C, sob pena de colapso dos elementos combustíveis e comprometimento do núcleo do reator. Percebe-se claramente que a temperatura do combustível durante a operação do reator constitui um aspecto muito importante em relação à sua segurança.

Neste ínterim, a termohidráulica, desde os anos 1950, tem fornecido contribuições significativas para o projeto, a operação, o desempenho e a segurança das centrais nucleares, de modo a estimar parâmetros de operação que garantem a integridade do material combustível e, por consequência, a não liberação de produtos de fissão. No entanto, novos desafios se apresentam em relação à modelagem termohidráulica dos sistemas conceituais da Geração IV, tais como os reatores VHTRs, que operam com temperaturas bem mais elevadas que aquelas que são observadas nas plantas nucleares atuais, além da geometria e dos fenômenos termohidráulicos envolvidos serem mais complexos.

Para o estudo da viabilidade da tecnologia de reatores de temperatura muito elevada refrigerados à gás, um reator experimental de 10 MW chamado HTR-10 (*High Temperature Reactor 10MW*) foi construído pelo INET (*Institute of Nuclear and New Energy Technology*), da Universidade Tsinghua. O reator, localizado em Beijing, na China, é do tipo leito de bolas. Diversos dados experimentais e de simulação relacionados à operação do reator foram disponibilizados pelo INET e por estudos independentes.

Neste trabalho, são investigados os parâmetros termohidráulicos no núcleo do reator HTR-10 em condições de plena potência do reator, com ênfase na distribuição de temperaturas. O problema, em si, tem sido definido como um dos problemas de benchmark de um projeto de cooperação internacional para a análise de reatores de alta temperatura refrigerados à gás, sob coordenação inicial da IAEA (do inglês *International Atomic Energy Agency*, Agência Internacional de Energia Atômica). Resultados sobre este problema estão disponíveis em relatório técnico divulgado pela [IAEA \(2013\)](#).

Para a realização do estudo, são usadas técnicas de CFD (do inglês *Computational Fluid Dynamics*, Dinâmica de Fluidos Computacional). Tem sido observado um interesse

cada vez maior da indústria na aplicação destas técnicas em simulações nas mais diversas áreas da engenharia. Com ela, é possível estimar algumas características de fluxos típicos de reatores nucleares que não podem ser obtidas com softwares tradicionais voltados para a análise do comportamento termohidráulico de sistemas nucleares. Para a representação da coluna anular do núcleo de leito de bolas do HTR-10, são adotados modelos geométricos tridimensionais. Estes modelos incluem a modelagem de cada elemento combustível, em uma abordagem conhecida como abordagem realística.

Com o uso de uma abordagem CFD, a modelagem termohidráulica do núcleo de reatores VHTRs do tipo leito de bolas constitui o principal objetivo deste trabalho, tendo como objeto de estudo o reator HTR-10. Este objetivo geral pode ser desmembrado nos seguintes objetivos específicos:

- Consolidação de uma metodologia CFD baseada no código Ansys CFX para a simulação de reatores de leito de bolas;
- Avaliação de diferentes arranjos regulares para os elementos combustíveis na construção dos modelos geométricos do núcleo;
- Comparação dos resultados obtidos com dados experimentais e de simulação disponibilizados pela [IAEA \(2013\)](#) para o reator HTR-10;
- Validação das condições limites de segurança de reatores VHTRs que utilizam combustível com partículas TRISO.

Para melhor organização do trabalho, a presente dissertação de mestrado é dividida em 6 capítulos.

No capítulo 2, é realizada uma revisão bibliográfica sobre a temática da energia nuclear e, mais especificamente, a tecnologia VHTR. Também é apresentada a fundamentação básica da abordagem CFD, bem como resultados de trabalhos obtidos com a aplicação destas técnicas na simulação termohidráulica de leitos de bolas.

O capítulo 3 é dedicado à descrição das características do reator HTR-10 e do combustível empregado na sua operação; também são citados e comentados os resultados obtidos com a operação experimental do reator.

Uma descrição minuciosa da metodologia empregada neste trabalho para a realização da modelagem termohidráulica do núcleo do reator HTR-10 é oferecida no capítulo 4, incluindo as etapas de pré-processamento exigidas em qualquer abordagem CFD.

Os resultados obtidos com a aplicação da metodologia são discutidos e comentados no capítulo 5. Além da apresentação destes resultados para os arranjos regulares

considerados, estes são comparados entre si e com dados experimentais, e de simulação disponibilizados pela IAEA (2013).

Por fim, no capítulo 6, chega-se às conclusões finais desta dissertação, além de sugerir desdobramentos futuros para esta pesquisa.

2 Revisão da Literatura

2.1 Energia Nuclear

Atualmente, o uso da energia nuclear responde por cerca de 14 % da matriz de geração elétrica mundial. Segundo a [IAEA \(2015\)](#), no fim de 2014 haviam 438 reatores em operação, sendo responsáveis por uma capacidade de geração global de 376,2 GW; projeções de crescimento a médio e longo prazo estão concentradas na Ásia, onde se encontram 46 dos 70 reatores sob construção no momento.

A crise do petróleo ocorrida na década de 1970 se mostrou bastante propícia para a construção de novas centrais nucleares. Entretanto, a recessão econômica e a queda dos preços dos combustíveis fósseis ocorridas ainda no final daquela década, aliados aos acidentes de Three Mile Island (1979) e de Chernobyl (1986), resultaram na desaceleração da expansão do parque de reatores nucleares no final da década de 1980, conforme mostrado na Figura 1. Ainda assim, desde então verifica-se o aumento da participação da energia nuclear na produção de eletricidade a nível mundial, isto devido a avanços significativos em relação ao desempenho das plantas nucleares e à prorrogação da vida útil das centrais que já se encontravam em operação ([OECD, 2012](#)).

Nos últimos anos, a energia nuclear voltou a atrair interesses, diante de um

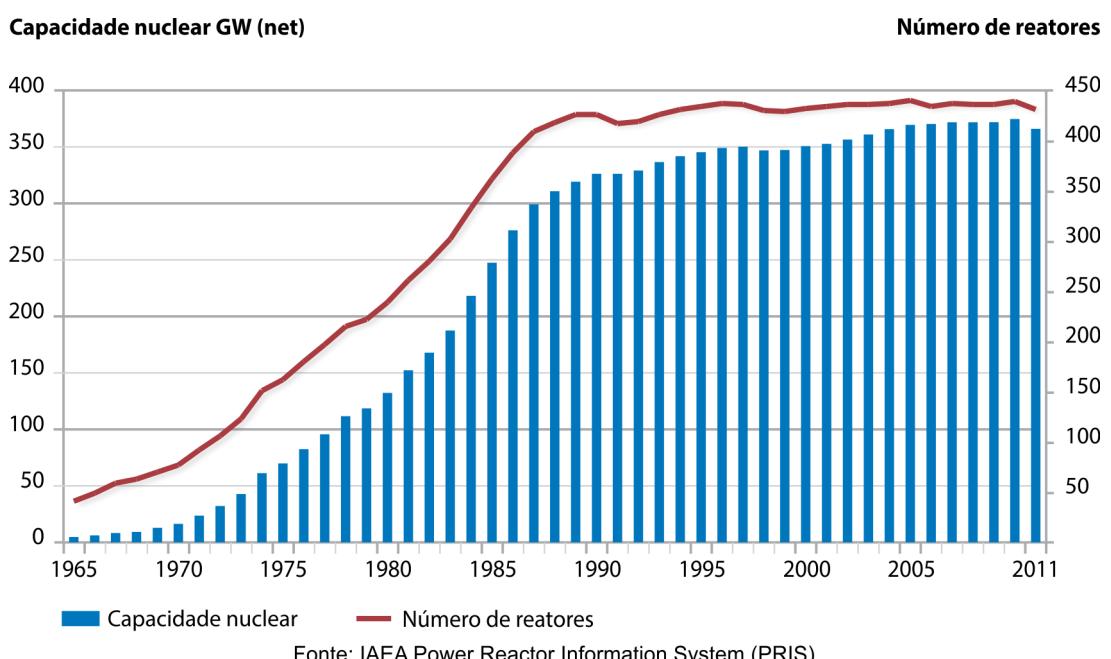
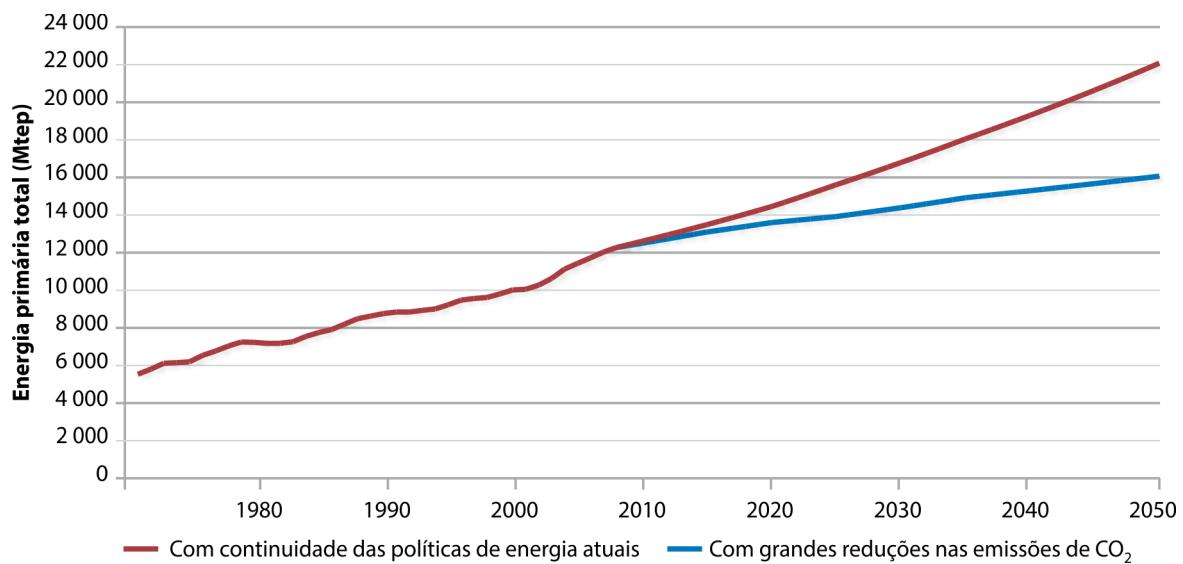


Figura 1 – Capacidade de geração da energia nuclear e número de reatores em operação no mundo (1965-2011) ([OECD, 2012](#))

cenário de rápido crescimento da demanda energética mundial que apresenta como pano de fundo o aumento das preocupações ambientais com as atividades de geração de energia, especialmente em relação à emissão de dióxido de carbono e ao agravamento do efeito estufa pela queima de combustíveis fósseis.

Em 2010, algumas projeções foram apresentadas pela *International Energy Agency* (IEA) para o crescimento da demanda de energia nas próximas décadas. Em um cenário mais conservador, era esperado um aumento próximo a 75%, quando comparada com a demanda mundial de energia primária registrada em 2010, se mantidas as atuais políticas energéticas; em um cenário mais ambicioso, tal aumento seria reduzido à 30 %, através da adoção de políticas de melhoramento de eficiência energética, como parte dos esforços para diminuir emissões de dióxido de carbono (vide Figura 2).

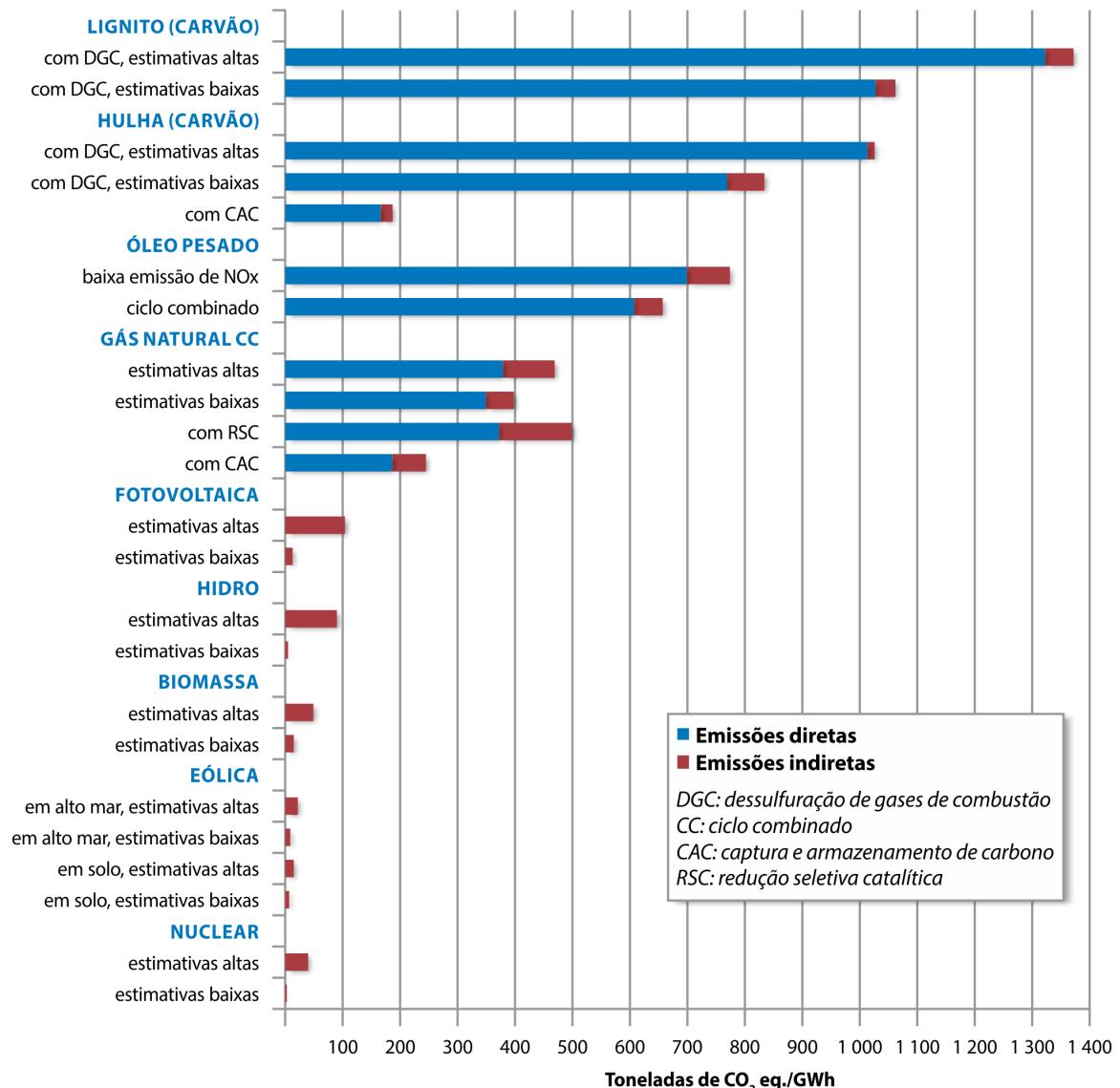


Fontes: OECD Factbook 2010 e cenários base e Blue Map apresentados pela IEA (*Energy Technology Perspectives*, 2010)

Figura 2 – Histórico e demanda mundial prevista de energia primária ([OECD, 2012](#))

Em relação à redução das emissões de dióxido de carbono e de outros gases do efeito estufa, sua necessidade já é amplamente reconhecida pela comunidade científica e pela maioria das entidades governamentais, sob pena de implicar em um aquecimento global insustentável. Somente a queima de combustíveis fósseis para a geração de eletricidade respondem por 40 % do total de emissões. Neste ínterim, ciclos de combustão nuclear não envolvem emissões diretas e as emissões indiretas causadas pela extração e enriquecimento do urânio são bastante inferiores às emissões diretas provocadas pela queima de combustíveis fósseis, conforme ilustrado na Figura 3; tais níveis de emissão são compatíveis com aqueles observados em ciclos de energias renováveis.

Além disso, uma preocupação recorrente em muitos países está associada à disponibilidade de recursos energéticos adequados a preços razoáveis. No que diz respeito à energia nuclear, ainda que a produção do urânio (seu recurso primário) esteja



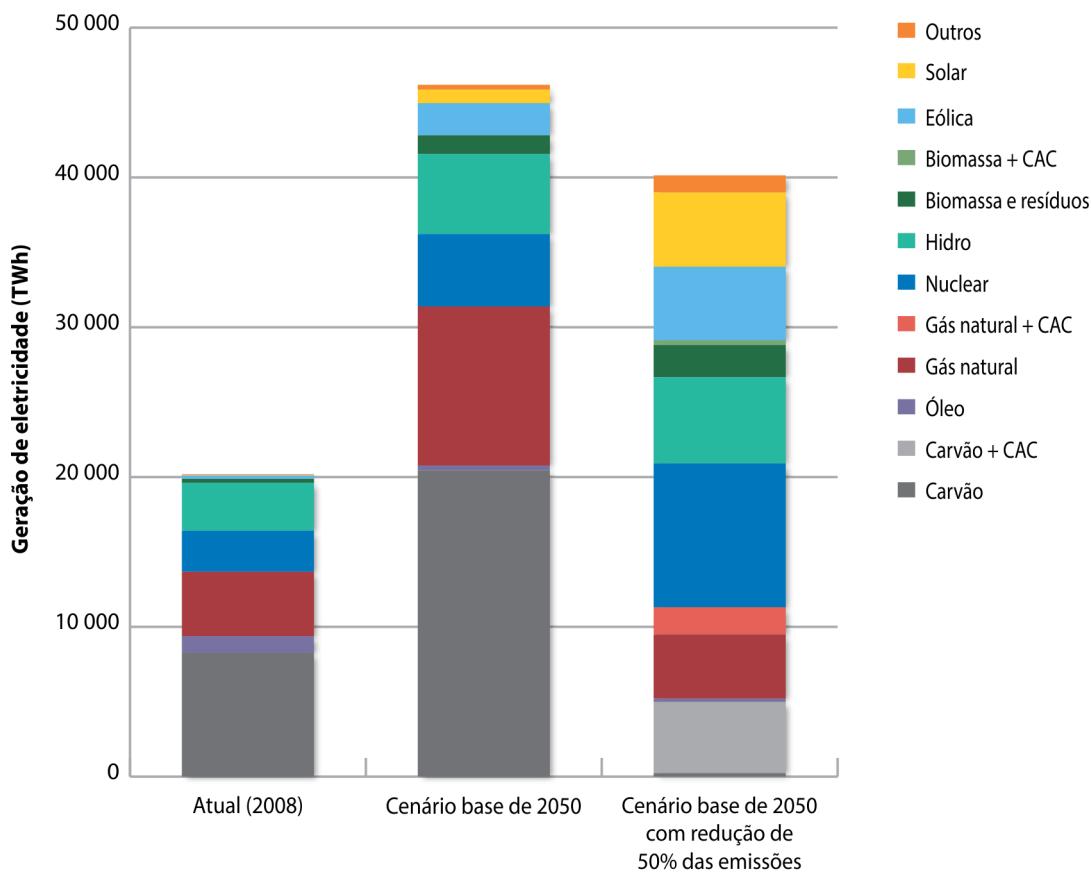
Fonte: Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas, *Mitigation of Climate Change*, 2007

Figura 3 – Emissões diretas e indiretas de gases de efeito estufa para diversos sistemas de geração elétrica ([OECD, 2012](#))

concentrada em apenas 8 países, estima-se que os recursos estão espalhados em todo o mundo. Acrescenta-se a isso o fato de que a quantidade de combustível requerida em um ciclo de combustão nuclear é bastante inferior, quando comparado com fontes de combustível fósseis. A modo de exemplo, a energia gerada a partir de 1 kg de urânio natural usado como combustível é, segundo a [OECD \(2012\)](#), equivalente à energia gerada pela queima de 22.000 kg de carvão, 15.000 kg de óleo ou 14.000 kg de gás liquefeito natural. Com base nestes aspectos, a durabilidade das atuais reservas de urânio, se consideradas as de caráter não convencional, é estimada em 700 anos para reatores térmicos (tecnologia predominante nos reatores em operação atualmente) e em mais de 21.000 anos para os reatores de nêutrons rápidos.

Assim, pode-se concluir que a expansão da energia nuclear representará uma

importante contribuição em meio aos esforços empreendidos com o objetivo de promover a "descarbonização" dos sistemas de geração de eletricidade. Cenários apresentados pela IEA, conforme ilustrado na Figura 4, estimam que 90 % da produção elétrica, em 2050, será fornecida por fontes de energia de baixo carbono, se forem implementadas políticas para a redução de 50 % das emissões de CO_2 . Dentre estas fontes de energia, a energia nuclear responderia por quase 25 % de toda a matriz elétrica.



Nota: CAC é captura e armazenamento de carbono. "Outros" inclui energia geotérmica, maremotriz e ondomotriz.
Fonte: IEA, *Energy Technology Perspectives*, 2010.

Figura 4 – Projeções de cenários para a produção global de eletricidade ([OECD, 2012](#))

Uma maior expansão da indústria nuclear é prevista para as próximas décadas se o desenvolvimento tecnológico de outras fontes de baixo carbono ficar abaixo do esperado ou se seus custos permanecerem relativamente altos. Ainda assim, a [IAEA \(2013\)](#) enumera uma série de questões que deverão ser enfrentadas para que este quadro se consolide:

- Disponibilidade de sistemas de fornecimento de urânio adequados, com o aumento da eficiência do uso dos recursos naturais por ele disponíveis;
- Plena implementação de planos de gerenciamento e eliminação de resíduos radioativos;

- Contínuo melhoramento de níveis de segurança em futuras centrais nucleares ou naquelas que já se encontram em operação;
- Necessidade de tempos de construção e custos de investimentos menores na implantação de novas plantas nucleares;
- Desenvolvimento de recursos humanos especializados e capacidades industriais necessárias para a construção e operação de plantas nucleares, e para instalações de gerenciamento de ciclos de combustível;
- Manutenção e fortalecimento dos marcos legais internacionais para o uso da energia nuclear;
- Fortalecimento da aceitação da energia nuclear junto à opinião pública, como parte de uma estratégia para cumprimento de metas energéticas e ambientais.

2.2 Reatores VHTRs

Os mais recentes projetos de reatores nucleares disponíveis comercialmente, conhecidos como reatores da Geração III ou III+, incorporam uma série de avanços tecnológicos experimentados pela indústria nuclear, com o uso de técnicas de construção mais eficientes e com níveis de segurança e desempenho mais elevados. Um quadro ilustrativo da evolução dos reatores nucleares é apresentada na Figura 5.

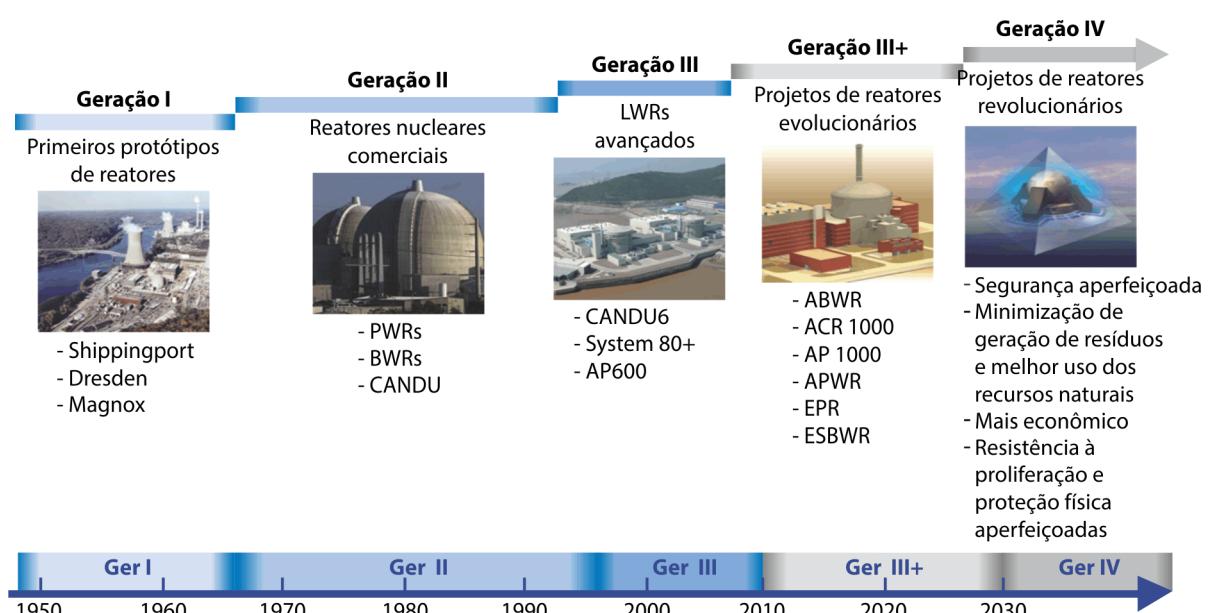


Figura 5 – Gerações de reatores nucleares (OECD, 2012)

No longo prazo, tecnologias de energia nuclear e ciclos de combustível mais inovadores, conhecidos como sistemas da Geração IV, estão sendo desenvolvidos através

de fóruns de cooperação internacional. Sendo considerada a mais importante iniciativa para a coordenação das atividades de pesquisa e de desenvolvimento (P&D) em reatores nucleares e ciclos de combustível avançados ([IAEA, 2013](#)), o GIF (*Generation IV International Forum*) conduziu um processo de estudo e de seleção de sistemas nucleares que, ao final de 2002, culminou na escolha de seis sistemas para os quais dedicam-se, desde então, os principais esforços ([GIF, 2002](#)). Estes sistemas foram os reatores rápidos refrigerados a sódio (SFR), os reatores de temperatura muito elevada (VHTR), os reatores refrigerados a água supercrítica (SCWR), os reatores rápidos refrigerados a gás (GFR), os reatores rápidos refrigerados a chumbo (LFR) e os reatores de sais fundidos (MSR). Os primeiros reatores comerciais que adotarão conceitos de sistemas da quarta geração são esperados para depois de 2030, quando muitas das centrais nucleares que atualmente se encontram em operação estarão com o tempo de vida útil encerrado ou próximo disso.

Mais conceitualmente maduros, os reatores SFRs e VHTRs são os principais candidatos para a implementação, nos próximos anos, de projetos de demonstração em larga escala de reatores da quarta geração. Em particular, a tecnologia VHTR representa o próximo estágio na evolução dos reatores HTGR (do inglês *High Temperature Gas-cooled Reactor*, Reator de Alta Temperatura refrigerados a Gás). Moderados a grafite e refrigerados a hélio, os sistemas VHTRs podem ser usados para a cogeração de calor e de eletricidade com temperaturas de saída entre 700 e 950 °C, e potencialmente com mais de 1.000 °C no futuro.

Para a geração de eletricidade (com alta eficiência, em torno de 50 %), um ciclo direto pode ser adotado, através do uso de uma turbina de gás hélio conectada diretamente ao circuito primário. Para aplicação em processos que requerem altas temperaturas (comuns em refinarias, nas indústrias petroquímica e metalúrgica e na produção de hidrogênio, por exemplo), normalmente é empregado um trocador de calor intermediário. Mais especificamente, a produção de hidrogênio implica no uso de processos termoquímicos e/ou eletrolíticos. Devido à estas características, o VHTR representa uma alternativa bastante atrativa para complexos industriais de larga escala ou para produzir energia elétrica. Um sistema VHTR de cogeração é mostrado na Figura 6.

Base tecnológica para o desenvolvimento dos sistemas VHTRs, os reatores do tipo HTGR utilizam partículas esféricas de combustível revestidas. Tais partículas, conhecidas como TRISO (TRIstructural ISOtropic), possuem um núcleo de material físsil envolto em múltiplas camadas de revestimentos refratários. Tais camadas constituem um vaso de pressão em miniatura altamente resistente a corrosão, e essencialmente uma barreira impermeável contra a liberação de produtos radiativos gasosos e metálicos resultantes da fissão do material físsil ([KOK, 2009](#)).

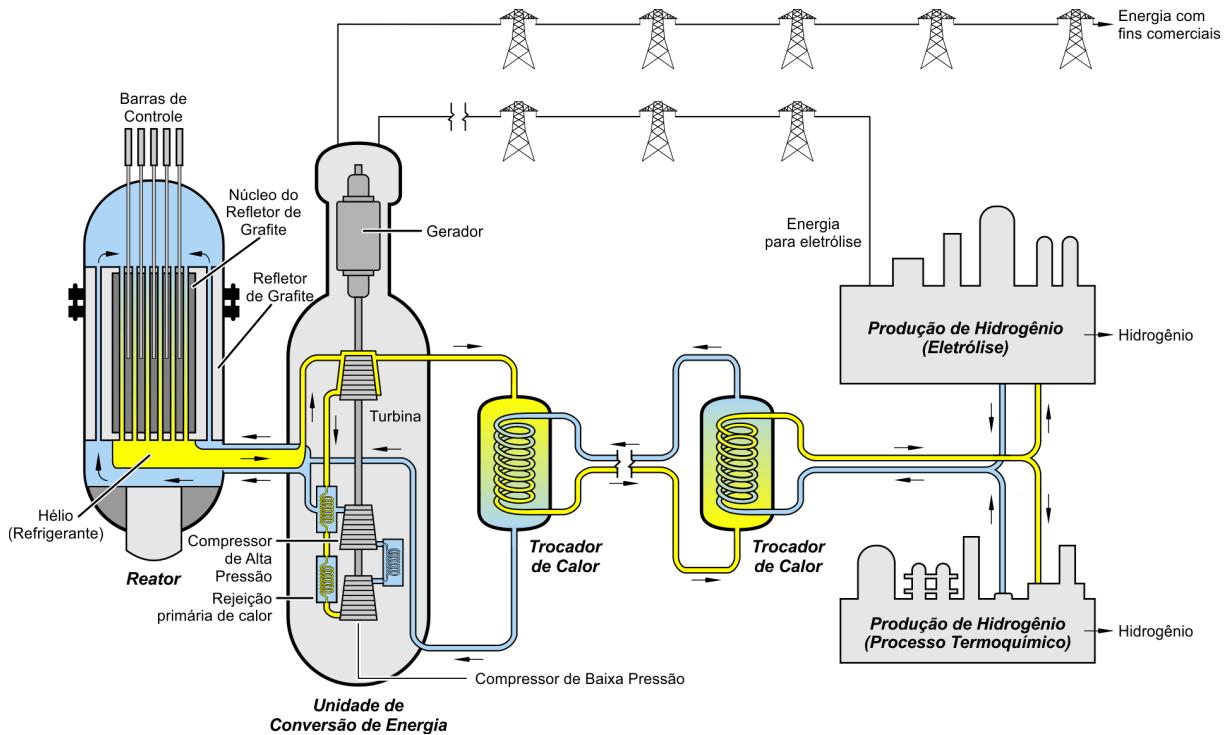


Figura 6 – Um VHTR modular para produção de hidrogênio e geração de eletricidade

A compactação das partículas TRISO para a constituição dos elementos combustíveis representa, segundo o mesmo Kok (2009), a maior distinção entre os diversos projetos de reatores de alta temperatura, com o que eles são classificados em duas categorias: reatores de blocos prismáticos e reatores de leito de bolas. Uma apresentação da partícula TRISO e dos sistemas de combustível é oferecida na Figura 7.

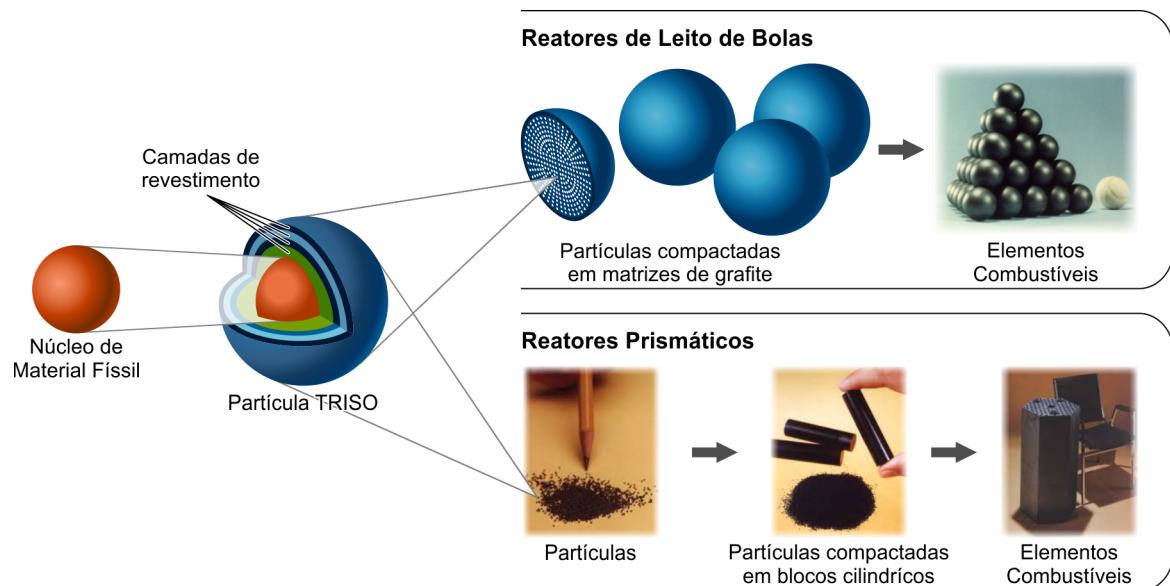


Figura 7 – Partículas TRISO e tipos de elementos combustíveis mais utilizados em reatores VHTRs

Em um reator prismático, as partículas estão compactadas em matrizes de carbono confinadas na forma de elementos cilíndricos; estes elementos são, por sua vez, carregados em canais de combustível localizados em blocos de grafite de formato hexagonal. O combustível é refrigerado por gás hélio, que flui através de canais de escoamento verticais localizados nos mesmos blocos de grafite. Blocos de combustível gasto são removidos ou substituídos por novos blocos durante interrupções periódicas na operação do reator.

Em reatores de leitos de bolas, as partículas TRISO estão confinadas em elementos esféricos de tamanho equivalente ao das bolas de bilhar. Para a refrigeração, o hélio flui através de um leito empacotado com elementos combustíveis esféricos. Durante a operação do reator, tais elementos são removidos continuamente do núcleo, sendo eles devolvidos ao núcleo ou substituídos por novos elementos combustíveis, a depender das condições de queima do combustível e da configuração do núcleo. [Lee et al. \(2007b\)](#) destacam que tais aspectos credenciam os reatores de leito de bolas como uma alternativa competitiva na medida em que a criticalidade do sistema pode ser mantida pelo carregamento contínuo dos elementos combustíveis, sem a necessidade de barras de controle, além do que o status global do núcleo pode ser determinado através da medição das temperaturas do combustível inserido naquele núcleo.

Embora a abordagem inicial para os sistemas VHTRs tenha sido focada na geração de temperaturas de saída muito altas (superiores a 1.000 °C) e na produção de hidrogênio, avaliações de mercado sinalizaram que a cogeração de eletricidade e de calor com temperaturas de saída na faixa de 700 a 850 °C apresentavam grande potencial, resultando no redirecionamento das tarefas de P&D para projetos que estabeleciam temperaturas de saída menores. A curto prazo, os esforços permanecerão concentrados em projetos do gênero. Além disso, outras demandas de P&D incluem o desenvolvimento de combustíveis e materiais que permitam aumentar as temperaturas de saída do núcleo para valores superiores a 1.000 °C e com os quais possa-se obter queimas de combustível com valores máximos entre 150 e 200 GWh/tMP. Em relação, especificamente, aos elementos combustíveis, é necessário ainda garantir que as temperaturas máximas alcançadas, em qualquer regime de operação normal ou em acidentes, estejam dentro de faixas toleráveis para a partícula TRISO. Também devem ser evitados picos de potência e gradientes de temperatura no núcleo, bem como limitar a degradação estrutural advinda do ingresso de ar ou água. Por fim, é esperado o aperfeiçoamento e a validação de modelos sistêmicos e de dinâmica de fluidos computacional que necessitam avaliar o comportamento termohidráulico do núcleo através de *benchmarks* teóricos e experimentais ([GIF, 2014](#)).

