

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR**

**COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR
CENTRO REGIONAL DE CIÊNCIAS NUCLEARES DO NORDESTE**

Programa de Pós-graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares

**MODELAGEM DETALHADA DE SISTEMAS NUCLEARES AVANÇADOS
DO TIPO LEITO DE BOLAS COM COMBUSTÍVEL ENCAPSULADO**

JESÚS ALBERTO ROSALES GARCÍA

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira
(DEN - UFPE)

Coorientador: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández
(InSTEC)

Recife - PE

Maio, 2015

JESÚS ALBERTO ROSALES GARCÍA

**MODELAGEM DETALHADA DE SISTEMAS NUCLEARES AVANÇADOS
DO TIPO LEITO DE BOLAS COM COMBUSTÍVEL ENCAPSULADO.**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares do Departamento de Energia Nuclear da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências. Área de Concentração: Engenharia de Reatores.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner Oliveira Lira

Coorientador: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández

Recife – PE

Maio, 2015

Catálogo na fonte
Bibliotecária Valdicêa Alves, CRB-4 / 1260

G215m García, Jesús Alberto Rosales.
Modelagem detalhada de sistemas nucleares avançados
do tipo leito de bolas com combustível encapsulado. / Jesús Alberto
Rosales García . - Recife: O Autor, 2015.
132folhas, Il., Abr. e Sigl., e Tabs.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner Oliveira Lira.
Coorientador: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.
Programa de Pós-Graduação de Engenharia de Energia Nuclear, 2015.
Inclui Referências e Anexos.

1. Engenharia de Energia Nuclear. 2. VHTR. 3. ADS. 4.
transmutação. 5. HTR-10. I. Lira, Carlos Alberto Brayner Oliveira.
(Orientador). II. Hernández, Carlos Rafael García. (Coorientador).
III. Título.

UFPE

621.48CDD (22. ed.)

BCTG/2015-179

MODELAGEM DETALHADA DE SISTEMAS NUCLEARES AVANÇADOS DO TIPO LEITO DE BOLAS COM COMBUSTÍVEL ENCAPSULADO

Jesús Alberto Rosales García

APROVADA EM: 18.05.2015

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

ORIENTADOR: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández

COMISSÃO EXAMINADORA:

Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira – DEN/UFPE

Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández – Dept. Eng. Nuclear/InSTEC-Cuba

Prof. Dr. José Rubens Maiorino – UFABC-SP

Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima – CRCN-NE/CNEN

Prof. Dr. Jair de Lima Bezerra – DEN/UFPE

Prof. Dra. Lázara Silveira Castrillo – UPE

Visto e permitida a impressão

Coordenador(a) do PROTEN/DEN/UFPE

“A mi familia, por enseñarme a caminar
aun cuando los perros ladren.”

AGRADECIMENTOS

A mis padres queridos, por su amor, fortaleza, comprensión.

A mi hermano y mi hermana, por su cariño y cofradía siempre (LQCC).

A mi familia grande y querida, por su ayuda y presencia en todo momento de mi vida, en especial a mis abuelos.

A Lise por su amor y espera (desesperada), y a su familia que también es mía.

A mis dos grandes tutores y amigos, Carlos García y Carlos Brayner, por sus enseñanzas y cuidados, por sus conocimientos transmitidos siempre.

Al pikete de Recife, mis hermanos de las mil batallas, Leo, Daniel, Zahily, Landy, Abel por haber estado en cada momento dispuestos a brindar la ayuda necesitada.

A mis grandes amigos, cubanos y brasileños, por todo su apoyo y cariño brindado.

A la profesora Lázara, por su ayuda en todo momento de mi trabajo en Brasil, sobre todo en los primeros meses, que fue cuando más la necesité.

A los profesores Mário, Jair, Fernando, Elmo, Araújo por la ayuda brindada siempre.

A los profesores del Dpto. de FGMyC por su apoyo incondicional.

En general, a todos los que de una forma u otra contribuyeron con su granito de arena en este resultado, a todos, MUCHAS GRACIAS.

Conteúdo

Lista de Figuras.....	8
Lista de Tabelas	10
Lista de Abreviaturas e Siglas	12
Resumo	13
Abstract	14
1 INTRODUÇÃO	15
1.1 Objetivos	18
1.2 Justificativa do trabalho	19
2 REVISÃO DA LITERATURA.....	21
2.1 Reatores de temperatura muito alta	21
2.2 Vantagens e desafios dos futuros VHTR.....	27
2.3 Transmutação	29
2.4 ADS	32
2.5 Projeto e antecedentes do TADSEA	36
2.6 Modelos geométricos para a simulação dos reatores de leito de bolas.....	44
3 MATERIAIS E MÉTODOS	51
3.1 Descrição do HTR-10.....	51
3.2 Métodos probabilísticos.....	55
3.3 MCNPX	57
3.4 Modelos computacionais para a simulação do leito de bolas do HTR-10.....	58
3.5 Descrição da tarefa de referência do HTR-10.....	65
4 VALIDAÇÃO DOS MODELOS USADOS NA SIMULAÇÃO DOS REATORES DE LEITOS DE BOLAS.....	70
4.1 Resolução da tarefa de referência do HTR-10 para o problema original	70
4.2 Resolução da tarefa de referência do HTR-10 para o problema desviado ...	76
4.3 Influência das configurações BCC e FCC nas propriedades multiplicativas do núcleo	82
4.4 Estudo do efeito de corte das partículas TRISO com a superfície da bola....	84
5 AVANÇOS NO PROJETO CONCEITUAL DO TADSEA.....	93
5.1 Projeto do núcleo.....	93
5.2 Estudo da variação da composição isotópica do combustível	105
5.3 Estudo da variação da radiotoxicidade no tempo do combustível antes e depois do seu trabalho no TADSEA	109
5.4 Projeto da blindagem do TADSEA.....	113
6 CONCLUSÕES	118

Referências	122
Anexo I: Cálculo da altura crítica do HTR-10	126
Anexo II: Cadeias de decaimento radioativo	128

Lista de Figuras

Figura 1 - Partícula TRISO.....	16
Figura 2 - Forma macroscópica do combustível dos VHTRs, bolas (esquerda), compacto (direita).....	17
Figura 3 – Resumo das instalações HTGR à escala industrial e experimental.....	21
Figura 4 - Diagrama do reator Dragon.....	22
Figura 5 - Diagrama básico do reator AVR.....	23
Figura 6 - Esquema do HTTR e futuras instalações para o uso do calor.....	25
Figura 7 - Núcleo do HTR-10.....	26
Figura 8 - Esquema básico do VHTR.....	28
Figura 9 - Ciclo avançado do combustível.....	30
Figura 10 - Conceito geral do sistema dirigido por um acelerador.....	33
Figura 11 - Esquema do núcleo do PBT.....	38
Figura 12 - Vista do alvo de espalação de prótons do PBT.....	39
Figura 13 - Elemento combustível do PBT.....	41
Figura 14 - Modelos usados na simulação do leito de bolas. Esquerda: núcleo homogêneo. Meio: núcleo homogêneo axialmente por zonas. Direita: núcleo heterogêneo.....	45
Figura 15 - Modelo FCC.....	45
Figura 16 - Procedimento para expandir uma célula unitária.....	47
Figura 17 – Seções transversais do núcleo do HTR-10. Esquerda: vertical. Direita: horizontal.....	54
Figura 18 - Esquema da barra de controle do HTR-10.....	55
Figura 19 - História do nêutron incidente.....	56
Figura 20 - Seção transversal horizontal da parte superior do HTR-10, usando MCNPX.....	59
Figura 21 - Arranjo cúbico centrado nas faces.....	60
Figura 22 - Células unitárias usadas na simulação do leito de bolas.....	61
Figura 23 - Modelo hexagonal uniforme.....	63
Figura 24 - Seção transversal vertical do modelo do HTR-10, usando MCNPX.....	64
Figura 25 - Seção transversal da barra de controle usando MCNPX.....	65
Figura 26 - Comportamento de K_{eff} com as variações da posição da barra de controle.....	76
Figura 27 - Comportamento de K_{eff} com as variações da posição da barra de controle.....	81
Figura 28 - Espectro do fluxo neutrônico para varias relações combustível/moderador nas células unitárias BCC e FCC.....	84
Figura 29 – Distribuição cúbica uniforme das partículas TRISO dentro da bola.....	85
Figura 30 - Modelo cúbico uniforme sem efeito de corte.....	86
Figura 31 – Modelo aleatório detalhado.....	87
Figura 32 - K_{inf} em função da massa de combustível na bola para os modelos estudados.....	89
Figura 33 - Comportamento do K_{eff} em função do raio do kernel.....	95
Figura 34 – Distribuições de potência axiais e radiais, absolutas e normalizadas do PBT com combustível homogêneo e heterogêneo com raio do kernel de 200 μm	97
Figura 35 - Espectro energético do PBT com combustível homogêneo e heterogêneo com raio do kernel de 200 μm	98

Figura 36 - Esquema do novo projeto do TADSEA (contém as barras absorvedoras inseridas e o projeto da blindagem).....	99
Figura 37 – Variação de K_{eff} em função da massa de combustível na bola para o TADSEA.....	101
Figura 38 - Densidade de potência axial do TADSEA para 4,5g de massa na bola para a primeira carga.	102
Figura 39 – Espectro energético por unidade de letargia para o núcleo do TADSEA com 4,5g de massa de combustível na bola para a primeira carga.	102
Figura 40 - Coeficientes de reatividade por temperatura do moderador.	104
Figura 41 – Comparação das distribuições axiais da densidade de potência para a primeira carga e o estado estacionário do TADSEA.	107
Figura 42 - Variação das massas dos isótopos do plutônio no núcleo do TADSEA.	108
Figura 43 - Variação das massas dos actínídeos menores no núcleo do TADSEA.	109
Figura 44 - Variação da radiotoxicidade por inalação no tempo.	111
Figura 45 - Principais contribuintes à radiotoxicidade para os tempos estudados, antes e depois do trabalho no TADSEA.	112
Figura 46 - Fluxo neutrônico e a taxa de dose em função da blindagem biológica.	116

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Composição do combustível irradiado depois de 10 anos de decaimento.....	32
Tabela 2 - Projetos principais no âmbito da transmutação e os ADS.....	35
Tabela 3 - Massa dos transurânicos no combustível nuclear irradiado nos LWR (40 GWd/ton U, 15 anos de decaimento) e composição do combustível do PBT.....	36
Tabela 4 - Composição do combustível do PBT por bola e por partícula TRISO.....	37
Tabela 5 - Principais características do PBT e do TADSEA.....	43
Tabela 6 - Principais grandezas de projeto do HTR-10.....	52
Tabela 7 - Características dos elementos combustíveis e as bolas.....	53
Tabela 8 - Resultados obtidos para o cálculo da altura crítica por outros participantes do CRP e no nosso trabalho.....	71
Tabela 9 - K_{eff} em função da temperatura do núcleo.....	72
Tabela 10 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência original B2.....	72
Tabela 11 - Efetividade das barras de controle para o núcleo completo.....	74
Tabela 12 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B3.....	74
Tabela 13 - Efetividade das barras de controle para a carga inicial do núcleo.....	75
Tabela 14 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B4.....	75
Tabela 15 - Efetividade diferencial de uma barra de controle.....	75
Tabela 16 - Resultados obtidos para o cálculo da altura crítica por outros participantes do CRP e no nosso trabalho.....	77
Tabela 17 - K_{eff} em função da temperatura do núcleo.....	78
Tabela 18 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência desviado B2.....	78
Tabela 19 - Efetividade das barras de controle para o núcleo completo.....	79
Tabela 20 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B3.....	79
Tabela 21 - Efetividade das barras de controle para a carga inicial do núcleo.....	80
Tabela 22 - Efetividade diferencial de uma barra de controle.....	80
Tabela 23 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B4.....	81
Tabela 24 - Valores de K_{eff} para as diferentes alturas usando as configurações das bolas FCC e BCC.....	82
Tabela 25 - Valores de K_{inf} para os modelos estudados para diferentes valores de massa de combustível na bola.....	88
Tabela 26 - Resultados obtidos no estudo da intercepção das partículas dentro da bola para os modelos cúbico e hexagonal uniforme.....	90
Tabela 27 - Resultados de K_{eff} em função da altura do núcleo do HTR-10 usando os modelos estudados.....	92
Tabela 28 - K_{eff} em função do raio do kernel.....	95
Tabela 29 - Parâmetros geométricos e materias do novo projeto do TADSEA.....	100
Tabela 30 - Coeficientes de reatividade por temperatura do moderador.....	103
Tabela 31 - Efetividade das barras de controle no TADSEA para as massas de combustível nas bolas estudadas.....	105
Tabela 32 - Composição da blindagem biológica SHAEFFER PORTLAND.....	114

Tabela 33 - Resultados para o cálculo do fluxo neutrônico e a taxa de dose em função da espessura da blindagem.	115
Tabela 34 – K_{eff} em função da altura do núcleo do reator HTR-10 (Problema de referência original).	126
Tabela 35 - K_{eff} em função da altura do núcleo do reator HTR-10 (Problema de referência desviado).....	127

Lista de Abreviaturas e Siglas

- ADS: Accelerator Driven Systems.
- AM: Actínídeos Menores.
- AVR: Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor.
- BISO: Bi-structural Isotropic or Buffer Isotropic.
- BCC: Body-centered cubic.
- Ciclo I-S: Ciclo de Iodo-Enxofre.
- CRP: Programas de pesquisa coordenados
- CRTM: coeficiente de reatividade por temperatura do moderador.
- DOE: Department of Energy, United States.
- D.P: Desvio padrão.
- D/T: Difusão/Transporte.
- e : coeficiente de incorporação do isótopo.
- FCC: Face-centered cubic.
- FSV: Fort St. Vrain.
- GA: General Atomics.
- GT-MHR: Gas Turbine-Modular Helium Reactor.
- HTGR: High Temperature Gas Reactor.
- HTR-10: High Temperature Reactor of 10 MW.
- HTR-PM: High Temperature Reactor-Pebble bed Modules.
- HTTR: High Temperature Test Reactor.
- IAEA: International Atomic Energy Agency.
- INET: Instituto de Energia Nuclear e Tecnologia, Universidade de Tsinghua (China).
- IXH: Intermediate Exchanger Heat.
- INL: Idaho National Laboratory.
- JAEA: Japan Atomic Energy Agency.
- k_1 : K_{eff} com barras absorvedoras inseridas.
- k_2 : K_{eff} sem barras absorvedoras inseridas
- K_{eff} : coeficiente de multiplicação efetiva dos nêutrons.
- K_{inf} : coeficiente multiplicação dos nêutrons em um meio infinito.
- Li: Lado do cubo.
- LINAC: Linear Accelerator
- LLFP: Long Life Fission Products.
- LWR: Light Water Reactor.
- NEA: Nuclear Energy Agency.
- M: Monte Carlo.
- MCNP: Monte Carlo N-Particle transport.
- MCNPX: Monte Carlo N-Particle transport eXtended.
- P & T: Partitioning and Transmutation.
- PBMR: Pebble Bed Modular Reactor.
- PCEs: Partículas de Combustível Encapsulado.
- PF: Fração de empacotamento.
- PyC: Pyrolytic Carbon.
- TADSEA: Transmutation Advanced Device for Sustainable Energy Applications.
- THTR: Thorium High Temperature Reactor.
- TOE: Trabalhador Ocupacionalmente Exposto.
- TRISO: tri-structural-isotropic.
- TRU: Elementos Transurânicos.
- VHTR: Very High Temperature Reactor.
- VSOP: Computer Code System for Reactor Physics and Fuel Cycle Simulation.
- ρ_w : Efetividade das barras absorvedoras

MODELAGEM DETALHADA DE SISTEMAS NUCLEARES AVANÇADOS DO TIPO LEITO DE BOLAS COM COMBUSTÍVEL ENCAPSULADO

Autor: Jesús Alberto Rosales García

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

Coorientador: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández

Resumo

A sustentabilidade da energia nuclear dependerá, entre outros fatores, da capacidade de redução dos inventários dos resíduos nucleares de vida longa. Com esse objetivo, desenvolveu-se a nova geração de reatores nucleares, com seis protótipos que se destacam por sua segurança, resistência à proliferação e a gestão dos resíduos. Dentro dessa nova geração de reatores, encontram-se os reatores de temperatura muito alta (VHTR), pela capacidade de produzir energia e a obtenção de altas temperaturas na saída do refrigerante, para seu uso em aplicações de alta temperatura como a produção de hidrogênio. Os ADS (Accelerator Driven Systems), que podem ser projetados como VHTR, são sistemas projetados para a redução dos elementos transurânicos provenientes dos LWRs (Light Water Reactors).

O TADSEA (Transmutation Advanced Device for sustainable Energy Applications) é um ADS do tipo leito de bolas, projetado para atingir uma queima profunda dos elementos transurânicos, a produção colateral de energia e a obtenção de altas temperaturas para produzir hidrogênio. O presente trabalho têm como objetivo realizar melhoras no projeto conceitual do TADSEA, através da simulação geométrica detalhada do combustível, para o qual foi desenvolvida e avaliada uma metodologia para a modelagem computacional detalhada da dupla heterogeneidade do combustível em um leito de bolas, usando o código probabilista MCNPX. Foram incluídos novos elementos no projeto como a blindagem, as barras absorvedoras para garantir a segurança do sistema, e foi avaliado o desempenho na redução dos resíduos e sua radiotoxicidade associada, assim como a produção de energia.

Palavras-chave: VHTR; ADS; transmutação, HTR-10

DETAILED SIMULATION OF ADVANCED PEBBLE BED NUCLEAR SYSTEMS USING COATED FUEL

Author: Jesús Alberto Rosales García

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

Co-advisor: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández

Abstract

The sustainability of nuclear energy will depend of the capability reduction of the inventories of long-lived nuclear waste. With this goal, it was developed the new generation of nuclear reactors with six prototypes, which stand out for their safety, proliferation resistance and the waste management. Within this new reactors generation, there is the very high temperature reactor (VHTR), designed to produce energy and to obtain high temperatures in the coolant, for their use in high temperature applications such as hydrogen production. The ADSs, which can be designed as VHTRs, are systems designed to reduce the mass of transuranic elements coming from the LWRs.

The TADSEA is an ADS, pebble bed type, designed to achieve deep burning levels in the fuel, the power generation, and to obtain high temperatures to produce hydrogen. The aim of this study is to make the TADSEA conceptual re-design, by means of a detailed fuel geometric simulation, for which it was developed and evaluated a methodology for the detailed computational simulation of the fuel double heterogeneity in pebble-bed nuclear core, using the probabilistic code MCNPX. New design elements such as the shield and absorbers bars were included, and the performance in the reduction of nuclear waste and their associated radiotoxicity as well as the energy production were evaluated.

Keywords: VHTR; ADS; transmutation, HTR-10

1 INTRODUÇÃO

O rápido crescimento da população mundial, o processo de desenvolvimento dos países emergentes e as instabilidades políticas que têm confrontado o mundo durante décadas têm aumentado os desafios energéticos. Apesar dos grandes esforços para reduzir o uso dos combustíveis fósseis, a maior parte do crescimento da demanda de energia está sendo fornecida pelos hidrocarbonetos. Mesmo em países que estão politicamente comprometidos com uma forte política de mitigação da mudança climática e com as políticas de segurança de energia, novas chaminés estão crescendo tão rapidamente no céu como as turbinas eólicas. O estabelecimento da exploração de gás em grande escala nos EUA provocou uma queda significativa dos preços do carvão, tornando a produção de energia a partir de carvão financeiramente mais atraente para muitas utilidades em muitos países. Atualmente, a tendência do consumo de combustíveis fósseis, a longo prazo parece não parar (FUTTERER et al., 2014).

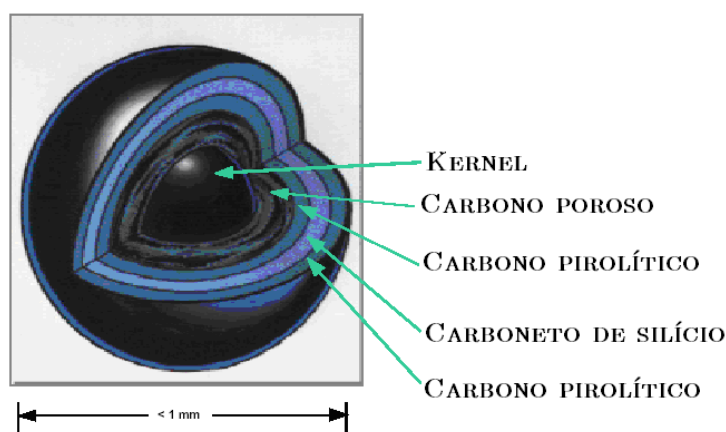
A energia nuclear, junto com a economia de energia e o desenvolvimento das energias renováveis, pode ser parte da solução dos desafios energéticos descritos, mas o acidente de Fukushima Daiichi tem enfatizado a necessidade de projetos de reatores particularmente seguros.

Nesse contexto, as características atraentes de segurança passiva que apresentam os reatores de temperatura muito alta, refrigerados a gás (VHTR), de médio porte (600 MWT) permanecem como uma particular vantagem. O VHTR foi selecionado em 2002 como um dos seis reatores conceituais que tem o potencial para completar os critérios de desempenho do Fórum Internacional da Geração IV (GIF). Isso inclui avanços na sustentabilidade, economia, segurança, confiabilidade, resistência à proliferação e proteção física (U.S. DOE NUCLEAR ENERGY RESEARCH ADVISORY COMMITTEE AND THE GENERATION IV INTERNATIONAL FORUM, 2002).

O VHTR pode contar com a experiência adquirida entre os anos 60 e a atualidade, dos reatores e protótipos experimentais nos EUA (Peach Bottom, Fort St. Vrain (FSV)), na Alemanha (AVR (Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor)), THTR (Thorium High Temperature Reactor), no Japão (HTTR (High Temperature Test Reactor)) e na China (HTR-10 (High Temperature Reactor-10 MW)), os dois últimos atualmente em funcionamento.

Um dos maiores desafios e a chave para o desenvolvimento do reator com um núcleo totalmente cerâmico, foi o desenvolvimento do combustível. Primeiramente, foi desenvolvida a partícula BISO (Bi-structural isotropic) e, mais tarde a partícula TRISO, na qual é adicionada uma camada de carboneto de silício (SiC) às camadas de grafite existentes na partícula para uma eficiente retenção dos produtos de fissão a temperaturas de 1600°C e ainda maiores. Essas partículas TRISO (Tri-structural isotropic) constituem a base dos projetos modernos dos reatores de alta temperatura (HTR). A Figura 1 mostra as características de uma partícula TRISO, o núcleo, a camada de carbono poroso para assimilar os inchamentos do combustível e a retenção dos produtos de fissão gasosos, a camada interior de PyC (Pyrolytic carbon) e a camada de SiC como barreiras contra a difusão dos produtos de fissão metálicos e, finalmente, a camada exterior de PyC que fornece suporte e proteção às camadas mais internas.

Figura 1 - Partícula TRISO.



(VENNERI et al., 2001)

As partículas TRISO inseridas em uma matriz de grafite aleatoriamente adquirem uma forma macroscópica, usualmente em forma de cilindros chamados “compactos” ou como elementos combustíveis esféricos chamados “bolas” de 6 cm de diâmetro (Figura 2). Os compactos são inseridos em blocos hexagonais de grafite e são montados para constituir o núcleo do reator. No outro caso, as bolas enchem o espaço central do vaso do reator, e o leito de bolas resultante constitui o núcleo do mesmo. Essas bolas apresentam uma distribuição aleatória dentro do núcleo, o qual é uma cavidade cilíndrica com paredes de grafite. Em alguns projetos, como o HTR-10, o núcleo é preenchido com bolas de combustível e bolas de grafite em uma proporção determinada na primeira carga. Devido

à natureza estocástica desses leitos, não está bem definida a posição exata das bolas dentro do núcleo nem a posição exata das partículas TRISO dentro das bolas. Os núcleos do tipo leito de bolas são caracterizados por uma recirculação contínua das mesmas desde a parte superior até a parte inferior do núcleo (estratégia de recarga contínua do combustível). Quando as bolas chegam à parte inferior do núcleo, seu nível de queima é verificado medindo-se a sua atividade. Então, se a bola ainda é capaz de produzir energia é introduzida novamente; no caso contrário, a bola é separada para o seu posterior reprocessamento, ou levada para um depósito temporário de combustível irradiado. As bolas podem recircular até 10 vezes ao longo do núcleo até que atinjam o grau de queima desejado, de modo que as condições de irradiação e a queima nos núcleos variam em função do tempo.

Figura 2 - Forma macroscópica do combustível dos VHTRs, bolas (esquerda), compacto (direita).



(VENNERI et al., 2001)

Os reatores de leito de bolas têm várias vantagens operacionais e de segurança: por exemplo, alguns projetos são controlados por efeitos de temperatura, e não por barras de controle, ou seja, o projeto do reator é tal que se pode controlar a potência de maneira inerente devido ao alargamento Doppler, o núcleo gera menos potência na medida que aumenta a temperatura. O reator pode ser projetado de modo que, a densidades de potência muito baixas, têm a capacidade de dissipar mais calor através das paredes que aquele gerado no núcleo, permitindo, no caso de acidente, remover o calor residual por métodos passivos. Outra vantagem é a possibilidade de recarga contínua do combustível:

as bolas podem ser extraídas do núcleo desde a parte baixa do reator e ser inseridas pela parte superior, evitando ter de desligar o reator durante a recarga. Esse tipo de recarga evita também que exista um excesso de reatividade no núcleo, e, além disso, permite inspecionar as bolas em todo momento.

Outra possibilidade dos reatores de leito de bolas é que são capazes de usar bolas com diferentes tipos de combustível dentro do mesmo projeto básico do reator (embora não seja durante o mesmo tempo). Uma variante dos reatores de leito de bolas que responde à sustentabilidade da energia nuclear são os chamados ADS, os quais são estudados e projetados na atualidade para a transmutação dos resíduos nucleares provenientes dos reatores de água leve. Os ADS são núcleos subcríticos acoplados a um acelerador de prótons de altas energias que reagem com um alvo de espalação e fornecem os nêutrons necessários para manter a reação em cadeia.

O projeto e estudo das principais características dos sistemas nucleares de Geração IV e dos sistemas híbridos para a transmutação dos resíduos nucleares são um tema de grande atualidade no campo da engenharia nuclear.

1.1 Objetivos

O trabalho tem como objetivo melhorar o projeto conceitual do TADSEA, um ADS do tipo leito de bolas, refrigerado a gás hélio e moderado a grafite, que usa combustível TRISO, para a transmutação de resíduos nucleares e a produção de energia.

Objetivos Específicos:

- Desenvolver uma metodologia para a descrição geométrica detalhada do combustível, que considera a dupla heterogeneidade do núcleo dada pelas bolas no núcleo e as partículas TRISO dentro das bolas;
- Estudar e comparar os modelos para a distribuição geométrica das partículas TRISO dentro das bolas quanto à sua influência na exatidão do cálculo das propriedades multiplicativas, assim como a influência do efeito de corte e as dificuldades na construção;
- Estudar e comparar os modelos BCC (Body-Centered Cubic) e FCC (Face-Centered Cubic) para a simulação do leito de bolas quanto à sua influência

na exatidão do cálculo das propriedades multiplicativas do núcleo e o espectro dentro das células unitárias;

- Validação dos modelos empregados na simulação do leito de bolas comparando-se os resultados calculados para a tarefa de referência do HTR-10 com os resultados experimentais e calculados por outros autores;
- Incluir e estudar, no projeto conceitual do TADSEA, elementos de segurança como as barras absorventes e estudar a eficiência dessas barras na primeira carga;
- Considerar uma composição do núcleo em estado estacionário de acordo a uma estratégia de recarga contínua do TADSEA, de tal forma, que seja obtido um perfil axial de liberação de energia mais uniforme;
- Estudar a variação da concentração isotópica do combustível proveniente do combustível irradiado nos LWR, no núcleo do TADSEA com a queima e estudar a variação temporal da radiotoxicidade dos resíduos na saída do núcleo do TADSEA;
- Realizar o projeto preliminar da blindagem do TADSEA.

1.2 Justificativa do trabalho

O presente trabalho justifica-se devido aos problemas que existem atualmente com respeito à gestão dos resíduos nucleares de vida longa, que repercutem na baixa aceitação atual da energia nuclear como uma fonte segura e sustentável, e à necessidade de produzir hidrogênio sem emissões de CO₂. Os sistemas híbridos do tipo leito de bolas refrigerados a gás, projetados para usar elementos transurânicos como combustível encapsulado em forma de partículas TRISO são capazes de fornecer a solução aos problemas mencionados devido à capacidade de obter energia de forma segura e eficiente, assim como reduzir o inventário dos elementos transurânicos de vida longa. Além disso, podem-se obter altas temperaturas do refrigerante na saída do núcleo, o que fornece uma forma eficiente de produzir hidrogênio cumprindo-se com os requisitos anteriores. Também apresenta a vantagem de atingir um alto grau de queima do combustível e, assim, ser capaz de transmutar os elementos transurânicos e reduzir a massa e a radiotoxicidade associada aos mesmo em um ciclo de um passo.

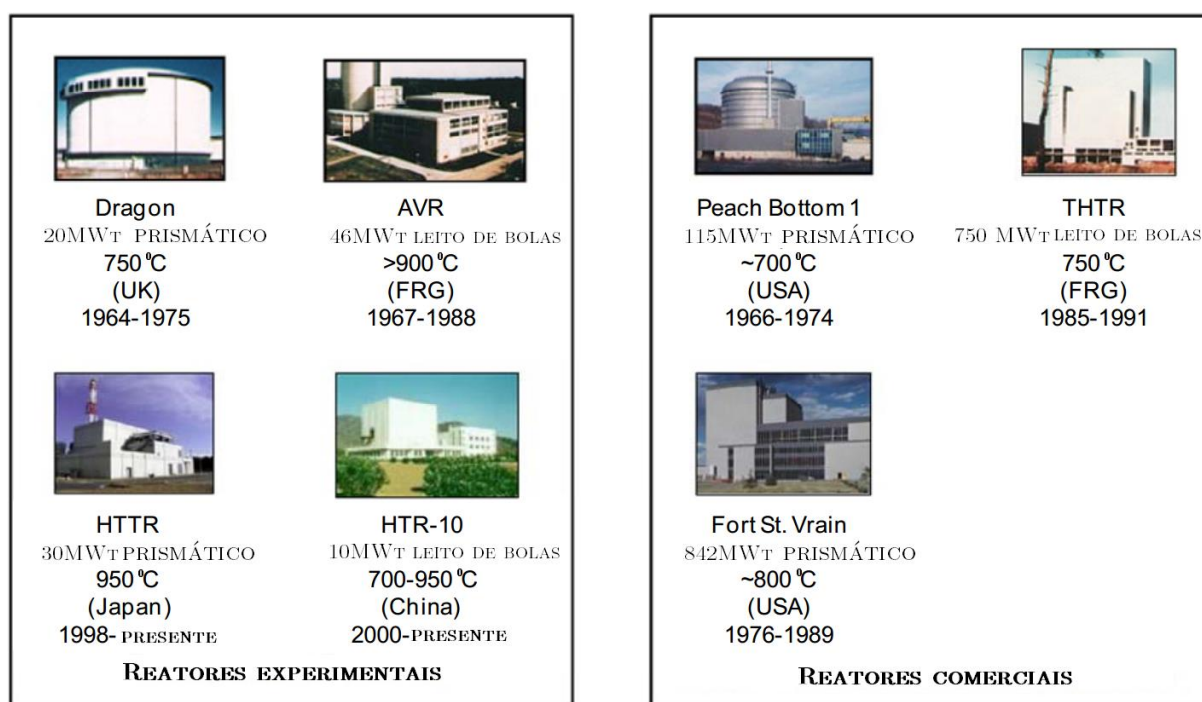
Por outro lado, os modelos utilizados para os projetos conceituais anteriores do TADSEA empregavam uma mistura homogênea do combustível, o que não esgota todas as possibilidades de análise do comportamento de diferentes parâmetros neutrônicos. Uma descrição geométrica detalhada do combustível permitiria aprofundar no conhecimento do comportamento de diferentes parâmetros neutrônicos e completar o projeto conceitual das instalações mencionadas.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Reatores de temperatura muito alta

Os reatores de alta temperatura refrigerados a gás têm sido projetados e operado desde a década de 60. A Figura 3 mostra um resumo das instalações HTGR (High Temperature Gas Reactor) à escala comercial e experimental.

Figura 3 – Resumo das instalações HTGR à escala industrial e experimental.

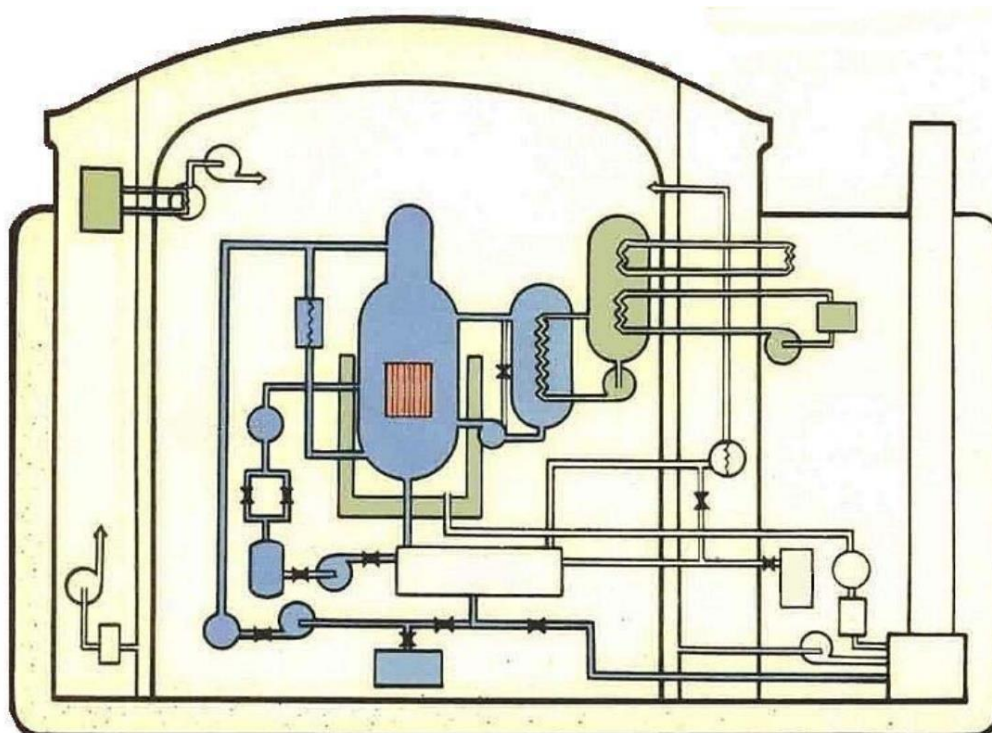


(FUTTERER et al., 2014)

O primeiro reator construído foi o de testes de 20 MWt Dragon, no Reino Unido (Figura 4). O projeto Dragon foi liderado pela Organização para a Cooperação Económica e o Desenvolvimento, operado desde 1964 até 1975. O principal objetivo do reator Dragon foi o teste de combustíveis, elementos combustíveis e materiais estruturais. Mais especificamente, os novos combustíveis revestidos, filosofias de projeto e comportamentos submetidos a irradiação foram testados para fornecer suporte ao desenvolvimento do reator FSV e o reator THTR. O reator Dragon trabalhava a 20 MWt e usava hélio como refrigerante principal, com temperaturas na entrada e na saída de 350°C e 750°C, respectivamente. O núcleo foi projetado como um bloco prismático e o

combustível inicial usado foi o urânio e o tório altamente enriquecido, mas, devido às dúvidas com respeito à disponibilidade a longo prazo, o Dragon mudou para o combustível baseado em urânio com baixo enriquecimento. Embora tenha sido projetado para testes de combustível, o Dragon forneceu experiências importantes como as rachaduras pelo cloreto nas tubulações do sistema de refrigeração secundário (BECK et al., 2010).

Figura 4 - Diagrama do reator Dragon.



(FUTTERER et al., 2014)

Depois do Dragon, foram construídos dois reatores de baixa potência, o Peach Bottom 1 nos Estados Unidos e o AVR na Alemanha. O Peach Bottom 1 foi o primeiro reator HTGR construído nos Estados Unidos e foi adquirido e operado pela Empresa elétrica da Filadélfia e continuou em operação desde 3 de março de 1966 até 31 de outubro de 1974. Peach Bottom 1 foi fechado por ter completado sua missão de demonstração e porque não era rentável devido ao seu tamanho. Esse reator era capaz de produzir 115 MWt, equivalentes a 40 MWe, usava hélio como refrigerante principal que entrava com uma temperatura de 327°C e saía a 700°C. Os elementos combustíveis, que foram originalmente revestidos de uma camada de PyC, eram prismáticos e usavam carbonetos de urânio e tório como combustível. Depois de algum tempo em operação, a

atividade do reator poderia continuar-se incrementando devido à falha do revestimento do combustível. O combustível foi substituído pelo combustível BISO, o qual tem uma camada interna de grafite buffer que continha os produtos de fissão e outra camada externa que retinha os gases nobres da fissão. O combustível BISO trabalhou corretamente no Peach Bottom 1, mas apresentava deficiências a altas temperaturas. A camada de SiC foi adicionada mais tarde ao projeto do combustível revestido, chamado atualmente combustível TRISO e usado mais tarde no reator FSV, o qual demonstrou uma melhora importante na retenção dos produtos de fissão. Essa melhora também levou ao abandono do sistema de purga do gás que era necessário nos reatores que usavam combustível BISO, como o Peach Bottom 1. O Peach Bottom 1 forneceu experiências importantes, dentre elas, o ingresso do óleo por parte dos circuladores (BECK et al., 2010).

