



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

MARIANA CECILIA BETANCOURT

**MODELO COMPUTACIONAL PARA A ANÁLISE DE CICLOS DE COMBUSTÍVEL
ESTENDIDOS DE UM REATOR DE ÁGUA PRESSURIZADA INTEGRAL**

Recife
2025

MARIANA CECILIA BETANCOURT

**MODELO COMPUTACIONAL PARA A ANÁLISE DE CICLOS DE COMBUSTÍVEL
ESTENDIDOS DE UM REATOR DE ÁGUA PRESSURIZADA INTEGRAL**

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

Orientador (a): Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira

Coorientador (a): Dr. Carlos Rafael García Hernández

Dr. Leorlen Yunier Rojas Mazaria

Recife

2025

Catálogo de Publicação na Fonte. UFPE - Biblioteca Central

Betancourt, Mariana Cecilia.

Modelo computacional para a análise de ciclos de combustível estendidos de um reator de água pressurizada integral / Mariana Cecilia Betancourt. - Recife, 2025.

129f.: il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociências, Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, 2025.

Orientação: Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira.

Inclui referências.

1. SMR; 2. iPWR; 3. Tório; 4. Serpent; 5. OpenFoam; 6. Termohidráulica. I. Lira, Carlos Alberto Brayner de Oliveira.
II. Título.

UFPE-Biblioteca Central

MARIANA CECILIA BETANCOURT

**MODELO COMPUTACIONAL PARA A ANÁLISE DE CICLOS DE COMBUSTÍVEL
ESTENDIDOS DE UM REATOR DE ÁGUA PRESSURIZADA INTEGRAL**

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

Área de concentração: Engenharia de Reatores

Aprovado em: 30/01/2025.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira (Orientador)
Centro Regional de Ciências Nucleares

Prof. Dr. Daniel Gonzalez Rodriguez (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

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

Prof. Dr. Abel Gomez Rodríguez (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco – UFPE

Prof. Dr. Daniel Milian Pérez (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira, obrigado pelo esforço, dedicação e paciência, sou muito grata pela oportunidade que recebi.

Agradeço aos meus co-orientadores Dr. Carlos Rafael García Hernández e Dr. Leorlen Yunier Rojas Mazaria, sem os quais não poderia ter uma formação acadêmica completa. Com seu conhecimento e forma de trabalhar conseguiram conquistar minha admiração, além de lhes agradecer todo o carinho e dedicação ao longo dos anos.

A todos os professores que fizeram parte da minha formação acadêmica, entre eles um agradecimento especial aos professores Fernando, Mário, Jair e Daniel González, por todo conhecimento compartilhado sobre engenharia nuclear.

Um agradecimento especial ao meu marido por sempre acreditar em mim e sempre me dar seu apoio, compreensão e amor.

Agradeço aos meus pais e à minha irmã por todo apoio e orientação para alcançar meus objetivos. Obrigado pelos sábios conselhos que foram capaz de me dar nos momentos certos.

Agradeço à FACEPE pelo apoio financeiro, sem o qual teria sido muito difícil concluir a pós-graduação.

RESUMO

O projeto e otimização de reatores modulares avançados tem sido uma das principais linhas de investigação nos últimos dez anos na área da energia nuclear, pelas vantagens que apresentam em relação às centrais nucleares tradicionais. Por outro lado, há um interesse crescente na utilização do tório devido aos seus benefícios como combustível nuclear. Este trabalho investiga um reator modular pequeno (SMR) do tipo água pressurizada integrado (iPWR), que produz 530 MW (t), e utiliza misturas de Tório-Urânio (ThU), Tório-Plutônio (ThPu) e Tório-Urânio-Plutônio (ThUPu) como combustível. Propõe-se desenvolver um modelo computacional, utilizando o programa Serpent, que permita uma descrição neutrônica detalhada do núcleo do SMR. Além disso, propõe-se desenvolver um modelo termohidráulico usando o programa OpenFoam, que permite calcular as distribuições de temperatura na seção em que é produzida a maior potência dentro do núcleo do SMR iPWR. São calculados parâmetros neutrônicos importantes, como a variação de K_{eff} com a queima do combustível, os coeficientes de reatividade por temperatura, bem como as distribuições de energia do núcleo para diferentes instantes de tempo e a variação de massa para os principais isótopos. O comportamento físico-neutrônico do núcleo é estudado, utilizando métodos para controlar a reatividade. Com o modelo termohidráulico são calculadas as distribuições de temperatura, tanto no combustível quanto no refrigerante.

Palavras-chaves:

SMR, iPWR, Tório, Neutrônico, Serpent, Termohidráulico, OpenFoam.

ABSTRACT

The design and optimization of advanced modular reactors has been one of the main research lines in the last ten years in the field of nuclear energy, due to the advantages they present in relation to traditional nuclear power plants. On the other hand, there is a growing interest in the use of thorium due to its benefits as a nuclear fuel. This work investigates a small modular reactor (SMR) of the integral pressurized water reactor type (iPWR), which produces 530 MW (t), and uses Thorium-Uranium (ThU), Thorium-Plutonium (thPu) and Thorium-Uranium-Plutonium (ThUPu) mixtures as fuel. It is proposed to develop a computational model, using the Serpent program, that allows a detailed neutronic description of the SMR core. In addition, it is proposed to develop a thermohydraulic model using the OpenFoam program, that allows to calculate the temperature distributions in the section where the greatest power is produced in the SMR iPWR core. Important neutronic parameters are calculated, such as the K_{eff} variation as the fuel burnup, the temperature coefficient of reactivity, as well as the energy distributions for different instants of time and the mass variation for the main isotopes. The physical-neutronic behavior of the core is studied, using methods to control reactivity. With the thermohydraulic model, the temperature distributions are calculated, both in the fuel and in the coolant.

Keywords:

SMR, iPWR, Thorium, Neutronic, Serpent, Thermohydraulic, OpenFoam.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1. Evolução da tecnologia nuclear.....	18
Figura 2. Oferta de Potência de Geração Elétrica em junho 2024.....	24
Figura 3. Ciclo de combustível de uma etapa.....	27
Figura 4. Ciclo de reprocessamento de combustível convencional com uma única reciclagem.....	28
Figura 5. Ciclo de combustível DUPIC com processamento OREOX.....	30
Figura 6. Estratégias de queima de plutônio baseadas em PWR ou reatores rápidos.	31
Figura 7. Abordagens alternativas para partição e transmutação no sistema de reator rápido integral (IFR) e o sistema de estrato duplo em um ADS.	33
Figura 8. Conceito de Radkowsky, unidade de seed-blanket (SBU).	40
Figura 9. Projeto de conjunto de combustível de unidade de seed-blanket (SBU) e seed e blanket inteiras (WASB).	42
Figura 10. Características e dimensões das barras de seed e blanket.....	42
Figura 11. Configuração do reator MPower.	50
Figura 12. Projeto de contenção mPower.	51
Figura 13. Esquema do núcleo e conjunto de combustível do reator.....	56
Figura 14. Características e dimensões das barras de combustível e tubo guia.....	58
Figura 15. Esquema de um conjunto e uma barra de combustível.	59
Figura 16. Esquema MonoThPu.	60
Figura 17. Esquema MultiThUPu.	60
Figura 18. Esquema MultiThU.....	61
Figura 19. Esquema IFBA.....	65
Figura 20. Vista isométrica e superior da geometria do canal de combustível.	67
Figura 21. A malha utilizada na discretização do domínio.....	68
Figura 22. Visão geral da estrutura do OpenFOAM.....	85
Figura 23. Configurações estudadas para distribuição de conjuntos com combustível MOX no núcleo.	90
Figura 24. Espectro de nêutrons para os casos considerados.....	91

Figura 25. Valores do fator de multiplicação efetivo (Keff) versus queima do combustível para os casos simulados.....	92
Figura 26. (A) Fatores de pico de potência radial no BOC, MOC, EOC para o caso de referência de UO ₂ . (B) Fatores de pico de potência radial em BOC, MOC, EOC para o caso MonoThPu. (C) Fatores de pico de potência radial em BOC, MOC, EOC para o caso MultiThUPu. (D) Fatores de pico de potência radial em BOC, MOC, EOC para o caso MultiThU ₂	94
Figura 27. Massas de isótopos de plutônio versus queima do combustível para as composições de combustível do núcleo estudadas (A, B e C).	96
Figura 28. Radiotoxicidade total devido à ingestão do combustível MOX descarregado.	99
Figura 29. Distribuição das barras IFBA dentro do conjunto de combustível em quarto de simetria.	103
Figura 30. Variação dos valores de Keff com a queima do combustível para as composições MonoThPu y MultiThUPu.	104
Figura 31. Variação da massa do ¹⁰ B com o queimado do combustível.....	105
Figura 32. Fatores de potência de pico em BOC sem e com 104,128 e 156 barras de IFBA, considerando um quarto de simetria, para a mistura MonoThPu.....	106
Figura 33. Fatores de potência de pico em BOC sem e com 104,128 e 156 barras de IFBA, considerando um quarto de simetria, para a mistura MultiThUPu.	107
Figura 34. Variação de Keff com a queima do combustível, para diferentes concentrações de gadolínio.	108
Figura 35. Fatores de potência de pico em BOC, considerando um quarto de simetria.	110
Figura 36. Variação da massa de Gd155 com a queima do combustível para as misturas estudadas	111
Figura 37. Variação da massa de Gd157 com a queima do combustível para as misturas estudadas.	111
Figura 38. Distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent para a mistura MonoThPu.....	113
Figura 39. Distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent para a mistura MultiThUPu.	114

Figura 40. Distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent para a mistura MultiThU2.	115
Figura 41. Distribuição da temperatura axial no centro do refrigerante.....	116
Figura 42. Distribuição da temperatura radial na barra de combustível.	118
Figura 43. Distribuição da temperatura axial no centro do combustível.....	120

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Parâmetros do reator levados em consideração para diagramas de ciclo de combustível.....	26
Tabela 2. Parâmetros do reator levados em consideração para diagramas de ciclo de combustível parcialmente fechados.	32
Tabela 3. Parâmetros do reator levados em consideração para diagramas de ciclo de combustível completamente fechados.	33
Tabela 4. Projetos e status do SMR do tipo iPWR.	49
Tabela 5. Principais dados do núcleo do reator proposto.....	57
Tabela 6. Composições de combustível MOX.....	62
Tabela 7. Especificações para IFBA.....	65
Tabela 8. Principais parâmetros termohidráulicos	66
Tabela 9. Estudo de Independência de Malha.	68
Tabela 10. Qualidade da malha em relação aos parâmetros Qualidade Ortogonal e Skewness.....	69
Tabela 11. Tipos de patch básicos.	86
Tabela 12. Resultados, no estado BOC, obtidos para os valores de k_{eff} e os coeficientes de potência máxima de pico para as quatro configurações analisadas .	90
Tabela 13. Resultados dos parâmetros do ciclo de combustível para as composições de combustível simuladas.	93
Tabela 14. Fator de conversão para composições de combustível propostas	97
Tabela 15. Vetor de isótopos de plutônio, no início do ciclo (BOC) e no fim do ciclo (EOC) para composições que usam plutônio.	97
Tabela 16. Vetores de isótopos de urânio e porcentagem de variação das massas de isótopos de urânio.	98
Tabela 17. Massas finais (gr) de actínídeos menores por TnHM inicial.	98
Tabela 18. Parâmetros de nêutrons atrasados em BOC e EOC para todas as composições de combustível simuladas.....	100
Tabela 19. Coeficientes de temperatura do moderador e coeficientes de vazão total do refrigerante para composições de núcleo propostas.....	101
Tabela 20. Coeficientes de temperatura do combustível (FTCs) para composições de combustível propostas.	102

Tabela 21. Principais parâmetros para a mistura MonoThPu	103
Tabela 22.Principais parâmetros para a mistura MultiThUPu.....	103
Tabela 23. Principais parâmetros para a mistura MonoThPu.....	109
Tabela 24. Principais parâmetros para a mistura MultiThUPu.....	109

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- ADS - Accelerator Driven Systems (Sistemas Acionados por Acelerador)
- BOC - Beginning Of Cycle (Início do ciclo)
- BWR - Boiling Water Reactor (Reator de Água Fervente)
- CAREM - Central Argentina de Elementos Modulares
- CDF - Core Damage Frequency (Frequência de Dano ao Núcleo)
- CFD - Computational Fluid Dynamics (Fluidodinâmica Computacional)
- FP - Fission products (Produtos de Fissão)
- FR - Fast Reactor (Reator Rápido)
- GIF - Generation IV International Forum (Fórum Internacional Geração IV)
- HEU - Highly Enriched Uranium (Urânio Altamente Enriquecido)
- HLW - High Level Waste (Resíduos de Alto Nível)
- HTR - High Temperature Reactor (Reator de Alta Temperatura)
- HTR-PM - High Temperature Reactor – Pebble-Bed Modular (Reator de Alta Temperatura Modular de Lecho de Bolas)
- HTGR - High Temperature Gas Reactors (Reatores Refrigerados a Gás de Alta Temperatura)
- IAEA - International Atomic Energy Agency (Agência Internacional de Energia Atômica)
- IBA - Integral Burnable Absorbers (Absorvedores Queimáveis Integrais)
- IFBA - Integral Fuel Burnable Absorbers (Absorvedores Queimáveis Integrais de Combustível)
- IFR - Integral Fast Reactor (Reator Rápido Integral)
- INPRO - Innovative Nuclear Reactors and Fuel Cycles (Reatores Nucleares Inovadores e Ciclos de Combustível)
- iPWR - Integral Pressurized Water Reactor (Reator de Água Pressurizada Integral)
- LEU - Low Enriched Uranium (Urânio Pouco Enriquecido)
- LMFBR - Liquid Metal Fast Breeder Reactors (Reatores Reprodutores Rápidos refrigerados a Metal Líquido)
- LWR - Light Water Reactor (Reatores de Água Leve)
- MA - Minor Actinides (Actínídeos Menores)
- MOX - Mixed Oxide (Óxido Misto)
- MSBR - Molten Salt Breeder Reactor (Reatores Reprodutores de Sal Fundida)

OCDE - Organisation for Economic Co-operation and Development (Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico)

P&T- Partição e Transmutação

PHWR - Pressurized Heavy-Water Reactor (Reatores de Água Pesada Pressurizada)

PUREX - Plutonium and Uranium Recovery by Extraction (Recuperação de Plutônio e Urânio por Extração)

PWR - Pressurized Water Reactor (Reator de Água Pressurizada)

RCS - Reactor Coolant System (Sistema de Refrigeração do reator)

SBU - Seed-Blanket Unit

SMR - Small Modular Reactor (Reator Modular Pequeno)

UREX - Uranium Extraction (Extração de Urânio)

WASB - Whole Assembly As Seed and Blanket (Conjunto Inteiro como Seed-Blanket)

WPu - Weapon-grade plutonium (Plutônio para armas)

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	17
1.1. OBJETIVO GERAL	21
1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	21
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1. PERSPECTIVAS PARA A ENERGIA NUCLEAR	22
2.2. CICLO DE COMBUSTÍVEL NUCLEAR	25
2.2.1. Esquemas baseados na tecnologia industrial atual e extensões possíveis	26
2.2.2. Esquemas com ciclos de combustível parcialmente fechados.	31
2.2.3. Esquemas envolvendo ciclos de combustível totalmente fechados.	32
2.3. POTENCIALIDADES DO TÓRIO COMO COMBUSTÍVEL NUCLEAR	34
2.3.1. Experiência no uso de tório como combustível	37
2.3.2. Ciclo de combustível de tório	38
2.4. REATORES MODULARES PEQUENOS	43
2.4.1 Vantagens da modularidade	44
2.4.2. Projetos de SMR	46
2.4.3. SMR do tipo iPWR	48
2.4.4. mPower (B&W GENERATION mPower, ESTADOS UNIDOS)	49
3 MATERIAIS E MÉTODOS	56
3.1. CARACTERÍSTICAS DO PROJETO DO NÚCLEO iPWR PROPOSTO	56
3.1.1 Estratégias de combustível MOX consideradas.	59
3.1.2. Uso de absorvedores queimáveis.	63
3.2. DESCRIÇÃO TERMOHIDRÁULICA DA SEÇÃO MAIS QUENTE DO NÚCLEO	66
3.2.1. Geração de geometria e discretização espacial	67
3.2.2. Modelo de turbulência $k-\epsilon$ Padrão	69

3.2.3. Propriedades do UO_2 sólido.	70
3.2.2. Propriedades do $(\text{U,Gd})\text{O}_2$ sólido.....	73
3.2.3. Propriedades do $(\text{Th,U})\text{O}_2$ sólido	75
3.2.4. Propriedades do $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ sólido	76
3.2.5. Propriedades do Zircaloy-4	76
3.2.6. Propriedades do Hélio.....	78
3.3. CÓDIGOS USADOS PARA LA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	78
3.3.1. Serpent.....	78
3.3.2. OpenFOAM.....	83
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	89
4.1. RESULTADOS NEUTRÔNICOS.....	89
4.1.1. Calculos neutrônicos do núcleo sem absorventes queimáveis	89
4.1.2. Calculo do espectro neutrônico	90
4.1.3. Ciclo de combustível	91
4.1.4. Fatores de pico radial de potência do núcleo	93
4.1.5. Análise da queima do combustível no núcleo.....	95
4.1.6. Parâmetros de nêutrons atrasados	100
4.1.7. Coeficientes de reatividade do moderador	100
4.2. CALCULO NEUTRÔNICO USANDO VENENOS QUEMÁVEIS.....	102
4.2.1. CONTROLE DA REATIVIDADE USANDO IFBA	102
4.2.2. CONTROLE DA REATIVIDADE USANDO Gd_2O_3	107
4.3. RESULTADOS TERMOHIDRAULICOS	112
Conclusões	122

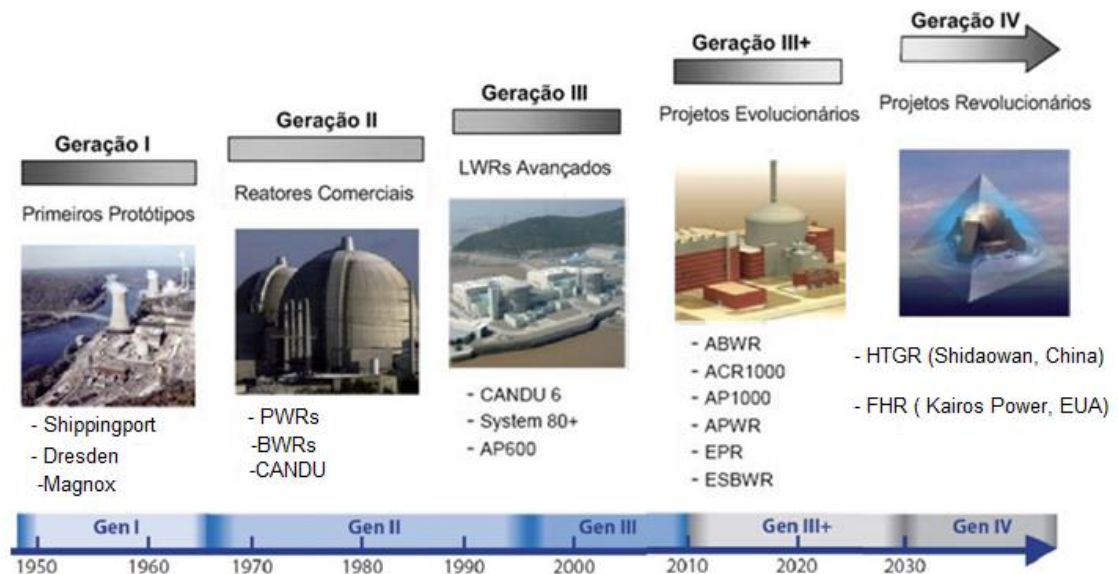
1. INTRODUÇÃO

O uso da energia nuclear tem sido uma das respostas atreladas à necessidade de obtenção de energia elétrica em larga escala e redução das emissões de dióxido de carbono na atmosfera, sendo esta uma das mais modernas fontes de energia que não emite gases de efeito estufa. Sua contribuição para a mitigação das mudanças climáticas tem sido importante ao evitar a emissão anual de cerca de 2 bilhões de toneladas de dióxido de carbono. As reservas atuais são grandes o suficiente para garantir a produção de combustível nuclear por décadas (IAEA, 2020a). Por outro lado, criou uma série de desafios, como o armazenamento ou a eliminação de resíduos radioativos de longa vida e a proliferação de armas nucleares.