2.3 Dinâmica de Fluidos Computacional

Dinâmica de Fluidos Computacional (do inglês *Computational Fluid Dynamics*, CFD) é uma metodologia dedicada à análise de fluidos em movimento e à sua influência em diversos processos físicos ou físico-químicos, a exemplo daqueles que envolvem transferência de calor. Para a caracterização física do escoamento dos fluidos, são usadas equações diferenciais parciais (conhecidas como equações de governança) cuja resolução é obtida a partir de soluções numéricas geradas pelo emprego de recursos computacionais ([TU et al., 2013](#)).

Além de pesquisas de cunho puro ou aplicado, [Tu et al. \(2013\)](#) enumera diversas aplicações industriais que tem despertado crescente interesse no uso de técnicas CFD, incluindo engenharia aeroespacial, automotiva, biomédica, química, civil, ambiental, energia e esportes. Como a implementação de códigos CFD para a simulação de cada caso específico de escoamento pode consumir muito tempo, conforme atestam, por exemplo, [Tu et al. \(2013\)](#) e [Baker \(2011\)](#), pacotes de software de CFD comerciais de propósito geral têm sido desenvolvidos. Tais pacotes fornecem interfaces gráficas de usuário (do inglês *Graphical User Interface*, GUI) amigáveis que permitem ao usuário utilizar rotinas de código incorporadas que tratam da solução de uma variedade de problemas associados ao escoamento de fluidos, à transferência de calor, dentre outros fenômenos.

Programas que fornecem uma análise completa em CFD consistem de três elementos principais: pré-processador, *solver* e pós-processador. Na Figura 8, é apresentado um *framework* que ilustra a interconectividade destes três elementos dentro de uma análise CFD.

A fase de pré-processamento envolve quatro etapas, a saber:

- a) Definição e criação de um modelo geométrico apropriado, no qual o problema de escoamento de fluido será analisado. Neste sentido, técnicas de replicação de geometrias conhecidas são adotadas através do uso de ferramentas CAD (do inglês *Computer Aided Design*, Desenho Assistido por Computador) ou, em caso de geometrias mais complexas, é realizada uma sondagem da geometria pelo uso de alguma técnica não-invasiva (imagens de ressonância magnética, por exemplo) combinada com algum tipo de algoritmo de definição da geometria ([BAKER, 2011](#));
- b) Geração de malha, que consiste na discretização do modelo geométrico criado (chamado de domínio computacional) em uma série de pequenos volumes ou elementos não sobrepostos. Descrito em cada elemento, o escoamento do fluido é resolvido numericamente, com o que são determinados valores discretos de

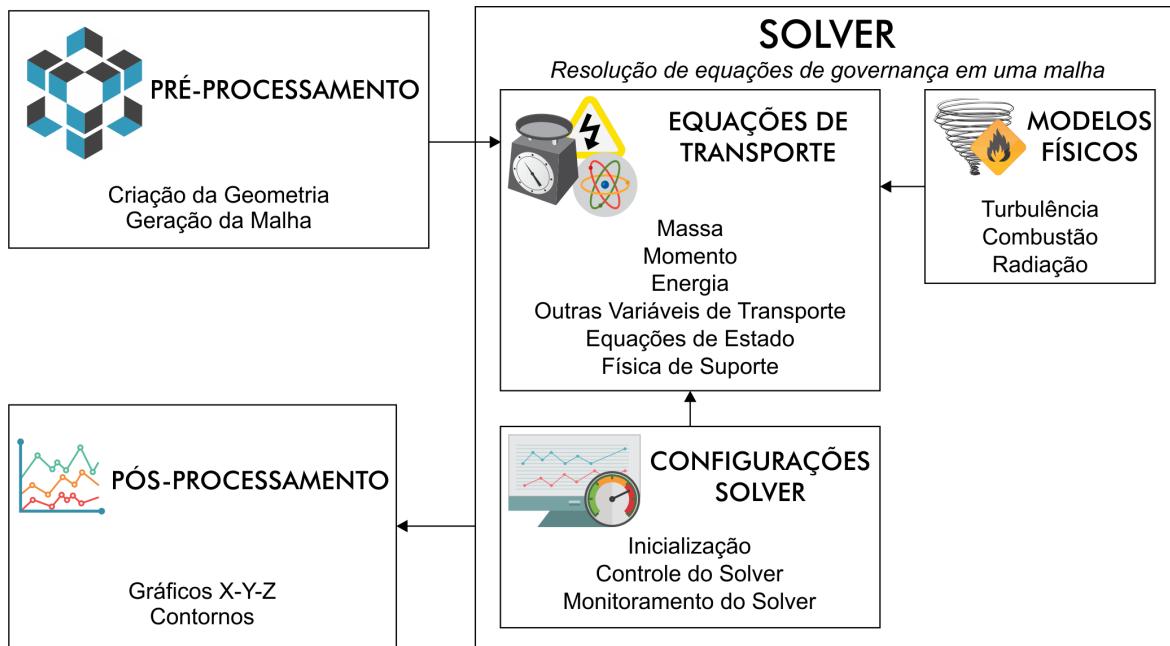


Figura 8 – Principais componentes de um framework CFD, e estágios para solução de um problema usando CFD

propriedades diversas, tais como velocidade, pressão, temperatura e outros parâmetros de transporte de interesse. A acurácia da solução é fortemente influenciada pelo número de elementos da malha gerada para o domínio computacional, embora existam limitações ao tamanho da malha impostas por custos computacionais e tempos dispendidos para executar o volume de cálculos;

- Seleção de fenômenos físicos e quantificação das propriedades físicas relacionadas aos fluidos envolvidos no problema de escoamento em estudo, a exemplo da densidade e da viscosidade;
- Especificação de condições de contorno; fluxos de escoamento internos ou externos aos limites do domínio computacional, se existirem, exigem condições de contorno apropriadas para acomodar o comportamento do fluido em relação à sua entrada e saída naquele domínio. O domínio também pode apresentar contornos de borda abertos, bem como bordas de paredes sólidas estacionárias ou possíveis obstáculos internos que delimitam a geometria do escoamento. Em escoamentos de fluidos nos quais o transporte de calor representa um fator crítico, a caracterização da superfície das bordas de contorno e dos obstáculos constitui um elemento obrigatório, através da definição de temperaturas ou de distribuições de fluxo de calor. Em escoamentos compressíveis, nos quais há uma grande variação da densidade em relação à temperatura, a densidade surge como parte da solução dentro do domínio, exigindo sua especificação nas bordas do contorno de entrada do fluxo.

Após a fase de pré-processamento, um *solver CFD* é executado para a obtenção de uma solução numérica do problema de escoamento em estudo. A obtenção da solução final é influenciada por processos de inicialização, controle e monitoramento daquela solução, além de outros relacionados aos cálculos realizados e à verificação de convergência. Uma visão geral da relação entre estes processos é ilustrada na Figura 9.

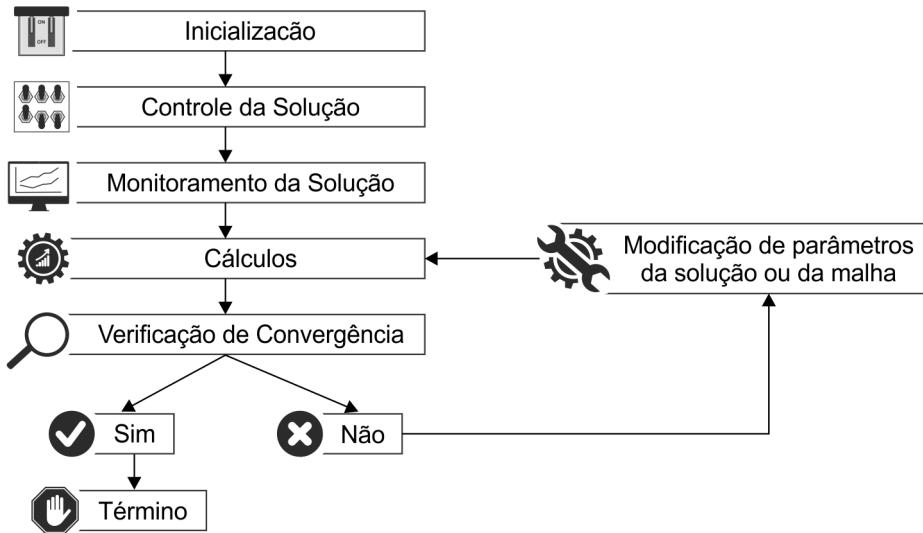


Figura 9 – Visão geral das etapas e processos do solver CFD

Como os fenômenos físicos subjacentes ao escoamento de fluidos reais requerem o tratamento de elementos chaves para serem resolvidos através de uma abordagem de solução iterativa, normalmente é requerida a inicialização de todos os valores discretos das propriedades do fluido antes do cálculo da solução. Em tese, condições iniciais podem ser puramente arbitrárias, mas, na prática, procura-se selecionar condições iniciais apropriadas; isso se justifica pelo fato de que o procedimento iterativo convergirá mais rapidamente e alcançará resultados em um tempo computacional menor se as condições iniciais estiverem mais próximas daquelas que são observadas no estágio estável da solução final. Além disso, a configuração apropriada de parâmetros no módulo de controle da solução geralmente implica na especificação de esquemas de discretização apropriados e na seleção de *solvers* iterativos adequados. Quase todos os programas comerciais de CFD de propósito geral consolidados e exaustivamente validados adotam o método dos volumes finitos como sua técnica de solução numérica padrão (TU et al., 2013).

As operações relacionadas às etapas de monitoramento da solução, cálculos e verificação de convergência são integradas. A convergência normalmente é aferida pelo monitoramento de desvios oriundos dos cálculos numéricos das equações algébricas processadas em cada iteração. Comumente conhecidos como resíduos, eles permitem mensurar a conservação global das propriedades de escoamento. Uma solução con-

vergente é alcançada quando são obtidos resíduos em patamares abaixo de margens de tolerância estabelecidas previamente através de parâmetros de controle. Pesos de sobre-relaxamento selecionados de forma criteriosa podem acelerar a convergência da solução, sendo por isto adotados pela maioria dos programas comerciais de CFD para melhorar a estabilidade do procedimento numérico e assegurar a convergência do processo iterativo. A seleção de valores apropriados para estes pesos é normalmente obtida de forma empírica, pela investigação extensa de uma série de problemas de escoamento.

A fase de pós-processamento corresponde à visualização dos resultados dos cálculos obtidos ao término da simulação computacional. Programas comerciais de CFD frequentemente apresentam ferramentas de visualização gráfica incorporadas às suas interfaces GUIs. Pode se optar ainda pelo uso de pacotes de softwares gráficos independentes; alguns deles são desenvolvidos especificamente para pós-processamento de resultados de CFD, ao passo que outros constituem ferramentas de visualização gráfica de propósito geral. Diferentes formatos de visualização gráfica de dados fornecidos por estas ferramentas e pacotes incluem gráficos (bidimensionais, vetoriais e de contorno), *streamlines*, relatórios e animações.

[Saha et al. \(2013\)](#) enumeraram uma série de questões e tendências em pesquisa e desenvolvimento na área de termohidráulica dedicadas aos reatores da quarta geração ou àqueles que já se encontram em operação ou sob construção, sejam elas de caráter experimental ou que envolvam simulações computacionais. Na área de simulação computacional, num contexto em que se assiste a avanços na computação de alto desempenho, muitas destas linhas se mostram propícias para a aplicação de técnicas de CFD, revelando o crescente interesse da indústria nuclear no uso desta metodologia. Apesar dos avanços já alcançados na área de termohidráulica, desde a década de 1950, para o projeto, operação, desempenho e segurança das atuais centrais nucleares, [Saha et al. \(2013\)](#) reconhecem que o recente acidente nuclear de Fukushima-Daiichi (ocorrido em março de 2011) aponta para a necessidade da continuidade de atividades de P&D nesta área.

Em relação à simulação CFD de reatores de leitos de bolas, que constitui o foco de interesse do presente trabalho, há, segundo [Wu et al. \(2010\)](#), duas abordagens principais: a abordagem de meio poroso e a abordagem realística. Na abordagem de meio poroso, um conceito médio de porosidade é aplicado para simular a geometria do leito de bolas. Trata-se de uma abordagem simplificada que tem mostrado boa correlação com dados experimentais para alguns parâmetros de geometrias empacotadas. Na abordagem realística, por outro lado, cada elemento do leito é modelado. Após comparações entre resultados de simulações realizadas com as duas abordagens, eles chegaram à conclusão de que a abordagem de meio poroso pode ser usada para capturar características

termohidráulicas globais, incluindo o gradiente médio de pressão e o aumento da temperatura do fluido ao longo da direção axial do leito. No entanto, características anisotrópicas de escoamento, como a separação de fluido, a formação de vórtices e a oscilação de fenômenos (picos de temperatura, por exemplo) só podem ser simuladas de forma satisfatória com a abordagem realística. Em relação a esta segunda abordagem, a ressalva está no custo computacional necessário para a realização das simulações, cerca de 3.000 vezes superior àquele que é exigido para a aplicação da abordagem porosa. Apesar disso, a abordagem realística tem sido adotada ultimamente por vários pesquisadores, devido ao já mencionado progresso na capacidade de processamento computacional observado nas últimas décadas.

2.4 Estado da Arte

Alguns dos trabalhos recentes na modelagem de leitos de bolas e suas principais contribuições são comentados nesta seção. Inúmeros esforços foram ou estão sendo empreendidos com o objetivo de compreender a complexa configuração do fluido em geometrias do gênero. Boa parte destes esforços envolvem técnicas de CFD através do uso da abordagem realística. Neste sentido, a distribuição aleatória das esferas de combustível na região do núcleo deste tipo de reator torna sua modelagem mais complexa. Na maioria das simulações, é usado um arranjo fixo ordenado de bolas, incluindo arranjos cúbicos simples (do inglês SC, *Simple Cubic*), cúbicos centrados no corpo (do inglês *Body Center Cubic*, BCC) ou cúbicos centrados na face (do inglês *Face Center Cubic*, FCC).

[Lee et al. \(2007b\)](#), por exemplo, investigaram a transferência de calor induzida por turbulência em um reator de leito de bolas. Em relação à distribuição dos elementos combustíveis no leito de bolas, foram adotados arranjos BCC e FCC. Picos de temperatura locais relativamente irregulares foram identificados na geometria BCC, ao passo que distribuições de temperatura regulares foram encontradas na geometria FCC. Embora não tenham sido obtidas temperaturas em patamares perigosos para a operação do reator, concluiu-se que a turbulência do fluxo do refrigerante afeta as distribuições de temperatura ao longo da superfície dos elementos combustíveis, motivando a ocorrência dos picos locais de temperatura.

Simulações de turbulência através do espaço intersticial entre os elementos combustíveis também foram realizadas por [Hassan \(2008\)](#) com o uso do modelo LES (Large Eddy Simulation). Um número total de 24 bolas foi usado para o segmento simulado da geometria, com a definição de pontos de contato entre aqueles elementos. Os resultados obtidos confirmaram as expectativas em relação à complexidade da estrutura de escoamento nos espaços existentes entre os elementos combustíveis. A vorticidade

na direção axial perpendicular ao escoamento também foi investigada, pelo qual se observou o rápido surgimento e desaparecimento de turbilhões entre as bolas. Além da simulação, foi conduzido um experimento com um leito empacotado com esferas de vidro distribuídas de forma aleatória e com um fluido de trabalho de propriedades físicas semelhantes à água. A partir da aplicação de técnicas de velocimetria de rastreamento de partículas, obtiveram-se os campos de escoamento instantâneos e informações detalhadas sobre o padrão de escoamento. Zonas de alta vorticidade foram detectadas em regiões próximas ao material de empacotamento, de tal modo que os resultados alcançados indicaram que a quantidade e o tamanho dos vórtices aumentam com o tamanho dos poros e a velocidade de escoamento.

[Taylor et al. \(2002 apud SHAMS et al., 2013a\)](#), por sua vez, introduziram em sua modelagem um espaçamento artificial entre bolas adjacentes e investigou o efeito deste espaçamento em uma célula unitária da estrutura do leito de bolas; na representação simplificada daquele leito de bolas, é usada uma configuração BCC, com uma única partícula esférica posicionada no centro de uma célula e cercada por 8 esferas de tamanho 1/8 em cada vértice da mesma célula. Diversos e importantes parâmetros de escoamento de fluido e de transferência de calor foram examinados e os resultados calculados foram comparados com correlações empíricas. Os resultados sugerem que, dada a geometria singular e complexa dos reatores de leitos de bolas, pacotes de software de CFD são apropriados para o cálculo de características locais e globais do escoamento, de modo a se constituírem em ferramentas valiosas para o estudo termohidráulico de reatores deste tipo.

Os efeitos dos arranjos BCC e FCC em relação ao comportamento termohidráulico do núcleo de um reator de leito de bolas também foram avaliados por [Ferng e Lin \(2013\)](#), ao considerar aspectos diversos como a aceleração de fluxo, a formação de vórtices, a separação de fluxo nos poros, a variação anisotrópica do número de Nusselt e a variação de temperatura na superfície das bolas. Os resultados sugeriram que a aceleração do fluxo sobre as esferas num arranjo FCC é maior que aquela que é observada no arranjo BCC, resultando em uma maior capacidade de transferência de calor e em uma temperatura menor nas bolas, devendo-se isso à estrutura mais compactada de elementos encontrada em arranjos FCC. Também é observada a redução do número de Nusselt médio na direção axial do leito (da primeira para a sétima camada de bolas), com o que se pode alcançar uma condição térmica de fluxo totalmente desenvolvido. Tais resultados estão em concordância qualitativa e quantitativamente com aqueles calculados pela correlação KTA (trata-se de uma correlação bastante adotada em projetos de reatores de leito de bolas). Ademais, o modelo foi avaliado com o uso de dados experimentais medidos por [Yang et al. \(2012\)](#), para um arranjo BCC, havendo boa concordância entre os valores experimentais e os obtidos em [Ferng e Lin \(2013\)](#).

Em seu trabalho, [Kao et al. \(2013\)](#) investigaram a distribuição do coeficiente de transferência de calor em uma matriz tridimensional de esferas a partir do uso de medidas experimentais e predições baseadas em técnicas de CFD. Os experimentos conduzidos consistiam na passagem de ar quente através de um conjunto de 12 esferas localizadas em um canal de fluxo e foram adotados cinco modelos de turbulência para as simulações de CFD. As comparações de distribuições medidas e previstas dos coeficientes de transferência de calor na superfície das esferas apontaram para o modelo v^2-f como aquele que melhor prediz as características de transferência de calor para as esferas em diferentes regiões da matriz. O modelo reproduz os efeitos de turbulência nas regiões próximas à parede do núcleo, além de efeitos locais com maior precisão, como a transferência de calor e a separação de fluxo. Em adição às equações do modelo $k - \epsilon$ (energia cinética turbulenta, k , e dissipação de energia cinética turbulenta, ϵ), este modelo inclui uma função de tensão normal (v^2) e uma função elíptica, f , para modelar efeitos anisotrópicos.

Visando obter um domínio computacional otimizado e bem definido que pudesse servir de referência para validações, [Shams et al. \(2012\)](#) otimizaram a geometria de uma célula unitária FCC, incluindo as condições de fronteira e a geração de malhas da geometria do leito. Para esta célula, foram realizadas várias simulações baseadas em RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes Simulation*). Em seguida, uma simulação q-DNS da célula unitária FCC otimizada foi realizada em [Shams et al. \(2013c\)](#) e [Shams et al. \(2013d\)](#) para a geração de um banco de dados q-DNS de referência. Neste banco de dados estão incluídas duas seções diferentes através do domínio computacional (para visualização qualitativa do campo de fluxo) e 43 perfis de várias propriedades em diferentes locais do mesmo domínio computacional. As inúmeras comparações quantitativas apresentadas, incluindo resultados relacionados aos campos de escoamento (média, valor eficaz e covariância de velocidade) e de temperatura (média, valor eficaz e fluxos de calor turbulento), revelaram um fluxo de escoamento complexo e uma distribuição de temperatura igualmente complexa.

Após este trabalho de validação, dois estudos com diferentes níveis de modelagem de turbulência foram apresentados: [Shams et al. \(2013a\)](#) e [Shams et al. \(2013b\)](#). No primeiro trabalho são feitas simulações numéricas da célula unitária FCC otimizada com o uso do modelo LES. A partir destes resultados e da extensa comparação com os dados q-DNS gerados e a um custo computacional significativamente inferior (6 vezes mais rápido), foram encontradas diferenças máximas da ordem de 6 %. No segundo trabalho, foram realizadas simulações de três alternativas diferentes de modelos DES e os resultados também foram comparados com os dados q-DNS, com o que se concluiu que o modelo IDDES-SST apresentou melhor correspondência (neste caso, a simulação foi 14 vezes mais rápida).

Como estruturas de empacotamento regulares são amplamente adotadas na maioria destes trabalhos para a simplificação da geometria do leito de bolas, [Pavlidis e Lathouwers \(2013\)](#) propuseram uma nova metodologia através da qual são gerados leitos empacotados de forma aleatória e com um pequeno número de esferas (inferior a 50). Os modelos foram comparados com dados numéricos de referência de leitos de bolas com grande número de esferas, com os resultados apresentando boa aceitação qualitativa e quantitativa. Em outro trabalho correlato ([Pavlidis; Lathouwers, 2013](#)), além do empacotamento aleatório do leito, é usada uma malha adaptativa LES, assim como o tratamento implícito das fronteiras sólidas. O modelo se mostrou capaz de resolver numericamente leitos empacotados de forma aleatória, pelo sucessivo refinamento da malha nas fronteiras implícitas e nas áreas de recirculação de fluxo.

Os principais avanços no desenvolvimento experimental da tecnologia de reatores de leito de bolas estão concentrados na China, com um reator de 10 MW chamado de HTR-10 (*High Temperature Reactor*) e que se encontra sob responsabilidade do *Institute of Nuclear and New Energy Technology* (INET). Após a entrada do reator em operação experimental, dados empíricos foram colocados à disposição para a validação de modelos termohidráulicos usados pelo INET e em outros trabalhos. [Mazaira et al. \(2015\)](#), por exemplo, simularam o fluxo compressível de uma coluna FCC em altura equivalente à do núcleo do HTR-10 com o emprego de uma abordagem CFD realística. Ao obter a distribuição da temperatura na direção axial central do núcleo, as temperaturas máximas alcançadas pelo combustível foram inferiores àquelas estabelecidas para a operação segura do reator.

Resultados obtidos em diversos trabalhos que calculam a distribuição de temperatura do núcleo do HTR-10 em operação experimental inicial com potência total são comparados por [Chen et al. \(2009\)](#). Sob coordenação inicial da IAEA, este problema de benchmark foi selecionado no âmbito de um projeto de pesquisa dedicado à avaliação de desempenho de reatores de alta temperatura refrigerados à gás. Vários resultados de cálculos dos trabalhos apresentados possuíam correspondência entre si e apresentaram boa aceitação em relação aos dados experimentais. Discrepâncias entre resultados foram atribuídas preliminarmente à diferentes métodos, modelos, propriedades de materiais (entre outros) usados em códigos computacionais. As temperaturas máximas calculadas no centro do núcleo foram bastante inferiores ao valor limite de 1.230 °C. Três dos trabalhos citados fizeram uso de códigos CFD, incluindo os pacotes comerciais de propósito geral Fluent ([FLUENT INC., 2003](#)) e Phoenics ([Ludwig et al., 1989](#)).

3 O Reator HTR-10

Lançado pelo governo chinês em 2006, um programa nacional de desenvolvimento da ciência e tecnologia a médio e longo prazo dedicou parte de suas atenções para a intensificação de pesquisas em 16 tecnologias chaves, entre elas a de reatores nucleares de água pressurizada (PWR) e de alta temperatura refrigerados a gás (HTGR). Fruto dos esforços iniciais dedicados para o desenvolvimento, em particular, da tecnologia HTGR, o reator HTR-10 foi concebido, segundo [Zhong e Xu \(1996\)](#), com o propósito de verificar e demonstrar características técnicas e de segurança dos reatores modulares VHTR, além de contribuir para a consolidação de uma base experimental para o desenvolvimento de aplicações de calor através de processos nucleares neste tipo de reator. Os objetivos específicos do projeto incluíam adquirir expertise no design, construção e operação de reatores VHTR, a realização de testes de irradiação em elementos combustíveis e a demonstração da cogeração de eletricidade/calor e do ciclo combinado de turbinas de vapor/gás. A planta nuclear localiza-se nas próprias dependências do INET (*Institute of Nuclear Energy Technology*), na região noroeste da cidade de Beijing.

3.1 Características do Reator

A planta do reator HTR-10 inclui edifícios de concreto para alojamento do reator, os geradores de vapor e das turbinas, além de duas torres de resfriamento e um centro de ventilação. Os parâmetros principais de design do reator estão listados na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros principais de projeto do reator HTR-10

Parâmetro	Valor
Potência térmica	10 MW
Pressão do refrigerante (hélio) no circuito primário	3,0 Mpa
Temperatura média de entrada no reator (hélio)	250 °C
Temperatura média de saída no reator (hélio)	700 °C
Fluxo de escoamento de massa (hélio) em potência total	4,32 Kg/s
Pressão principal na saída do gerador de vapor	4,0 Mpa
Temperatura principal na saída do gerador de vapor	440 °C
Temperatura da água de alimentação do gerador de vapor	104 °C
Fluxo principal de escoamento de vapor	3,47 kg/s
Potência elétrica gerada pela turbina de vapor	3,0 MW

Conforme mostrado na Figura 10, o núcleo do reator e o gerador de vapor do sistema primário estão conectados por um sistema de tubulação concêntrica, com a tubulação mais interna correspondendo ao duto de gás quente. O sistema de confinamento, constituído pelos edifícios de concreto e por outros componentes do circuito

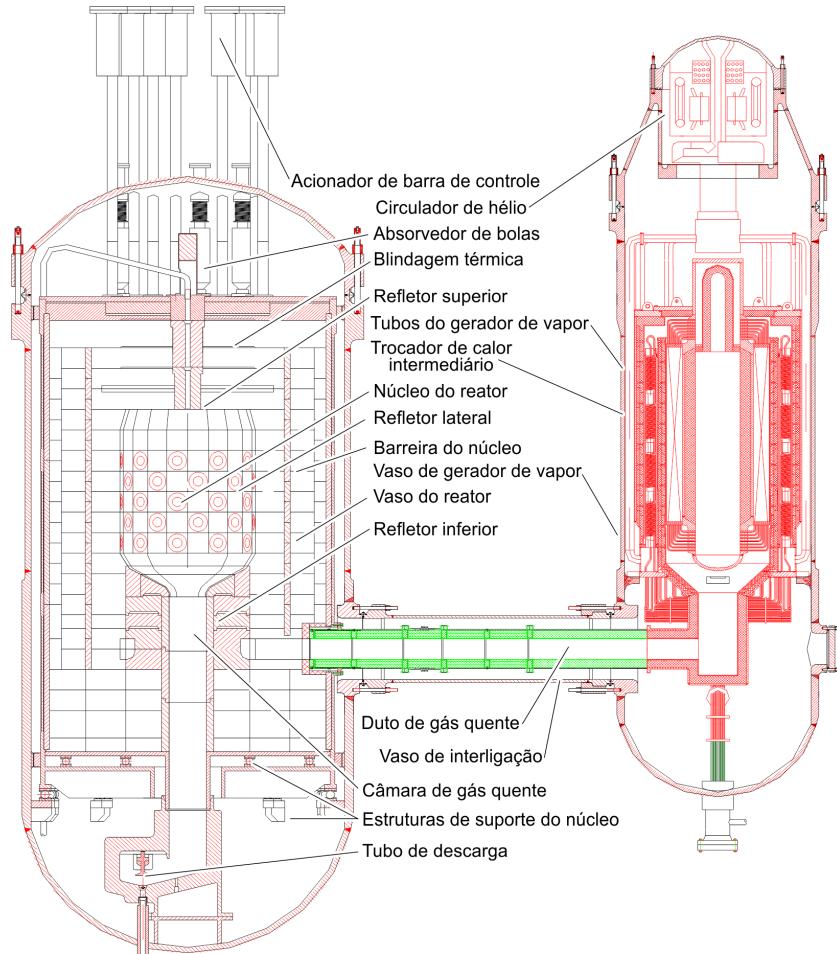


Figura 10 – Sistema primário do reator HTR-10, incluindo o vaso do reator e o gerador de vapor ([IAEA, 2013](#))

primário de pressão, representa, junto ao sistema de ventilação, a última barreira contra o lançamento de radioatividade no meio ambiente. Estando o reator em operação, a pressão no interior do sistema de confinamento se encontra abaixo da pressão atmosférica externa ([IAEA, 2013](#)).

Refletores de grafite estão posicionados ao redor do núcleo do reator, sendo categorizados como refletores superiores, refletores laterais e refletores inferiores. Constituído de múltiplas camadas de blocos de grafite e de carbono, a estrutura de refletores laterais é dividida radialmente em duas seções: uma seção interna de grafite, que atua como um refletor de nêutrons, e uma seção externa de blocos de carbono, que atua como isolador térmico e absorvedor (ou blindagem neutrônica). Neste refletor, há ainda 20 canais próximos à zona ativa do núcleo, incluindo 10 canais de barras de controle, 7 canais de absorvedores de bolas, e 3 canais reservados para irradiação, além de outros 20 canais de escoamento do refrigerante em estado frio (estes últimos posicionados na seção externa dos blocos de grafite do refletor). Uma representação da seção transversal do núcleo e refletor lateral com suas regiões e componentes é apresentada na Figura 11.

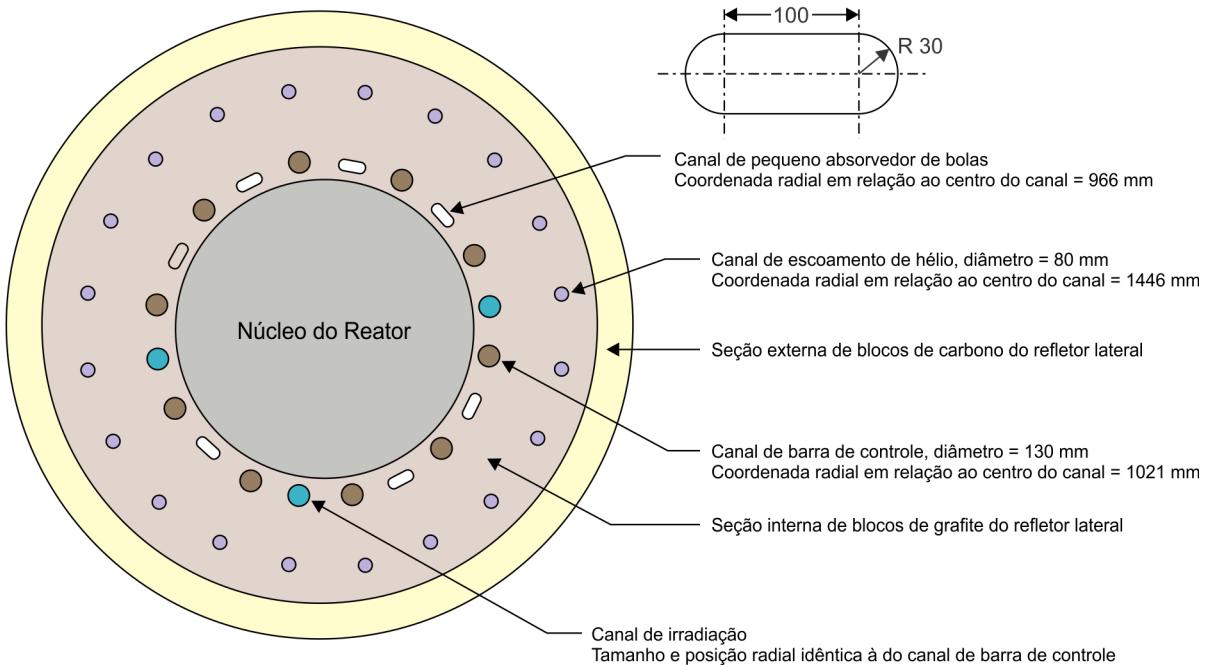


Figura 11 – Seção transversal do núcleo e refletor lateral do reator HTR-10. Adaptado de [Terry et al. \(2005\)](#)

Como em qualquer sistema VHTR, é usado o gás hélio para a refrigeração do núcleo do reator, a uma taxa de escoamento de massa de 4,32 Kg/s. Bombeado para o vazo de pressão do reator (VPR) através de um sistema de circulação, o fluxo principal do gás atravessa o núcleo do reator e os canais de escoamento, alcançando o repositório de gás quente localizado na seção inferior do reator com temperaturas médias de 700 °C.

As passagens de escoamento do refrigerante no interior do vaso de pressão são ilustrados na Figura 12. Em condições normais de operação, o gás frio, uma vez bombeado para o interior do VPR, flui pelo espaço anular existente entre a barreira de contenção do núcleo e o VPR. Na cavidade inferior do VPR, uma pequena porção do hélio flui em direção ao tubo de descarga para se juntar ao repositório de hélio quente. O fluxo principal do gás, por sua vez, atravessa os canais de escoamento de refrigerante para alcançar o repositório de gás frio localizado sobre a seção superior do núcleo do reator. Após isso, o fluido é separado em dois fluxos: uma pequena porção é escoada para os canais das barras de controle, ao passo que o fluxo principal flui para baixo, pelo leito de bolas do núcleo, onde é aquecido pelos elementos combustíveis. Já misturado no repositório de gás quente, o hélio deixa o núcleo do reator pelo duto de gás quente em direção ao gerador de vapor, onde é resfriado e, após isso, é bombeado de volta ao vaso do reator pelo circulador de hélio ([CHEN et al., 2009](#)).

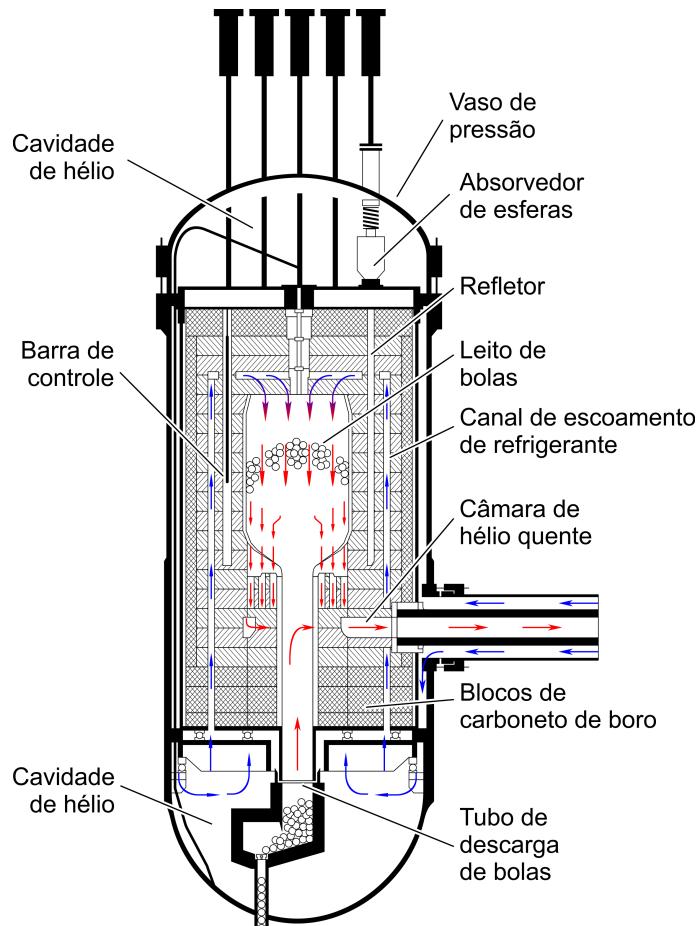


Figura 12 – Vaso de pressão do reator e passagens de escoamento do refrigerante pelo circuito primário.