O AVR foi o primeiro reator nuclear construído na República Federativa da Alemanha e foi projetado como uma instalação experimental de potência para os reatores de leito de bolas com propósitos adicionais como o teste de combustíveis. O AVR foi situado no Centro de Pesquisas Jülich e manteve-se em operação por 20 anos, aproximadamente, desde 1967 até 1988. A Figura 5 mostra o diagrama básico do projeto do reator AVR. Esse reator era capaz de produzir 46 MWt, equivalentes a 15 MWe e usava hélio como refrigerante principal.

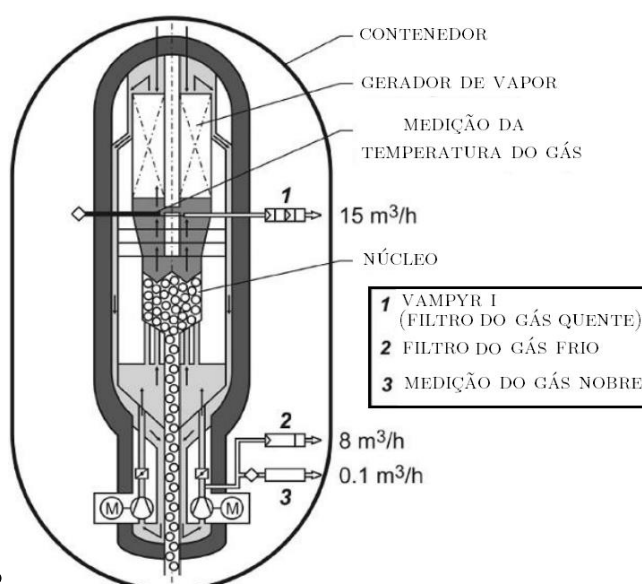


Figura 5 - Diagrama básico do reator AVR.

(FUTTERER et al., 2014)

As temperaturas do hélio na entrada e na saída eram de 275°C e 950°C, respectivamente. O combustível usado eram óxidos de urânio e tório em forma de BISO.

Um dos principais problemas do AVR foi o pó de grafite e a sua mobilidade. O circuito primário estava fortemente contaminado com produtos de fissão metálicos (Sr^{90} e Cs^{137}). Concluiu-se que a causa principal da contaminação do AVR foram as altas temperaturas do núcleo, as quais incrementaram a taxa de liberação dos produtos de fissão (BECK et al., 2010).

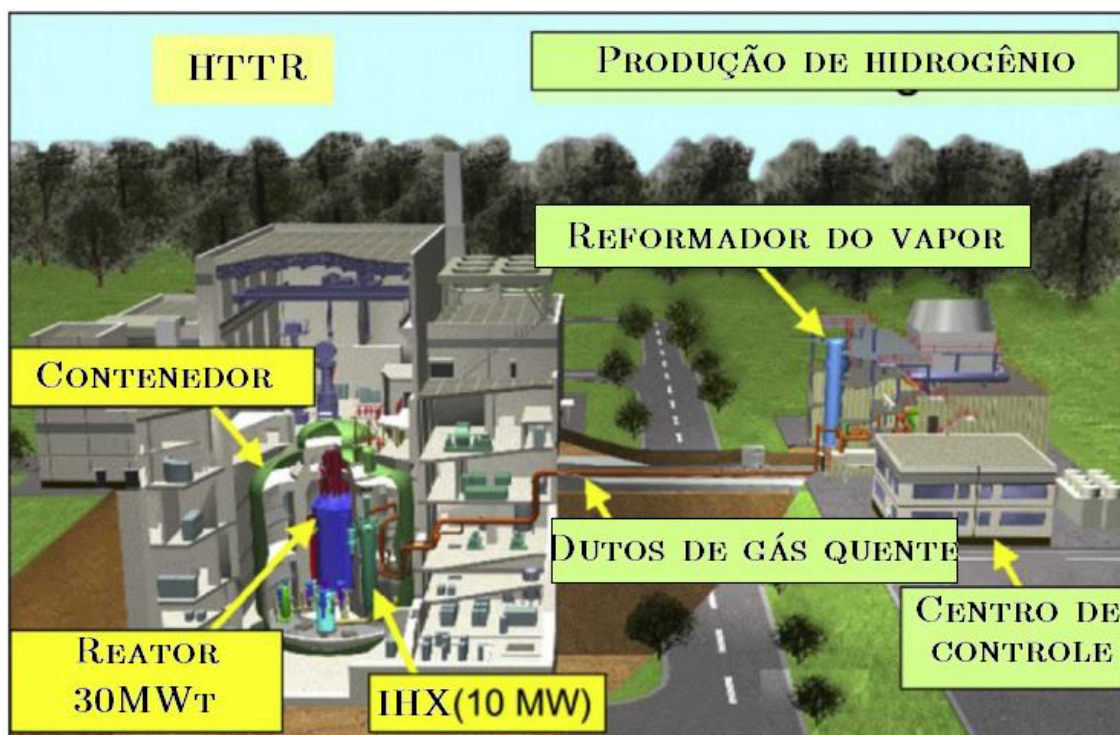
Outro HTGR do tipo prismático foi o FSV construído nos Estados Unidos, projetado pela companhia General Atomics que usou Peach Bottom 1 como base para o projeto. O reator FSV esteve em operação desde 1974 até 1989 e operava a 842 MWt para uma saída de 330 MWe. O hélio de alta temperatura era usado como refrigerante principal para produzir vapor reaquecido e superaquecido a, aproximadamente, 538°C. O hélio entrava ao reator a 404°C e saía do reator ao gerador de vapor a 777°C. O reator era contido dentro de um vaso de concreto pré-esforçado e usava um projeto de bloco prismático para os elementos combustíveis. O combustível usado era uma mistura de carbonetos de urânio e tório em forma de partículas TRISO. O FSV teve vários problemas mecânicos e dele foram aprendidas lições, tais como os rolamentos lubrificados pela água nos circuladores e as bolas de controle coladas umas às outras (BECK et al., 2010).

O THTR foi uma usina nuclear patrocinada pela República Federativa da Alemanha e Nordrhein Westfalen. A construção dessa usina começou em 1971, mas, devido a mudanças de requerimentos de licença, foi completada em 1984. Esse reator de leito de bolas foi conectado à rede elétrica em novembro de 1985. Em agosto de 1989, foi tomada a decisão de desligar a usina permanentemente por razões sócio-políticas e não por problemas técnicos associados à usina. O THTR tinha uma potência de saída de 750 MWt equivalente a 300 MWe e usava hélio como refrigerante principal. O hélio entrava ao reator a 250°C e saía a 750°C, o vaso era de concreto pré-esforçado e as partículas combustíveis usavam óxidos de urânio e tório. O THTR demonstrou a segurança inerente dos HTGR, incluindo dados do núcleo e dados de transientes da usina (BECK et al., 2010).

O HTTR foi o primeiro HTGR no Japão, construído no estabelecimento de pesquisas de Oarai do Instituto de Pesquisas de Energia Atômica de Japão. O propósito do HTTR foi estabelecer e melhorar as tecnologias dos HTGR, assim como a utilização do calor de origem nuclear. Esse reator atingiu a sua primeira criticalidade em novembro de 1998 e atingiu a potência plena de 30 MWt em dezembro de 2001. O hélio é usado como refrigerante no circuito primário e entra ao reator desde o trocador de calor intermediário (IXH, sigla em inglês) aproximadamente a 400°C e sai a uma temperatura

de 850°C, mas com possibilidades de sair a 950°C. Esse reator usa elementos combustíveis do tipo prismático e partículas TRISO de dióxido de urânio como partículas combustíveis. É uma excelente referência para os futuros projetos porque ainda está em operação e possui um excelente desempenho a altas temperaturas (Figura 6). Algumas preocupações, como a oxidação do grafite e algumas anomalias das temperaturas, são lições aprendidas desse reator.

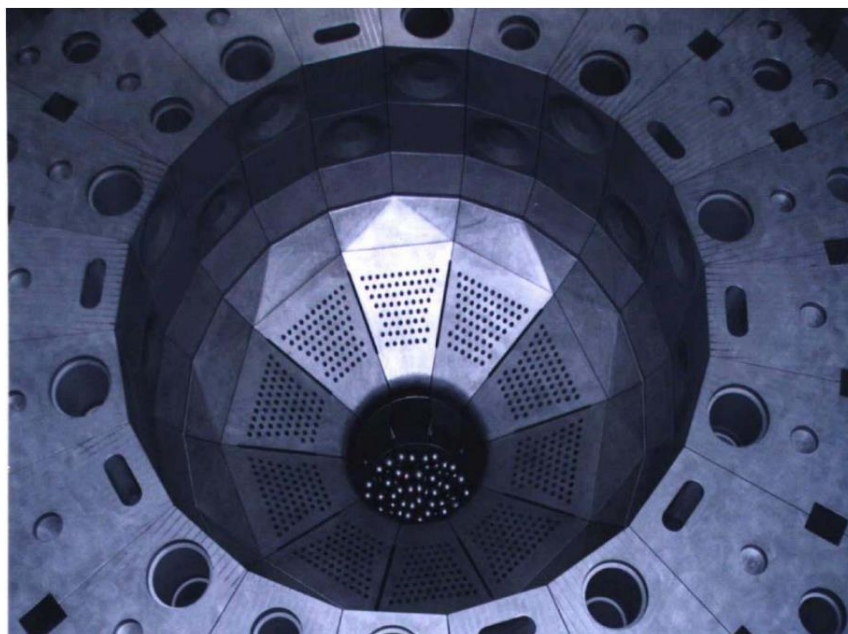
Figura 6 - Esquema do HTTR e futuras instalações para o uso do calor.



(FUTTERER et al., 2014)

O HTR-10 foi projetado e construído pelo Instituto de Tecnologias Nucleares e Novas Energias da China como um reator de testes para o seu uso posterior em testes dos HTGR para a geração de energia elétrica. Esse reator tornou-se crítico em 2000, atingiu a potência plena em 2003 e atualmente opera a 10 MWt. A Figura 7 mostra uma imagem do núcleo e as especificações técnicas vão ser tratadas com maior detalhe na Seção 3.1. As temperaturas do hélio na entrada e na saída do núcleo são de 250°C e 700°C, respectivamente. O núcleo do HTR-10 é um leito de bolas que usa partículas TRISO compostas de dióxido de urânio (FUTTERER et al., 2014).

Figura 7 - Núcleo do HTR-10.



(FUTTERER et al., 2014)

Um dos projetos mais importantes da tecnologia dos leitos de bolas era o Reator Modular de Leito de Bolas (PBMR), na África do Sul. A PBMR Pty. Ltd foi uma colaboração pública-privada que se estabeleceu em 1999 em resposta às ameaças de cortes energéticos ao nível nacional, e para iniciar o desenvolvimento de um reator modular de leito de bolas com uma capacidade nominal de 165 MWe. Esse projeto apresenta uma potência térmica de 400 MWt e uma conversão direta com uma turbina de gás e uma temperatura do hélio na saída de 900°C. Em junho de 2003, o governo da África do Sul aprovou um protótipo de 110 MWe para a utilidade ESKOM localizada em Koeberg. Esse protótipo estava destinado a entrar em serviço em 2014, preceder a inclusão de 24 PBMR e, assim, fornecer 4000 MWe dos 12000 MWe planejados como capacidade elétrica para o 2030. Outras grandes instalações dedicadas a testes de tecnologias específicas dos PBMR foram realizadas em 2007: uma “instalação de testes de transferência de calor”, uma “instalação para testes do hélio”, um “micromodelo do leito de bolas”, e um ventilador eletromagnético. Além disso, tinham um laboratório de combustível que desenvolveu processos de fabricação e técnicas de testes de controle de qualidade com sucesso de partículas combustíveis revestidas com urânio enriquecido em dezembro de 2008. Em 2009, o projeto do PBMR, assim como outros projetos de equipamento nuclear na África do Sul, apresentaram problemas de recursos e tiveram que reorientar seu plano de negócios ao fornecimento de calor para processos industriais, uma tarefa muito difícil em

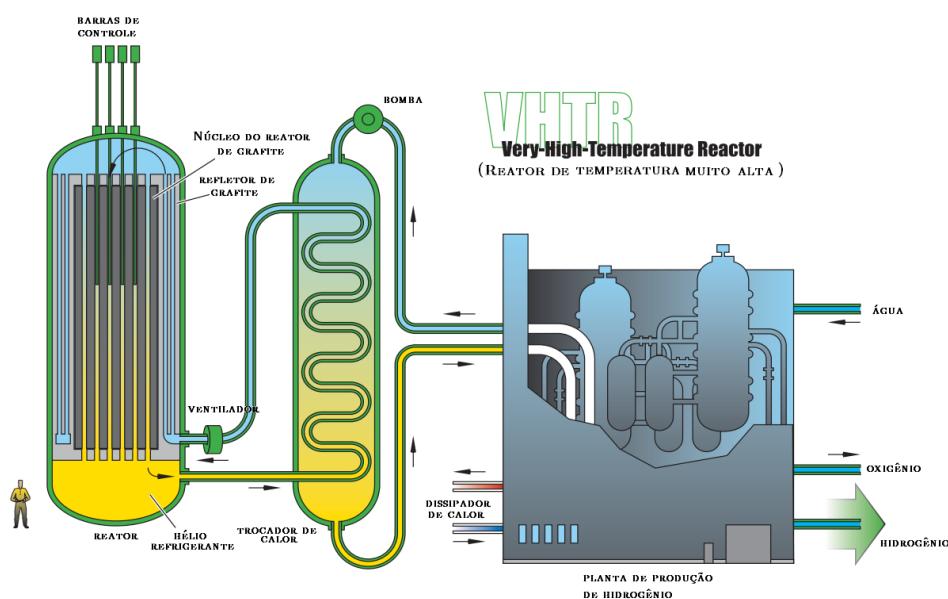
um país com grandes reservas de carvão e sem limites nas emissões de CO₂. O novo objetivo do PMBR foi a produção de energia no local, cogeração, dessalinização da água do mar e processos diretos de fornecimento de calor. Os objetivos dos processos de aplicações de calor incluíam petroquímica, produção de amoníaco e fertilizantes, refinarias, vapor para a recuperação da areia petrolífera, hidrogênio para o transporte futuro e dessalinização da água. Portanto, o PBMR Ltd. começou a desenvolver opções para frotas comerciais com Sasol (Companhia de liquefação do carvão de África do Sul), com Eskom para a eletricidade, assim como usuários de cogeração dos Estados Unidos e do Canadá. Devido a problemas de financiamento e problemas de interação entre PBMR e reguladores de África do Sul, o projeto foi parado em 2010 (FUTTERER et al., 2014).

2.2 Vantagens e desafios dos futuros VHTR

Os projetos dos VHTR baseados na experiência acumulada dos reatores de alta temperatura oferecem promissoras características de desempenho. O sistema é altamente classificado economicamente devido à sua alta eficiência na produção de hidrogênio, confiabilidade pela segurança inerente que apresentam o reator e o combustível. Também está classificado como bom em resistência à proliferação e proteção física, e avaliado de neutro respeito à sustentabilidade devido ao seu ciclo aberto do combustível. Esses projetos também prometem a operação a altos graus de queima do combustível, uma grande margem para a falha do combustível e uma excelente retenção dos produtos de fissão através do projeto do combustível TRISO. A capacidade de produzir calor acima dos 900°C os faz muito apropriados para processos de cogeração do calor e energia (Figura 8). Essa característica permite que eles possam produzir hidrogênio através da eletrólise do vapor ou processos termoquímicos, para fornecer hidrogênio e calor de alta temperatura para produzir combustíveis sintéticos do carvão, biomassa ou captura do CO₂, assim como a produção de reagentes químicos para uma variedade de instalações industriais, incluídas a petroquímica, a produção de fertilizantes e a produção de aço (FUTTERER et al., 2014). O conceito do reator VHTR foi baseado em dois projetos fundamentais: o projeto da General Atomics para produzir 600 MWt, refrigerado a hélio, que usa combustível prismático (Reator Modular de Turbina de Gás hélio, GT-MHR) ou do tipo leito de bolas como o PBMR. São reatores de médio porte, uma característica atrativa que cumpre com os requisitos dos investidores, e faz com que

sejam muito competitivos com respeito aos grandes sistemas monolíticos. O circuito primário está conectado com um reformador de vapor e um gerador de vapor para o processo de entrega do calor. O sistema pode incorporar equipes de geração de energia para satisfazer às necessidades de cogeração. O sistema tem a flexibilidade para adotar ciclos combustíveis de urânio-plutônio, urânio-tório (GARCÍA et al., 2013), e oferecer uma maior minimização dos resíduos. Considera-se que o VHTR é o sistema de produção de hidrogênio com menor prazo, estimada a sua construção para o 2020.

Figura 8 - Esquema básico do VHTR.



(U.S. DOE NUCLEAR ENERGY RESEARCH ADVISORY COMMITTEE AND THE
GENERATION IV INTERNATIONAL FORUM, 2002)

Os VHTR requerem avanços significativos no desempenho dos combustíveis e materiais a altas temperaturas, os quais se podem nutrir das experiências e desenvolvimentos propostos para os anteriores reatores prismáticos ou do tipo leito de bolas. Tecnologias adicionais para os VHTR incluem ligas de altas temperaturas, cerâmicas de fibras reforçadas e revestimentos combustíveis de carbonetos de zircônio (U.S. DOE NUCLEAR ENERGY RESEARCH ADVISORY COMMITTEE AND THE GENERATION IV INTERNATIONAL FORUM, 2002).

2.3 Transmutação

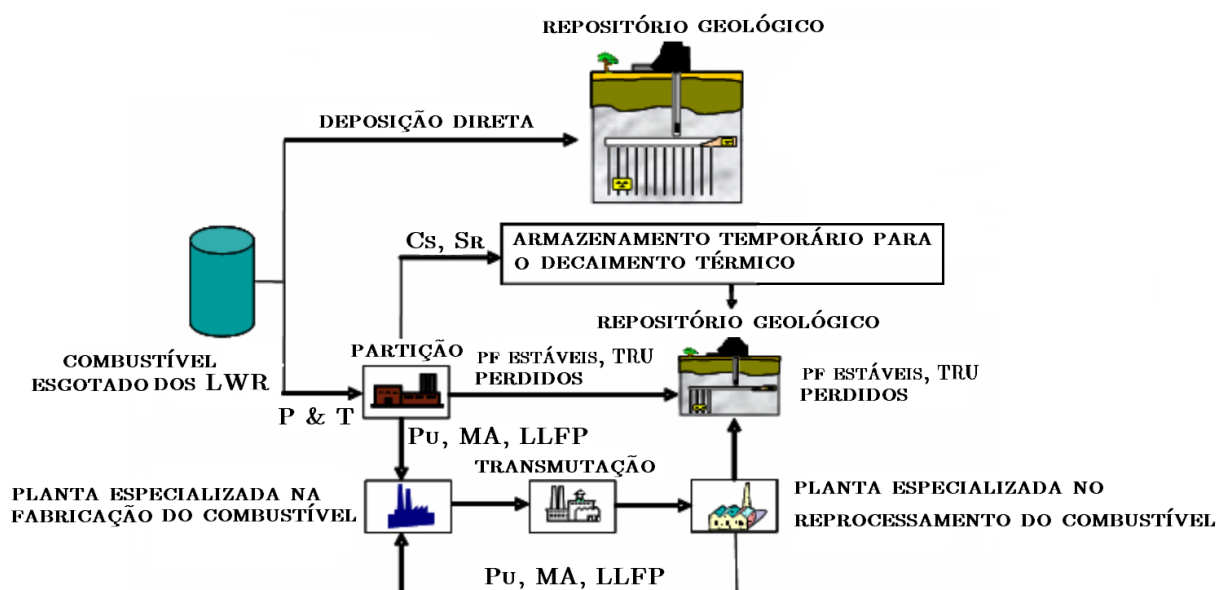
Os projetos inovadores que foram escolhidos para formar a Geração IV dos reatores nucleares respondem a 8 objetivos fundamentais que abrangem 4 grandes áreas: sustentabilidade, economia, segurança, resistência à proliferação e proteção física. Em termos de sustentabilidade, esses projetos estão focados na utilização do combustível e gestão dos resíduos nucleares, e os dois objetivos de projeto que respondem a essa área podem se resumir em (U.S. DOE NUCLEAR ENERGY RESEARCH ADVISORY COMMITTEE AND THE GENERATION IV INTERNATIONAL FORUM, 2002):

1. gerar energia sustentável que cumpra com os objetivos do ar limpo e promova a disponibilidade a longo prazo dos sistemas, e a utilização do combustível de forma mais efetiva para a produção de energia em todo o mundo;
2. minimizar e manusear os resíduos nucleares e reduzir notavelmente os inventários radioativos existentes para, dessa forma, melhorar a proteção à saúde pública e ao meio ambiente.

A sustentabilidade da energia nuclear dependerá da capacidade de redução dos inventários dos resíduos nucleares liderados principalmente pelos elementos transurânicos provenientes da queima do combustível. Os depósitos de resíduos radioativos, como resultado da energética nuclear, devem encontrar ainda uma solução satisfatória, especialmente em termos de meio ambiente e aceitabilidade social. Como consequência dessa situação, muitos países com usinas de grande porte baseadas na energia nuclear, encontram-se pesquisando atualmente várias opções para os seus depósitos. As técnicas de separação e transmutação podem contribuir para a redução do inventário radioativo e a radiotoxicidade associada. Atualmente, procuram-se vias para reduzir drasticamente a massa e a radiotoxicidade dos resíduos radioativos que serão armazenados nos repositórios profundos e reduzir o tempo necessário para atingir o nível de radioatividade da matéria prima originalmente usada para produzir energia. A transmutação está ganhando terreno no campo da gestão dos resíduos e estuda-se sua inserção no chamado ciclo avançado do combustível, o qual inclui a mineração, a produção dos elementos combustíveis, seu emprego no reator, reelaboração do urânio

remanescente, separação do plutônio e os actínídeos menores para serem reciclados pelos reatores nucleares de novo tipo e ADS (DEPARTMENT OF ENERGY, 1999). Finalmente, a separação de alguns dos produtos de fissão de vida longa, sua reciclagem e, depois, os resíduos finais serão situados nos depósitos geologicamente estáveis (Figura 9).

Figura 9 - Ciclo avançado do combustível.



Nos reatores de fissão, as duas reações nucleares principais que têm lugar são a fissão e a captura neutrônica. A primeira delas permite a conversão dos isótopos radioativos de vida longa em produtos de fissão (objetivo da transmutação); contudo, as capturas radiativas e os posteriores decaimentos que dão lugar aos isótopos filhos através das cadeias de decaimento correspondentes, tornam os actínídeos em outros elementos, geralmente de vida longa. A reação chave é a fissão, a qual transforma os actínídeos de alta toxicidade e vida longa em produtos de fissão de vida curta e baixa toxicidade. Outras reações, como a captura ou a reação $(n, 2n)$ transformam espécies de actínídeos em outras espécies de actínídeos sem um efeito significativo na radiotoxicidade. Porém, essas reações são importantes na medida que os actínídeos mudem de actínídeos férteis com baixa probabilidade de fissão a actínídeos físséis com alta probabilidade de fissão (reprodução do combustível). A transformação de um actínídeo é completa quando a cadeia de transformação, que envolve gerações de reações neutrônicas e decaimentos radioativos, termina com a fissão. Os actínídeos representam apenas um 0,1% da massa

total do combustível remanescente, constituídos principalmente por isótopos de neptúnio, amerício e cúrio. Os principais isótopos que mais contribuem à dose equivalente são Am^{241} , Np^{237} , Cm^{242} e Cm^{244} . Especialmente importante é a reciclagem do amerício por vários fatores. Por um lado, tem a segunda maior contribuição mais alta à radiotoxicidade do combustível irradiado durante os primeiros 1000 anos de decaimento no armazenamento geológico. Por outro lado, é o precursor do isótopo de vida longa Np^{237} e, finalmente, porque no processo da reciclagem do plutônio, aparece esse isótopo (THE EUROPEAN TECHNICAL WORKING GROUP ON ADS, 2001; A'LANDER et al., 2006; RED-IMPACT. IMPACT OF PARTITIONING, TRANSMUTATION AND WASTE REDUCTION TECHNOLOGIES ON THE FINAL NUCLEAR WASTE DISPOSAL, 2007).

Os produtos radioativos, embora presentes em baixas concentrações no combustível nuclear, são perigosos para as formas de vida, quando eles são descarregados para o meio ambiente. Além disso, esses resíduos devem ser isolados da biosfera e exigem profundos depósitos geologicamente estáveis, para serem armazenados por longos períodos de tempo. O perigo desses elementos provém da sua toxicidade e, em particular, da radiotoxicidade que surge da sua própria natureza radioativa. Entende-se por radiotoxicidade a medida em que um elemento pode ser tóxico aos organismos devido ao seu caráter radioativo dado pela atividade que possui e sua forma de incorporação ao organismo:

$$\text{Radiotoxicidade} = \text{Atividade} \cdot e \quad (1)$$

em que e [Sv/Bq] quantifica-se de acordo ao tipo de radiação, fatores de peso, informação metabólica e biocinética. Tem em conta a forma como o isótopo transporta-se na cadeia alimentar, os órgãos onde se aloja no corpo humano, etc (THE EUROPEAN TECHNICAL WORKING GROUP ON ADS, 2001). A radiotoxicidade a longo prazo será aportada fundamentalmente pelos actínídeos, principalmente pelo plutônio e os isótopos do amerício. Os produtos de fissão inicialmente contribuem com uma alta radiotoxicidade, mas decaem em um curto período de tempo. Os AM (Actínídeos Menores) e os isótopos do plutônio, que lideram a radiotoxicidade aportada em um longo período de tempo, decaem mais devagar até o nível de referência, considerado como a radiotoxicidade da mina do urânio natural. A Tabela 1 mostra a composição do combustível irradiado do

reator depois de 10 anos de decaimento. Embora os AM e os isótopos do plutônio representem o 1% da massa final do combustível irradiado, eles são os mais perigosos por seus longos tempos de meia-vida ($T_{1/2}$) e alta radiotoxicidade associada, dando origem a um manuseio longo e perigoso.

Tabela 1 - Composição do combustível irradiado depois de 10 anos de decaimento.

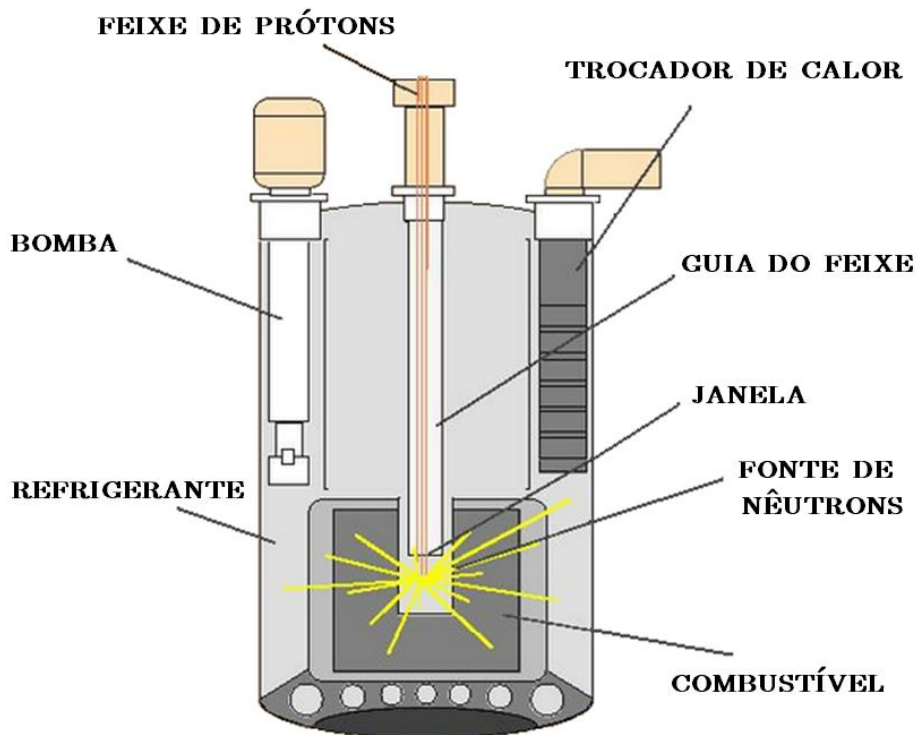
Actínídeos		Produtos de fissão	
Urânio	95,6%	Estáveis o de vida curta	3%
Plutônio	0,9%	Césio e Estrôncio	0,3%
Actínídeos menores	0,1%	Iodo e Tecnécio	0,1%

(VENNERI et al., 2001)

2.4 ADS

Entre os sistemas escolhidos pela Geração IV de reatores, quatro deles são de espectro rápido. Isso é devido às atrativas vantagens que têm os reatores rápidos na transmutação dos resíduos, a reprodução do combustível, a efetiva utilização das reservas de urânio e a queima dos actínídeos. Apesar de que o projeto dos VHTR está encaminhado à produção de energia e às aplicações de altas temperaturas, existe um amplo estudo da transmutação dos resíduos nucleares usando uma variante desse sistema. Os ADS apresentam vantagens interessantes em termos de transmutação, segurança, possível aceitação social e a obtenção de calor com parâmetros para a posterior produção de hidrogênio. O primeiro projeto conceitual do ADS foi realizado pelo físico italiano Carlos Rubbia e publicado em 1993 (CARMINATI et al., 1993). Os ADS são sistemas nos quais se junta uma fonte de nêutrons, que causa uma reação de espalação, com um núcleo subcrítico. Um ADS é composto por um acelerador de partículas onde são produzidos prótons de altas energias que reagem com os metais pesados do alvo para produzir nêutrons. Esse alvo é situado no centro de um núcleo subcrítico onde podem estar, além do combustível nuclear, produtos de fissão de vida longa, e formando parte do combustível os elementos transurânicos (Figura 10)

Figura 10 - Conceito geral do sistema dirigido por um acelerador.



(UNIVERSITY OF BRISTOL SCHOOL OF CHEMISTRY)

Os transurânicos físséis estão dispostos de maneira que a reação em cadeia não se sustenta sem a introdução de uma fonte externa, a qual é dada pela reação de espalação das partículas carregadas aceleradas. Por isso, o transmutador é dirigido pelos nêutrons produzidos quando os prótons acelerados atingem o alvo (chamada também operação subcrítica). Quando o feixe de partículas aceleradas, normalmente prótons, incide sobre o alvo de um material pesado situado na parte central do reator, geram-se, mediante reações de espalação, partículas carregadas e nêutrons. Esses nêutrons desempenham, em relação ao comportamento cinético do sistema, o mesmo papel que os nêutrons retardados nos reatores críticos, assim, a baixa fração de nêutrons atrasados para os combustíveis usados perde importância e pode-se controlar o reator mais facilmente através da fonte e o acelerador. Os nêutrons que vêm do alvo de espalação, multiplicados pelos nêutrons da fissão do combustível nuclear dentro do núcleo subcrítico, mantém um determinado nível de fluxo neutrônico que libera calor e permite transmutar os AM de vida longa nos produtos de fissão estáveis ou de curta vida. Nesse processo, produz-se calor que pode converter-se em energia elétrica ou ser empregado na produção de

hidrogênio. O ADS pode ser projetado para operar tanto no espectro térmico como no espectro rápido, e exceto pelo estado subcrítico do reator, o núcleo é muito parecido ao de um reator crítico (SALVATORES, 2006).

O estado da arte dos ADS está em um processo constante de pesquisa e desenvolvimento. Atualmente existem muitos projetos na área dos sistemas para a transmutação. As principais diferenças nos tipos de tecnologias, são em relação aos componentes mais importantes desses sistemas, resumidos em:

- Acelerador usado para manter as condições de trabalho;
- Alvo de espalação;
- Criticalidade;
- Tipo de refrigerante;
- Tipo de combustível.

Este tipo de projeto apresenta vantagens sobre outros sistemas; por exemplo, a possibilidade de operar com um núcleo subcrítico abre novas oportunidades para novos reatores conceituais, além de que a proporcionalidade da potência do reator com a corrente do acelerador simplifica o controle do sistema. Esse sistema permite a operação segura do núcleo com características degradadas, comuns dos queimadores de AM puros, permite também prescindir de sistemas de controle e sistemas de segurança redundantes, e o excesso de reatividade pode ser eliminado, seguindo o projeto dos núcleos com uma redução potencial de acidentes dados pela reatividade induzida. Durante a transmutação, a composição isotópica dos elementos transurânicos (TRU) ou os AM do combustível irradiado dos LWRs evolui de jeito diferente em dependência do espectro neutrônico no qual estejam submetidos.

Alguns estudos têm indicado que usar um espectro rápido é essencial para o consumo total dos AM, e o espectro térmico para queimar os isótopos do plutônio. A vantagem de usar um espectro rápido é dada pelo fato de que a razão da produção neutrônica devida à fissão e da absorção dos nêutrons, aumenta à medida que aumenta a energia dos nêutrons (THE EUROPEAN TECHNICAL WORKING GROUP ON ADS, 2001). Contudo, estudos detalhados realizados depois têm demonstrado que, em condições apropriadas, os nêutrons térmicos também são capazes de transmutar AM (VENNERI et al., 2001). Essas vantagens permitem que os ADS sejam sistemas muito seguros, com uma grande flexibilidade e melhoras no comportamento dinâmico, o qual justifica a encarecida fonte de nêutrons.

Atualmente, o estado dos ADS se encontra na fase de pesquisa e desenvolvimento com os países desenvolvidos como líderes das atividades, destacando-se os programas da União Europeia (UE), Bielorrússia, Índia, Japão, etc (STANCULESCU, 2009). Os principais projetos relacionados com esse tema estão mostrados na Tabela 2.

Tabela 2 - Projetos principais no âmbito da transmutação e os ADS.

País(es)	Nome/Atividade
UE	<u>Programa EURATOM</u> Megawatt Pilot Experiment (MEGAPIE) MYRRHA/Projeto XT-ADS Instalação experimental GUINIVERE
Bielorrússia	<u>Programa experimental YALINA</u> Desenvolvimento de provas para o monitoramento da reatividade Estudo da cinética espacial Medição das velocidades de transmutação
Índia	<u>Programa de P+D dos ADS</u> Objetivos: Ciclos avançados de combustível e a reprodução do material físsil. Uso do tório Dados nucleares Desenvolvimento de códigos de transporte para partículas de altas energias Fonte de 14 MeV, acoplada a um reator subcrítico (refrigerado a água e carregado com urânio natural)
Japão	<u>(IAEA) Programa de P+D de ADS</u> Estudos no projeto de um núcleo subcrítico ADS de 800 MW. com alvo de Pb-Bi Provas de corrosão para diferentes materiais estruturais

(STANCULESCU , 2009)

2.5 Projeto e antecedentes do TADSEA

O projeto preliminar do modelo do ADS consiste em definir as características das principais partes que o compõem: o acelerador de partículas, o alvo de espalação, o núcleo, o combustível, o refrigerante, etc. Essas características constituem o ponto de partida para realizar, em capítulos posteriores, as análises e cálculos necessários que permitam fazer um projeto conceitual detalhado do dispositivo e avaliar sua viabilidade para cumprir com os objetivos propostos: diminuir a massa e a radiotoxicidade do combustível nuclear irradiado das usinas nucleares convencionais e atingir temperaturas muito altas do refrigerante na saída do núcleo para a produção de hidrogênio.

O principal antecedente de nosso dispositivo é o PBT (Pebble Bed Transmuter) (ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007), um ADS do tipo leito de bolas, refrigerado a gás e moderado a grafite, que usa como combustível pequenas quantidades de elementos TRUs em forma de partículas TRISO compactadas em uma matriz de grafite, formando uma configuração do tipo leito de bolas. O PBT foi projetado para a transmutação de resíduos nucleares (especificamente alguns elementos TRUs) das usinas nucleares convencionais de água leve.

Tabela 3 - Massa dos transurânicos no combustível nuclear irradiado nos LWR (40 GWd/ton U, 15 anos de decaimento) e composição do combustível do PBT.

Nucleído	Massa (g/ton)	Nucleído	Massa (g/ton)
Np ²³⁶	5,3E-04	Am ²⁴²	2,5E+00
Np ²³⁷	6,5E+02	Am ²⁴³	1,4E+02
Pu ²³⁸	2,3E+02	Cm ²⁴²	5,9E-03
Pu ²³⁹	5,9E+03	Cm ²⁴³	4,3E-01
Pu ²⁴⁰	2,6E+03	Cm ²⁴⁴	3,1E+01
Pu ²⁴¹	6,8E+02	Cm ²⁴⁵	2,3E+00
Pu ²⁴²	6,0E+02	Cm ²⁴⁶	3,2E-01
Pu ²⁴⁴	4,2E-02	Cm ²⁴⁷	3,7E-03
Am ²⁴¹	7,7E+02	Cm ²⁴⁸	2,4E-04

(THE EUROPEAN TECHNICAL WORKING GROUP ON ADS, 2001)

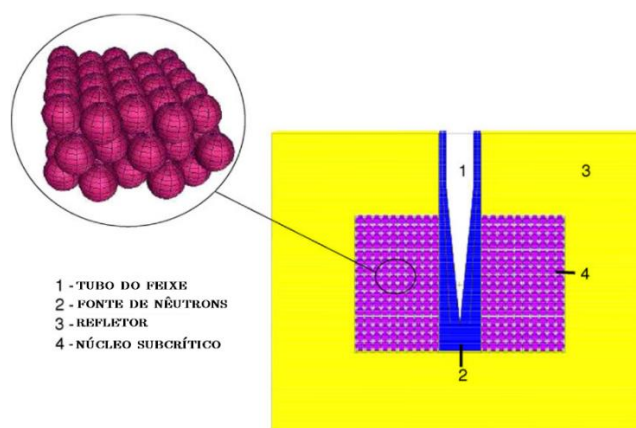
A Tabela 3 mostra a composição do combustível nuclear irradiado nos LWR com um grau de queima de 40 GWd/ton U depois de 15 anos de decaimento. O combustível do PBT está formado pelos elementos TRUs da Tabela 3 destacados em negrito. A Tabela 4 mostra a massa dos elementos TRUs que compõem o combustível do PBT, por bola e por partícula TRISO.