Cada geração de reatores nucleares (Figura 1) representa a evolução da tecnologia nuclear em direção a projetos mais simples e robustos, que atendam satisfatoriamente aos requisitos relacionados à segurança, gerenciamento de resíduos, não proliferação e percepção pública. Os objetivos gerais dos reatores de geração III+ e IV baseados em acordos internacionais compreendem oito metas em quatro áreas principais (PIORO; RODRIGUEZ, 2023):

- Sustentabilidade
 - Gerar energia de forma sustentável, facilitando a disponibilidade de combustível nuclear no longo prazo.
 - Minimizar o lixo nuclear e reduzir a carga de seu armazenamento.
- Segurança e confiabilidade
 - Destaque-se em segurança e confiabilidade.
 - Apresentar uma probabilidade muito baixa de danos ao núcleo.
 - Eliminar a necessidade de evacuação externa de pessoal do local da fábrica em caso de acidente.
- Economia
 - Ter um custo de ciclo de vida menor ou igual do que outras fontes de energia.
 - Ter risco financeiro associado comparável ao de outras fontes de energia.
- Resistência à proliferação e segurança física.
 - Ser uma via pouco atrativa para o roubo ou desvio de material utilizável para armas nucleares.

Figura 1. Evolução da tecnologia nuclear.



Fonte: Adaptado de NUCLEAR ENERGY AGENCY [NEA] (2014)

O uso de reatores nucleares avançados de geração III+ e IV, e suas aplicações, tornou-se importante, visto como um meio capaz de contribuir para a transição global para sistemas de energia mais sustentáveis, acessíveis e confiáveis. Essa tecnologia, que poderá ser integrada em futuros sistemas de geração de energia elétrica sem carbono e com altas proporções de diferentes fontes de energia renovável, inclui Reatores Modulares Pequenos (SMR, Small Modular Reactor).

O desenvolvimento desta tecnologia para implantação imediata e de curto prazo está progredindo em todo o mundo. Vários países realizam pesquisas importantes voltadas para o desenvolvimento e fabricação de uma série de diferentes protótipos de SMR, marcando um novo enfoque nos potenciais benefícios que este tipo de tecnologia permitirá. Existem mais de 70 projetos de SMR em desenvolvimento para diferentes aplicações. No final de 2023, duas usinas de energia SMR de demonstração estavam em operação (IAEA, 2024):

- A usina nuclear flutuante Akademik Lomonosov na Federação Russa, com dois reatores KLT-40S de 35 MW(e) cada um. A usina nuclear flutuante está em operação comercial desde maio de 2020, fornecendo calor e energia para a cidade de Pevek na região de Chukotka.
- O módulo de demonstração do reator de alta temperatura – leito de esferas (HTGR PBR), na China, no local de Shidaowan, iniciou operação comercial em

6 de dezembro de 2023, gerando uma potência total de 200 MW(e), a partir de dois reatores.

O crescimento da energia nuclear está ligado à percepção do público sobre o impacto ambiental associado às usinas nucleares e aos ciclos de combustível. Por isso, a sustentabilidade passa a ser um requisito fundamental, o que significa que o uso racional dos recursos naturais, a minimização dos resíduos nucleares e a resistência à proliferação são considerados tão importantes quanto a segurança nuclear. Uma das alternativas consideradas para a gestão do combustível nuclear é o ciclo de combustível aberto por meio do descarte direto de combustível irradiado em formações geológicas profundas. Outra opção estudada, é o ciclo fechado de combustível com o objetivo de reciclar materiais físséis e remover produtos de fissão como resíduos de alto nível (KORNECKI; WISE, 2024).

O ciclo de combustível nuclear de uma passagem, com disposição final direta do combustível irradiado, usa apenas parte do minério de urânio (U) original (aproximadamente 1%). Além disso, a presença de plutônio no combustível irradiado tem um impacto significativo como uma fonte potencial de radiotoxicidade de longo prazo. Por um lado, o acúmulo contínuo de plutônio (Pu) excedente representa um fardo futuro para a comunidade mundial, principalmente devido ao risco de ser desviado para fins militares. Dado que o plutônio civil pode ser usado em armas, os estoques atuais deste material são suficientes para construir cerca de 100000 ogivas nucleares, o que representa um desafio para a segurança mundial. Uma maneira de garantir que o plutônio fique inacessível para usos não autorizados e não pacíficos é reutilizá-lo como combustível de óxido misto (MOX, Mixed Oxide) em reatores de energia (HIPPEL, VON; MACKERRON, 2015). Esta estratégia permite que o plutônio seja plenamente utilizado como recurso energético, aumentando a sustentabilidade da energia nuclear. Portanto, do ponto de vista do desenvolvimento sustentável, a reciclagem é uma opção atraente para melhorar a eficiência da gestão dos recursos naturais e reduzir o acúmulo de rejeitos radioativos.

As previsões globais indicam que a procura de urânio nos próximos cinco anos aumentará de cerca de 72 milhões de quilogramas de U_3O_8 por ano para cerca de 86 milhões de quilogramas. Com a atual taxa de consumo mundial, os recursos comprovados de urânio durarão cerca de cem anos se houver um rápido desenvolvimento da energia nuclear no mundo sem a implantação de reatores

avançados. É por isso que várias pesquisas estão focadas em melhorar a utilização de actínídeos naturais (IAEA, 2018a; ORGANISMO INTERNACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA IAEA, 2023). Nesse contexto, o uso de tório (Th) é uma opção interessante, devido às suas boas propriedades neutrônicas, principalmente em espectros de nêutrons térmicos. No entanto, o tório não contém nenhum isótopo físsil de ocorrência natural. Portanto, o tório deve ser suplementado com urânio ou plutônio, garantindo a produção de energia em longo prazo com resíduos de baixa radiotoxicidade. (IAEA, 2005).

O presente trabalho foca na análise de um reator modular pequeno integral de água pressurizada (iPWR, Integral Pressurized Water Reactor) com configurações de combustível de misturas de óxido de Tório-Plutônio (ThPu), Tório-Urânio (ThU) e Tório-Urânio-Plutônio (ThUPu). O projeto do núcleo será baseado nas características do SMR BWX Technologies/Bechtel Generation mPower, que tem uma potência nominal de 180 MW(e) por módulo (U.S.NRC, 2020). Uma característica distintiva deste projeto de reator modular é que não usa absorvedor dissolvido no refrigerante para o controle de reatividade (IAEA, 2020b). Outro aspecto importante deste projeto SMR é proposto em ERIGHIN (2012); KITCHER; CHIRAYATH (2016); ROSALES GARCÍA *et al.* (2018), onde um ciclo de combustível estendido de 48 meses é considerado. Essa opção considera um ciclo de combustível de um passo, em que todo o núcleo é descarregado e substituído após quatro anos.

Apesar dos estudos realizados sobre o projeto do núcleo mPower (ERIGHIN, 2012; KITCHER; CHIRAYATH, 2016; ROSALES GARCÍA *et al.*, 2018), os modelos computacionais que descrevem em detalhes as características neutrônicas e termohidráulicas do núcleo, bem como seu comportamento durante a queima do combustível, ainda são insuficientes. A maioria desses estudos sobre a queima do combustível em iPWR foram feitos usando modelos computacionais simplificados que simulam o conjunto típico ou médio de combustível com condições de contorno com ausência de fugas de nêutrons na direção radial. Simular os processos neutrônicos de todo o núcleo do reator usando modelos de Monte Carlo constitui um desafio para o projeto da configuração do núcleo que atinge um ciclo estendido de quatro anos.

1.1. OBJETIVO GERAL

Desenvolver um modelo computacional que permita o estudo e a otimização dos parâmetros físico-neutrônicos e o cálculo dos parâmetros termohidráulicos do núcleo de um reator SMR iPWR, baseado no Serpent e no OpenFOAM, para ciclos de combustíveis estendidos.

1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estudar configurações básicas com combustíveis não padrão do tipo MOX e à base de tório que alcançam ciclos estendidos de quatro anos com parâmetros de segurança satisfatórios.
- Estudar estratégias para controlar a reatividade para ciclos de combustíveis de 4 anos usando como combustível UO_2 e misturas de Th-U, Th-Pu e Th-U-Pu.
- Comparar e avaliar os projetos de núcleo propostos em termos de suas vantagens no ciclo do combustível. (Grau de queima, coeficiente de reprodução, geração de resíduos).
- Comparar e avaliar os projetos dos núcleos propostos em termos de suas vantagens nos parâmetros de segurança.
 - Espectro neutrônico do núcleo
 - Coeficientes de reatividade por temperatura do combustível e da água.
 - Fração de nêutrons atrasados.
 - Perfis radiais para distribuição da energia liberada no núcleo e no conjunto de combustível mais carregado.
- Desenvolver um modelo computacional da seção crítica do núcleo que permita o cálculo dos parâmetros termohidráulicos mais importantes da seção onde a maior potência é produzida dentro do núcleo.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. PERSPECTIVAS PARA A ENERGIA NUCLEAR

O crescimento da capacidade nuclear tem sido constante ao longo da última década, com um aumento de 20,3 GW(e) entre 2012 e 2022. Durante esse período, 68 reactores com 67,8 GW(e) de capacidade foram ligados à rede nuclear. Mais do 83% deste crescimento ocorreu na Ásia, onde uma capacidade total de 56,2 GW(e) (55 reatores) foi ligada à rede. De acordo com relatórios fornecidos à Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA, International Atomic Energy Agency), as centrais nucleares geraram cerca de 2486,8 terawatts-hora (TW·h) de eletricidade distribuível e com baixo teor de carbono em 2022 (ORGANISMO INTERNACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA IAEA, 2023).

Em dezembro de 2023, a capacidade global de energia nuclear operacional era de 371,5 GW(e), fornecida por 413 reatores em 31 países, com uma produção total de 2515,2 TWh. Os três maiores produtores foram os Estados Unidos da América, com a maior frota do mundo, 30% (742,4 TWh) da geração total de eletricidade, seguidos pelos 16% da China (406,5 TWh), e pelos 13% da França (323,8 TWh). Uma capacidade total de 61,1 GW(e) (59 reatores) estava em construção em 17 países dos quais 35 na Ásia. Por tanto, as perspectivas de expansão e crescimento de curto e longo prazo continuam focadas na Ásia, especialmente na China. Cerca de 67% da capacidade global de reatores operacionais (261,8 GW(e), 295 reatores) está em operação há mais de 30 anos, enquanto mais do 29% (112,2 GW(e), 142 reatores) está em operação há mais de 40 anos e 4% (17,5 GW(e), 28 reatores) há mais de 50 anos (IAEA, 2024).

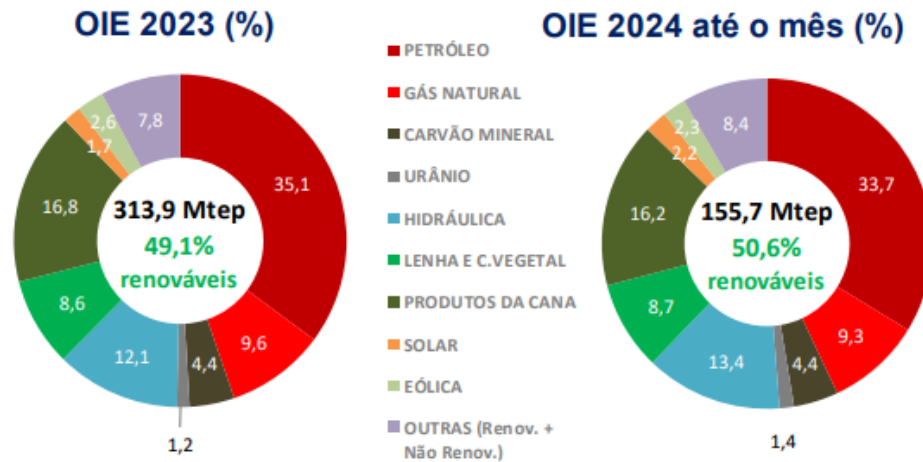
O envelhecimento da frota de centrais nucleares realça a necessidade de renovar ou aumentar a capacidade nuclear, a fim de compensar o desmantelamento planeado e contribuir para a sustentabilidade e a segurança energética global, bem como para os objetivos em matéria de alterações climáticas. Mesmo com o envelhecimento das centrais nucleares, os reactores nucleares em funcionamento continuam a demonstrar elevados níveis de fiabilidade e desempenho. Até 2035, o número de países com centrais nucleares em funcionamento poderá aumentar 30% graças à adição de 10 a 12 novos países com centrais nucleares em funcionamento, em comparação com os actuais 31 países (IAEA, 2024).

O Brasil possui atualmente duas usinas PWR em operação, Angra 1 e Angra 2, instaladas no município de Angra dos Reis, no estado do Rio de Janeiro. Enquanto isso, a terceira unidade Angra 3 desse complexo nuclear está em construção. As obras da usina nuclear Angra 3 (1,4 GW), no estado do Rio de Janeiro, estão em andamento há 35 anos e estão apenas 62% concluídas. O reator Angra 1 (657 MW) entrou em operação comercial em 1985, com área de ocupação de 37918,35 m², e está em processo de renovação de licença de operação por mais 20 anos. Com 657 megawatts (MW) de potência, a instalação gera energia suficiente para suprir uma cidade de 2 milhões de habitantes. O reator Angra 2 (1350 MW) entrou em operação comercial em fevereiro de 2001, ocupando uma área de 93802,74 m². É capaz de abastecer uma cidade de 4 milhões de habitantes, equivalente às populações de Brasília e Porto Alegre somadas (DANTAS, 2014).

Apesar da geração ser relativamente baixa, o Brasil faz parte de um seleto grupo de apenas três países (juntamente com Estados Unidos e Rússia) que têm reservas de minério, tecnologia e usinas nucleares para produzir energia. O Brasil tem a quinta maior reserva de urânio do mundo (ORGANISMO INTERNACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA IAEA, 2023).

Desde 2012, o Brasil utiliza fontes térmicas como carvão, gás, óleo diesel e combustíveis para complementar o fornecimento de energia elétrica, com predominância de fontes hídricas (MME, 2020). A Figura 2 ilustra a matriz de fornecimento de energia elétrica. Pode-se verificar que 89,7% foram obtidos através de fontes renováveis, até junho, alcançando o valor acumulado de 381,0 TWh. A ótima proporção de renováveis na Oferta Interna de Energia (OIE), proporcionando uma geração de energia mais limpa, consequência tanto de um regime hídrico favorável, como dos investimentos em energia solar e eólica (MME, 2024).

Figura 2. Oferta de Potência de Geração Elétrica em junho 2024.



Fonte: Adaptado de MME (2024)

Com o esgotamento das opções de aproveitamento de recursos hídricos nas regiões Sul e Sudeste, a fronteira hidrelétrica avançou para o Centro e o Norte do país. No entanto, devido às restrições ambientais, as novas hidrelétricas construídas nessas regiões são do tipo “fio d’água”, ou seja, não contam com reservatórios que permitam acumular água da época de chuvas para utilização nos períodos mais secos. Está previsto o esgotamento do potencial hidrelétrico economicamente aproveitável do país a partir de 2030. Após 2025, o Brasil vai passar por uma transição, de uma expansão majoritariamente hidrelétrica para o uso de térmicas como nuclear, carvão e gás natural na base do sistema, para garantir a segurança energética do país no futuro (MME, 2020).

Neste contexto, a geração nuclear tem um importante papel a cumprir em uma matriz elétrica diversificada, sustentável e eficiente. Dentre suas vantagens, destacamos a competitividade, estabilidade, disponibilidade; demonstradas nas operações de Angra 1 e Angra 2, e a garantia de abastecimento de combustível oferecida pela posse da quinta maior reserva de urânio do mundo, com grande potencial energético. Além disso, o país domina o ciclo dos elementos combustíveis (MME, 2020).

Os levantamentos geológicos desenvolvidos, principalmente, pela CNEN e Nuclebrás determinaram diversos depósitos de minerais radioativos. Porém, além desses depósitos tecnicamente bem definidos e dimensionados, sabe-se que dezenas de acumulações anômalas de minerais de Urânio e Tório estão distribuídas por todo o território brasileiro (IAEA, 2019a, 2020c).

2.2. CICLO DE COMBUSTÍVEL NUCLEAR

O ciclo do combustível nuclear pode ser definido como o conjunto de processos e operações necessários para a fabricação do combustível nuclear, sua irradiação em reatores e o armazenamento, reprocessamento ou descarte do combustível irradiado. Vários ciclos de combustível nuclear podem ser considerados, dependendo do tipo de reator e combustível usado e se o combustível irradiado é reprocessado ou não ou se o material nuclear é reciclado. Considerando o potencial diferente em relação à redução de resíduos, o investimento necessário em tecnologia avançada e a escala de tempo diferente para o desenvolvimento e implementação desta tecnologia, é apropriado distinguir entre três famílias de esquemas de ciclo de combustível (IAEA, 2019b):

- Esquemas baseados na tecnologia industrial atual e extensões possíveis.
- Esquemas com ciclos de combustível parcialmente fechados.
- Esquemas envolvendo ciclos de combustível totalmente fechados.

As opções, em termos de tratamento e reciclagem do combustível irradiado, dependem das estratégias que melhor possam atender aos principais critérios estabelecidos pelo Fórum Internacional Geração IV. Portanto, o desenvolvimento industrial das estações de tratamento-reciclagem deve ser realizado de forma consistente com a evolução da frota de reatores (transição Geração II/III para Geração IV). Em IAEA (2019b) e OECD (2006), foi feito um estudo sobre esquemas avançados de ciclo de combustível que se concentram em partição e transmutação (P&T) e esquemas de ciclo de combustível do tipo ADS (Sistemas Acionados por Acelerador). Este estudo aborda questões de gestão de resíduos, fornecendo pela primeira vez uma avaliação de desempenho de vários exemplos de Repositórios de Resíduos de Alto Nível (HLW, High Level Waste). Os resultados do estudo complementam a análise dos efeitos dos ciclos avançados de combustível no uso de urânio e nas perdas transurânicas, descrevendo seu impacto nas políticas de gestão de resíduos. O conjunto de esquemas de ciclo de combustível considerado cobre um espectro mais amplo do que estudos anteriores, incluindo práticas industriais atuais, ciclos parcialmente fechados e ciclos totalmente fechados com sistemas de reator rápido (FR, Fast Reactor). Os esquemas do ciclo do combustível são analisados com ênfase

nos resíduos primários e secundários gerados em cada etapa. As composições, atividades e cargas de calor de todos os fluxos de resíduos são rastreadas e seu impacto nos conceitos de disposição de resíduos é avaliado. Uma breve descrição dos esquemas de ciclo do combustível usados atualmente e aqueles propostos para as próximas gerações de reatores nucleares será feita a seguir.

2.2.1. Esquemas baseados na tecnologia industrial atual e extensões possíveis

A Figura 3 inclui o atual ciclo de combustível de uma etapa no Reator de Água Pressurizada (PWR, Pressurized Water Reactor) e a Tabela 1 mostra as características dos reatores tidas como referência nos diagramas. O ciclo de combustível de passagem única é o modo de operação no qual o material nuclear passa pelo reator apenas uma vez. Após a irradiação, o combustível é mantido nas piscinas até ser enviado para armazenamento fora do reator. Essa estratégia do ciclo do combustível é a adotada atualmente por muitos países (RODRÍGUEZ-PENALONGA; SORIA, 2017).

O combustível nuclear irradiado armazenado acumula-se a uma taxa de aproximadamente 7000 toneladas de metais pesados (t HM) por ano em todo o mundo, e o inventário armazenado é de cerca de 320000 t HM (IAEA, 2024). Para os países com programas nucleares que têm estratégias de ciclo aberto, os principais desafios continuam a ser a necessidade de capacidade adicional de armazenamento de combustível nuclear irradiado e a duração crescente do armazenamento pré-eliminação.

Tabela 1. Parâmetros do reator levados em consideração para diagramas de ciclo de combustível.

Parâmetros	PWR-UOX	PWR-MOX	CANDU
Urânio natural (U_{nat})	0.71% ^{235}U	-	-
Urânio enriquecido	4.90 % ^{235}U	-	-
Urânio empobrecido (U_{dep})	0.25 % ^{235}U	0.25 % ^{235}U	-
Potência	4250 MW(t)	4250 MW(t)	2159 MW(t)

	1450 MW(e)	1450 MW(e)	713 MW(e)
Queima	60 MWd/tHM	60 MWd/tHM	15 MWd/tHM
Tempo de envelhecimento	2 anos	2 anos	-
Tempo de resfriamento	5 anos	5 anos	-

Figura 3. Ciclo de combustível de uma etapa.