3.2 Elementos Combustíveis

O HTR-10 é um reator do tipo leito de bolas, estando o núcleo constituído, portanto, de uma coluna anular alimentada com esferas de combustível. Na seção superior do vaso do reator, unidades de absorção de bolas são usadas para a inserção dos elementos combustíveis, que são removidos por um tubo de descarga localizado na seção inferior do núcleo (vide Figura 12).

Cada elemento combustível corresponde a uma bola esférica com 60 mm de diâmetro. Revestida por uma camada interna de grafite com 5 mm de espessura, o interior do elemento é constituído por uma matriz de grafite que contém partículas TRISO (Tri-estrutural Isotrópico) distribuídas de forma homogênea (IAEA, 2013). De acordo com Aziz e Refeat (2009), estão presentes em cada elemento combustível 8.355 partículas TRISO que contêm, cada uma, 5 mg de urânio enriquecido a 17 %.

Desenvolvida para diversos projetos de reatores que operam com altas temperaturas de refrigerante ou alto desempenho em relação à queima do combustível, cada partícula TRISO consiste tipicamente de 5 regiões. No centro da partícula, está o núcleo

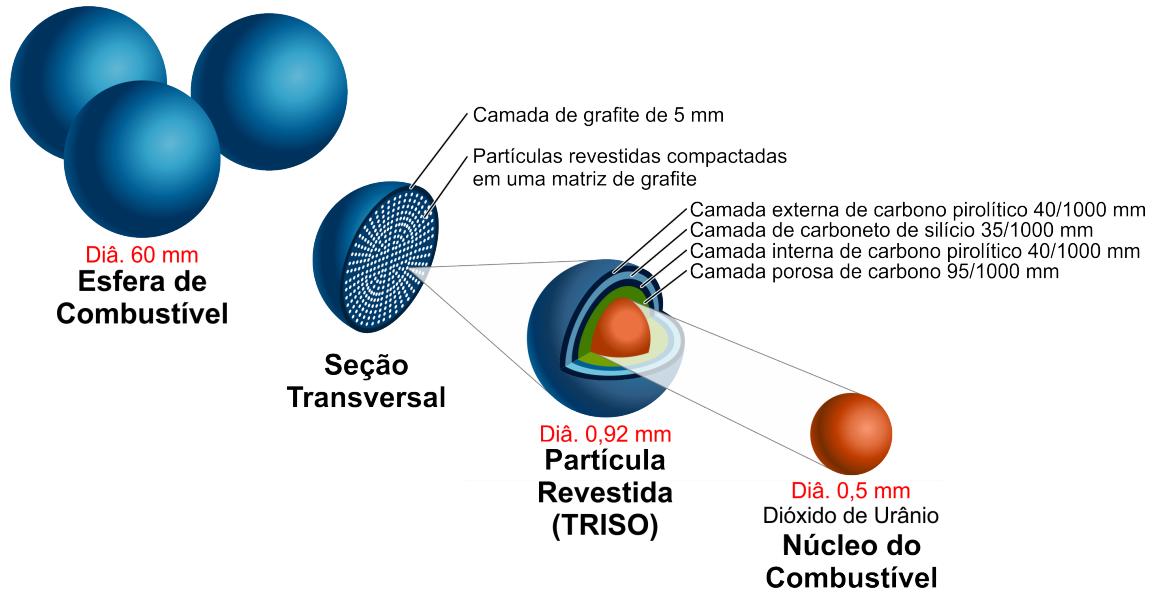


Figura 13 – Estrutura dos elemento combustíveis e das partículas TRISO usadas na operação do reator HTR-10

do combustível, que contém o material nuclear enriquecido. Para atenuar colisões provocadas por fragmentos de fissão e acomodar acúmulos de gases internos e alterações nas dimensões da partícula, uma camada de carbono poroso envolve o núcleo. Por fim, as camadas externas incluem duas camadas de carbono pirolítico separadas por uma camada de carboneto de silício. Estas últimas camadas atuam como vasos de pressão, como barreiras de difusão (contra a liberação de produtos de fissão) e como protetores de ataques químicos e de gases corrosivos (Powers; Wirth, 2010). Uma representação simplificada do elemento combustível e da partícula TRISO são mostradas na Figura 13.

As partículas TRISO podem suportar temperaturas de até 1.600 °C sem sofrer degradação em sua estrutura ou composição. Entre 1.600 °C e 1.800 °C, as barreiras começam a falhar e a liberação de produtos de fissão aumenta rapidamente; em temperaturas acima de 2.000 °C, a decomposição térmica da camada de carboneto de silício é o mecanismo de colapso predominante (NUREG, 2004), levando à fratura do elemento combustível. A relação entre a integridade do elemento combustível e a temperatura é ilustrada na Figura 14.

Para a carga inicial do núcleo, bolas *dummy* (bolas de grafite sem combustível nuclear) são colocadas no tubo de descarga e na região inferior do núcleo do reator. Em seguida, uma mistura de elementos combustíveis e bolas *dummy* em proporções de 57% e 43%, respectivamente, é carregada de forma gradual até que seja alcançada a criticalidade do reator (vide Figura 15). Uma vez alcançada a criticalidade, bolas misturadas (*dummy* e combustível) na mesma proporção são carregadas para que o leito do núcleo seja preenchido completamente, com o que será permitido ao reator operar em potência máxima (Aziz; Refeat, 2009).

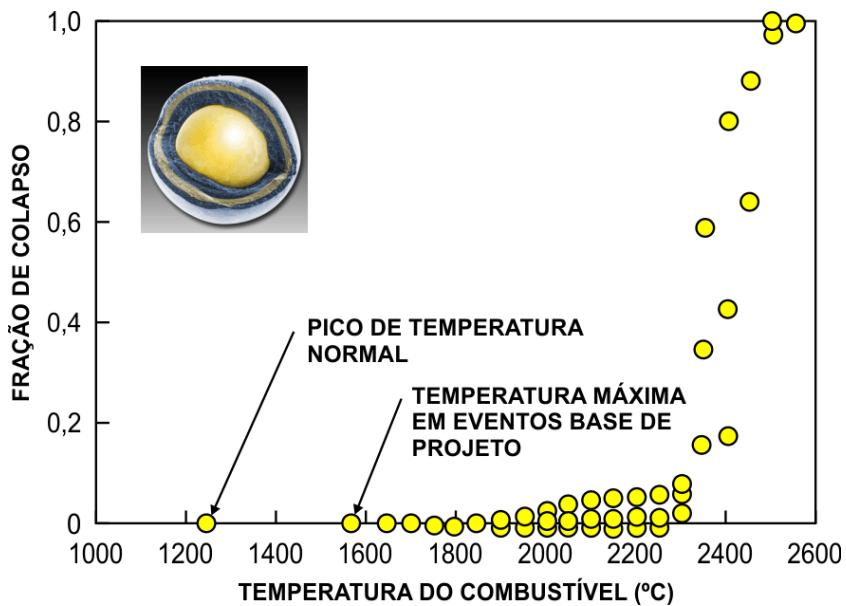


Figura 14 – Influência da temperatura na fração de colapso das partículas TRISO. Adaptado de [Brossard et al. \(2009\)](#)

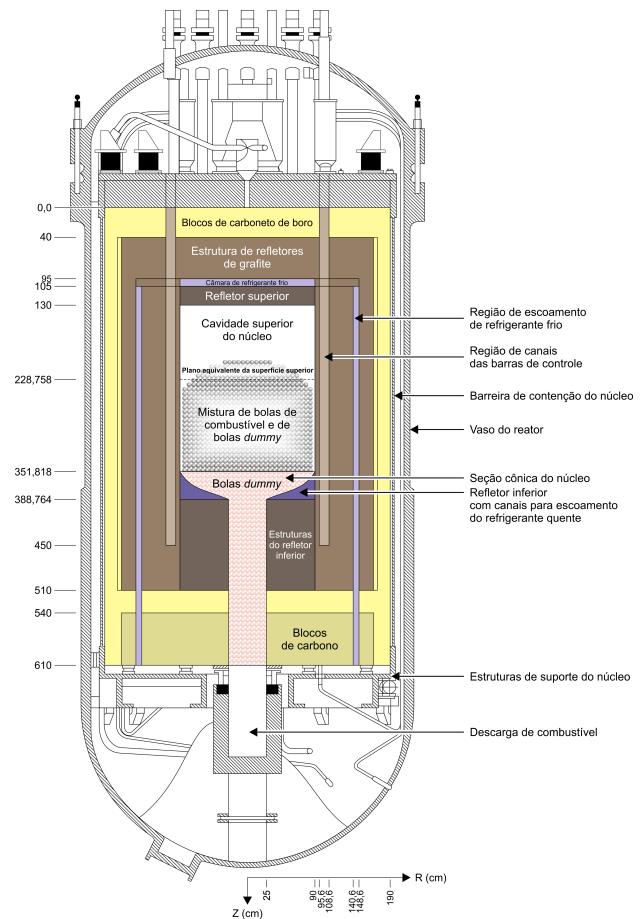


Figura 15 – Regiões do núcleo do reator HTR-10 em sua configuração inicial. Adaptado de [Terry et al. \(2005\)](#)

3.3 Operação e Resultados

O HTR-10 alcançou sua primeira criticalidade ao final de 2000. No início de 2003, o reator tornou-se totalmente operacional, operando com potências nominais de 10 MW. Naquele período, viria a ser conectado à rede elétrica do próprio INET através de um gerador externo, além de ser usado alguns meses depois com propósitos de aquecimento. Desde então, diversos testes foram realizados com o objetivo de demonstrar as características de segurança inerentes aos reatores do gênero. Segundo [Hu et al. \(2006\)](#), dados obtidos com os experimentos também se tornaram úteis para a validação de códigos computacionais implementados com o objetivo de analisar a segurança, e transientes daquele reator, de modo a assegurar que a temperatura máxima do combustível não excedesse 1.600 °C, bem como as temperaturas dos diversos componentes da planta não ultrapassassem os limites de temperatura dos respectivos materiais empregados na fabricação deles.

Durante a realização dos testes, ou em sua operação normal, a potência do reator é monitorada por um sistema de medição nuclear composto por três dispositivos de instrumentação de fluxo neutrônico que cobrem todas as faixas de potência nas quais o reator é operado. Em função de limitações da estrutura interna, não há propriamente passagens de escoamento para acomodar instrumentos de medição de escoamento. No entanto, outros parâmetros cruciais são registrados através de um sistema de monitoramento térmico, composto por termopares distribuídos em diversos pontos localizados no interior do reator, conforme mostrado na Figura 16 (CHEN et al., 2015).

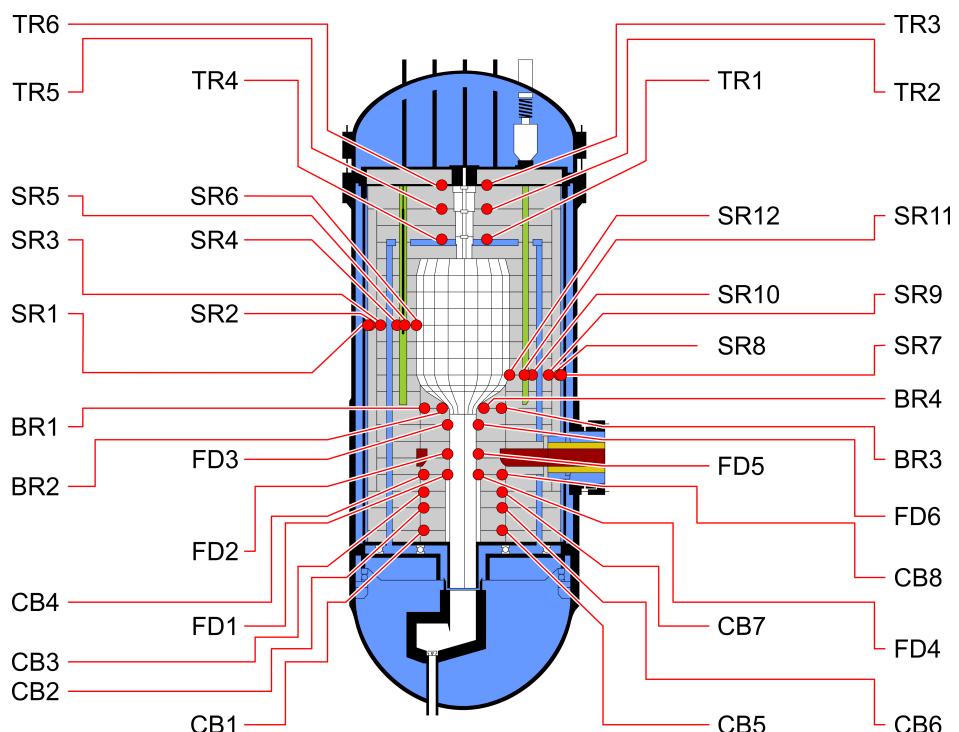


Figura 16 – Sistema de monitoramento térmico do reator HTR-10

Entre os experimentos de demonstração de segurança, [Hu et al. \(2006\)](#) mencionam uma série de testes que já foram concluídos, conforme a relação abaixo:

- Perda de escoamento do hélio;
- Corte de fornecimento externo de energia;
- Desligamento da turbina;
- Não fechamento da válvula do circuito primário sem *scram*¹ do reator;
- Desligamento do circulador de hélio sem que houvesse *scram* do reator (com potências de 3 MW e 10 MW, respectivamente);
- Inserção de reatividade sem que houvesse *scram* do reator a 3 MW.

Em todos os testes mencionados acima, as temperaturas máximas dos diversos componentes do reator se mostraram inferiores às temperaturas limites. Com limite de pressão no circuito primário estabelecido em 3,3 MPa, também houve monitoramento da pressão, sem que ela, em nenhum momento, excedesse tal limite. Em particular, o teste de desligamento do circulador de hélio sem *scram* do reator, isto é, sem a inserção das barras de controle; ainda assim, a potência do reator foi reduzida rapidamente (de 10 MW a zero) de forma automática, mantendo o reator subcrítico por um longo período, conforme ilustrado na Figura 17. Tal comportamento é explicado pela reatividade negativa advinda do aumento de temperatura no núcleo, este último acarretado pela redução da capacidade de remoção de calor do circuito primário. Embora tenha havido um aumento significativo da temperatura na seção superior do refletor durante a realização do teste, as temperaturas das demais regiões do núcleo reduziram gradativamente ([HU et al., 2006](#)).

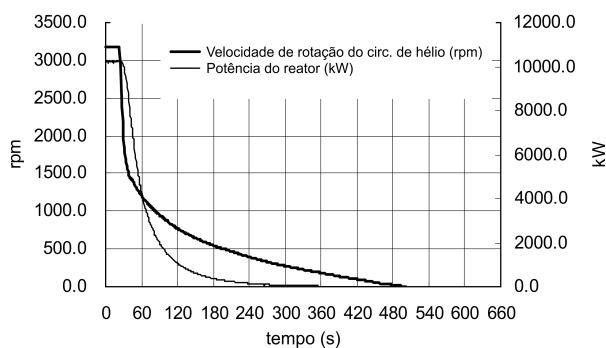


Figura 17 – Transiente com desligamento de circulador de hélio sem *scram* do reator (com potência inicial de 10 MW). Adaptado de [Hu et al. \(2006\)](#)

¹O termo é usado para descrever o desligamento de emergência de um reator nuclear. A origem do uso do termo se deve ao acrônimo "Safety Control Rod Axe Men", em referência a um mecanismo de desligamento usado com o primeiro reator operacional construído nos Estados Unidos, o *Chicago Pile*.

Diante dos resultados satisfatórios, obtidos com o HTR-10 através do seu longo tempo de operação e dos testes de demonstração de segurança, dois novos projetos tem sido lançados pelo governo chinês com o objetivo de dar continuidade ao desenvolvimento da tecnologia de reatores de alta temperatura. Um deles é um protótipo de planta modular, conhecido como HTR-PM, para demonstrar a viabilidade comercial dos reatores HTGR. O outro projeto consiste na substituição do vaso de pressão do gerador de vapor do HTR-10 por um novo vaso de pressão que contenha uma turbina de hélio e um gerador para a conversão direta da energia térmica em energia elétrica ([WU; YU, 2007](#)), eliminando a necessidade do circuito secundário.

Indubitavelmente, uma das principais contribuições do projeto e operação do reator HTR-10 é fornecer um conjunto de valores experimentais de referência que podem ser utilizados na construção e validação de metodologias e ferramentas de simulação para reatores VHTRs.

4 Modelagem Termohidráulica do Núcleo do Reator HTR-10

Os procedimentos citados neste capítulo foram desenvolvidos com o auxílio do software Ansys CFX (versão 14). É um código CFD de propósito geral que faz parte de uma suíte de aplicativos da própria Ansys voltados para a análise de problemas de simulação em engenharia. O software é constituído de quatro módulos que, a partir da entrada de uma geometria e de uma malha, permitem realizar uma simulação CFD: os módulos de pré-processamento e pós-processamento (Ansys CFX-Pre e Ansys CFD-Post, respectivamente), o próprio solver CFD (Ansys CFX-Solver) e uma ferramenta de gerenciamento de submissão de simulações para a realização dos cálculos (CFD Job Manager) ([ANSYS INC., 2011](#)). Para a construção da geometria e da malha, são usados dois outros aplicativos integrados ao Ansys CFX, o Ansys Designer Modeler e o Ansys Meshing.

O Ansys CFX-Solver, em particular, oferece recursos para a submissão de cálculos em modo serial ou em modo paralelo. No modo de submissão serial (modo de submissão padrão do solver), todos os cálculos são realizados por um único processo que é executado em um único processador. No modo de submissão paralelo, os cálculos são realizados, de forma dividida, por dois ou mais processos que poderão ser executados em uma única CPU (processamento paralelo local) ou em mais de uma CPU (processamento paralelo distribuído). Para comunicação entre os processos criados pelo solver em um modo de execução paralelo, são empregadas versões das bibliotecas MPI (do inglês *Message Passing Interface*, Interface de Passagem de Mensagens) e PVM (do inglês *Parallel Virtual Machine*, Máquina Paralela Virtual), com as quais é possível usar redes de computadores homogêneas e heterogêneas, respectivamente. Independentemente da biblioteca usada, a implementação paralela incorporada ao solver é baseada em um modelo SPMD (do inglês *Single Program, Multiple Data*, Único Programa, Múltiplos Dados), em que versões idênticas do mesmo código são executadas em dois ou mais processos.

4.1 Domínio Computacional

A geometria de leitos empacotados possui, reconhecidamente, uma estrutura bastante complexa. Definida, em princípio, pelo número de elementos esféricos em um contêiner, o leito apresenta poros constituídos por espaçamentos entre as partículas esféricas, pelos quais o fluido circula. Uma coluna empacotada é um caso específico em que o leito é confinado dentro de uma estrutura cilíndrica, podendo ela se apresentar de

forma fixa ou fluidizada. Em um leito estático, as partículas são posicionadas de forma fixa, e não são arrastadas ou movimentadas pelo fluido, ao contrário do que ocorre em um leito fluidizado. Algumas propriedades geométricas de leitos fixos citadas por Baker (2011) são consideradas para a definição do domínio computacional da simulação realizada neste trabalho, tais como o diâmetro equivalente da partícula, o regime de empacotamento e a porosidade.

Em um leito empacotado, os elementos podem se apresentar com tamanho e forma uniforme, ou ainda com formato irregular. Quando os elementos não são esféricos, eles são representados por esferas equivalentes de mesmo volume, definidas por equivalência de diâmetro ou esfericidade. No presente trabalho, de simulação do comportamento termohidráulico do núcleo do HTR-10, não houve necessidade de se fazer correspondência com esferas equivalentes, já que os elementos combustíveis usados naquele reator possuem formato esférico. Mais especificamente, cada elemento combustível apresenta 6 cm de diâmetro, tendo uma camada interna de grafite com espessura de 5 mm, que envolve uma matriz de grafite na qual as partículas TRISO estão dispersas (vide Figura 13). Dado este diâmetro para a esfera, chega-se a um raio r de 3 cm e, por consequência, a um volume equivalente de $1,131\text{E}+2 \text{ cm}^3$, obtido pela expressão

$$V_{esfera} = \frac{4}{3}\pi r^3. \quad (1)$$

Além da geometria dos elementos, a forma de arranjo segundo a qual eles estão dispostos no interior do leito exerce influência significativa em relação à porosidade e consequentemente à facilidade (ou dificuldade) com a qual o fluido atravessa o meio. O regime de empacotamento dos elementos combustíveis em reatores de leitos de bolas é, via de regra, não estruturado. O arranjo não estruturado se caracteriza pelo fato de que a localização de cada partícula é aleatória, não havendo, a princípio, nenhuma descrição matemática conhecida que possa ser usada para descrever a orientação e a posição dos elementos. Adicionalmente, o processo de recarga contínua do combustível em reatores do gênero intensifica o aspecto aleatório encontrado na distribuição dos elementos no interior do núcleo. Como a abordagem realística exige a modelagem individual de cada elemento combustível, a solução empregada na maioria dos trabalhos correlatos envolve o uso de arranjos estruturados que são aproximações da distribuição real dos elementos em um leito de bolas. Neste trabalho, dois tipos de arranjos estruturados são empregados: FCC (do inglês *Face Center Cubic*, Cúbico Centrado na Face) e BCC (do inglês *Body Center Cubic*, Cúbico Centrado no Corpo).

Uma célula unitária FCC apresenta um elemento posicionado de forma centralizada em cada vértice, além de outro elemento no centro de cada face do cubo. No caso de elementos esféricos uniformes, se considerado apenas o volume ocupado por estes

elementos no interior da célula cúbica unitária, são totalizadas 8 partículas nos vértices com 1/8 do volume da esfera de referência cada uma e 6 partículas de face com metade do volume cada uma, chegando-se a um volume total equivalente ao de 4 esferas na célula unitária. Nas células unitárias BCC, além dos elementos posicionados em cada vértice, há apenas mais um elemento localizado no centro do cubo, com o que se tem um volume total equivalente na célula unitária correspondente ao volume de 2 esferas. A estrutura dos arranjos FCC e BCC é ilustrada na Figura 18.

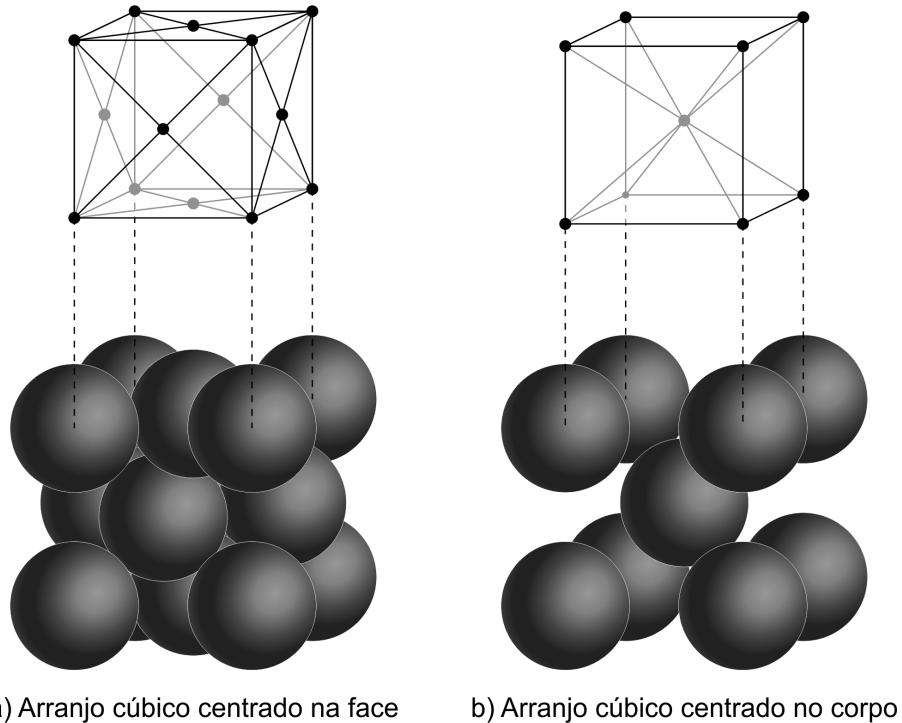


Figura 18 – Tipos de arranjos regulares cúbicos utilizados na simulação

Um leito de bolas também pode ser descrito, conforme observa [Baker \(2011\)](#), como uma restrição ou um bloqueio parcial com o qual o fluido interage em alguma direção. A facilidade com a qual o fluido atravessa o meio também é determinada pelo volume do vazio intersticial presente no interior do leito, podendo ele ser representado de forma adimensional como uma fração de porosidade (ϵ). Expressa pela divisão entre o volume de espaço vazio, V_{vazio} , e o volume total do leito, V , conforme mostrado na Eq. (2), a porosidade guarda relação direta com a fração de empacotamento F_p dos elementos definida na Eq. 3.

$$\epsilon = \frac{V_{vazio}}{V}, \quad (2)$$

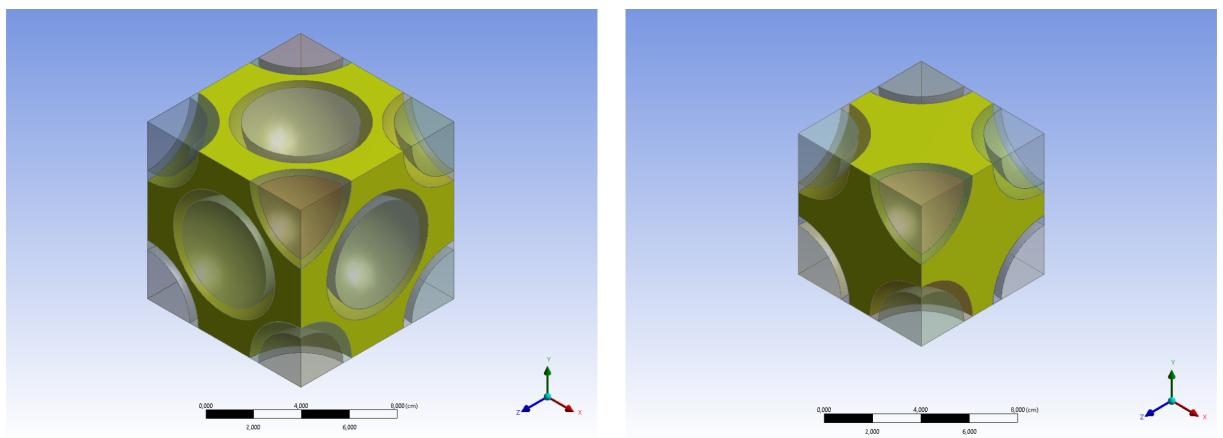
$$F_p = 1 - \epsilon. \quad (3)$$

Como ocorre em qualquer estrutura cúbica, a definição das dimensões das células unitárias FCC e BCC se resume ao comprimento da aresta a . A partir da fração

de empacotamento, também expressa pela relação entre o volume ocupado pelas esferas e o volume total, combinada com a definição de volume da célula cúbica, se chega ao comprimento da aresta da célula unitária na fórmula

$$a = \sqrt[3]{\frac{n \cdot V_{esfera}}{F_p}}, \quad (4)$$

onde n é a quantidade de esferas equivalentes que ocupam a célula unitária. O volume ocupado pelos elementos na célula unitária FCC, conforme já visto anteriormente, corresponde ao volume ocupado por quatro ($n = 4$) esferas. Na célula BCC, o volume ocupado é reduzido à duas ($n = 2$) esferas. Para o valor da fração de empacotamento, são considerados parâmetros de design apresentados no *benchmark* elaborado pela IAEA (2013) para o HTR-10 e outros reatores de alta temperatura refrigerados a gás, sendo $F_p = 0,61$. Com o uso destes dados na Eq. (4), são obtidos os comprimentos de aresta nas células FCC e BCC, sendo $a = 9,052 \text{ cm}$ ou $7,184 \text{ cm}$, respectivamente. A geometria das células unitárias é mostrada na Figura 19.



a) Célula unitária FCC do leito de bolas do HTR-10 b) Célula unitária BCC do leito de bolas do HTR-10

Figura 19 – Geometria das células unitárias FCC e BCC adotadas para o leito de bolas do núcleo do HTR-10

Em função do alto custo computacional exigido para a simulação do núcleo completo do HTR-10, a geometria final escolhida corresponde a uma coluna da seção central do núcleo, gerada a partir da replicação na direção vertical de células FCC e BCC em quantidade equivalente à altura do núcleo (estimada em 197 cm, conforme apontado em dados extraídos da IAEA (2013)). Dessa forma, para o arranjo FCC, a coluna é formada por 22 células unitárias e, para o arranjo BCC, por 27 células. Em relação às células das extremidades da coluna, não são considerados outros elementos além daqueles que estão posicionados nos vértices da face adjacente ao restante da coluna ou localizados no centro daquela face. Além disso, uma extensão do escoamento

foi acrescentada após a última célula em cada arranjo para garantir que as condições de desenvolvimento do escoamento do fluido fossem plenamente alcançadas. Detalhes adicionais das geometrias estão descritos nas Tabelas 2 e 3, além de estarem ilustradas na Figura 20.

Tabela 2 – Especificações da geometria dos arranjos FCC e BCC

Tipo de Elemento	Coluna FCC		Coluna BCC	
	Número de elementos	Esferas correspondentes	Número de elementos	Esferas correspondentes
1/8 do volume	168	21	208	26
Metade do volume	122	61	0	0
Volume completo	0	0	25	25
Total	290	82	233	51

Tabela 3 – Dimensões dos arranjos FCC e BCC

Propriedade	Coluna FCC	Coluna BCC
Aresta (m)	9,052E-2	7,184E-2
Volume da célula unitária (m^3)	7,417E-4	3,708E-4
Quantidade de células unitárias	22	27
Volume da célula de expansão (m^3)	1,482E-3	7,434E-4
Volume total (m^3)	1,78E-2	1,075E-2
Proporção de volume em relação à geometria completa (%)	3,56E-1	2,151E-1

4.2 Construção da Malha

Após a geração da geometria, o processo de construção da malha constitui a etapa seguinte da modelagem em qualquer abordagem CFD. Em linhas gerais, este processo consiste em discretizar o volume ocupado pelo domínio computacional em uma série de pequenos volumes ou elementos. Entre outros fatores, a precisão de uma solução CFD é fortemente influenciada pela quantidade e formato das células usadas na discretização do domínio. Não é de surpreender, portanto, que grande parte do tempo gasto em uma análise de CFD seja usualmente dedicado à geração de malhas apropriadas, conforme alerta [Tu et al. \(2013\)](#).

Além de formas cúbicas, elementos tetraédricos ou poliédricos podem ser encontrados na constituição da malha, dependendo da geometria do domínio computacional. Em relação à estrutura da malha, ela pode ser tratada como estruturada ou não estruturada, com a distinção entre uma e outra se resumindo à distribuição regular ou

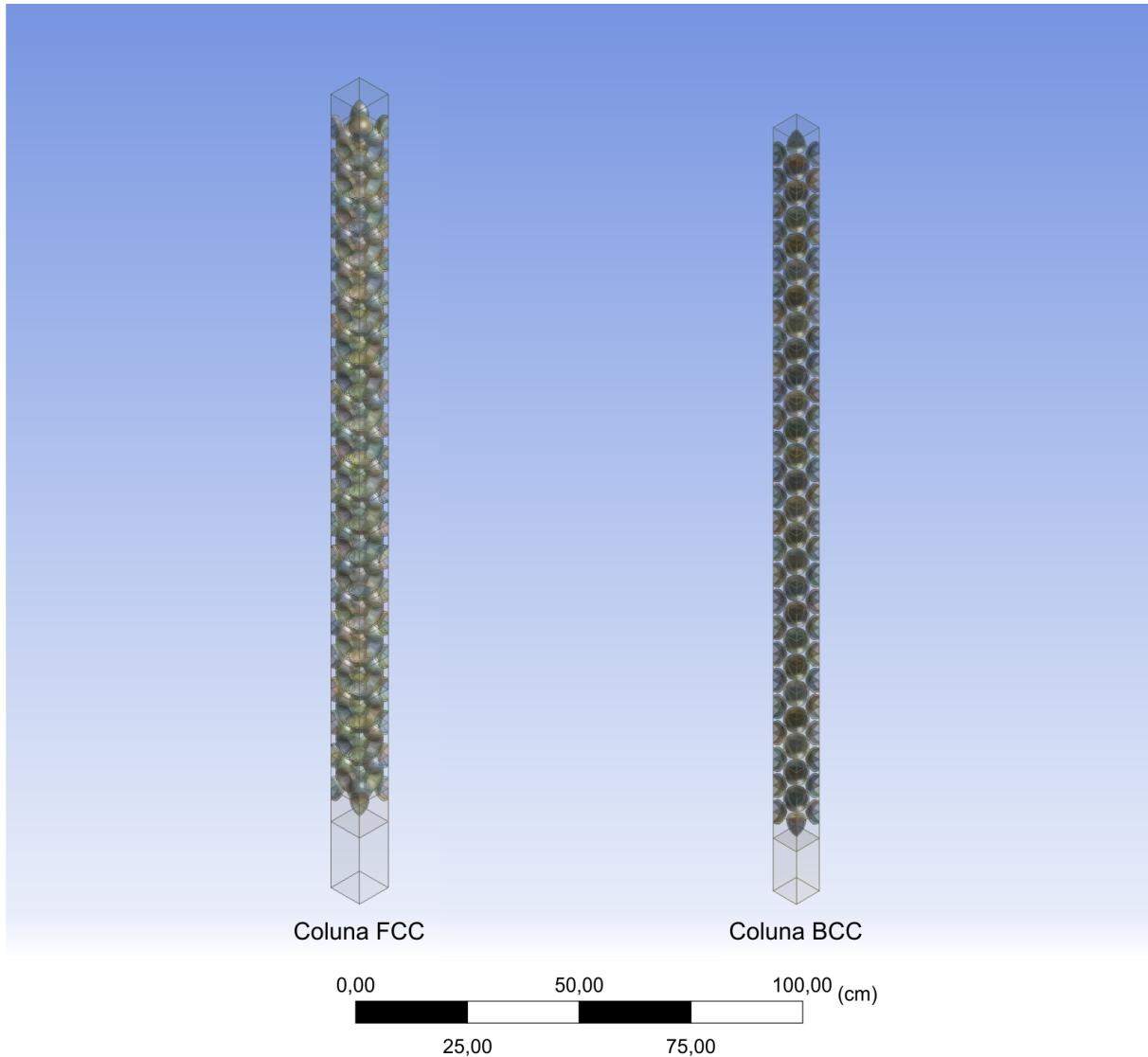


Figura 20 – Modelo geométrico das colunas FCC e BCC do núcleo do reator HTR-10.

não dos elementos ao longo do volume discretizado. Embora não haja diferenças de acurácia entre malhas não estruturadas e estruturadas, estas últimas demandam um custo computacional menor. Indicadas para geometrias mais simples, malhas estruturadas não se mostram apropriadas para leitos de bolas com regime de empacotamento aleatório, devido à complexidade da geometria destes leitos. Também não é incomum a combinação de malhas estruturadas com malhas não estruturadas, próprias, segundo Baker (2011), para domínios que alternam regiões de espaço aberto com áreas que apresentam restrições geométricas complexas. A maioria dos pacotes profissionais de software de CFD oferecem recursos para a geração e a manipulação de ambos os tipos de malhas.