Tabela 4 - Composição do combustível do PBT por bola e por partícula TRISO.

Nucleído	Massa dos transurânicos por bola (g)	Massa dos transurânicos por partícula TRISO (g)
Np ²³⁷	5,92E-02	1,37E-05
Pu ²³⁸	1,84E-02	4,24E-06
Pu ²³⁹	6,79E-01	1,57E-04
Pu ²⁴⁰	3,15E-01	7,26E-05
Pu ²⁴¹	1,05E-01	2,43E-05
Pu ²⁴²	6,45E-02	1,49E-05
Am ²⁴¹	6,80E-02	1,57E-05
Am ²⁴³	1,21E-02	2,80E-06
Cm ²⁴⁴	2,17E-03	5,00E-07

O núcleo do PBT está constituído por um cilindro que contém 20 camadas de bolas. As bolas de uma camada são localizadas nos buracos da camada que fica imediatamente embaixo, formando uma estrutura tetraédrica (Figura 11), com uma fração de empacotamento de 0,74 (a fração de empacotamento é a relação entre o volume ocupado pelas bolas e o volume total do núcleo). No centro do cilindro se encontra o alvo de espalação, que contém uma liga eutética de chumbo-bismuto. O sistema é mantido por meio do acelerador de prótons, com uma energia do feixe na ordem de 380 MeV, e intensidades perto a 10 mA. A potência térmica do PBT é 10 MWt no estado estacionário. O núcleo tem uma altura de 98 cm, um raio exterior de 75,75 cm, seguido de um refletor de 60 cm de espessura.

Figura 11 - Esquema do núcleo do PBT.



(ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007)

O acelerador

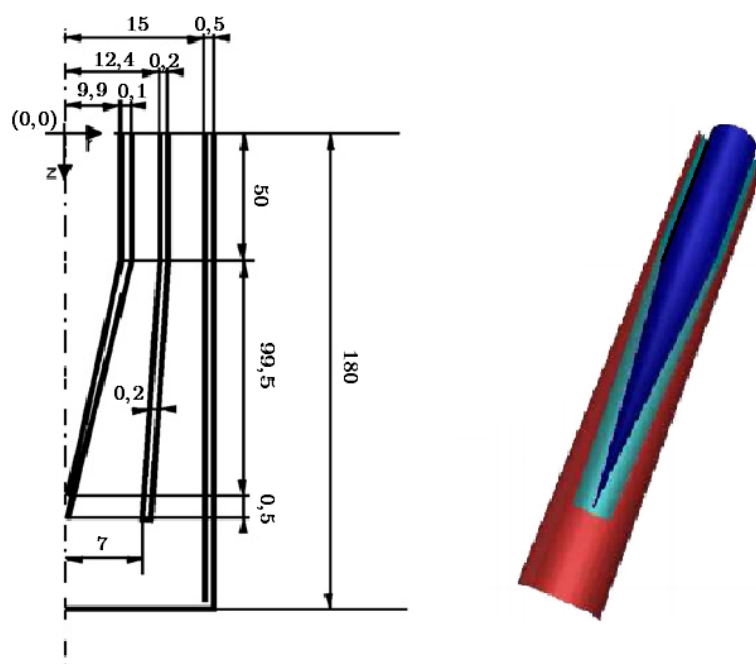
O acelerador proposto para o sistema é um ciclotron com seis setores de separação e quatro cavidades de separação, que permitem atingir a energia de 380 MeV como uma intensidade da corrente na ordem de 10 mA. Possui quatro cavidades de rádio frequência que operam a uma frequência de 70 MHz, usadas para se obter uma separação suficiente entre as voltas no raio de extração. O feixe injeta com uma energia de 20 MeV desde um supercondutor de 40 MeV H^+ do ciclotron, o qual gera os prótons especificados anteriormente (ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007). As principais vantagens desse acelerador são enunciadas em ABÁDANES, PÉREZ-NAVARRO (2007), embora a energia do feixe de 380 MeV implica uma baixa taxa de nêutrons produzidos por espalação, considera-se suficiente para uma instalação de demonstração dos ADS como foi proposto para o projeto MYRRHA (ABDERRAHIM et al., 2001).

O alvo de espalação

O alvo de espalação é feito do material eutético chumbo-bismuto com um projeto inovador para a janela de separação entre o tubo do feixe e o alvo (Figura 12) que responde aos seguintes propósitos: o primeiro dos propósitos que persegue esse projeto é o alargamento da fonte neutrônica para reduzir o pico térmico no núcleo. Para lograr o objetivo, a janela tem forma cônica, que estende a geração dos nêutrons por quase todo o eixo do núcleo. Como desvantagem, a energia de deposição está muito próxima da janela

sólida, aumentando as dificuldades no projeto do sistema de refrigeração. Essa janela sólida é feita de aço inoxidável HT-9, pela sua alta resistência ao dano neutrônico o qual tem sido estudado cuidadosamente (ABÁNADES et al., 1999). Esse alvo foi estudado detalhadamente para estabelecer as condições de trabalho do material.

Figura 12 - Vista do alvo de espalação de prótons do PBT.



(ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007)

O refrigerante

O refrigerante escolhido para o PBT é o gás hélio que, embora seja mais custoso que outros gases como o CO₂ ou o nitrogênio, possui duas características que justificam o seu uso: (1) Sendo um gás nobre, é quimicamente inerte. Isto é muito importante para manter a integridade dos elementos combustíveis já que não provoca a oxidação do grafite; (2) devido a sua baixa seção de choque, não interage com os nêutrons presentes no reator, ou seja, é neutronicamente transparente. Isso faz com que não ocorra moderação dos nêutrons quando passam pelo refrigerante, e, assim, o espectro fica determinado unicamente pelo projeto do combustível. Por outro lado, não existira um coeficiente de reatividade devido à temperatura do refrigerante, já que uma variação na densidade do hélio produz um incremento depreciável na sua seção macroscópica (GLASSTONE; SESONSKE, 1990).

O combustível

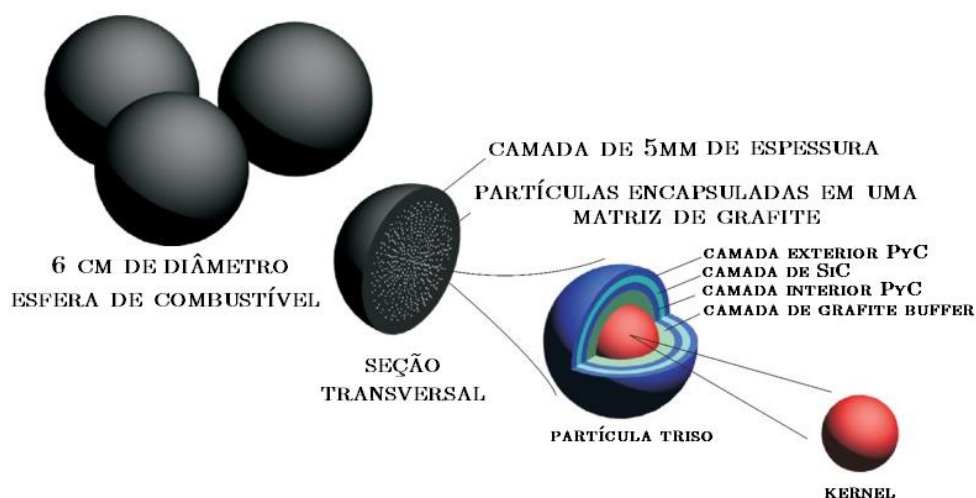
O núcleo do PBT está composto por uma agregação de bolas, que são os elementos combustíveis do reator. Considera-se um tamanho fixo de 6 cm de diâmetro para as bolas, sendo o mais comumente usado na literatura. Cada um desses elementos combustíveis divide-se em duas zonas:

Zona interior (zona combustível ou zona ativa): é uma esfera de 5 cm de diâmetro. Está composta por partículas TRISO de 1mm de diâmetro (Figura 13) compactadas em uma matriz de grafite. Cada uma dessas micropartículas compõe-se de um núcleo combustível de 0,4 mm de diâmetro (kernel). O núcleo está rodeado de uma camada de grafite de baixa densidade de 0,1125 mm de espessura (buffer). A continuação encontra-se a camada interior de carbono pirolítico de 0,0625 mm de espessura (IPyC), uma camada de carboneto de silício de 0,0625 mm de espessura (SiC) e, por último, a camada exterior de carbono pirolítico (OPyC), de 0,0625 mm de espessura. As dimensões das camadas têm sido escolhidas de acordo com as considerações reportadas na literatura (U.S. NUREG, NUCLEAR REGULATORY COMMISSION, 2004).

Zona exterior: Está composta por uma camada de grafite de 5mm de espessura que rodeia a zona combustível, e que faz o papel de moderador neutrônico junto com a grafite da matriz das bolas.

Com esse projeto do PBT, demonstrou-se a capacidade de um ADS com espectro de nêutrons térmicos para reduzir, consideravelmente, a massa dos isótopos do plutônio e alguns actínídeos menores, alcançando a diminuição da radiotoxicidade dos resíduos (ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007). Contudo, o PBT foi concebido somente como um transmutador de transurânicos e não como um sistema capaz de contribuir adicionalmente à produção de calor ou energia.

Figura 13 - Elemento combustível do PBT.



O TADSEA

Com o objetivo de utilizar a energia produzida pelas reações nucleares que tem lugar no núcleo de um transmutador como o PBT na geração de hidrogênio, devido à demanda prevista desse vetor em um futuro cenário energético, foi concebido um novo dispositivo chamado TADSEA. O TADSEA, como o PBT, é um ADS de leito de bolas refrigerado a gás, que usa como combustível os elementos transurânicos encapsulados em forma de partículas TRISO (GARCÍA et al., 2011). Para isso, considerou-se aumentar a potência térmica do TADSEA, procurando valores na ordem dos que são requeridos em uma instalação experimental. Na instalação experimental, a potência do núcleo tem de ser suficientemente elevada para representar a potência de um transmutador em escala industrial. Têm sido estudadas potências ótimas para esse tipo de instalação e os valores variam entre 80 MWt e 100 MWt (THE EUROPEAN TECHNICAL WORKING GROUP ON ADS, 2001), assim, o valor selecionado para a potência térmica do projeto do TADSEA foi 100 MWt. O acelerador proposto para o TADSEA é um LINAC (Linear accelerator) (FAJARDO, 2012), em lugar do ciclotron que tinha sido escolhido para o projeto conceitual do PBT de 10 MWt (ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007), devido à necessidade de incrementar a energia e intensidade do feixe de prótons, seguindo as diretivas de projetos de ADS como o projeto europeu PDS-XADS (MUELLER, 2007), que sugere utilizar um acelerador de 1 GeV e 10 mA para os núcleos subcríticos com $K_{eff} < 0,95$. São mantidas as características do projeto do alvo de espalação, o tipo de refrigerante e as características

geométricas do projeto dos elementos combustíveis propostas para o PBT (ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007). Em ÁBADANES et al. (2011) foram publicados os parâmetros básicos propostos para o TADSEA. A potência calculada para o consumo de eletricidade do acelerador proposto foi de 6,82 MWe. Além disso, a potência elétrica de bombeamento para a refrigeração do núcleo foi estabelecida em 5 MWe. Considerando um ciclo Brayton regenerativo com a eficiência proposta de 45%, a produção de electricidade do TADSEA é 45 MWe.

A geometria

Pretende-se que a razão entre a superfície exterior do reator e o volume do mesmo seja elevada, de forma que o reator possa dissipar a potência residual em caso de acidente por mecanismos de radiação e convecção natural através da superfície exterior do refletor (KOK, 2009). Para atingir a potência térmica desejada de 100 MWt no TADSEA, decidiu-se incrementar as dimensões do núcleo e manter a mesma composição do combustível do PBT na bola (ROSALES; GARCÍA, 2008). Do ponto de vista técnico, é possível aumentar a potência incrementando as dimensões do núcleo, mantendo a densidade de potência média de 7 W/cm^3 . Isso foi feito sob a condição de que o incremento fosse de tal forma, que fossem conservadas as capacidades de transmutação do PBT sem afetar os perfis de potência.

Como foi mencionado anteriormente, a fração de empacotamento do PBT foi escolhida igual a 0,74, por ser este o maior grau de compactação que pode ser atingido em um leito de bolas infinito, e que corresponde a uma configuração tetraédrica (TIAN, 2007), assim, decidiu-se manter para o TADSEA, a disposição das bolas e a fração de empacotamento do PBT (ROSALES; GARCÍA, 2008).

Para garantir a segurança do dispositivo, em ROSALES, GARCÍA (2008) e em GARCÍA et al. (2011), realiza-se o estudo da dependência entre o fator de multiplicação efetiva (K_{eff}) e a largura do refletor. Os resultados indicam que, para as condições mais extremas, uma espessura radial do refletor menor que 70 cm garante um K_{eff} menor que 0,95, e a partir daí, que fosse escolhido uma largura do refletor de 60 cm. Na Tabela 5 são resumidas as características do PBT e do TADSEA.

Tabela 5 - Principais características do PBT e do TADSEA.

Grandeza	PBT	TADSEA
Potência do acelerador (MW)	3,8	10
Energia do feixe de prótons (MeV)	380	1000
Intensidade do feixe de prótons (mA)	10	10
Raio interior do núcleo (cm)	15,75	15,50
Raio exterior do núcleo (cm)	75,75	125,75
Altura (cm)	97,98	293,94
Volume total (m ³)	1,69	14,38
Volume de combustível (m ³)	0,0016	10,64
Massa de combustível (kg)	14,64	124,50
Número de bolas	11064	94092
Fração de empacotamento	0,74	0,74
K _{eff}	0,84	0,94
Potência térmica (MW)	10	100
Densidade de potência média (W/cm ³)	6	7
Espessura do refletor (cm)	60	60

(GARCÍA et al., 2011)

A sua capacidade de transmutação foi estudada em ROSALES, GARCÍA (2008) e comparada com a do PBT, demonstrando que um dispositivo com essas características é capaz de reduzir a massa e a radiotoxicidade de alguns transurânicos presentes no combustível nuclear irradiado dos LWR. Em GARCÍA et al. (2012), foi desenvolvido um método geométrico para calcular o número real de bolas que cabem no leito do núcleo do TADSEA, e foi obtido o valor realístico da fração de empacotamento (0,64), valor menor que o assumido no primeiro projeto. Com esse resultado, foi projetado novamente o leito de bolas do TADSEA, com o qual se obteve que, para o valor da massa na bola usado anteriormente (1,5 g) e a largura do refletor de 60 cm, o valor da potência obtida no núcleo está abaixo dos 100 MWt no fim do ciclo estacionário e apenas ultrapassa os 100 MWt no princípio do ciclo estacionário. Esses valores de potência não são adequados, já que o TADSEA deve ser projetado de maneira que, sob qualquer condição, possa gerar os 100 MWt. Para atingir o nível de potência desejado, foram analisadas duas novas opções

para o projeto do TADSEA: (1) aumento do refletor radial de 60 cm até 180 cm, (2) variar a massa do combustível na bola entre 0,5 e 6 g.

2.6 Modelos geométricos para a simulação dos reatores de leito de bolas

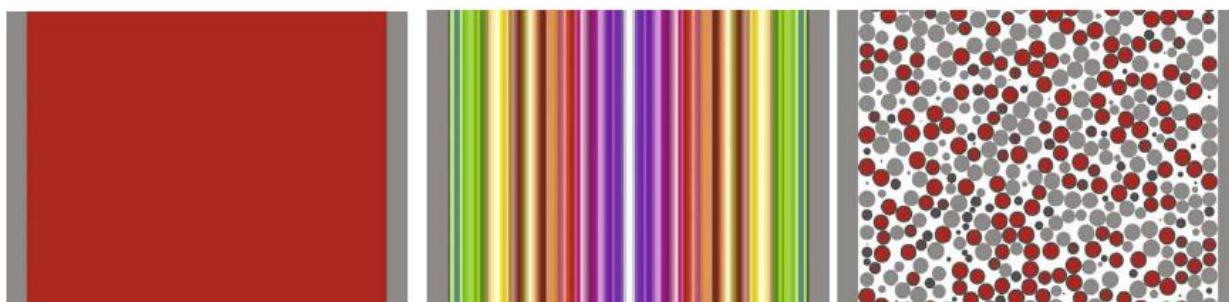
Como foi mencionado anteriormente no Capítulo 1, nos reatores do tipo leito de bolas, tanto as bolas, como as partículas TRISO dentro das bolas, tem uma distribuição aleatória e suas posições não estão bem definidas. Para a simulação desses leitos de bolas, têm sido usados vários modelos que serão comentados e analisados neste epígrafe.

2.6.1 Modelagem homogênea do núcleo

Em AUWERDA et al. (2010) realiza-se um estudo da influência dos modelos da simulação de um núcleo de um HTR do tipo leito de bolas nos seguintes efeitos: a densidade de empacotamento não uniforme das bolas, o efeito “streaming” e o fator de Dancoff. Os modelos usados para analisar esses efeito foram (Figura 14):

1. Um núcleo homogêneo, no qual foi homogeneizado o leito de bolas de maneira que a densidade fosse uniforme em todo o núcleo, levando em consideração a fração de empacotamento do mesmo;
2. O núcleo foi dividido radialmente em seções de 1 cm de espessura (exceto a última seção, que tem 0,71 cm). Para cada zona foi calculada a fração de empacotamento correspondente e com esta foi calculada a densidade do material homogêneo que compõe a mesma. Finalmente, obtém-se um núcleo homogêneo axialmente que inclui as flutuações das densidades do leito de bolas;
3. Todas as bolas foram modeladas individualmente, formando um modelo exato do leito de bolas de 100 cm de altura.

Figura 14 - Modelos usados na simulação do leito de bolas. Esquerda: núcleo homogêneo. Meio: núcleo homogêneo axialmente por zonas. Direita: núcleo heterogêneo.

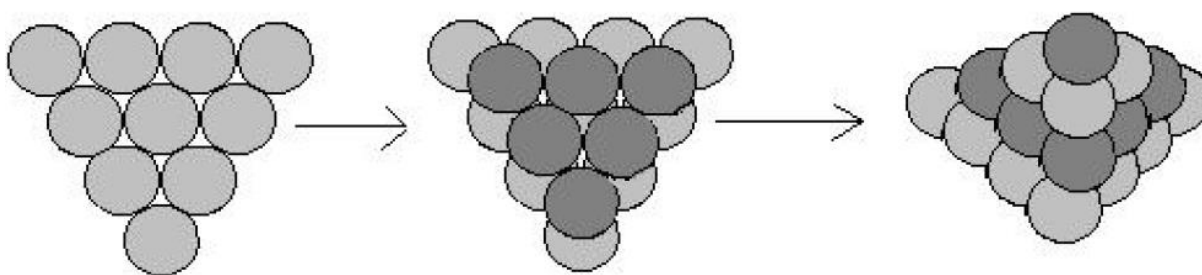


(AUWERDA et al., 2010)

2.6.2 Modelagem homogênea das PCEs (Partículas de Combustível Encapsulado) dentro do núcleo

No trabalho ABÁDANES, PÉREZ-NAVARRO (2007) realiza-se o projeto conceitual de um ADS do tipo leito de bolas (PBT). Nesse trabalho não são considerados os materiais homogeneamente distribuídos pelo núcleo, mas existe uma distribuição uniforme das bolas. As bolas estão dispostas seguindo um arranjo cúbico centrado nas faces, ou seja, um arranjo triangular em um plano e uma bola em outro plano superior, situada no ponto médio do triângulo equilátero (Figura 15).

Figura 15 - Modelo FCC.



(ABÁDANES; PÉREZ-NAVARRO, 2007)

Com essa distribuição, atinge-se a maior fração de empacotado possível de 0,7405 para um meio infinito. O núcleo resultante tem um cilindro interior de 15,75 cm de raio (alvo de espalação), um cilindro exterior de 75,75 cm e uma altura de 98 cm capaz de conter um total de 11064 bolas. Nesse modelo foi considerado, também, para cada bola,

uma composição homogênea da zona combustível, usando as frações mássicas adequadas de carbono, silício e combustível. Considera-se que todas as PCEs estão dissolvidas em uma matriz de grafite e que todo o volume não ocupado pelo combustível e o carboneto de silício, está ocupado por grafite. Esse modelo é empregado para os estudos realizados em GARCÍA et al. (2011), GARCÍA et al. (2012), ÁBADANES et al. (2011), que incluem cálculos de queima das zonas combustíveis homogêneas.

2.6.3 Modelagem heterogênea do leito de bolas com uma distribuição uniforme das PCEs

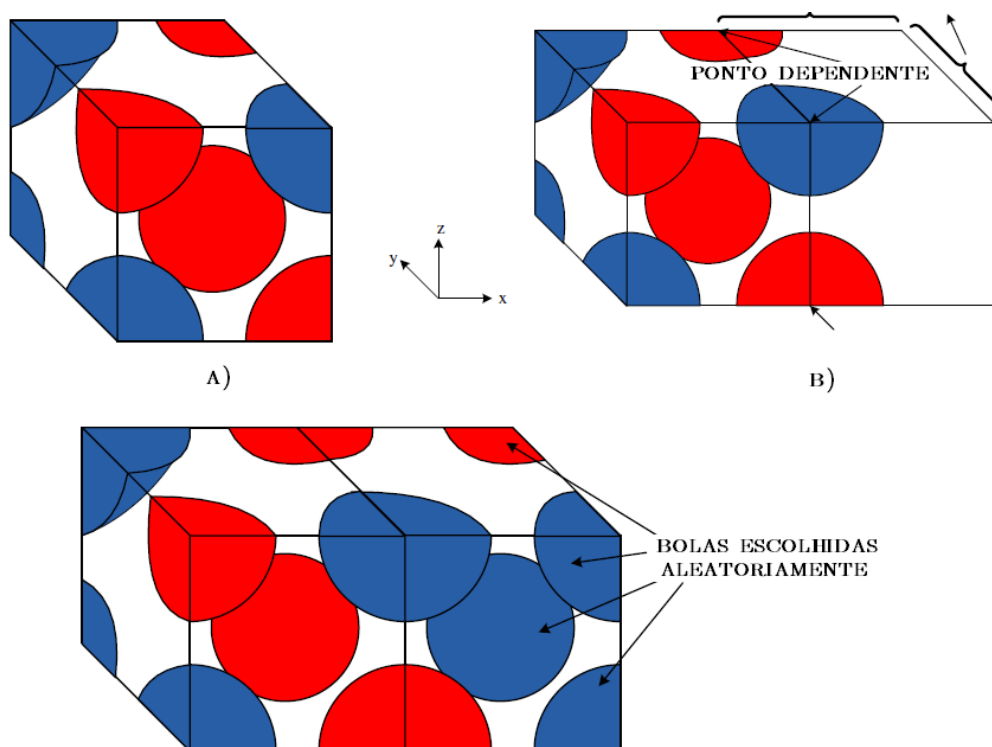
Em BOMBONI et al. (2011), realiza-se a simulação detalhada da geometria de um PBMR-400, usando o código MonteBurns, acoplado ao MCNP (Monte Carlo N-Particle, sigla em inglês). O combustível usado nesse trabalho é uma mistura de Pu-Np que provém de um LWR padrão. Modela-se o núcleo como um cilindro infinito, considerando que as bolas de combustível estão dispostas seguindo dois arranjos diferentes: cúbico centrado no corpo (BCC) e hexagonal ponto a ponto (CHPOP). Realiza-se o modelo de duas formas diferentes; primeiramente, incluem-se as bolas que são cortadas pelo cilindro. Depois, para eliminar esse efeito de corte, define-se uma zona de exclusão, eliminando o volume exterior com uma espessura igual ao diâmetro das bolas. Dessa maneira, evita-se que fiquem incluídas na geometria as bolas que são cortadas. As PCEs são completamente descritas e dispostas de acordo com uma distribuição cúbica simples dentro da bola para uma massa de combustível igual a 2 g.

Em SEKER, ÇOLAK (2003), realizam-se os primeiros cálculos de criticalidade do HTR-10 usando o código MCNP-4B (BRIESMEISTER, 1997). O núcleo é composto por bolas de combustível e bolas de moderador, distribuídas dentro do núcleo para a primeira carga. Além disso, as PCEs são consideradas dentro de cada elemento combustível. O modelo foi preparado usando as opções de *Lattice (rede)* e *Universe (universo)* do MCNP para as PCEs dentro das bolas, e para as bolas combustíveis e moderadoras dentro do núcleo. Dessa maneira, foi possível desenvolver um modelo completo para o núcleo do HTR-10, onde está presente a dupla heterogeneidade, embora seja de um jeito uniforme (não aleatória).

2.6.4 Modelagem aleatória das bolas dentro do núcleo

Em KIM et al. (2011), é desenvolvido um método eficiente para modelar um leito de bolas considerando a aleatoriedade das bolas e as variadas configurações que podem apresentar-se no núcleo do HTR-10. Consegue-se simular uma configuração aleatória das bolas fazendo com que o material que compõe a célula unitária, que é expandida mediante uma estrutura repetitiva, é determinado aleatoriamente, embora a aleatoriedade das bolas não é simulada diretamente. Assume-se que a célula unitária que é expandida, têm uma configuração BCC.

Figura 16 - Procedimento para expandir uma célula unitária.



(KIM et al., 2011)

Essa configuração tem uma bola no centro da célula, e um oitavo de bola em cada um dos vértices do cubo, pelo qual a célula é composta por duas bolas. Assumindo que a bola é formada por um material, uma célula unitária pode ter no máximo 9 materiais, sem contar o material do espaço entre as bolas. Por outro lado, no núcleo de leito de bolas do HTR-10, só podem existir dois tipos de bolas: bolas de combustível e bolas de moderador. Assumindo que cada bola é formada por um material só (combustível ou moderador), um total de 512 tipos de células unitárias possíveis podem ser criadas mediante permutações

com repetição, $\prod_2^9 = 512$. A célula unitária é atribuída a um universo no MCNP. Quando o arquivo de entrada ao MCNP é criado, seleciona-se aleatoriamente um universo entre os 512 possíveis. Ao expandir a célula, conserva-se a continuidade dos materiais entre os universos (Figura 16). As partículas PCEs dentro das bolas são simuladas de maneira uniforme mediante uma configuração cúbica.

2.6.5 Modelagem determinística dos reatores do tipo leito de bolas

Com os códigos de cálculo que utilizam os métodos de Monte Carlo, resulta relativamente fácil representar um número elevado de geometrias diferentes, obtendo-se resultados com elevada confiabilidade, já que não é necessário empregar nenhum tipo de discretização energética ou espacial na resolução da equação do transporte. Porém, com as capacidades de cálculo atuais, o tempo requerido para um problema similar é significativamente superior ao empregado pelos códigos determinísticos. É por isso que, na etapa do projeto básico ou conceitual de qualquer reator, etapa na qual normalmente se realizam numerosas variações dos parâmetros principais, é preferível usar códigos determinísticos que requerem tempos de cálculo menores. Na metodologia tradicional do cálculo dos reatores por códigos que empregam métodos determinísticos, os primeiros passos consistem em obter seções de choque homogêneas de um elemento combustível, para, posteriormente, utilizá-las na resolução da equação de transporte ou difusão ao nível do núcleo completo. No caso dos elementos combustíveis que contêm partículas TRISO, o processo de homogeneização pode dividir-se em duas etapas: na primeira etapa, são obtidas as seções de choques de autoblindagem para uma partícula, e estas posteriormente são utilizadas para a homogeneização do elemento combustível. Essa metodologia geralmente requer o cálculo de fatores de Dancoff de forma externa, usualmente mediante códigos que empregam Monte Carlo. Os métodos determinísticos resolvem a equação do transporte para o comportamento médio das partículas. Esses métodos fornecem uma completa informação do espaço de fase do problema, diferentemente dos códigos probabilísticos, que oferecem informação para os parâmetros específicos pedidos pelo usuário.

Um dos códigos mais usados no cálculo dos reatores de alta temperatura de leito de bolas é o VSOP (Computer Code System for Reactor Physics and Fuel Cycle Simulation). O VSOP é um sistema de códigos computacionais para a simulação numérica completa da

física dos reatores térmicos. O código tem sido amplamente usado no curso do desenvolvimento dos reatores de alta temperatura com combustível esférico. Por isso, muitas ferramentas têm sido incluídas para cobrir características específicas desse tipo de reator. A aplicação do código implica o processamento de seções de choque, comissionamento do reator e avaliação do espectro neutrônico dos elementos combustíveis, cálculo da difusão neutrônica, queima e recarga do combustível, controle do reator e a termoidráulica de estados estacionários e transientes. O cálculo neutrônico pode ser realizado em três dimensões, enquanto a análise termoidráulica está limitada para reatores refrigerados a gás em duas dimensões espaciais. O código VSOP permite ao usuário seguir a vida do reator desde a carga inicial até o núcleo em equilíbrio. Cálculos iterativos de diferentes características físicas asseguram a consistência e retroalimentação durante a queima, a simulação da recarga do combustível e variações da potência do núcleo. Os transientes de temperatura podem ser seguidos mediante a avaliação nuclear quase-estática em paralelo. Utiliza-se uma história detalhada da potência dos elementos combustíveis para o cálculo da sua potência de decaimento individual (RÜTTEN et al., 2009).

Outro código usado na simulação dos reatores de alta temperatura refrigerados a gás, que usam métodos deterministas, é o DELIGHT. O DELIGHT é um código para a análise da queima de células combustíveis, que produz um grupo de constantes necessárias para o cálculo de reatores de alta temperatura refrigerados a gás. O método de probabilidades de colisão é usado para o cálculo da rede. O cálculo do modelo da rede pode ser implementado para elementos combustíveis do tipo cilíndricos como de bolas, que caracteriza o cálculo da queima do combustível considerando a dupla heterogeneidade do combustível (NOJIRI et al., 2004).

Outro código determinista usado no cálculo dos HTGR é o SRAC. O sistema SRAC está projetado para o cálculo neutrônico de vários tipos de reatores térmicos. Tal sistema cobre a produção efetiva de grupos de seções de choque microscópicas e macroscópicas, cálculos estáticos de células e cálculos do núcleo incluindo a análise da queima. Fornece os parâmetros importantes requeridos no projeto de reatores, assim como em análise experimentais. Por outro lado, o sistema SRAC não resolve problemas de transporte de fótons, cinética ou cálculos termoidráulicos acoplados. Possui bibliotecas baseadas nas últimas versões das bibliotecas JENDL e ENDF/B para mais de 300 núclídeos. Os cálculos estão baseados no método das probabilidades de colisão aplicável a 16 tipos de

geometrias que cobrem os cálculos de células para a maioria dos reatores existentes. Os sistemas de dupla heterogeneidade podem ser resolvidos mediante cálculos de células sucessivos, sempre que a homogeneização das seções macroscópicas transversais é obtida separadamente. Especialmente, a absorção ressonante na qual o efeito da dupla heterogeneidade deve ser resolvido simultaneamente, pode ser tratado sempre que a célula microscópica possa ser aproximada a uma célula em uma dimensão (OKUMURA et al., 2007).

O WIMS é uma família de códigos que combina todos os métodos da física dos reatores (tanto deterministas como probabilistas), desenvolvidos durante mais de 30 anos por UKAEA Winfrith (United Kingdom Atomic Energy Authority), e tem sido modificado e ajustado para a resolução de diferentes tipos de problemas (KULIKOWSKA, 2000). Esse código utiliza uma ampla variedade de métodos para resolver os problemas da física do reator e pode ser utilizado para o projeto e a avaliação preditiva do comportamento para:

- Todos os tipos de reatores térmicos;
- Recipientes para transporte do combustível;
- Usinas de reprocessamento;
- Plataformas experimentais

O código WIMS permite aos usuários obter estimativas dos coeficientes e efeitos de reatividade, os perfis da distribuição de energia, o inventário do combustível irradiado, as velocidades de reação e dados da célula da rede em todo o reator. O código também pode ser usado em conjunto com o código PANTHER, o qual resolve as equações homogêneas da difusão de multigrupos em estado estacionário e transiente, utilizando um método nodal avançado. Permite que os cálculos possam ser realizados em 0, 1, 2 ou 3 dimensões, em geometria hexagonal ou retangular, para o estado de equilíbrio e para o comportamento transiente em qualquer usina com um reator térmico (WIMS. A General Purpose Reactor Physics Program for Core Physics Calculations, 2013).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo apresenta-se uma descrição do reator de alta temperatura de leito de bolas HTR-10, assim como os modelos utilizados para sua simulação usando MCNPX (HENDRICKS et al., 2007). Apresenta-se uma descrição do código MCNPX, que usa métodos probabilísticos, explicando as vantagens que tem para a simulação dos reatores de leito de bolas. É apresentada também a tarefa de referência do HTR-10, que posteriormente será resolvida para validar a metodologia da simulação empregada, o código e o método de cálculo usado na simulação, que será utilizada para reprojetar o TADSEA.

3.1 Descrição do HTR-10

A configuração do núcleo do HTR-10 difere muito da que possuem os reatores convencionais que atualmente estão em funcionamento no mundo. No núcleo, as bolas de combustível e as bolas chamadas “dummy” (bolas de grafite sem combustível) estão distribuídas aleatoriamente dentro do núcleo na primeira carga. Na distribuição das partículas TRISO que estão incluídas na zona combustível das bolas encontra-se outra manifestação da aleatoriedade na composição do núcleo. O núcleo do reator em equilíbrio contém aproximadamente 27000 elementos combustíveis, conformando assim, um leito de bolas de 180 cm de diâmetro e 197 cm de altura média. Na zona do núcleo do reator coloca-se uma mistura de bolas combustível e bolas “dummy”, cumprindo com a relação 57%/43%. Depois de atingida a primeira criticalidade, uma mistura de bolas com igual proporção é carregada para encher o reator, facilitando que este seja capaz de operar a potência plena. O núcleo completo (incluindo a zona cônica da descarga) tem um volume estimado de 5 m³ (IAEA-TECDOC-1382, 2003). A Tabela 6 mostra um resumo das principais características de projeto do HTR-10 e a Tabela 7 mostra as características geométricas e materiais do combustível e as bolas “dummy” do HTR-10.

No projeto do reator, o grafite age como o principal material do núcleo, devido a que se encontra localizado no refletor superior, inferior e lateral. As estruturas cerâmicas do núcleo encontram-se localizadas em um vaso metálico que está apoiado no vaso do reator.

Tabela 6 - Principais grandezas de projeto do HTR-10.

Grandeza	Unidade	Valor
Potência térmica	MW	10
Pressão do hélio primário	MPa	3
Diâmetro do núcleo	cm	180
Altura média do núcleo	cm	197
Temperatura média do hélio na saída do reator	°C	700
Temperatura média do hélio na entrada do reator	°C	250
Fluxo mássico do hélio a potência total	kg/s	4,3
Pressão do vapor na saída do gerador de vapor	Mpa	4
Temperatura do vapor na saída do gerador de vapor	°C	440
Temperatura da água de alimentação	°C	104
Taxa do fluxo do vapor	t/hr	12,5
Número de barras de controle		10
Número de bolas absorvedoras no refletor lateral		7
Combustível nuclear		UO ₂
Número de elementos combustíveis em estado de equilíbrio		27000
Modo de recarga do combustível	Multi-passes	

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

O refletor lateral tem uma largura de 100 cm, incluindo uma camada de blocos de grafite. Os canais do hélio frio estão projetados dentro do refletor lateral de forma que o refrigerante primário (hélio) flua para acima depois de entrar ao vaso do reator desde o espaço circular, entre o vaso conector e o duto de ar quente. O fluxo de hélio inverte-se na parte superior do núcleo do reator para entrar ao leito de bolas, dando lugar a um modelo de fluxo descendente. Depois de ser aquecido no leito de bolas, o hélio entra em uma câmara de gás quente no refletor inferior e daí flui através do duto de gás quente até os componentes do trocador de calor.