**“Ciclo de combustível de passagem única ou aberto”
(Ciclo de combustível de referência)**

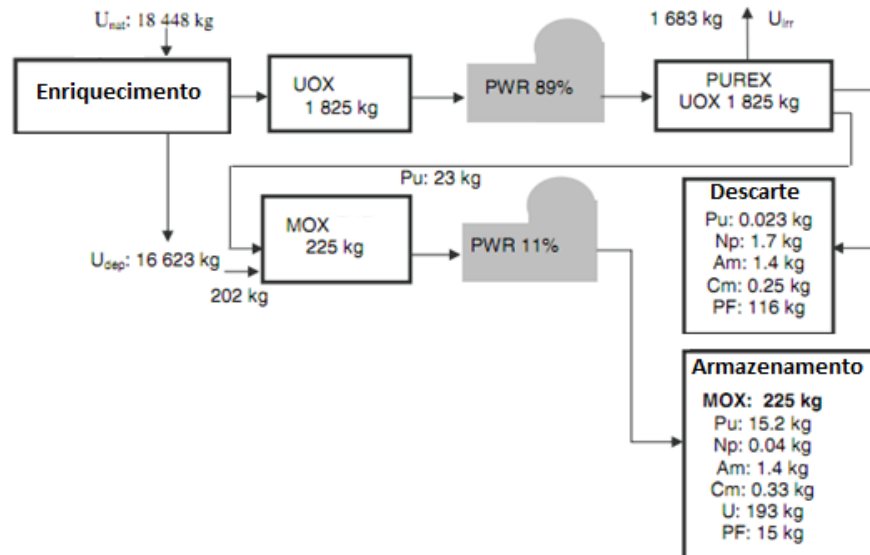


Fonte: Adaptado de OECD (2006)

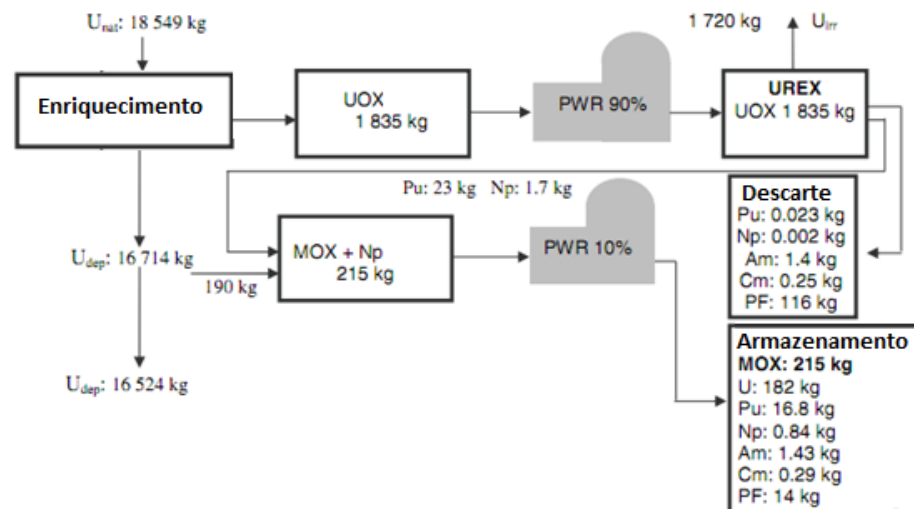
É importante integrar ciclos de combustível novos e inovadores com os ciclos de combustível existentes para enfrentar os atuais desafios do abastecimento energético e garantir o desenvolvimento sustentável, tecnológico e fisicamente seguro da energia nuclear. O reprocessamento de combustível irradiado representa a parte fundamental da indústria nuclear para atingir um ciclo de combustível fechado. O objetivo do reprocessamento é recuperar o material físsil do combustível irradiado para que possa ser utilizado na produção de novos combustíveis de óxido mistos de urânio. O combustível irradiado normalmente terá cerca de 1,0% de ^{235}U e 0,6% de plutônio físsil (quase 1% de Pu total), com cerca de 95% de ^{238}U , e o restante, cerca de 3%, são produtos de fissão (FP, Fission Products) e actínídeos menores. Os produtos de fissão e os actínídeos menores são removidos para tratamento, condicionamento, armazenamento e, por fim, descarte seguro (LOVASIC, 2008). O Esquema A, na Figura 4, é o ciclo de reprocessamento de combustível convencional com uma única reciclagem do plutônio separado como combustível de óxidos mistos de urânio-plutônio. O esquema B é uma variante mais resistente à proliferação do esquema A, onde o neptúnio acompanha o plutônio, evitando assim a separação do plutônio puro (OECD, 2006).

Figura 4. Ciclo de reprocessamento de combustível convencional com uma única reciclagem.

"Ciclo de combustível de reprocessamento convencional" (Esquema A)
O plutônio é reciclado uma vez na forma de MOX.



Evita a separação do plutônio puro reciclando o neptúncio junto com o plutônio. (Esquema B)



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

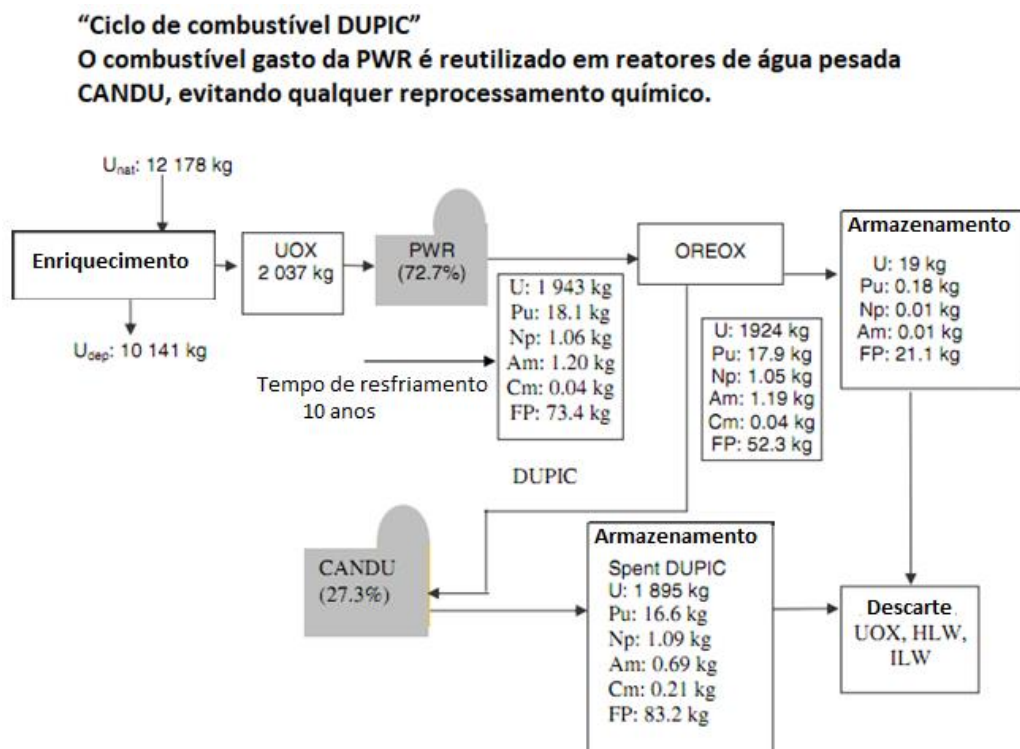
O processo de reprocessamento depende de processos químicos e físicos para separar o material necessário do combustível nuclear usado. Diferentes processos técnicos podem ser usados para conseguir essa separação. No entanto, ao longo dos anos, PUREX (Plutonium and Uranium Recovery by Extraction) se tornou o processo mais aceito. As etapas comuns no reprocessamento são (IAEA, 2009):

- Desmontagem e/ou cisalhamento de conjuntos de combustível para permitir acesso ao combustível.
- Dissolução do combustível em ácido nítrico quente.
- Remoção de sólidos não dissolvidos, se necessário, por filtração ou centrifugação.
- Extração de urânio e plutônio de soluções ácidas.
- Separação de urânio e plutônio.
- Purificação do urânio e plutônio separados.
- Concluindo os nitratos de urânio e plutônio para reutilização, reciclagem ou armazenamento.

O processo UREX (Uranium Extraction) é um processo PUREX que foi modificado para evitar que o plutônio seja extraído. No processo UREX, aproximadamente 99,9% do urânio e mais de 95% do tecnécio são separados um do outro e dos outros produtos de fissão e actínídeos. A chave é a adição de ácido acetohidroxâmico (AHA) às seções de extração e triagem do processo. A adição de AHA diminui muito a capacidade de extração de plutônio e neptúnio, proporcionando maior resistência à proliferação, em comparação com a etapa de extração de plutônio no processo PUREX (LOVASIC, 2008).

A Figura 5 mostra o esquema do ciclo de combustível DUPIC (Direct Use of Spent PWR Fuel in CANDU Reactors) com processamento OREOX (oxidação e redução do combustível óxido), que evita qualquer reprocessamento químico. O ciclo de combustível DUPIC depende de processos mecânicos e térmicos secos para fabricar diretamente o combustível CANDU (Canada Deuterium Uranium) a partir do combustível PWR gastado sem separar o material físsil e os produtos de fissão. Este conceito foi proposto e denominado ciclo de combustível DUPIC em um programa de desenvolvimento conjunto envolvendo o Instituto de Pesquisa de Energia Atômica da Coreia, AECL (Atomic Energy Canada Limited) e o Departamento de Estado dos EUA (OECD, 2006).

Figura 5. Ciclo de combustível DUPIC com processamento OREOX.



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

A compatibilidade geral e as salvaguardas do ciclo do combustível DUPIC foram confirmadas em um extenso estudo de viabilidade, e o processo OREOX foi selecionado como o método de fabricação mais promissor para o combustível DUPIC. Este processo OREOX é o coração do ciclo do combustível DUPIC e a principal característica na fabricação do combustível. Este último difere do processo de fabricação de combustível CANDU convencional, pois deve ser realizado em uma instalação blindada, pois o material combustível permanece altamente radioativo durante todo o processo. A viabilidade do conceito foi então confirmada em um programa de verificação experimental (OECD, 2006).

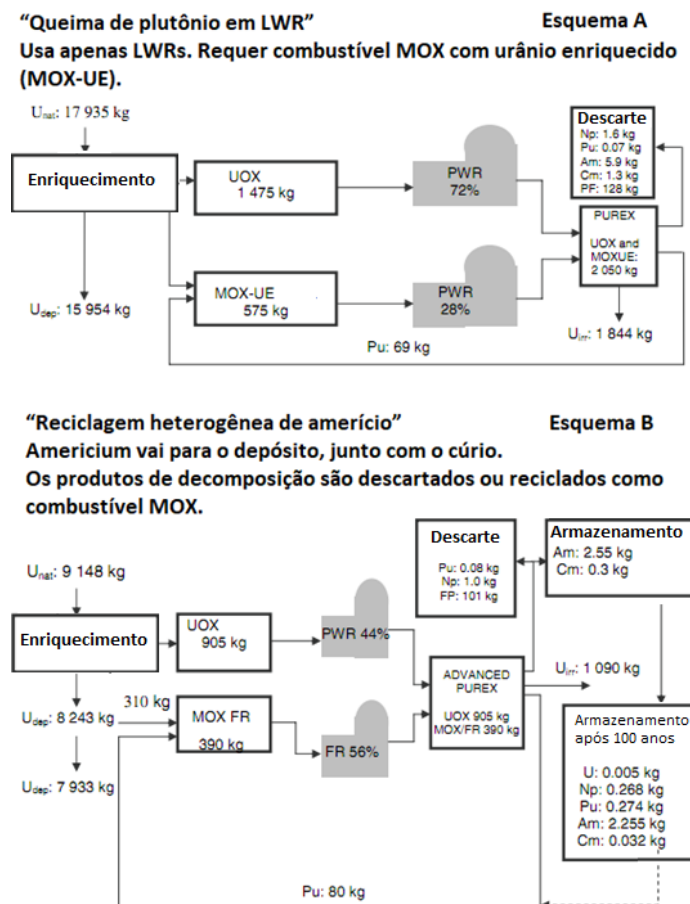
Atualmente existem diferentes tipos de ciclos avançados em pesquisa, cujo objetivo é alcançar a sustentabilidade da energia nuclear reduzindo ainda mais o volume e a radiotoxicidade dos resíduos finais, bem como melhorando a utilização dos recursos, mantendo sua viabilidade econômica. A maioria deles tem algo em comum: são baseados em tecnologias de particionamento e transmutação, que buscam encurtar a meia-vida dos isótopos de longa duração em isótopos estáveis de curta duração.

2.2.2. Esquemas com ciclos de combustível parcialmente fechados.

Os esquemas parcialmente fechados apresentam ciclos de combustível que são totalmente fechados para o plutônio, enquanto o neptúnio é sempre transferido para o lixo. Os esquemas diferem, entretanto, no que diz respeito ao tratamento do amerício e do cúrio. Todos os combustíveis são reprocessados usando métodos aquosos, seja PUREX ou PUREX avançado, se houver separação mínima de actínídeos (IAEA, 2019b).

Os esquemas A e B, na Figura 6, representam duas estratégias de queima de plutônio baseadas em PWR e reatores rápidos. A reciclagem contínua de plutônio no esquema A exige um combustível MOX especial com urânio enriquecido (MOX-EU) para compensar a degradação da composição isotópica do plutônio no espectro de nêutrons térmicos do PWR (OECD, 2006).

Figura 6. Estratégias de queima de plutônio baseadas em PWR ou reatores rápidos.



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

Uma característica do Esquemas B (Figura 6) é uma instalação menor de armazenamento de actínídeo com uma opção de reciclagem atrasada. Após cerca de 100 anos, grande parte do cúrio armazenado teria se deteriorado e, após algum reprocessamento adicional, poderia ser reciclado como plutônio. A Tabela 2 mostra as características dos reatores tidas como referência (OECD, 2006).

Tabela 2. Parâmetros do reator levados em consideração para diagramas de ciclo de combustível parcialmente fechados.

Parâmetros	PWR-UOX	PWR-MOX-UE	FR-MOX
Urânio natural (U_{nat})	0,71% ^{235}U	0,71% ^{235}U	-
Urânio enriquecido	4,90 % ^{235}U	3 % ^{235}U	-
Urânio empobrecido (U_{dep})	0,25 % ^{235}U	0,25 % ^{235}U	0,25 % ^{235}U
Potência	4250 MW(t)	4250 MW(t)	3600 MW(t)
	1450 MW(e)	1450 MW(e)	1450 MW(e)
Queima	60 MWd/tHM	60 MWd/tHM	140 MWd/tHM
Tempo de envelhecimento	2 anos	2 anos	2 anos
Tempo de resfriamento	5 anos	5 anos	5 anos

2.2.3. Esquemas envolvendo ciclos de combustível totalmente fechados.

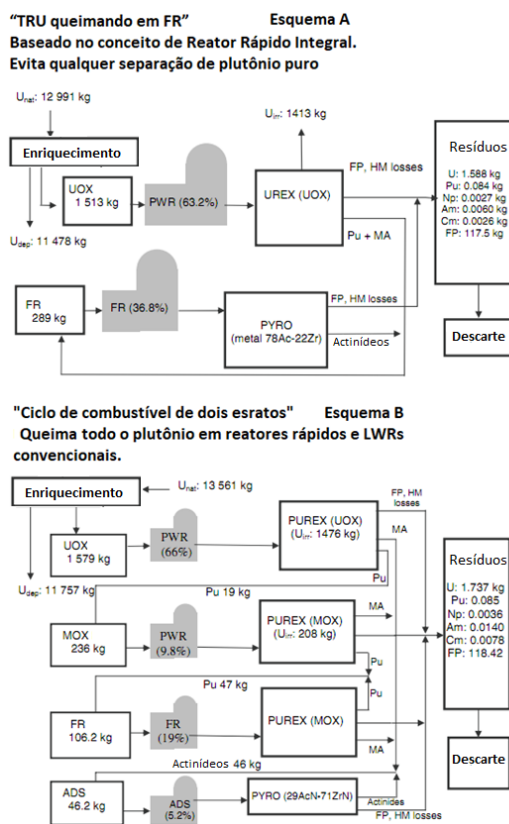
Os reatores avançados têm ciclos de combustível totalmente fechados, o que significa que todos os actínídeos são reciclados continuamente até a fissão. Como apenas perdas de reprocessamento vão para o desperdício, os ciclos de combustível totalmente fechados produzem resíduos praticamente livres de actínídeos. Os combustíveis são reprocessados usando métodos de reprocessamento aquoso (UREX e PUREX avançado) e piroquímico. A Tabela 3 mostra as características dos reatores tidas como referência nos diagramas (OECD, 2006).

Os esquemas A e B, na Figura 7, são representativos de duas abordagens alternativas para a partição e transmutação no sistema de reator rápido integral (IFR, Integral Fast Reactor), com base em queimadores transurânicos críticos, e o sistema de estrato duplo que queima actínídeos menores em um ADS. No sistema IFR, o plutônio e os actínídeos menores são co-processados; enquanto no sistema de estrato duplo, o plutônio e os actínídeos menores são tratados separadamente. Neste último, todo o plutônio é gerenciado em reatores rápidos e PWR convencionais alimentados

Tabela 3. Parâmetros do reator levados em consideração para diagramas de ciclo de combustível completamente fechados.

Potência	4250 MW(t)	1575 MW(t)	Sistema
	1450 MW(e)	600 MW(e)	refrigerado por
			chumbo bismuto
			ADS JAERI
Queima	50 MWd/tHM	140 MWd/tHM	50 MWd/tHM
Tempo de envelhecimento	2 anos	1 anos	1 anos
Tempo de resfriamento	4 anos	2 anos	2 anos

Figura 7. Abordagens alternativas para partição e transmutação no sistema de reator rápido integral (IFR) e o sistema de estrato duplo em um ADS.



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

2.3. POTENCIALIDADES DO TÓRIO COMO COMBUSTÍVEL NUCLEAR

Desde os primórdios do desenvolvimento da energia nuclear, o tório foi considerado um combustível potencial que poderia complementar ou mesmo substituir o urânio natural. Nos últimos tempos, a necessidade de resistência à proliferação, ciclos de combustível mais longos, aumento da queima do combustível, estoques reduzidos de plutônio e uso in situ de material físsil replicado levou a um interesse renovado em ciclos de combustíveis baseados em tório. Os dois principais projetos internacionais, o Programa de Reatores Nucleares Inovadores e Ciclos de Combustível (INPRO, Innovative Nuclear Reactors and Fuel Cycles) iniciado pela Agência internacional de energia atômica (IAEA, International Atomic Energy Agency) e o Fórum Internacional Geração IV (GIF, Generation IV International Forum) liderado pelos Estados Unidos, também estão considerando os ciclos de combustível de tório. Os combustíveis à base de tório têm os seguintes benefícios e desafios (GALAHOM; MOHSEN; AMRANI, 2022; OECD, 2015):

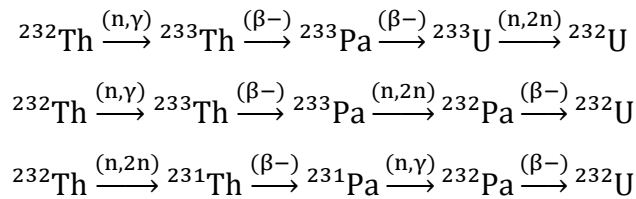
Benefícios

- O tório é 3 a 4 vezes mais abundante que o urânio, e amplamente distribuído na natureza como um recurso facilmente explorável em muitos países.
- O ciclo de combustível de tório é uma maneira atraente de produzir energia nuclear de longo prazo com baixo resíduo radioativo. Além disso, a transição para o tório poderia ser realizada pela incineração de plutônio para armas (WPu, Weapon-grade plutonium) ou plutônio civil.
- A seção transversal de absorção de nêutrons térmicos de ^{232}Th (7,4 barns) é quase três vezes maior do que ^{238}U (2,7 barns). Assim, uma maior conversão é possível (em ^{233}U) com ^{232}Th do que com ^{238}U (em ^{239}Pu). Portanto, o tório é um material fértil melhor do que o ^{238}U em reatores térmicos, mas o tório é inferior ao urânio empobrecido como um material fértil em reatores rápidos.
- Para núcleos físseis ^{233}U , o número de nêutrons liberados por nêutron absorvido (representado como η) é maior que 2,0 em uma ampla faixa de espectro de nêutrons térmicos, em oposição a ^{235}U e ^{239}Pu . Portanto, ao contrário do ciclo ^{238}U - ^{239}Pu em que a reprodução só pode ser obtida com espectros de nêutrons rápidos, o ciclo de combustível ^{232}Th - ^{233}U pode operar com espectros rápidos, epitérmicos ou térmicos.

- O dióxido de tório (ThO₂) é quimicamente mais estável e tem maior resistência à radiação do que o dióxido de urânio. A taxa de liberação de produto de fissão para combustíveis à base de ThO₂ é uma ordem de magnitude menor do que para UO₂. ThO₂ tem propriedades termofísicas favoráveis devido à maior condutividade térmica e menor coeficiente de expansão térmica em comparação com UO₂. Portanto, espera-se que os combustíveis baseados em ThO₂ tenham um desempenho melhor do que os óxidos mistos baseados em UO₂.

- O ThO₂ é relativamente inerte e não oxida ao contrário do UO₂, que é facilmente oxidado em U₃O₈ e UO₃. Portanto, o armazenamento temporário de longo prazo e o descarte permanente em um depósito do combustível ThO₂ gasto são mais simples, sem o problema de oxidação.

- Ciclos de combustíveis à base de tório têm uma resistência intrínseca à proliferação devido à formação de ²³²U por meio de reações (n, 2n) com ²³²Th, ²³³Pa e ²³³U.



Da mesma consideração, ²³²U poderia ser usado como um portador atraente para urânio altamente enriquecido (HEU, Highly Enriched Uranium) e WPU para evitar sua proliferação para fins não pacíficos.

- Para a incineração de WPU ou Pu civil no ciclo de uma etapa, o combustível (Th, Pu)O₂ é mais atraente, em comparação com (U, Pu)O₂, já que o plutônio não é produzido no primeiro e o ²³²U formado após o ciclo de uma etapa no combustível irradiado garante resistência à proliferação.