Outro aspecto relevante, quando da construção da malha, diz respeito à densidade de elementos por unidade de volume. Malhas de maior densidade implicam

em um custo computacional maior. Devido a isto, em um primeiro momento, o uso de malhas menos densas para uma simulação em particular é recomendada por [Tu et al. \(2013\)](#), por permitir avaliar a capacidade dos recursos computacionais disponíveis para a execução da simulação, além de propiciar a análise da convergência ou divergência dos cálculos numéricos. Uma vez identificada a convergência, o refinamento da malha no domínio do escoamento permitiria alcançar uma solução aceitável, com a garantia da independência desta solução em relação à malha.

Neste trabalho, são usados mecanismos de refinamento global de malha disponibilizados pelo Ansys Meshing, como a geração de uma maior quantidade de volumes nas lacunas existentes entre os elementos combustíveis e a graduação entre volumes mínimos e máximos com base em taxas de variação específicas. Em particular, o uso de malhas mais densas nas regiões de maior proximidade entre as esferas se explica pelo alto grau de turbulência esperado naquelas regiões. Além disso, tais malhas se apresentam como não estruturadas devido ao alto grau de curvatura observado naquelas regiões do domínio computacional, com o emprego, por consequência, de células tetraédricas. Por sua vez, a discretização do espaço ocupado pelas esferas conta com a aplicação de malhas sem variação de densidade, devido à uma menor complexidade da geometria destas regiões. Mais especificamente, no interior de cada esfera, é gerada uma malha não estruturada; para as camadas de grafite, se alternam malhas não estruturadas com malhas estruturadas ajustadas às paredes, estas últimas constituídas por células hexaédricas. Todos estes aspectos estão ilustrados nas Figura 21.

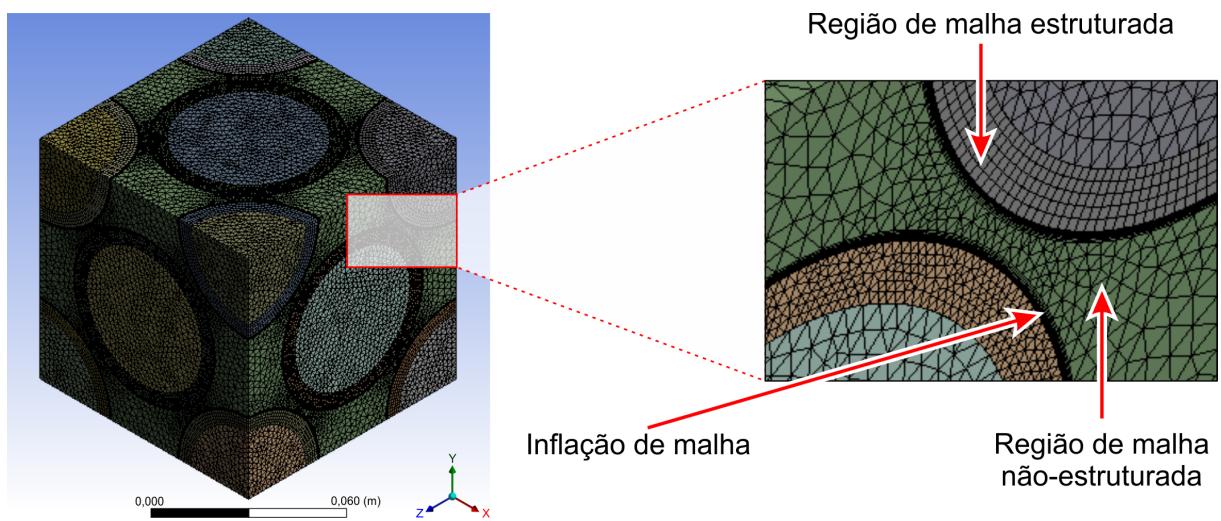


Figura 21 – Esquema da malha de uma célula unitária FCC.

Outro mecanismo de refinamento empregado envolve o uso de configurações locais da malha em regiões específicas da geometria. Estas configurações se sobrepõem àquelas definidas globalmente. Para tal, as diversas regiões do domínio computacional

são agrupadas em três subdomínios (técnica conhecida como de múltiplos domínios). Para os dois primeiros subdomínios, correspondentes às regiões internas das esferas e às camadas de grafite, respectivamente, as configurações locais aplicadas incluem a redefinição do volume máximo dos elementos de controle.

No último subdomínio, correspondente aos espaçamentos existentes entre os elementos combustíveis, uma configuração de malha local envolve a seleção das faces das esferas, resultando em um grau de refinamento de malha mais elevado, de modo a permitir uma melhor captura do fenômeno de transferência de calor para o fluido de trabalho. Nesta configuração, uma inflação da malha é estabelecida junto às faces das esferas, com a definição de 10 camadas de células hexaédricas. A espessura das camadas não é constante (conforme mostrado na Figura 22), devido ao uso de uma taxa de variação de 20% da camada anterior para a camada seguinte. Também é possível estabelecer a espessura total da camada de inflação em valores correspondentes ao grau de refinamento desejado para a malha naquela região. Uma vez estabelecidas as configurações globais e locais da malha, ela pode ser gerada pelo pacote Ansys CFX.

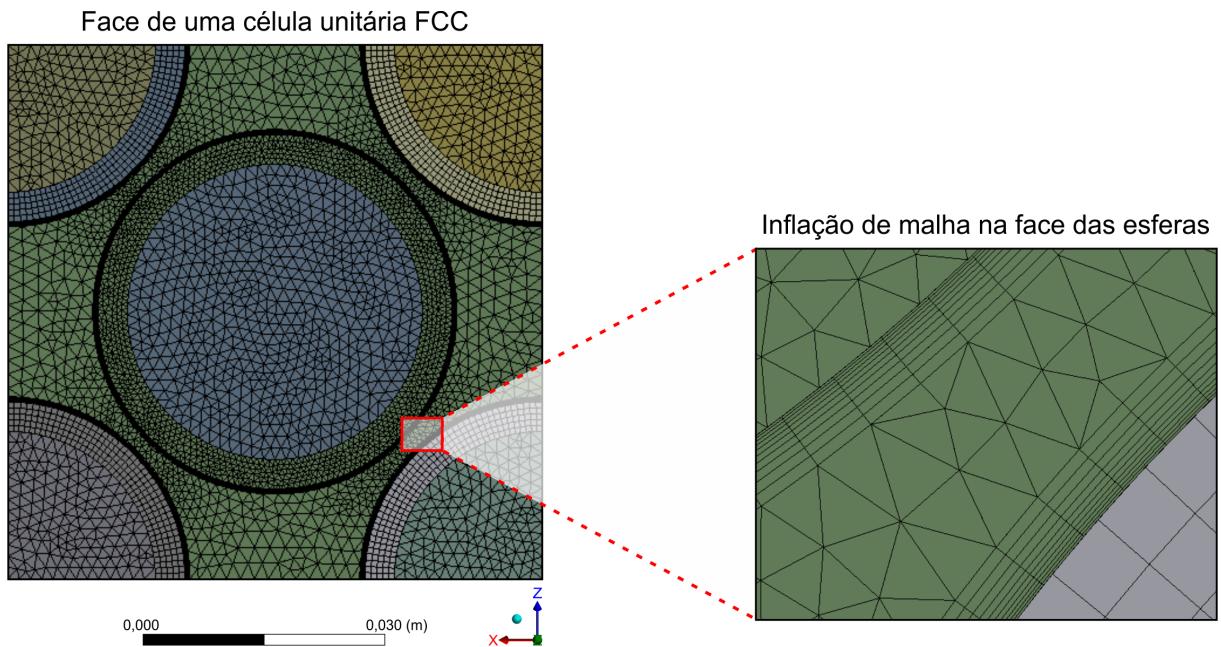


Figura 22 – Inflação de malha nas faces das esferas de uma célula unitária FCC.

4.3 Fenômenos Físicos e Parâmetros

Muitos problemas baseados na abordagem CFD exigem a simulação de fenômenos físicos complexos, devido ao fato deles influenciarem significativamente a dinâmica do fluido no interior do domínio de escoamento. Logo, a definição dos processos físicos subjacentes a um sistema de escoamento em particular representa um aspecto crucial

para a obtenção de resultados satisfatórios.

Para a análise termohidráulica do núcleo do HTR-10, a transferência de calor constitui, certamente, um dos principais fenômenos envolvidos na simulação. Estando o reator em operação normal, o calor gerado pelas reações nucleares é absorvido em quase sua totalidade pelo fluxo de hélio. Uma pequena quantidade do calor é dissipada por um sistema de remoção de calor por decaimento, constituído por painéis de refrigeração de água e refrigeradores de ar instalados nos lados interno e externo, respectivamente, da parede de concreto da cavidade do reator. No modelo termohidráulico apresentado no benchmark da IAEA (2013) e ilustrado nas Figuras 23 e 24, transferência de calor por condução no interior dos elementos combustíveis e por convecção na interface entre o refrigerante e o combustível são os fenômenos esperados na região de interesse da presente simulação (o leito de bolas). O modelo termohidráulico em questão usa um sistema de coordenadas R-Z (expressas em centímetros) em que a direção R corresponde ao eixo horizontal e a direção Z corresponde ao eixo vertical, com o ponto de origem sendo representado pela interseção da superfície superior com o eixo central do núcleo ativo do leito de bolas.

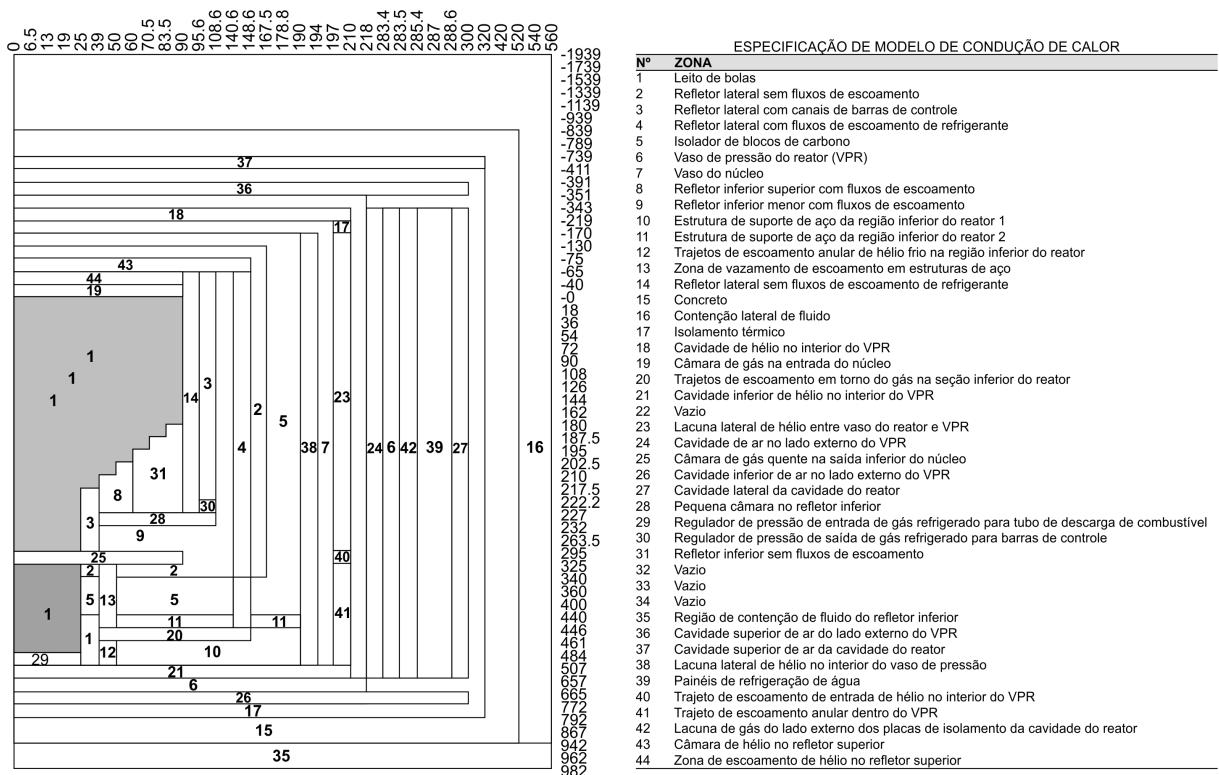


Figura 23 – Modelo de transferência de calor por condução no núcleo do reator HTR-10.
Adaptado de (IAEA, 2013)

Para o cálculo da distribuição de geração de calor do núcleo inicial, é usada uma distribuição de potência extraída do *benchmark* da IAEA (2013). Mostrada na Tabela 4,

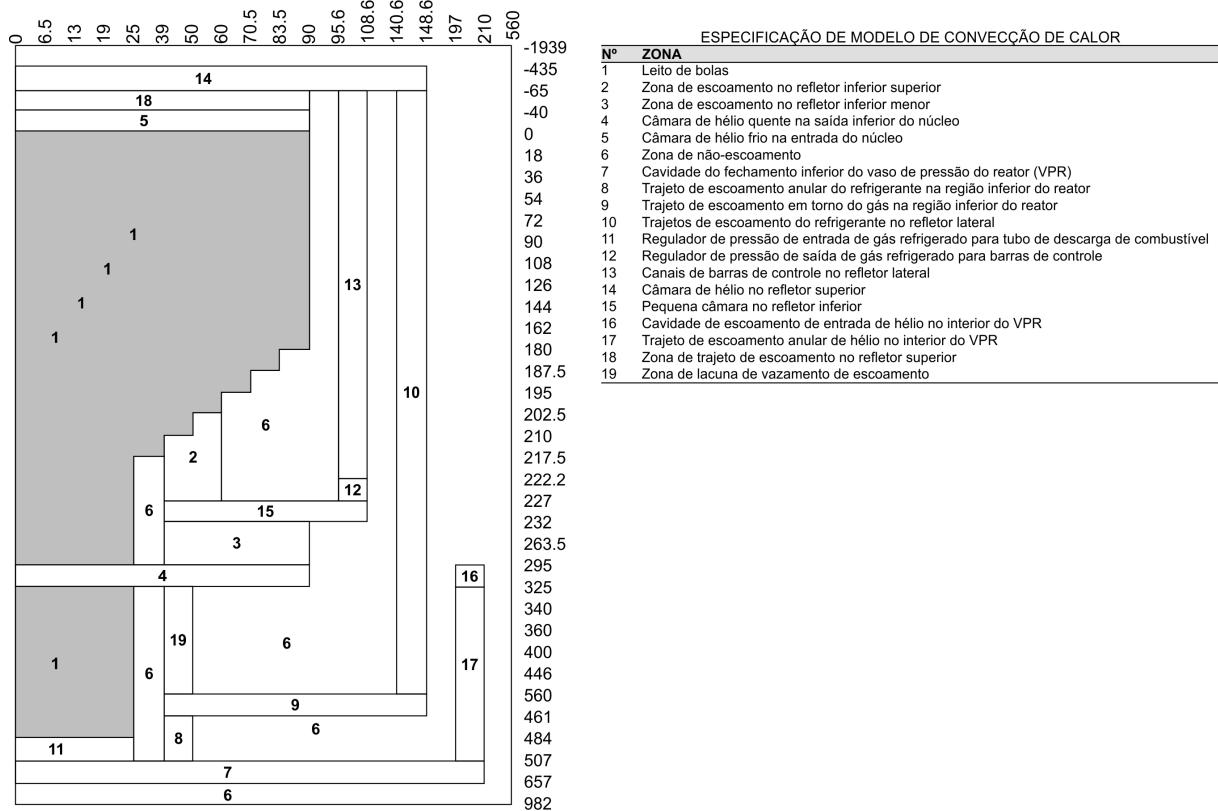


Figura 24 – Modelo de transferência de calor por convecção no núcleo do reator HTR-10.
Adaptado de ([IAEA, 2013](#))

nesta distribuição também é empregado o mesmo sistema de coordenadas R-Z adotado para os modelos de transferência de calor apresentados nas Figuras 23 e 24.

Tabela 4 – Distribuição da potência gerada no núcleo do reator HTR-10 no início da operação (MW/m³) ([IAEA, 2013](#))

Z/R (cm)	0	6,5	13	19	25	39	50	60	70,5	83,5
0	1,79	1,79	1,79	1,78	1,75	1,71	1,68	1,65	1,63	1,65
18	2,12	2,11	2,10	2,08	2,06	2,01	1,95	1,89	1,86	1,89
36	2,46	2,45	2,44	2,41	2,35	2,26	2,18	2,10	2,07	2,09
54	2,61	2,60	2,58	2,56	2,49	2,43	2,33	2,27	2,22	2,22
72	2,78	2,77	2,75	2,72	2,65	2,56	2,46	2,39	2,30	2,30
90	2,84	2,84	2,82	2,79	2,71	2,55	2,45	2,33	2,26	2,26
108	2,66	2,65	2,63	2,60	2,56	2,49	2,38	2,29	2,22	2,21
126	2,49	2,49	2,47	2,44	2,37	2,29	2,19	2,08	2,01	2,00
144	2,36	2,35	2,33	2,30	2,22	2,11	2,02	1,93	1,85	1,82
162	2,33	2,32	2,29	2,25	2,16	2,02	1,93	1,83	1,73	1,66
180	1,53	1,53	1,51	1,48	1,42	1,33	1,27	1,21	1,13	0,00

Obviamente, como o domínio computacional usado nesta simulação corresponde à coluna central do leito do bolas do HTR-10, são considerados apenas os valores de

potência definidos no centro do núcleo ($R = 0$). Adicionalmente, para a definição das potências efetivas geradas no material físsil presente na região interna à camada de grafite dos elementos combustíveis, são feitas outras considerações. Inicialmente, é obtido o volume de cada esfera sem a camada de grafite (com o que temos, portanto, bolas com raio de 0,025 m), chegando-se a

$$V_{esferasemgrafite} = 6,545E-5m^3. \quad (5)$$

Em seguida, é calculada a relação entre os volumes das esferas sem e com a camada de grafite. O volume da esfera com a camada de grafite, conforme já citado anteriormente, é obtido da Eq. (1). Com isto, a relação entre os volumes é dada por

$$R_{volumes} = \frac{V_{esferasemgrafite}}{V_{esfera}} = 0,5787 \quad (6)$$

Por fim, de posse da fração de empacotamento do leito de bolas (0,61), da relação de potências ($P_{benchmark}$) na seção central do leito de bolas (vide Tabela 4) e da relação entre os volumes, calculada na Eq. (6), chega-se à potência efetiva gerada pelo material físsil das esferas de combustível (sem a camada de grafite), sendo ela expressa por

$$P_{esfera} = \frac{P_{benchmark}}{0,61 \cdot R_{volumes}}. \quad (7)$$

As potências efetivas, com base na Eq. (7), estão listadas na Tabela 5. Para a identificação das esferas sobre as quais cada potência será aplicada, as camadas de esferas das colunas FCC e BCC são agrupadas em 11 grupos. Conforme mostrado na Figura 25, na coluna FCC, 3 grupos são compostos de 3 camadas e os grupos restantes possuem 4 camadas; na coluna BCC, são 4 grupos com 4 camadas e 7 grupos com 5 camadas cada uma.

Outro fenômeno físico esperado no leito de bolas é o regime turbulento experimentado pelo fluido refrigerante. Neste sentido, vários dos trabalhos citados na seção de estado da arte já apontavam para esta característica do fluido de trabalho em geometrias de leitos empacotados. Em linhas gerais, um fluxo turbulento pode ser classificado como sendo altamente instável e aleatório. As perturbações observadas no fluxo do fluido podem ser originadas, segundo Tu et al. (2013), a partir do livre movimento de escoamento ou mesmo serem induzidas pelo contato com superfícies ásperas. O início de um processo turbulento depende da razão entre a força de inércia e a força de viscosidade; trata-se de uma propriedade adimensional conhecida como número de Reynolds, conforme mostrado na Eq. (8).

$$Re = \frac{\text{Força inercial}}{\text{Força de viscosidade}}. \quad (8)$$

Tabela 5 – Distribuição efetiva de potências nas colunas FCC e BCC da seção central

Potências na seção central do núcleo extraídas do benchmark (MW/m ³)	Potência em cada esfera (divisão por fração de porosidade) (MW/m ³)	Potência em cada esfera (sem a camada de grafite) (MW/m ³)
1,79	2,934	5,071
2,12	3,475	6,006
2,46	4,033	6,969
2,61	4,279	7,394
2,78	4,557	7,875
2,84	4,656	8,045
2,66	4,361	7,535
2,49	4,082	7,054
2,36	3,869	6,685
2,33	3,820	6,600
1,53	2,508	4,334

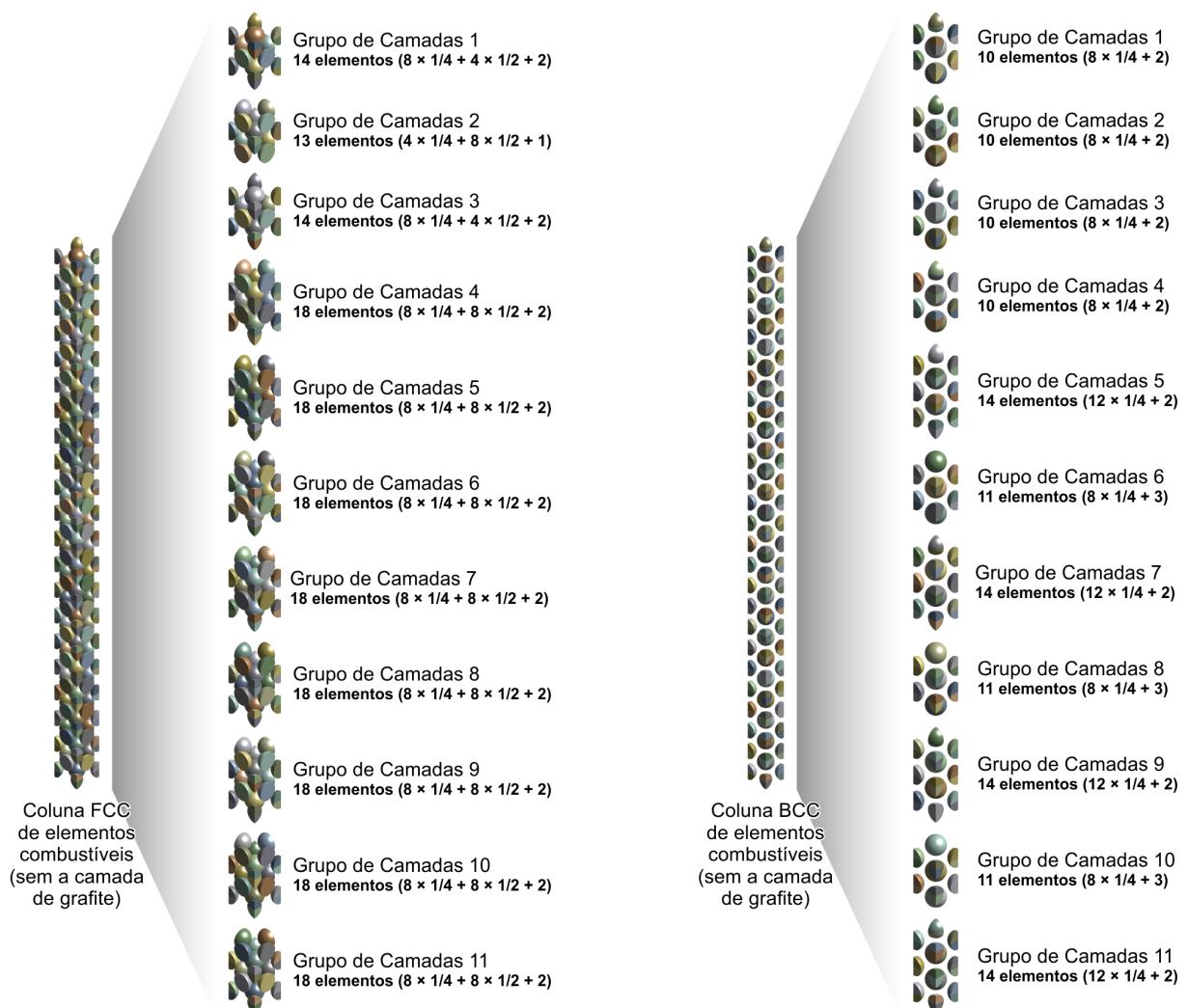


Figura 25 – Agrupamento dos elementos combustíveis em camadas para a distribuição efetiva de potências.

Com baixos números de Reynolds, as forças de inércia são menores que as forças de viscosidade, implicando numa dissipação das eventuais ocorrências de pertubações no fluxo. Com altos números de Reynolds, ocorre o contrário: as forças de inércia são suficiente grandes para amplificar as pertubações, tornando o movimento do fluido inherentemente instável, com a variação aleatória da velocidade e de outras propriedades do fluido ao longo do campo de escoamento. Além disso, fluxos turbulentos são caracterizados pela ocorrência de estruturas de fluxo rotacionais chamadas de turbilhões, com uma ampla escala de comprimentos e velocidades. Os turbilhões maiores apresentam escalas de velocidade e de comprimento comparáveis com o fluxo principal de escoamento (TU et al., 2013).

O Ansys CFX fornece um ambiente de interface gráfica próprio para a seleção dos fenômenos físicos mencionados acima. Além disso, são disponibilizadas ferramentas para a definição das propriedades do refrigerante e dos materiais usados nos elementos combustíveis. Neste ponto, são seguidas as recomendações apontadas no *benchmark* da IAEA (2013). Para o hélio, considera-se que a capacidade de calor específico por volume constante corresponde a 5.195 J/Kg·K e que a massa molar é de 4 Kg/Kmol; já a viscosidade (η_{helio}), a densidade (ρ_{helio}) e a condutividade (λ_{helio}) são dependentes da temperatura T e da pressão P , sendo expressos pelas Eqs. (9, 10 e 11), respectivamente.

$$\eta_{helio} = 3,674E-7T^{0,7} \quad (9)$$

$$\rho_{helio} = 48,14 \frac{P}{T} \left(1 + 0,4446 \frac{P}{T^{1,2}} \right)^{-1} \quad (10)$$

$$\lambda_{helio} = 2,682E-5 (1 + 1,123E-3P) T^{0,71 \cdot (1 - 2E - 04P)} \quad (11)$$

As recomendações apontadas no *benchmark* para as propriedades do hélio se baseiam em uma padrão de segurança sobre reatores de alta temperatura refrigerados à gás publicado pela agência alemã KTA (*Kerntechnischen Ausschusses*) e dividido em 5 seções, com destaque para a seção que trata do cálculo das propriedades materiais do hélio (KTA, 1978). Este padrão, por sua vez, se utilizou de estimativas realizadas por Petersen (1970), que considera faixas de pressão (0,1 a 10 MPa) e de temperatura (até 1.527 °C) que são aplicáveis a projetos de reatores daquele tipo. Naquele trabalho, devido ao propósito de se obter expressões de cálculo das propriedades materiais com um grau de acurácia maior, as equações são formuladas a partir da introdução de um fator de compressibilidade na lei dos gases ideais, sendo este último determinado por uma equação virial de estado.

Por sua vez, a densidade do combustível (ρ_c) é de 1.720 kg/m³; considerando novamente que T é a temperatura (em °C), sua capacidade de calor, C_c , é descrita por

uma aproximação cúbica obtida por correlação com a capacidade de calor volumétrico, da forma

$$C_c = 1,75(0,645 + 3,14E-3T - 2,809E-6T^2 + 0,959E-9 \times T^3). \quad (12)$$

Tal formulação é usada em trabalhos correlatos, como o de [Lee et al. \(2007a\)](#). Por último, aqui é considerado um método proposto por [Melese e Katz \(1984 apud LEE et al., 2007a\)](#) e [Kim \(2004 apud LEE et al., 2007a\)](#) para determinar a condutividade dos elementos combustíveis, ρ_c , sendo dada por

$$\rho_c = 1,2768 \times \left(\frac{-0,3906E-4T + 0,06829}{DOSIS + 1,931E-4T + 0,105} + 1,228E-4T + 0,042 \right), \quad (13)$$

onde T é a temperatura (com a ressalva de que, se T for igual ou menor a 450 °C, T é considerado 450 °C) e $DOSIS$ é a dosagem de irradiação de nêutrons rápidos, também com a ressalva de que para valores superiores a 2,5, ela é considerada igual a 2,5.

4.4 Modelo Matemático

As equações que governam a dinâmica do escoamento de fluidos e que constituem a fundamentação matemática das técnicas de CFD são formuladas com base nas leis de conservação da física. São três os princípios fundamentais evocados nestas equações: a conservação de massa para o fluido, a conservação do momento, segundo a qual a variação temporal do momento linear é igual à soma das forças aplicadas sobre uma partícula de fluido (segunda lei de Newton), e a conservação de energia, segundo a qual a variação de energia é igual à soma da variação de transferência de calor e à variação do trabalho aplicado sobre a partícula de fluido (primeira lei da termodinâmica).

A derivação das equações pode ser acompanhada em [Tu et al. \(2013\)](#) e em [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#), onde se considera um volume de controle de dimensões suficientemente pequenas (Figura 26a), de modo a garantir que as leis de conservação no interior do volume sejam válidas.

A conservação de massa em qualquer local do elemento de controle é dada pela equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} = 0, \quad (14)$$

onde ρ é a densidade do fluido naquele local, bem como se considera a decomposição da velocidade do fluido em suas componentes locais u , v e w (a equação também é conhecida como equação da continuidade). Aqui cabe observar que os termos transientes que aparecem nesta e nas próximas equações devam ser desconsiderados em simulações de casos estacionários, a exemplo do objeto de estudo deste trabalho.

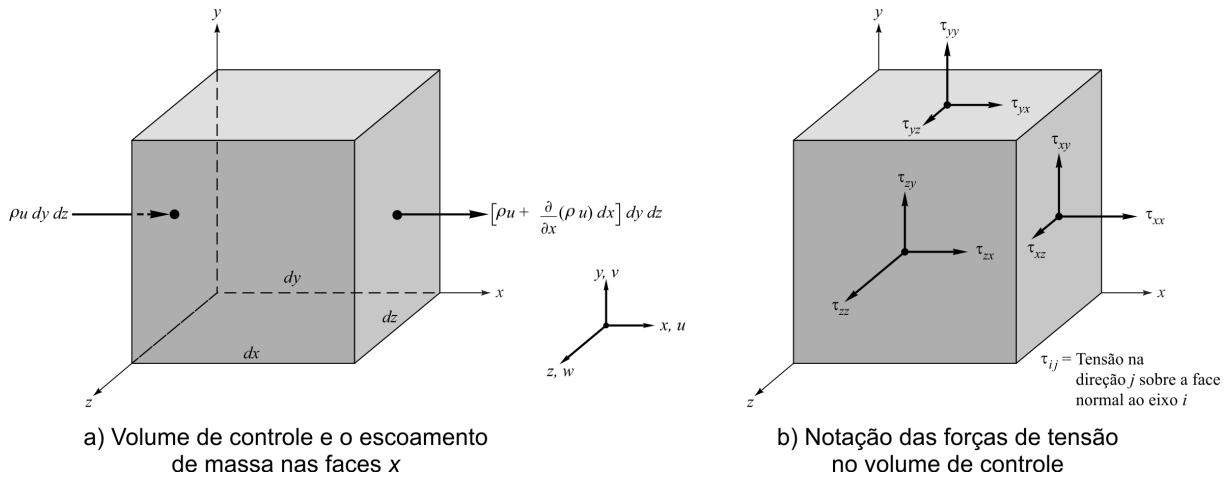


Figura 26 – Volume de controle fixado no plano cartesiano

Para a formulação das equações de conservação do momento, são considerados componentes de força que agem sobre o volume de controle, com elas se distinguindo entre duas fontes: as forças de corpo, que agem à distância, como o campo gravitacional e o campo eletromagnético, e as forças de superfície, que agem por contato com o fluido através da superfície de controle. Estas últimas decorrem da pressão p e dos componentes de tensão normais e tangenciais (Figura 26b); disso, e em meio à aplicação da 2^a Lei de Newton, chega-se às Eqs. (15a, 15b e 15c) para cada uma das direções x , y e z , respectivamente.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho wu)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_u \quad (15a)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho wv)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_v \quad (15b)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho ww)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + S_z \quad (15c)$$

Nestas equações, os efeitos das forças de corpo são incorporados pela introdução dos termos de fontes adicionais S_u , S_v e S_w .

Por fim, para a equação de energia, é utilizada a lei da condução de calor, que associa o fluxo de calor com o gradiente de temperaturas T e com a condutividade térmica q . Combinado com a variação de trabalho realizado pelas forças de tensão (descrito pela função de dissipação Φ), a equação de energia, em se tratando de fluidos compressíveis, a exemplo do gás hélio, é frequentemente rearranjada para se obter uma equação para a entalpia h , resultando na equação

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uh)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vh)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho wh)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[q \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[q \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[q \frac{\partial T}{\partial z} \right] - \left[\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right] + \Phi + S_h. \quad (16)$$

Nesta equação, a função de dissipação Φ representa uma fonte de energia devida à deformação do trabalho aplicado sobre o fluido, ao relacionar as componentes locais de velocidade com as forças de tensão ilustradas na Figura 26b. O trabalho é extraído da energia mecânica que causa o movimento do fluido e a função é expressa por

$$\begin{aligned}\Phi = & \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \\ & \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z}.\end{aligned}\quad (17)$$

As semelhanças entre as equações anteriores permitem a dedução de uma equação genérica. Com a introdução de uma variável genérica ϕ , a generalização toma a forma dada pela Eq. (18), onde Γ é o coeficiente de difusão. Chamada de *equação de transporte* para a propriedade ϕ , a Eq. (18) acomoda os termos que não são comuns às equações de governança através do termo fonte S_ϕ .