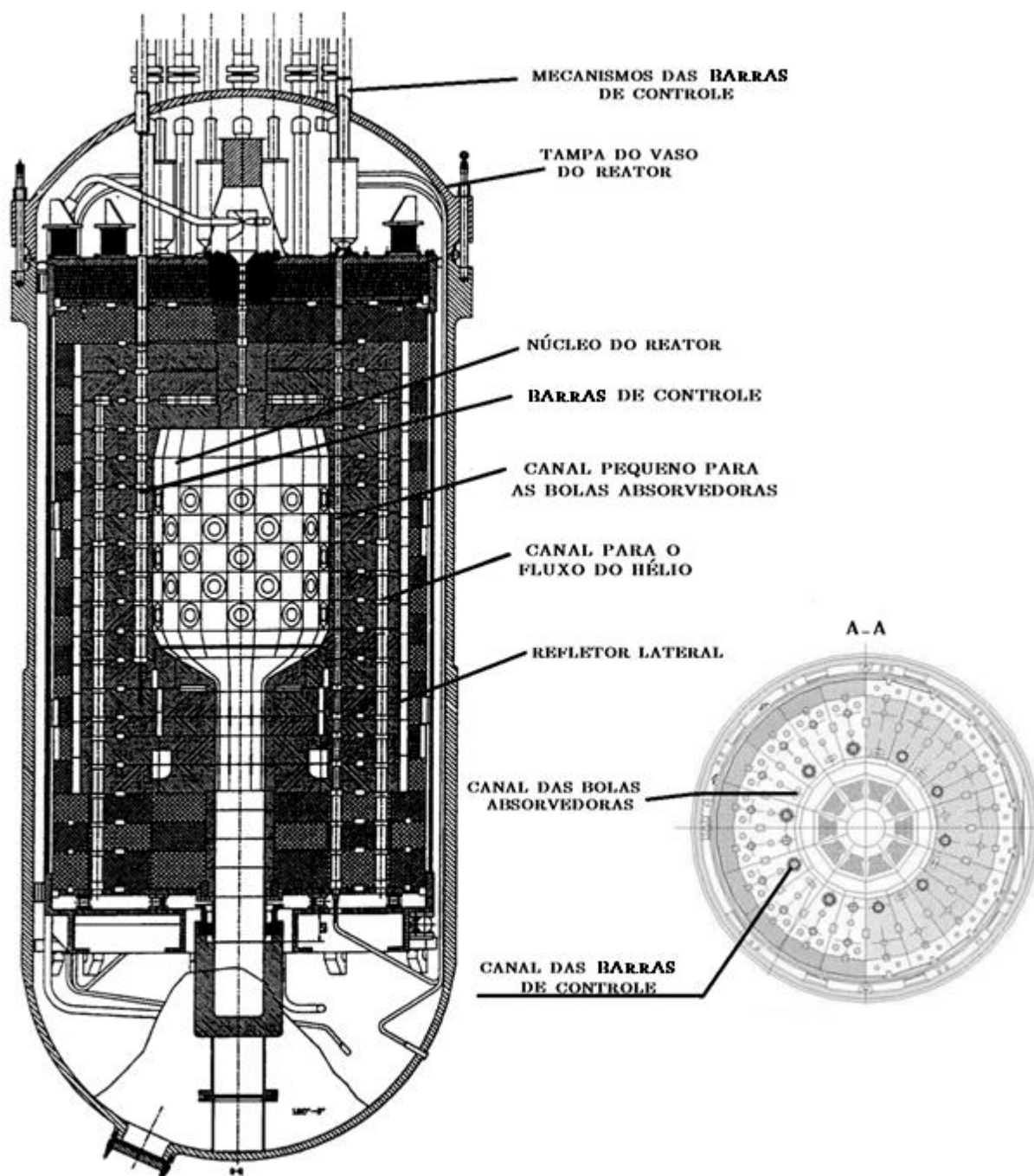
Tabela 7 - Características dos elementos combustíveis e as bolas.

Grandeza	Unidade	Valor
Diâmetro da bola	cm	6
Diâmetro da zona combustível	cm	5
Densidade do grafite da matriz e da zona exterior	g/cm ³	1,73
Massa do metal pesado no elemento combustível	g	5
Enriquecimento do elemento combustível fresco	%	17
Impurezas do boro natural no urânio	ppm	4
Impurezas do boro natural no grafite	ppm	1,3
Fração de empacotamento das bolas no núcleo		0,61
Kernel da partícula TRISO		
Raio	cm	0,025
Densidade do UO ₂	g/cm ³	10,4
Camadas da partícula TRISO		
Materiais das camadas		PyC/PyC/SiC/PyC
Espessura das camadas	cm	0,009/0,004/0,0035/0,004
Densidade das camadas	g/cm ³	1/1,9/3,18/1,9
Bolas “dummy”		
Diâmetro da bola	cm	6
Densidade do grafite	g/cm ³	1,73
Impurezas do boro natural no grafite	ppm	1,3

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

No refletor radial, perto da zona ativa, há dez orifícios para as barras de controle (d=130 mm), sete orifícios para as pequenas bolas absorventes e três orifícios para propósitos de irradiação (d=130 mm). Há vinte canais de fluxo (perfurados com d=80 mm) no refletor lateral para a entrada do hélio. A zona ativa do reator que contém as esferas está rodeada com refletores de grafite e estes, a sua vez, estão rodeados por uma camada (ou camadas) de blocos de grafite borado (Figura 17).

Figura 17 – Seções transversais do núcleo do HTR-10. Esquerda: vertical. Direita: horizontal.

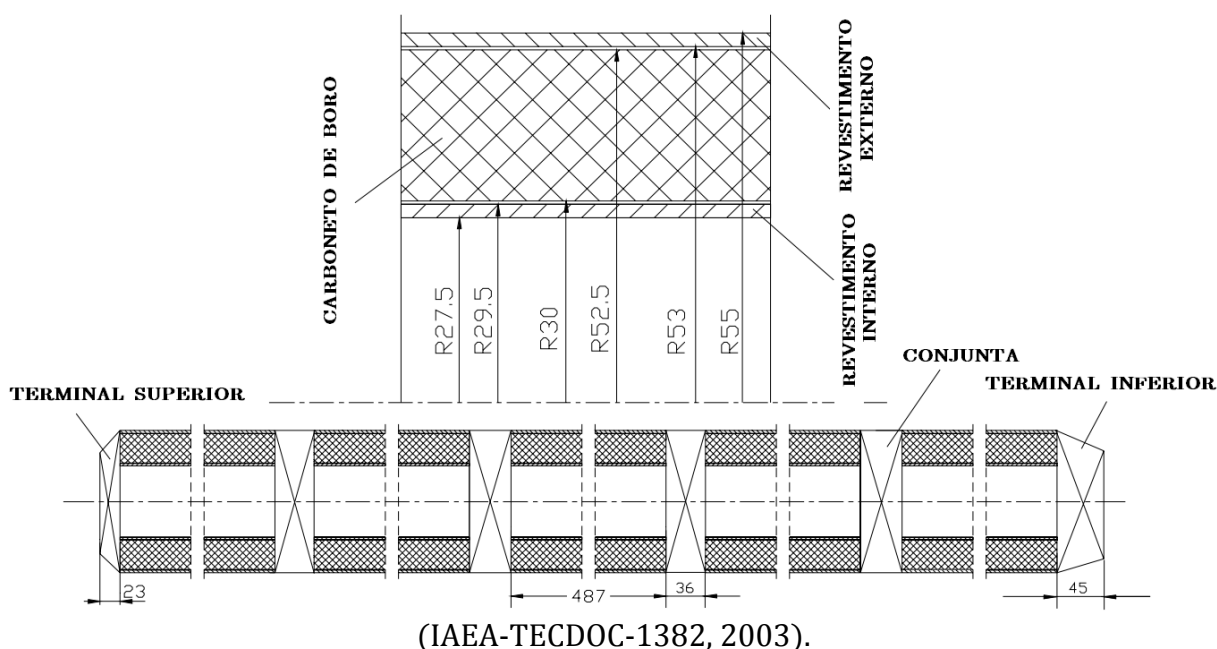


(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

Existem dois sistemas de desligamento do reator, um sistema de barras de controle e um sistema de pequenas bolas absorventes (Figura 17). Ambos sistemas por projeto, estão localizados no refletor lateral. Os dois sistemas são capazes de levar o reator a condições de desligamento de forma segura. O reator possui dez barras de controle

localizadas no refletor lateral. O absorvente de nêutrons usado é o carboneto de boro (B_4C) e cada barra de controle tem cinco segmentos de anéis de B_4C (Figura 18), os quais estão localizados na área entre um revestimento interno e externo de aço inoxidável. Estes estão interconectados por juntas metálicas. O diâmetro interno do anel de B_4C é de 60 mm e o externo é de 105 mm, enquanto seu comprimento é de 487 mm. O diâmetro interno/externo dos revestimentos internos de aço inoxidável são 55 mm/59 mm e dos revestimentos externos são 106 mm/ 110 mm. O comprimento de cada junta é de 36 mm. Os comprimentos dos extremos superior e inferior são de 23 mm e 45 mm, respectivamente (IAEA-TECDOC-1382, 2003).

Figura 18 - Esquema da barra de controle do HTR-10.



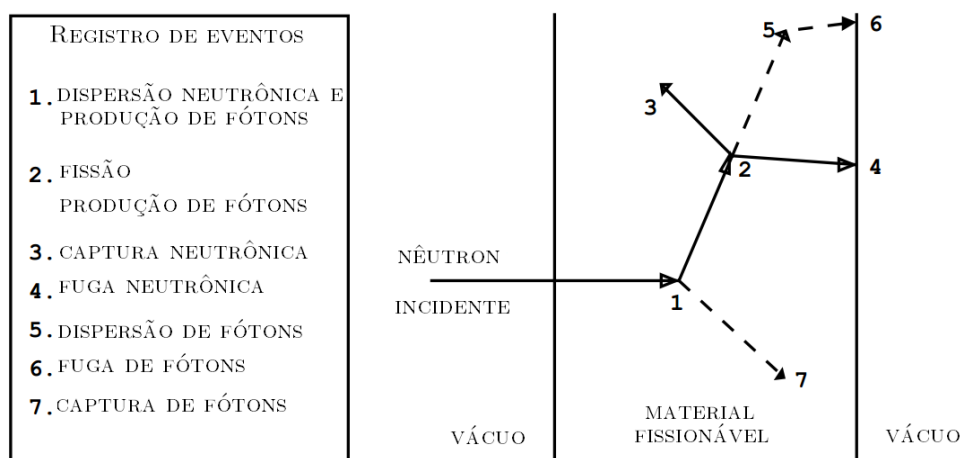
3.2 Métodos probabilísticos

Devido à complexidade dos leitos de bolas e a necessidade de uma simulação precisa, os métodos probabilísticos são muito adequados para a resolução destes problemas. Os métodos probabilísticos, como Monte Carlo, não resolvem uma equação explícita, mas obtêm respostas através da simulação das partículas e determina alguns aspectos do seu comportamento médio. Esse comportamento médio das partículas em um sistema físico (utilizando o teorema central do limite) é inferido o comportamento das partículas simuladas. O método de Monte Carlo pode ser usado para reproduzir um processo estatístico (como a interação das partículas nucleares com a matéria) e é

particularmente útil para problemas complexos que não podem ser simulados por códigos computacionais que usam métodos determinísticos.

Os elementos probabilísticos individuais que compreendem um processo, são modelados sequencialmente e a distribuição da probabilidade que governa esses eventos é estatisticamente amostrada para descrever o fenômeno total. O processo da amostragem estatística é baseado na seleção de números aleatórios (análogo ao lançamento de um dado, em um jogo de cassino, daí o nome de Monte Carlo). No transporte das partículas, as técnicas de Monte Carlo são eminentemente realísticas (um experimento teórico) que consistem em seguir realmente todas e cada uma de muitas partículas a partir da fonte, ao longo da sua vida, até sua morte em alguma categoria terminal (pode ser absorção, fuga, etc). As distribuições de probabilidade são amostradas aleatoriamente a partir dos dados de transporte para determinar o resultado em cada passo da vida das partículas (Monte Carlo N Particle Transport Code System, 2000).

Figura 19 - História do nêutron incidente.



(PELOWITZ, 2005)

A Figura 19 mostra a história de um nêutron incidente em um bloco de material que pode experimentar fissão. Os números entre 0 e 1 são selecionados aleatoriamente para determinar qual interação ocorre (se existe) e onde terá lugar, baseado nas regras (físicas) e probabilidades governantes nos processos (dados de transporte) e os materiais envolvidos. Uma vez completada a história do nêutron, muitas mais histórias são realizadas e seguidas, e assim, as distribuições das partículas envolvidas são bem conhecidas. Os parâmetros de interesse (pedidos pelo usuário) são calculados junto com as estimativas da precisão estatística dos resultados. Esse método apresenta como

desvantagem o elevado custo computacional necessário para obter um bom resultado além de que os resultados fornecidos são só aqueles pedidos pelo usuário.

3.3 MCNPX

O MCNPX (MCNP eXtended, sigla em inglês) é um código baseado em Fortran90 criado em 1994 pelo Laboratório Nacional de Los Álamos, o qual tem desenvolvido uma série de códigos de transporte de partículas há 60 anos. É um código de transporte de partículas, geral, para diferentes tipos de geometrias e para uma grande faixa de energias, dependente do tempo. Podem-se modelar o transporte de uma grande variedade de partículas como nêutrons, elétrons, fótons, prótons, etc., e pode ser usado para reproduzir processos nucleares de caráter estatístico, tais como, a interação de diferentes partículas com a matéria. A versão MCNPX 2.6e, liberada em novembro do 2007 (usada em nosso trabalho), incorpora novas possibilidades com respeito à última versão anterior, agrupando-se as mais importantes em:

- Código de Monte Carlo para o transporte das radiações;
- Simula o transporte de 34 tipos de partículas em uma grande faixa de energias empregando modelos e tabelas de dados nucleares;
- Incorpora modelos para simular a queima e a variação da composição isotópica no tempo do combustível. Método Preditor-Corretor;
- Incorpora novas técnicas estatísticas (redução da variância);
- Incorpora novos tipos de fontes de partículas. (LAHET para considerar o transporte de prótons e a reação de espalação);
- Aperfeiçoamento da depleção e da queima;
- Outras melhoras computacionais (gráficos, paralelismo, sistemas operativos, etc.)

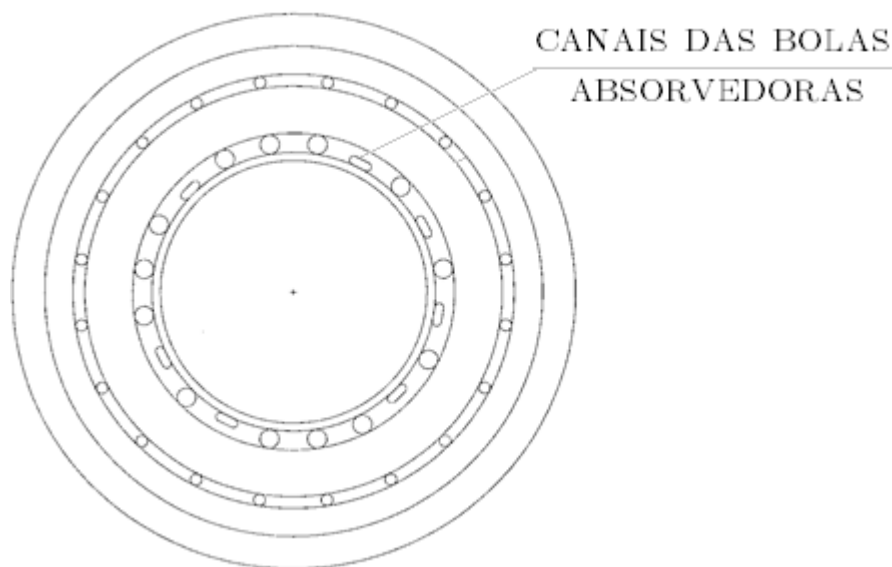
O código MCNPX, na versão 2.6e (HENDRICKS et al., 2007), incorpora um conjunto de novas possibilidades para a simulação computacional dos sistemas dirigidos por aceleradores (ADS). A primeira delas é a incorporação do código LAHET que permite descrever a cascata neutrônica produzida pelo feixe de prótons e o seu transporte a altas energias, e dessa forma, permite a simulação em uma corrida só, do transporte dos prótons e nêutrons no alvo de espalação e o ingresso destes últimos ao núcleo subcrítico como fonte de nêutrons rápidos. Para o cálculo da evolução isotópica no núcleo, utilizou-

se a nova possibilidade da versão anteriormente mencionada que incorpora os códigos CINDER90 e MonteBurns. Na atualidade, as possibilidades de cálculo da queima do combustível e da variação da composição isotópica do código MCNPX estão limitadas para problemas de criticalidade. O CINDER90 trabalha com uma estrutura de 63 grupos energéticos, as seções de choques a 63 grupos condensam-se a partir de um espectro genérico, o qual pode conduzir a algumas discrepâncias no inventário final dos isótopos filhos dos produtos de fissão. O método Preditor-Corretor que se usa para o cálculo da queima do combustível, consiste em realizar um cálculo de queima com CINDER90 até a metade do passo do tempo previsto e logo o MCNPX calcula a densidade do fluxo neutrônico e as velocidades de interação para um estado estacionário nesse passo. Com os novos fluxos e densidades de colisões obtidas, recalcula-se a queima do combustível até o final do passo pelo tempo previsto. Por isso, os fluxos e as densidades de colisões calculadas para o estado estável na metade do passo pelo tempo, consideram-se grandezas médias para calcular a variação na composição isotópica durante o mesmo tempo. A utilização desta técnica permite alongar os passos pelo tempo sem perder exatidão.

3.4 Modelos computacionais para a simulação do leito de bolas do HTR-10

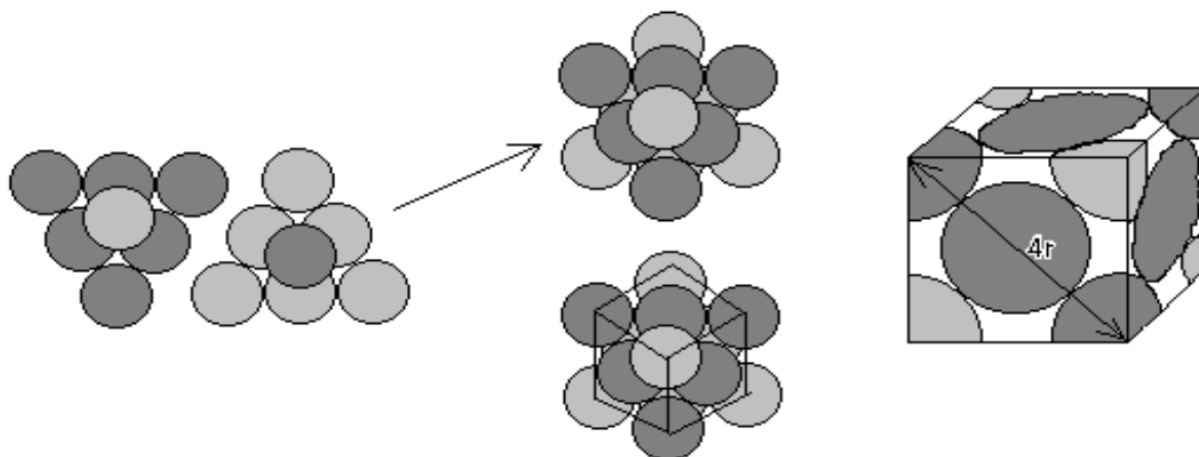
Para a modelagem neutrônica do TADSEA foi desenvolvida uma metodologia baseada no código MCNPX, a qual será validada resolvendo a tarefa de referência do HTR-10. O modelo desenvolvido para simular a neutrônica do HTR-10 permite considerar de forma detalhada o núcleo do reator, os blocos de grafite e de grafite borado que rodeiam eles, além dos canais de irradiação, de resfriamento, as barras de controle e as bolas absorventes. Os orifícios das barras de controle, os canais de irradiação e aqueles da entrada do refrigerante ao núcleo, que estão localizado no moderador de grafite, foram simulados em forma de cilindros com sua localização e dimensões exatas de acordo com o esquema mostrado no problema de referência (Figura 20). O modelo construído para simular a tarefa de referência é um modelo geométrico detalhado do núcleo, que considera a dupla heterogeneidade dada pelas bolas de combustível e as bolas “dummy” no núcleo do reator HTR-10 e as partículas encapsuladas nas bolas de combustível.

Figura 20 - Seção transversal horizontal da parte superior do HTR-10, usando MCNPX.



A relação de bolas de combustível-bolas de moderador (57%-43%) especificada na tarefa de referência, não pode ser modelada exatamente usando as possibilidades das estruturas repetitivas do código MCNPX. Para resolver esse problema foi variado o tamanho das bolas “dummy”, a modo de garantir a reprodução exata da relação mássica das bolas de combustível e as bolas de moderador no volume do núcleo. Essa aproximação já foi considerada em simulações anteriores baseadas no MCNP publicadas em IAEA-TECDOC-1382 (2003). Com o objetivo de estudar a influência dos modelos nos resultados do cálculo, para a simulação do leito de bolas, foram estudados dois tipos de arranjos uniformes das bolas, FCC (cúbico centrado nas faces) e o BCC (cúbico centrado no corpo). Para obter o arranjo FCC, primeiro tomamos um grupo de seis esferas que formam um triângulo equilátero com uma esfera na parte superior, depois tomamos um grupo de sete esferas com a mesma formação, mas orientadas na direção oposta. Unindo ambos grupos, pode-se observar que forma-se um cubo simétrico que contém oito oitavos de esferas nos cantos do cubo e 6 meias de esferas nas faces (Figura 21). A célula unitária está composta por quatro bolas (oito oitavos de bola e seis meias bolas), duas delas consideradas como bolas de moderador com um diâmetro equivalente e as outras duas de combustível.

Figura 21 - Arranjo cúbico centrado nas faces.

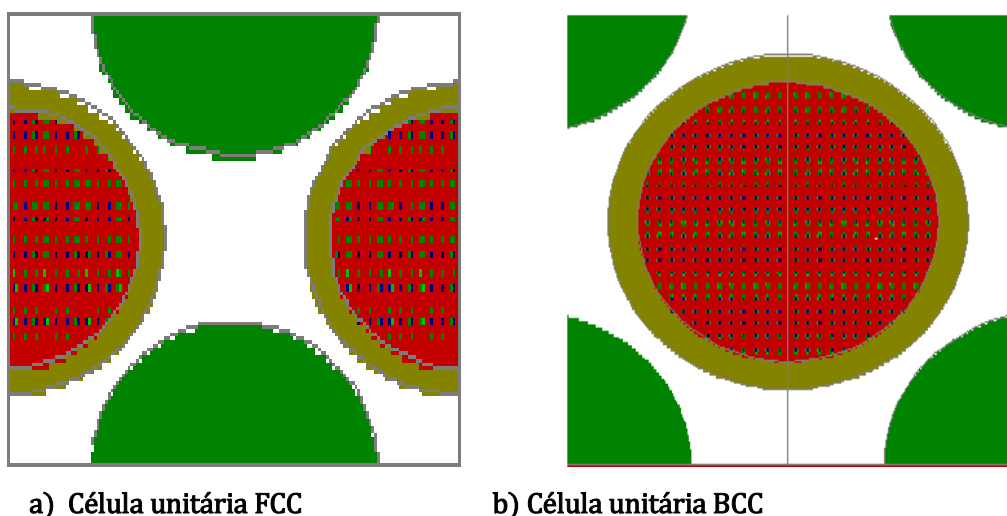


(BEALS et al., 2000)

Calcularam-se as dimensões da célula unitária, de maneira que fosse garantida a fração de empacotamento volumétrica das bolas desejada no núcleo, neste caso 0,61 (valor estabelecido na tarefa de referência), o qual consegue-se espaçando as bolas ou frações das bolas dentro da célula. Considerou-se que o combustível estaria localizado na célula nas metades das bolas laterais e as bolas “dummy” seriam os oitantes da célula e as duas metades superior e inferior. A célula foi projetada deste jeito para que quando fossem simuladas as bolas “dummy” do cone da descarga na primeira carga, usar uma célula unitária similar (com todas as bolas de grafite), garantindo a continuidade dos materiais na união das duas regiões, a região do cone e a região do núcleo. Para esta configuração, a bola “dummy” apresenta um raio de 2,731 cm e o lado da célula cúbica é de 8,665 cm (Figura 22a)

Para o arranjo BCC, toma-se uma célula unitária composta por uma bola no seu interior e oito oitavos de esferas nos cantos, ficando uma célula composta por duas bolas ($8\left(\frac{1}{8}\right) + 1$), uma bola de combustível e outra de moderador. De igual forma ao arranjo FCC, reduz-se o diâmetro da bola “dummy” para garantir a relação combustível-moderador especificada. Nesta célula unitária, considera-se como combustível a bola central e os oitantes representam as bolas de moderador. Para essa configuração, a bola “dummy” apresenta um raio de 2,731 cm e o lado da célula cúbica é de 6,877 cm (Figura 22 b).

Figura 22 - Células unitárias usadas na simulação do leito de bolas.



Uma vez criadas as células unitárias, usando as facilidades das estruturas repetitivas que apresenta o MCNPX, foram repetidas estas células unitárias em todo o volume do núcleo, criando assim, o leito de bolas. A estrutura repetitiva é uma ferramenta que apresenta o MCNPX para gerar geometrias complexas onde existem muitas superfícies de iguais características geométricas, como é o caso dos leitos de bolas. Permitem simular várias superfícies mediante a definição de uma superfície só, diminuindo assim a complexidade e o custo computacional. Para isso, é necessário definir um conjunto de superfícies ou células que formem um conjunto completo (geométrico e de materiais), o qual é chamado de universo (célula unitária). Depois, esse universo é repetido no interior de um volume, criando as superfícies desejadas. No MCNPX, a repetição das células nos volumes realiza-se usando dois tipos de redes, hexagonal ou quadrada. No nosso caso, a célula unitária é um cubo, portanto, a rede mais adequada para criar as estruturas repetitivas é a quadrada. Repetiu-se a célula unitária na rede quadrada até a superfície do cilindro, e pela altura, realizou-se de maneira que a altura do núcleo representara um número inteiro, múltiplo do lado da célula unitária, com o objetivo de conservar a fração de empacotado e a relação 57%-43% de bolas de combustível e bolas de moderador para o problema do cálculo da altura crítica. Na direção radial, existe um corte da célula unitária pela superfície do cilindro, o que constitui uma aproximação do modelo. A consideração de manter o tamanho real das bolas de combustível, preserva o efeito de heterogeneidade da rede das macro-bolas e sua influência na probabilidade de escape à absorção ressonante do U^{238} , que espera-se domine os efeitos de reatividade, enquanto minimiza-se a perturbação devido à dupla heterogeneidade da rede.

O segundo nível de heterogeneidade no combustível está dado pela definição das partículas TRISO dentro das bolas. Para lograr isso, é necessário usar as facilidades das estruturas repetitivas, devido ao grande número de partículas necessárias para garantir uma massa de combustível na bola (ex, 5g no HTR-10) é impossível de simular individualmente, até mesmo porque o MCNPX apresenta um número limite de superfícies para definir uma célula e um número limite de células, o qual é amplamente excedido pelo número de superfícies e células necessárias para simular as partículas TRISO e atingir os valores de massa na bola desejados. Usualmente, é criada uma célula cúbica composta por uma partícula TRISO no centro do cubo, rodeada de grafite. As dimensões da célula cúbica são calculadas de maneira que seja conservada a massa de combustível desejada na bola. Finalmente, a célula cúbica é repetida no interior da bola enchendo todo seu volume. A seção transversal da bola diminui na medida que aumenta a distância dessa seção ao centro da bola, acarretando uma diminuição do número de partículas TRISO situadas na seção. Com o objetivo de diminuir o número de partículas cortadas pela superfície da bola, foi criada uma estrutura repetitiva hexagonal por planos, a qual utiliza uma rede hexagonal que seria mais adequada para a seção transversal circular. Conhecendo a massa e a densidade do combustível na bola, calcula-se o volume de combustível na bola, o qual é dividido pelo volume do kernel da partícula TRISO para obter o número de partículas necessárias para lograr representar a massa de combustível predefinida na bola. No centro da bola é criado um hexágono de dimensões fixas que será nossa rede hexagonal, onde será colocada uma partícula TRISO. A quantidade de hexágonos, e portanto, de partículas TRISO que poderiam ser colocadas no plano, é calculada dividindo a área da seção transversal da bola onde é colocada a rede entre a área do hexágono que compõe a rede. Esse número de partículas TRISO é subtraído do total de partículas TRISO a colocar e é situada a rede em outro plano na direção axial, localizado a uma distância “z” do plano central. Usando relações geométricas demonstra-se que o número de partículas que poderiam ser situadas em um plano localizado a uma distância “z” do centro pode ser calculado mediante a Equação 2

$$No. de partículas (z) = \frac{\pi(R^2 - z^2)}{2\sqrt{3}a^2}. \quad (2)$$

Onde R é o raio da zona combustível da bola e **a**, a apótema do hexágono que compõe a rede hexagonal. Depois, para o passo “z” na direção positiva e negativa,

calculam-se quantas partículas TRISOS podem ser distribuídas nesses dois planos e subtraem-se do total a situar. Novamente é situado outro plano para outro passo axial e realiza-se o mesmo procedimento do cálculo das TRISOS que podem ser colocadas nesse plano. Quando para o próximo passo “z”, obtém-se que o número de TRISOS que poderiam ser situadas no plano é maior do que o número de TRISOS restantes, realiza-se o processo inverso onde essa vez é calculada a distância do plano ao centro da bola que garante que sejam situadas exatamente as TRISOS restantes. A distância do último plano situado ao plano mais próximo é calculada e comparada com a distância que existe entre o plano calculado e o raio da zona combustível e, se fosse maior que um erro definido anteriormente (10^{-3} no nosso caso), incrementa-se o passo “z” e realiza-se o processo iterativo até que os planos encontrem-se uniformemente distribuídos (ROSALES et al., 2013). Para realizar esse processo, foi criada uma ferramenta computacional em Fortran90 que calcula automaticamente a posição dos planos que garante a localização de todas as TRISOS a situar na bola de jeito uniforme (Figura 23).

Realizando o procedimento descrito, é possível simular de maneira detalhada o núcleo de um reator de leito de bolas considerando os dois níveis de heterogeneidade do combustível. Para o HTR-10, foram simuladas também todas as estruturas das barras absorvedoras, canais de irradiação e os canais das bolas absorvedoras. A Figura 24 mostra o esquema do reator HTR-10 em uma seção transversal obtida com o MCNPX, o núcleo carregado e as barras de controle retiradas.

Figura 23 - Modelo hexagonal uniforme.

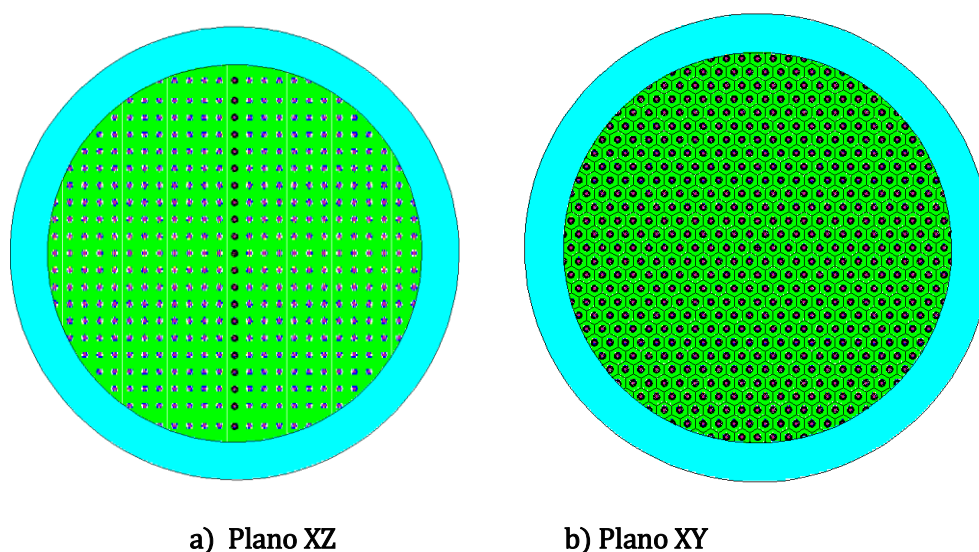
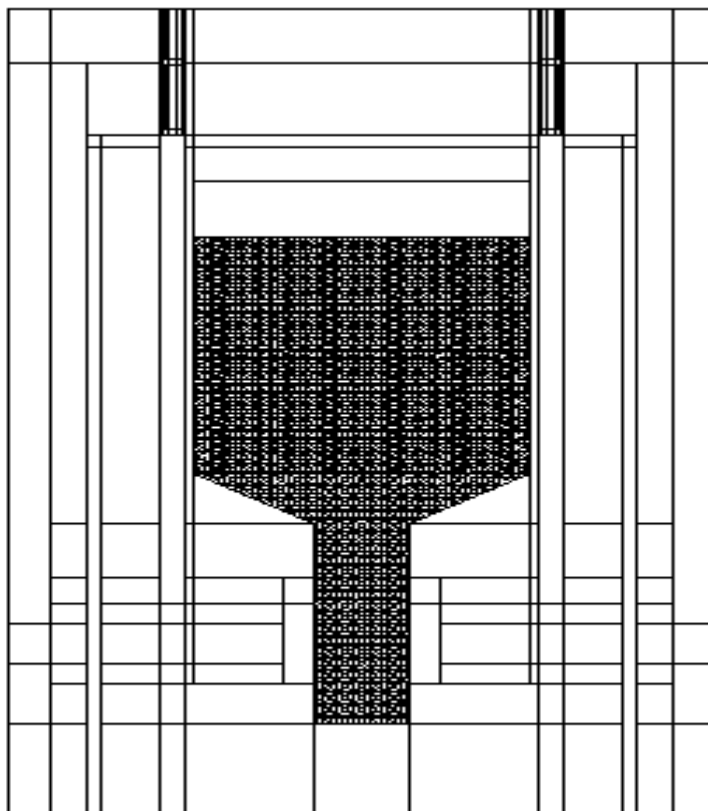
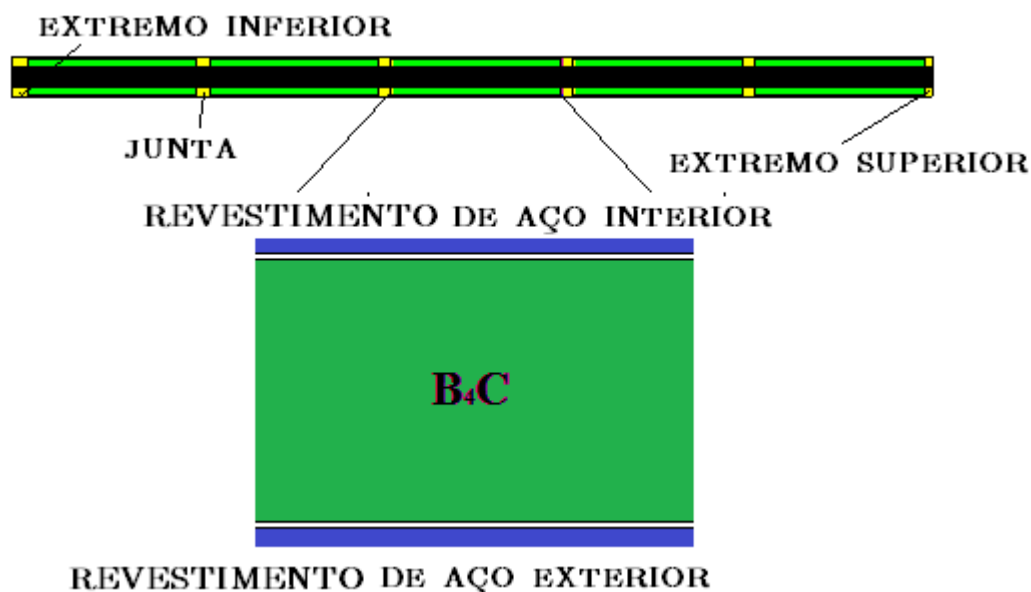


Figura 24 - Seção transversal vertical do modelo do HTR-10, usando MCNPX.



As barras de controle foram simuladas igualmente usando as estruturas repetitivas. Definiu-se um universo como um segmento da barra, composto pelos revestimentos, o carboneto de boro e as juntas, que foi repetido no interior da barra em toda a altura. Os detalhes dos materiais das juntas de aço inoxidável entre as barras de controle não foram incluídos na definição do problema, portanto, assumiu-se que eram de aço puro e que estas não sofrem deformações e mantêm a geometria anular dos segmentos absorventes, facilitando assim, o fluxo de hélio (IAEA-TECDOC-1382, 2003). Definiu-se uma densidade do B_4C de $1,7 \text{ g/cm}^3$ e a composição das estruturas metálicas estabeleceu-se como: Cr-18%, Fe-68,1%, Ni-10%, Si-1%, Mn-2%, C-0,1%, Ti-0,8% com uma densidade de $7,9 \text{ g/cm}^3$ (IAEA-TECDOC-1382, 2003). Na Figura 25 mostra-se o projeto da barra de controle usada na simulação mediante uma vista do MCNPX.

Figura 25 - Seção transversal da barra de controle usando MCNPX.