- No ciclo de combustível ²³²Th-²³³U, muito menos plutônio e actínídeos menores de vida longa (MA: Np, Am e Cm) são formados em comparação com o ciclo de combustível ²³⁸U-²³⁹Pu, minimizando assim a radiotoxicidade associada no combustível usado. No entanto, no final posterior do ciclo de combustível ²³²Th-²³³U, existem outros radionuclídeos, como ²³¹Pa, ²²⁹Th e ²³⁰U, que podem ter um impacto radiológico de longo prazo.

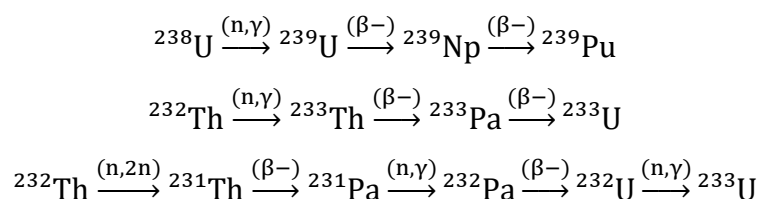
Desafios:

- O ponto de fusão do ThO₂ (3350 °C) é muito maior do que o do UO₂ (2800 °C). Portanto, uma temperatura de sinterização muito mais alta (>2000 °C) é necessária para produzir combustíveis de óxido misto à base de ThO₂ de alta densidade. Uma mistura auxiliar de sinterização (CaO, MgO, Nb₂O₅, etc.) é necessária para atingir a densidade da pastilha de combustível desejada em uma temperatura mais baixa.

- Combustíveis de óxido misto à base de ThO₂ são relativamente inertes e, ao contrário dos combustíveis UO₂ e (U, Pu) O₂, não se dissolvem facilmente em ácido nítrico concentrado. A adição de pequenas quantidades de HF em HNO₃ concentrado é essencial, levando à corrosão de equipamentos e tubos de aço inoxidável em plantas de reprocessamento. O problema de corrosão é mitigado com a adição de nitrato de alumínio. Uma solução THOREX fervendo [13 M HNO₃ + 0,05 M HF + 0,1 M Al(NO₃)₃] a 393 K e um longo período de dissolução é necessário para combustíveis à base de ThO₂.

- Os combustíveis irradiados à base de tório contêm uma quantidade significativa de ²³²U, que tem meia-vida de apenas 73,6 anos e está associada a fortes subprodutos emissores de gama, ²¹²Bi e ²⁰⁸Tl com meia-vida muito curta. Como resultado, há um acúmulo significativo de dose de radiação com armazenamento de combustível separado ²³³U ou Th gasto, exigindo reprocessamento e remanufatura remotos e automatizados em células quentes fortemente blindadas e aumento do custo das atividades do ciclo do combustível.

- Na cadeia de conversão de ²³²Th para ²³³U, ²³³Pa é formado como um intermediário, que tem uma meia-vida relativamente mais longa (27 dias) em comparação com ²³⁹Np (2,35 dias) no ciclo de combustível de urânio, para que requer um tempo de resfriamento maior de pelo menos um ano para completar a decadência de ²³³Pa para ²³³U.



Normalmente, o Pa passa para os resíduos do produto da fissão no processo THOREX, o que pode ter um impacto radiológico de longo prazo. É

essencial separar o Pa da solução de combustível irradiado antes do processo de extração com solvente para a separação de ^{233}U e tório.

- O processo de três correntes de separação de urânio, plutônio e tório do combustível irradiado (Th, Pu) O_2 , embora viável, ainda precisa ser desenvolvido.
- O banco de dados e a experiência de combustíveis de tório são muito limitados, em comparação com os combustíveis UO_2 e (U, Pu) O_2 , e devem ser aumentados antes que grandes investimentos sejam feitos para utilização combustíveis comerciais de tório e ciclos de combustível.

2.3.1. Experiência no uso de tório como combustível

Durante os anos pioneiros da energia atômica, 1950 a 1970, o ciclo do combustível de tório foi o assunto de vários estudos. Alguns dos primeiros reatores de água leve (LWR, Light Water Reactor) comerciais desenvolvidos no final da década de 1950 e início da década de 1960 nos Estados Unidos foram inicialmente usados com combustíveis à base de tório; em particular, o reator de água fervente (BWR, Boiling Water Reactor) Elk River e o Reator de Alta Temperatura (HTR, High Temperature Reactor) Peach Bottom, que começaram a operar em 1964 e 1967, respectivamente (ADE *et al.*, 2014).

O PWR Edison Indian Point-1 foi iniciado em 1962 com um núcleo inicial de seed de tório misturado com ^{235}U . Do núcleo inicial, 1,1 toneladas métricas de urânio foram recuperadas na forma líquida, contendo 7% em peso de ^{233}U e 58% em peso de ^{235}U , indicando uma quantidade bastante significativa de replicação de tório para urânio no reator. Uma parte do combustível Indian Point-1 foi enviada para Babcock e Wilcox para exame pós-irradiação. Foram examinadas amostras de combustível cuja queima variou de 3,0 a 30,0 GWd/MTHM. A liberação do gás de fissão foi inferior a 2,0%, o que é semelhante ao observado para o combustível UO_2 padrão na época. Além disso, a distorção e o inchaço do combustível foram mínimos, independentemente do queimado. As conclusões do exame pós-irradiação para o combustível foram que o combustível $\text{ThO}_2\text{-UO}_2$ era mais resistente ao craqueamento térmico e inchaço induzido por irradiação do que os combustíveis UO_2 operados em condições semelhantes (ADE *et al.*, 2014).

A descrição de estudos e experiências com o uso de tório de diferentes países pode ser encontrada em ADE *et al.* (2014). Assim, foi demonstrada a viabilidade do uso de tório em reatores refrigerados a gás de alta temperatura (HTGR, High Temperature Gas Reactors), LWR, reatores de água pesada pressurizada (PHWR, Pressurized Heavy-Water Reactor), reatores reprodutores rápidos refrigerados a metal líquido (LMFBR, Liquid Metal Fast Breeder Reactors) e reatores reprodutores de sal fundido (MSBR, Molten Salt Breeder Reactor). Essas atividades foram bem documentadas em várias revisões extensas e anais de conferências publicadas pela Comissão de Energia Atômica dos Estados Unidos, o Departamento de Energia dos Estados Unidos, e a IAEA. Mais recentemente, os procedimentos das reuniões da IAEA sobre Utilização de Combustível de Tório: Opções e Tendências resumiram as atividades e projetos de pesquisa coordenados da IAEA e o status da opção do ciclo de combustível de tório, incluindo ADS, nos Estados-Membros (OECD, 2015).

2.3.2. Ciclo de combustível de tório

A curto prazo, deve ser possível incorporar o ciclo de combustível de tório em alguns dos reatores existentes sem grandes modificações nos sistemas de engenharia, controle do reator e dispositivos de reatividade. A introdução de tório em menores quantidades, ou seja, como um aditivo, nos combustíveis de urânio ou plutônio pode ser considerada, embora tenha um impacto muito limitado nas perspectivas gerais para o urânio ou para fins de gestão de resíduos. No entanto, para reatores e ciclos de combustível inovadores, muitos estudos da física do reator e outros avanços tecnológicos seriam necessários antes que pudessem ser implementados. As opções de longo prazo teriam que receber material fissil, seja plutônio de qualidade fissil adequada do ciclo de combustível U-Pu existente, ou ^{233}U gerado durante um período de transição, para ser realizável. Portanto, a utilização em larga escala de tório para energia nuclear só é possível com a introdução de uma etapa adicional de primeiro converter o ^{232}Th fértil em ^{233}U fissil. O uso subsequente de ^{233}U é concebível das seguintes maneiras (NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2015):

- Ciclo de combustível aberto baseado na irradiação do ^{232}Th e fissão do ^{233}U in situ, sem envolver a separação química do ^{233}U .

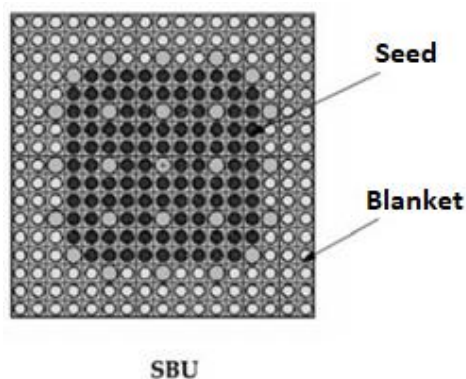
- Ciclo de combustível fechado baseado no reprocessamento químico de tório irradiado ou combustíveis à base de tório para a recuperação de ^{233}U e a remanufatura e reciclagem de combustíveis contendo ^{233}U .

Opções de ciclo de combustível de um passo de tório em LWR com urânio enriquecido

O tório foi proposto para uso em ciclos de combustível de um passo como um meio de estender os recursos de urânio e reduzir a produção de espécies transurânicas. Em ciclos de combustível de uma etapa, o combustível descarregado é descartado diretamente sem qualquer reciclagem ou reprocessamento e, portanto, contém o resíduo do material físsil original, bem como o material físsil ^{233}U gerado. As principais diferenças na implementação entre as várias opções de passagem única incluem o tipo de reator, a configuração geométrica do combustível e a fonte de materiais físseis (OECD, 2015).

O uso de tório em um ciclo de combustível de um passo em um reator requer urânio enriquecido ou plutônio separado no combustível para garantir a criticidade e a duração desejada do ciclo de irradiação para a produção de energia. A maior parte da experiência com essa tecnologia envolve o uso de tório em LWR. Um exemplo de uso de tório no ciclo de uma etapa é o conceito de Radkowsky (KASTEN, 1998) de um reator de água leve (LWR). O conceito de Radkowsky consiste em um arranjo de seed-blanket, com uso de tório como blanket e urânio levemente enriquecido como seed. Uma característica principal do projeto é o uso de um conjunto de combustível heterogêneo, unidade de seed-blanket (SBU), com a parte blanket de tório do conjunto de combustível separada da peça seed de urânio (Figura 8). A separação permite o gerenciamento independente do combustível blanket de tório e da parte do núcleo que consiste no seed. A intenção é ter uma alta taxa de fissão "in situ" do ^{233}U gerado no blanket, com o seed fornecendo nêutrons à blanket. Uma descrição detalhada deste reator pode ser encontrada em KASTEN (1998).

Figura 8. Conceito de Radkowsky, unidade de seed-blanket (SBU).



Fonte: Adaptado de KASTEN (1998)

A abordagem de seed-blanket foi estudada em ADE *et al.* (2014) como uma alternativa baseada em tório para o ciclo de combustível UOX de um passo em PWR. Este sistema utiliza conjuntos de combustível que são do mesmo tamanho que os conjuntos PWR convencionais e podem ser adaptados em PWR comerciais existentes sem a necessidade de modificações significativas nos reatores ou equipamentos no local (por exemplo, ferramentas de manuseio de combustível). O carregamento inicial no blanket contém tório e uma pequena quantidade de urânio pouco enriquecido (LEU, Low Enriched Uranium) para produzir energia.

Opções de ciclo de combustível de reciclagem de tório/²³³U

Como um material fértil, o tório geralmente requer reciclagem para aumentar a utilização de seus recursos. Os sistemas de reatores que suportam os ciclos de combustível de tório podem operar como conversores ou reprodutores. Os conversores requerem material físsil adicional para operar, mas os reprodutores acabariam sendo autossuficientes com tório-²³³U. Cálculos feitos por especialistas russos demonstram a possibilidade de alcançar a autossuficiência no ciclo de combustível ²³²Th-²³³U com uma relação de reprodução $\geq 1,0$ em LMFBR refrigerado a sódio tipo BN-800. Resultados semelhantes também foram relatados na França. Também em outros tipos de reatores, HTGR ou reatores de água pesada, os cálculos mostram a possibilidade de a taxa de reprodução se aproximar de 1,0, mas não ultrapassá-la (IAEA, 2005).

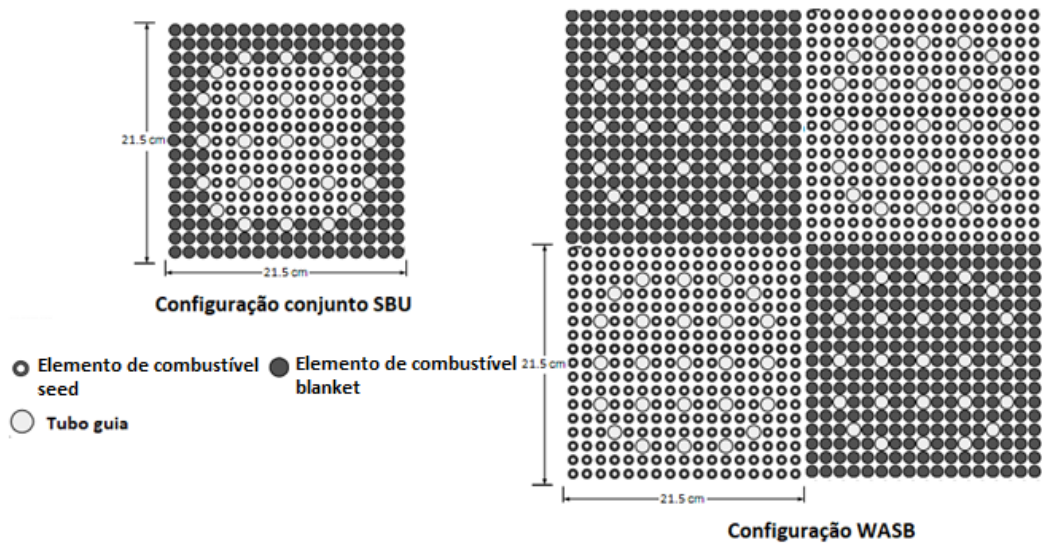
Várias opções de projeto de combustível à base de tório investigadas nos últimos anos demonstraram a viabilidade básica dos ciclos de combustível à base de tório para LWR atuais e de próxima geração. Na reciclagem de combustível de

descarga de tório em LWR, há duas opções: combustíveis U-Th ou Pu-Th. As características neutrônica de combustíveis de tório sugerem que não pode ser gerado ^{233}U suficiente em um PWR convencional para torná-lo autossustentável em um ciclo de ^{233}U -Th puro e, portanto, urânio ou plutônio enriquecido no combustível seriam necessários. Se o objetivo é evitar completamente a necessidade de urânio natural e enriquecimento de urânio, é necessário produzir quantidades suficientes de ^{233}U em reatores reprodutores (IAEA, 2005).

Dois cenários principais de implementação têm sido o foco de estudos recentes para PWR: disposição homogênea ou heterogênea do combustível. Projetos homogêneos usam uma mistura de ThO_2 - UO_2 , dentro de cada barra de combustível, com uma fração de volume de urânio e enriquecimento suficiente para obter o ciclo necessário e a duração da queima. Projetos heterogêneos consideram uma abordagem de seed-blanket, onde as barras de combustível de urânio e tório são espacialmente separadas dentro de um determinado conjunto ou entre conjuntos. Estudos homogêneos também consideraram esquemas "microheterogêneos" em que o urânio e o tório são separados espacialmente em uma barra de combustível dada. A separação espacial de pelo menos alguns milímetros das partes de urânio e tório do combustível pode melhorar a queima do combustível (AMATULLAH *et al.*, 2024; IAEA, 2005; TSIGE-TAMIRAT, 2011).

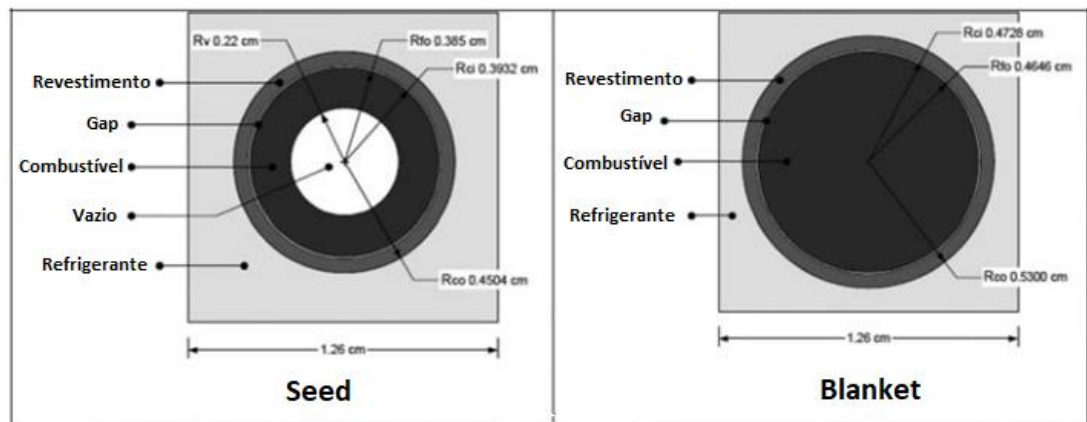
Duas opções heterogêneas foram exploradas no âmbito da Iniciativa de Pesquisa de Energia Nuclear, financiada pelo Departamento de Energia dos Estados Unidos. As duas abordagens são: 1) SBU, também conhecida como o conceito Radkowsky que emprega uma unidade de seed-blanket que é uma substituição um-por-um para um conjunto de combustível PWR convencional; e 2) todo o conjunto de seed-blanket (WASB, Whole Assembly As Seed and Blanket), onde o seed e o blanket de cada unidade ocupam um conjunto PWR em tamanho real e os conjuntos são dispostos no núcleo em uma matriz retangular modificada. As abordagens SBU e WASB (Figura 9) são novos projetos de conjuntos de combustível, não novos reatores, e se destinam a ser adaptados ao PWR existente com mudanças mínimas nos sistemas e hardware existentes. A Figura 10 mostra as características e dimensões das barras de seed e blanket (IAEA, 2005).

Figura 9. Projeto de conjunto de combustível de unidade de seed-blanket (SBU) e seed e blanket inteiras (WASB).



Fonte: Adaptado de FOAD; MANSOUR; AZIZ (2010)

Figura 10. Características e dimensões das barras de seed e blanket.



Fonte: Adaptado de FOAD; MANSOUR; AZIZ (2010)

Em ERNOULT *et al.* (2015) é realizado um estudo cujo objetivo é comparar as diferentes possibilidades de reciclagem de plutônio em reatores PWR e as possibilidades oferecidas pelo ciclo de tório. Neste estudo, é apresentado um esquema de reprocessamento múltiplo. As estratégias de reprocessamento múltiplo requerem que os combustíveis à base de tório sejam separados dos combustíveis enriquecidos com urânio e, portanto, requerem pelo menos dois tipos de conjuntos. A primeira estratégia considera os combustíveis UOX padrão, junto com os combustíveis de tório, onde o plutônio do combustível irradiado UOX é reprocessado,

e onde o plutônio e o urânio (essencialmente ^{233}U) desses combustíveis irradiados são multiprocessados. Também é possível separar o multiprocessamento do plutônio e o multiprocessamento do ^{233}U . Isso leva a um cenário com três tipos de conjuntos: conjuntos UOX, nos quais o plutônio é produzido, conjuntos MOX feitos de tório e plutônio, nos quais o plutônio é queimado e ^{233}U é produzido; e conjuntos MOX feitos de tório e urânio, nos quais ^{233}U é multirecyclado. Embora ambas as estratégias usem conjuntos PWR padrão, elas diferem por causa do efeito do espectro de nêutrons (ERNOULT *et al.*, 2015).

2.4. REATORES MODULARES PEQUENOS

A pesquisa e o desenvolvimento da energia nuclear como fonte de geração de eletricidade levaram ao surgimento dos primeiros protótipos de reatores nucleares, denominados reatores de Primeira Geração. Desde então, a tecnologia nuclear evoluiu para projetos mais simples e robustos, que atendem de forma satisfatória aos requisitos relacionados à segurança, gerenciamento de resíduos, não proliferação e percepção pública. Diversas referências abordaram a evolução desses projetos em todo o mundo, analisando os fatores modificados nas diferentes gerações (GLASSTONE; SESONSKE, 2010; KESSIDES, 2012; MARQUES, 2010; NIAN, 2017). Além disso, outras referências desenvolveram a evolução técnica de aspectos do projeto PWR tão relevantes quanto barras de controle ou combustível (CUMMINS; MATZIE, 2018). Pelo exposto nestas referências, podemos afirmar que o projeto PWR é o projeto que atualmente apresenta o maior percentual de implantação no mundo, sendo os projetos de reatores nucleares Geração II os mais desenvolvidos com características distintas entre eles.

Para pesquisa de dados sobre reatores nucleares, o Sistema de Informação de Reator de Potência (Power Reactor Information System, PRIS) (IAEA, 2017), desenvolvido pela IAEA, está em operação há mais de cinco décadas e possui um banco de dados exaustivo sobre as usinas nucleares existentes em todo o mundo. O PRIS contém informações sobre reatores de potência em operação, em construção ou em processo de descomissionamento.