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w\phi)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z} \right] + S_\phi \quad (18)$$

Em muitos casos, um modelo apropriado para as tensões de viscosidade é introduzido, com sua definição dada em função da taxa de deformação local do volume de controle, sendo esta expressa, por sua vez, em termos dos gradientes de velocidade (TU et al., 2013). Neste modelo, as tensões de viscosidade também são relacionadas com a viscosidade dinâmica μ e com um segundo coeficiente de viscosidade, λ , que normalmente é ignorado em fluidos compressíveis. Ao aplicar este modelo, chega-se às equações de Navier-Stokes (Eqs. 19a, 19b e 19c). Para efeito de simplificação de notação, V é o vetor velocidade e Du/Dt , Dv/Dt e Dw/Dt são derivadas substantivas dos componentes locais de velocidade.

$$\begin{aligned}\rho \frac{Du}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \nabla \cdot V \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + S_u\end{aligned}\quad (19a)$$

$$\begin{aligned}\rho \frac{Dv}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial x} + \lambda \nabla \cdot V \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + S_v\end{aligned}\quad (19b)$$

$$\begin{aligned}\rho \frac{Dw}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial x} + \lambda \nabla \cdot V \right] + S_z\end{aligned}\quad (19c)$$

Escoamentos turbulentos, como aqueles que são esperados em geometrias contendo leitos de bolas, exigem, ocasionalmente, a resolução de equações adicionais. Isso

se explica pelo fato de que a resolução numérica direta das equações de Navier-Stokes em regimes de alta turbulência exigem requisitos computacionais proibitivos. Caso este empecilho não seja superado, é admissível, em algumas aplicações, a obtenção de informações sobre valores médios das propriedades do escoamento ao longo do tempo, com o que são ignorados detalhes de flutuações instantâneas típicas de regimes turbulentos. Este princípio é aplicado às equações de conservação, com o que se chega às equações de governança médias no tempo, mais popularmente conhecidas como equações de Navier-Stokes médias no tempo (do inglês *Reynolds-averaged Navier-Stokes*, RANS). Se considerado, por exemplo, o campo de velocidade representado na Figura 27, V , ele é decomposto em um componente médio (\bar{V}) e uma flutuação ao redor deste componente, V' , tal que

$$V = \bar{V} + V' \quad (20)$$

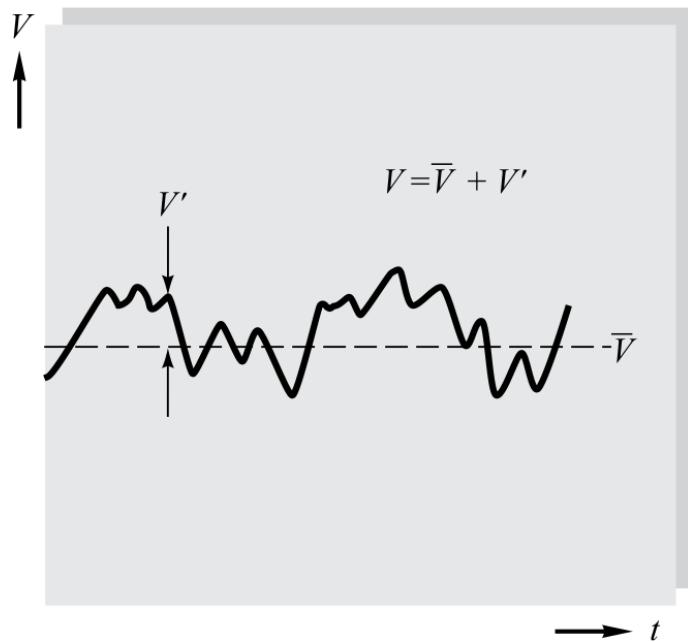


Figura 27 – Definição de média e flutuação da variável turbulenta de velocidade. Adaptado de [White \(2009\)](#)

De forma análoga, a decomposição apresentada na Eq. (20) é estendida para as demais propriedades do escoamento. Denotando a propriedade de escoamento por ϕ e considerando a referida decomposição, o valor médio no tempo pode ser expresso por

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int \phi(t) dt, \quad (21)$$

onde Δt é o intervalo temporal. [Baker \(2011\)](#) ressalta que o intervalo temporal deve ser consideravelmente maior do que aquele no qual se observa a frequência de flutuações, de modo a capturar um número significativo de eventos. A partir das formulações básicas evocadas pelas Eqs. (20 e 21), é derivado um conjunto de regras que, quando

aplicadas da forma como mostrado por [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#), resulta nas equações de RANS voltadas para escoamentos compressíveis, com a conservação média da massa no tempo dada por equação

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \Delta \cdot (\bar{\rho} \tilde{V}) = 0. \quad (22)$$

De forma análoga, o momento linear médio no tempo é definido pelas Eqs. (23a), (23b) e (23c).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{V}) &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla \tilde{u}) + \\ &\left[-\frac{\partial (\bar{\rho} u'^2)}{\partial x} - \frac{\partial (\bar{\rho} u' v')}{\partial y} - \frac{\partial (\bar{\rho} u' w')}{\partial z} \right] + S_{Mx} \end{aligned} \quad (23a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{V}) &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla \tilde{u}) + \\ &\left[-\frac{\partial (\bar{\rho} u'^2)}{\partial x} - \frac{\partial (\bar{\rho} u' v')}{\partial y} - \frac{\partial (\bar{\rho} u' w')}{\partial z} \right] + S_v \end{aligned} \quad (23b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{V}) &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla \tilde{u}) + \\ &\left[-\frac{\partial (\bar{\rho} u'^2)}{\partial x} - \frac{\partial (\bar{\rho} u' v')}{\partial y} - \frac{\partial (\bar{\rho} u' w')}{\partial z} \right] + S_w \end{aligned} \quad (23c)$$

Por fim, o mesmo raciocínio pode ser aplicado na equação de transporte para uma quantidade escalar arbitrária (a temperatura, por exemplo), resultando na equação

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\phi} \tilde{V}) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \tilde{\phi}) + \left[-\frac{\partial (\bar{\rho} u' \phi')}{\partial x} - \frac{\partial (\bar{\rho} v' \phi')}{\partial y} - \frac{\partial (\bar{\rho} w' \phi')}{\partial z} \right] + S_\phi. \quad (24)$$

Como a variação da densidade não pode ser ignorada nestes tipos de escoamentos (ainda que os efeitos da flutuação da densidade o sejam), alguns termos médios são ponderados pela densidade ou da forma como sugerido por [Favre \(1965 apud PLETCHER et al., 2013\)](#), sendo eles indicados por \tilde{V} , \tilde{u} , \tilde{v} , \tilde{w} e $\tilde{\phi}$.

Como resultado da aplicação da abordagem de obtenção dos valores médios, termos de tensão turbulenta são gerados nas Eqs. (23a), (23b) e (23c). Tais termos ($-\bar{\rho} u'^2$, $-\bar{\rho} v'^2$, $-\bar{\rho} w'^2$, $-\bar{\rho} u' v'$, $-\bar{\rho} u' w'$ e $-\bar{\rho} v' w'$) são chamados de tensões de Reynolds. Além disso, termos extras também aparecem na Eq. (24). Diante disso, para a resolução das equações de RANS, modelos de turbulência são introduzidos com o objetivo de predizer as tensões de Reynolds e os termos extras de transporte escalar. Vários modelos partem do princípio de que existe uma analogia entre a ação das tensões de viscosidade e as tensões de Reynolds no escoamento médio. Segundo a lei de Newton de viscosidade, as tensões viscosas são proporcionais à taxa de deformação dos elementos de fluido,

levando a

$$\tau_{ij} = \mu_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \text{ onde } i, j = 1, 2, 3 \quad (25)$$

Na notação de sufixo assumida para a Eq. (25), se convenciona que i ou $j = 1$ corresponde à direção x , i ou $j = 2$ à direção y e i ou $j = 3$ à direção z . Da lei de Newton de viscosidade, também se depreende que a tensão turbulenta aumenta na mesma proporção em que a taxa turbulenta de deformação aumenta, levando a uma formulação proposta pelo matemático francês Bousinesq em 1877, que relaciona as tensões de Reynolds com as taxas médias de deformação. Com base na mesma notação empregada na Eq. (25), a formulação é dada por

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (26)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta dinâmica (assumida como constante) e k é a energia cinética turbulenta. De caráter adimensional, a viscosidade turbulenta é definida em função da transferência de quantidade de movimento oriunda de colisões de turbilhões turbulentos. O segundo termo no lado direito da equação também inclui δ_{ij} , o delta Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ se $i = j$, e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$). Dessa equação, é possível deduzir que o transporte de momento turbulento também se assume como proporcional ao gradiente médio de velocidade, com o que, por analogia, o transporte turbulento de um escalar é igualmente proporcional ao gradiente do valor médio da quantidade transportada. Tomando Γ_t como a difusidade turbulenta, isso é expresso na forma

$$-\rho \overline{u'_i \phi'} = \Gamma_t \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (27)$$

Um dos modelos de turbulência mais comuns disponível na literatura é o modelo $k-\varepsilon$. Trata-se de um modelo em que são usadas duas equações de transporte, através das quais são descritas duas quantidades de turbulência: a primeira variável de transporte corresponde à energia cinética turbulenta, k , e a segunda variável, ε , determina a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Com este modelo, é possível simular os efeitos do transporte das propriedades turbulentas por convecção e difusão e a própria produção e destruição da turbulência. Apesar da existência de adaptações nas equações para modelar casos específicos de escoamento, um modelo padrão para elas foi idealizado por [Launder e Spalding \(1974\)](#), da forma como se segue:

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (28)$$

$$\frac{\partial (\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (29)$$

Em ambas as equações, $S_{ij} \cdot S_{ij}$ representa o produto escalar dos componentes locais da taxa média de deformação, da forma como deduzido por Versteeg e Malalasekera (2007). Para as constantes numéricas que aparecem nas equações, seus valores são tidos como $\sigma_k = 1,00$, $\sigma_\varepsilon = 1,30$, $C_{1\varepsilon} = 1,44$ e $C_{2\varepsilon} = 1,92$, conforme recomendações de Launder et al. (1972 apud LAUNDER; SPALDING, 1974) após extensiva análise empírica de escoamentos turbulentos livres. Considerando que os efeitos da turbulência podem ser descritos por uma escala de velocidade, ϑ , e por uma escala de comprimento de turbulência, ℓ , eles são relacionados à energia cinética e à taxa de dissipaçāo da forma

$$\vartheta = \sqrt{k} \quad \ell = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}. \quad (30)$$

Como a viscosidade turbulenta pode ser expressa em função do produto da escala de velocidade turbulenta pela escala de comprimento da turbulência, recorrendo-se às definições dadas na Eq. (30), chega-se à

$$\mu_t = C\rho\vartheta\ell = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (31)$$

onde C_μ é outra constante numérica definida como 0,09, ao se considerar, novamente, recomendações de Launder et al. (1972 apud LAUNDER; SPALDING, 1974). Para escoamentos próximos a paredes sólidas, o modelo se vale do comportamento universal esperado nestas regiões, quando associado a altos números de Reynolds. Nestas regiões, uma relação logarítmica é adotada para relacionar a tensão de cisalhamento da parede u_τ com a velocidade média V , obtendo-se, assim, a velocidade do fluido próxima à parede, u^+ , conforme expresso na Eq. (32). Nesta equação, κ é a constante de Von Karman, E é um parâmetro de rugosidade da parede e y^+ é a distância adimensional do local de escoamento em relação à parede. Em baixos números de Reynolds, a relação logarítmica não é válida, exigindo modificações no modelo padrão de equações e a aplicação de funções específicas de tratamento de parede.

$$u^+ = \frac{V}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad (32)$$

O modelo $k - \varepsilon$ é amplamente aplicado na indústria, pelo que está validado para um grande número de situações. Apesar disto, o modelo não apresenta resultados satisfatórios em alguns casos de escoamento, como fluxos não confinados, escoamentos com condições de contorno curvas e escoamentos completamente desenvolvidos em dutos não circulares (BAKER, 2011).

Um segundo modelo de turbulência de duas equações bastante conhecido é o modelo $k - \omega$. Neste modelo, ao invés de se usar a taxa de dissipaçāo de energia cinética turbulenta para determinar a escala de comprimento (vide Eq. 30), se considera a frequência da turbulência $\omega = \varepsilon/k$ como segunda variável de transporte. Com base

nisto, a escala de comprimento é dada por $\ell = \sqrt{k}/\omega$ e a viscosidade turbulenta, por consequência, é obtida na forma

$$\mu_t = \rho k/\omega. \quad (33)$$

No modelo $k - \omega$, as tensões de Reynolds também são obtidas conforme descrito pela Eq. (25) e as equações de transporte para k e ω são dadas, por sua vez, segundo Versteeg e Malalasekera (2007), como

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + \left(2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta^* \rho k \omega, \quad (34)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + \gamma_1 \left(2\rho S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \omega \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta_1 \rho \omega^2. \quad (35)$$

Os dois últimos termos de cada equação correspondem às taxas de produção e de dissipação, respectivamente, das variáveis de transporte. Assim como ocorre no modelo $k - \varepsilon$, algumas constantes de ajuste são consideradas ($\sigma_k = 2,0$, $\sigma_\omega = 2,0$, $\lambda_1 = 0,553$, $\beta_1 = 0,075$ e $\beta^* = 0,09$). Funções específicas de tratamento de parede não são requeridas em casos de escoamentos com baixos números de Reynolds e o modelo é, segundo Baker (2011), bem mais acurado que o modelo $k - \varepsilon$ ao prever a turbulência em camadas finas próximas à parede e em escoamentos confinados. No entanto, o modelo se mostra bastante sensível no tratamento de escoamentos com fronteiras livres, podendo conduzir a resultados insatisfatórios.

Um modelo que reunisse as melhores características dos modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ foi proposto por Menter (1993). O modelo, conhecido como SST $k - \omega$ (do inglês *Shear Stress Transport*, Transporte de Tensão de Cisalhamento), combina a formulação robusta e precisa do modelo $k - \omega$ em regiões próximas às paredes com a independência do modelo $k - \varepsilon$ nas regiões completamente turbulentas que estão distantes de paredes e com fluxos livres de escoamento. Neste modelo híbrido, basicamente ocorre uma transformação do modelo padrão $k - \varepsilon$ em um modelo $k - \omega$ nas regiões próximas às paredes.

O cálculo das tensões de Reynolds e a equação para k permanecem idênticos ao modelo $k - \omega$, mas a equação de ω é modificada a partir da reformulação da equação de ε com a substituição da taxa de dissipação (ε) da energia cinética por $k\omega$, resultando em

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega u_i)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + \gamma_2 \left(2\rho S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \omega \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \\ &\quad \beta_2 \rho \omega^2 + 2 \frac{\rho}{\sigma_{w,2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad (36)$$

O último termo do lado direito da equação acima é conhecido como termo de difusão cruzada, permitindo ao modelo aumentar a produção de ω e, por consequência, aumentar a dissipação de energia cinética em escoamentos livres, o que leva a uma redução da

sensibilidade do modelo $k - \omega$ naquelas regiões de escoamento. Uma série de melhorias foram adicionadas ao modelo por [Menter et al. \(2003\)](#), com destaque para a revisão das constantes usadas nas equações ($\sigma_k = 1,0$, $\sigma_{\omega,1} = 2,0$, $\sigma_{\omega,2} = 1,17$, $\gamma_2 = 0,44$, $\beta_2 = 0,083$ e $\beta^* = 0,09$) e a inclusão de funções de mistura e de limitadores.

As funções de mistura são usadas para propiciar uma transição suave entre o modelo padrão $k - \varepsilon$ e o modelo $k - \varepsilon$ modificado que é aplicado nas regiões próximas às paredes, resultando em soluções numericamente mais estáveis. Elas são introduzidas na equação para modificar o termo de difusão cruzada, por intermédio de uma operação de multiplicação por $(1 - F_1)$, onde F_1 é a função de mistura. Elas também são empregadas na definição de constantes obtidas a partir da combinação dos valores de constantes do modelo original $k - \omega$ e do modelo $k - \varepsilon$ modificado que estão correlacionadas. A função de mistura para a definição de constantes é dada tipicamente em função do raio de turbulência, da distância em relação à parede e do número turbulento de Reynolds. Sua forma algébrica, por sua vez, é escolhida de tal modo que a função assume o valor 0 (zero) nas paredes, se aproxima de 1 (um) nos campos de escoamento distantes das paredes e produz uma transição suave ao longo do caminho entre a parede e a extremidade da camada limite ([VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)).

Entre os limitadores, um deles é aplicado para a viscosidade turbulenta, de modo a permitir um melhor desempenho do modelo em escoamentos com gradientes adversos de pressão, sendo definido por

$$\mu_t = \frac{a_1 \rho k}{\max(a_1 \omega, SF_2)}, \quad (37)$$

onde $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$, a_1 é uma constante e F_2 é uma segunda função de mistura. Para prevenir o acúmulo de turbulência em regiões estacionárias, um outro limitador é introduzido para o termo de produção de energia cinética da equação de k , da forma

$$P_k = \min \left(10\beta^* \rho k \omega, 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right). \quad (38)$$

4.5 Condições de Contorno

As equações apresentadas na seção anterior são aplicáveis em qualquer problema de escoamento de fluidos. No entanto, ainda que as equações de governança sejam idênticas, os campos de escoamento são diferentes em cada caso de estudo, devendo-se isso à especificação das condições de contorno e de algumas *condições iniciais*. Entende-se por condições de contorno a caracterização das regiões do domínio computacional limítrofes ao ambiente externo do domínio. Algumas recomendações encorajadas por [Tu et al. \(2013\)](#) incluem o deslocamento, se necessário, das fronteiras do domínio para locais em que as condições de contorno são identificadas mais facilmente, o não

negligenciamento de obstáculos externos de entrada ou de saída que possam afetar a distribuição do fluxo de forma significativa, e as análises de sensibilidade sobre a alteração sistemática das condições de contorno dentro de certos limites para detectar variações relevantes nos resultados computacionais.

No âmbito da abordagem CFD, são normalmente adotados dois tipos de condições de contorno: *Dirichlet* e *Neumann*. Condições de contorno de Dirichlet são caracterizadas pela especificação de valores (quantidades físicas) das propriedades dos fenômenos que ocorrem sobre o contorno do domínio. Em uma condição de contorno de Neumann, por sua vez, são definidos os valores das derivadas de tais propriedades. No presente trabalho, são consideradas condições de contorno para as regiões de entrada e de saída de escoamento, além de condições de contorno simétricas e de parede.

Em particular, a caracterização das condições de contorno de entrada envolve a definição de diversas propriedades. Em relação ao regime de escoamento, assume-se que a velocidade é subsônica (velocidades de escoamento abaixo da velocidade do som) e que a direção do fluxo é normal ao plano de entrada do fluxo. Como a intensidade da turbulência é desconhecida naquela região do domínio, é adotada uma recomendação apontada por [ANSYS Inc. \(2011\)](#), com a definição de 5 % de intensidade e uma taxa de viscosidade equivalente a 10. Dois dos principais parâmetros de projeto do HTR-10 também são considerados aqui: a temperatura média do refrigerante na entrada do núcleo ($250\text{ }^{\circ}\text{C}$) e a taxa de escoamento de massa do gás hélio estando o reator em plena potência ($4,32\text{ Kg/s}$).

Para a taxa de escoamento de massa do gás hélio, fazemos algumas considerações complementares. Cálculos termohidráulicos disponíveis em [IAEA \(2013\)](#) sugerem que uma parte do refrigerante é escoada para outras regiões distintas da zona do leito de bolas. São elas: o tubo de descarga de combustível, os canais das barras de controle e os espaços existentes entre os blocos de grafite dos refletores, com taxas de escoamento em patamares correspondentes, respectivamente, a 1%, 2% e 10% da taxa de escoamento de $4,32\text{ Kg/s}$. Assim, a taxa de escoamento que flui através do leito de bolas para efetivamente refrigerar os elementos combustíveis carregados no núcleo é reduzida a 87%, com o que se tem

$$m_{núcleo} = 3,77\text{ Kg/s}. \quad (39)$$

Como a geometria do leito de bolas simulada neste trabalho é restrita a uma coluna da seção central do núcleo do HTR-10, calcula-se uma taxa de escoamento proporcional à taxa de escoamento expressa na equação acima. Para isto, usa-se a relação entre a área total de entrada do núcleo e a área de entrada da coluna. A área de entrada do núcleo corresponde a uma base circular com $0,9\text{ m}$ de raio; para a coluna da seção central do núcleo, é considerada a área da face de entrada da coluna FCC/BCC, determinada em função do comprimento da aresta da célula unitária, sendo este obtido,

por sua vez, pela Eq. (4). Combinado com a Eq. (39), as taxas de escoamento de entrada de refrigerante são obtidas pela equação (40)

$$m_{\text{entrada}} = \frac{a^2}{\pi \cdot (0,9)^2} \times m_{\text{nucleo}}. \quad (40)$$

Com base nesta última equação, as taxas de escoamento nas colunas FCC e BCC são 1,214E-2 kg/s e 7,647E-3 kg/s, respectivamente.

Para as condições de contorno na saída, é bastante apropriado que elas sejam selecionadas com base no princípio de que o fluxo que se encontra acima da região de saída do escoamento exerce pouca influência sobre as especificações daquelas condições de contorno. Para que isto seja possível, é recomendável que a área de saída do domínio computacional seja posta em algum local distante de regiões com alto grau de mudanças na geometria ou de recirculação de fluido, com o que será permitido ao fluxo alcançar uma condição de pleno desenvolvimento sem que haja mudanças na direção do fluxo. Conforme já citado anteriormente, para que este propósito seja alcançado, uma extensão da coluna da seção central do núcleo do reator HTR-10 é acrescentada após a última célula unitária de elementos combustíveis na presente simulação. Detalhes sobre a extensão da coluna FCC são mostrados na Figura 28.

Além disso, conforme lembrado por [Tu et al. \(2013\)](#), como as regiões de entrada do domínio computacional representam uma fonte potencial de massa para a escoamento do fluxo, é importante estabelecer regiões de saída que caracterizem a dissipação de massa daquele escoamento de forma satisfatória, em clara referência ao princípio de conservação de massa.

Segundo [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#), nas regiões de saída em que o fluxo alcança pleno desenvolvimento, os gradientes de todas as variáveis de transporte (com exceção da pressão) são nulos na direção do escoamento, levando ao uso de condições de contorno de Neumann. Em relação à pressão, neste trabalho, optou-se por um perfil de pressão que varia de acordo com a influência do fluxo que se encontra acima da região de saída do escoamento; além disso, o perfil está associado a uma pressão média definida de forma estática. A pressão média \bar{P}_{media} (neste caso, definida em 0 Pa) é, segundo [ANSYS Inc. \(2011\)](#), relacionada com a integração da superfície S de saída do domínio, na forma

$$\bar{P}_{\text{media}} = \frac{1}{A} \int_S P_{pi} dA. \quad (41)$$

Na equação acima, P_{pi} é a pressão imposta em cada ponto de integração e A é a área da superfície de saída sobre a qual se aplica aquela pressão. Para garantir a condição expressa na Eq. (41), a pressão em cada ponto de integração é dada por

$$P_{pi} = \bar{P}_{\text{media}} + (P_n - \bar{P}_n). \quad (42)$$

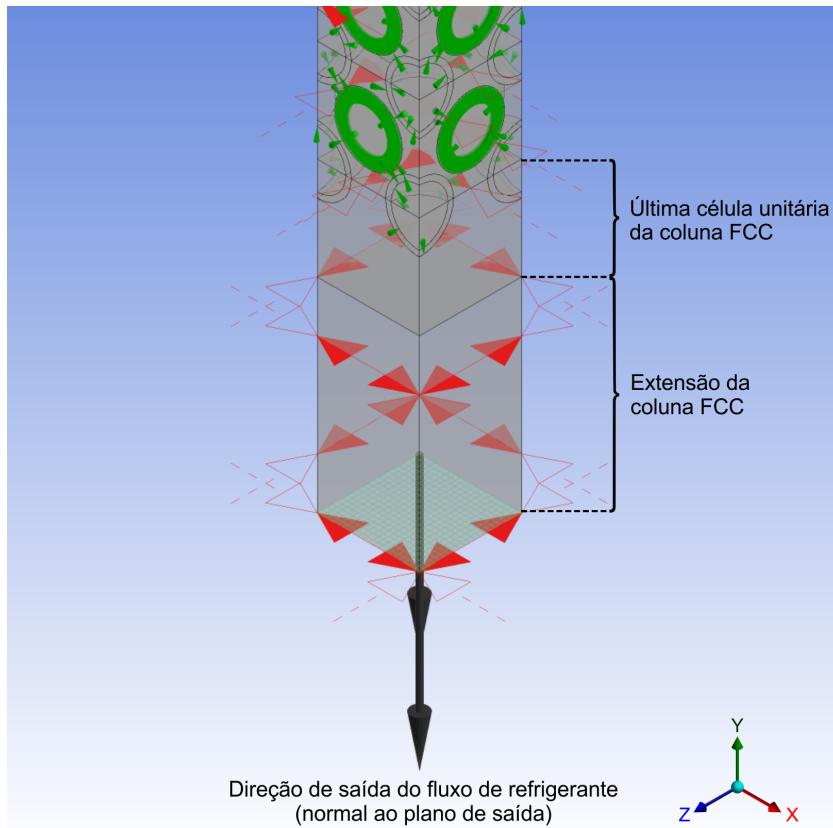


Figura 28 – Extensão da coluna FCC para garantir a condição de fluxo desenvolvido na especificação das condições de contorno de saída.

Como se vê na equação acima, a pressão em cada ponto de integração é definida pela pressão média acrescida da diferença entre o valor de pressão nodal local e a pressão média da fronteira de saída. Dessa forma, ainda que o perfil de pressão de saída seja variável, o valor médio de pressão se mantém inalterado, em valores definidos estaticamente, conforme foi dito anteriormente.

Um outro tipo de condição de contorno empregado nesta simulação apresenta características de simetria. Trata-se de um tipo de condição aplicado para situações em que a geometria do fluxo representa uma fração do domínio real do problema. De fato, as geometrias geradas neste trabalho correspondem a menos de 0,5% do volume real do núcleo do HTR-10 ($5\ m^3$), conforme se depreende dos dados apresentados na Tabela 3. Os planos simétricos são constituídos pelas faces laterais das células unitárias FCC e BCC, de modo que dois requisitos devem ser satisfeitos em cada plano: a velocidade normal é nula e os gradientes normais para todas as propriedades de transporte são nulos (TU et al., 2013).

Por fim, condições de contorno de paredes são consideradas nas regiões de contato entre o refrigerante e a superfície dos elementos combustíveis. Para estas paredes sólidas, de caráter estacionário, assume-se uma condição de não deslizamento,

o que implica em velocidades nulas de escoamento sobre as superfícies sólidas das esferas, conforme indicado por Tu et al. (2013) e Versteeg e Malalasekera (2007), de tal modo que

$$u = v = w = 0 \text{ na superfície.} \quad (43)$$

Além disso, as paredes são tratadas como lisas, sem a existência, portanto, de superfícies ásperas. Para efeito de ilustração, na Figura 29 são resumidas as condições de contorno consideradas para a coluna FCC do núcleo do HTR-10.

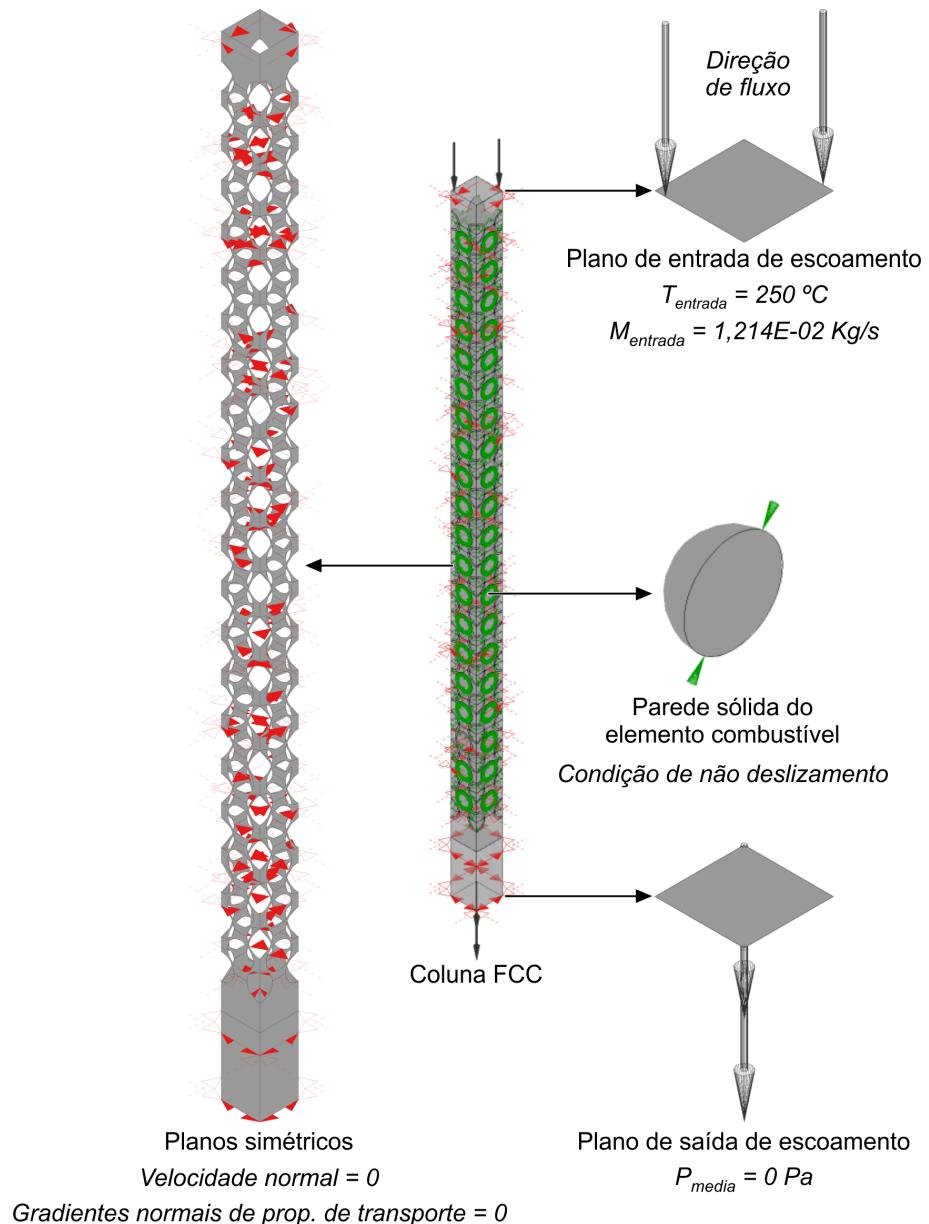


Figura 29 – Especificação das condições de contorno da simulação para a coluna FCC

4.6 Esquema Numérico

Soluções analíticas para as equações de governança apenas podem ser obtidas para geometrias e condições de escoamento extremamente simples, o que não é o caso, obviamente, do leito de bolas do núcleo do HTR-10. Para contornar esta situação, as equações diferenciais parciais de governança e as condições auxiliares (iniciais e de contorno) são convertidas em um sistema de equações algébricas discretas, em um processo conhecido como estágio de discretização, segundo [Tu et al. \(2013\)](#). Após isso, o sistema de equações discreto é solucionado para se obter uma solução aproximada para as equações de governança.

Assim como na maioria dos softwares comerciais de CFD, o Ansys CFX usa o método de volumes finitos para realizar a discretização do domínio computacional. Um dos principais atrativos deste método diz respeito, segundo [Tu et al. \(2013\)](#), à capacidade de aplicação não somente em malhas estruturadas, mas também em malhas não estruturadas, permitindo, dessa forma, a manipulação de formas geométricas arbitrárias. O Ansys CFX, em particular, usa uma implementação do método de volumes finitos baseada em elementos (do inglês EbFVM, *Element based Finite Volume Method*). A malha é usada para a geração dos volumes finitos, nos quais se assume que as propriedades de escoamento, tais como massa, momento e energia, se conservam. Embora a malha seja tridimensional, para exemplificação da metodologia, é considerado aqui um domínio de duas dimensões, da forma como mostrado na Figura 30. Um volume de controle é gerado ao redor de cada nó da malha, a partir das linhas que conectam os pontos médios das arestas aos centros dos elementos de malha circunvizinhos ([ANSYS INC., 2011](#)).

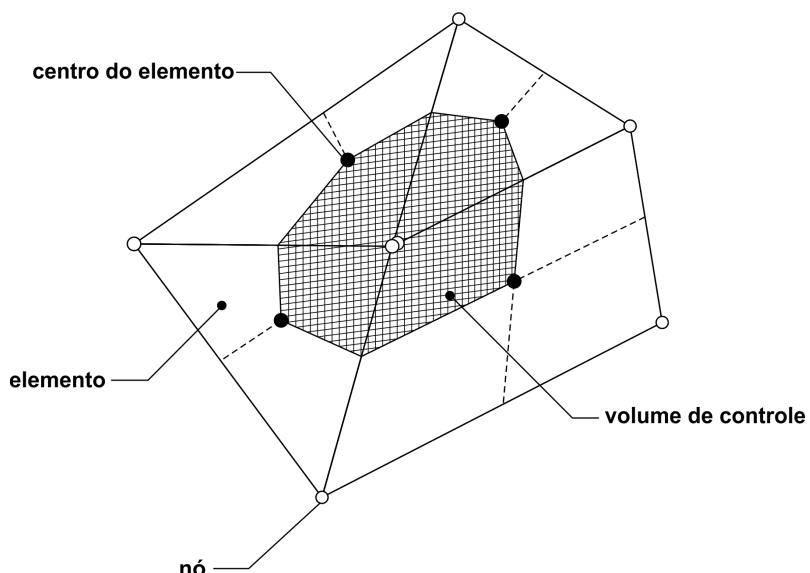


Figura 30 – Definição de volume de controle, quando da discretização das equações de governança. Adaptado de [ANSYS Inc. \(2011\)](#)

Para efeito de ilustração, se considerada a equação de continuidade, dada pela Eq. (14), mas em notação indicial, esta é integrada em cada volume de controle e, por fim, o teorema de divergência gaussiana é aplicado para converter as integrais de volume que envolvam operadores de divergência e de gradiente em integrais de superfície. Se não houver deformação dos volumes de controle ao longo do tempo, a equação integrada de continuidade toma a forma

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \, dV + \int_s \rho u_j \, dn_j = 0, \quad (44)$$

onde V e s são, respectivamente, o volume e as regiões de superfície de integração, e dn_j corresponde aos componentes cartesianos diferenciais do vetor normal externo à superfície.

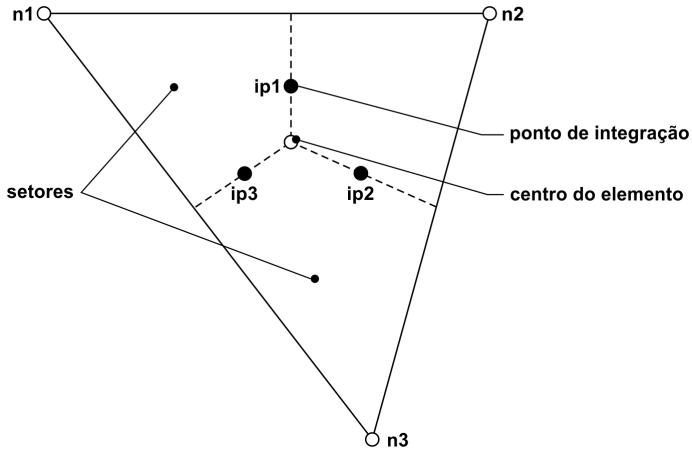


Figura 31 – Elemento de malha em duas dimensões. Adaptado de [ANSYS Inc. \(2011\)](#)

Em seguida, um tratamento numérico é aplicado para a discretização das integrais de volume e de superfície encontradas na Eq. (44). Se considerado, por exemplo, um elemento de malha simples, conforme ilustrado na Figura 31, a discretização é realizada em cada setor do elemento de malha e armazenada no volume de controle ao qual o setor pertence; para as integrais de superfície, são considerados os pontos de integração (ip_n) localizados no centro de cada segmento interno de superfície e, em seguida, a discretização resultante é distribuída para os volumes de controle adjacentes ([ANSYS INC., 2011](#)). Após isso, a Eq. (44) assume a forma

$$V \left(\frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} (\rho u_j \Delta n_j)_{ip} = 0, \quad (45)$$

onde V é o volume de controle, Δt é o passo de tempo, Δn_j é o vetor de superfície discreto externo, ip se refere a algum ponto de integração e ρ^0 é a densidade do fluido em um instante de tempo anterior. Para a soma, são considerados todos os pontos de

integração existentes no volume de controle. Esta abordagem é repetida para as demais equações de governança.