3.5 Descrição da tarefa de referência do HTR-10

Nos anos 90, o OIEA iniciou vários Programas de Pesquisa Coordenados (CRPs, sigla em inglês), com o objetivo de pesquisar e avaliar a segurança, o comportamento do combustível e os aspectos físico-neutrônicos e operacionais dos HTGRs. Os CRPs promovem a pesquisa científica e o desenvolvimento de engenharia através da avaliação analítica dos problemas de referência, a aplicação de códigos computacionais novos e/ou existentes e a validação dos modelos propostos. Realizaram-se vários CRPs para avaliar o HTTR japonês, o HTR-10 chinês e o reator suíço HTR-PROTEUS (Reator de alta temperatura que usa urânio com baixo enriquecimento) e foi publicado o trabalho IAEA-TECDOC-1382 (2003) o qual é um informe do CRP que avalia o HTTR e o HTR-10. Na segunda parte do informe, realizou-se um estudo do HTR-10, dirigido a avaliar a física do núcleo com a criticalidade inicial, o valor da efetividade das barras de controle (com o núcleo completamente preenchido e com o núcleo preenchido até a altura inicial) e o comportamento dos coeficientes de reatividade de temperatura. Neste estudo recomenda-se que o modelo físico do núcleo do reator inclua como estruturas só os blocos de grafite e fornecem-se os dados iniciais para a modelagem do problema de referência original:

- Densidade do grafite refletor: 1,76 g/cm³;

- Conteúdo equivalente das impurezas do boro natural no grafite: 4,8366 ppm;
- Densidade dos blocos de grafite borado incluindo o B₄C: 1,59 g/cm³;
- Relação de peso do B₄C nos blocos de grafite borado: 5%;
- Densidade das bolas “dummy”: 1,73 g/cm³;
- Impurezas equivalentes do boro nas bolas “dummy”: 1,3 ppm;
- Atmosfera inicial no núcleo: hélio.

Para a modelagem com Monte Carlo da tarefa de referência analisada, a geometria do reator pode ser simulada de uma maneira mais exata e precisa, por isso em IAEA-TECDOC-1382 (2003) fornece os seguintes dados adicionais:

1. Vinte canais de fluxo de hélio:
Diâmetro do canal/Coordenada radial do centro do canal 80/1446 mm
Altura do canal (coordenada z) 1050-6100 mm
2. Dez barras de controle e três canais de irradiação:
Diâmetro do canal/Coordenada radial do centro do canal 130/1021 mm
Altura do canal (coordenada z) 0-4500 mm
3. Sete canais de pequenas bolas absorvedoras:
Localização na coordenada z 0-1300 e 3887,64- 6100 mm
Diâmetro do canal/Coordenada radial do centro 60/986 mm
Localização na coordenada z 1300-3887,64 mm
4. Duto de gás quente
Diâmetro do duto 300 mm
Posição do duto z= 4800 mm
Comprimento do duto na direção radial 900-1800 mm
5. Tubo da descarga do combustível:
Tubo do canal da descarga $0 < R < 250$ mm, $3887,64 < Z < 6100$ mm

Depois que o problema de referência original foi definido e antes da primeira carga do núcleo do HTR-10, foram trocadas duas condições da definição do problema de referência original, com respeito à carga inicial do núcleo e ao primeiro experimento de criticalidade (IAEA-TECDOC-1382, 2003):

- Primeiro, as bolas “dummy” que seriam carregadas no núcleo inicial, não eram as mesmas que tinham sido definidas no problema de referência original. Foram preparadas bolas de grafite de outro tipo para a primeira

criticalidade. As diferenças entre as bolas de grafite preparadas e as bolas definidas no problema tinham a ver com dois aspectos que influem no cálculo físico: densidade e impurezas do boro. A densidade das bolas de grafite preparadas é de $1,84 \text{ g/cm}^3$, um valor superior ao definido no problema de referência ($1,73 \text{ g/cm}^3$). As impurezas equivalentes do boro nas bolas preparadas eram de $0,125 \text{ ppm}$ ao invés de $1,3 \text{ ppm}$, o qual foi o valor definido;

- Em segundo lugar, o primeiro experimento de criticalidade foi planejado fazer-lo com ar ao invés de hélio, que era o refrigerante definido no problema original.

Quando foram dados a conhecer as mudanças do problema de referência aos diferentes participantes do programa coordenado de pesquisa, foram repetidos vários dos cálculos, baseados nas novas condições do problema, cujos resultados para ambos problemas analisam-se em IAEA-TECDOC-1382 (2003). Em resumo as três mudanças consideradas para o problema de referência desviado foram:

- Densidade das bolas “dummy”: $1,73 \text{ g/cm}^3 \rightarrow 1,84 \text{ g/cm}^3$;
- Impurezas equivalentes do boro nas bolas “dummy”: $1,3 \text{ ppm} \rightarrow 0,125 \text{ ppm}$;
- Atmosfera inicial no núcleo: hélio $\rightarrow$ ar

Os problemas de referência para a modelagem computacional neutrônica do reator de teste chinês HTR-10, compreendem uma serie de cálculos de estado nos quais calcula-se o valor do fator de multiplicação efetiva (K_{eff}) em diferentes condições. Para determinar a altura crítica do núcleo, calcula-se o valor de K_{eff} para diferentes valores da altura do leito de bolas e para determinar os efeitos de reatividade por temperatura e efetividade das barras de controle, calculam-se diferentes estados do reator, variando a temperatura do núcleo ou fazendo variações nas posições das barras de controle. Os problemas de referências são divididos em quatro subproblemas:

1. Avaliação da altura crítica do núcleo para a carga inicial (B1)

O problema de referência B1, consiste em estimar a altura crítica inicial (quando $K_{\text{eff}}=1.0$) do núcleo do leito de bolas do reator HTR-10. O valor da altura é medido a partir da superfície superior do cone da descarga. No problema de referência original, considera-se uma temperatura do núcleo de $20 \text{ }^\circ\text{C}$, uma atmosfera de hélio (refrigerante), com barras de controle e bolas absorvedoras completamente retiradas. No experimento,

atingiu-se a primeira criticalidade com um número total de 16890 bolas carregadas no núcleo do reator, das quais, 9627 eram bolas de combustível e 7263 eram bolas “dummy” (relação 57%-43%). Essa carga corresponde com uma altura de 123,06 cm. A atmosfera dentro do núcleo era de ar com uma temperatura de 15 °C.

2. Coeficientes de reatividade por temperatura do combustível e do moderador (B2)

O problema de referência B2 consiste em calcular o valor de K_{eff} com o núcleo cheio (5 m³), em atmosfera de hélio, com uma temperatura no núcleo de 20 °C (B21), 120 °C (B22) e 250 °C (B23), respectivamente e sem nenhuma barra de controle ou bolas absorvedoras inseridas. O núcleo cheio apresenta uma altura de 180,12 cm.

3. Efetividade das barras de controle para o núcleo completo (B3)

Os problemas modelados neste caso são, o cálculo da efetividade das dez barras de controle inseridas completamente (B31) e a efetividade de uma barra só totalmente inserida, com as outras nove completamente retiradas (B32), em uma atmosfera de hélio a 20 °C e o núcleo cheio. Os experimentos de calibração da efetividade das barras de controle foram realizados para algumas das barras de controle quando o núcleo do reator foi carregado com 17000 bolas. Essa quantidade corresponde a uma altura de núcleo de 123,86 cm. O valor experimental da efetividade integral de uma barra de controle foi de 1,4693%.

4. Efetividade das barras de controle para o núcleo inicial (B4)

Esse problema inclui estimar a efetividade das 10 barras de controle totalmente inseridas (B41), sob uma atmosfera de hélio e uma temperatura do núcleo de 20 °C, para uma altura da carga do núcleo de 126 cm. Inclui também, calcular a efetividade diferencial de uma barra de controle (B42), a que deve ser calculada como a efetividade da barra de controle quando está nas posições axiais 394,200 cm, 383,618 cm, 334,918 cm, 331,318 cm, 282,618 cm, 279,018 cm, 230,318 cm (IAEA-TECDOC-1382, 2003), também sob uma atmosfera de hélio e a uma temperatura do núcleo de 20 °C. No experimento, as condições não foram as mesmas que as planejadas para o problema. As principais diferenças estavam na altura da elevação das barras de controle e a quantidade de combustível carregado no núcleo do reator. No cálculo, a posição do extremo inferior da barra de

controle foi trocada de 119,200 cm para 394,200 cm, enquanto que no experimento a posição do extremo inferior da barra de controle foi trocada de 171,200 cm para 394,200 cm. No cálculo, a condição especificada de carga do núcleo foi de 126 cm de altura, equivalente a 17293 bolas, enquanto a condição experimental foi de 17000 bolas. Apesar de que estas diferenças entre as condições de cálculo e as experimentais, os dados podem ser juntados e comparados.

4 VALIDAÇÃO DOS MODELOS USADOS NA SIMULAÇÃO DOS REATORES DE LEITOS DE BOLAS

Neste capítulo apresenta-se a resolução da tarefa de referência do HTR-10 usando MCNPX, versão 2.6e, com o objetivo de validar os modelos neutrônicos propostos para a simulação dos leitos de bolas com combustível TRISO que serão utilizados para melhorar o projeto conceitual do TADSEA. Os resultados obtidos na nossa simulação são comparados com os resultados experimentais e com os resultados obtidos por outros autores participantes do programa coordenado para os mesmos problemas (ROSALES et al., 2014). Realizam-se estudos comparativos dos modelos de distribuição das partículas TRISO dentro das bolas a pequena escala (em uma bola, cálculo de K_{inf}) e a grande escala (no núcleo do HTR-10, cálculo da altura crítica).

4.1 Resolução da tarefa de referência do HTR-10 para o problema original

4.1.1 Problema de referência B1

Calculou-se o problema de referência original B1 mediante a simulação geométrica detalhada do núcleo de leito de bolas do reator HTR-10, fazendo uso de uma estrutura repetitiva quadrada para o arranjo FCC. Empregou-se a fração de empacotamento do núcleo estabelecida de 0,61 e garantiu-se a relação 57%-43% combustível-moderador, reduzindo o tamanho das bolas de moderador. Na modelagem foi considerada a dupla heterogeneidade das bolas de combustível no núcleo e as partículas encapsuladas dentro delas, além de fazer uma representação exata de todos os blocos de grafite no refletor, com os orifícios para os canais de refrigerante, as barras de controle e as bolas absorventes que rodeiam o leito de bolas. Para calcular a altura crítica, foi realizado o cálculo de K_{eff} para diferentes alturas de carga do núcleo e depois, mediante técnicas de interpolação (Spline Cúbico), calcula-se a altura do núcleo para a qual K_{eff} é igual a unidade. As alturas usadas para o cálculo de K_{eff} são múltiplos da altura da célula unitária, com o objetivo de não cortar as bolas de combustível na direção axial, manter as relações de moderador-combustível, a fração de empacotamento, e dessa forma, minimizar a influência desta aproximação no modelo. Os cálculos foram realizados com as bibliotecas de seções de choque ENDF/B-VI com uma atmosfera de hélio, a uma temperatura de 27

°C (300 K) no núcleo. Os valores de K_{eff} obtidos para cada uma das alturas simuladas mostram-se na Tabela 34 do Anexo I. Esses resultados foram calculados para um milhão de histórias dos nêutrons e todos os valores de desvio padrão (D. P.) estão abaixo de 100 pcm.

Tabela 8 - Resultados obtidos para o cálculo da altura crítica por outros participantes do CRP e no nosso trabalho.

	Métodos de cálculo usados	
	Difusão/Transporte (D/T)	Monte Carlo (M)
China	125,8	126,1
Alemanha	124,2	-
	126,8	
Indonésia	107	-
	120	
Japão	113	-
Holanda	125,3	-
Rússia	136	137,3
Turquia	119,27	129,7
		135,3
EUA	-	127,5
		128
Nosso trabalho	-	123,67047

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

Na Tabela 8 mostram-se os resultados obtidos para o cálculo da altura crítica pelos outros países participantes no programa, e no nosso trabalho, além dos métodos de cálculo com os quais foram realizadas as simulações. O resultado obtido neste cálculo

encontram-se na ordem dos obtidos pelos participantes do programa coordenado e esse resultado apresenta boa concordância com o valor experimental reportado (123,06 cm), o qual representa um erro relativo ao valor experimental do 0,5%.

4.1.2 Problema de referência B2

Os cálculos foram realizados com as bibliotecas disponíveis para o MCNPX versão 2.6e de seções de choque, obtidas a partir de ENDF/B-VI com temperaturas no núcleo de 26,85 °C (300 K), 326,85 °C (600K) e 526,85 °C (800 K), uma atmosfera de hélio, com as barras completamente retiradas e sem bolas absorventes. A não coincidência das bibliotecas disponíveis com as temperaturas consideradas no experimento, faz impossível a comparação real dos resultados do cálculo, assim, decidiu-se calcular o valor de K_{eff} para as temperaturas do experimento através da interpolação polinômica, que embora não seja a comparação ideal, permite realizar uma análise quantitativa das tendências. Os resultados dos cálculos para as temperaturas disponíveis mostram-se na Tabela 9, assim como os resultados para os problemas B22 e B23. Os resultados de K_{eff} para as temperaturas estabelecidas na tarefa obtidos mediante a interpolação dos resultados de K_{eff} obtidos para as outras temperaturas apresentam boa concordância com os reportados pelos participantes do programa coordenado (Tabela 10).

Tabela 9 - K_{eff} em função da temperatura do núcleo.

Problema	B21	Temperaturas disponíveis			B22 (interpolado)	B23 (interpolado)
Temperatura (K)	300	600	800		393,15	523,15
K_{eff}	1,12438	1,09999	1,08117		1,11731	1,10669
D.P. (pcm)	90	90	86		-	-

Tabela 10 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência original B2.

	B21 (K_{eff} a 20°C o 27°C)		B22 (K_{eff} a 120°C)		B23 (K_{eff} a 250°C)	
	D/T	M	D/T	M	D/T	M
China	1,1197	-	1,1104	-	1,0960	-

Alemanha	1,13725	-	1,12404	-	1,10693	-
	1,12665		1,11331		1,09588	
Indonésia	1,2193	-	1,1983	-	1,1748	-
	1,1381		1,1149		1,0844	
Holanda	1,1176	-	1,1085	-	1,0963	-
Rússia	1,1182	1,1076	1,1079	1,0933	1,0927	1,0794
Turquia	-	1,0941	-	1,0802	-	1,0671
		1,0809		1,0380		1,0035
EUA	-	1,1319	-	1,1279	-	1,1245
		1,1298				

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

4.1.3 Problema de referência B3

Os problemas modelados neste caso são, o cálculo da efetividade das dez barras de controle inseridas completamente (B31) e a efetividade de uma barra só, com as barras restantes retiradas (B32), a 20 °C e o núcleo cheio. No nosso estudo, os cálculos de K_{eff} foram feitos usando as bibliotecas ENDF/B-VI, para uma temperatura de 27 °C no núcleo com atmosfera de hélio. A efetividade das barras é calculada mediante a Equação 3.

$$\rho_w = \frac{k_1 - k_2}{k_1 \cdot k_2} \quad (3)$$

Onde ρ_w é o valor da efetividade das barras de controle, k_1 e k_2 representam os valores de K_{eff} no reator quando as barras estão completamente inseridas e quando não estão inseridas, respectivamente. Os valores obtidos para as efetividades das barras em cada um dos problemas são mostrados na Tabela 11. Os resultados obtidos na simulação estão na ordem dos resultados publicados no programa coordenado (Tabela 12), e apresentam boa concordância com os resultados reportados pelos chineses em suas simulações com métodos de Monte Carlo.

Tabela 11 - Efetividade das barras de controle para o núcleo completo.

Problema	Sem barras	B31	1 barra
K_{eff}	1,12438	0,96447	1,10795
D. P. (pcm)	90	91	92
Efetividade (%)	-	14,75	1,32

Tabela 12 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B3.

	B31 (%)		B32 (%)	
	D/T	M	D/T	M
China	15,24	16,56	-	1,413
Alemanha	16,6	-	1,56	-
Japão	18	-	-	-
Holanda	11,86	-	-	-
Rússia	15,50	17,90	-	-
Turquia	-	18,73	-	2,53
		21,88		4,60
EUA	-	16,50	-	-

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

4.1.4 Problema de referência B4

Calculou-se a efetividade das dez barras de controle totalmente inseridas, em uma atmosfera de hélio, com uma temperatura do núcleo de 27 °C e uma altura de carga do núcleo de 126 cm. A efetividade das barras de controle foi igualmente calculada mediante a Equação 3. Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 13. O valor experimental reportado para a efetividade de uma barra para o núcleo inicial é de 1,44% e o valor reportado pelos chineses em suas simulações foi de 1,793%. O resultado obtido em nossa simulação apresenta boa concordância com os reportados pela maioria dos países participantes no programa coordenado (Tabela 14).

Tabela 13 - Efetividade das barras de controle para a carga inicial do núcleo.

Problema	Sem barras	B41	1 barra
K_{eff}	1,00758	0,85496	0,98940
D. P. (pcm)	92	90	89
Efetividade (%)	-	17,72	1,82

Tabela 14 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B4.

	B41 (%)		B42 (%)	
	D/T	M	D/T	M
China	18,27	19,36	1,619	1,793
Alemanha	20,50	-	1,97	-
Holanda	13,61	-	-	-

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

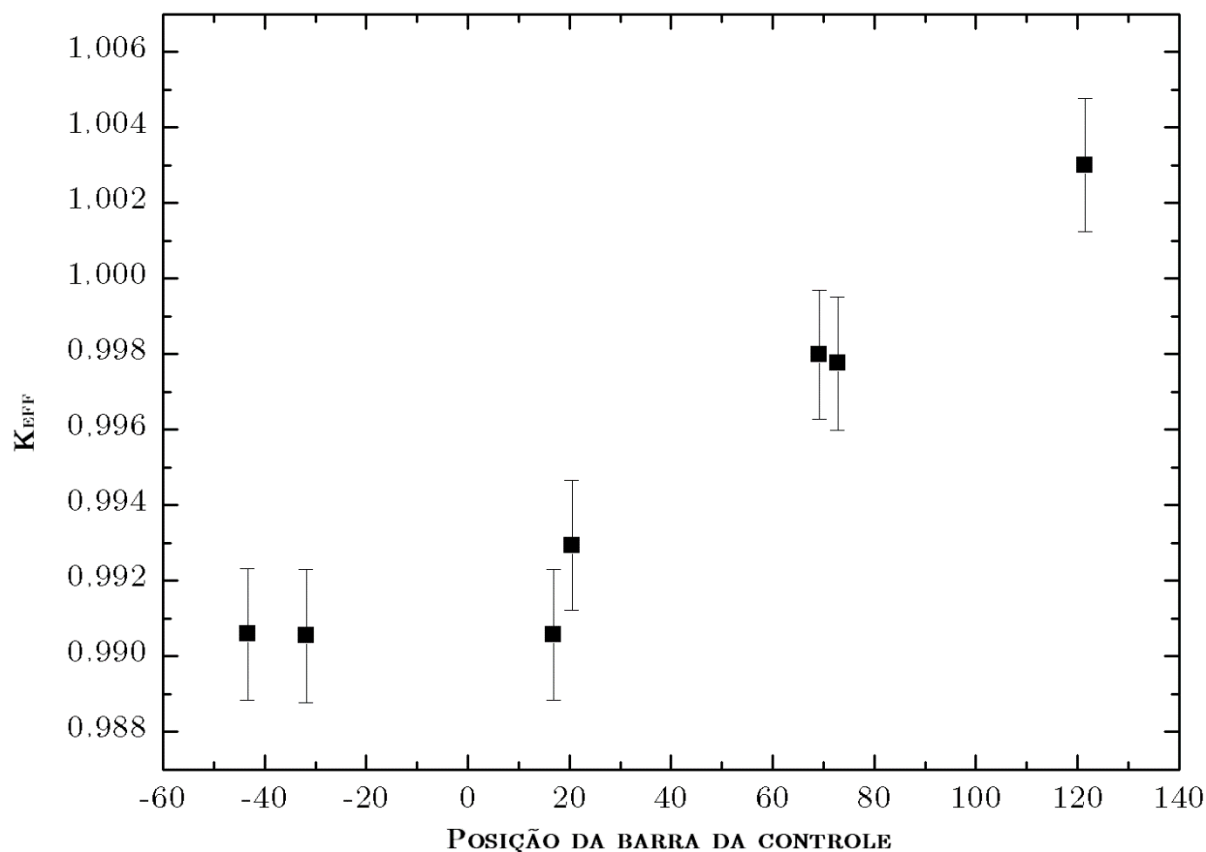
A efetividade diferencial de uma barra foi calculada para as posições axiais equivalentes às propostas em IAEA-TECDOC-1382 (2003), devido a que o origem de nosso sistema de referência está deslocado (o plano inferior do núcleo combustível encontra-se na altura 0). Trabalhou-se sob uma atmosfera de hélio, a temperatura do núcleo de 27 °C e uma altura de 126 cm. Os valores calculados estão mostrados na Tabela 15. Os intervalos de confiança foram calculados para um nível de confiança do 95%. Na Figura 26 mostra-se a variação de K_{eff} em função da posição de uma barra de controle para cada uma das posições da barra usadas no cálculo da efetividade diferencial.

Tabela 15 - Efetividade diferencial de uma barra de controle.

Posição	K_{eff}	Efetividade (%)
-43,382	$0,99059 \pm 0,00174$	-1,70
-31,8	$0,99054 \pm 0,00176$	-1,71
16,9	$0,99057 \pm 0,00173$	-1,70
20,5	$0,99294 \pm 0,00173$	-1,46

69,2	$0,99799 \pm 0,00171$	-0,95
72,8	$0,99776 \pm 0,00176$	-0,98
121,5	$1,00300 \pm 0,00176$	-0,45

Figura 26 - Comportamento de K_{eff} com as variações da posição da barra de controle.



Os valores de K_{eff} para mudanças pequenas da posição da barra permanecem dentro da faixa de incerteza do método de cálculo sem apresentar diferenças significativas. Para intervalos maiores da variação da posição da barra pode-se observar que o valor de K_{eff} aumenta na medida que é retirada a barra de controle.

4.2 Resolução da tarefa de referência do HTR-10 para o problema desviado

A mudança de algumas condições do problema de referência original (densidade do grafite e a concentração de boro nas bolas “dummy” e o hélio do refrigerante que foi trocado por ar) gerou outro grupo de resultados para os problemas planejados, originando o problema de referência desviado. Esses desvios foram considerados no nosso modelo para realizar a simulação do novo problema de referência, provocando

mudanças na composição das bolas e na atmosfera do núcleo. As outras condições foram mantidas invariáveis com respeito ao problema original.

4.2.1 Problema de referência B1

Calcula-se a altura crítica inicial do núcleo do reator HTR-10, com temperatura do núcleo de 20 °C, neste caso com uma atmosfera de ar (refrigerante), com uma densidade das bolas “dummy” de 1,84 g/cm³ e com uma concentração do boro de 0,125 ppm. Os outros parâmetros, bibliotecas e condições foram mantidas intatas.

Os valores de K_{eff} obtidos para cada uma das alturas simuladas mostram-se na Tabela 35 do Anexo I e observa-se que, a altura crítica é menor no problema desviado em comparação com o resultado obtido para o problema original e, por conseguinte, menos bolas são necessárias para atingir a criticalidade. Esperava-se esse resultado, devido que com o aumento da densidade do moderador e a diminuição das impurezas do boro no moderador são melhoradas as propriedades multiplicativas do núcleo, obtendo-se assim, uma melhor economia neutrônica. Os resultados apresentam boa concordância com os reportados em IAEA-TECDOC-1382 (2003) para esse problema (Tabela 16).

Tabela 16 - Resultados obtidos para o cálculo da altura crítica por outros participantes do CRP e no nosso trabalho.

	Métodos de cálculo usados	
	Difusão/Transporte	Monte Carlo
China	122,558	122,874
França	-	115,36
	-	117,37
Alemanha	121	-
	123,3	-
Holanda	122,1	-
África do Sul	122,537	-

Nosso trabalho	-	121,31
----------------	---	--------

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

4.2.2 Problema de referência B2

O problema B2 foi calculado sob as mesmas condições, as mesma bibliotecas e a mesma metodologia empregada no problema original. Foram mudadas somente as condições de projeto que originaram o problema de referência desviado, o refrigerante, a densidade das bolas “dummy” e a concentração de boro nas mesmas. Os resultados mostram-se na Tabela 17, os quais estão em boa concordância com os reportados no programa coordenado pela maioria dos países participantes (Tabela 18).

Tabela 17 - K_{eff} em função da temperatura do núcleo.

Problema	B21	Temperaturas disponíveis		B22 (interpolado)	B23 (interpolado)
Temperatura (K)	300	600	800	393,15	523,15
K_{eff}	1,13317	1,10693	1,08640	1,12498	1,11357
D. P. (pcm)	89	89	87	-	-

Tabela 18 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência desviado B2.

	B21 (K_{eff} a 20°C o 27°C)		B22 (K_{eff} a 120°C)		B23 (K_{eff} a 250°C)	
	D/T	M	D/T	M	D/T	M
China	1,1358	1,1381	1,1262	-	1,1111	-
França	-	1,15679 1,14737	-	-	-	-
Alemanha	1,1468 1,1368	-	1,1334 1,1232	-	1,1160 1,1054	-
África do Sul	1,12861	-	1,11956	-	1,10469	-

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

4.2.3 Problema de referência B3

O cálculo da efetividade das barras para o núcleo completo foi realizado usando as mesmas condições usadas no problema original e a mesma metodologia, excetuando só as três mudanças que originaram o problema desviado (o refrigerante, densidade do grafite nas bolas “dummy” e impurezas do boro nas bolas “dummy”). Os resultados são mostrados na Tabela 19, apresentam boa concordância com os resultados publicados em IAEA-TECDOC-1382 (2003) (Tabela 20) e pode-se observar que a efetividade de uma barra representa aproximadamente 10% da efetividade das dez barras, como era esperado.

Tabela 19 - Efetividade das barras de controle para o núcleo completo.

Problema	Sem barras	B31	1 barra
K_{eff}	1,13317	0,97630	1,11384
D. P. (pcm)	89	94	89
Efetividade (%)	-	14,18	1,53

Tabela 20 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B3.

	B31 (%)		B32 (%)	
	D/T	M	D/T	M
China	14,46	15,31	1,277	1,343
França	-	13,06	-	1,35
		13,44		1,31
Alemanha	15,73	-	1,48	-

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

4.2.4 Problema de referência B4

O cálculo da efetividade das barras e a efetividade diferencial de uma barra para o núcleo inicial foi calculado para o problema desviado. As metodologias de cálculo e condições foram mantidas, excetuando só as mudanças que originaram o problema

desviado (o refrigerante, densidade do grafite nas bolas “dummy” e impurezas do boro nas bolas “dummy”). Os resultados são mostrados nas Tabelas 21 e 22 respectivamente. Igualmente esses resultados apresentam muito boa concordância com os reportados no programa coordenado e a efetividade de uma barra representa o 10% da efetividade das dez barras (Tabela 23). Na Figura 27 mostra-se o comportamento do K_{eff} em função da posição da barra de controle. Igual ao caso do problema original, as pequenas variações na altura da barra não originam diferenças significativas no valor de K_{eff} (para um 95% de confiança). Variações maiores na posição das barras mostram uma diferença significativa no valor do K_{eff} .

Tabela 21 - Efetividade das barras de controle para a carga inicial do núcleo.

Problema	Sem barras	B41	1 barra
K_{eff}	1,01358	0,86778	0,99693
D. P. (pcm)	88	92	89
Efetividade (%)	-	16,58	1,65

Tabela 22 - Efetividade diferencial de uma barra de controle.

Posição	K_{eff}	Efetividade (%)
-43,382	$0,99846 \pm 0,00176$	-1,49
-31,8	$0,99607 \pm 0,00172$	-1,73
16,9	$1,00044 \pm 0,00169$	-1,30
20,5	$1,00052 \pm 0,00165$	-1,29
69,2	$1,00527 \pm 0,00178$	-0,82
72,8	$1,00547 \pm 0,00171$	-0,80
121,5	$1,00977 \pm 0,00174$	-0,37

Figura 27 - Comportamento de K_{eff} com as variações da posição da barra de controle.

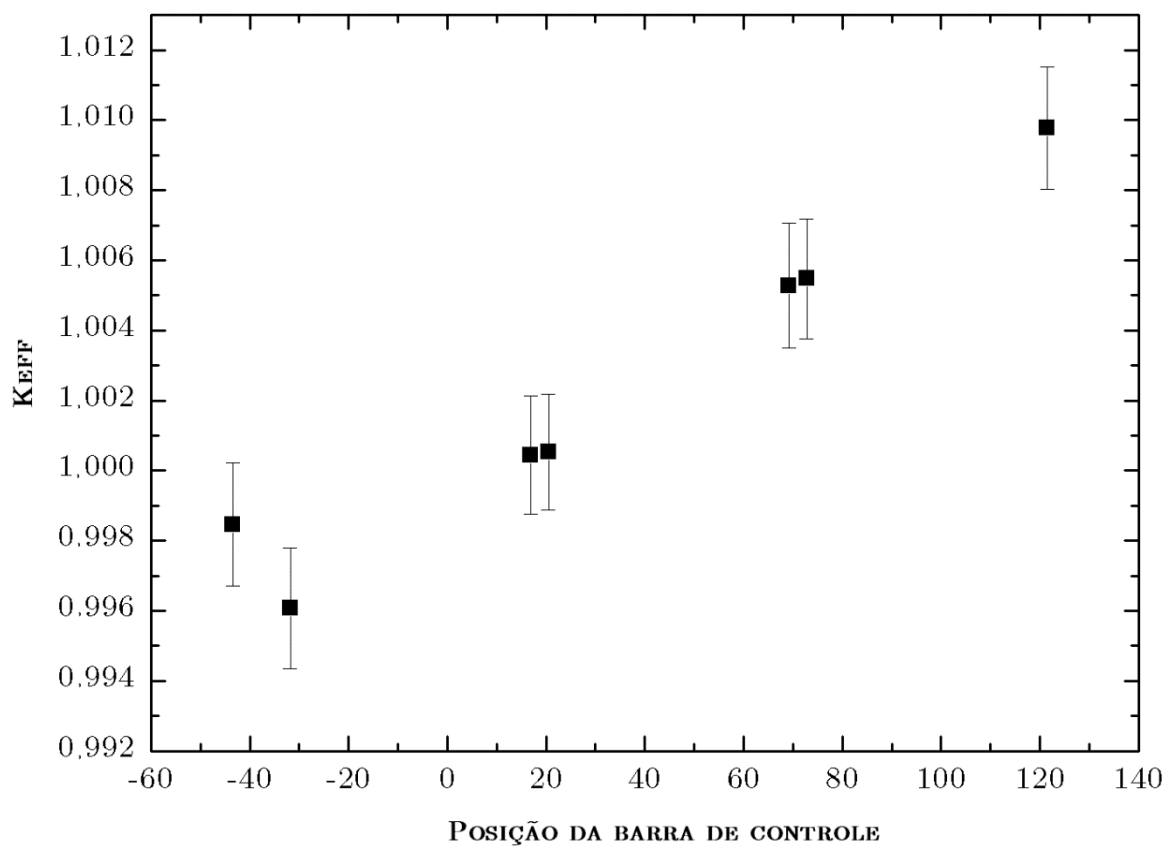


Tabela 23 - Resultados obtidos pelos participantes do Programa Coordenado para o Problema de referência B4.

	B41 (%)		B42 (%)	
	D/T	M	D/T	M
China	17,23	18,28	1,540	1,572
França	-	13,66	-	1,52
		3,80		
Alemanha	19,31	-	1,86	-

(IAEA-TECDOC-1382, 2003)

4.3 Influência das configurações BCC e FCC nas propriedades multiplicativas do núcleo

O objetivo deste estudo é avaliar a possível influência do arranjo usado para a simulação das bolas no núcleo, BCC ou FCC no cálculo da altura crítica. Os cálculos foram realizados para as condições definidas no problema de referência original com uma atmosfera de ar no núcleo (refrigerante). Como foi explicado no Capítulo 3, as células unitárias que compõem os arranjos BCC e FCC estão compostas por dois e quatro bolas, respectivamente. As alturas do núcleo para os quais calcula-se o valor de K_{eff} são valores diferentes em cada caso; devido que os valores foram escolhidos como múltiplos do lado da célula unitária para as duas configurações (8,665 cm para a configuração FCC e 6,877 cm para a configuração BCC), com o objetivo de evitar efeitos de corte na direção axial que poderiam alterar os valores da fração de empacotamento e a relação moderador-combustível predefinidas. Os resultados obtidos de K_{eff} para as diferentes alturas do núcleo usando as duas configurações são mostrados na Tabela 24. Os valores da altura crítica foram obtidos mediante interpolação Spline Cúbico, 127,599 cm e 126,184 cm para as configurações FCC e BCC, respectivamente. Os valores são muito similares, apresentando entre eles um erro relativo do 1,1%. A comparação ponto a ponto é impossível, devido à diferença do tamanho entre ambas células. O resultado obtido mostra que, para este tipo de cálculo, as células são equivalentes.

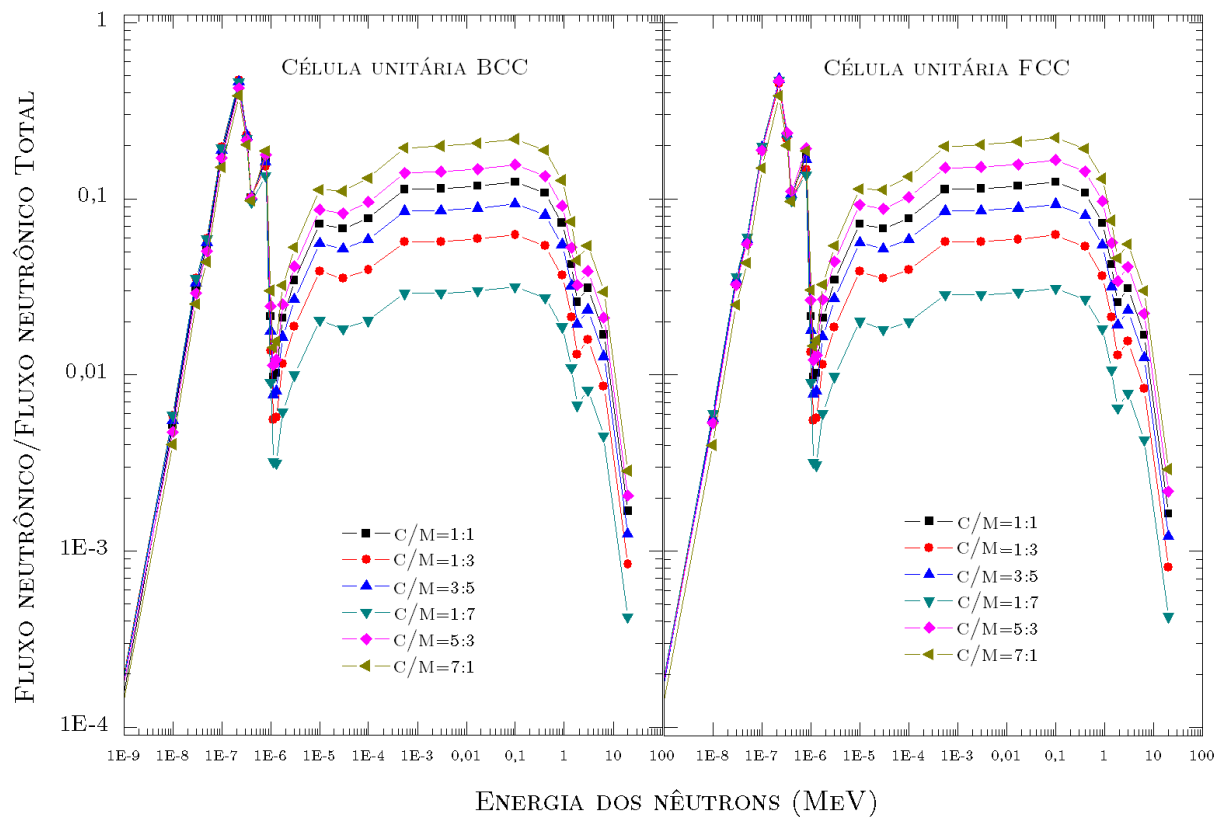
Tabela 24 - Valores de K_{eff} para as diferentes alturas usando as configurações das bolas FCC e BCC.

Altura (cm)	K_{eff}	D. P. (pcm)	Altura (cm)	K_{eff}	D. P. (pcm)
FCC			BCC		
86,650	0,84136	88	96,2822	0,89089	90
95,315	0,88329	89	103,1595	0,92115	91
103,980	0,91968	87	110,0368	0,94597	87
112,645	0,95301	87	116,9141	0,96954	89
121,310	0,98135	89	123,7914	0,99234	91
129,975	1,00689	89	130,6687	1,01476	91
138,640	1,03129	87	137,5460	1,03210	88
147,305	1,05146	88	144,4233	1,04923	91

155,970	1,07036	90	151,3006	1,06466	91
164,635	1,08672	88	158,1779	1,08043	88
-	-	-	165,0552	1,09213	90
Altura crítica (cm)					
127,599	1	-	126,184	1	-

Realizou-se um estudo com o objetivo de avaliar o impacto que poderia ter o arranjo das bolas no espectro neutrônico, e por sua vez, mudanças da composição isotópica durante a queima, para várias relações combustível/moderador (C/M). Compararam-se os espectros neutrônicos das células unitárias BCC e FCC para diferentes relações combustível/moderador. A relação combustível/moderador foi obtida em cada célula variando o raio das bolas “dummy”. As características geométricas das partículas TRISO e a fração de empacotamento foram mantidas iguais às da tarefa de referência. O espaço entre as bolas foi preenchido com hélio. Para simular um meio infinito, definiram-se condições de contorno periódicas nas superfícies laterais da célula unitária e condições de contorno branca (a partícula que atinge uma superfície branca é refletida com uma distribuição cossenoide relativa à superfície normal) para as superfícies superior e inferior (TURKMEN, ÇOLAK, 2012). O comportamento do espectro do fluxo é mostrado na Figura 28, para as diferentes relações combustível/moderador nas duas células unitárias estudadas. Observa-se que não existem diferenças significativas apreciáveis para o espectro neutrônico entre as duas células unitárias estudadas, comportando-se de igual maneira para as diferentes relações combustível/moderador estudadas.