Os Reatores Modulares Pequenos, conhecidos como SMR (Small Modular Reator), têm sido aclamados como transformadores em muitas frentes, apoiando os

pilares econômico, ambiental e social do desenvolvimento sustentável. De acordo com a IAEA, os SMR são aqueles reatores nucleares com potência elétrica inferior a 300 MW (e) e Reatores Nucleares de médio porte com potência de até 700 MW (e). Os reatores pequenos tendem a ser mais simples e mais robustos do que os maiores e, como tal, oferecem vantagens em termos de fabricação e construção. Além disso, são mais fáceis de incorporar como carga base dentro de uma rede de energia elétrica ou podem ter sua própria micro-rede, aumentando a confiabilidade geral do sistema. Os reatores pequenos são mais adequados para a padronização, porque além de reduzir o custo de capital, também permite que eles se beneficiem da experiência compartilhada de operação e manutenção. Isso deve reduzir o esforço e o tempo de licenciamento de unidades subsequentes, uma vez que a maioria dos problemas de licenciamento teria sido resolvida na primeira unidade desse tipo (CARELLI; INGERSOLL, 2014).

Os reatores de energia nuclear que geram menos de 20 MW térmico (MWt) são chamados de micro-reatores ou SMRs muito pequenos (vSMR). Este baixo nível de potência permite que esses reatores sejam classificados como Categoria de Perigo 2 de acordo com os regulamentos dos EUA: 10 CFR 830 e DOE STD 1027. Ou seja, seu perigo potencial está limitado às consequências no local, ao contrário da Categoria 1, que tem o potencial de consequências fora do local. Embora os microrreatores sejam considerados por alguns como uma tecnologia inovadora na área de energia nuclear, eles têm sido usados há décadas em aplicações espaciais (OWUSU; HOLBROOK; SABHARWALL, 2018).

2.4.1 Vantagens da modularidade

Modularidade pode ser definida como o grau em que os componentes de um sistema podem ser separados para oferecer flexibilidade e variedade. Há uma tendência de estender este conceito ao longo do ciclo de vida dos módulos, levando em consideração a fabricação, montagem, função, serviço, comissionamento eletrônico e descarte. Isso requer independência entre componentes e processos ao longo do ciclo de vida. Portanto, a modularidade simplifica o projeto e o gerenciamento subsequente de sistemas complexos, dividindo-os em componentes discretos (LANGLOIS, 2002).

Modularidade em escala refere-se à aquisição e instalação de módulos SMR conforme a necessidade, evitando a necessidade de se comprometer inicialmente com uma grande potência de saída, como é o caso de grandes reatores convencionais. Um módulo pode ser definido como um reator e um sistema de fornecimento de vapor. Cada módulo é independente e pode ser desligado sem afetar outros módulos (CARELLI; INGERSOLL, 2014). A modularização em um SMR assume várias formas, identificadas por (HUSSEIN, 2020):

- Integrado: inclui dois módulos principais, o reator e o sistema de resfriamento primário, ambos no mesmo vaso de pressão; além do vaso do reator, que pode ser visto como um terceiro componente. Este projeto elimina qualquer conexão de tubo entre o reator e os trocadores de calor, reduzindo a possibilidade de acidente com perda de líquido refrigerante.
- Compacto: um dos primeiros conceitos de SMR, motivado pela necessidade de compactação em reatores submarinos. O sistema de circulação de refrigerante primário é feito o mais compacto possível para reduzir o tamanho da contenção do reator.
- Combinados: agregação de pequenos módulos de reatores para formar uma grande planta.

A construção modular envolve a instalação de componentes no local fabricados externamente. Isso tem a vantagem de encurtar o tempo de construção e reduzir custos, além de proporcionar flexibilidade, aumentando a segurança, reduzindo desperdícios, reduzindo interrupções durante a construção, realizando as tarefas de forma independente e em paralelo e facilitar a realocação quando for necessário. A modularização não é um conceito novo para a indústria de energia nuclear. Um resumo dos diferentes projetos modulares usados anteriormente na indústria de energia nuclear é fornecido em WRIGLEY *et al.* (2019), incluindo a modularização de anéis de contenção na década de 1950. Em 1982, Singh e Barnert demonstraram que a modularidade de um reator pequeno de alta temperatura pode melhorar sua economia como fonte de calor (SINGH; BARNERT, 1982). Posteriormente, em 1997, CHRISTOPHER W. LAPP; MICHAEL W. GOLAY (1997) apresentaram uma metodologia para a modularização sistemática e eficiente de projeto e construção em usinas nucleares. Mais recentemente, SUTHARSHAN *et al.* (2011) mostrou como a modularidade do projeto Westinghouse AP1000 produzindo 1110 GWe, permite fácil

montagem de componentes, cronograma de construção mais curto, menos congestionamento de construção e menos trabalho no campo, enquanto melhora os testes de qualidade componentes e montagens na fábrica.

2.4.2. Projetos de SMR

Vários países realizam pesquisas importantes voltadas para o desenvolvimento e fabricação de uma série de diferentes protótipos de SMR, marcando um novo enfoque nos potenciais benefícios que este tipo de tecnologia permitirá. Vários institutos de pesquisa consideram os SMR uma tecnologia confiável para a produção de eletricidade. Um dos primeiros relatórios sobre este tipo de reator foi elaborado pela Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico (OCDE, Organisation for Economic Co-operation and Development) em 1991, com foco na avaliação de sua aptidão para a produção de eletricidade, geração de calor e cogeração. Entretanto, a maioria dos SMR descritos pela OCDE são versões dos grandes reatores, que não seguem o conceito de reator modular pequeno (HIDAYATULLAH; SUSYADI; SUBKI, 2015).

Em 2006, a IAEA divulgou um relatório de mais de 700 páginas sobre SMR titulado “Status de projetos inovadores de reatores de pequeno e médio porte”. Este relatório considera os conceitos principais e fornece uma ampla revisão das variantes de projeto: 13 projetos resfriados a água, 6 projetos resfriados a gás, 6 projetos resfriados por metal líquido, bem como um reator não convencional avançado de alta temperatura. A principal conclusão deste relatório é que os reatores GEN III + SMR podem ser baseados nas experiências bem-sucedidas obtidas na exploração de LWR de segunda e terceira geração (HIDAYATULLAH; SUSYADI; SUBKI, 2015).

A IAEA em 2007 conduziu estudos sobre as características econômicas e de segurança dos SMR, bem como outros fatores importantes, como a resistência à proliferação. Posteriormente, em 2009, um relatório é publicado explicando as melhorias de segurança que os SMR apresentam com relação a grandes usinas nucleares. No final de 2010, um resumo é feito sobre o status e as perspectivas futuras dos SMR (LOCATELLI; BINGHAM; MANCINI, 2014).

Rosner e Goldberg em 2011 (ROSNER; GOLDBERG, 2011), e a OCDE examinam diferentes projetos e consolidam tecnologias, economia e segurança.

Esses relatórios representam a base para o trabalho que se seguiu. No entanto, muitos artigos atuais foram publicados examinando as questões que envolvem os SMR e seu mérito relativo.

Em 2011, 2012, 2014, 2016 e 2018, relatórios foram publicados pela AIEA sobre o estado de desenvolvimento da tecnologia SMR, fornecendo uma visão geral concisa do status mais recente dos designs SMR. Mais recentemente, em IAEA (2020b), a AIEA informa sobre os avanços de design e desenvolvimentos tecnológicos de SMR de todas as principais linhas de tecnologia dentro da categoria SMR, fornecendo informações sobre os ciclos de combustível associados e gerenciamento de resíduos radioativos dos projetos. Em IAEA (2020b) pretende-se ser um suplemento ao Sistema de Informação de Reator Avançado da IAEA (ARIS).

Vinte e cinco projetos SMR resfriados a água com várias configurações de tecnologias de LWR e reator de água pesada para aplicações terrestres na rede são descritos em IAEA (2020b), compreendendo PWR integrais, PWR compactos, BWR, projetos do tipo CANDU e reatores de piscina de aquecimento urbano. Esses projetos representam tecnologia madura, considerando que a maioria das grandes usinas em operação hoje são reatores refrigerados a água. São apresentados seis SMR resfriados a água que podem ser implantados em um ambiente marinho, como uma unidade de energia flutuante montada em barcaça ou uma unidade de energia submersível, algumas das quais foram implantadas como navios quebra-gelo nucleares. O primeiro SMR conectado à rede está nesta categoria, com a implantação do KLT-40S para a usina nuclear flutuante Akademik Lomonosov em Pevek, Federação Russa, que iniciou suas operações comerciais em maio de 2020.

Onze SMR do tipo HTGR são descritos em IAEA (2020b), e três reatores de teste HTGR. Onze designs SMR de espectro de nêutrons rápidos são apresentados com todas as diferentes opções de refrigerante, incluindo sódio, metal líquido pesado (por exemplo, chumbo ou bismuto de chumbo) e gás hélio. Um progresso tangível foi feito no desenvolvimento e implementação de tecnologia em SMR nesta categoria. O BREST-OD-300, um reator de nêutrons rápido refrigerado a chumbo, está em construção em Seversk, na Federação Russa, com operação programada para o final de 2026. São apresentados dez projetos de reator de tecnologia avançada resfriado a sal fundido, que também é um dos seis projetos de reator de Geração IV. Vários

projetos SMR estão passando por atividades de licenciamento preliminar no Canadá, Estados Unidos e Reino Unido (IAEA, 2020b).

Embora cada um desses relatórios enfoque aspectos diferentes, as principais conclusões comuns a quase todos eles são as seguintes:

- Os SMR reforçaram os principais atributos de segurança porque têm sistemas de segurança passivos que diminuem os efeitos de qualquer erro humano e agem de forma confiável em circunstâncias extremas.
- Os SMR podem ser divididos em dois grupos: SMR Gen III+ e reatores de quarta geração. SMR GEN III+ são baseados nos mesmos princípios físicos dos grandes reatores atuais e podem ser desenvolvidos rapidamente em 2 a 3 anos.
- Atualmente, os SMR GEN III + são adequados para a produção de eletricidade, enquanto os SMR de quarta geração irão adicionar a capacidade de queimar resíduos nucleares de reatores de terceira geração.

2.4.3. SMR do tipo iPWR

O perigo de uma grande ruptura do tubo principal de circulação de refrigerante e a perda associada de refrigerante podem ser completamente evitados encerrando os componentes principais do sistema de refrigerante primário em PWR (geradores de vapor, pressurizador e bombas) dentro do vaso de pressão do reator, conhecido como projeto integral. Nos últimos anos, a tendência no desenvolvimento da tecnologia SMR é para SMR do tipo iPWR. Este conceito foi promissor em 1960, ao imaginar um reator composto de vasos de pressão internos e externos, com o refrigerante primário no vaso interno. Em 1992, se reintroduziu o conceito de reator integral no chamado Reator Integral Seguro (SIR) (HUSSEIN, 2020). Tratava-se de um reator de água pressurizada com sistema de resfriamento primário integrado, conectado a um sistema de despressurização de tanque de supressão que pode fornecer água de injeção passiva (acionada por gravidade) ao vaso do reator.

Existem atualmente cerca de onze projetos e conceitos SMR do tipo iPWR em todo o mundo, a maioria deles em estágios de desenvolvimento e alguns planejados para implementação em curto prazo. A Tabela 4 apresenta os projetos atuais de iPWR em diferentes estágios de desenvolvimento. Apesar das vantagens que os reatores

integrals oferecem, sua compactação resulta em uma relação superfície-volume mais alta, portanto, maior fuga de nêutrons e energia térmica. Isso resulta em menor consumo de combustível e maior volume de resíduos. Os reatores integrals também são provavelmente mais difíceis de inspecionar e manter devido à sua compactação (ZELIANG *et al.*, 2020).

Tabela 4. Projetos e status do SMR do tipo iPWR.

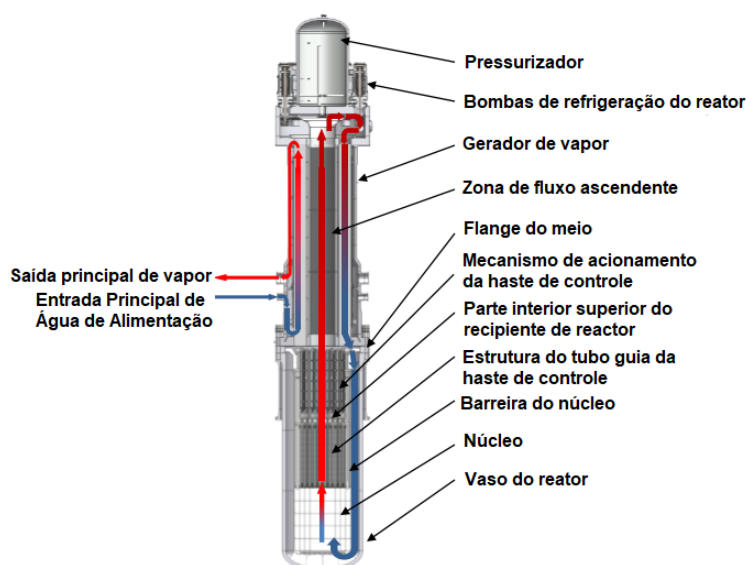
Desenvolvedor de Tecnologia	Projeto do Reator	Status do projeto
China National Nuclear Corporation (CNNC)	ACP100	Em desenvolvimento
Instituto de Pesquisa e Design de Engenharia Nuclear de Xangai (SNERDI)	CAP150	Projeto conceitual concluído
Comissão Nacional de Energia Atômica da Argentina (CNEA)	CAREM25	Em construção
Mitsubishi Heavy Industries, Ltd	Reator modular de água integrado (IMR)	Projeto conceitual concluído
International Consortium	International Reactor Innovative e seguro (IRIS)	Design básico
BWXT mPower, Inc.	mPower	Em desenvolvimento
NuScale Power, LLC	NuScale	Estágio de licenciamento
Instituto de Pesquisa de Energia Atômica da Coreia (KAERI)	Reator avançado modular integrado ao sistema (SMART)	Licenciado
OKBM Afrikanto	VBER	Estágio de licenciamento
Westinghouse Electric Company LLC	Westinghouse SMR	Projeto conceitual concluído

2.4.4. mPower (B&W GENERATION mPower, ESTADOS UNIDOS)

O SMR mPower é um reator integrado de água pressurizada de Geração III+ projetado pela Generation mPower e suas afiliadas Babcock & Wilcox mPower, Inc. e

Betchel. O núcleo do reator consiste em 69 conjuntos de combustível que têm menos de 5% de enriquecimento, barras com adição de Gd_2O_3 , barras de controle Ag In–Cd (AIC) e B_4C e uma margem de desligamento de 3%. Não há boro solúvel presente no refrigerante do reator para controle de reatividade. Os conjuntos de combustível têm um projeto convencional de 17×17 com uma gaiola estrutural de grade fixa. No projeto, cada usina é composta por dois módulos mPower, gerando uma potência nominal de 360 MW(e). O projeto incorpora no vaso do reator geradores de vapor de passo único, pressurizador e mecanismo de acionamento das barras de controle do vaso, bombas herméticas montadas horizontalmente para resfriar o circuito primário e sistemas de segurança passiva. A Figura 11 mostra a configuração do reator mPower (IAEA, 2018b).

Figura 11. Configuração do reator MPower.

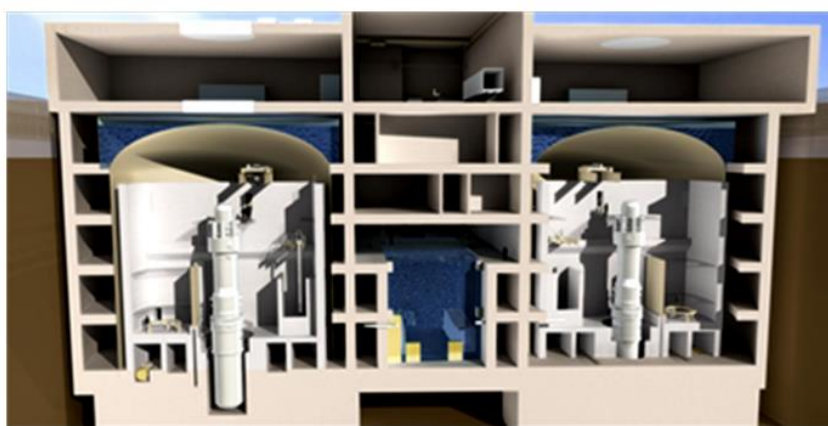


Fonte: Adaptado de HALFINGER; HAGGERTY (2012)

O reator mPower tem oito bombas internas que transferem um fluxo de 3.345 m³/s de refrigerante através do núcleo. O pressurizador embutido no topo do reator é aquecido eletricamente e a pressão nominal do refrigerante é de 14,2 MPa. O mecanismo de acionamento das barras de controle está completamente submerso no refrigerante primário dentro do vaso de pressão, excluindo a possibilidade de acidentes devido à ejeção das barras de controle. Uma perda de refrigerante por acidente devido à grande ruptura não é possível porque os componentes do primário estão dentro do vaso de pressão e o diâmetro máximo dos tubos conectados é inferior a 7,6 cm. A Figura 12 mostra o projeto de contenção para a planta mPower. O módulo

do reator está localizado dentro de sua própria contenção de aço subterrânea e ilha nuclear, isolando efetivamente o reator, juntamente com os sistemas de segurança, de ameaças externas feitas pelo homem e desastres naturais do tipo Fukushima. A ilha nuclear subterrânea hermética contém todas as fontes de água para o resfriamento de emergência necessário para proteger o núcleo do reator por um longo período de tempo, incluindo o tanque de reposição de água (CARELLI; INGERSOLL, 2014).

Figura 12. Projeto de contenção mPower.



Fonte: Adaptado de IAEA (2014)

Os recursos de segurança inerentes ao projeto do reator incluem uma baixa taxa de calor linear do núcleo que reduz as temperaturas do combustível e do revestimento durante acidentes, um grande volume de RCS (Reactor Coolant System) que permite mais tempo para as respostas do sistema de segurança em caso de acidente e pequenas penetrações em altitudes elevadas, aumentando a quantidade de refrigerante disponível para mitigar um pequeno LOCA. As margens operacionais e de segurança são significativamente mais fortes do que as exigidas pelo Comissão Nuclear Reguladora Americana (NRC, Nuclear Regulatory Commission), duas a três ordens de magnitude mais seguras ou aproximadamente 10^{-8} , em comparação com o NRC atual; cujos valores de referência da frequência de dano ao núcleo (CDF, Core Damage Frequency) estão entre 10^{-5} e 10^{-6} . O projeto do B&W mPower inclui um reservatório de combustível irradiado totalmente protegido localizado dentro da ilha nuclear subterrânea. Conforme observado em Fukushima, a proteção do combustível irradiado é mais crítica nos primeiros anos após sua remoção do núcleo do reator. Portanto, a piscina de combustível irradiado é projetada com um grande dissipador de

calor para garantir o resfriamento por mais de 30 dias sem a necessidade de intervenção externa e antes de encontrar perda de água fervente suficiente para descobrir o combustível irradiado. A piscina de combustível usado armazena combustível suficiente para uma vida útil de 20 anos. Em vez de girar o combustível por até três ciclos de reabastecimento, como nos PWR convencionais, o combustível do reator mPower dura quatro anos e então todo o núcleo é substituído em uma recarga (U.S.NRC, 2020)

Vários estudos neutrônicos e termohidráulicos foram realizados para garantir que o reator mPower atenda aos critérios segurança aprovados pelo NRC e aceitos pela indústria. Um dos primeiros estudos realizados foi ERIGHIN (2012), onde propõem um ciclo de combustível prolongado de 48 meses. O projeto principal e o plano de gerenciamento do ciclo da B&W mPower foram realizados usando o conjunto de códigos de projeto de Studsvik, CASMO-5 e SIMULATE-3. O estudo foi realizado simulando um conjunto de combustível. Os arquivos de saída do CASMO-5 foram usados para analisar as características nucleares do combustível em uma rede infinita. Além disso, com o SIMULATE-3, todos os conjuntos de combustível foram analisados com base na localização no núcleo. O projeto do conjunto foi realizado iterando os parâmetros nucleares, tanto no nível da rede quanto no nível do conjunto, para que haja um excesso de reatividade no núcleo para atingir a energia de ciclo necessária, ao mesmo tempo que atende a todos os critérios de eficiência de combustível e segurança. O núcleo do reator e a simulação de gerenciamento de ciclo confirmaram que o combustível atende às limitações e requisitos do ciclo para o qual foi projetado. Os autovalores e as distribuições de potência dos elementos combustível localizados dentro de um conjunto, calculados pelo CASMO-5/SIMULATE-3, foram comparados com os resultados medidos dos respectivos experimentos, com muito boa concordância de dados (ERIGHIN, 2012).