No Ansys CFX, os valores das propriedades de transporte ϕ em cada ponto de integração, quando requeridos em algumas das equações algébricas formuladas após a discretização, são aproximados em relação aos valores nodais de ϕ , na forma

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \nabla\phi \cdot \Delta \vec{r}, \quad (46)$$

onde ϕ_{up} é o valor da propriedade de transporte no nó à frente, e \vec{r} é o vetor que parte do nó à frente em direção ao ponto de integração ip . Vários esquemas de advecção são disponibilizados pelo Ansys CFX para o cálculo de β e $\nabla\phi$, optando-se neste trabalho pelo esquema *High Resolution*. Neste esquema, é usada uma fórmula especial não-linear para β em cada nó, com base em princípios estabelecidos por Barth e Jesperson (1989 apud ANSYS INC., 2011), de tal modo que o valor de β seja tão próximo de 1 (um) quanto possível (sem a introdução de novos extremos). A partir disso, o fluxo advectivo é avaliado com o uso dos valores de β e $\nabla\phi$ do nó superior.

Para a resolução do sistema discreto de equações algébricas obtido, é usada uma técnica de fatoração LU incompleta (ANSYS INC., 2011). Trata-se um método iterativo em que a solução das equações é alcançada ao longo de várias iterações. Considerando que o sistema linear de equações possa ser escrito na forma matricial, da forma

$$A\phi = B, \quad (47)$$

onde A é matriz de coeficientes das equações algébricas, ϕ é o vetor solução das incógnitas nodais e B é o vetor independente, a fatoração LU é aplicada, segundo Tu et al. (2013), sobre a matriz A , com o que se obtém uma matriz aproximada que será usada para a execução das iterações. Em um método iterativo, a solução $\phi^{(k)}$ obtida na iteração anterior k é usada para encontrar a solução da iteração seguinte, $\phi^{(k+1)}$ através de uma correção ϕ' , com o que se tem

$$\phi^{(k+1)} = \phi^{(k)} + \phi', \quad (48)$$

Para a primeira iteração, uma aproximação inicial para o vetor solução, $\phi^{(0)}$, é adotada. O resíduo da k -ésima iteração é obtido por

$$r^{(k)} = B - A\phi^{(k)} \quad (49)$$

Os resíduos representam uma medida de desbalanceamento local de cada equação conservativa. Eles são monitorados de forma contínua pelo solver do Ansys CFX para que o processo iterativo de cálculo da solução seja interrompido quando são obtidos

valores inferiores a um nível de tolerância estabelecido previamente. Soluções consistentes e estáveis são obtidas quando $r^{(k)} \rightarrow 0$, à medida que a quantidade de iterações k aumenta, com o que é caracterizada a *convergência* da solução.

Como $r^{(k)}$ é um vetor solução (e não um simples escalar), o julgamento da convergência em relação ao nível de tolerância é realizado com o emprego de uma norma vetorial sobre os resíduos das equações. Os resíduos são, antes disso, normalizados, para que o julgamento da convergência seja feito de forma mais consistente. Em relação à norma vetorial, o Ansys CFX oferece duas alternativas: a norma máxima e a norma RMS (do inglês *Root Mean Square*, Raiz do Valor Quadrático Médio), optando-se por esta última por oferecer uma medida global dos resíduos. Para o nível de tolerância, adotou-se 1e-4, valor considerado suficiente para muitas aplicações de engenharia. Cabe ainda observar que os resíduos das equações de transporte turbulento (k , ε , componentes de tensões de Reynolds, entre outros) não são considerados para determinar quando o nível de convergência desejado é alcançado (ANSYS INC., 2011).

Por fim, salientamos que o Ansys CFX utiliza uma técnica conhecida como *multigrid* para acelerar a convergência da solução. A técnica se fundamenta no princípio, já consolidado na literatura (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007), de que a propagação de erros ao longo da execução de um método iterativo guarda relação direta com o tamanho da malha. Erros de solução que apresentam alto grau de oscilação, com magnitude correspondente ao espaçamento da malha, são reduzidos rapidamente; por outro lado, erros com baixo grau de oscilação em relação à malha tendem a decair muito lentamente, dificultando, dessa forma, a convergência da solução.

Para contornar os problemas acarretados pela eventual ocorrência de erros de solução com baixo grau de oscilação, a técnica de multigrid usa uma série de malhas grossas (em relação à malha original), de modo que tais erros serão tratados como erros com alto grau de oscilação naquelas configurações de malha e, por consequência, serão reduzidos rapidamente. O procedimento *multigrid* genérico é ilustrado na Figura 32.

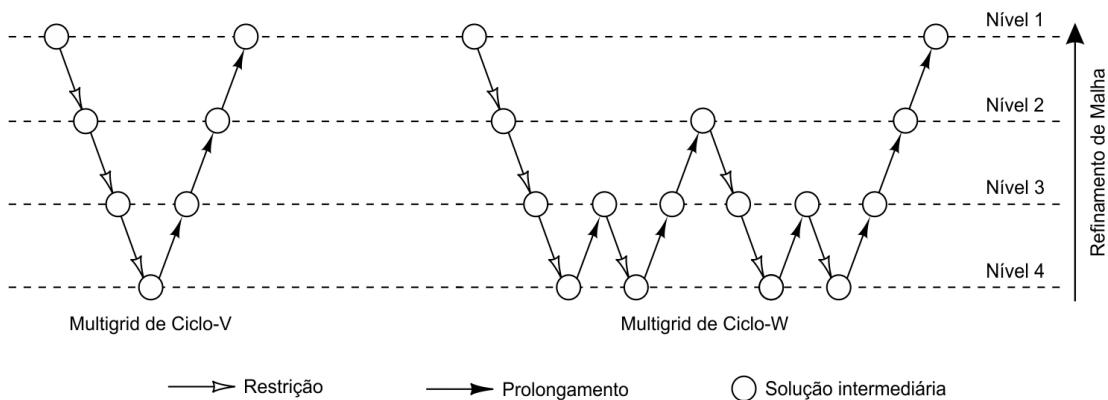


Figura 32 – Estratégias de ciclos de *multigrid* utilizado para aceleração da convergência no Ansys CFX. Adaptado de Versteeg e Malalasekera (2007)

Inicialmente, a partir da escolha de um método iterativo, são realizadas iterações no nível de malha original (mais fina), de espaçamento h , para gerar uma solução intermediária. A sequência de iterações executadas em cada nível é chamada de *relaxamento*. O número de iterações é escolhido de tal maneira que seja suficiente para reduzir, de forma efetiva, componentes de erro com alto grau de oscilação, sem atentar à eliminação daqueles componentes de erros com baixo grau de oscilação. Após isso, a solução encontrada e os erros residuais são transferidos para um nível de malha grossa, com espaçamento $c_2 h$, onde $c_2 > 1$, e após a realização do relaxamento naquele nível, os dados são transferidos para o próximo nível de malha grossa (de espaçamento $c_3 h$, onde $c_3 > c_2$), e assim por diante, até que seja alcançado o nível de malha mais grossa (esta etapa é chamada de *restrição*). Em seguida, a solução encontrada é transferida de volta ao nível de malha mais fina, não sem antes serem realizadas operações de *prolongamento* nos níveis de malha intermediários. Como os erros residuais das soluções intermediárias obtidas com as malhas mais grossas apresentam dados em quantidades inferiores àquelas que são exigidas em malhas mais finas (ou menos grossas), em cada etapa de prolongamento é usado um operador de interpolação apropriado para a geração de valores adicionais de erros residuais em locais intermediários das malhas mais finais. O procedimento é encerrado com a execução de iterações finais com a malha original, para a eliminação de eventuais erros que foram introduzidos durante as etapas de restrição e de prolongamento.

Existem diversas estratégias para a aplicação da técnica de *multigrid*, com elas se diferenciando entre si, basicamente, em função da forma como os ciclos de restrição e de prolongamento são alternados. Duas delas são apresentadas na Figura 32: o ciclo-V e o ciclo-W. Para diminuir o esforço computacional demandado pelo solver do Ansys CFX, ao invés da reconstrução da geometria para a obtenção das malhas grossas, os coeficientes dos sistemas discretos de equações destes níveis de malha são aproximados na forma de combinações lineares dos coeficientes das equações geradas para a malha fina original, em uma modalidade conhecida como *multigrid algébrico* ([VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)). Mais especificamente, é usada uma implementação particular desta modalidade de multigrid, proposta por [Hutchinson e Raithby \(1986 apud VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007\)](#), e conhecida como multigrid de correção aditiva (do inglês *Additive Correction Multigrid*, ACM).

Neste capítulo foram detalhadas as etapas da metologia utilizada na simulação CFD da coluna central do núcleo do reator HTR-10 com a abordagem realística. Estas etapas incluem a construção do modelo geométrico utilizando os arranjos regulares FCC e BCC, a geração da malha, a especificação dos fenômenos físicos e dos parâmetros dos materiais, as condições de contorno, as equações de governança, os modelos de turbulência usados e o processo iterativo da solução. No próximo capítulo, são apresentados e discutidos os resultados numéricos da simulação.

5 Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações CFD realizadas neste trabalho. Na seção 5.1 são mostrados resultados pré-liminares associados a uma geometria simplificada, onde se considerou uma coluna parcial com metade da altura do núcleo do reator HTR-10; tais simulações visavam avaliar e aprimorar as condições e parâmetros de simulação com um custo computacional menor. Em seguida, são oferecidos os resultados para as colunas completas considerando arranjos do tipo FCC (seção 5.2) e BCC (seção 5.3). Finalmente, os resultados para os dois tipos de arranjo são comparados entre si, e com os valores de referência apontados em [IAEA \(2013\)](#).

Para a realização dos cálculos que levaram aos resultados das simulações, empregou-se um cluster localizado nas dependências do Núcleo de Biologia Computacional e Gestão de Informações Biotecnológicas (NBCGIB), na Universidade Estadual de Santa Cruz (UESC). O cluster, chamado de CACAU (Centro de Armazenamento de dados e Computação Avançada da UESC), dispõe de 23 nós de processamento. Os 3 (três) nós alocados para a realização dos cálculos deste trabalho estão equipados cada um com 2 processadores Intel Xeon E5-2440 de 2,40 GHz (6 núcleos de processamento por CPU), 48 GB de RAM e 2 GPUs NVIDIA Tesla K20. Cada GPU é equipada com 5 GB de RAM e 2.496 núcleos de processamento, levando a uma performance estimada de 7,31 TFlops para os três nós de processamento em conjunto. Conforme mencionado no capítulo anterior, o solver incorporado ao Ansys CFX dispõe de recursos que permitem o uso de clusters e de outros sistemas de processamento paralelo.

5.1 Resultados Preliminares

A investigação das condições termohidráulicas de uma coluna axial completa do núcleo do reator HTR-10 foi precedida da realização de simulações de uma coluna parcial do núcleo com altura equivalente à aproximadamente metade da altura da coluna completa. Os esforços empreendidos neste primeiro estágio do trabalho objetivaram consolidar uma metodologia que assegurasse, entre outros fatores, a independência dos resultados em relação à malha para aplicação posterior com a geometria completa. Para alcançar a independência de malha, são realizadas simulações com diferentes tamanhos de malha e, após isso, os resultados computados são comparados; se não houverem diferenças significativas entre eles, conclui-se que os erros esperados durante o processo de discretização das equações de governança se encontram em níveis aceitáveis.

Para a realização da simulação com a coluna parcial, empregou-se um arranjo FCC para a distribuição dos elementos combustíveis ao longo da coluna. São usadas 12

células unitárias FCC, levando à constituição de uma coluna com 21 camadas de esferas e com altura de 108,6 cm (aqui cabe lembrar que a altura média do núcleo do HTR-10 é de 197 cm). Uma célula adicional com altura de 18,1 cm (equivalente à altura de duas células FCC) foi acrescentada ao final da última célula unitária FCC para assegurar que as condições de desenvolvimento do escoamento fossem plenamente alcançadas. Dados sobre a quantidade de elementos combustíveis aparecem na Tabela 6, e uma ilustração da coluna é apresentada na Figura 33.

Tabela 6 – Especificações da geometria da coluna parcial FCC

Tipo de elemento (proporção ao volume da esfera)	Número de elementos	Esferas correspondentes
1/8	88	11
Metade	40	20
Completo	11	11
Total	95	42

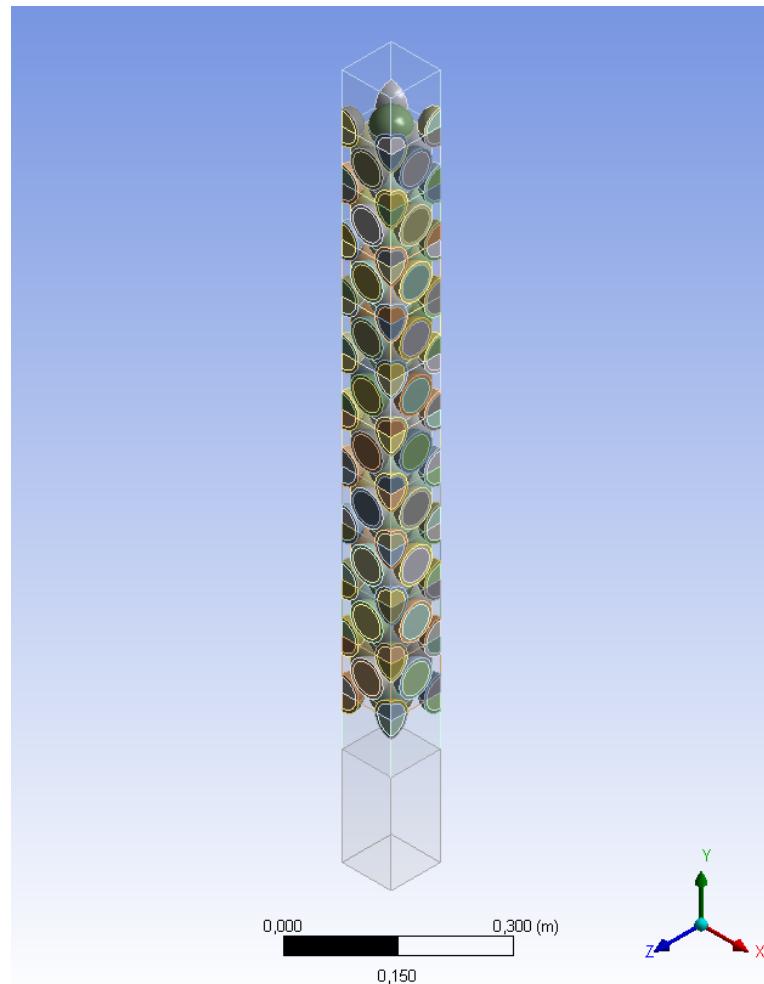


Figura 33 – Geometria da coluna parcial com arranjo FCC do núcleo do reator HTR-10

Em relação à metodologia descrita no capítulo anterior, quando da construção da malha, da definição das condições de contorno e do tratamento numérico, as modificações se limitaram à distribuição de potências e ao modelo de turbulência usado. Como a geometria da coluna inicial corresponde aproximadamente à metade da geometria completa, apenas os primeiros 5 (cinco) valores nominais de potência expostos na Tabela 5 foram considerados, de modo a serem aplicados, respectivamente, em 5 agrupamentos de camadas de elementos combustíveis. Sobre o modelo de turbulência, adotou-se o modelo $k - \varepsilon$.

Assim como vários outros softwares comerciais de CFD, o Ansys CFX dispõe de ferramentas com as quais é possível visualizar graficamente os resultados obtidos ao final de uma simulação computacional. Entre os recursos disponibilizados por estas ferramentas, consta a seleção de regiões do domínio computacional para o cálculo das diversas propriedades de escoamento (velocidade, temperatura, pressão, entre outros). Todos os resultados apresentados nesta e nas próximas seções foram obtidos com tais ferramentas. Para validação dos resultados, são considerados, para efeito de comparação, dados experimentais e de simulação apresentados no *benchmark* da IAEA (2013) sobre reatores de alta temperatura refrigerados a gás, mais especificamente aqueles relacionados à distribuição de temperaturas do reator HTR-10 sob condições de operação do reator em plena potência.

Os resultados obtidos com a geometria parcial são mostrados nas Figuras 34, 35 e 36. Na Figura 34, é ilustrado um gráfico com a distribuição axial da temperatura ao longo do plano central da coluna do núcleo. Os resultados apontam para o esperado aumento gradativo da temperatura ao descermos pela coluna, com o combustível alcançando temperaturas máximas de 805 °C, em posição axial que corresponde, aproximadamente, aos centros dos elementos combustíveis da última camada (99,55 cm). De acordo com os resultados disponíveis no benchmark da IAEA (2013), a temperatura estimada no eixo central do leito de bolas e naquela posição varia entre 599 °C e 803 °C, a depender de cada simulação. Em virtude da insuficiência dos dados tabulados disponibilizados pelo benchmark, empregou-se a ferramenta WebPlotDigitizer (ROHATGI, 2015) para, a partir de gráficos comparativos, extrair os valores de referência citados nesta e nas seções seguintes.

O fluxo de gás hélio alcança, por sua vez, temperaturas que oscilam entre 533 °C e 555 °C na região de saída do escoamento (logo após a última célula unitária FCC), resultando em uma temperatura média de 544 °C, conforme mostrado na Figura 35. No centro do plano transversal apresentado na figura, a temperatura é de exatos 534,65 °C. Em um dos trabalhos fornecidos para o *benchmark*, de autoria de pesquisadores da Universidade Hacettepe (Turquia), a temperatura estimada no mesmo local se mostrou quase 105 °C acima. No referido trabalho, foi usado um software comercial de CFD para

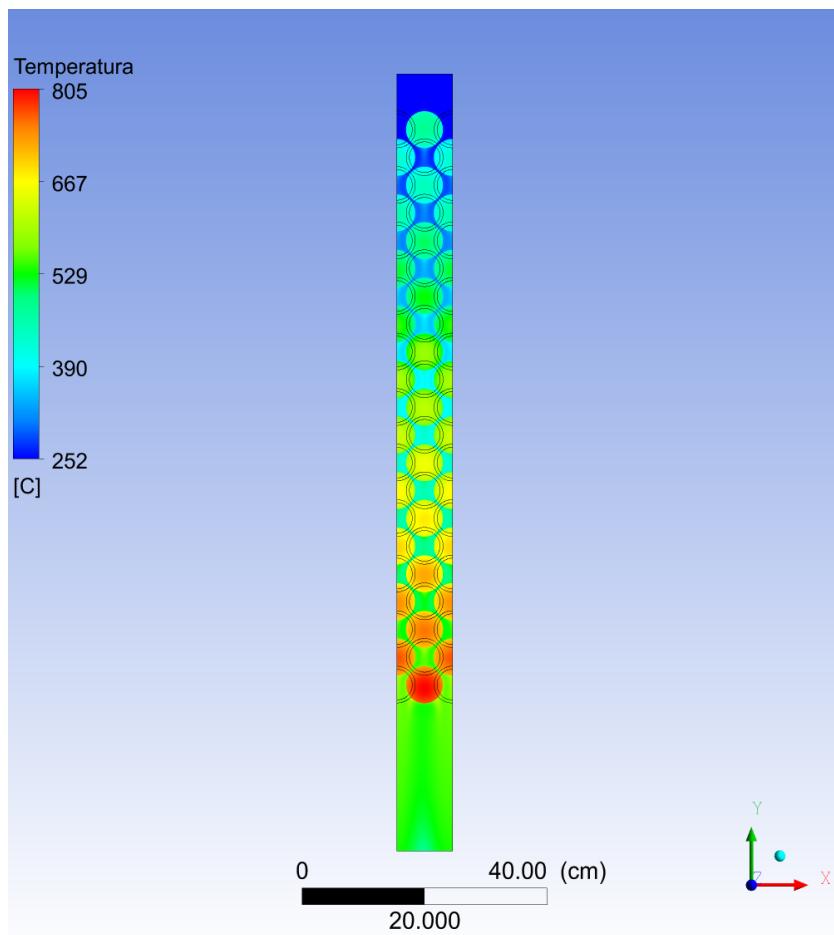


Figura 34 – Distribuição axial de temperaturas na seção central da coluna parcial FCC

o cálculo das distribuições de temperatura e de escoamento, o Fluent ([FLUENT INC., 2003](#)).

Por fim, na Figura 36, é apresentada a distribuição de temperaturas na superfície do último elemento combustível do domínio computacional. Como são observadas temperaturas menores na região frontal da esfera (de encontro ao fluxo de escoamento axial), deduz-se que uma maior taxa de transferência de calor ocorre neste local. Na região traseira da esfera, já se percebe um comportamento oposto: maiores temperaturas na superfície da esfera e, por consequência, menor transferência de calor. As diferenças de temperatura entre as regiões frontal e traseira da esfera chegam a 42 °C.

Devido ao uso de uma coluna de menor altura, usou-se apenas um nó de processamento para a realização dos cálculos. Após a construção da malha, foram totalizados 9.035.759 nós e 31.829.783 elementos. A simulação foi antecedida de outra simulações com diferentes tamanhos de elemento de malha, sem que houvesse desvios significativos em relação às temperaturas máximas obtidas (em patamares inferiores a 1 %), o que sugere uma independência destes resultados em relação à malha. Os resultados obtidos com o modelo geométrico da coluna parcial possibilitaram refinar

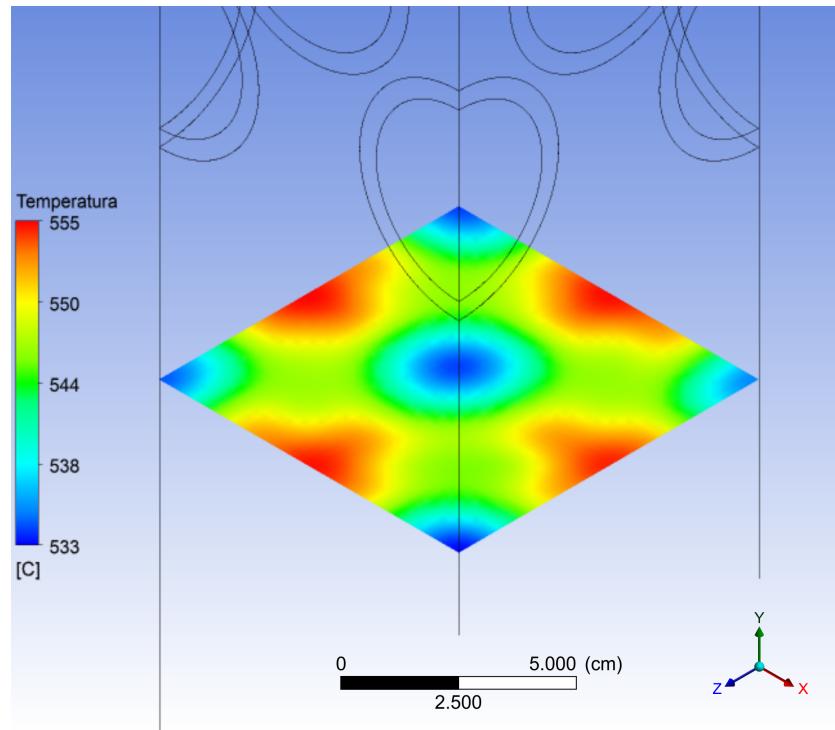


Figura 35 – Distribuição de temperaturas do gás hélio na saída da coluna parcial FCC

e validar a metodologia CFD utilizada, estabelecendo as bases para a simulação da coluna completa.

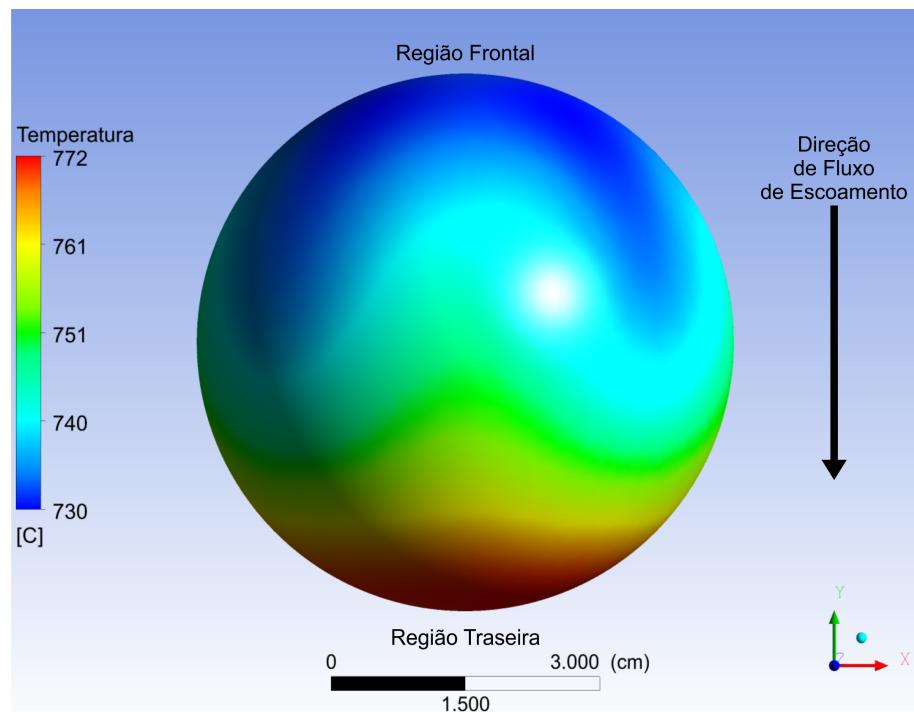


Figura 36 – Distribuição de temperaturas na superfície do último elemento combustível da coluna parcial FCC

5.2 Resultados com o Arranjo FCC

Conforme descrito na seção 5.1, foi construído um modelo geométrico para a coluna completa da seção central do núcleo com o uso do arranjo FCC. Após a construção da malha e a especificação dos fenômenos, parâmetros materiais e condições de contorno, foram feitas simulações com os modelos de turbulência $k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST. Os resultados são mostrados nas Figuras 37 - 42.

Na Figura 37, é mostrada a distribuição das temperaturas ao longo do plano axial central da coluna FCC completa, utilizando os modelos de turbulência $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita). De forma análoga ao observado na coluna parcial, os resultados novamente apontam para o aumento gradativo da temperatura ao longo da direção axial, mas com picos de temperatura significativamente maiores. Os picos são registrados em locais próximos ao centro do elemento combustível da 37^a camada (profundidade de 171,95 cm); a partir desse ponto se observa uma redução da temperatura em direção à região de saída do escoamento. Os resultados sugerem que a queda de temperatura no final da coluna está associada com os menores valores nominais de potência que são gerados na seção inferior do leito de bolas do reator, conforme mostrado na Tabela 4. No entanto, as temperaturas máximas são maiores com a simulação realizada com modelo $k-\epsilon$ (957 °C), quando comparadas com a simulação realizada com o modelo $k-\omega$ SST (910 °C).

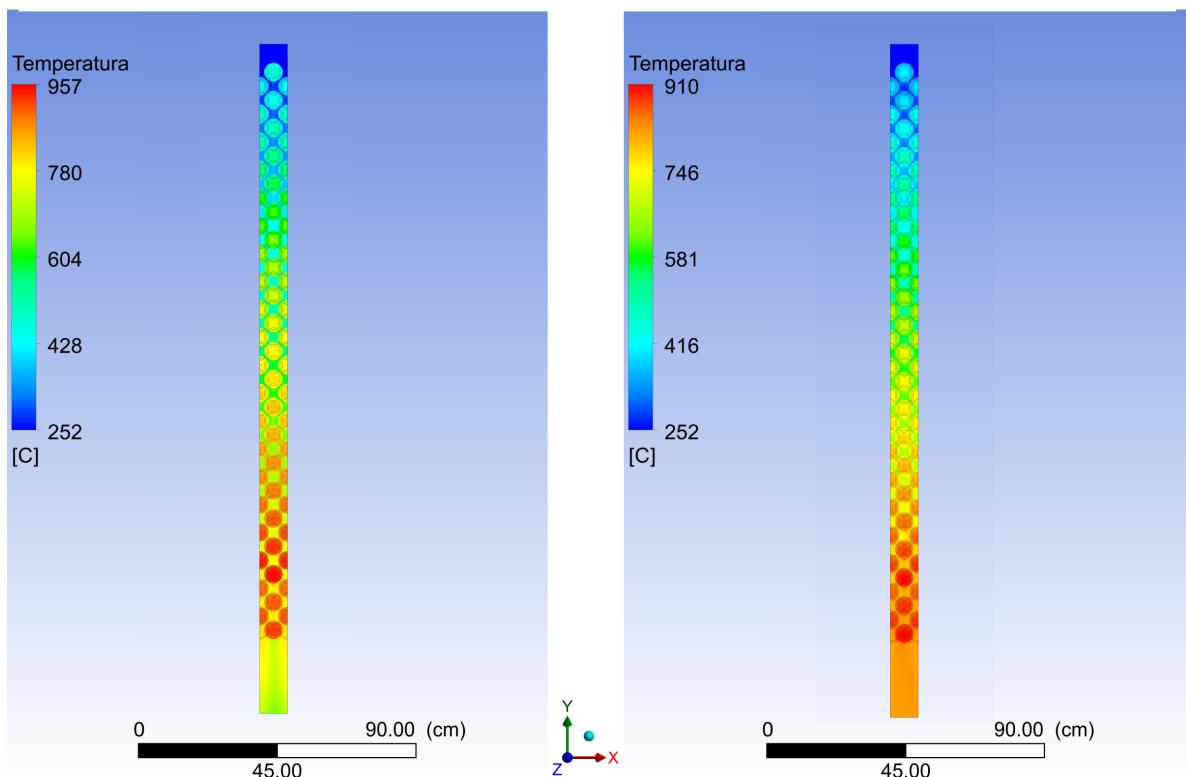


Figura 37 – Distribuição axial de temperaturas na seção central da coluna FCC completa, pelo uso dos modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)

Em relação ao modelo $k-\omega$ SST usado na obtenção dos perfis de temperatura e dos demais resultados desta seção, no que toca à convergência, ela não foi alcançada para o nível de tolerância estabelecido inicialmente (1E-4). O fato é explicado pela propagação de resíduos com curto grau de oscilação ao longo das iterações computadas para a resolução numérica das equações de governança, conforme mostrado no gráfico da Figura 38. As equações de continuidade e de energia alcançaram a convergência rapidamente, mas o mesmo não se observou em relação às equações de momento (ainda que os resíduos, para estes últimos, estejam próximos de 1e-4, com valores finais de 2,1E-4, 2,9E-4 e 2,1E-4 nas direções x , y e z , respectivamente). Alguns autores sugerem que, se os resíduos forem pequenos e permanecerem estáveis após um elevado número de iterações, caso as grandezas de interesse não sofram mudanças significativas, pode-se considerar que a simulação CFD converge. Na Figura 38 são observadas poucas variações nos resíduos após 300 iterações (o processamento da solução numérica foi encerrado após a execução de 1.000 iterações).

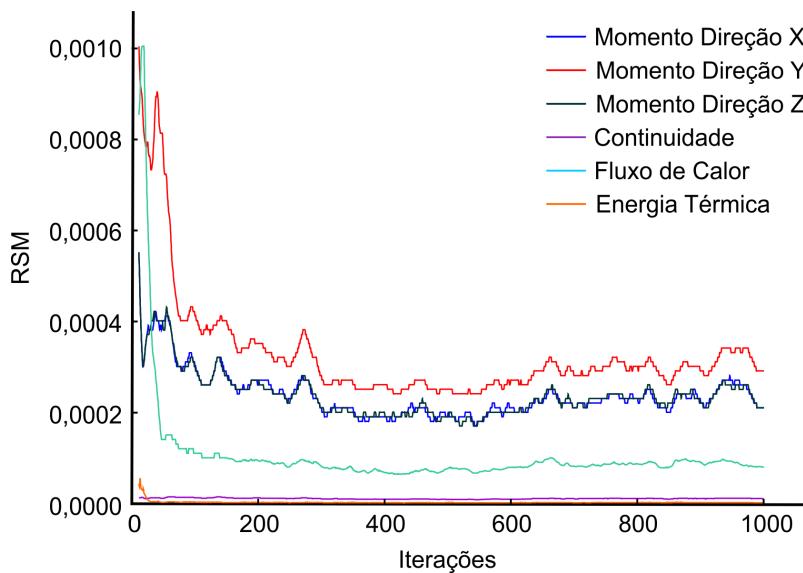


Figura 38 – Evolução da convergência da solução com o modelo $k-\omega$ SST para a coluna completa com o uso do arranjo FCC

Ao se deter na análise da temperatura de saída do gás hélio apresentado na Figura 39, conclui-se que ela apresenta um perfil com fortes variações na simulação realizada com o modelo $k-\epsilon$. Com o modelo $k-\omega$ SST, é obtido um perfil mais uniforme, mas a temperatura média de saída se encontra bem acima da temperatura média de 700 °C que é esperada na saída do núcleo do reator HTR-10. Apesar disso, os dados desta segunda simulação encontram boa concordância com vários dos trabalhos apresentados no benchmark da IAEA (2013) sobre o reator HTR-10; nestes trabalhos, ao se estimar a temperatura dos elementos combustíveis e do fluxo de refrigerante presentes no núcleo, na direção radial e na posição axial de 1,70 m, foram obtidos valores que estavam, via de

regra, bem acima dos valores de temperatura em locais próximos aos refletores laterais que cercam o leito de bolas (em quase todos os trabalhos, as temperaturas ultrapassam 800 °C, se aproximando, inclusive, em alguns casos, de 900 °C).

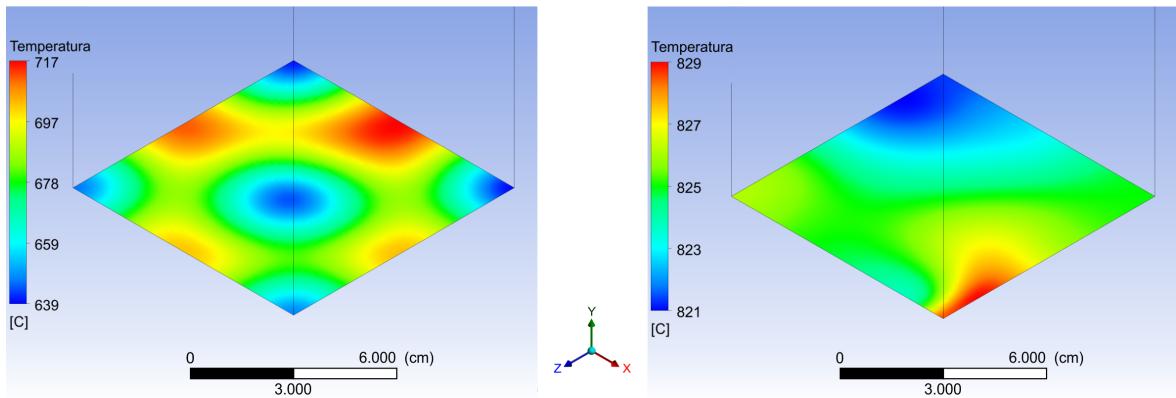


Figura 39 – Distribuição de temperaturas do gás hélio na saída da coluna FCC completa, pelo uso dos modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)

As distribuições de temperatura na superfície das esferas de combustíveis também confirmam tendências já apontadas com os resultados da seção anterior e em outros trabalhos correlatos. Novamente, temperaturas menores são observadas nas regiões frontais dos elementos combustíveis, quando comparadas com aqueles apresentadas nas regiões traseiras, indicando, dessa forma, uma maior transferência de calor para o refrigerante nas regiões frontais. No entanto, as diferenças de temperatura entre as regiões frontais e traseiras da esfera é quase duas vezes maior na simulação realizada com o modelo $k-\omega$ SST, conforme mostrado na Figura 40.