Figura 28 - Espectro do fluxo neutrônico para varias relações combustível/moderador nas células unitárias BCC e FCC.



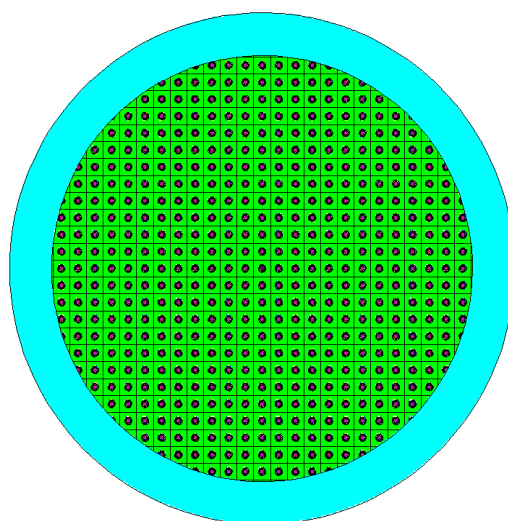
4.4 Estudo do efeito de corte das partículas TRISO com a superfície da bola

Com o uso das estruturas repetitivas na modelagem com códigos MCNP para situar as partículas TRISO no interior dos elementos combustíveis, introduzem-se duas aproximações: a não aleatoriedade das partículas TRISO dentro das bolas e interseção das partículas TRISO com a superfície da bola. Essa última aproximação pode resultar que a massa de combustível situada na bola seja diferente da massa que se deseja simular, o que pode influenciar significativamente ou não nas propriedades multiplicativas do núcleo. Para estudar a influência desse efeito, foi calculado o valor de K_{inf} para quatro modelos diferentes da distribuição das partículas TRISO dentro das bolas: modelo hexagonal uniforme (seção 3.4, Figura 23), modelo cúbico uniforme (Figura 29), modelo cúbico uniforme sem o efeito de corte (Figura 30) e um modelo de distribuição aleatório (Figura 31).

- **Modelo cúbico uniforme:** Para gerar a distribuição cúbica uniforme dentro da bola, conhecendo a massa e a densidade do combustível, calcula-se o

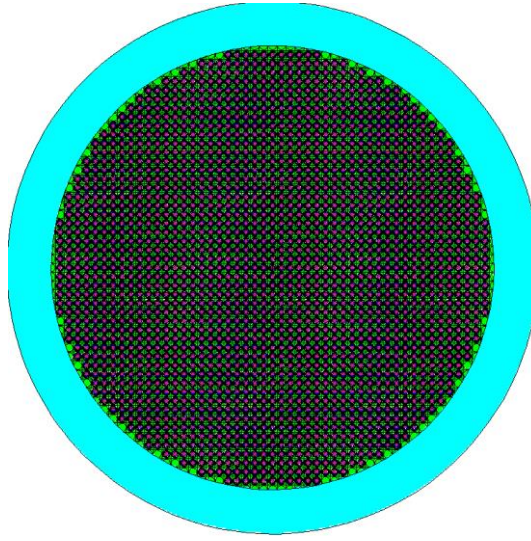
volume de combustível necessário. O volume de combustível a considerar na bola divide-se entre o volume de um kernel, e obtém-se o número total de PCEs. Uma vez calculado a quantidade de partículas TRISO total, o volume da zona combustível é dividido pela quantidade de partículas TRISO para obter o volume da célula cúbica que será então repetida uniformemente dentro da bola. No centro de cada cubo é situada uma partícula TRISO. A Figura 29 mostra uma seção da bola no plano $z=0$ da distribuição cúbica para uma massa de 5g e uma densidade de UO_2 de $10,4 \text{ g/cm}^3$ e um raio do kernel de $250 \text{ }\mu\text{m}$ (Características do combustível do HTR-10).

Figura 29 – Distribuição cúbica uniforme das partículas TRISO dentro da bola.



- Modelo cúbico uniforme sem o efeito de corte: Nos dois modelos apresentados anteriormente (hexagonal e cúbico uniforme) observa-se claramente o efeito de corte com a superfície da bola. Essa situação pode ser evitada através da remoção do arranjo de todas as partículas TRISO que são cortadas pela superfície da bola. Construiu-se um modelo cúbico uniforme no qual, aquelas partículas que são cortadas pela superfície da bola são localizadas visualmente, removidas desse arranjo e situadas novamente em planos sucessivos. Isso faz que todas as partículas consideradas fiquem dentro da bola de forma íntegra, mas sob o custo de que este modelo é muito mais difícil de construir (Figura 30).

Figura 30 - Modelo cúbico uniforme sem efeito de corte.

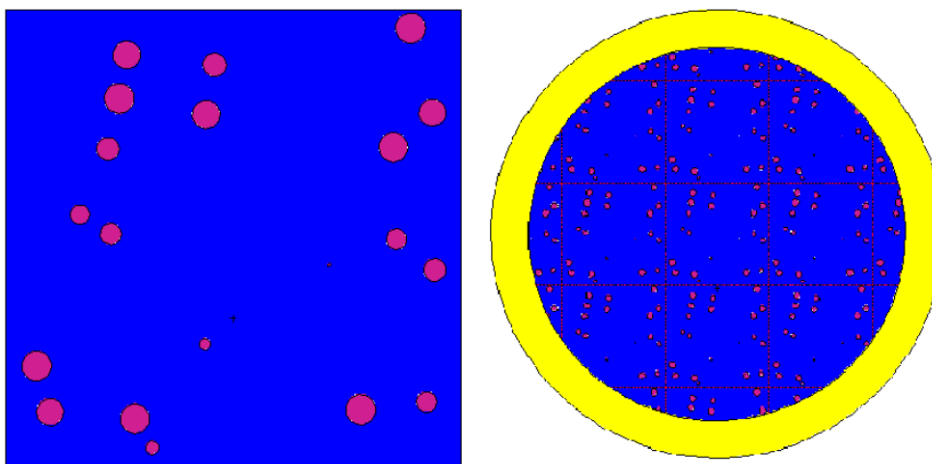


- Modelo aleatório detalhado: para obter uma distribuição aleatória das partículas TRISO dentro das bolas, foi usado o algoritmo proposto por ARDAKANI et al. (2015), onde 333 partículas TRISO são aleatoriamente distribuídas em uma rede cúbica. Esse número foi proposto no modelo original para a simulação do HTTR (ARDAKANI et al., 2015). A rede cúbica é situada no centro da bola combustível e depois é repetida no interior da zona combustível da bola, usando uma estrutura repetitiva. As dimensões do cubo dependem da massa de combustível por bola usada (Equações 4 e 5). Primeiramente, calcula-se o número total de partículas TRISO dentro da bola de maneira similar aos outros modelos (No. TRISOS). Posteriormente, usando a fração de empacotamento (PF) dentro da bola, obtém-se as dimensões do cubo que representará a rede (Li) (sendo R_{PCE} o raio da partícula TRISO e R_{bola} o raio da zona combustível da bola). A Figura 31 mostra a vista do elemento cúbico da rede e um corte da bola completa.

$$Pf = \frac{No. TRISOS \times R_{PCE}^3}{R_{bola}^3} \quad (4)$$

$$Li = \left(\frac{333}{Pf} \times \frac{4}{3} \pi R_{PCE}^3 \right)^{1/3} \quad (5)$$

Figura 31 – Modelo aleatório detalhado.



Realizou-se o cálculo do valor de K_{inf} para os modelos estudados de distribuição das partículas TRISO dentro da bola. Foram utilizadas condições de contorno do tipo branca, condições apropriadas para simular médios dispersores infinitos. Essa condição foi imposta para a superfície exterior da camada de grafite. As massas de combustível usadas no estudo abrangem o possível espectro para os reatores VHTR. Os valores de K_{inf} foram calculados através da simulação de 2000 histórias dos nêutrons e 500 ciclos para um total de um milhão de histórias. Os resultados obtidos do desvio padrão estão na ordem das 50 pcm, valor inferior ao limite recomendado (100 pcm) para os cálculos de autovalores. Os valores são mostrados na Tabela 25 e na Figura 32, mostra-se a distribuição de K_{inf} em função das massas.

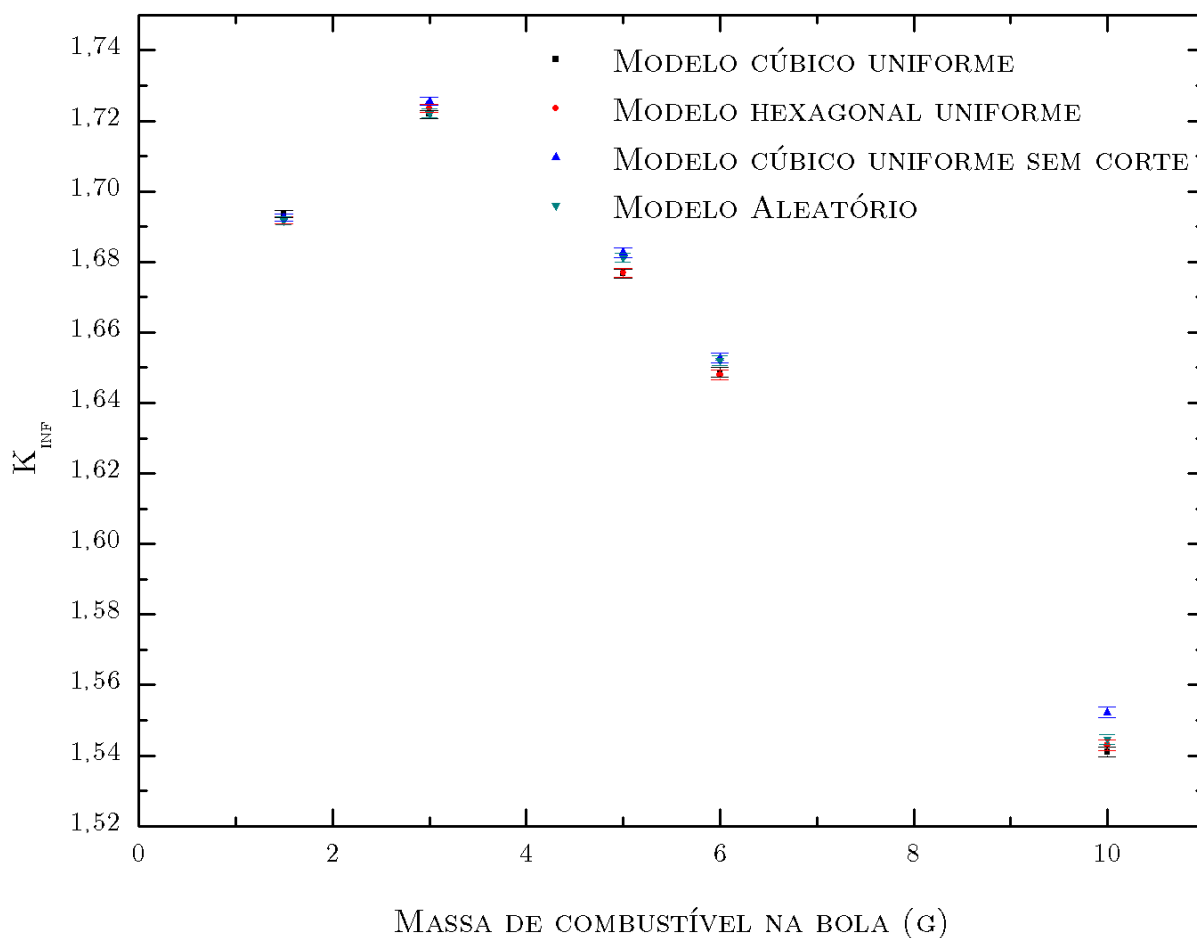
Observa-se que os valores de K_{inf} diminuem na medida que aumenta a massa de combustível na bola. As barras de erro do K_{inf} foram construídas para um nível de confiança de 95% ($\pm 1,96\sigma$) e mostram que a partir dos 5g de massa de combustível na bola existem diferenças significativas nos valores de K_{inf} obtidos para as redes onde não evita-se o efeito de corte (cúbica uniforme e hexagonal uniforme) e o modelo sem corte. Sempre são obtidos valores maiores de K_{inf} para esse último modelo, devido que são consideradas todas as partículas dentro da bola. Entre os modelos que não evitam o efeito de corte não existem diferenças significativas. As diferenças nos valores de K_{inf} obtidas entre os modelos que evitam e os que não evitam efeito de corte aumentam com o aumento da massa de combustível na bola.

Tabela 25 - Valores de K_{inf} para os modelos estudados para diferentes valores de massa de combustível na bola.

$K_{inf} \pm 1,96\sigma$					
Massa(g)/Modelo	1,5	3	5	6	10
Hexagonal	1,69184	1,72357	1,67693	1,64803	1,54294
uniforme	$\pm 0,00099$	$\pm 0,00122$	$\pm 0,00127$	$\pm 0,00145$	$\pm 0,00145$
Cúbico uniforme	1,69354	1,72188	1,67666	1,64870	1,54103
	$\pm 0,00106$	$\pm 0,00116$	$\pm 0,00129$	$\pm 0,00137$	$\pm 0,00145$
Cúbico uniforme	1,69262	1,72553	1,68263	1,65273	1,55222
sem corte	$\pm 0,00106$	$\pm 0,00116$	$\pm 0,00137$	$\pm 0,00131$	$\pm 0,00145$
Modelo Aleatório	1,69165	1,72216	1,68122	1,65207	1,54456
detalhado	$\pm 0,00116$	$\pm 0,00128$	$\pm 0,00134$	$\pm 0,00138$	$\pm 0,00146$

No caso dos resultados de K_{inf} para o modelo aleatório, comportam-se de maneira similar ao modelo onde não existe efeito de corte para massas pequenas. Ao aumentar a massa de combustível na bola, o valor de K_{inf} tende ao comportamento dos modelos que tem efeito de corte. Isto se explica porque, para massas pequenas, a fração de empacotamento na célula unitária é pequena e as partículas TRISO tem a possibilidade de estar mais separadas e quando o cubo é repetido dentro da bola, são interceptadas menos partículas com a superfície da bola. Por exemplo, para os 5g de massa de combustível na bola, o valor obtido de K_{inf} para o modelo aleatório é similar ao valor obtido para o modelo uniforme sem corte. Para os 6g vai-se afastando do comportamento do modelo sem corte e para os 10g apresenta o mesmo valor que os obtidos nos modelos onde existe o efeito de corte, devido a que para esse valor da massa, o efeito estudado torna-se significativo.

Figura 32 - K_{inf} em função da massa de combustível na bola para os modelos estudados.



Com o objetivo de avaliar quantitativamente o corte das partículas TRISO com a superfície da bola utilizando os modelos hexagonal uniforme e cúbico uniforme, criou-se um algoritmo que calcula geometricamente, para os valores da massa estudadas, quantas partículas encontram-se integralmente dentro da bola, quantas estão sendo localizadas realmente com relação ao total que devem ser consideradas, quantas são cortadas pela superfície da bola e quantas possuem o centro da partícula na zona combustível. Esse estudo pretende comparar os modelos uniformes estudados e determinar em qual modelo esse efeito de corte é maior. Para realizar esse estudo precisa-se, como dado inicial, conhecer o número de partículas TRISO que devem ser consideradas na bola. Com esse dado, no caso do modelo cúbico uniforme, o programa calcula as posições espaciais de cada elemento no arranjo cúbico que compõe a rede. Como cada partícula TRISO encontra-se no centro do elemento da rede, é simples conhecer o centro de cada TRISO situado na bola. Calculando todos os possíveis centros das partículas TRISO, pode-se calcular a distância que existe entre o centro da bola e o centro de cada uma das partículas,

para assim conhecer se a partícula é interceptada pela superfície, se está dentro da bola integralmente ou fora dela. Como critério adotamos que a partícula está dentro, interceptada ou fora da bola se o kernel da partícula TRISO está dentro, interceptado ou fora da bola, respectivamente. No caso do modelo hexagonal uniforme, o procedimento foi o mesmo, só que nesse caso, os dados iniciais são: a apótema do hexágono que compõe a rede hexagonal e as posições na direção z dos planos onde serão situadas as partículas. A Tabela 26 mostra os resultados obtidos para cada um dos modelos. O raio do kernel da partícula TRISO utilizado foi de 250 μm e o raio da zona combustível usado foi 2,5 cm. Chamamos T ao número de partículas TRISO que apresentam um kernel inteiro dentro da bola, N é o número total de partículas TRISO a serem situadas na bola para garantir o valor da massa desejada, D é a distância em cm que existe entre o centro da bola e o centro da partícula TRISO analisada, pelo que a quarta coluna contém o número de partículas que tem o centro na zona combustível. R_k é o raio do kernel da partícula TRISO analisada e a última coluna contém o número de partículas totais cortadas.

Tabela 26- Resultados obtidos no estudo da intercepção das partículas dentro da bola para os modelos cúbico e hexagonal uniforme.

Massa(g)	N	T	$D \leq 2,5$	$2,5 - R_k < D < 2,5 + R_k$
Modelo cúbico				
1,5	2501	2469	2517	84
3	5001	4945	4945	192
5	8335	8217	8385	384
6	10001	9771	9939	624
10	16669	16279	16831	792
Modelo hexagonal				
1,5	2501	2435	2531	132
3	5001	4877	4997	216
5	8335	8103	8343	552
6	10001	9751	10039	492
10	16669	16257	16677	912

Observa-se que em todos os casos, T é mais próximo ao valor predefinido para o modelo cúbico que para o modelo hexagonal. Por outro lado, o modelo cúbico apresenta menos partículas TRISO na zona do corte comparado com o modelo hexagonal, com exceção do caso da massa de 6g que existem menos partículas cortadas no modelo hexagonal. Observa-se também que existe um maior número de partículas cortadas para

o modelo hexagonal, excetuando novamente o caso da massa de 6g, onde existe um maior número de partículas cortadas no modelo cúbico.

Até agora, tem sido demonstrado que existem diferenças significativas nas propriedades multiplicativas em pequena escala quando utilizam-se modelos que apresentam efeito de corte e o modelo que não apresenta essa aproximação. Embora não existem diferenças significativas nas propriedades multiplicativas para os modelos cúbico uniforme e hexagonal uniforme em pequena escala, obteve-se que o modelo que melhor representa as partículas TRISO na bola e no qual o efeito de corte é menor, é para o caso cúbico. Avaliaremos a influência que pode ter o efeito de corte e o uso de diferentes modelos nas propriedades multiplicativas para um núcleo completo. Para isto foi resolvida a tarefa de referência do HTR-10, especificamente o problema do cálculo da altura crítica HTR-10 (IAEA-TECDOC-1382, 2003). O arranjo para a distribuição das bolas no núcleo foi escolhida a configuração BCC e variou-se a distribuição das partículas TRISO dentro das bolas, usando os modelos de distribuição apresentados anteriormente. Foi resolvido o problema B1 original da tarefa de referência do HTR-10, para uma massa de 5g, mas neste caso mudou-se a atmosfera de hélio por ar. Os valores de K_{eff} em função da altura do núcleo obtidos para cada modelos são mostrados na Tabela 27. Para todas as alturas, os modelos aleatório e cúbico sem efeito de corte subestimam o valor de K_{eff} com respeito aos modelos uniformes. Os valores obtidos para a altura crítica mediante a interpolação por Spline cúbico demonstram a grande semelhança entre eles, obtendo-se um erro relativo do 0,5% entre o maior e o menor valor obtido da altura crítica. Pode-se concluir que para estudos a escalas de reator, para cálculos de criticalidade, não existem diferenças significativas entre os modelos de distribuição uniforme e aleatórios, assim como, também não é significativo o efeito de corte pelas superfícies das bolas com as partículas TRISO no interior delas. Este resultado é muito importante devido a que os modelos aleatórios são de muito difícil construção e, muitas vezes, não podem ser realizados devido às limitações dos programas e tempos de cálculos tão prolongados. De fato, até no modelo aleatório aqui usado, foi criada uma célula unitária e repetida dentro da bola, devido a que o MCNPX apresenta limitações em relação à quantidade de células que podem ser definidas, assim como o número de superfícies que podem ser usadas para definir uma célula. Com este resultado, demonstra-se que o uso da célula cúbica uniforme, que é o modelo de mais simples construção fornece resultados bons nos cálculos de criticalidade a escala do núcleo do reator.

Tabela 27 - Resultados de K_{eff} em função da altura do núcleo do HTR-10 usando os modelos estudados.

Cúbico uniforme			Hexagonal uniforme		Cúbico sem corte		Aleatório detalhado	
Altura (cm)	K_{eff}	D.P (pcm)	K_{eff}	D.P (pcm)	K_{eff}	D.P (pcm)	K_{eff}	D.P (pcm)
96,2822	0,89076	27	0,89145	29	0,88947	27	0,88549	28
103,159 5	0,92032	28	0,92024	28	0,91920	28	0,91683	27
110,036 8	0,94667	28	0,94783	28	0,94521	27	0,94441	28
116,914 1	0,97106	28	0,97125	28	0,96978	27	0,96840	28
123,791 4	0,99314	29	0,99386	29	0,99260	27	0,99047	29
130,668 7	1,01377	28	1,01424	27	1,01219	29	1,01298	27
137,546 0	1,03261	28	1,03248	27	1,03149	28	1,02856	28
144,423 3	1,04903	27	1,04938	28	1,04845	28	1,04572	28
151,300 6	1,06494	28	1,06486	28	1,06416	27	1,06360	28
158,177 9	1,07939	28	1,08002	27	1,07914	29	1,07727	27
165,055 2	1,09261	29	1,09312	28	1,09257	28	1,09332	27
Altura Crítica (cm)								
126,1835			125,9535		126,4135		126,6435	

5 AVANÇOS NO PROJETO CONCEITUAL DO TADSEA

Neste Capítulo apresentam-se os principais resultados do cálculo para o novo projeto do TADSEA, empregando os modelos desenvolvidos que leva em consideração a dupla heterogeneidade do leito de bolas. Estuda-se a influência de heterogeneidades nos parâmetros do núcleo como o tamanho do kernel (núcleo) das partículas TRISO. É projetada e modelada uma estratégia de queima do combustível no núcleo do TADSEA, que considera a recarga contínua do combustível, e os passes múltiplos das bolas pelo núcleo, típico dos reatores do tipo leito de bolas que empregam combustível TRISO. Estuda-se a variação da composição isotópica do combustível irradiado em uma estratégia de queima profunda, e realizam-se outros estudos para completar o projeto conceitual desde o ponto de vista de segurança, como são o cálculo da efetividade das barras absorventes e o projeto preliminar da blindagem.

5.1 Projeto do núcleo

Os principais objetivos do TADSEA são a transmutação dos resíduos nucleares de vida longa provenientes dos reatores de água leve, e a obtenção de calor com os parâmetros necessários para a obtenção de hidrogênio, além da produção de energia elétrica. Como foi explicado no Capítulo 2, o principal antecedente desse ADS do tipo leito de bolas foi um PBT projetado em ABÁDANES, PÉREZ-NAVARRO (2007), o qual foi concebido somente para a transmutação dos resíduos de vida longa provenientes do combustível irradiado dos LWR. As modificações mais importantes que sofreu o núcleo do PBT de 10 MWt para atingir a configuração do TADSEA foi a ampliação axial e radial do núcleo, assim como a mudança da energia do feixe de prótons provenientes do acelerador, que foi incrementada de 380 MeV para 1000 MeV. Originalmente no projeto do TADSEA foram mantidas invariáveis as frações de empacotamento, composição e dimensões dos elementos combustíveis, refrigerante, etc. A fração de empacotamento do PBT considerou-se igual a 0,74 por ser esse o maior grau de compactação que pode-se atingir em um leito de bolas, e que corresponde a uma configuração compacta hexagonal em um meio infinito, pelo que decidiu-se manter inicialmente para o TADSEA a disposição das bolas e a fração de empacotamento do PBT, embora estudos posteriores demonstraram um valor mais real de fração de empacotamento para esse caso de 0,64.

Em uma anterior modificação do projeto do núcleo do TADSEA, calculou-se a fração de empacotamento real (0,64), para o qual desenvolveu-se uma metodologia que permite calcular a porosidade real de um meio infinito (GARCÍA et al., 2012). Nesse trabalho, foi estudada também a dependência da potência atingida no núcleo subcrítico em função de parâmetros como a espessura do refletor, K_{eff} para diferentes valores de massa e velocidades de transmutação para os elementos transurânicos usados no combustível.

Nesta nova etapa do projeto do TADSEA, desenvolveram-se modelos para considerar a dupla heterogeneidade do combustível. Foi projetada e modelada uma estratégia de queima que simula o sistema de passes múltiplos das bolas e permite obter uma distribuição mais aplainada do campo de liberação de energia axial, para realizar cálculos termoidráulicos mais reais. Por outro lado, leva-se em consideração no projeto conceitual do TADSEA, elementos de segurança não considerados anteriormente como: as barras absorventes de segurança e a blindagem, assim como uma descrição mais detalhada do sistema, incluindo a cavidade para a entrada das bolas na parte superior do núcleo, o cone e o tubo da descarga das bolas na parte inferior do núcleo.

5.1.1 Estudo da influência do tamanho do kernel das partículas TRISO nas propriedades multiplicativas do núcleo

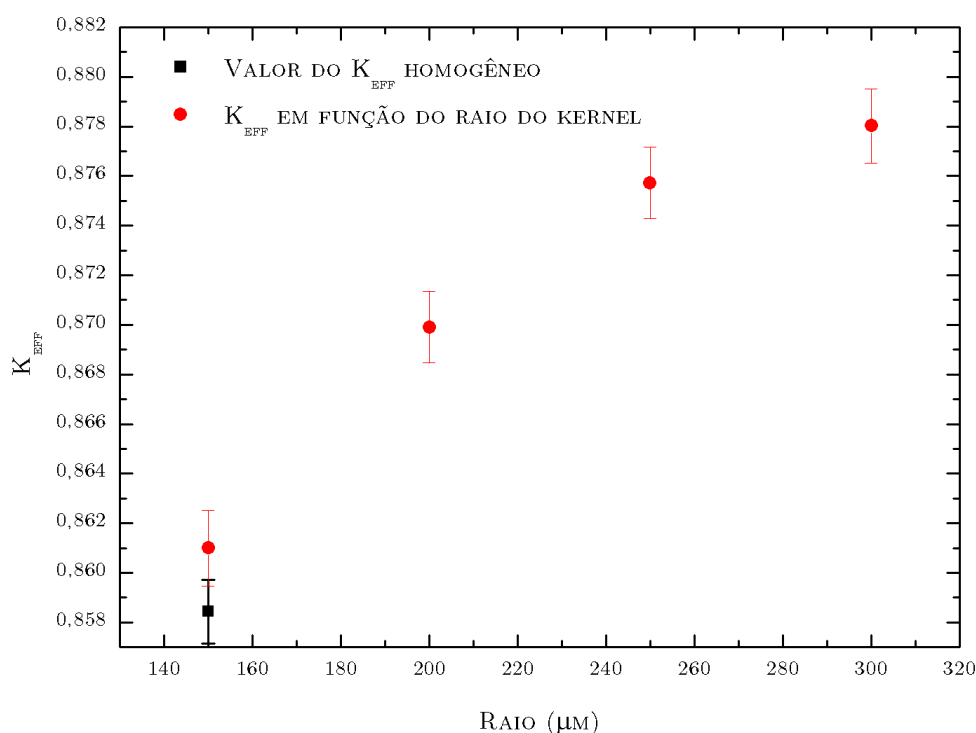
Neste estudo foi avaliado o comportamento do coeficiente de multiplicação efetiva em função do raio do kernel da partícula TRISO. Por razões de simplicidade, decidiu-se estudar esse comportamento no PBT de 10 MWt. No modelo homogêneo usado para a simulação do PBT, considerou-se na homogeneização da composição dentro da bola, um raio do kernel das partículas TRISO de 200 μm . Nesse modelo, todas as camadas de grafite foram consideradas com a mesma densidade, mas existe uma quantidade de SiC que varia com o tamanho do kernel empregado, e portanto, do número de PCEs. Foram tomados quatro valores do raio do kernel que abrangem a faixa de valores utilizados por outros autores (TALAMO, 2005; GUDOWSKI, 2005; NABIELEK, KAISER, 1984), e compararam-se os resultados do K_{eff} com o valor obtido para o caso do modelo homogêneo do PBT, com uma composição equivalente, conservando a massa de combustível na bola de 1,5g. Os cálculos foram realizados para a primeira carga do núcleo com combustível fresco composto pelos elementos transurânicos provenientes do combustível irradiado dos

LWR. A distribuição das partículas TRISO dentro da bola foi realizada segundo o modelo hexagonal uniforme apresentado na seção 3.4. A distribuição das bolas dentro do núcleo foi usando o mesmo modelo utilizado em ABÁDANES, PÉREZ-NAVARRO (2007). Os valores obtidos são mostrados na Tabela 28 e o comportamento é mostrado na Figura 33.

Tabela 28 - K_{eff} em função do raio do kernel.

Raio do kernel (μm)	K_{eff} (95% de confiança)	D. P. (pcm)
Homogêneo	$0,85844 \pm 0,00129$	66
150	$0,86099 \pm 0,00153$	78
200	$0,86991 \pm 0,00145$	74
250	$0,87573 \pm 0,00143$	73
300	$0,87802 \pm 0,00149$	76

Figura 33 - Comportamento do K_{eff} em função do raio do kernel.



Observa-se que na medida que aumenta o tamanho do kernel, aumenta o valor do K_{eff} . Os valores calculados para 150 μm estão dentro do intervalo de confiança dos valores de K_{eff} calculados com uma composição homogênea do combustível, o qual era esperado, já que um kernel de muito pequeno diâmetro é uma distribuição do combustível similar à de um meio homogêneo. Para o raio de 200 μm , o qual foi usado na homogeneização do

combustível para o caso homogêneo, aparecem diferenças significativas, sendo maior para o caso heterogêneo. Para 250 μm de raio do kernel o K_{eff} continua aumentando significativamente para um 95 % de confiança com relação ao obtido para 200 μm . O valor de K_{eff} obtido para 300 μm aumenta com respeito ao obtido para 250 μm , mas não apresentam diferenças significativas, já que os intervalos de confiança desse valor interceptam-se. Todos os cálculos foram realizados com igual estatística (2000 histórias e 500 ciclos), o qual evidencia-se nos valores similares do desvio padrão em cada caso, demonstrando que as diferenças obtidas são dadas pelas diferenças no raio do kernel.

5.1.2 Influência de uma simulação detalhada da geometria do combustível nos resultados das distribuições de potência e o espectro neutrônico

Foram calculadas as distribuições de potência para a primeira carga do PBT de 10 MWt com combustível fresco, empregando um modelo que usa uma geometria detalhada do combustível dentro das bolas, com uma distribuição das PCE hexagonal uniforme explicada na Seção 3.4 para 200 μm de raio do kernel. Esse raio do kernel foi escolhido para comparar os resultados obtidos para esta configuração com os resultados obtidos para o PBT que usa o modelo homogêneo da zona combustível. Para obter uma distribuição da potência axial, dividiu-se o núcleo em 10 zonas de igual volume e calculou-se a potência média em cada zona. No caso da distribuição da potência radial, dividiu-se o núcleo em 10 zonas de igual raio e calculou-se a potência média em cada zona. Os resultados são mostrados na Figura 34. Em ambas distribuições observa-se um aumento do valor da potência absoluta quando simula-se o combustível de forma detalhada (Figura 34 a e c). Os cálculos foram realizados com igual estatística, o que demonstra a influência do efeito de bloco e a autoblindagem das partículas nos valores de potência obtidos. Quando os valores de potência são normalizados (Figura 34 b e d), observa-se uma grande coincidência dos resultados em ambos modelos. Esses resultados também são coerentes com o obtido no valor de K_{eff} para o kernel de 200 μm , onde também é observado esse aumento. Foi calculado além, o espectro neutrônico médio no núcleo em ambos casos para avaliar a influência da simulação detalhada do combustível no espectro neutrônico. Os resultados são mostrados na Figura 35. O espectro foi calculado em energia contínua para 69 grupos energéticos, dos quais 14 são térmicos, 13 são de ressonância e 42 são térmicos. O PBT opera na região térmica com um pico espectral nos 0,15 eV, embora tem uma forte

contribuição rápida devido aos nêutrons provenientes da reação de espalação. Observa-se que para a simulação empregando uma geometria detalhada do combustível TRISO, o fluxo comporta-se aproximadamente da mesma maneira em quanto à forma, em comparação com o obtido para a simulação do combustível de composição homogênea, contudo aumenta o seu valor absoluto, o qual corresponde às diferenças obtidas nas distribuições de potência. Resultados similares para o estudo do espectro foram obtidos pelos autores PLUKIENE, RIDIKAS (2003) em um estudo similar.

Figura 34 – Distribuições de potência axiais e radiais, absolutas e normalizadas do PBT com combustível homogêneo e heterogêneo com raio do kernel de 200 μm .

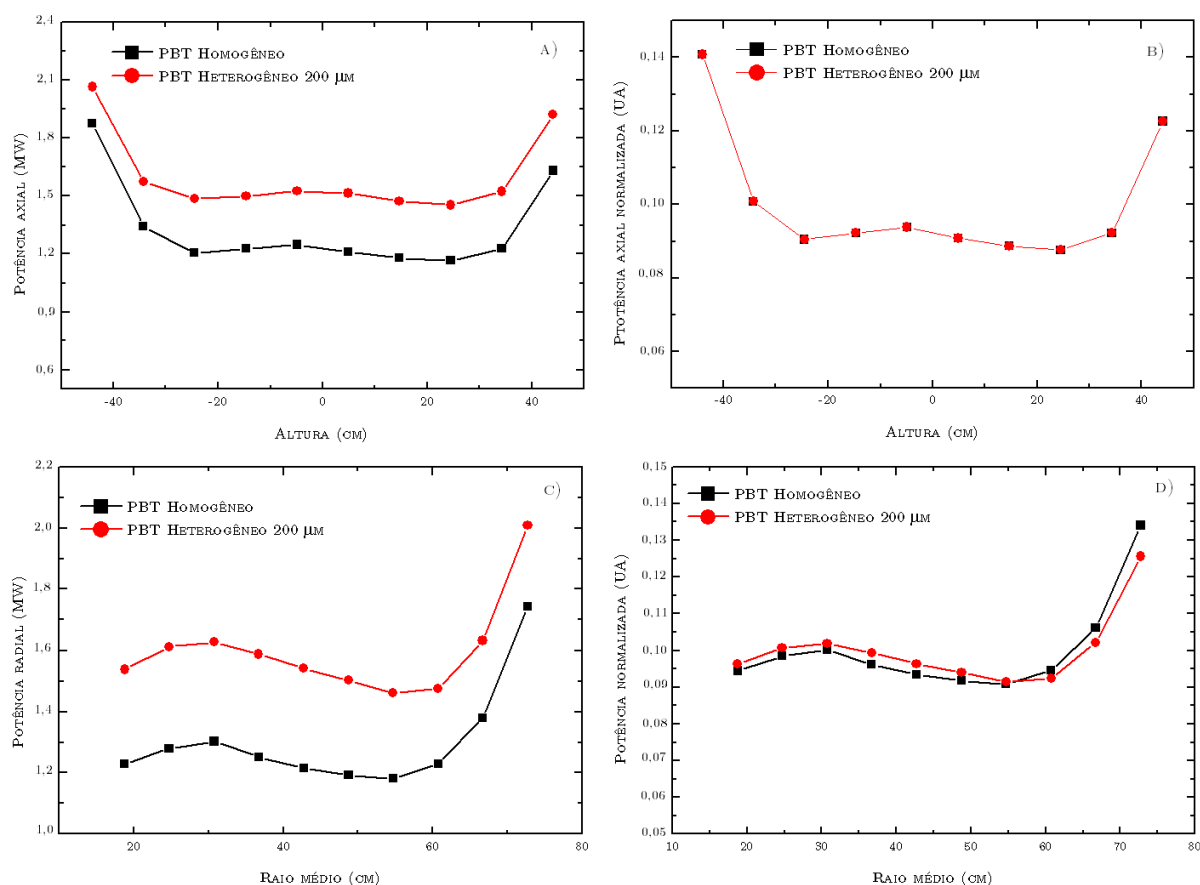
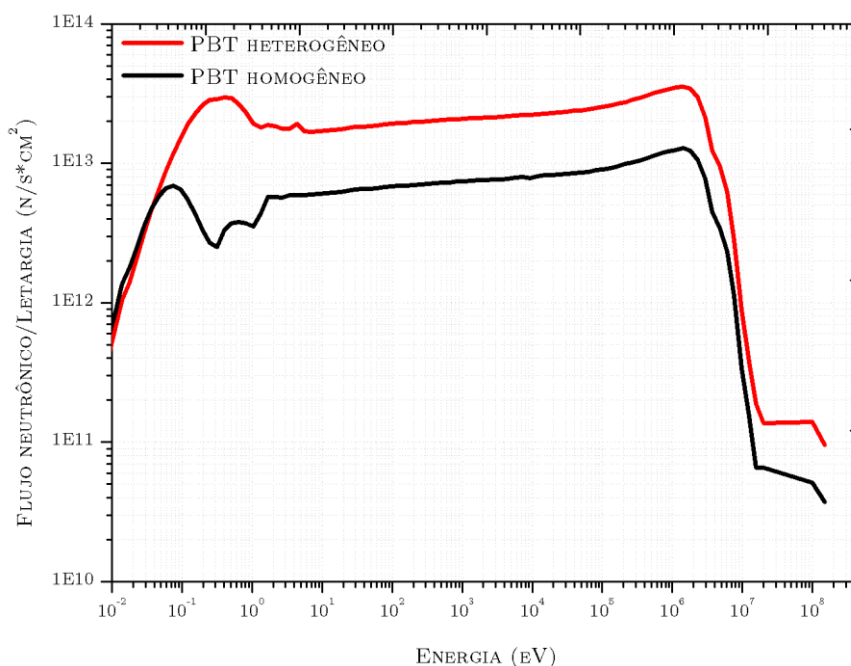


Figura 35 - Espectro energético do PBT com combustível homogêneo e heterogêneo com raio do kernel de 200 μm .