Outro trabalho que propõe um ciclo estendido de combustível para o reator mPower é publicado por Michael Joseph Scarangella (SCARANGELLA, 2012). Este artigo descreve uma série de análises realizadas usando o pacote de código Studsvik para investigar uma estratégia de mistura de combustível convencional, empregando Gd_2O_3 como o principal absorvedor queimável, para o reator B&W mPower. As características do núcleo são semelhantes às do estudo anterior. Neste caso, as barras de controle são divididas em quatro grupos mutuamente exclusivos para a

regulação da potência. Os membros individuais de um grupo podem ser agrupados e movidos em uníssono ou individualmente, se necessário. Este gerenciamento de reatividade, que substitui o boro solúvel por um equilíbrio de venenos queimáveis fixos e padrões alternados de barras de controle, é semelhante à estratégia de gerenciamento de reatividade do BWR. Além da opção que considera um ciclo de combustível de um passo em que todo o núcleo é descarregado e substituído após quatro anos; uma estratégia convencional de utilização de combustível foi desenvolvida, empregando reabastecimento parcial periódico (29 meses) e reorganização, como uma alternativa ao programa de quatro anos de ciclo do combustível. Os reabastecimentos parciais do reator B&W mPower são possíveis e podem ser alcançados usando estratégias existentes que foram desenvolvidas para gerenciar o combustível para a frota global LWR.

Em HALFINGER; HAGGERTY (2012), são descritas as diferentes vantagens do reator mPower, como a escalabilidade do projeto, a facilidade de transporte e a independência dos direitos da água para a rejeição do calor secundário, o que o torna muito adequado para sua implementação em uma ampla gama de aplicações, incluindo acréscimos incrementais à carga básica, condições de rastreamento de carga e aplicações industriais. Além disso, propõe-se que este reator seja uma solução viável para modernizar as antigas usinas convencionais, aproveitando o sistema de transmissão e a localização da usina existente.

Kitcher e Chirayath em KITCHER; CHIRAYATH (2016), desenvolveram um modelo computacional do projeto do IPWR, com base no núcleo do SMR mPower. O núcleo otimizado pode produzir 500 MW de energia térmica com uma vida útil de quatro anos a um fator de capacidade de 87%. Simulações de queima de combustível foram realizadas para otimizar a duração do ciclo de combustível, enriquecimento de combustível e padrão de carregamento de núcleo para obter uma distribuição de energia de núcleo uniforme. Os parâmetros cinéticos estimados do reator, como a fração de nêutrons atrasados e o tempo médio de geração de nêutrons, são típicos de PWR existentes, dos quais muito do projeto SMR baseado em IPWR é derivado. Este estudo mostrou que os coeficientes Doppler, moderador de temperatura, vácuo e reatividade de potência são todos negativos ao longo da vida útil de quatro anos, indicando a possibilidade de operação segura do reator. Uma análise semi-analítica da termohidráulica revela perfis de temperatura radiais e axiais aceitáveis do elemento

de combustível com uma margem significativa de segurança dos padrões da indústria em limites superiores de temperatura de combustível e superfície de revestimento.

Em PLACE (2017) é descrito o projeto termohidráulico do SMR B&W mPower. Aqui é afirmado que a maioria dos transientes e acidentes descritos são idênticos ou muito semelhantes aos PWR operacionais comerciais ou mesmo PWR avançados com sistemas de segurança passiva. Nenhum novo fenômeno termohidráulico ou neutrônico foi identificado para este projeto de reator. Um modelo tridimensional completo do projeto SMR IPWR é desenvolvido em PLACE (2017), usando MCNP5 (X-5 Monte Carlo Team, 2008) e MCNPX2.6 para avaliar a segurança e o desempenho do cálculo do núcleo do reator. As distribuições de potência dos elementos de combustível não são calculadas devido à natureza computacionalmente cara do uso de MCNPs para tais análises. Como resultado, a potência do elemento combustível, um parâmetro importante de segurança e desempenho, não é calculada. Em vez disso, as frações de potência do conjunto são calculadas no MCNP e passadas para uma ferramenta de análise termohidráulica de canal único (SCA), onde os parâmetros do elemento de combustível mais quentes são calculados e subsequentemente aplicados a todo o conjunto como um conservadorismo. A ferramenta SCA termohidráulica usa técnicas semianalíticas aplicadas ao canal da barra de combustível mais quente.

Mais recentemente, em ROSALES GARCÍA *et al.* (2018) foi desenvolvido um modelo para descrever os parâmetros de nêutrons de um núcleo SMR que pode produzir até 530 MW de energia térmica, com base no núcleo mPower. Para descrever o comportamento dos nêutrons do núcleo SMR, eles desenvolveram um modelo que representa um oitavo núcleo, aproveitando a simetria da geometria estudada, e impôs condições de contorno reflexivas nos planos de divisão. O modelo possui refletores de água superior e inferior de 20 cm. Usando este modelo, várias configurações de enriquecimento de combustível foram estudadas para obter as distribuições de energia mais homogêneas dentro dos conjuntos de combustível ao longo da vida do núcleo. Os coeficientes de reatividade de temperatura e a variação de massa dos isótopos principais foram calculados para o núcleo otimizado. Por fim, desenvolveram um modelo que permite a avaliação termohidráulica da seção mais quente dos elementos combustíveis. A principal ferramenta para o transporte de partículas e

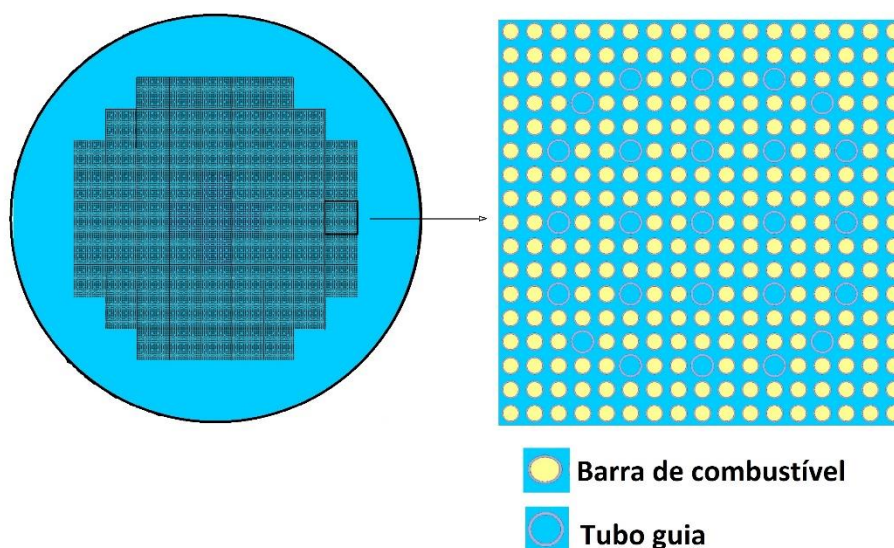
cálculos de queima de combustível foi o código MCNPX, versão 2.6e. Os cálculos termohidráulicos foram realizados com o programa Ansys CFX 14.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1. CARACTERÍSTICAS DO PROJETO DO NÚCLEO iPWR PROPOSTO

O núcleo do projeto iPWR proposto para analisar diferentes ciclos de combustível usando MOX foi estudado e seu projeto melhorado em várias publicações anteriores, conforme descrito no capítulo anterior (ERIGHIN, 2012; KITCHER; CHIRAYATH, 2016; ROSALES GARCÍA *et al.*, 2018). Nestes estudos, o comportamento do núcleo do reator iPWR foi simulado com combustível UO_2 padrão. O núcleo otimizado é composto por 69 conjuntos de combustível padrão da Westinghouse Company, carregados em uma estrutura quadrada de 21,5 cm de passo, que tem uma configuração simétrica de espelho octante. Cada conjunto de combustível contém 264 barras de combustível, 24 tubos guia para barras de controle e uma barra para instrumentação no centro (HALFINGER; HAGGERTY, 2012). A Figura 13 mostra a distribuição dos conjuntos de combustível dentro do núcleo e a Tabela 5 apresenta os principais dados do núcleo do reator proposto.

Figura 13. Esquema do núcleo e conjunto de combustível do reator.



Fonte: A autora (2025)

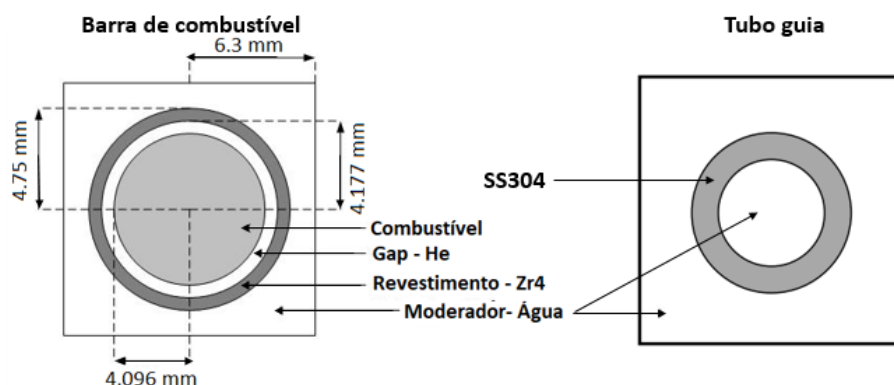
Tabela 5. Principais dados do núcleo do reator proposto.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
Potência Térmica	530 MW	Raio interno do tubo guia	0,561 cm
Diâmetro equivalente do núcleo	200 cm	Raio externo do tubo guia	0,602 cm
Comprimento ativo do combustível	240 cm	Raio interno do tubo de instrumentação	0,559 cm
Passo da rede do conjunto	21,5 cm	Raio externo do tubo de instrumentação	0,605 cm

O tubo de instrumentação colocado no centro do conjunto de combustível é um tubo de aço inoxidável fechado em uma extremidade que, cruzando o fundo hemisférico do vaso do reator, corre axialmente através do núcleo. Através do tubo de instrumentação, acionado de fora, pequenos detectores de fluxo de nêutrons móveis ou termopares de medição de temperatura são introduzidos e movidos ao longo do núcleo, a fim de determinar a distribuição espacial de tais parâmetros no núcleo (CARELLI; INGERSOLL, 2014).

As barras de controle contendo um material de absorção de neutrões são inseridas nos tubos de guia (Figura 14). Em conjuntos que contêm barras de controle, as barras de combustível internas são submoderadas. O aumento resultante no fluxo de nêutrons da região de ressonância resulta em uma conversão maior de ^{238}U em plutônio físsil. A submoderação nos conjuntos de combustível controlados também atua no sentido de reduzir a reatividade naquelas áreas, onde os nêutrons já são perdidos por absorção nas barras de controle. Conforme o ciclo do combustível progride e o combustível inicialmente carregado (^{235}U) é consumido, os átomos físseis formados pelo processo de conversão anterior (^{239}Pu e ^{241}Pu) agora contribuem para a produção de energia. Quando um conjunto de barras de controle é removido, os tubos guia se enchem de água, aumentando assim a moderação de nêutrons e melhorando a utilização de combustível (CARELLI; INGERSOLL, 2014).

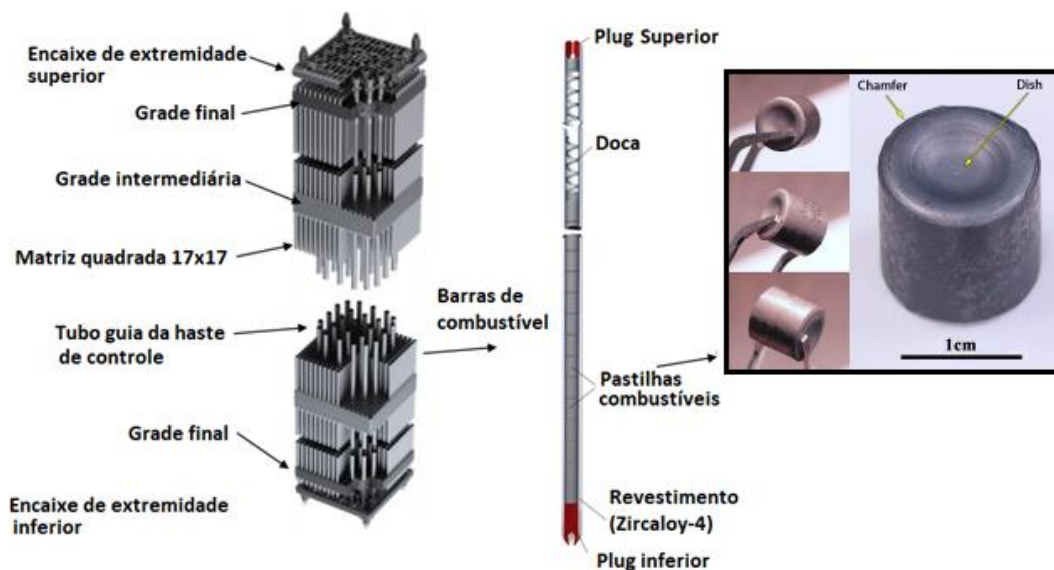
Figura 14. Características e dimensões das barras de combustível e tubo guia.



Fonte: A autora (2025)

Neste trabalho, foi estudado a viabilidade de núcleos parcialmente carregados com combustível MOX, com o objetivo de comparar o comportamento dos ciclos de combustível estendidos de 48 meses. Um terço do núcleo (24 conjuntos de combustível) será carregado com combustível MOX, enquanto o restante terá combustível UO_2 . As barras de combustível são constituídas por pastilhas de combustível cilíndricas uniformes de MOX ou UO_2 conforme o caso, colocados dentro de um cilindro metálico hermeticamente fechado por tampões soldados em suas extremidades, fabricados com a liga Zircaloy-4. Esta liga é resistente à corrosão e possui uma seção transversal de baixa absorção de nêutrons. Molas de compressão são dispostas entre as pastilhas de combustível e os plugues do revestimento de Zircaloy-4 para evitar o deslocamento do combustível devido ao acúmulo de produtos de fissão, evitando assim que o revestimento se quebre. Este espaço livre (gap) entre o revestimento e o combustível é preenchido sob pressão com hélio, que é um gás inerte com uma seção de absorção de nêutrons térmicos praticamente nula ($\sigma_a = 0,007$ barns) e tem boas qualidades de transmissão de calor (CARELLI; INGERSOLL, 2014). A Figura 15 mostra o esquema para um conjunto e uma barra de combustível.

Figura 15. Esquema de um conjunto e uma barra de combustível.



Fonte: Adaptado de TULENKO; SUBHASH (2012)

Uma característica distintiva deste projeto de reator modular é que não usa absorvedor dissolvido no refrigerante para controle de reatividade, então o grande excesso de reatividade terá que ser compensado apenas com absorvedores queimáveis e barras de controle (ERIGHIN, 2012). A não utilização de absorvedor químico produz um grande valor negativo do coeficiente de reatividade da temperatura moderadora, principalmente no início do ciclo (BOC, Beginning Of Cycle), o que fornece um mecanismo de controle de reatividade inerente robusto, como um BWR.

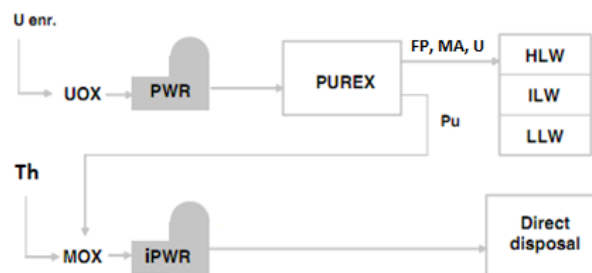
O projeto SMR é um ciclo de combustível estendido de 48 meses. Esta opção considera um ciclo de combustível de um passo, em que todo o núcleo foi descarregado e substituído após quatro anos. Não houve reabastecimento ou troca de conjuntos de combustível durante o ciclo, priorizando a resistência à proliferação. A longa duração esperada do ciclo de combustível necessita de um enriquecimento inicial maior e, portanto, de uma carga maior de absorvedores queimável e operação de potência total com barras de controle inseridas (ERIGHIN, 2012).

3.1.1 Estratégias de combustível MOX consideradas.

A partir das estratégias de uso de combustível MOX apresentadas no capítulo anterior, as seguintes foram selecionadas para serem usadas em um ciclo de combustível estendido do iPWR proposto (ERNOULT *et al.*, 2015):

- **MonoThPu:** Plutônio, obtido a partir de uma primeira reciclagem de um combustível irradiado originalmente composto por UO_2 levemente enriquecido, é reciclado uma vez em uma mistura com Tório (Figura 16), 13,14% de PuO_2 e 86,86% de ThO_2 . O vetor plutônio, característico de uma primeira reciclagem, possui uma alta proporção de isótopos físséis. Nesse caso, o novo combustível físsil obtido será o ^{233}U . Como nenhum novo plutônio é produzido, o vetor final do plutônio será pouco enriquecido em combustível físsil.

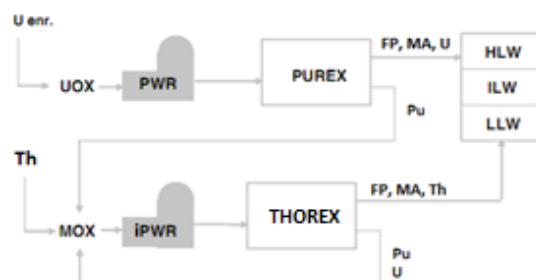
Figura 16. Esquema MonoThPu.



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

- **MultiThUPu:** Nesta composição, o plutônio recuperado de uma primeira reciclagem é misturado com o plutônio e o urânio reciclado de um combustível MOX de reciclagem múltipla e, em seguida, misturado com o tório (Figura 17). Neste caso, o novo combustível MOX contém 81,28% em peso de ThO_2 , 5% de UO_2 reprocessado e 13,72% de PuO_2 . Como há uma reciclagem múltipla de plutônio, seu vetor contém uma baixa porcentagem de seus isótopos físséis e uma alta fração de ^{238}Pu , ^{240}Pu e ^{242}Pu em comparação com a de uma simple reciclagem.

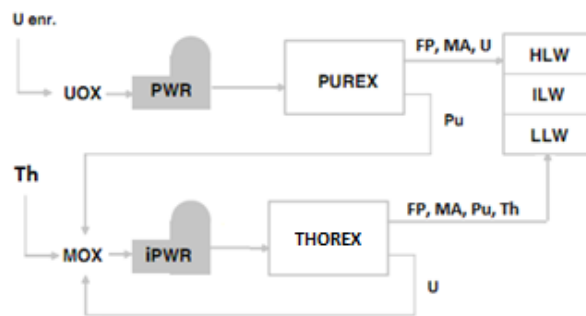
Figura 17. Esquema MultiThUPu.



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

- **MultiThU2:** Neste caso, o combustível MOX é composto por uma mistura de urânio reprocessado, proveniente de anteriores combustíveis MOX à base de tório (Figura 18). O vetor isotópico de urânio reprocessado é derivado de dois tipos de combustível MOX anteriores. Um composto por uma mistura de plutônio e tório e o outro de urânio e tório reprocessado. A proporção é de 6,97% de UO_2 reprocessado e o restante de ThO_2 .

Figura 18. Esquema MultiThU.



Fonte: Adaptado de OECD (2006)

O combustível irradiado original era UO_2 ligeiramente enriquecido, que foi queimado a 50 GWd/TnHM em um LWR padrão. A composição do vetor isotópico do plutônio reciclado em seu primeiro tempo dependerá de vários parâmetros: o valor de queima, o tempo de resfriamento e o tempo necessário para a separação química, a fabricação e o carregamento do novo combustível. Para estabelecer as composições do combustível MOX em nosso estudo, foi considerado um tempo de resfriamento de cinco anos antes da separação química, que geralmente é o tempo considerado para estudos de multiprocessamento de plutônio em reatores reprodutores. Um tempo de dois anos entre a separação química e o carregamento do novo combustível também foi estabelecido. As densidades de UO_2 , PuO_2 e ThO_2 foram consideradas como 93,5% das densidades teóricas (10,97 g/cm³ para UO_2 , 11,5 g/cm³ para PuO_2 , e 10 g/cm³ para ThO_2) (ERNOULT *et al.*, 2015). Na Tabela 6 as composições estudadas são mostradas.

Tabela 6. Composições de combustível MOX.

	MonoThPu	MultiThUPu	MultiThU2
²³⁸ Pu	2,70	5,58	
²³⁹ Pu	51,05	23,91	
²⁴⁰ Pu	24,22	24,51	
²⁴¹ Pu	12,80	11,16	
²⁴² Pu	7,30	33,80	
²⁴¹ Am	1,93	1,04	
Total Pu %	13,14	13,72	
²³² U		0,21	0,31
²³³ U		52,59	49,79
²³⁴ U		26,45	29,63
²³⁵ U		11,69	7,21
²³⁶ U		9,04	12,97
²³⁸ U		0,05	0,09
Total U %		5,00	6,97
Total Th %	86,86	81,28	93,03

Os elementos transurânicos presentes no combustível irradiado têm diferentes características físicas e podem ser classificados em quatro famílias (WRIGLEY *et al.*, 2019):

- Neptúnio: O isótopo 237 é formado principalmente a partir do ²³⁵U, por captura de nêutrons e decaimento beta e, em menor grau, do ²³⁸U por reação (n, 2n). Sua produção a curto prazo é independente do tipo de reciclagem de plutônio. Após a descarga, o neptúnio é formado a partir da desintegração de ²⁴¹Pu em ²⁴²Am em ²³⁷Np. Sua meia-vida é extremamente longa
- Amerício 241, gerado pelo decaimento beta do ²⁴¹Pu que tem um período de decaimento relativamente curto (menos de 14 anos). Sua produção é, portanto, maior no ciclo do combustível do que nos reatores. Como um poderoso emissor alfa e gama, sua presença penaliza o reprocessamento e a fabricação de combustível MOX; uma vez que sua produção está relacionada principalmente aos atrasos entre o reprocessamento e a fabricação.
- ²⁴²Am e ²⁴³Am, produzidos por irradiação de isótopos superiores do plutônio. ²⁴²Am por captura de nêutrons em ²⁴¹Am (e, portanto, as quantidades são desprezíveis); ²⁴³Am criado a partir do decaimento beta de ²⁴³Pu, que tem meia-vida muito curta de cinco horas. Portanto, eles dependem do grau de plutônio e das condições de irradiação.