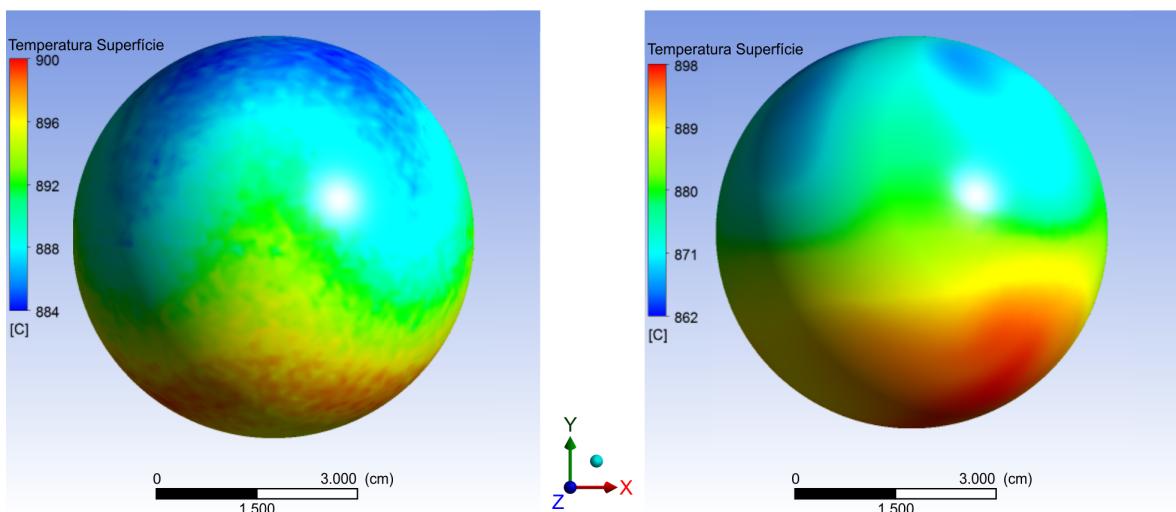


Figura 40 – Distribuição de temperaturas na superfície da última esfera de combustível da coluna FCC usando os modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)

Os contornos de velocidade do fluido em diferentes regiões do plano axial central são apresentados na Figura 41. Observa-se claramente uma aceleração do fluxo de gás nas regiões de maior proximidade entre os elementos combustíveis, devendo-se isso, essencialmente, à redução da área de escoamento naquelas regiões, conforme apontado por Wu et al. (2010). Regiões de estagnação de fluxo (ou próximo disso) são identificadas, por sua vez, abaixo das esferas. Os picos de velocidade são alcançados nas lacunas próximas à região de saída do escoamento. No entanto, valores escalares maiores são obtidos com o modelo $k-\omega$ SST, quando comparados com aqueles fornecidos pela simulação realizada com o modelo $k-\epsilon$. Além disso, uma maior intensidade das características anisotrópicas do fluxo junto às paredes das esferas é revelada pelo modelo $k-\omega$ SST, o que guarda relação direta com o melhor tratamento do escoamento junto à parede que aquele modelo oferece.

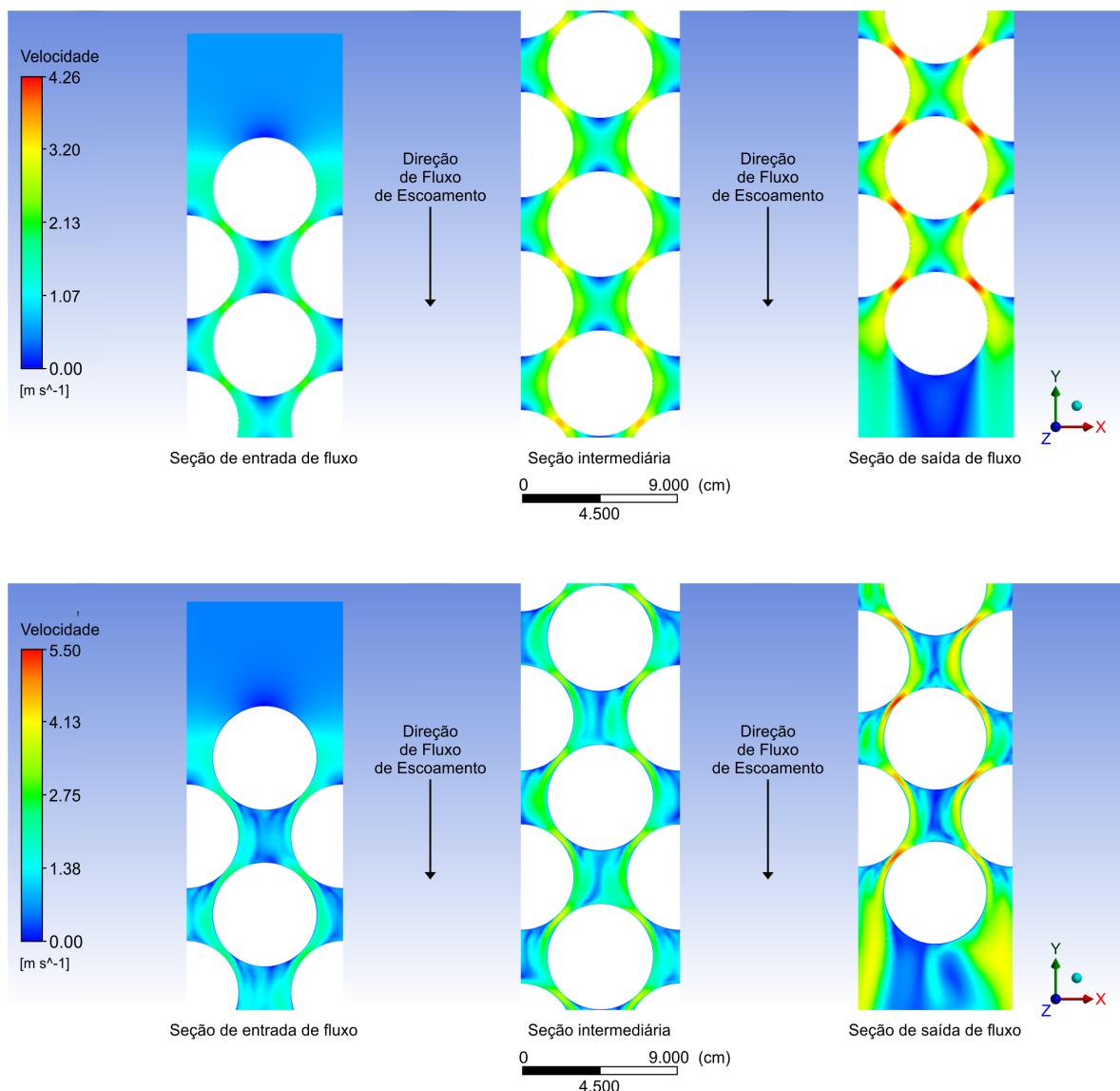


Figura 41 – Contornos de velocidade do fluido no plano central da coluna FCC completa usando os modelos $k-\epsilon$ (acima) e $k-\omega$ SST (abaixo)

Para melhor compreensão do fenômeno de turbulência, distribuições de vetores de escoamento são mostradas na Figura 42, em seções transversais localizadas no centro e na extremidade superior da 11^a célula unitária FCC (posições axiais de 95,025 cm e 90,5 cm, respectivamente). Os resultados sugerem a formação de vórtices nas regiões traseiras das esferas, nas quais elas se encontram mais afastadas entre si. Porém, é perceptível que os vórtices estão delineados de forma menos irregular na simulação realizada com o modelo $k-\epsilon$. Na simulação realizada com o modelo $k-\omega$ SST, a turbulência se mostra mais caótica, havendo, inclusive, aparente formação de um par de vórtices (ao invés de um único vórtice) no canto inferior direito da seção transversal do centro da célula unitária (Figura 42d).

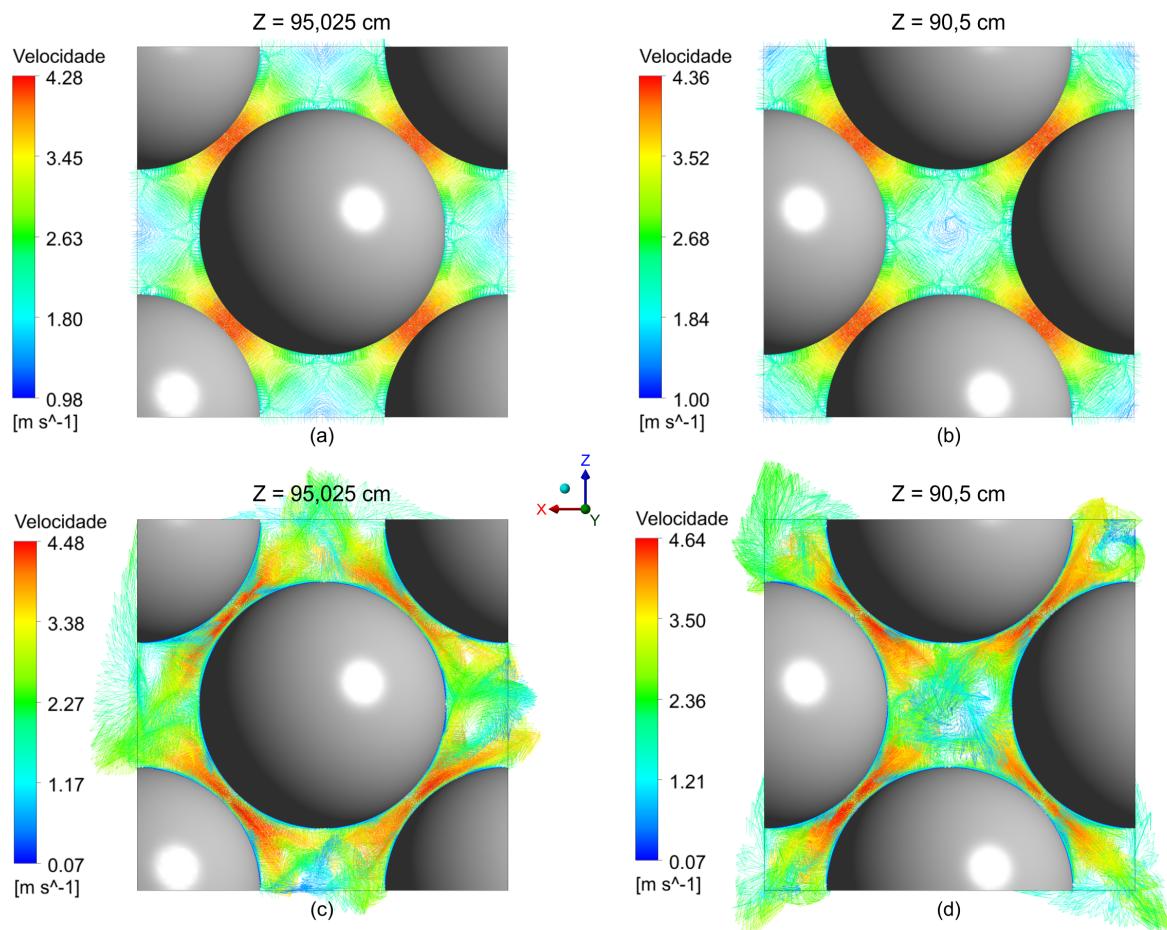


Figura 42 – Vetores de velocidade em uma seção transversal da coluna FCC completa usando os modelos $k-\epsilon$ (a e b) e $k-\omega$ SST (c e d)

A queda de pressão ao longo do leito de bolas constitui, segundo Wu et al. (2010), outro parâmetro essencial no projeto e operação de um reator de leito de bolas. O cálculo da distribuição de pressão mostrada na Figura 43 revela uma queda gradual da pressão ao longo da direção axial, mas níveis de pressão significativamente maiores na região superior do leito de bolas são obtidos com o modelo $k-\omega$ SST (quase duas vezes maior,

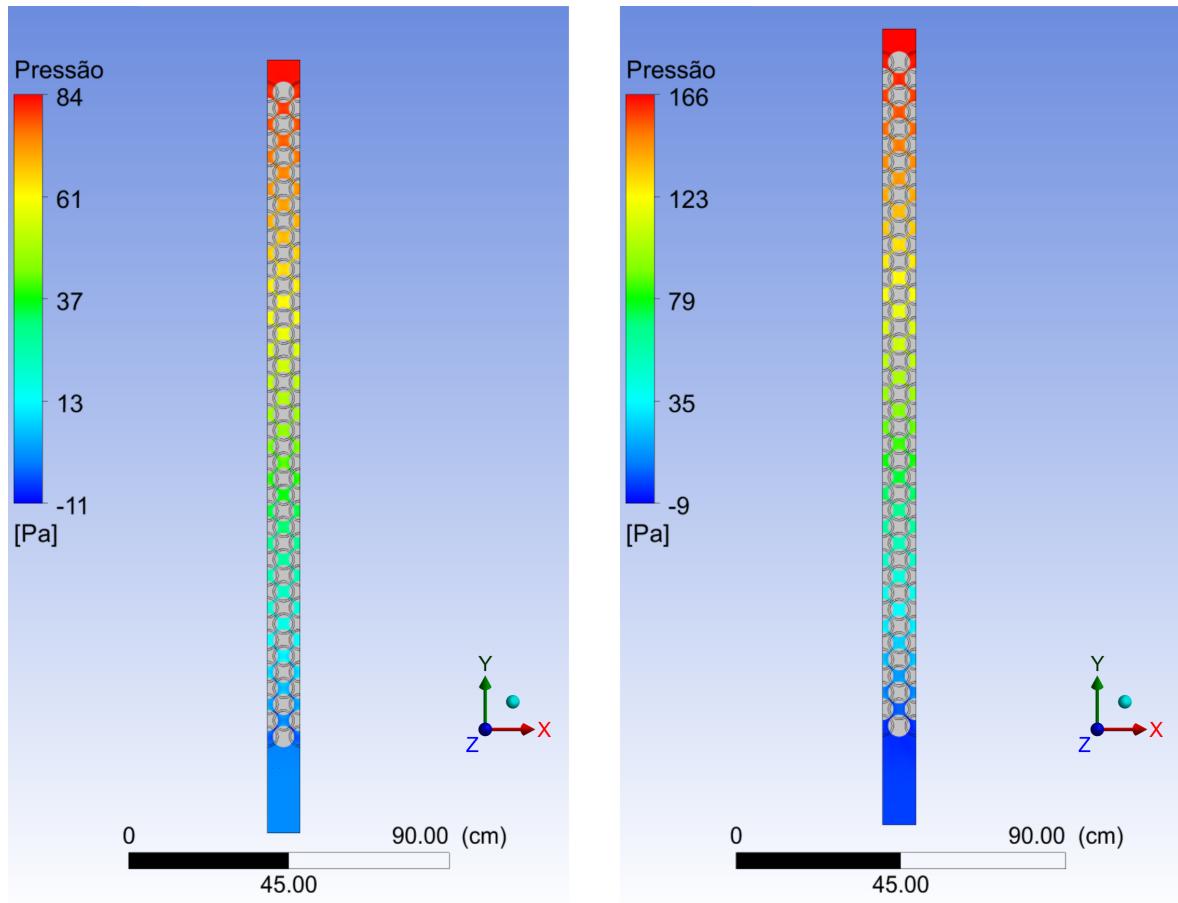


Figura 43 – Distribuição axial de pressão no plano central da coluna FCC completa usando os modelos $k-\epsilon$ (esquerda) e $k-\omega$ SST (direita)

quando comparado com os resultados apontados na simulação realizada com o modelo $k-\epsilon$). A variação da queda de pressão, quando comparados os resultados dos modelos $k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST, também é observada em alguns outros trabalhos correlatos, como o de Lee et al. (2007b), que associa esta variação aos diferentes modelos de turbulência usados e às diferenças no fechamento das equações de governança.

Cálculos de independência de malha também foram realizados para confirmar a independência dos resultados das simulações em relação às características da malha. Dois casos finais com 51.995.823 e 75.941.593 elementos, respectivamente, foram comparados, obtendo que os maiores desvios nas temperaturas máximas foram inferiores a 1 %. Para a realização dos cálculos com a malha mais fina, foram usados os três nós do cluster CACAU equipados com GPUs, com alocação de até 120 GB de memória. Como a simulação com o modelo $k-\omega$ SST não convergiu com o nível de tolerância estabelecido inicialmente (1E-4), sendo interrompida após o processamento de 1.000 iterações, a realização dos cálculos consumiu mais de 28 horas. A simulação com o modelo $k-\epsilon$, por sua vez, se encerrou com menos de 2 horas, pelo fato da convergência ter sido alcançada com menos de 50 iterações.

5.3 Resultados com o Arranjo BCC

Um modelo geométrico para a coluna completa da seção central do núcleo com o uso do arranjo BCC também foi construído para a realização de simulações. Os cálculos de simulação com os modelos de turbulência $k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST foram igualmente precedidos pela construção da malha e pela especificação dos fenômenos, parâmetros materiais e condições de contorno. Os resultados da simulação são mostrados nas Figuras 44 - 48.

Nas simulações realizadas com a geometria BCC completa, ao ser empregado o modelo de turbulência $k-\omega$ SST, também não se alcançou o nível de convergência estipulado inicialmente ($1e-4$). Para tentar contornar esta situação, alterações foram promovidas na geometria da coluna, pela ampliação na direção axial das regiões de entrada e de saída de fluxo, de modo a garantir que as condições de desenvolvimento pleno do escoamento fossem alcançadas mais rapidamente. Em particular, aumentou-se a altura da célula posicionada após a última célula BCC (acréscimo de 14,38 cm), mas a evolução da convergência do processo iterativo se mostrou semelhante àquele apresentado na Figura 38. Os resíduos para as equações de momento (novamente responsáveis pelo não alcance do nível de convergência), apresentaram valores finais de 3.2E-4, 3.3E-4 e 3.1E-4 nas direções x , y e z , respectivamente. A realização dos cálculos foi encerrada após a execução de 1.000 iterações.

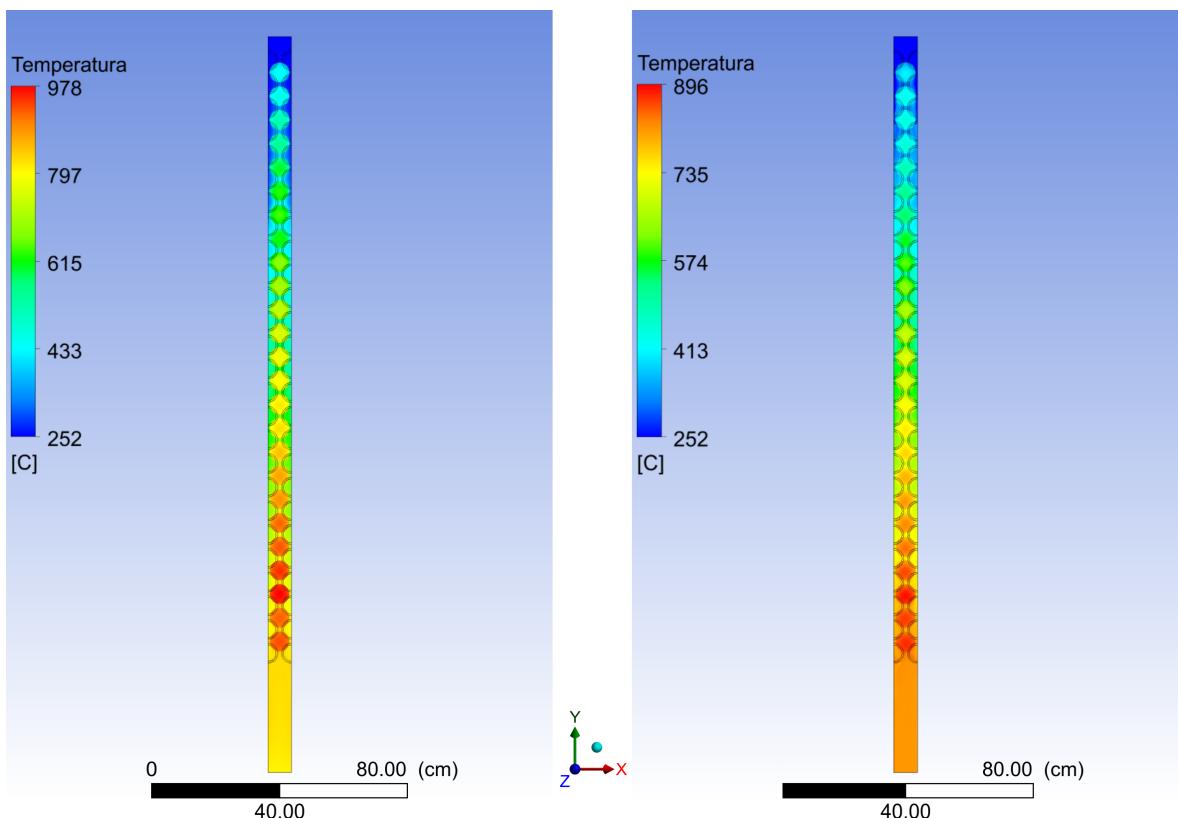


Figura 44 – Distribuição axial de temperaturas no plano central da coluna BCC completa utilizando os modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)

Dos resultados apresentados na Figura 44, conclui-se que o comportamento da evolução da temperatura dos diversos elementos (hélio, camada de grafite e combustível) ao longo da coluna se mostra semelhante àquele obtido com a simulação da coluna FCC. As maiores temperaturas também são registradas no centro da camada de elementos combustíveis que se encontra acima das últimas 5 camadas (profundidade de 168,965 cm). Novamente se assiste a um decaimento da temperatura após esta camada. No entanto, os valores escalares dos picos de temperatura também estão em patamares diferentes, de modo que valores maiores são obtidos com o modelo $k-\epsilon$, da mesma forma como observado na simulação da coluna FCC. Entre todas as simulações realizadas, as maiores temperaturas são obtidas com a coluna BCC e o modelo $k-\epsilon$ (978 °C). Por sua vez, no arranjo BCC com o modelo $k-\omega$ SST são encontrados menores picos de temperatura, quando comparados com os demais casos de simulação.

De acordo com a Figura 45, a oscilação da temperatura de saída do gás hélio não é muito grande, com a diferença máxima entre valores mínimos e máximos não se mostrando superior à 10 °C. Ademais, a temperatura média de saída fornecida pela simulação com o modelo de turbulência $k-\epsilon$ é levemente superior àquela apurada com o modelo $k-\omega$ SST.

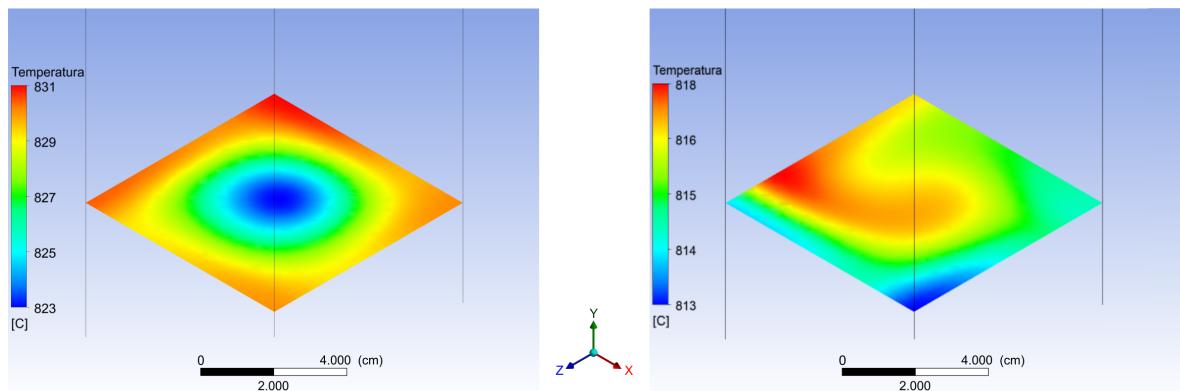


Figura 45 – Distribuição de temperaturas do gás hélio na saída da coluna BCC completa, pelo uso dos modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)

De igual forma ao apontado na simulação realizada com a coluna FCC, é sinalizada uma maior variação de temperatura ao longo da superfície do elemento combustível que se encontra mais próximo da região de saída do escoamento ao se usar o modelo de turbulência $k-\omega$ SST, conforme mostrado na Figura 46. No entanto, apesar da menor variação térmica, maiores temperaturas na superfície da esfera são registradas com o modelo $k-\epsilon$, em aparente reflexo direto dos maiores picos de temperatura obtidos com esta simulação, entre todas as simulações realizadas.

No que diz respeito ao campo de velocidade de escoamento, gráficos de contornos de diferentes regiões do plano axial central são apresentados na Figura 47.

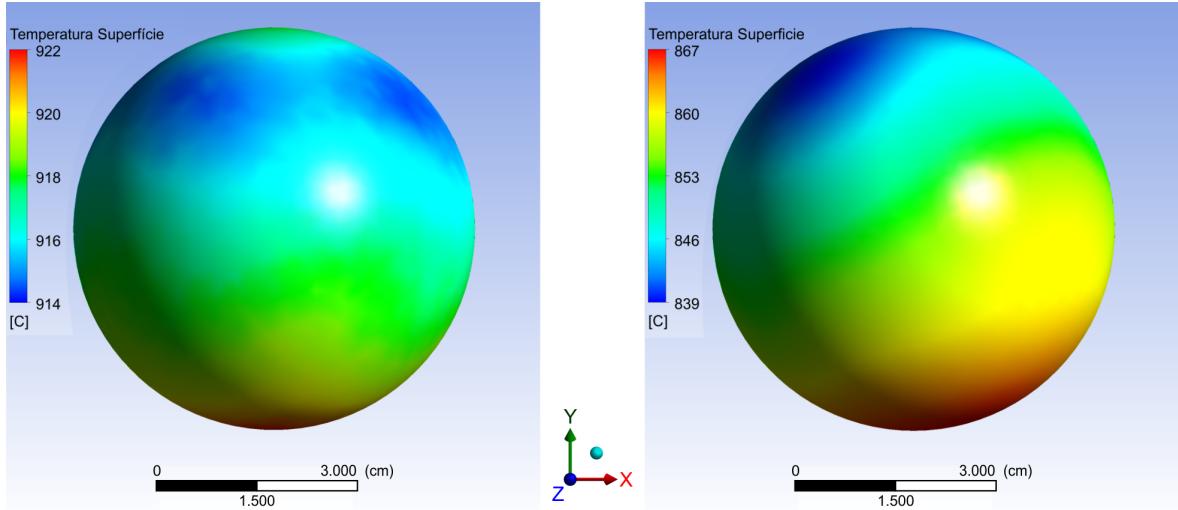


Figura 46 – Distribuição de temperaturas na superfície da última esfera de combustível usando os modelos $k-\epsilon$ (à esquerda) e $k-\omega$ SST (à direita)

Novamente, se observa uma aceleração do fluxo em regiões de maior proximidade entre as esferas (situadas em locais próximos aos planos simétricos do domínio computacional). Zonas de estagnação de escoamento também se formam abaixo das esferas. Estes dados, se comparados com os resultados obtidos para a geometria FCC, sugerem variações menores na velocidade do fluxo de hélio para a coluna BCC, resultando em um cenário de mistura turbulenta menor. Isso é explicado, segundo [Ferng e Lin \(2013\)](#), pelo fato da geometria dos arranjos BCC apresentar menor grau de compactação, com o que se tem maiores zonas de circulação de fluxo. Ao comparar os resultados obtidos com o uso de cada modelo de turbulência, características anisotrópicas de fluxo junto às paredes das esferas também são apontadas com maior intensidade com o modelo $k-\omega$ SST.

O cenário de menor mistura turbulenta fica mais óbvio ao se deparar com a distribuição de vetores de velocidade. Aqui, para este propósito, são consideradas seções transversais localizadas no centro e na extremidade superior da 14^a célula unitária BCC (posições axiais de 97,065 cm e 93,47 cm, respectivamente), levando aos gráficos de vetores de velocidade mostrados na Figura 48. Da distribuição de vetores, é possível inferir a formação de vórtices na região central limítrofe entre duas células adjacentes (Figuras 48a e Figuras 48c), bem como nos cantos de cada esfera (Figura 48b e 48d). Tais vórtices estão delineados de forma mais regular, quando comparados com aqueles que são identificados na simulação da geometria FCC. Há menos cruzamentos de linhas de escoamento, levando a um cenário de turbulência menos caótico.

Em relação à pressão, a distribuição ao longo da coluna é mostrada na Figura 49. Os dados também apontam para a queda gradativa da pressão, embora com níveis de pressão maiores na seção superior do plano axial para a simulação realizada com o

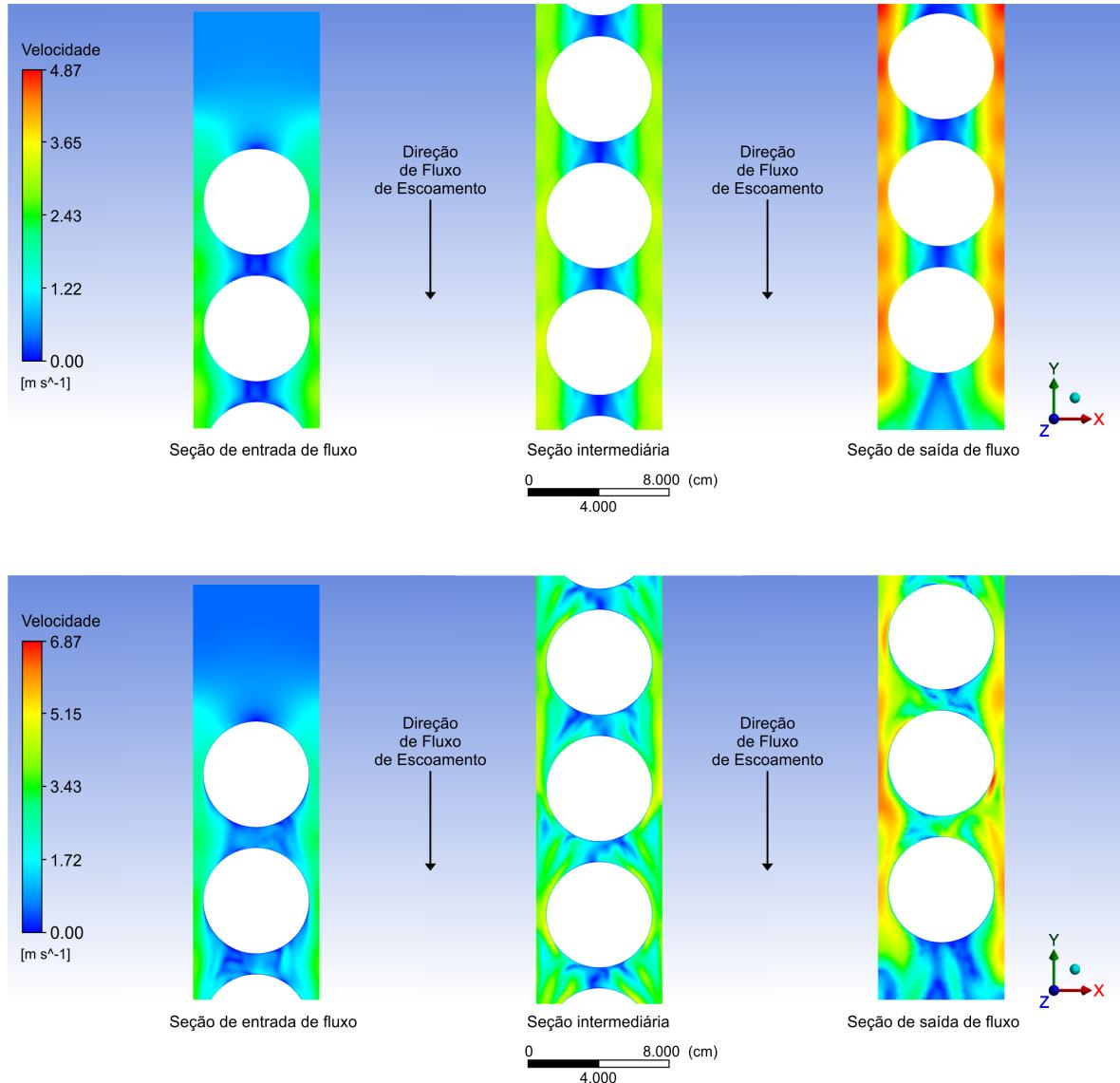


Figura 47 – Contornos de velocidade axial no plano central da coluna BCC completa com os modelos $k-\epsilon$ (acima) e $k-\omega$ SST (abaixo)

modelo $k-\omega$ SST (quase três vezes maior). Os resultados de simulação com o modelo $k-\epsilon$ estão mais próximos daqueles obtidos pela simulação da coluna FCC com o mesmo modelo de turbulência.

Simulações com diferentes tamanhos de malha também foram realizadas para garantir a independência dos resultados em relação aos parâmetros de malha. Os casos finais de simulação com os quais são apresentados os resultados desta seção possuem 33.041.727 e 44.031.557 elementos, com os maiores desvios nas temperaturas máximas se mostrando inferiores a 1 %. A menor quantidade de elementos, ao se comparar com as malhas geradas para as geometrias de arranjos FCC, é justificada pelo fato dos elementos combustíveis dispostos na coluna BCC apresentarem menor grau de compactação, resultando em uma geometria menos complexa. Por consequência, isso

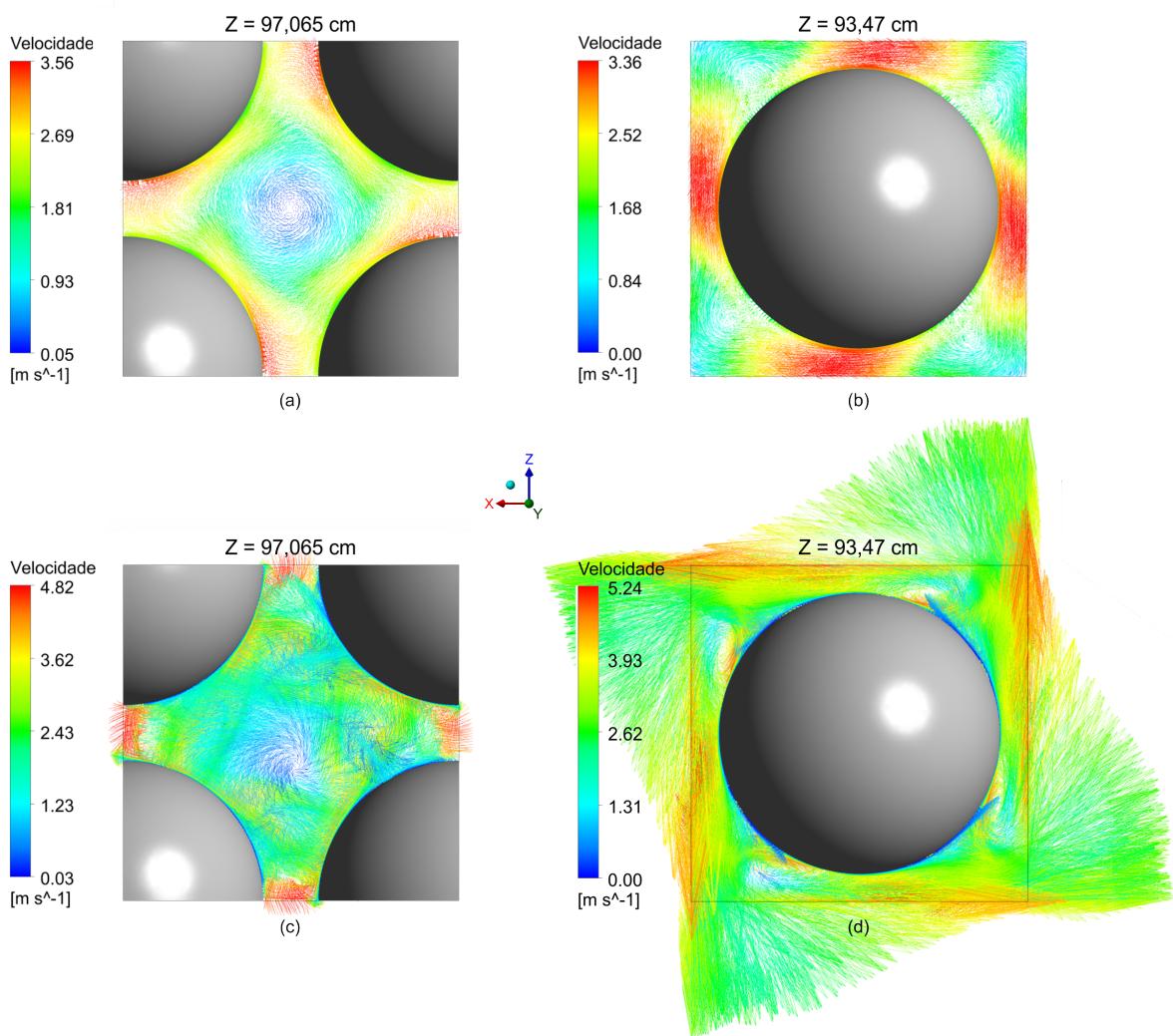


Figura 48 – Vetores de velocidade em uma seção transversal da coluna BCC completa com os modelos $k-\epsilon$ (a e b) e $k-\omega$ SST (c e d)

se reflete na menor alocação de memória para a realização dos cálculos de simulação (de até 56 GB de RAM), com o uso dos três nós do cluster equipados com unidades de processamento gráfico. Assim como observado com as simulações realizadas com o arranjo FCC e o modelo $k-\epsilon$, a convergência também é alcançada rapidamente com este modelo de turbulência e a coluna BCC (49 iterações e com menos de 2 horas de processamento). No entanto, a convergência não é alcançada nas simulações realizadas com o modelo $k-\omega$ SST, com os cálculos sendo interrompidos após mais de 42 horas (até o término da simulação, foram processadas 2.000 iterações).