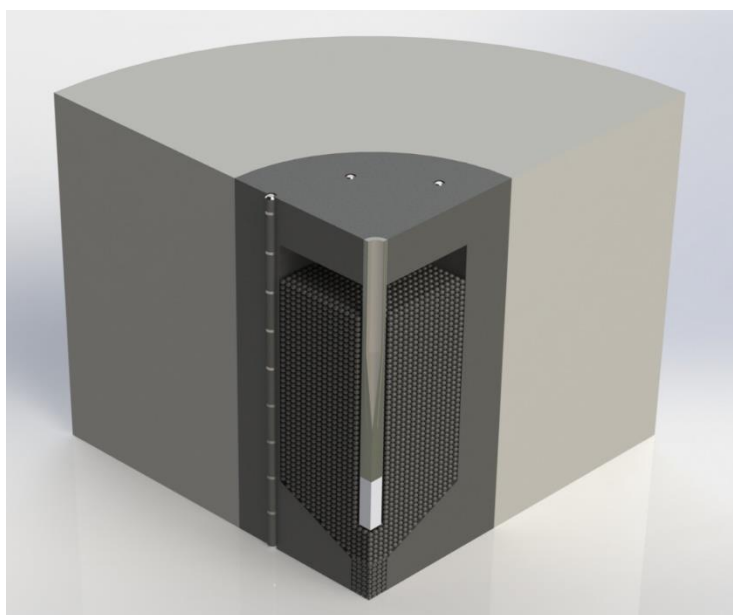


5.1.3 Cálculo dos parâmetros neutrônicos do núcleo do TADSEA com uma descrição geométrica detalhada do combustível TRISO

A partir dos estudos mostrados anteriormente, realizou-se o projeto do TADSEA, considerando uma modelagem detalhada da geometria do combustível que leva em consideração a dupla heterogeneidade. Decidiu-se modificar as características geométricas das partículas TRISO originais do TADSEA e usar as de o HTR-10, porque demonstra-se que para um maior diâmetro do kernel, obtém-se melhores propriedades multiplicativas. Para simular a distribuição das partículas TRISO dentro da bola, foi usado o modelo cúbico uniforme, e para a distribuição das bolas no núcleo foi usada a configuração BCC, com uma fração de empacotamento de 0,64. Com o objetivo de evitar o corte da célula unitária na direção axial com a repetição, diminuiu-se a altura do núcleo original de 293,94 cm até 282,81 cm, fazendo que a altura do núcleo fosse múltiplo da célula unitária BCC usada para a distribuição das bolas no núcleo. Ao núcleo foi adicionado um espaço na superfície na parte superior para simular o lugar por onde entram as bolas no núcleo, de altura similar à altura do HTR-10 (41 cm). Outro elemento adicionado ao modelo que não era considerado no projeto conceitual do TADSEA foi o cone da descarga das bolas, assim como o tubo da descarga. Esses elementos foram projetados de maneira

similar aos do HTR-10, mas foram dimensionados para o TADSEA de maneira que atingiram a parte inferior do reator e que o cone da descarga das bolas fosse geometricamente semelhante ao do HTR-10. Embora o controle dos ADS seja simples por ser um sistema subcrítico, adiciona-se ao projeto conceitual um novo elemento de segurança: dez barras absorventes, as quais são inseridas no refletor lateral em casos de emergência para garantir uma profunda subcriticalidade do núcleo. No estado estacionário de operação do sistema as barras devem permanecer extraídas. Essas barras absorventes foram simuladas no refletor a 30 cm da superfície cilíndrica que delimita o núcleo. A geometria das barras absorventes, assim como os materiais e a composição é igual aos utilizados no HTR-10. Para isso, foi criada uma célula unitária composta pelas partes que compõem a barra de controle (Figura 25), e esta foi repetida no interior das cavidades que foram situadas uniformemente em torno do núcleo a 36° . Manteve-se a espessura do refletor superior e inferior considerado no projeto original do TADSEA (100 cm). As características do alvo foram mantidas iguais às do projeto anterior do TADSEA, assim como a intensidade e a corrente do feixe de prótons. O combustível usado na nova versão do projeto conceitual do TADSEA é igual ao proposto para o PBT e o TADSEA (Tabela 4).

Figura 36 - Esquema do novo projeto do TADSEA (contém as barras absorvedoras inseridas e o projeto da blindagem).



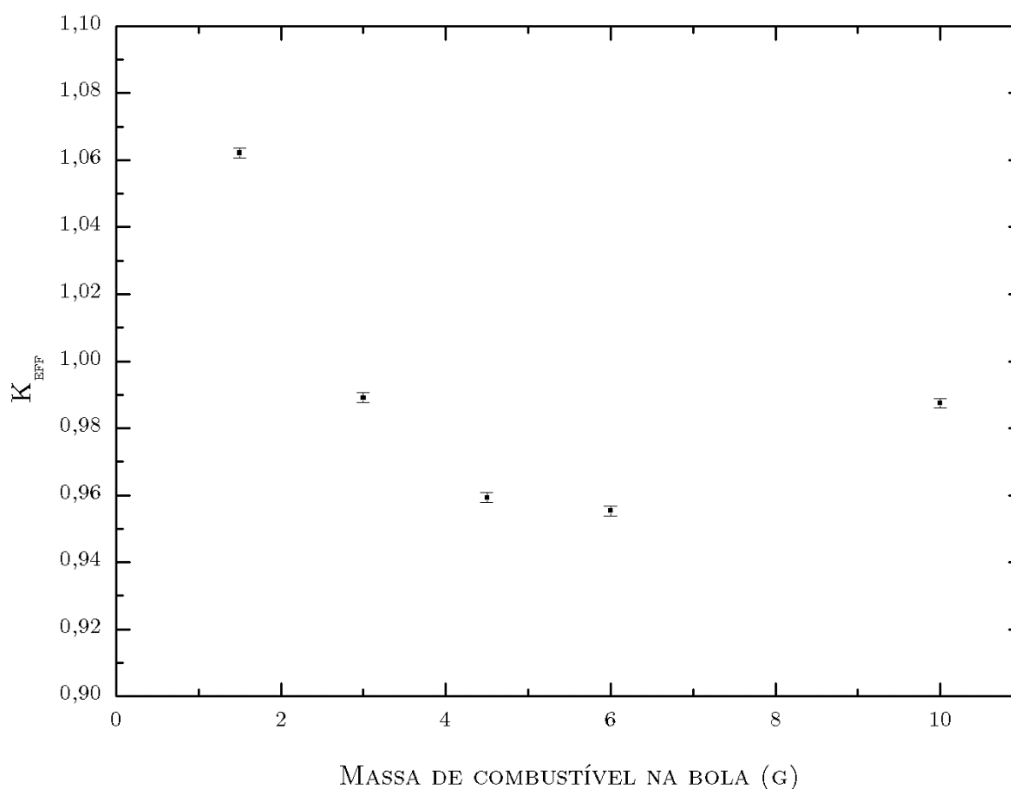
A Figura 36 mostra o esquema da instalação projetada, e os parâmetros geométricos e de operação são resumidos na Tabela 29.

Tabela 29 - Parâmetros geométricos e materiais do novo projeto do TADSEA.

Grandeza	Unidade	Valor
Potência térmica	MW	100
Intensidade do feixe	MeV	1000
Raio do núcleo	cm	125,75
Altura do núcleo	cm	282,81
Altura da cavidade de entrada das bolas	cm	41
Corrente do feixe	mA	10
Espessura do refletor radial	cm	60
Espessura do refletor axial	cm	100
Lado da célula BCC	cm	7,07
Refrigerante		Hélio
Número de barras de controle	-	10
Kernel da partícula TRISO		
Raio	cm	0,025
Densidade do combustível	g/cm ³	10,33
Camadas da partícula TRISO		
Materiais das camadas		PyC/PyC/SiC/PyC
Espessura das camadas	cm	0,009/0,004/0,0035/0,004
Densidade das camadas	g/cm ³	1/1,9/3,18/1,9
Bolas “dummy”		
Diâmetro da bola	cm	6
Densidade do grafite	g/cm ³	1,73
Impurezas do boro natural no grafite	ppm	1,3

Para o novo modelo do TADSEA, procedeu-se ao cálculo do fator de multiplicação efetiva, com o objetivo de determinar o valor da massa de combustível na bola que garante a subcriticalidade desejada do núcleo na ordem da estabelecida como requisito no projeto original.

Figura 37 – Variação de K_{eff} em função da massa de combustível na bola para o TADSEA.



Na Figura 37 mostra-se a variação de K_{eff} em função da massa de combustível fresco na bola, com as barras absorventes retiradas. Como era de esperar, no cálculo com a modelagem detalhada do núcleo, considerando a dupla heterogeneidade, obtém-se valores maiores das propriedades multiplicativas para o combustível fresco. Por outro lado, a mudança da configuração da partícula TRISO de 200 μm de raio do kernel para uma partícula de 250 μm de raio, também aumenta o valor de K_{eff} no núcleo do TADSEA. Esse comportamento foi obtido anteriormente para o PBT e mostrado na Figura 33. Na Figura 37 observa-se o maior valor de K_{eff} para a massa de 1,5g, o qual diminui com o aumento da massa de combustível na bola. Para 4,5g obtém-se um valor de 0,95930, valor com uma subcriticalidade perto do valor requerido, além de que um maior valor da massa de combustível irradiado garante valores maiores da queima, o qual é um dos objetivos do projeto conceitual do sistema.

Com a configuração do núcleo para uma massa de 4,5g de combustível na bola, calculou-se a distribuição axial da densidade de potência do núcleo do TADSEA para a primeira carga. A Figura 38 mostra a distribuição axial da densidade de potência por zona em função da altura do TADSEA e a Figura 39 mostra o espectro por unidade de letargia obtido para o TADSEA na primeira carga com 4,5g de massa de combustível na bola.

Figura 38 - Densidade de potência axial do TADSEA para 4,5g de massa na bola para a primeira carga.

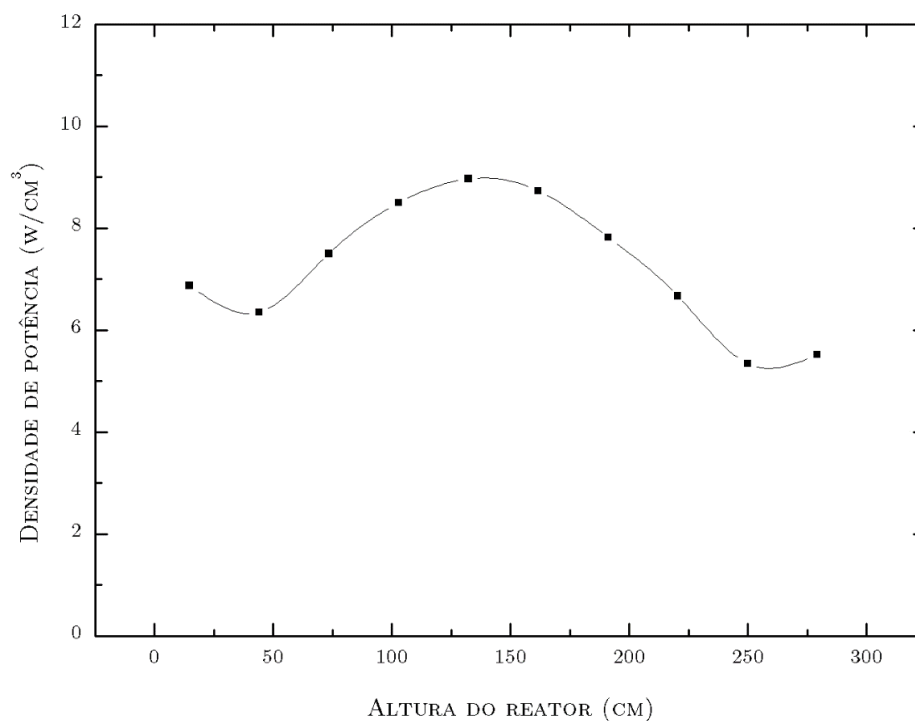
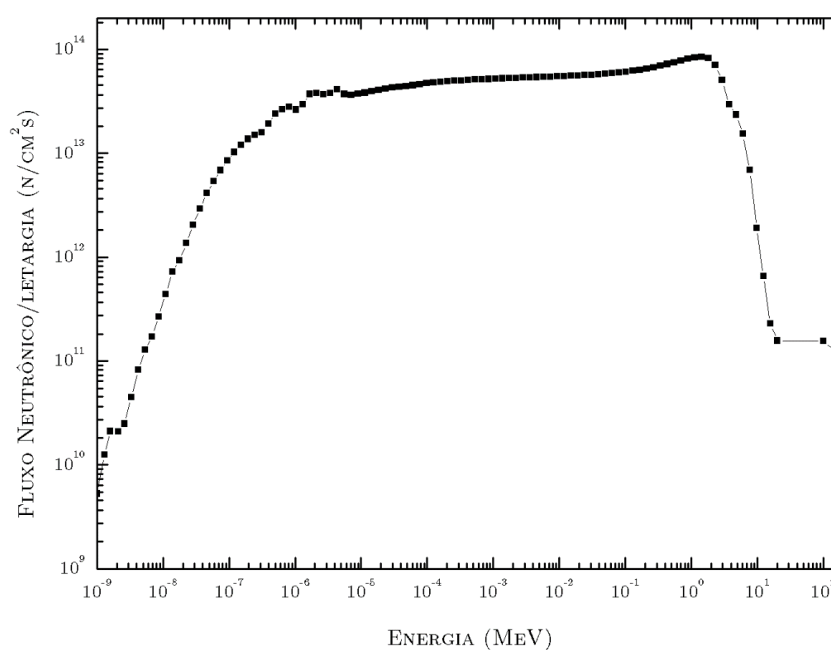


Figura 39 – Espectro energético por unidade de letargia para o núcleo do TADSEA com 4,5g de massa de combustível na bola para a primeira carga.



O núcleo foi dividido em 10 zonas de igual altura e calculou-se a densidade de potência média em cada uma. A densidade de potência foi normalizada a 100 MWt, já que

esse é o valor de potência permitida para a instalação, o qual pode-se controlar a partir da corrente do acelerador. Obteve-se um máximo do coeficiente de não uniformidade da distribuição igual a 1,24. O valor de potência absoluta que pode ser obtido no núcleo é de 434 MWt, um pouco maior que o obtido no projeto do TADSEA original para a primeira carga, devido principalmente ao aumento da massa, que foi triplicada e também às mudanças dos modelos de simulação do combustível, de um modelo homogêneo para um modelo heterogêneo. Por outro lado, o espectro energético tem endurecido igualmente devido a esse aumento da massa.

Foi calculado o coeficiente de reatividade por temperatura do moderador (CRTM), para a primeira carga do TADSEA com 4,5g de combustível na bola (Tabela 30). Para o cálculo do autovalor foram simuladas 2000 histórias por ciclo e 500 ciclos. Foram utilizadas as bibliotecas disponíveis em XSDIR, END/B VI.2 (PELOWITZ, 2005). Considerou-se a mesma temperatura do grafite nas camadas da partícula TRISO, assim como na matriz de grafite dentro da zona combustível e no grafite do revestimento da bola. Para o grafite do refletor, sempre considerou-se uma temperatura de 300 K. Os efeitos dos enlaces químicos e a estrutura cristalina do grafite foram tomados em consideração na função $S(\alpha, \beta)$, disponível nas bibliotecas de dados nucleares ENDL/B V para 300, 600, 800, 1200, 1600, 2000 K. O CRTM calcula-se segundo a Equação 6:

$$CRTM = \frac{\rho^{T2} - \rho^{T1}}{T2 - T1} = \frac{\frac{1}{K_{eff}^{T1}} - \frac{1}{K_{eff}^{T2}}}{T2 - T1} \quad (6)$$

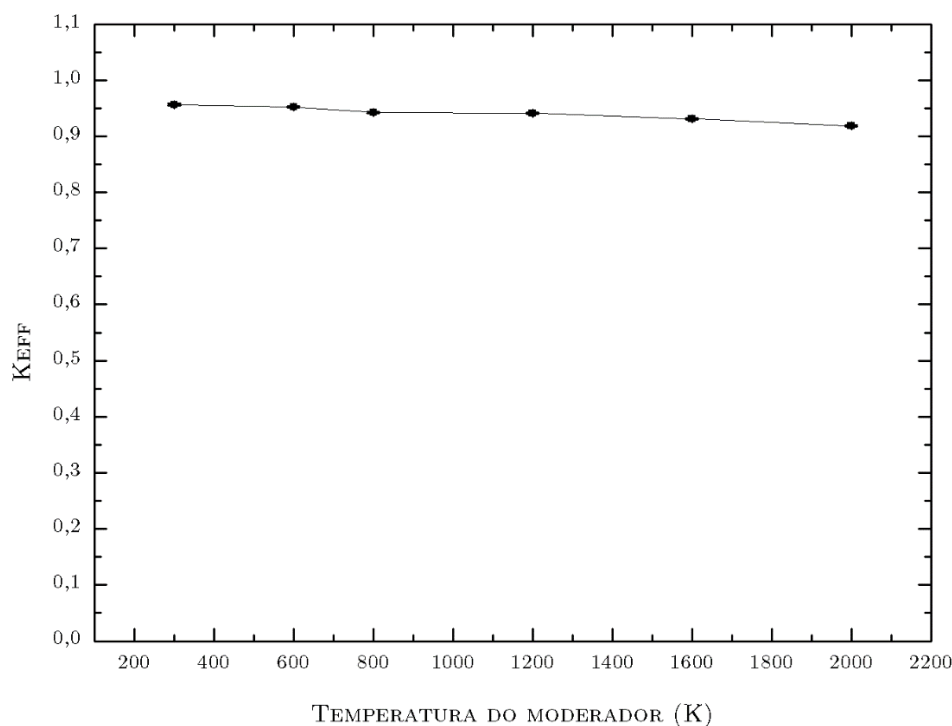
Onde K_{eff}^{T1} e K_{eff}^{T2} são os autovalores às temperaturas $T1$ e $T2$, respectivamente. Os resultados da variação de K_{eff} com a temperatura do moderador são mostrados na Figura 40. Pode-se observar que K_{eff} diminui com o aumento da temperatura do moderador, o que produz uma retroalimentação negativa por temperatura do moderador. O coeficiente de reatividade por temperatura do combustível não foi calculado devido à ausência das bibliotecas para os elementos que compõem o combustível.

Tabela 30 - Coeficientes de reatividade por temperatura do moderador.

Temperatura (K)	K_{eff}^1	D. P.	K_{eff}^2	D. P.	CRTM pcm/K	
300-600	0,95656	7,4E-4	0,95226	6,6E-4	-1,57	$\pm 0,51$

600-800	0,95226	6,6E-4	0,94275	6,9E-4	-5,30	$\pm 0,75$
800-1200	0,94275	6,9E-4	0,94108	7,3E-4	-0,47	$\pm 0,40$
1200-1600	0,94108	7,3E-4	0,93137	6,7E-4	-2,77	$\pm 0,40$
1600-2000	0,93137	6,7E-4	0,91887	7E-4	-3,65	$\pm 0,40$

Figura 40 - Coeficientes de reatividade por temperatura do moderador.



Um dos elementos novos neste projeto do TADSEA é a proposta de inclusão de dez barras absorventes de segurança situadas no refletor a 30 cm do núcleo, distribuídas a 36°. Esse elemento de segurança foi projetado seguindo os princípios de defesa em profundidade, como redundância dos sistemas de controle, já que o controle da reação em cadeia dos ADS está dada pelo trabalho do acelerador, devido à subcriticalidade do núcleo. Como foi explicado no Capítulo 3, as características geométricas e materiais das barras de controle do TADSEA são as mesmas do que as do HTR-10. O estudo da efetividade das barras de segurança no núcleo do TADSEA foi realizado para várias massas de combustível na bola. Calculou-se o valor de K_{eff} com as barras de segurança retiradas, depois com as dez barras de segurança inseridas e usando a Equação 3 obteve-se o valor da efetividade. Os resultados são mostrados na Tabela 31.

Tabela 31 - Efetividade das barras de controle no TADSEA para as massas de combustível nas bolas estudadas.

Massa (g)	K ₂	D. P. (pcm)	K ₁	D. P. (pcm)	Efetividade
1,5	1,06216	75	1,02318	77	-3,59 %
3	0,98912	74	0,94941	77	-4,23 %
4,5	0,95930	71	0,91946	74	-4,52 %
6	0,95534	77	0,91480	73	-4,65 %
10	0,98756	68	0,94909	70	-4,10 %

5.2 Estudo da variação da composição isotópica do combustível

Para o cálculo da variação da composição isotópica do combustível no núcleo, tanto no caso do PBT como no projeto conceitual original do TADSEA, empregou-se um modelo com uma composição homogênea da zona combustível da bola, e adicionalmente o núcleo foi dividido em dez zonas axialmente. Para modelar o processo de carga do combustível, inicialmente cada zona é carregada com combustível fresco e logo, cada 99 dias, realiza-se a recarga do combustível, onde recarrega-se o combustível da parte superior com combustível fresco e são extraídas as bolas da última zona, a mais baixa, enquanto desloca-se a composição existente nesse tempo em cada zona para a zona situada em um nível inferior. Dessa maneira é simulada a recarga contínua do combustível, onde as bolas entram pela parte superior do núcleo e são extraídas pela parte inferior do mesmo.

Na verdade, o processo de troca do combustível nos reatores do tipo leito de bolas realiza-se acrescentando bolas de combustível fresco pela parte superior do núcleo e extraíndo bolas com determinado nível de queima pela parte inferior. Essas bolas são analisadas em função do nível de irradiação para comprovar se não tem atingido o grau de queima permitido, sendo enviadas ao armazém, ou devolvidas ao núcleo pela parte superior se ainda não atingiram esse nível de irradiação.

Esse esquema real de recarga de combustível é praticamente impossível de ser simulado exatamente. O problema é muito mais complexo quando emprega-se uma descrição detalhada das partículas TRISO dentro das bolas. Por outro lado, a estrutura repetitiva criada para simular a distribuição das bolas no núcleo não permite descrever a queima no tempo de cada bola separadamente.

No nosso estudo, para simular a queima do combustível com um esquema multipasse das bolas dentro do núcleo do TADSEA utilizando uma descrição detalhada do combustível, fizeram-se as seguintes considerações:

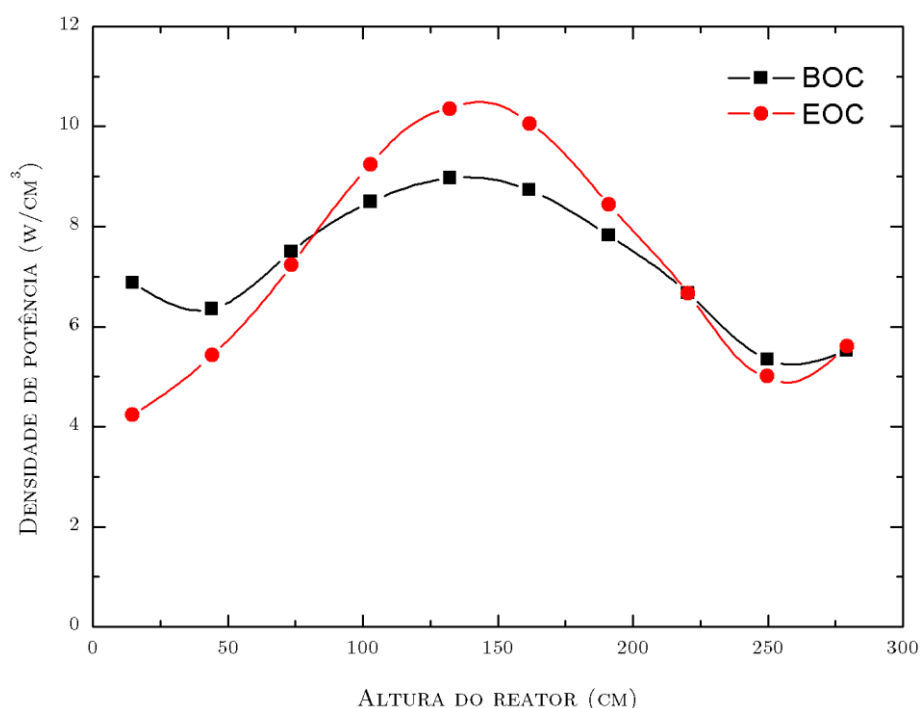
1. Divide-se o núcleo igualmente em 10 zonas materiais na direção axial e cada zona é carregada com combustível fresco.
2. Calcula-se a variação da composição isotópica das dez zonas do núcleo cada 100 dias, com o reator trabalhando a uma potência de 100 MWt, para um tempo total de 2000 dias. Aos 2000 dias, o combustível apresenta uma queima média de 632,2 GWd/Ton HM. A esse cálculo o chamaremos cálculo da queima para um ciclo de 2000 dias, que seria o tempo, que em média, permanece uma bola de combustível no núcleo.
3. Para simular uma composição representativa do núcleo no estado estacionário, considerando que foi realizado um esquema multipasse das bolas pelo núcleo (10 passes), tomaram-se 3 composições médias para as 10 zonas axiais que são descritas na continuação, e que consideram-se representativas da mistura de bolas com diferente número de passes que deve existir em cada zona.
4. As primeiras 3 zonas do reator na direção axial (contando de acima para baixo) foram carregadas com a composição que foi obtida para a zona 2 aos 900 dias do ciclo, a qual apresenta um grau de queima de 284,5 GWd/Ton HM.
5. As próximas 4 zonas foram carregadas com a composição que foi obtido na zona 5 para os 1000 dias, a qual apresenta um grau de queima de 316,2 GWd/Ton HM (grau de queima médio).
6. Finalmente, a composição das 3 últimas zonas e o cone da descarga foi tomada como a composição obtida para a zona 9 a 1100 dias, a qual apresenta um grau de queima de 347,7 GWd/Ton HM.

Com a distribuição anterior da composição do combustível no núcleo, considera-se que a bola permanece em média 2000 dias e atinge um grau de queima de 632,2 GWd/Ton HM e passa 10 vezes no núcleo. Considerando uma dependência linear entre o tempo de irradiação e o grau de queima atingido no estado estacionário, a mistura das bolas no núcleo teria um grau de queima igual à metade do valor total de queima. As três

zonas superiores teriam um valor médio de 10% inferior em relação as zonas centrais, enquanto as três zonas inferiores um 10% acima.

Usando a composição calculada para o estado estacionário (EOC) foi obtida a distribuição axial da densidade de potência para o TADSEA, igualmente normalizada para um valor de potência total de 100 MWt, e é mostrada na Figura 41.

Figura 41 – Comparação das distribuições axiais da densidade de potência para a primeira carga e o estado estacionário do TADSEA.

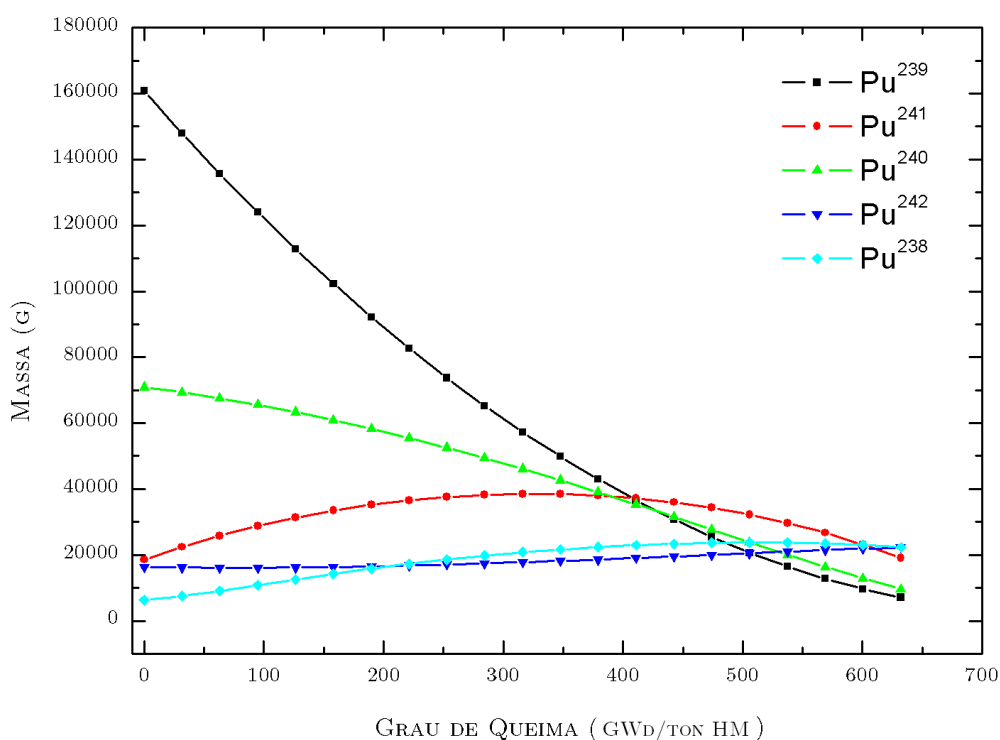


Em comparação com a distribuição axial da densidade de potência obtida para a primeira carga (BOC), observa-se um incremento na densidade de potência na zona central e uma diminuição na parte inferior do núcleo, dado pela queima do combustível. No estado estacionário, obtém-se um fator pico máximo na zona central igual a 1,43. Comparando esses resultados com os obtidos no TADSEA original, logra-se uma melhor uniformidade na liberação da energia, levando em consideração que as diferenças entre as distribuições axiais da densidade de potência eram mais pronunciadas entre a primeira carga e o ciclo estacionário e que o coeficiente de pico máximo nesse estudo foi de 1,69 (ROSALES, GARCÍA, 2008). A potência total máxima possível obtida para o núcleo no estado estacionário foi de 159 MWt, o que permite, ainda no estado estacionário, produzir os valores de potência do projeto. No primeiro projeto conceitual do TADSEA, a potência

produzida no estado estacionário era de 113 MWt e para essa potência, foi obtida uma temperatura média do refrigerante na saída do núcleo de 1222,66 K, temperatura que pode ser usada para a produção de hidrogênio mediante o ciclo I-S.

Usando as composições do núcleo explicadas anteriormente, procedeu-se a estudar a variação da composição isotópica dos elementos que compõem o combustível no núcleo durante o trabalho do TADSEA. Nas Figuras 42 e 43 mostra-se a variação da concentração dos isótopos do plutônio e dos actínídeos menores considerados no combustível, respectivamente.

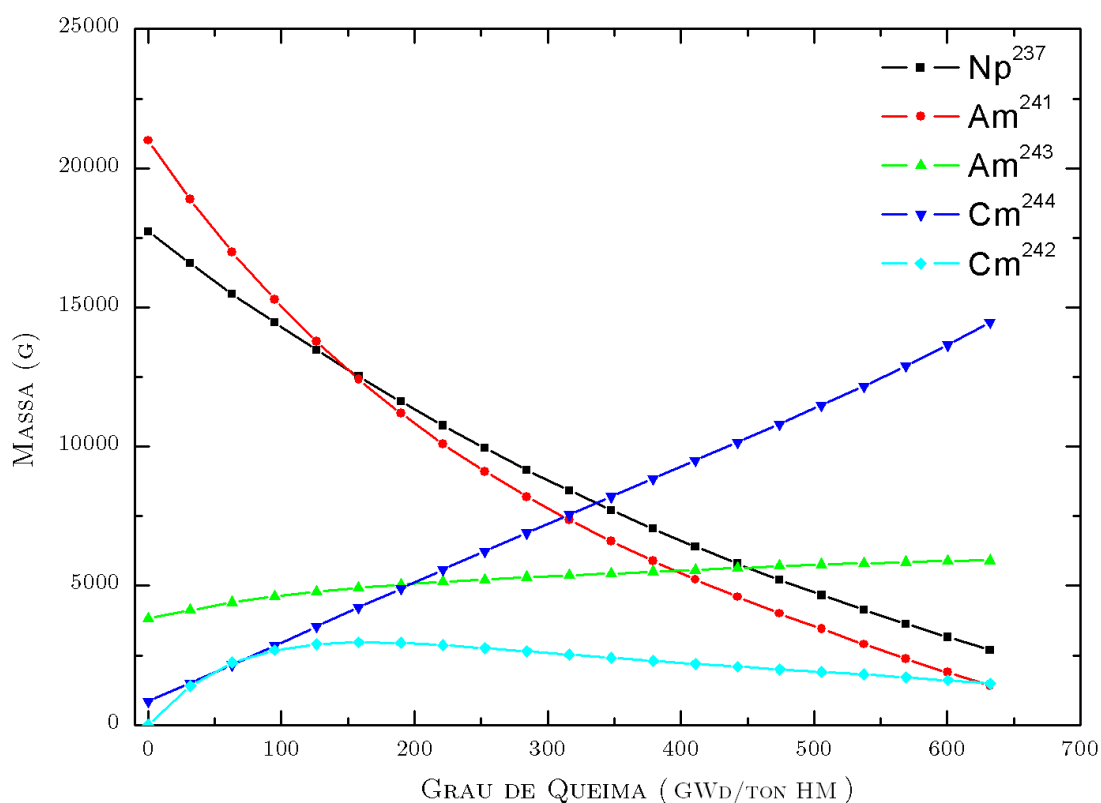
Figura 42 - Variação das massas dos isótopos do plutônio no núcleo do TADSEA.



Obtém-se que as massas dos isótopos do plutônio mais abundantes (Pu²³⁹ e Pu²⁴⁰) sofrem uma diminuição considerável. O Pu²³⁹ diminui sua massa em 95,60%, enquanto que a massa do Pu²⁴⁰ diminui em 86,42%. Embora obtém-se um leve incremento das massas do Pu²³⁸ e do Pu²⁴², a massa total dos isótopos do plutônio diminui em 66,8%. A massa do Np²³⁷ e a massa do Am²⁴¹ diminuem fortemente em 84,83% e em 93,27%, respectivamente. A massa do Cm²⁴⁴ é a que maior incremento apresenta e, de fato, é um dos principais contribuintes à radiotoxicidade à descarga, mas por outro lado, possui um período de semidesintegração bem pequeno em comparação com os outros elementos estudados, e decai rapidamente em Pu²⁴⁰. A produção de Cm²⁴⁴ provém das capturas que

ocorrem no Am^{243} , que formam o Am^{244} , que decai por β^- no Cm^{244} . Outra contribuição à formação da massa de Cm^{244} está dada pela desintegração por β^- do Am^{242} em Cm^{242} , o qual, por capturas consecutivas passa a Cm^{244} . Contudo, ao final do ciclo estacionário, a massa dos actínídeos menores diminui em 40,2%. Em resultados anteriores publicados para o projeto original do TADSEA, onde empregava-se uma composição homogênea do combustível (GARCÍA et al., 2011) conseguia-se chegar a um estado estacionário na massa de Cm^{244} , assim como de Am^{243} , pelo que poderia-se considerar um ciclo mais prolongado, para atingir uma maior diminuição das massas dos isótopos do plutônio e dos actínídeos menores.

Figura 43 - Variação das massas dos actínídeos menores no núcleo do TADSEA.