- Cúrio e núclídeos mais pesados, também produzidos por sucessivas capturas e decaimentos beta do plutônio para o amerício. O combustível irradiado contém menos de 0,01% de cúrio (^{242}Cm , ^{244}Cm e ^{245}Cm). As meias-vidas do ^{242}Cm e do ^{244}Cm são curtas, mas sua presença, mesmo em pequenas quantidades, resulta em fortes fontes de radiação e calor.

3.1.2. Uso de absorvedores queimáveis.

Os avanços contínuos no projeto do conjunto de combustível permitiram uma melhor utilização do combustível, aumentando assim o desempenho dos núcleos do reator. Uma característica desses projetos avançados de conjuntos de combustível é o uso expandido de materiais absorvedores queimáveis (veneno de nêutrons), seja como parte integrante do conjunto de combustível ou como um conjunto separado. Os absorvedores queimáveis podem ser classificados em duas categorias distintas: Barras de veneno queimáveis (barras de controle) e Absorvedores queimáveis integrais (IBA, Integral Burnable Absorbers). As IBA são venenos queimáveis que são parte integrante ou não removível do conjunto de combustível, uma vez que é fabricado. Neste trabalho usaremos barras absorvedores queimáveis compostas por uma mistura de Gadolínio (Gd_2O_3) e UO_2 ; e barras do Absorvedor Integral de Combustível Westinghouse (IFBA, Integral Fuel Burnable Absorbers), que possui um revestimento de diboreto de zircônio (ZrB_2) nas pastilhas de combustível.

Gd_2O_3 como absorvedores queimável

A fim de compensar o excesso de reatividade no núcleo e diminuir o fator de pico, barras de absorvedores queimáveis são usadas no conjunto de combustível. As barras de absorvedores queimáveis são compostas por Gadolínio (Gd_2O_3) homogeneamente disperso em uma matriz de UO_2 . Um dos problemas que surge com a utilização das barras de $\text{Gd}_2\text{O}_3+\text{UO}_2$ é a diminuição da condutividade térmica, portanto o enriquecimento de urânio na barra de absorvedor queimável deve ser reduzido, de forma a garantir o limite máximo de temperatura, definido no projeto.

Devido ao amplo uso do Gd_2O_3 como absorvedor queimável em PWR, muitos são os estudos a respeito da otimização do combustível misturado ao gadolínio. Em CUDRNAK; NECAS (2011); DURAZZO *et al.* (2010); (UGURU *et al.*, 2020) diferentes opções de combustível são analisadas, variando a concentração de Gd_2O_3 (2-10%)

na barra de absorvedor queimáveis para PWR, bem como o enriquecimento de urânio na mistura $Gd_2O_3+UO_2$. Tomando esses conceitos de otimização como referência, neste trabalho será analisada uma concentração entre 4-8% de Gd_2O_3 e 3-4% de enriquecimento de ^{235}U .

O átomo de gadolínio tem uma seção transversal de 36000 barn para nêutrons térmicos. Dos sete isótopos que contém, apenas ^{155}Gd e ^{157}Gd são úteis devido às suas seções transversais de absorção muito alta, 60889 barn e 254078 barn respectivamente. Os outros isótopos, que constituem 70% da quantidade total, têm pequenas seções transversais e eles são os principais responsáveis pela pequena absorção indesejável no final da vida do combustível (CUDRNAK; NECAS, 2011). Para reduzir essa absorção parasitária no final do ciclo e enfatizar a absorção no início, é possível usar gadolínio enriquecido em ^{155}Gd e ^{157}Gd . Outra propriedade interessante do gadolínio como material absorvedor é que sua seção transversal de captura não térmica não diminui tão rapidamente em função da velocidade do nêutron quanto a dos outros elementos usados (boro, cádmio ou háfnio).

Para calcular a densidade teórica que a mistura $(U,Gd)O_2$ deve ter, é necessário conhecer sua composição química, seu modelo estrutural e os parâmetros da rede cristalina. De acordo com esses critérios, em diversos estudos foram obtidas equações que descrevem a variação da densidade teórica com a quantidade de gadolínio. A equação obtida de acordo com os dados fornecidos para a densidade teórica por B&W, que é o grupo de projeto do reator em estudo:

$$\rho_{DT} = 10.960 - 0.033x \quad (1)$$

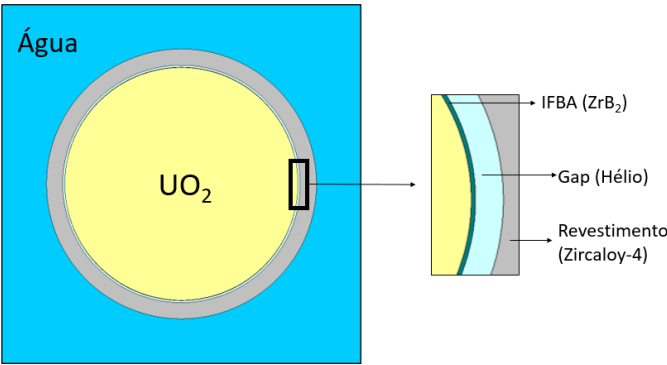
Onde ρ_{DT} é a densidade teórica expressa em g/cm^3 e x é o conteúdo de Gd_2O_3 (em %). A quantidade de UO_2 não tem efeitos significativos na variação da densidade, de acordo com os resultados obtidos por FUKUSHIMA *et al.* (1982). Além disso, é estabelecido que a densidade das pastilhas de $Gd_2O_3+UO_2$ é de 95% da densidade teórica. Valor, para o qual as magnitudes específicas de calor e condutividade térmica foram normalizadas.

ZrB₂ como absorvedor queimável

Alguns projetos de conjuntos de combustível Westinghouse incluem barras IFBA, que contêm pastilhas de combustível de dióxido de urânio enriquecido com uma camada fina de ZrB_2 na superfície externa (Figura 19). As barras IFBA são exclusivas da Westinghouse e têm sido usadas nos núcleos do reator Westinghouse desde

aproximadamente 1987. As especificações para projetos de conjuntos usando barras IFBA incluem o carregamento de boro no revestimento ZrB_2 , o número de barras IFBA e a localização ou carregamento padrão das barras IFBA dentro do conjunto de combustível (SANDERS; WAGNER, 2002).

Figura 19. Esquema IFBA



Fonte: A autora (2025)

O número de barras IFBA em um conjunto de combustível pode variar de zero a menos do 60% do número total de barras de combustível. Para um conjunto Westinghouse 17x17, contendo 264 hastes de combustível, são conhecidos os padrões de carregamento com 0, 8, 16, 32, 48, 64, 80, 104, 128 e 156 IFBA. Além disso, a carga de boro no revestimento ZrB_2 e o enriquecimento de ^{235}U inicial são variados para atender aos objetivos principais. Como o boro se esgota completo rapidamente e não desloca o material combustível, não há penalidade de reatividade residual (GODFREY, 2014). A Tabela 7 mostra as especificações para IFBA.

Tabela 7. Especificações para IFBA

Material	ZrB_2
Carregamento de Boro-10	0,927 mg/cm
Enriquecimento de Boro-10	50 %
Densidade	3,85 g/cc
Altura do veneno	240 cm
Fração de peso (%)	
^{10}B	9,347
^{11}B	9,347
Zr	81,306

3.2. DESCRIÇÃO TERMOHIDRÁULICA DA SEÇÃO MAIS QUENTE DO NÚCLEO

Uma das limitações termohidráulicas do combustível é que a temperatura atingida não pode ultrapassar seu ponto de fusão. A temperatura máxima que é atingida no combustível depende basicamente da condutividade térmica e da densidade de potência linear nas barras. O revestimento atua como uma barreira de contenção, evitando a liberação de produtos de fissão radioativos produzidos no combustível para o refrigerante. Ele está sujeito a grandes tensões produzidas pelo refrigerante de alta pressão que o rodeia, a pressão dos gases de fissão que se acumulam na lacuna e a rachadura e dilatação da barra de combustível irradiada. Essas tensões são muito sensíveis à temperatura, portanto, variações de temperatura no revestimento devem ser evitadas (TONG; WEISMAN, 1982).

A pressão do refrigerante do reator é mantida por um pressurizador aquecido eletricamente, localizado acima do gerador de vapor, proporcionando operação estável e resposta de pressão durante todas as condições operacionais. A temperatura do refrigerante do reator deve ser mantida abaixo do ponto de saturação para que não haja ebulição no núcleo; isso resulta em um subresfriamento de aproximadamente 32 °C na saída do núcleo. A densidade de potência do núcleo do reator B&W mPower é de aproximadamente 65 W/cm³, mais baixa do que a densidade de potência de um grande PWR (96,6 W/cm³ para o reator AP1000) (ERIGHIN, 2012). A Tabela 8 mostra os principais parâmetros termohidráulicos utilizados no modelo para a realização do estudo termohidráulico da seção mais quente do núcleo (U.S.NRC, 2020).

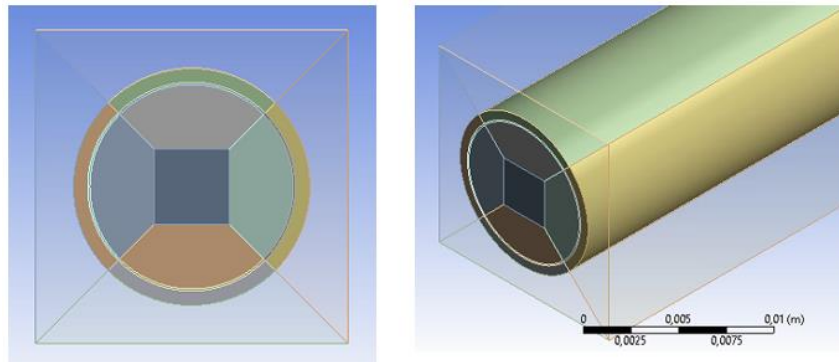
Tabela 8. Principais parâmetros termohidráulicos

Parâmetro	Valor
Potência térmica	530 MW
Pressão	14,8 MPa
Temperatura de entrada	290 °C
Temperatura de saída	318,8 °C
Fluxo mássico	3345 kg/s

3.2.1. Geração de geometria e discretização espacial

Para verificar se o combustível atende às limitações térmicas, é necessário analisar o conjunto de combustível no qual é produzida a maior potência (conjunto crítico). Aproveitando as condições de simetria para simplificar os cálculos e otimizar os recursos computacionais disponíveis, o subcanal mais quente do conjunto combustível de maior potência foi simulado. As dimensões do subcanal são aquelas mostradas na Figura 14, considerando um comprimento ativo de 240 cm. A Figura 20 mostra a geometria desenvolvida em Ansys Meshing.

Figura 20. Vista isométrica e superior da geometria do canal de combustível.



Fonte: A autora (2025)

A forma da malha e a quantidade de elementos usados para discretizar o espaço depende da geometria e da precisão necessária da solução. No presente estudo, uma malha estruturada foi utilizada para se adaptar à geometria do canal. A geometria foi decomposta em várias partes para obter uma malha mais estruturada e otimizar os recursos computacionais utilizados.

Nas proximidades das paredes é realizado um refinamento da malha para garantir que os gradientes de velocidade e temperatura sejam resolvidos corretamente. Ao realizar um estudo de CFD, é necessário realizar um estudo de independência de malha para garantir que o tamanho de malha escolhido seja adequado para obter resultados confiáveis. Para isso, o canal de combustível é avaliado usando diferentes configurações de malhas, comparando malhas grossas e finas, obtendo diferentes números de nós, faces e células. Os resultados obtidos para as diferentes configurações de malha são mostrados na Tabela 9 e comparados, com o objetivo de minimizar o erro

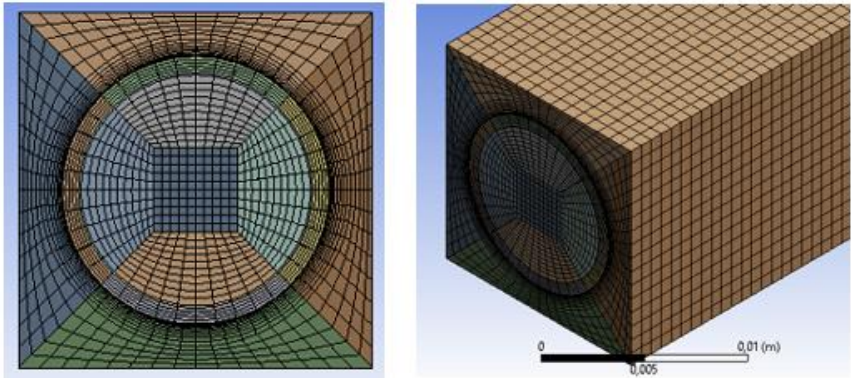
sucessivo e obter resultados próximos aos esperados. Foram avaliados os valores máximos e mínimos de temperatura.

Tabela 9. Estudo de Independência de Malha.

Malha	UO ₂		Zirlo		Helio		Água	
Elementos	T _{mín}	T _{max}	T _{mín}	T _{max}	T _{mín}	T _{max}	T _{mín}	T _{max}
537621	898,82	1588,45	606,88	704,70	635,98	944,86	562,87	605,6
1174520	900,62	1609,29	607,85	707,17	636,60	949,39	562,77	605,6
2214780	901,31	1611,73	608,06	707,76	636,95	950,76	562,82	605,6
3876000	902,11	1614,52	607,95	708,27	637,02	951,27	562,83	605,6
5114010	902,63	1614,84	607,90	708,30	637,02	951,53	562,89	605,6

Obteve-se que, com uma malha de 3876000 elementos, chega-se a uma solução independente da malha, com um erro relativo menor que 1%. Na Figura 21, a seção transversal do subcanal é mostrada. A malha é gerada pelo método de multizona, que se baseia no entrelaçamento de zonas independentes, proporcionando uma decomposição automática da geometria em regiões de varredura e regiões livres

Figura 21. A malha utilizada na discretização do domínio.



Fonte: A autora (2025)

Para verificar a qualidade da malha, é realizada uma avaliação por meio dos indicadores de qualidade Skewness, Aspect Ratio e Orthogonal Quality. A Tabela 10 mostra a relação entre os indicadores da malha e sua qualidade. O parâmetro Skewness, que determina o quão perto do ideal está uma face ou célula, ou seja, equilátero ou equiangular, sendo 0 ideal (ótimo) e 1 para completamente degenerado

(pior), para o presente trabalho obteve-se um valor máximo de 0,5. O parâmetro Aspect Ratio é a proporção entre o comprimento da borda mais longa e o comprimento da borda mais curta. Deve ser igual a 1 para uma malha ideal. No estudo obteve-se 28,66 para o máximo, valores menores que 100 são considerados para uma malha de boa qualidade. O último e principal parâmetro avaliado foi a Qualidade Ortogonal, que envolve o ângulo entre o vetor que une dois nós da malha (ou volume de controle) e o vetor normal para cada superfície de ponto de integração (n) associada a essa aresta. Para esse parâmetro, é considerado 1 um valor ótimo e 0 um valor ruim, resultando em um valor de 0,632 para o mínimo. A malha obtida para a modelagem realizada atende aos requisitos dos indicadores de qualidade, garantindo a confiabilidade dos resultados.

Tabela 10. Qualidade da malha em relação aos parâmetros Qualidade Ortogonal e Skewness.

Qualidade	Orthogonal Quality	Skewness
Excelente	0,95 – 1,00	0 – 0,25
Muito Bom	0,70 – 0,95	0,25 – 0,50
Bom	0,20 – 0,69	0,50 – 0,80
Aceitável	0,15 – 0,69	0,80 – 0,94
Ruim	0,001 – 0,14	0,95 – 0,97
Inaceitável	0 – 0,001	0,98 – 1,00

3.2.2. Modelo de turbulência k - ε Padrão

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

O modelo k - ε define a viscosidade turbulenta como $\mu_T = \frac{C_\mu k^2}{\varepsilon}$ (2), onde C_μ é uma constante do modelo. Com ε e k calculados pelas equações 2 e 3; com μ sendo a viscosidade e R_{ij} a tensão de Reynolds.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = R_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} R_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k\varepsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (4)$$

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

O modelo $k-\varepsilon$ padrão foi escolhido para este trabalho devido ser amplamente utilizado para diversos casos da engenharia, por apresentar um baixo custo computacional, sendo robusto, de fácil entendimento e utilização (WILCOX, 2006)

3.2.3. Propriedades do UO_2 sólido.

Ponto de fusão

O valor recomendado para a temperatura de fusão de UO_2 é:

$$T_m = 3120 \pm 30 \text{ K} \quad (\text{Escala IPTS-68}) \quad (5)$$

Este valor foi recomendado por Rand de sua análise de quatorze estudos experimentais (durante um período de 20 anos) da temperatura de fusão do UO_2 . Esta recomendação de Rand foi aceite por um acordo internacional e foi recomendado por Harding, Martin e Potter em sua revisão de 1989 das propriedades do material para a segurança do reator (IAEA, 2006).

Densidade

As equações recomendadas para a densidade do dióxido de urânio sólido são baseadas no valor do parâmetro de rede de 0,54704 nm obtido por Gronvold a 293 K e na avaliação de 1988 da expansão térmica por D. G. Martin. Assumindo que o peso molecular do UO_2 é 270,0277, este parâmetro de rede dá uma densidade teórica do UO_2 a 293 K de 10,956 $\text{Mg}\cdot\text{m}^{-3}$. Aplicando a recomendação de expansão térmica de Martin, a densidade teórica a 273 K é 10,963 $\text{Mg}\cdot\text{m}^{-3}$. A densidade de UO_2 é considerada como 93,5% da densidade teórica. A densidade em função da temperatura pode ser calculada a partir de (IAEA, 2008):

$$\rho(T) \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] = \rho(273) \frac{L(273)^3}{L(T)} \quad (6)$$

Onde $\rho(273)$ é a densidade a 273 K; $L(273)$ e $L(T)$ são os comprimentos a 273 K e à temperatura T (K), respectivamente. A razão do comprimento a 273 K para o

comprimento na temperatura T (K) pode ser calculada a partir das equações de Martin para a expansão térmica do UO₂ sólido (IAEA, 2008):

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

$$\frac{L(T)}{L(273)} = 0,99734 + 9,802 \cdot 10^{-6}T - 2,705 \cdot 10^{-10}T^2 + 4,291 \cdot 10^{-13}T^3 \quad (7)$$

$$923 \leq T \leq 3120 \text{ K}$$

$$\frac{L(T)}{L(273)} = 0,99672 + 1,179 \cdot 10^{-5}T - 2,429 \cdot 10^{-9}T^2 + 1,219 \cdot 10^{-12}T^3 \quad (8)$$

Entalpia (H) e calor específico (Cp)

As correlações recomendadas são (IAEA, 2008):

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

$$H(T) - H(298,15) = C_1\theta \left[(e^{\theta/T} - 1)^{-1} - (e^{\theta/298,15} - 1)^{-1} \right] + C_2[T^2 - (298,15)^2] + C_3e^{-E_a/T} \quad (9)$$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p = \frac{C_1\theta^2 e^{\theta/T}}{T^2(e^{\theta/T} - 1)^2} + 2C_2T + \frac{C_3E_a e^{-E_a/T}}{T^2} \quad (10)$$

$$C_1 = 81,613$$

$$\theta = 548,68$$

$$C_2 = 2,285 \cdot 10^{-3}$$

$$C_3 = 2,360 \cdot 10^7$$

$$E_a = 18531,7$$

Essas equações foram aproximadas da seguinte forma polinomial:

$$H(T) - H(298,15) = -21,1762 + 52,1743\tau + 43,9753\tau^2 - 28,0804\tau^3 + 7,88552\tau^4 - 0,5266\tau^5 + 0,7139\tau^{-1} \quad (11)$$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p = 52,1743 + 87,951\tau - 84,2411\tau^2 + 31,5421\tau^4 - 2,6334\tau^4 - 0,7139\tau^{-2} \quad (12)$$

A incerteza para o aumento da entalpia é de $\pm 2\%$ para a faixa de temperatura de 298,15 a 1800 K e $\pm 3\%$ de 1800 a 3120 K. Para as correlações de calor

específicas, há uma incerteza de $\pm 2\%$ para a faixa de temperatura de 298,15 a 1800 K, e $\pm 13\%$ de 1800 a 3120 K (IAEA, 2008).