5.4 Comparação e Validação dos Resultados

Nas seções 5.2 e 5.3, foram discutidos os resultados da simulação CFD para a coluna completa no centro do núcleo do reator HTR-10. Foram apresentadas distribui-

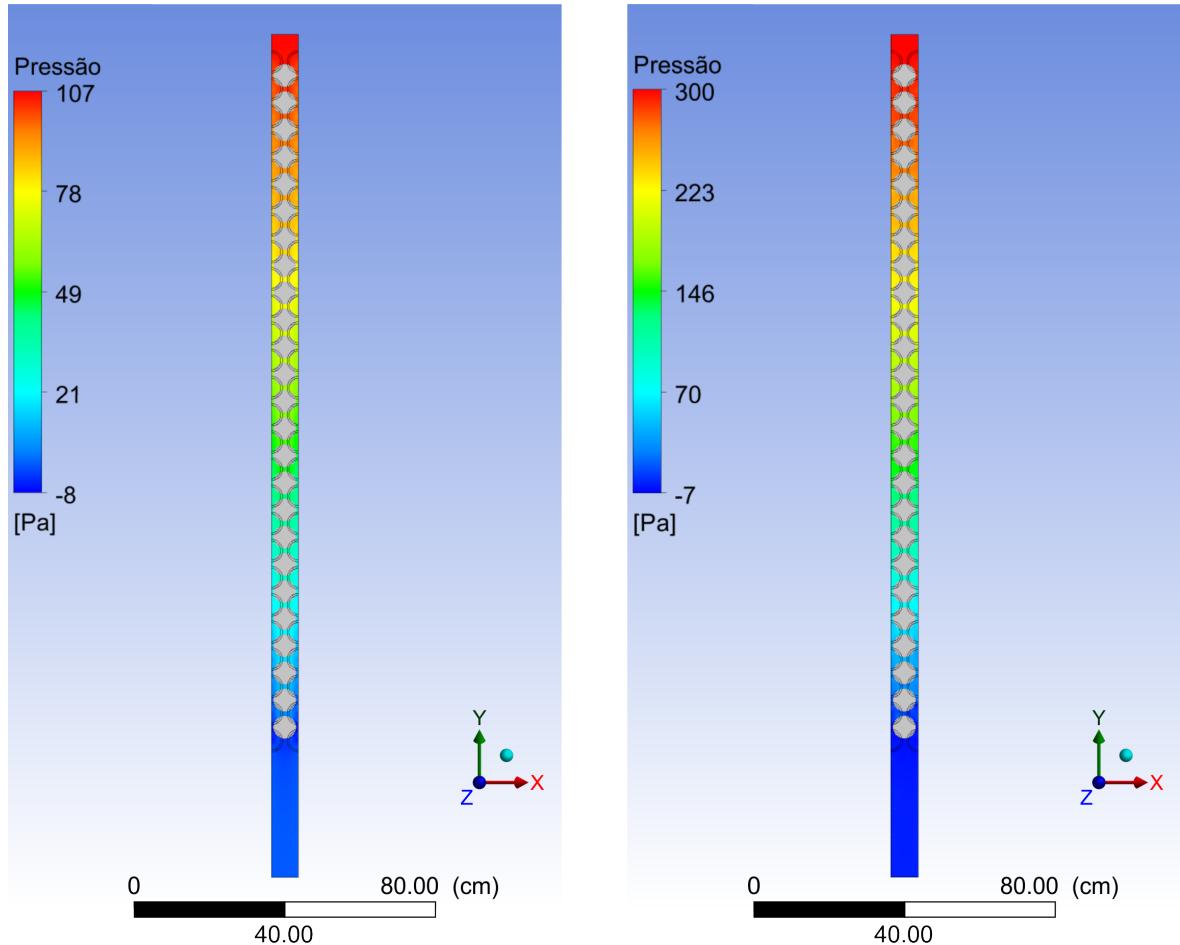


Figura 49 – Distribuição axial de pressão no plano central da coluna BCC completa com os modelos $k-\epsilon$ (esquerda) e $k-\omega$ SST (direita)

ções de temperatura, parâmetros de fluxos turbulentos e a queda de pressão usando arranjos FCC e BCC. Esta seção é dedicada à comparação dos resultados entre os dois tipos de arranjo, além de validá-los em relação aos valores de referência do benchmark da IAEA (2013).

De acordo com os dados apresentados nas duas seções anteriores, é possível concluir que há regularidade, em certa medida, nos resultados das simulações realizadas em relação à evolução da temperatura ao longo do plano central da coluna, bem como nas temperaturas máximas dos diversos componentes do leito de bolas (hélio, camada de grafite e combustível). Em relação à temperatura de saída do hélio, uma caracterização anisotrópica maior é registrada com a coluna FCC e o modelo $k-\epsilon$, ao compará-la com as demais simulações.

No que toca ao regime turbulento do hélio no interior do leito de bolas, misturas turbulentas de fluxo ocorrem com maior intensidade na coluna FCC, devido à maior compactação fornecida pelos arranjos FCC. Isso resulta na formação de vórtices de menor regularidade, quando comparados com aqueles identificados na coluna BCC.

Para a pressão, o perfil de queda ao longo da direção axial é observado em todas as simulações, mas diferenças maiores entre os valores escalares mínimos e máximos são encontrados na geometria BCC.

Conforme já mencionado em seções anteriores, valores de referência para a distribuição de temperatura do reator HTR-10 em operação, sob potência total, estão compiladas em IAEA (2013). Os resultados de investigação deste problema de benchmark foram fornecidos por um consórcio de instituições de 7 países (África do Sul, China, Coreia do Sul, Estados Unidos, França, Holanda, Inglaterra e Turquia). Em 5 (cinco) destes trabalhos, foram usados modelos bidimensionais. Em relação aos softwares empregados na realização dos cálculos, alguns participantes optaram por pacotes de propósito específico (a exemplo do THERMIX, de uso do INET, da China) e outros optaram por pacotes de propósito geral.

Todos os resultados de perfis de temperatura no eixo central do núcleo ($R = 0$ cm) que foram fornecidos pelos participantes apontaram para o aumento da temperatura ao longo da direção axial, de modo a alcançar um valor máximo, após o qual a temperatura começa a decair. As temperaturas máximas obtidas pelos participantes, se considerada a combinação da distribuição de potência axial e a direção de escoamento do hélio, são registradas em posições axiais localizadas entre 170 e 190 cm (esta região corresponde à seção inferior da parte cilíndrica do leito de bolas). A queda de temperatura no núcleo após alcançar seu pico é explicada pelo fato de não existir elementos combustíveis na região côncava do leito de bolas e no tubo de descarga do combustível.

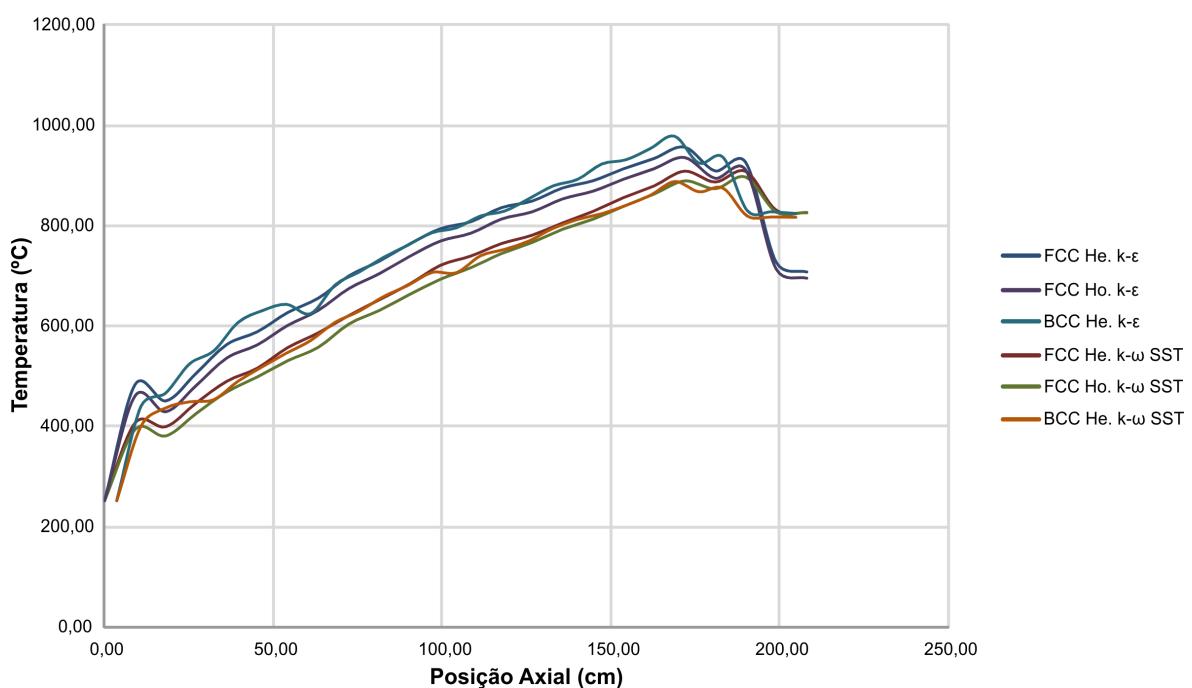


Figura 50 – Perfis de temperatura axial no eixo central ($R = 0$) para as diversas simulações desenvolvidas neste trabalho

Os resultados obtidos neste trabalho apresentam boa concordância com os resultados do benchmark. Os picos de temperatura obtidos com a coluna FCC e com a coluna BCC são registrados nas posições axiais de 171,95 cm e 168,965 cm, respectivamente. Em relação à evolução da temperatura axial no centro do leito de bolas, a semelhança é evidente ao sintetizar os resultados do trabalho em um gráfico de perfil de temperatura, conforme mostrado na Figura 50. Para construir o gráfico, foram usadas amostras de temperaturas calculadas nos centros dos elementos combustíveis de cada coluna, onde é esperada a ocorrência das maiores temperaturas. São acrescentados ainda resultados de simulações adicionais com a geometria FCC, mas sem distinção entre a camada de grafite e o material físsil (combustível) confinado (ou seja, o elemento é tratado como uma esfera homogênea). Para o tratamento da turbulência, foram usados os mesmos modelos empregados na simulação das colunas heterogêneas ($k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST).

No gráfico da Figura 51, são incluídos os valores de referência disponibilizados por 5 participantes do consórcio para a geração do benchmark (África do Sul, China, França, Inglaterra e Turquia). Neste segundo gráfico, percebe-se que os resultados obtidos com a simulação da coluna BCC de elementos heterogêneos e o modelo $k-\epsilon$ são aqueles que mais se afastam da maioria dos resultados, devido à curva de menor crescimento de temperatura que é observada naquela simulação. As outras simulações forneceram resultados semelhantes aos valores de referência.

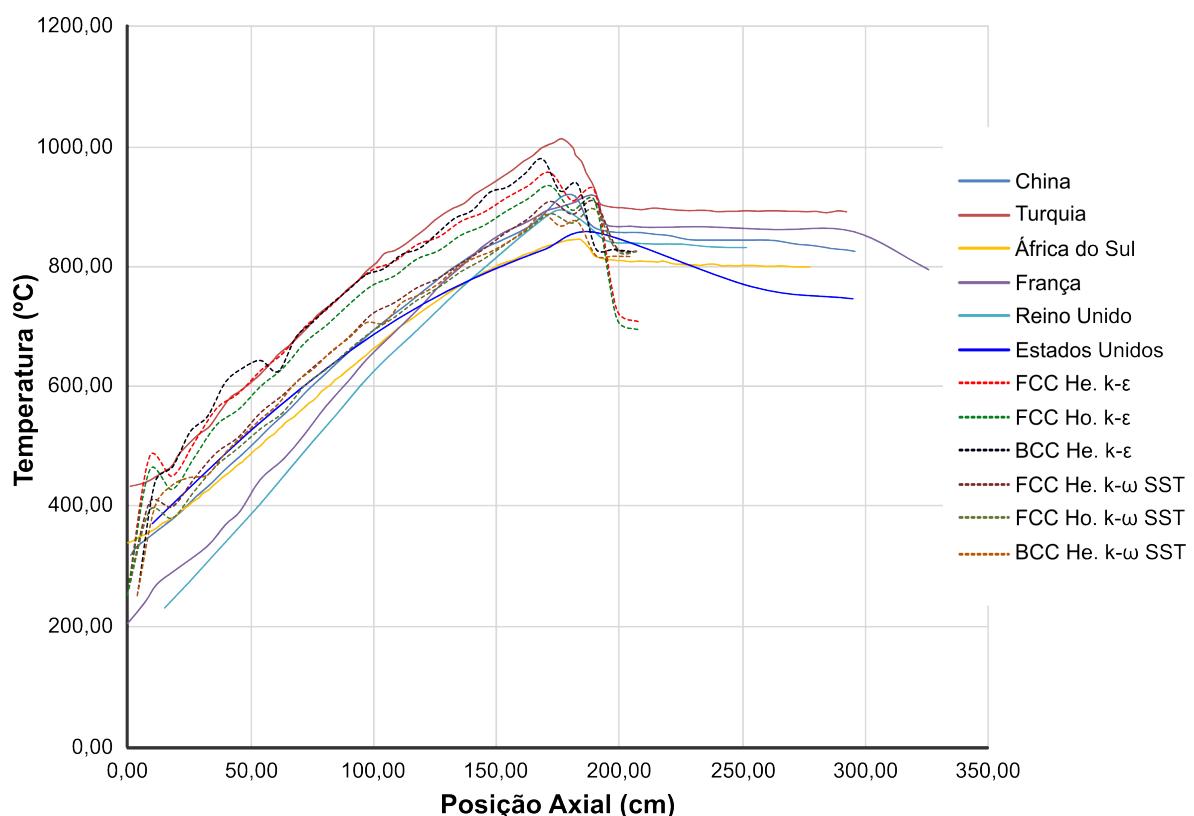


Figura 51 – Comparação dos perfis de temperatura axial ($R = 0$ cm) fornecidos pelas simulações com alguns dos resultados do benchmark da IAEA (2013)

Em relação aos centros dos elementos combustíveis, os picos de temperatura calculados pelos diversos participantes do benchmark variam entre 880,80 °C e 1025,60 °C. Nos resultados obtidos por este trabalho, as temperaturas máximas se encontram dentro desta faixa (os resultados extraídos se situam entre 875 °C e 978 °C). Outro dado selecionado, para efeito de comparação, é a temperatura máxima alcançada na superfície dos elementos combustíveis; mais uma vez, os picos de temperatura obtidos se encontram em patamares próximos, quando comparados com aqueles fornecidos pelos participantes. Neste trabalho, estes picos de temperatura variam de 882 °C a 951 °C, dependendo da simulação realizada. Um gráfico comparativo com as temperaturas máximas no centro e na superfície do combustível é apresentado na Figura 52.

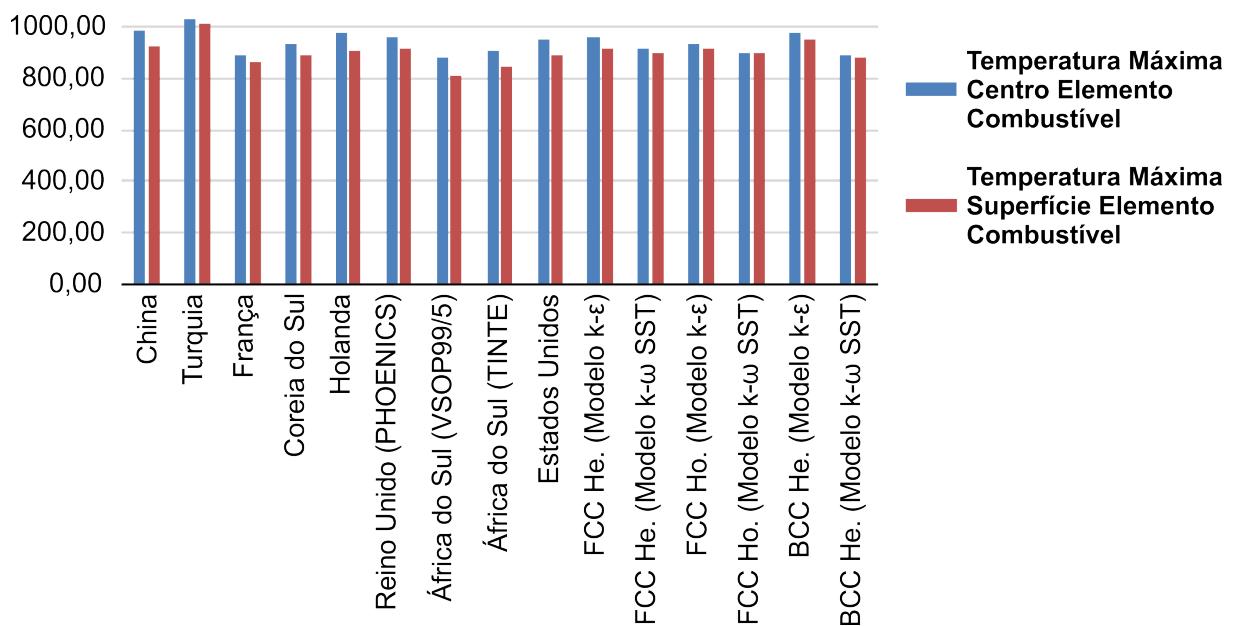


Figura 52 – Comparação das temperaturas máximas fornecidas pelas simulações com os resultados do benchmark da IAEA (2013)

Em relação às características de segurança do reator HTR-10, as temperaturas máximas alcançadas pelo combustível no presente trabalho e nos estudos apresentados no benchmark da IAEA (2013) estão com os valores obtidos bem abaixo do limite recomendado para as partículas TRISO (1.600 °C). O maior pico de temperatura obtido é inferior a 1.000 °C (aproximadamente 978 °C).

6 Conclusões

Neste trabalho, foi realizada uma investigação sobre as condições termohidráulicas de reatores de alta temperatura do tipo leito de bolas. Como caso de estudo, é considerado, mais especificamente, o reator experimental de 10MW conhecido como HTR-10, de responsabilidade do INET, em Beijing, China.

Para a realização da simulação, optou-se por uma abordagem realística baseada em CFD. Trata-se de uma técnica empregada no estudo de escoamentos de fluidos e na influência deles em diversos fenômenos físicos, como a transferência de calor. Recentemente, tem se observado um crescente interesse da indústria ou mesmo da academia nesta abordagem, resultando no desenvolvimento de diversos softwares de CFD de propósito geral. Neste trabalho em particular, optou-se pelo uso do Ansys CFX, um dos inúmeros pacotes que se encontram disponíveis comercialmente.

A definição do domínio computacional constituiu a primeira etapa da abordagem. Neste ínterim, a geometria extremamente complexa do núcleo do reator em estudo representou um complicador adicional para a construção do modelo geométrico, sendo agravado pela distribuição aleatória das esferas de combustível no interior do leito de bolas. Na maioria dos trabalhos correlatos que consideram a modelagem realística de cada elemento combustível, são usados arranjos regulares. Neste trabalho, são adotados arranjos cúbicos centrados na face (FCC) e centrados no corpo (BCC) para a construção de uma coluna localizada na seção central do núcleo. Após a discretização do domínio computacional e a definição de condições de contorno nas regiões de interface com o ambiente externo com base em características de projeto do reator HTR-10, prosseguiu-se com a resolução numérica das equações de governança no domínio discretizado. Para o tratamento numérico do regime de turbulência esperado no leito de bolas, foram usados dois modelos recomendados na literatura: o modelo $k-\epsilon$ e o modelo $k-\omega$ SST. Devido ao volume de dados de discretização, foram empregados recursos computacionais de processamento paralelo.

Os resultados obtidos ratificam a viabilidade da abordagem CFD na solução das condições termohidráulicas de reatores de leitos de bolas, a exemplo do reator HTR-10. Eles também reforçam a ampla aceitação que o Ansys CFX tem recebido por parte de inúmeros pesquisadores, no que toca à sua aplicação em problemas de simulação em diversas áreas de engenharia.

As temperaturas máximas calculadas com a simulação da geometria FCC são bastante próximas (diferenças menores que 55 °C, independentemente do modelo de turbulência considerado). A estrutura mais compactada da coluna FCC implicou em um

cenário de escoamento turbulento mais caótico do gás hélio, com alto grau de mistura de fluxos turbulentos e vórtices delineados de forma mais irregular. Com a coluna BCC, as divergências entre os picos de temperatura são levemente maiores (diferenças em torno de 80 °C). A turbulência se mostra menos caótica, com a formação de vórtices de maior regularidade.

Quando comparados os resultados obtidos com ambas as geometrias, os perfis de evolução da temperatura no eixo central da coluna se mostram semelhantes, com o registro de picos de temperatura em posição axial próxima à 170 cm; a partir desta posição, é observado uma queda da temperatura (em direção à região de saída do escoamento).

As comparações com estudos correlatos compilados em benchmark da IAEA (2013) também indicam que os resultados são satisfatórios. Quando comparados as temperaturas máximas no centro e na superfície dos elementos combustíveis, os resultados são bastante próximos entre si. A localização dos picos de temperatura em relação ao eixo axial também guarda semelhanças com os valores de referência apontados pelo benchmark. De modo geral, conclui-se, portanto, que os resultados da simulação são aceitáveis.

Por fim, no que diz respeito às características de segurança do reator HTR-10, as temperaturas máximas alcançadas pelo combustível no presente trabalho, se consideradas todas as simulações realizadas, estão bem abaixo do limite recomendado para as partículas TRISO (1.600 °C). Os resultados obtidos permitem, dessa forma, apoiar o desenvolvimento de reatores de leitos de bolas, enquanto alternativa em um futuro próximo, em resposta ao aumento da demanda energética mundial.

Em relação aos trabalhos futuros, pode se sugerir aqui a simulação de LOCAs (do inglês *Loss of Coolant Accident*, Acidente com Perda de Refrigerante) com as geometrias FCC e BCC usadas nesta simulação. Resultados experimentais com o reator HTR-10 já estão disponíveis, a partir de testes realizados pelo próprio INET. Nestes testes, não se procedeu com o desligamento emergencial do reator, quando do corte forçado da circulação primária do refrigerante; após um período de tempo (4.075 s), observou-se que o núcleo alcançou sua criticalidade novamente com picos de potência com valores relativos de 0,25, confirmando, dessa forma, a segurança da operação do reator nestas condições. Resultados de simulações de LOCAs também foram incorporados aos problemas de benchmark apresentados pela (IAEA, 2013) para o HTR-10, mas com o uso de outras metodologias.

Conforme mencionado no capítulo anterior, os níveis de convergência estabelecidos (1E-4) não foram alcançados para as simulações do escoamento turbulento com o modelo de turbulência $k-\omega$ SST. Como se sabe, o solver do Ansys CFX faz uso de técnicas de *multigrid* para acelerar a convergência das soluções iterativas, mas elas se mostraram

insuficientes para aquelas simulações (ainda assim, cabe lembrar que os resultados termohidráulicos alcançados foram razoáveis). O aperfeiçoamento da modelagem da coluna com o modelo $k-\omega$ SST constitui uma outra sugestão de trabalho futuro.

Referências

- ANSYS INC. **CFX R14 Pre-User's Guide**. Release 14.0, Help System. Canonsburg, 2011.
- AZIZ, M.; REFEAT, R. Burnup and criticality analysis of carbon coated particle fuel in HTR-10 reactor. In: **Proceedings of the 7th Conference on Nuclear and Particle Physics**. Sharm El-Sheikh, Egypt: , 2009. p. 215–223.
- BAKER, M. J. **CFD simulation of flow through packed beds using the finite volume technique**. Tese (Doutorado) — University of Exeter, 2011.
- BARTH, T. J.; JESPERSON, D. C. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. **AIAA Journal**, 1989.
- BROSSARD, P.; ABRAM, T. J.; PETTI, D.; SAWA, K.; LEE, Y. W.; FÜTTERER, M. A. The VHTR fuel and fuel cycle project: Status of ongoing research and results. In: FORUM, G. I. I. (Ed.). **GIF Symposium**. Paris, France, 2009. p. 103–108.
- CHEN, F.; DONG, Y.; ZHANG, Z. Temperature response of the HTR-10 during the power ascension test. **Science and Technology of Nuclear Installations**, v. 2015, p. 13p., 2015.
- CHEN, F.; DONG, Y.; ZHENG, Y.; SHI, L.; ZHANG, Z. Benchmark calculation for the steady-state temperature distribution of the HTR-10 under full-power operation. **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 46, n. 6, p. 572–580, 2009.
- FAVRE, A. Equations des gaz turbulents compressibles: 1. formes générales. **Journal of Mécanique**, v. 4, n. 3, p. 361–390, Septembre 1965.
- FERNG, Y. M.; LIN, K.-Y. Investigating effects of BCC and FCC arrangements on flow and heat transfer characteristics in pebbles through CFD methodology. **Nuclear Engineering and Design**, v. 258, p. 66–75, May 2013.
- FLUENT INC. **FLUENT 6.1 User's Guide**. Lebanon, New Hampshire, 2003.
- GIF. **A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems**. : U.S. DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee and the Generation IV International Forum, 2002.
- GIF. **Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems**. : Nuclear Energy Agency (NEA) of the Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD), 2014.
- HASSAN, Y. A. Large eddy simulation in pebble bed gas cooled core reactors. **Nuclear Engineering and Design**, v. 238, n. 3, p. 530–537, March 2008.
- HU, S.; LIANG, X.; WEI, L. Commissioning and operation experience and safety experiments on HTR-10. In: **3rd International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology**. Johannesburg, South Africa: , 2006.
- HUTCHINSON, B. R.; RAITHBY, G. D. A multigrid method based on the additive correction strategy. **Numerical Heat Transfer**, v. 9, n. 5, p. 511–537, 1986.

- IAEA. **Evaluation of high temperature gas cooled reactor performance: benchmark analysis related to the PBMR-400, PBMM, GT-MHR, HTR-10 and the ASTRA critical facility.** Vienna, 2013.
- IAEA. **Nuclear Technology Review 2015.** Vienna, Austria, 2015.
- KAO, M. T.; TUNG, Y. H.; FERNG, Y. M.; CHIENG, C. C.; CHYU, M. K. 3D measurements and numerical computations of heat transfer coefficients on spheres in an array. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 68, p. 110–118, June 2013.
- KIM, C. H. **Thermal property data for HTGR system design and safety analysis code input. Calculation Note.** 2004.
- KOK, K. D. **Nuclear Engineering Handbook.** Boca Raton, FL: CRC Press, 2009. (Mechanical Engineering Series).
- KTA. **Reactor Core Design for High-Temperature Gas-Cooled Reactor (Part 1: Calculation of the Material Properties of Helium).** Salzgitter, 1978.
- LAUNDER, B. E.; MORSE, A.; RODI, W.; SPALDING, D. B. The prediction of free shear flows: a comparison of the performance of six turbulence models. In: **Proceedings of NASA Conference on Free Shear Flows.** Langley: , 1972.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269–289, March 1974.
- LEE, J.-J.; PARK, G.-C.; KIM, K.-Y.; LEE, W.-J. Numerical treatment of pebble contact in the flow and heat transfer analysis of a pebble bed reactor core. **Nuclear Engineering and Design**, v. 237, n. 22, p. p. 2183–2196, March 2007.
- LEE, J.-J.; YOON, S.-J.; PARK, G.-C.; LEE, W.-J. Turbulence-induced heat transfer in PBMR core using LES and RANS. **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 44, n. 7, p. 985–996, 2007.
- Ludwig, J.; QIN, H.; SPALDING, D. **The PHOENICS Reference Manual.** CHAM TR/200. Bakery House, London, 1989.
- MAZAIRA, L. Y. R.; DOMINGUEZ, D. S.; HERNÁNDEZ, C. R. G.; RODRIGUEZ, A. G.; LIRA, C. A. B. d. O. Realistic CFD simulation of compressible flow inside the core of the pebble bed reactor HTR-10. In: **Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics and XI Argentine Congress on Computational Mechanics.** Buenos Aires, Argentina: , 2015. p. 840–848.
- MELESE, G.; KATZ, R. **Thermal and flow design of helium-cooled reactors.** La Grange Park, IL: , 1984.
- MENTER, F. Zonal two equation $k - \omega$ model for aerodynamic flows. **AIAA Journal**, 1993.
- MENTER, F. R.; KUNTZ, M.; LANGTRY, R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence mode. In: **Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer.** Begell House, Redding, CT: , 2003.

NUREG. TRISO-Coated Particle Fuel Phenomenon Identification and Ranking Tables (PIRTs) for Fission Product Transport Due to Manufacturing, Operations, and Accidents. Washington, DC, 2004.

OECD. Nuclear Energy Today. 2. ed. 2012.

PAVLIDIS, D.; LATHOUWERS, D. Fluid flow and heat transfer investigation of pebble bed reactors using mesh-adaptive LES. **Nuclear Engineering and Design**, v. 264, p. 161–167, November 2013.

Pavlidis, D.; Lathouwers, D. Realistic packed bed generation using small numbers of spheres. **Nuclear Engineering and Design**, v. 263, p. 172–178, October 2013.

PETERSEN, H. The Properties of Helium: Density, Specific Heats, Viscosity, and Thermal Conductivity at Pressures from 1 to 100 bar and from Room Temperature to about 1800 K. Copenhagen, 1970.

PLETCHER, R. H.; TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. 3. ed. Boca Raton: , 2013. (Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences).

Powers, J. J.; Wirth, B. D. A review of TRISO fuel performance models. **J. Nucl. Mater.**, v. 405, n. 1, p. 74–82, 2010.

ROHATGI, A. WebPlotDigitizer. Austin, Texas, USA: , 2015. Disponível em: <<http://arohatgi.info/WebPlotDigitizer>>.

SAHA, P.; AKSAN, N.; ANDERSEN, J.; YAN, J.; SIMONEAU, J. P.; LEUNG, L.; BERTRAND, F.; AOTO, K.; KAMIDE, H. Issues and future direction of thermal-hydraulics research and development in nuclear power reactors. **Nuclear Engineering and Design**, v. 264, p. 3–23, November 2013.

SHAMS, A.; ROELOFS, F.; KOMEN, E. M. J.; BAGLIETTO, E. Optimization of a pebble bed configuration for quasi-direct numerical simulation. **Nuclear Engineering and Design**, v. 242, p. 331–340, January 2012.

SHAMS, A.; ROELOFS, F.; KOMEN, E. M. J.; BAGLIETTO, E. Large eddy simulation of a nuclear pebble bed configuration. **Nuclear Engineering and Design**, v. 261, p. 10–19, August 2013.

SHAMS, A.; ROELOFS, F.; KOMEN, E. M. J.; BAGLIETTO, E. Numerical simulations of a pebble bed configuration using hybrid (RANS–LES) methods. **Nuclear Engineering and Design**, v. 261, p. 201–211, August 2013.

SHAMS, A.; ROELOFS, F.; KOMEN, E. M. J.; BAGLIETTO, E. Quasi-direct numerical simulation of a pebble bed configuration. part i: Flow (velocity) field analysis. **Nuclear Engineering and Design**, v. 263, p. 473–489, October 2013.

SHAMS, A.; ROELOFS, F.; KOMEN, E. M. J.; BAGLIETTO, E. Quasi-direct numerical simulation of a pebble bed configuration, part-ii: Temperature field analysis. **Nuclear Engineering and Design**, v. 263, p. 490–499, October 2013.

- TAYLOR, J. B.; YAVUZKURT, S.; BARATTA, A. J. Modeling of the fluid and heat transfer in a pebble bed modular reactor core with a computational fluid dynamics code. In: **Proceedings of the 10th International Conference on Nuclear Engineering**. Arlington, VA: , 2002. v. 2, p. 649–658.
- TERRY, W. K.; KIM, S.-S.; BRIGGS, J. B.; SUN, Y.; TIAWO, T. **Evaluation of the initial critical configuration of the HTR-10 pebble-bed reactor**. 2005.
- TU, J.; YEOH, G.-H.; LIU, C. **Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach**. 2. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2013.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2. ed. Harlow: Pearson Education, 2007.
- WHITE, F. M. **Fluid Mechanics**. 7. ed. New York: McGraw-Hill, 2009. (Mcgraw-Hill series in mechanical engineering).
- WU, C. Y.; FERNG, Y. M.; CHIENG, C. C.; LIU, C. C. Investigating the advantages and disadvantages of realistic approach and porous approach for closely packed pebbles in CFD simulation. **Nuclear Engineering and Design**, v. 240, n. 5, p. 1151–1159, May 2010.
- WU, Z.; YU, S. HTGR projects in China. **Nuclear Engineering and Technology**, v. 39, n. 2, p. 103, 2007.
- YANG, J.; WANG, J.; BU, S.; ZENG, M.; WANG, Q.; NAKAYAMA, A. Experimental analysis of forced convective heat transfer in novel structured packed beds of particles. **Chemical Engineering Science**, v. 71, p. 126–137, March 2012.
- ZHONG, D.; XU, Y. Progress of the HTR-10 project. In: IAEA (Ed.). **Design and Development of Gas Cooled Reactors with Closed Cycle Gas Turbines**. 1996. p. 25–30.