5.3 Estudo da variação da radiotoxicidade no tempo do combustível antes e depois do seu trabalho no TADSEA

Como foi mencionado no Capítulo 2, a perigosidade dos elementos radioativos vêm dada pela radiotoxicidade que apresentam. Um dos objetivos da transmutação é a

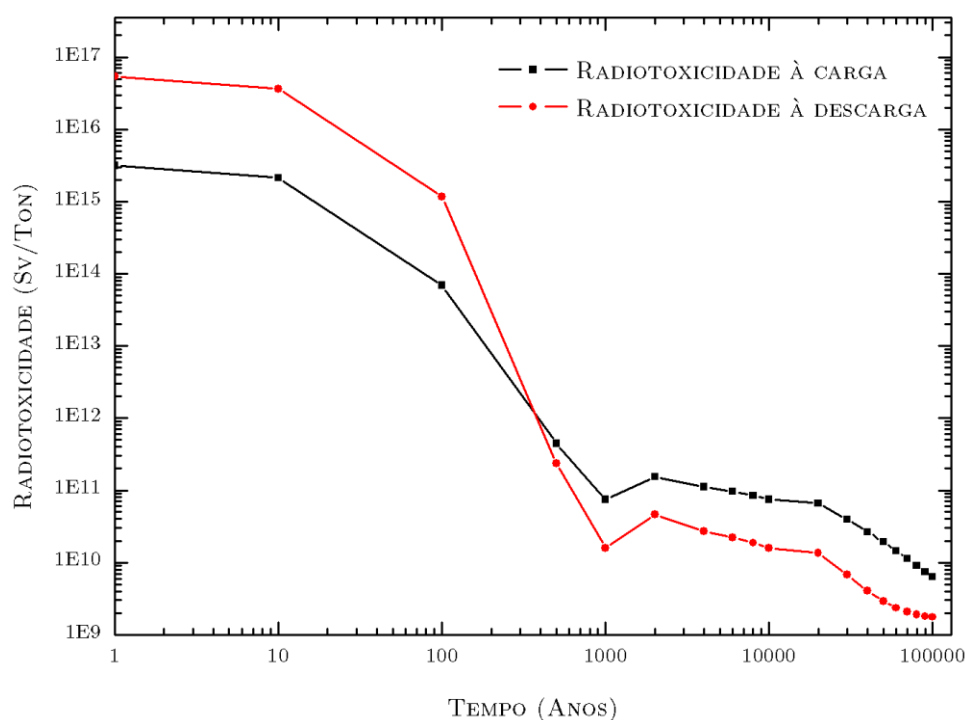
diminuição dessa radiotoxicidade ao longo do tempo, além da redução das suas massas e a produção colateral de energia. Neste estudo, compararemos o comportamento no tempo da radiotoxicidade apresentada pelos resíduos de vida longa do combustível irradiado dos LWR (isótopos do plutônio e os actínídeos menores), empregados como combustíveis à carga do TADSEA e a que apresenta esse combustível à descarga. Para a nossa análise comparativa consideramos a radiotoxicidade devida à inalação, na qual o coeficiente [e] utilizado depende do tipo de absorção pulmonar, pode ser rápida, moderada ou lenta. No nosso cálculo, considerou-se a velocidade de absorção pulmonar moderada. Existem isótopos que tem um valor só do coeficiente que não é precisamente moderado, pelo que foi utilizado no cálculo esse valor. Teve-se em conta o aporte à radiotoxicidade em cada instante do tempo calculado tanto dos isótopos pais como dos isótopos filhos que tem tempos de meia vida significativos (GAZETA OFICIAL DE LA REPÚBLICA DE CUBA, 2002; GARCÍA et al., 2013). Os valores das massas em função do tempo de decaimento calculam-se a partir da lei de decaimento exponencial:

$$M(t) = M_0 e^{-\lambda t} \quad (7)$$

Onde λ é a constante de decaimento do isótopo considerado. Depois, para calcular a radiotoxicidade, multiplicou-se a massa calculada ao final de cada intervalo do tempo pela atividade específica de cada isótopo, e pelo coeficiente de inalação correspondente, que dependem de cada isótopo. Os intervalos do tempo foram divididos de modo discreto, como pode ser apreciado na Figura 44. Considerou-se que os isótopos filhos aparecem para cada isótopo quando é calculado um intervalo do tempo dado. Ao passo pelo tempo seguinte, incorporam-se a descendência dos filhos na cadeia correspondente e assim, sucessivamente. São depreciados os filhos que tem um período de meia vida 10 vezes menor do que o intervalo do tempo considerado e sua massa é incluída diretamente na sua descendência (AUDI et al., 1997). As cadeias de decaimento de cada um dos elementos considerados mostram-se no Anexo II. Os elementos ressaltados em negrito são aqueles não considerados no cálculo devido aos pequenos tempos de meia vida. O último elemento da cadeia é o elemento estável. O comportamento da radiotoxicidade no tempo apresentada pelos isótopos componentes do combustível do TADSEA à carga e à descarga são mostrados na Figura 44.

Observa-se que para os primeiros 300 anos há um aumento da radiotoxicidade dos resíduos descarregados do ADS com respeito aos resíduos carregados, mas para tempos posteriores obtém-se uma apreciável diminuição da radiotoxicidade à descarga. Esse aumento da radiotoxicidade à descarga vem dado pelo crescimento da massa do Cm^{244} . A mudança brusca no comportamento da radiotoxicidade à descarga depois dos 200 anos está dado porque o tempo de meia vida do Cm^{244} é de 18 anos, e para o próximo tempo calculado (500 anos) tem decaído completamente.

Figura 44 - Variação da radiotoxicidade por inalação no tempo.



Isso pode-se ver melhor na Figura 45, onde mostram-se os principais elementos contribuintes à radiotoxicidade por inalação, à carga e à descarga do TADSEA, para os tempos estudados considerados mais importantes. As figuras foram feitas em escalas diferentes, já que o objetivo era apresentar os elementos que lideram a radiotoxicidade em cada instante do tempo considerado e comparar essas contribuições para o combustível depois de que fosse utilizado no TADSEA e a radiotoxicidade que teria o mesmo combustível sem o seu passo pelo núcleo do TADSEA.

Figura 45 - Principais contribuintes à radiotoxicidade para os tempos estudados, antes e depois do trabalho no TADSEA.



Para os 500 anos, o combustível que não passou pelo TADSEA apresenta maior radiotoxicidade que o combustível utilizado no TADSEA e os isótopos que lideram a

radiotoxicidade nesse tempo, igual que para os 1000 anos, são o Am^{241} , o Pu^{239} e o Pu^{240} . A radiotoxicidade ao muito longo prazo, 10000 e 100000 anos está liderada pelos elementos que apresentam tempos de meia vida maiores, o Pu^{239} , Pu^{240} , Pu^{242} e os isótopos do tório Th^{229} e Th^{230} , que foram-se formando dos decaimentos dos isótopos do plutônio e os actínídeos menores.

5.4 Projeto da blindagem do TADSEA

Neste estudo, realiza-se o primeiro projeto da blindagem biológica do TADSEA, empregando o código MCNPX para avaliar a tendência da radiação neutrônica em função da espessura da blindagem biológica e calcular a taxa de dose efetiva na superfície exterior da blindagem. Com o objetivo de diminuir os erros nos resultados e diminuir o custo computacional, foram utilizadas técnicas de redução de variância. Nos projetos de blindagem são comumente usadas estas técnicas devido a que, com a interação dos nêutrons com as camadas de blindagem mais próximas, menos nêutrons atingem as últimas camadas do mesmo, diminuindo a estatística do cálculo e, conseqüentemente, aumentando o erro estatístico dos resultados nas últimas camadas. A técnica de redução de variância empregada neste estudo é uma das mais antigas e comumente usada pelos códigos que empregam os métodos de Monte Carlo, chamada Divisão da Geometria /Roleta Russa. Quando é usada cuidadosamente pode salvar uma grande quantidade de tempo de cálculo. Quando as partículas viajam em uma direção de interesse, incrementa-se o número para obter uma melhor amostragem, no entanto, se estas seguem uma direção que não é importante, essas partículas são deixadas fora do estudo, evitando a perda de tempo nelas. Uma boa regra para aplicar esta técnica é manter o número de partículas viajando em uma direção de interesse aproximadamente constante.

A blindagem biológica propõe-se ser construída de concreto SHAEFFER PORTLAND e será colocada detrás do grafite usado como refletor. A densidade desse material é de $2,03 \text{ g/cm}^3$ e sua composição mostra-se na Tabela 32. Não faz sentido prático realizar a modelagem computacional usando MCNPX da espessura do concreto real necessário, devido a que a grande absorção que experimentam os nêutrons no concreto, faz que poucos nêutrons cheguem às camadas exteriores, e os valores estatísticos do cálculo seriam muito baixos para os resultados do fluxo neutrônico e a taxa da dose das mesmas. Então, para considerar a espessura real da blindagem, haveria que

simular um número muito elevado de histórias, elevando o custo computacional. Para resolver esse problema foi considerado uma espessura de 120 cm da blindagem biológica, e assim, avaliar a tendência do fluxo neutrônico e a taxa de dose neutrônica. Da curva do comportamento da taxa de dose para 120 cm da blindagem, pode-se mediante interpolação, determinar a espessura necessária do concreto para receber uma taxa de dose abaixo do limite permissível para o trabalhador ocupacionalmente exposto (TOE) (REMETTI et al., 2012). Dividiu-se a espessura da blindagem em dez camadas e foi calculado o valor do fluxo neutrônico em cada uma das dez superfícies que delimitam as camadas. Com os resultados obtidos para o fluxo neutrônico, calcularam-se as taxas de dose em rem/h e depois em mSv/h.

Tabela 32 - Composição da blindagem biológica SHAEFFER PORTLAND.

Elemento	Fração mássica
Hidrogênio	0,010
Oxigênio	0,529
Sódio	0,016
Magnésio	0,002
Alumínio	0,034
Silício	0,337
Potássio	0,013
Cálcio	0,044
Ferro	0,014
Carbono	0,001

(National Institute of Standards and Technology)

Finalmente, construiu-se a curva da tendência do fluxo e da taxa de dose para depois, mediante interpolação, calcular a espessura da blindagem necessária para obter ao final da blindagem, uma dose menor que o limite permissível para um TOE. O limite da dose usual para a exposição profissional é de 20 mSv ao ano. Considerando que o ano de trabalho do TOE tem 50 semanas e cada semana tem 40 horas, o limite permissível para a taxa da dose é de 0,01 mSv/h. Aplicamos a técnica de redução da variância nas últimas quatro camadas da blindagem, aumentando a importância da amostragem dos nêutrons nessas camadas (BRIESMEISTER, 1997). A importância em uma célula é utilizada para

terminar a história de uma partícula se esta é 0 e ajudar o transporte das partículas em zonas com maior importância. Por exemplo, se tem-se duas células adjacentes com importâncias I_i e I_j e sendo a razão $v = I_i/I_j$:

1. Se $v=1$ o transporte continua sem mudanças;
2. Se $v>1$ a partícula que está se movimentando da célula i à célula j , é dividida em v partículas com peso decrescente;
3. Se $v<1$ a partícula pode terminar sua história com uma probabilidade $1-v$ ou continuar incrementando seu peso por $1/v$.

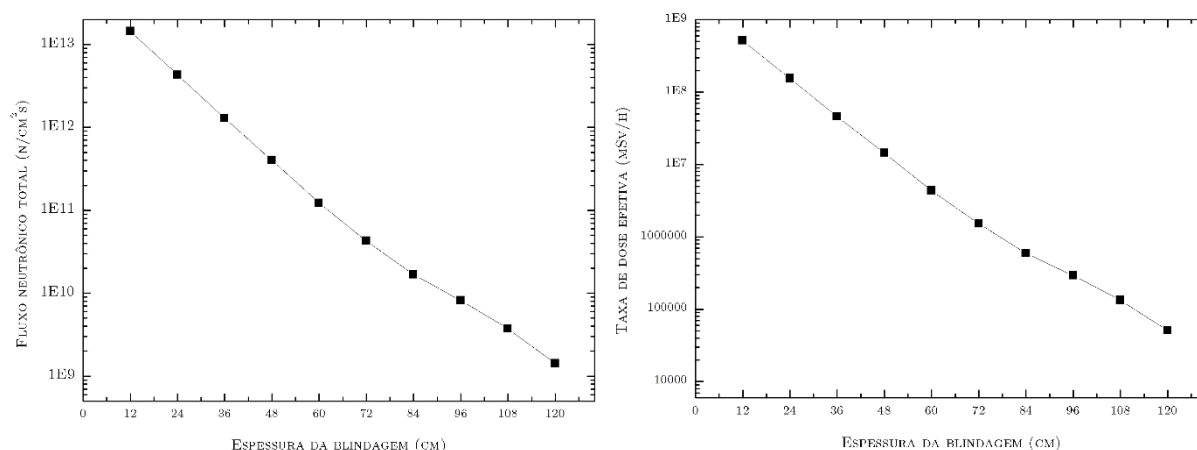
Tabela 33 - Resultados para o cálculo do fluxo neutrônico e a taxa de dose em função da espessura da blindagem.

Espessura da blindagem (cm)	Fluxo neutrônico absoluto (n/cm ² s)	Taxa de dose (mSv/h)
12	1,44E+13	5,14E+08
24	4,32E+12	1,54E+08
36	1,29E+12	4,60E+07
48	4,04E+11	1,44E+07
60	1,23E+11	4,38E+06
72	4,28E+10	1,52E+06
84	1,67E+10	5,95E+05
96	8,16E+09	2,91E+05
108	3,75E+09	1,33E+05
120	1,43E+09	5,08E+04
Grandeza	Função	R ²
Fluxo neutrônico (F)	$F [n/cm^2s] = 4,82 \cdot 10^{13} e^{-0,1x}$	1
Taxa de dose (D)	$D [(mSv/h)] = 1,72 \cdot 10^9 e^{-0,1x}$	1

Tendo em consideração a regra da aproximação inicial, às quatro últimas camadas da blindagem foi dada uma importância igual a 2. Os valores obtidos para o fluxo neutrônico absoluto e a taxa da dose são mostrados na Tabela 33. Estes resultados são mostrados graficamente na Figura 46 com o objetivo de observar a tendência do fluxo neutrônico e a taxa de dose em função da blindagem biológica, respectivamente.

Por outro lado, o material usado para a blindagem no estudo do HTR-10 é igualmente o concreto SHAEFFER PORTLAND. As propriedades do material é usado como blindagem expressa-se no coeficiente de atenuação, o qual sendo do mesmo material, era esperado que fosse o mesmo em ambos estudos.

Figura 46 - Fluxo neutrônico e a taxa de dose em função da blindagem biológica.



Para o estudo do HTR-10, o coeficiente de atenuação foi de 0,1020 e para a blindagem do TADSEA foi obtido um valor de 0,1006, os quais apresentam uma boa concordância. Como se esperava, a tendência segue uma atenuação exponencial e são muito similares quanto à forma, já que a taxa de dose efetiva depende do fluxo neutrônico. Com a função de interpolação obtida para a taxa de dose, é possível calcular a espessura da blindagem que garante uma taxa de dose abaixo da permitida para o TOE, para o qual obteve-se um valor de 257,22 cm. Observa-se também que os últimos quatro pontos não seguem exatamente a tendência linear que tem os anteriores. Isso, junto com o coeficiente de correlação igual à unidade demonstra a hipótese da necessidade de escolher uma espessura menor para não perder informação, assim como o uso da técnica de redução de variância.

Esta metodologia foi aplicada para calcular a taxa da dose efetiva na superfície exterior da blindagem do HTR-10 (REMETTI et al., 2012). O projeto da blindagem para o HTR-10 foi realizado para trabalhar com um fluxo neutrônico na ordem de 10^{12} n/cm²s e a espessura da blindagem obtida foi de 230 cm. Comparando nossos resultados da espessura da blindagem com os reportados para o HTR-10, observamos que são consistentes, já que os 257,22 cm da espessura da blindagem obtida para o TADSEA estão

em correspondência com um fluxo neutrônico um ordem de grandeza superior ao obtido no HTR-10.

6 CONCLUSÕES

No presente trabalho foram propostos novos avanços no projeto conceitual do TADSEA; um ADS do tipo leito de bolas, que usa combustível TRISO, projetado para a transmutação dos resíduos nucleares de vida longa, provenientes dos reatores de água leve, assim como a produção de energia elétrica.

Realiza-se um estudo do estado da arte dos reatores de alta temperatura, e os ADS do tipo leito de bolas, os principais projetos e as vantagens de cada sistema. São resumidos os principais sistemas de cálculo neutrônico dos reatores de leito de bolas, probabilísticos e determinísticos, assim como os modelos empregados para a simulação das heterogeneidades do núcleo (bolas no núcleo e as partículas TRISO dentro da bola) e as principais aproximações realizadas nos modelos empregados para os cálculos neutrônicos desses reatores.

Para considerar a dupla heterogeneidade do núcleo foram estudados vários modelos, dupla heterogeneidade de um leito de bolas que está dada pela estrutura das bolas com uma distribuição aleatória no recinto que contém elas, e a distribuição aleatória das partículas combustíveis encapsuladas dentro da zona combustível das bolas.

Para conformar os modelos geométricos que descrevem a dupla heterogeneidade, utilizou-se a possibilidade das estruturas repetitivas fornecidas pelo MCNPX. Diferentes tipos de células unitárias foram estudadas e empregou-se, nos cálculos neutrônicos para o novo projeto do TADSEA, a BCC para descrever a distribuição das bolas dentro do núcleo. Também foram analisados vários modelos para a descrição da distribuição das partículas TRISO dentro das bolas, e um novo modelo hexagonal uniforme foi apresentado.

Para validar os modelos utilizados, simulou-se de forma detalhada o reator de alta temperatura de leito de bolas HTR-10, e resolveram-se os problemas da tarefa de referência publicados em IAEA-TECDOC-1382 (2003). Os resultados obtidos em nossa simulação apresentaram muito boa concordância com os calculados por outros autores participantes no programa, assim como os resultados experimentais publicados.

Com o objetivo de avaliar a equivalência das células BCC e FCC, realizaram-se dois estudos, um ao nível de célula elementar e outro ao nível de núcleo do reator (HTR-10). No primeiro estudo, compararam-se os espectros neutrônicos das células unitárias BCC e FCC para diferentes relações combustível/moderador, usando em cada caso, a fração de

empacotamento igual à do HTR-10. Não são observadas diferenças significativas apreciáveis para o espectro neutrônico atribuídas ao uso de modelos de células unitárias diferentes, comportando-se de igual maneira para as diferentes relações combustível/moderador estudadas. No segundo estudo, calculou-se a altura crítica do HTR-10 para o problema original com atmosfera de ar, usando para a distribuição das bolas no núcleo as células FCC e BCC. Os valores da altura crítica foram obtidos mediante a interpolação por Spline Cúbico, 127,599 cm e 126,184 para as configurações FCC e BCC, respectivamente. Os valores da altura crítica são muito similares, apresentando entre eles um erro relativo do 1,1%. Esses resultados demonstram a equivalência entre as células elementares.

Foi estudada também a influência da distribuição das partículas TRISO dentro das bolas nas propriedades multiplicativas. As PCEs tem uma distribuição aleatória na zona combustível da bola. Contudo, modelar essa distribuição aleatória de forma exata é muito difícil e custosa, por isso são amplamente usadas as distribuições uniformes. Ao empregar estruturas repetitivas para modelar as heterogeneidades internas da bola, produzem-se efeitos de corte nas células unitárias com a superfície que delimita a zona. No nosso trabalho, comparam-se os resultados de K_{inf} em uma bola e os resultados da altura crítica do HTR-10 usando quatro modelos de distribuição: hexagonal uniforme, cúbico uniforme, um modelo cúbico onde não existe efeito de corte das partículas com a bola e um modelo aleatório. O cálculo de K_{inf} na bola foi realizado para várias massas de combustível na bola, com condições de contorno branca, onde apreciam-se diferenças significativas entre os modelos onde existe efeito de corte (hexagonal uniforme e cúbico uniforme) e o modelo que evita o efeito de corte para massas superiores o iguais a 3g. No modelo aleatório, o valor de K_{inf} comporta-se de maneira similar ao cúbico sem corte, exceto para massas superiores a 6g, onde comporta-se de forma similar aos que apresentam efeito de corte, devido a que esse efeito no modelo aleatório é mais importante para grandes valores da massa. Esse efeito foi estudado a escala de reator, onde realiza-se novamente o cálculo da altura crítica do HTR-10, com atmosfera de ar no problema original, distribuindo as bolas no núcleo com o modelo BCC, para os quatro modelos de distribuição das partículas TRISO dentro da bola. Os resultados não apresentam diferenças significativas do efeito de corte a escala do núcleo do reator.

Avaliou-se quantitativamente o efeito de corte em uma bola usando os modelos cúbico uniforme e hexagonal uniforme, onde é demonstrado que esse efeito é menor no modelo cúbico uniforme para quase todas as massas estudadas. Esses resultados são muito importantes desde o ponto de vista da geração da geometria, já que o modelo cúbico uniforme é o modelo mais simples de todos e não apresenta diferenças significativas com os outros modelos estudados muito mais difíceis de construir.

Tendo em consideração os resultados obtidos para modelar com exatidão a dupla heterogeneidade do leito de bolas, foi projetado novamente o núcleo do TADSEA. Foram inclusos alguns elementos novos desde o ponto de vista da segurança do TADSEA como o projeto de dez barras absorventes situadas no refletor, as quais apresentam uma efetividade de aproximadamente 4% para todos os valores de massa do combustível nas bolas. Foram considerados no projeto conceitual, a cavidade situada na parte superior do leito por onde entram as bolas, assim como o cone e o tubo de descarga das mesmas.

Obtém-se mudanças importantes nas propriedades multiplicativas quando são simuladas as partículas TRISO de forma heterogênea, tanto para o PBT como para o TADSEA. Determinou-se que um valor da massa de combustível irradiado na bola de 4,5g garante o nível de subcriticalidade desejado para atingir a potência do projeto e um valor profundo de queima.

Devido à impossibilidade de simular de maneira real a recarga contínua do combustível e um esquema multipasse das bolas, se define uma estratégia de queima do combustível a qual é simulada da forma seguinte. Considera-se que as diferentes zonas axiais do núcleo estarão compostas pelas bolas com um valor médio que queima, para isso, considerou-se que todas as bolas terão um grau de queima final igual, na zona central um grau de queima médio igual à metade do grau de queima final, e nas zonas superiores e inferiores, um valor médio de queima menor e maior do que o grau de queima médio, respectivamente.

Foram calculadas novamente as distribuições da densidade de potência axial tanto para a primeira carga como para o estado estacionário do núcleo, as quais apresentam boa concordância com estudos anteriores do TADSEA respeito à forma. Os coeficientes de pico para as distribuições na primeira carga e no estado estacionário são iguais a 1,24 e 1,43 respectivamente, menores que os obtidos nos estudos anteriores do TADSEA. Com esse esquema, no estado estacionário, consegue-se produzir uma potência de 159 MWt, a qual encontra-se acima do valor de projeto.

Obteve-se também um endurecimento do espectro neutrônico no núcleo do TADSEA para a nova composição proposta do TADSEA dado pelo aumento da massa de combustível na bola. Foram calculados também, os CRTM onde obtém-se sempre uma retroalimentação negativa no K_{eff} com o aumento da temperatura do moderador.

Estudou-se a variação da composição isotópica dos materiais no núcleo para o esquema de queima profundo projetado. Desde o início do ciclo até o estado estacionário, obtém-se uma redução considerável das massas dos isótopos transurânicos mais importantes, o qual coincide com os estudos anteriores. No nosso caso, o Pu^{239} diminui sua massa em 95,60%, entanto que a massa de Pu^{240} diminui em 86,42% e a massa total dos isótopos do plutônio diminui em 66,8%. Por sua parte, a massa total dos actínídeos menores diminui em 40,2%. A massa de Np^{237} e a massa de Am^{241} diminuem fortemente em 84,83% e em 93,27%, respectivamente. Embora, existe um aumento considerável da massa de Cm^{244} à descarga e não é atingido uma concentração estacionária desse isótopo.

A radiotoxicidade do combustível no momento da descarga do núcleo aumenta com respeito à radiotoxicidade do combustível sem o seu passo pelo TADSEA, devido ao aumento que tem a massa do Cm^{244} . Essa radiotoxicidade muda bruscamente a partir dos 200 anos e para os 300 anos, já a radiotoxicidade à descarga é menor que à carga, devido ao decaimento do Cm^{244} . Os principais contribuintes à radiotoxicidade ao longo prazo são os elementos com maiores tempos de meia vida, Am^{241} , Pu^{239} , Pu^{240} , Th^{229} e Th^{230} .

Como resultado de nosso trabalho, foi realizado o primeiro projeto da blindagem do TADSEA. Os materiais escolhidos coincidem com os empregados no projeto do HTR-10. Calcularam-se as doses equivalentes em 120 cm de blindagem de concreto dividido em dez zonas e mediante técnicas de extrapolação, determinou-se a espessura da blindagem que reduziria o valor da taxa de dose abaixo do limite permissível para um TOE. Obteve-se uma espessura da blindagem de 257,22 cm e os resultados estão em boa concordância com os obtidos em um estudo similar realizado para o HTR-10.

No trabalho foi melhorado o projeto conceitual de um dispositivo que cumpre com os objetivos de lograr a transmutação do combustível irradiado dos LWR, ao mesmo tempo que consegue produzir energia em um esquema de queima profunda e é possível atingir altas temperaturas na saída do núcleo para serem aproveitadas na produção de hidrogênio.

Referências

- A°LANDER, A.; DUFEK, J.; GUDOWSKI, W. From once-through nuclear fuel cycle to accelerator-driven transmutation. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 562, p. 630-633, 2006.
- ABÁDANES, A.; PÉREZ-NAVARRO, A. Engineering design studies for transmutation of nuclear waste with a gas-cooled pebble-bed ADS. **Nuclear Engineering and Design**, v. 237, p. 325-333, 2007.
- ÁBADANES, A; GARCÍA, C; ESCRIVÁ, A; PÉREZ-NAVARRO, A.; ROSALES, J. Application of gas-cooled Accelerator Driven System (ADS) transmutation devices to sustainable nuclear energy development. **Nuclear Engineering and Design**, v. 241, p. 2288-2294, 2011.
- ABÁNADES, A.; BUONO, S.; CASTRO, A.; MACIOCCO, L.; MOREAU, V. **Status report of the preliminary design of the proton target window for a low-power ADS prototype**. LAESA. [S.l.], p. 16-23. 1999. (VI).
- ABDERRAHIM, H.A.; KUPSCHUS, P.; MALAMBU, E.; BENOIT, P.H.; VAN TICHELEN, K.; ARIEN, B.; VERMEERSCH, F.; D'HONDT, P.; JONGEN, Y.; TERNIER, S.; VANDEPLASSCHE, D. MYRRHA: A multipurpose accelerator driven system for research & development. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, v. 463, p. 487-494, 2001.
- ARDAKANI, A.T.; GHOFrani, M.B.; EZZATI, A.O. Comparative modeling of stochastic versus regular arrangement of TRISO particles in HTTR. **Progress in Nuclear Energy**, v. 78, p. 291-296, 2015.
- AUDI, G.; BERSILLON, O.; BLACHOT, J.; WAPSTRA, A.H. The NUBASE evaluation of nuclear and decay properties. **Nuclear Physics A**, v. 624, p. 1-124, 1997.
- AUWERDA, G.J.; KOOSTERMAN, J.L.; LATHOUWERS, D.; VAN DER HAGEN, T.H.J.J. Effects of random pebble distribution on the multiplication factor in HTR pebble bed reactors. **Annals of nuclear energy**, v. 37, p. 1056-1066, 2010.
- BEALS, M.; GROSS, L.; HARRELL, V. CELL AGGREGATION AND SPHERE PACKING, 2000. Disponível em: <<http://www.tiem.utk.edu/~gross/bioed/webmodules/spherepacking.htm>>.
- BECK, J.M.; GARCIA, C.B.; PINCOCK, L.F. **High Temperature Gas-Cooled Reactors Lessons Learned Applicable to the Next Generation Nuclear Plant**. Idaho National Laboratory. [S.l.]. 2010.
- BOMBONI, E.; CERULLO, N.; LOMONACO, G. Simplified models for pebble-bed HTR core burn-up calculations with Monte Burns 2.0. **Annals of Nuclear Energy**, v. 40, p. 72-83, 2011.
- BRIESMEISTER J.F. **MCNP. A General Monte Carlo n-Particle Transport Code**. Los Alamos National Laboratory, Version 4B, LA-12625. [S.l.]. 1997.

CARMINATI, F.; KLAPISCH, R.; REVOL, J.P.; ROCHE, C.H.; RUBIO, J.A.; RUBBIA, C. **An energy amplifier for cleaner and inexhaustible nuclear energy production driven by a particle beam accelerator**. CERN. [S.l.]. 1993.

DEPARTMENT OF ENERGY. **A Roadmap for Developing Accelerator Transmutation of Waste (ATW) Technology: A Report to Congress**. Washington DC, p. 1-108. 1999.

FAJARDO, L.G. **Diseño conceptual de un sistema controlado por un acelerador para la transmutación de residuos nucleares y aplicaciones energéticas**. Tesis doctoral. Instituto de Ingeniería Energética. Universidad Politécnica de Valencia. Valencia. 2012.

FÜTTERER, M.A.; FU, L.; SINK, C.; GROOT, S.; POUCHON, M.; KIM, Y.W.; CARRÉ, F.; TACHIBANA, Y. Status of the very high temperature reactor system. **Progress in Nuclear Energy**, v. 77, p. 266-281, 2014.

GARCÍA, C.; ROSALES, J.; GARCÍA, L.; MUÑOZ, A.; ROSALES, F.; BRAYNER, C.; PÉREZ, J. Evaluation of uranium thorium and plutonium thorium fuel cycles in a very high temperature hybrid system. **Progress in Nuclear Energy**, v. 66, p. 61-72, 2013.

GARCÍA, C.; ROSALES, J.; GARCÍA, L.; PÉREZ-NAVARRO, A.; ESCRIVÁ, A.; ABÁNADES, A. Performance of a transmutation advanced device for sustainable energy application. **Progress in Nuclear Energy**, v. 53, p. 1151-1158, 2011.

GARCÍA, L.; PERÉZ, J.; GARCÍA, C.; ESCRIVÁ, A.; ROSALES, J.; ABÁDANES, A. Calculation of the packing fraction in a pebble-bed ADS and redesigning of the Transmutation Advanced Device for Sustainable Energy Applications (TADSEA). **Nuclear Engineering and Design**, v. 253, p. 142-152, 2012.

GAZETA OFICIAL DE LA REPÚBLICA DE CUBA. **Normas básicas de seguridad radiológica de la República de Cuba**. [S.l.]. 2002.

GLASSTONE, S.; SESONSKE, A. **Ingeniería de reactores nucleares**. Reverté S.A. [S.l.]. 1990.

HENDRICKS, J.S.; MCKINNEY, G.W.; FENSIN, M.L.; JAMES, M.R.; JOHNS, R.C.; DURKEE, J.W.; FINCH, J.P.; PELOWITZ, D.B.; WATERS, L.S.; GALLMEIER, F.X. **MCNPX, VERSION 26E**. Los Alamos National Laboratory. [S.l.]. 2007.

IAEA-TECDOC-1382. **Evaluation of high temperature gas cooled reactor performance: Benchmark analysis related to initial testing of the HTTR and HTR-10**. [S.l.]. 2003.

KIM, H.C.; KIM, S.H.; KIM J.K. A new strategy to simulate a random geometry in a pebble-bed core with the Monte Carlo code MCNP. **Annals of Nuclear Energy**, v. 38, p. 1877-1883, 2011.

KOK, K. **Nuclear Engineering Handbook**. Boca Raton. 2009.

KULIKOWSKA, T. **Reactor Lattice Codes**. ICTP. Trieste. 2000.

MCNP4C. Monte Carlo N Particle Transport Code System. OAK RIDGE NATIONAL Laboratory. [S.l.]. 2000.

MUELLER, A. **Accelerators for ADS: Science, Technology and Design**. International Centre for Theoretical Physics. Trieste. 2007.

NABIELEK, H.; KAISER, G. FUEL FOR PEBBLE-BED HTRs. **Nuclear Engineering and Design**, v. 78, p. 155-166, 1984.

NATIONAL Institute of Standards and Technology. Disponível em: <<http://physics.nist.gov/cgi-bin/Star/compos.pl?matno=144>>. Acesso em: 2014.

NOJIRI, N.; FUJIMOTO, N.; MOURI, T.; OBATA, H. **DELIGHT-8. One Dimensional Fuel Cell Burnup Analysis Code for High Temperature Gas-cooled Reactors (HTGR)**. [S.l.]. 2004.

OKUMURA, K.; KUGO, T.; KANEKO, K.; TSUCHIHASHI, K. **SRAC2006: A Comprehensive Neutronics Calculation Code System**. [S.l.]. 2007.

PELOWITZ, D.B. **MCNPX User's manual**. [S.l.]. 2005.

PLUKIENE, R.; RIDIKAS, D. Modelling of HTRs with Monte Carlo: from a homogeneous to an exact heterogeneous core with microparticles. **Annals of Nuclear Energy**, v. 30, p. 1573-1585, 2003.

RED-IMPACT. IMPACT OF PARTITIONING, TRANSMUTATION AND WASTE REDUCTION TECHNOLOGIES ON THE FINAL NUCLEAR WASTE DISPOSAL. Julich. [S.l.]. 2007.

REMETTI, R.; ANDREOLI, G.; KESHISHIAN, S. Monte carlo calculation of the neutron effective dose rate at the outer surface of the biological shield of HTR-10 reactor. **Nuclear Engineering and Design**, v. 243, p. 148-152, 2012.

ROSALES, J.; GARCÍA, C. **Diseño conceptual de un Sistema Manejado por un Acelerador, refrigerado por gas, que emplea combustible TRISO, para la transmutación de desechos nucleares y la producción de energía**. InSTEC. La Habana. 2008.

ROSALES, J.; GARCÍA, L.; PÉREZ, J.; MUÑOZ, A.; GARCÍA, C.; ESCRIVÁ, A.; SÁNCHEZ, D.; ABÁNADES, A. Advances in the conceptual design of a gas-cooled Accelerator Driven System (ADS) transmutation device for a sustainable nuclear energy development. **Progress in Nuclear Energy**, v. 69, p. 2-8, 2013.

ROSALES, J.; MUÑOZ, A.; GARCÍA, C.; GARCÍA, L.; BRAYNER, C.; PÉREZ, J.; ABÁNADES, A. Computational Model for the Neutronic Simulation of Pebble Bed Reactor's Core Using MCNPX. **International Journal of Nuclear Energy**, v. 2014, n. 279073, p. 1-12, 2014.

RÜTTEN, H.J.; HAAS, K.A.; BROCKMANN, H.; OHLIG, U.; POHL, C.; SCHERER, W. **V. S. O. P. Computer Code System for Reactor Physics and Fuel Cycle Simulation**. [S.l.]. 2009.

SALVATORES, M. Fuel cycle strategies for the sustainable development of nuclear energy: The role of accelerator driven systems. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 562, p. 578-584, 2006.

SEKER, V.; ÇOLAK, U. HTR-10 full core firsts criticality analysis with MCNP. **Nuclear Engineering and Design**, v. 222, p. 263-270, 2003.

STANCULESCU, A. **Partitioning and transmutation 1 and 2**. Joint ICTP/IAEA School on physics and technology of fast reactors systems. Trieste: [s.n.]. 2009.

TALAMO, A.; GUDOWSKI, W. Performance of the gas turbine-modular helium reactor fuelled with different types of fertile TRISO particles. **Annals of Nuclear Energy**, v. 32, p. 1719-1749, 2005.

THE EUROPEAN TECHNICAL WORKING GROUP ON ADS. **A European Roadmap for Developing Accelerator Driven Systems (ADS) for Nuclear Waste Incineration**. [S.l.]. 2001.

TIAN, J. A new ordered bed modular reactor concept. **Annals of nuclear energy**, v. 34, p. 297-306, 2007.

TÜRKMEN, M.; ÇOLAK, U. Effect of pebble packing on neutron spectrum and the isotopic composition of HTGR fuel. **Annals of Nuclear Energy**, v. 46, p. 29-36, 2012.

U.S. DOE NUCLEAR ENERGY RESEARCH ADVISORY COMMITTEE AND THE GENERATION IV INTERNATIONAL FORUM. **A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems**. [S.l.]. 2002.

U.S. NUREG, NUCLEAR REGULATORY COMMISSION. TRISO-Coated Particle Fuel Phenomenon Identification and Ranking Tables (PIRTs) for Fission Product Transport Due to Manufacturing, Operations, and Accidents. **Office of Nuclear Regulatory Research**, v. 1, n. NUREG/CR-6844, 2004.

UNIVERSITY OF BRISTOL SCHOOL OF CHEMISTRY. ALCHEMY. Disponível em: <<http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2002/crabb/modern.html>>. Acesso em: 2014.

VENNERI, F.; BAXTER, A.; MCEACHERN, D.; RODRIGUEZ, D.; FIKANI, M.; KUZMINSKI, J.; CAROSELLA, D. Deep burn transmutation: A practical approach to the destruction of nuclear waste in the context of nuclear power sustainability. **DOE**, v. 35, n. FDOE00-N-TRT-X-000132, 2001.

WIMS. A General Purpose Reactor Physics Program for Core Physics Calculations, 2013. Disponível em: <<http://www.answerssoftwareservice.com>>. Acesso em: 15 maio 2013.

Anexo I: Cálculo da altura crítica do HTR-10

Tabela 34 – K_{eff} em função da altura do núcleo do reator HTR-10 (Problema de referência original).

Altura (cm)	K_{eff}	D. P (pcm)	Quantidade de bolas	Bolas de combustível	Bolas “Dummy”
86,648100	0,85083	87	11893	6779	5114
95,312910	0,89405	89	13082	7457	5625
103,97772	0,92919	90	14271	8134	6137
112,64253	0,96268	86	15460	8812	6648
121,30734	0,99161	91	16649	9490	7159
129,97215	1,01720	87	17839	10168	7671
138,63696	1,04021	90	19028	10846	8182
147,30177	1,06114	86	20217	11524	8693
155,96658	1,07810	86	21410	12205	9205
164,63139	1,09565	90	22596	12880	9716
Altura crítica (cm)					
123,67047	1	-	17039	9712	7327

Tabela 35 - K_{eff} em função da altura do núcleo do reator HTR-10 (Problema de referência desviado).

Altura (cm)	K_{eff}	D. P. (pcm)	Quantidade de bolas	Bolas de combustível	Bolas “Dummy”
86,648100	0,85849	88	11892	6778	5114
95,312910	0,89936	86	13082	7457	5625
103,97772	0,93834	90	14271	8134	6137
112,64253	0,96917	90	15460	8812	6648
121,30734	1,00027	87	16649	9490	7159
129,97215	1,02495	87	17839	10168	7671
138,63696	1,04741	96	19028	10846	8182
147,30177	1,06874	89	20217	11524	8693
155,96658	1,08707	90	21406	12202	9204
164,63139	1,10429	87	22596	12880	9716
Altura crítica (cm)					
121,31	1	-	16636	9482	7154

Anexo II: Cadeias de decaimento radioativo