Condutividade térmica (λ)

A correlação recomendada para condutividade térmica considerando 95% da densidade teórica é (IAEA, 2008):

$$\lambda_{95} \left[\frac{W}{m K} \right] = \frac{100}{7,5408+17,692t+3,6142t^2} + \frac{6400}{t^{5/2}} e^{-\frac{16,35}{t}} \quad (13)$$

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

De 298 a 2000 K a incerteza é de $\pm 10\%$, e de 2000 a 3120 K é de $\pm 20\%$, devido às discrepâncias entre as diferentes medições dos pesquisadores.

Condutividade térmica do UO_2 irradiado

A equação do modelo de Halden é recomendada para a condutividade térmica de UO_2 sólido irradiado com 95% de densidade teórica, uma vez que seus dados cobrem uma ampla faixa de temperatura e queima, e estão dentro da dispersão experimental das medições relatadas na literatura (IAEA, 2006).

$$\lambda_{95} = \frac{1}{0,1148+0,0035B+2,475 \cdot 10^{-4}(1-0,0033B)T} + 0,0132 e^{0,0188T} \quad (14)$$

Com temperatura T em $^{\circ}C$, queima B em MWd/ kg UO_2 e condutividade térmica λ em W/mK. As incertezas foram determinadas a partir da dispersão dos dados disponíveis e dos desvios dos dados da equação recomendada. Da temperatura ambiente até 2000 K, a incerteza permanece dentro de 20%. Para temperaturas superiores a 2000 K, a incerteza não foi determinada (IAEA, 2006).

Esta correlação é aplicável considerando 95% da densidade teórica, no nosso caso usamos uma densidade que representa 93,5% da densidade teórica. Para encontrar os valores de condutividade para a densidade teórica ou qualquer outro valor de densidade, usamos a seguinte relação:

$$\lambda_{th} = \frac{\lambda_{1-p}}{1-\alpha p} \quad (15)$$

$$p = 1 - \frac{\rho}{\rho_{th}} \quad (16)$$

$$\alpha = 2,6 - 0,5t \quad (17)$$

Onde λ_{1-p} é a condutividade térmica para o valor de porosidade p, $t = T/1000$, T é a temperatura em K, λ_{th} é a condutividade para a densidade teórica.

$$\lambda_0 = \frac{\lambda_{0,95}}{1-0,05\alpha} = \frac{\lambda_{1-p}}{1-\alpha p} \quad (18)$$

$$\lambda_{1-p} = (1 - \alpha p) \frac{\lambda_{0,95}}{1-0,05\alpha} \quad (19)$$

3.2.2. Propriedades do (U,Gd)O₂ sólido

Calor específico (Cp)

As seguintes expressões são recomendadas para a capacidade de calor do sólido (U, Gd) O₂ de 300 a 2000K (IAEA, 2006).

$$C_p = C_{p0} + \Delta C_p \quad (20)$$

$$C_{p0} = a + bT - \frac{c}{T^2} \quad (21)$$

$$\Delta C_p = \frac{(\Delta H)}{\sqrt{2RT^2}} \exp\left(\frac{\Delta S}{2R}\right) \exp\left(\frac{-\Delta H}{2RT}\right) \quad (22)$$

$$a = 79,8 \text{ J/mol} \cdot K \quad b = 0,1263y^2 - 0,0073y + 0,0061 \text{ J/mol} \cdot K^2$$

$$c = (1,68 - 1,48y)10^6 \text{ J/mol}$$

$$\Delta H = (-73880y^3 + 10190y^2 - 612,13y + 310)10^3 \text{ J/mol}$$

$$\Delta S = 61,9669 - 45,564y \text{ J/mol}$$

Onde ΔH é a entalpia de ativação e ΔS é a entropia de ativação da formação do defeito de Frenkel. O ΔC_p é o aumento anômalo da capacidade térmica de (U, Gd)O₂, y é o conteúdo de gadolínio de (U_{1-y}, Gd_y) O₂, T está em K.

A incerteza para o calor específico do sólido (U, Gd)O₂ para a faixa de conteúdo de gadolínio entre 0 e 14,2 mol% é de 3% na faixa de temperatura de 298,15K a 2000K (IAEA, 2006).

Condutividade térmica

A condutividade térmica foi expressa em função da fração atômica de Gd_2O_3 e da temperatura dentro de um erro de ajuste de 6%. A equação recomendada de Ishimoto para a condutividade térmica, K , em $Wm^{-1}K^{-1}$ é (IAEA, 2006):

$$\lambda_{95} = \frac{\lambda_0}{x} \arctan(x) + 3,94 \cdot 10^{-11} T^3 \quad (23)$$

$$\lambda_0 = \frac{1}{2,45 \cdot 10^{-2} + 2,56 \cdot 10^{-4} T} \quad (24)$$

$$x = 3,31 \exp(-7,61 \cdot 10^{-4} T) \sqrt{y \lambda_0} \quad (25)$$

Onde a temperatura, T é em K. λ_0 é a condutividade térmica para UO_2 livre de defeito pontual, x é o parâmetro de espalhamento de fôtons pela impureza. O primeiro termo representa a contribuição dos fôtons. O segundo termo representa a contribuição do elétron. Ishimoto estimou as incertezas nas condutividades térmicas calculadas com sua equação como 6% de 400K a 2000K (IAEA, 2006).

Densidade

A densidade em função da temperatura pode ser calculada a partir de:

$$\rho(T) \left[\frac{kg}{m^3} \right] = \rho(273) \frac{L(273)^3}{L(T)} \quad (26)$$

Onde $\rho(273)$ é a densidade em 273 K; $L(273)$ e $L(T)$ são os comprimentos a 273 K e à temperatura T (K), respectivamente. As equações recomendadas para a expansão térmica linear de (U, Gd) O_2 por Jiang são (IAEA, 2006):

$$300 \leq T \leq 2000 \text{ K}$$

$$\frac{L(T)}{L(273)} = 0,99866 + 7,2512 \cdot 10^{-6} T + (2,0463 \cdot 10^{-13} g^2 + 3,4846 \cdot 10^{-11} g + 2,0653 \cdot 10^{-9}) T^2 \quad (27)$$

g: por cento em peso de Gd_2O_3

As incertezas são 85% a 300 K, 6,5% a 400 K e 4% de 500 a 2000 K. As equações recomendadas podem ser estendidas para 2200 K com 4% de incerteza.

3.2.3. Propriedades do (Th,U)O₂ sólido

Densidade

As avaliações da densidade da solução sólida (Th,U)O₂ foram fornecidas pela Divisão de Radiometalurgia, Centro de Pesquisa Atômica de Bhabha, Mumbai, Índia. A equação recomendada para a densidade teórica de ThO₂ –UO₂ em função do teor de UO₂ (x) e da temperatura (298–1600 K) é representada por (IAEA, 2006):

$$\rho_{th} = 10,087 - 2,891 \cdot 10^{-4}T - 6,354 \cdot 10^{-7}xT + 9,279 \cdot 10^{-3}x + 5,111 \cdot 10^{-6}x^2 \quad (28)$$

A incerteza da equação acima para estimativa da densidade teórica é de $\pm 0,28\%$. As densidades de (Th,U)O₂ foram consideradas como 93,5% das densidades teóricas.

Calor Específico

A seguinte equação foi obtida para a capacidade térmica do óxido misto (Th_yU_(1-y))O₂, estimado usando o método de Neumann Kopp (IAEA, 2006).

$$C_p \left[\frac{J}{mol K} \right] = y(55,9620 + 0,05126T - 3,6802 \cdot 10^{-5}T^2 + 9,2245 \cdot 10^{-9}T^3 - 5,74031 \cdot 10^5T^{-2}) + (1 - y)(52,1743 + 0,08795T - 8,4241 \cdot 10^{-5}T^2 + 3,1542 \cdot 10^{-8}T^3 - 2,633 \cdot 10^{-12}T^4 - 7,1391 \cdot 10^5T^{-2}) \quad (29)$$

A diferença máxima entre os valores estimados e experimentais não era mais do que $\pm 5\%$.

Condutividade térmica

A equação de melhor ajuste para condutividade térmica de (Th_{1-y}U_y) O₂ de 95% de densidade teórica em função da composição (y) e temperatura (T) foi derivada, a qual é válida de 873 a 1873K (IAEA, 2006).

$$\lambda_{95}(W/mK) = \frac{1}{-0,0464 + 0,0034y + (2,5185 \cdot 10^{-4} + 1,0733 \cdot 10^{-7}y)T} \quad (30)$$

3.2.4. Propriedades do (Th,Pu)O₂ sólido

As avaliações da condutividade térmica da solução sólida (Th,U)O₂ foram fornecidas pela Divisão de Radiometalurgia, Centro de Pesquisa Atômica de Bhabha, Mumbai, Índia. A equação de melhor ajuste para condutividade térmica de (Th_{1-y}Pu_y)O₂ de 95% da densidade teórica em função da composição (y) e temperatura (T) foi derivada, a qual é válida de 873 a 1873K (IAEA, 2006).

$$\lambda_{95}(W/mK) = \frac{1}{-0,08388+1,7378y+(2,62524 \cdot 10^{-4}+1,7405 \cdot 10^{-7}y)T} \quad (31)$$

3.2.5. Propriedades do Zircaloy-4

Calor específico

A dependência da temperatura das capacidades de calor calculadas de Zircaloy-4 é semelhante à dos dados de Zircaloy-2, mas a magnitude das capacidades de calor de Zircaloy-4 é maior (STUCKERT; PALAGIN, 2002).

$$273 \leq T \leq 1093 \text{ K}$$

$$C_p = 260,85 + 0,1371T \text{ [J/kg K]} \quad (32)$$

$$1093 \leq T \leq 1173 \text{ K}$$

$$C_p = 260,85 + 0,1371T + f(T) \quad (33)$$

$$f(T) = 565 \cdot \exp \left[- (T - 1163)^2 / 1100 \right] \quad (34)$$

$$1173 \leq T \leq 1293 \text{ K}$$

$$C_p = 634,6 - 0,4T + 1,6 \cdot 10^{-4}T^2 + f(T) \quad (35)$$

$$f(T) = 530 \cdot \exp \left[- (T - 1183)^2 / 2390 \right] \quad (36)$$

$$1320 \leq T \leq 2000 \text{ K}$$

$$C_p = 634,6 - 0,4T + 1,6 \cdot 10^{-4}T^2 \text{ [J/kg K]} \quad (37)$$

Temperatura de Solidus

Solidus é a temperatura mais alta na qual uma liga é sólida, onde a fusão começa. Esta temperatura depende do teor de oxigênio em porcentagem atômica (X) na liga. Para nosso caso, temos 0,675 em % O₂. Para calcular a temperatura de fusão, usamos a correlação (IAEA, 2006):

$$0 \leq X \leq 11,01\%$$

$$T_f = 2025,33 + 15,1043X + 0,0930X^2 \quad (38)$$

$$T_f = 2035,57 \text{ K}$$

A incerteza para esta correlação é de $\pm 20\text{K}$.

Condutividade térmica

A equação recomendada para a condutividade de zircônio é (IAEA, 2006):

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

$$\lambda_{\text{ZIRLO}} = 12,767 - 5,4348 \cdot 10^{-4} T + 8,9818 \cdot 10^{-6} T^2 [\text{W/mK}] \quad (39)$$

A extrapolação para temperaturas mais altas, onde não há dados disponíveis, não é recomendada porque é um ajuste polinomial para os dados e não uma equação baseada fisicamente. A incerteza da equação aumenta com a temperatura de 4% em 300K a 5% em 500K, 6% em 800K e 7% em 1200K. A incerteza média de 1200K a 1800K é de 7%.

Densidade

As equações recomendadas para densidade são (IAEA, 2006):

$$T \leq 1083 \text{ K}$$

$$\rho = 6595,2 - 0,1417 T \quad (40)$$

$$1144 \leq T \leq 1800 \text{ K}$$

$$\rho = 6690 - 0,1855 T \quad (41)$$

Entre las temperaturas 1083 y 1144 la densidad es 0,67% de la densidad recomendada para el zirconium.

3.2.6. Propriedades do Hélio

O calor específico pode ser considerado constante e igual a 5,193 kJ/kg K. A condutividade do hélio pode ser calculada a partir da relação de Von Ubisch (TONG; WEISMAN, 1982):

$$\lambda = 2,517 \cdot 10^{-3} T^{0.72} \quad (42)$$

3.3. CÓDIGOS USADOS PARA LA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

3.3.1. Serpent

Os métodos probabilísticos implementados no código Serpent (versão 2) serão utilizados para os cálculos da análise neutrônica. Serpent é um código de transporte de partículas Monte Carlo tridimensional de energia contínua multiuso, desenvolvido no Centro de Pesquisa Técnica VTT da Finlândia, Ltd. O desenvolvimento começou em 2004, e o código foi distribuído publicamente pelo Banco de Dados da OCDE / NEA e RSICC desde 2009. O Serpent começou como um código de física de reator simplificado, mas as capacidades da versão de desenvolvimento atual, Serpent 2, vão muito além da modelagem do reator. O código pode resolver vários problemas, desde a geração de constantes de grupo até a análise do ciclo de combustível, modelagem do reator e cálculos multifísicos acoplados (SERPENT DEVELOPER TEAM, 2020).

As principais aplicações do código Serpent incluem (LEPPÄNEN, 2008):

- Geração de constantes homogêneas de vários grupos para cálculos de simuladores de reatores determinísticos.
- Estudos de ciclo de combustível, incluindo cálculos detalhados de queima.
- Aplicações de reatores de pesquisa.
- Validação de códigos de transporte de rede determinística.

A simulação não se limita a geometrias de conjuntos bidimensionais e o código também pode ser usado para modelar qualquer configuração tridimensional de núcleo completo. A física da interação cobre todos os tipos de reatores, incluindo sistemas térmicos e de espectro rápido. As principais diferenças estruturais entre o Serpent 1 e

o Serpent 2 estão no tratamento de dados de seção transversal e paralelização. Diferentes modos de otimização foram introduzidos para problemas de cálculo de queima grandes e pequenas. O código é baseado na combinação de MPI (Message Passing Interface) e OpenMP (Open Multi-Processing), que é uma técnica de paralelização de memória compartilhada que permite que o cálculo seja dividido em várias linhas dentro da mesma unidade computacional, sem aumentar a demanda total de memória (ISOTALO, 2013).

A rotina de geometria básica no Serpent é baseada em um modelo de geometria sólida construtiva tridimensional (CSG), que é uma escolha típica para códigos de transporte de partículas Monte Carlo. O modelo é construído a partir de tipos de superfície quadrática e elementais, que são usados para formar células bidimensionais ou tridimensionais. A geometria pode ser dividida em vários níveis usando universos, transformações e estruturas repetidas, como redes quadradas e hexagonais. Além de estruturas regulares, um modelo de geometria estocástica explícita está disponível para lidar com combustíveis particulados distribuídos aleatoriamente usados em reatores de alta temperatura resfriados a gás (HTGR) (SERPENT DEVELOPER TEAM, 2020).

O Serpent usa uma combinação de traçado de raio de superfície a superfície convencional e o método de rastreamento delta de Woodcock para simular o transporte de nêutrons através da geometria. O método de rastreamento delta é essencialmente uma técnica de amostragem de rejeição que permite a travessia aleatória para continuar em várias regiões do material sem parar o nêutron em cada superfície limite. A rotina de geometria é baseada em uma abordagem baseada em universo, muito semelhante a outros códigos de Monte Carlo, como MCNP e KENO-VI (o conceito de universo é equivalente à definição de unidade em ESCALA). Este tipo de modelo de geometria permite a descrição de virtualmente qualquer combustível bidimensional ou tridimensional ou configuração de reator (SERPENT DEVELOPER TEAM, 2020).

A vantagem de usar o rastreamento delta nos cálculos do reator é que o caminho médio livre de nêutrons é geralmente longo em comparação com as dimensões espaciais da geometria e o fato de que os nêutrons podem ser movidos diretamente para o próximo local de colisão (provisório) sem parar a pista em cada cruzamento de limite pode levar a uma aceleração considerável na simulação de

transporte. Para evitar certos problemas de eficiência relacionados à presença de absorvedores pesados localizados, a rotina de transporte muda para o rastreamento de superfície quando a eficiência do circuito de amostragem de rejeição de rastreamento delta torna-se baixa. Na prática, descobriu-se que a diferença na eficiência não é significativa nos cálculos do reator devido à alta densidade de colisão nas regiões de interesse, mas a metodologia é pouco adequada para blindagem e outras aplicações onde as taxas de reação devem ser calculadas em regiões localizadas, longe ou isolado da fonte ativa (LEPPÄNEN, 2008).

A física de interação no Serpent é baseada na cinemática de colisão clássica e nas leis de reação ENDF. O código lê seções transversais de energia contínua e tabelas de probabilidade de ressonância não resolvidas de arquivos de biblioteca de formato ACE, que também são usados por MCNP. As seções de choque de reação são reconstruídas usando uma única rede de energia sindicada para todos os núclídeos. Esta abordagem leva a um aumento dramático na eficiência, especialmente ao modelar combustível irradiado que consiste em mais de 200 seções transversais de actínio e produto de fissão, pois o número de iterações demoradas de busca na grade é minimizado. Para considerar a dependência das interações de nêutrons com a temperatura, o Serpent tem uma rotina de ampliação Doppler embutida que permite que as seções transversais sejam ajustadas para temperaturas mais altas. O acúmulo de veneno do produto de fissão ^{135}Xe pode ser simulado sem executar um cálculo de queima em escala real usando uma rotina de iteração embutida. O código calcula as concentrações de equilíbrio de ^{135}Xe e ^{135}I a partir das taxas de produção, decomposição e absorção dos isótopos durante a simulação de transporte (SERPENT DEVELOPER TEAM, 2020).

O cálculo de queima é um processo cíclico que consiste em duas etapas. A primeira etapa é o ciclo de transporte, no qual as taxas de todas as reações de transmutação induzidas por nêutrons são calculadas, neste caso, usando técnicas padrão de Monte Carlo. Esses dados são então combinados com constantes de decaimento radioativo e rendimentos de produtos de fissão, lidos em bibliotecas de dados nucleares. As mudanças isotópicas nos materiais irradiados são descritas pelas equações de Bateman (LEPPÄNEN, 2008):

$$\frac{dN_j}{dt} = \sum_{i \neq j} \lambda_{ij} N_i - \lambda_j N_j \quad N_j(0) = N_0 \quad j = 1, \dots, n \quad (43)$$

Onde N_j é a densidade atômica do nuclídeo j , n é o número total de nuclídeos e λ_{ij} são os coeficientes de transmutação generalizados que caracterizam as taxas de reações induzidas por nêutrons e decaimento radioativo espontâneo. A segunda etapa do processo consiste na resolução dessas equações, após que o procedimento é repetido com as composições de materiais atualizadas.

Os coeficientes λ_{ij} são considerados constantes ao longo de cada etapa da queima. As taxas de reação usadas no cálculo são, portanto, características do espectro de fluxo no início de cada etapa, que pode levar a uma subestimação dos efeitos de autoproteção conforme aumentam as concentrações de nuclídeos. Este erro pode ser compensado reduzindo o tamanho do passo. Outra solução amplamente utilizada é o método preditor-corretor, no qual os coeficientes de transmutação são corrigidos repetindo o cálculo de transporte usando as composições de material (previstas) no final da etapa e tomando a média dos dois conjuntos de valores. O método preditor-corretor é usado por padrão no código Serpent (LEPPÄNEN, 2008).

Cálculo de seções transversais de transmutação de um grupo

As constantes de transmutação para reações induzidas por nêutrons podem ser escritas como o produto do fluxo de nêutrons (ϕ) de um grupo e a seção transversal microscópica de um grupo para a transmutação $i \rightarrow j$:

$$\lambda_{ij} = \phi \sigma_{ij} \quad (44)$$

O fluxo depende da normalização e a seção transversal é calculada pela média da seção transversal microscópica de energia contínua correspondente ao longo do espectro de fluxo no material irradiado (LEPPÄNEN, 2008):

$$\sigma_{ij} = \frac{\int_V \int_E \phi(r,E) \sigma_{ij}(E) d^3r dE}{\int_V \int_E \phi(r,E) d^3r dE} \quad (45)$$

As integrais são calculadas usando estimadores de fluxo Monte Carlo padrão. Os dados de interação de nêutrons estão disponíveis para quase 300 actínídeos e produtos de fissão.

Para a fissão, os coeficientes de transmutação de um grupo são definidos como (LEPPÄNEN, 2008):

$$\lambda_{ij} = \gamma_{ij} \phi \sigma_{fj} \quad (46)$$

Onde $\phi \sigma_{fj}$ é a seção transversal de fissão total de um grupo para o actínídeo i e γ_{ij} é o rendimento do produto de fissão j . Serpent lê dados de rendimento de fissão

de arquivos de formato ENDF. Os rendimentos são dependentes de energia e geralmente tabulados para duas ou três energias de nêutrons diferentes. A interpolação linear é usada entre os pontos para calcular rendimentos efetivos correspondentes ao espectro de fluxo. Os coeficientes de transmutação para decaimento radioativo são iguais à constante de decaimento multiplicada pela razão de ramificação para a reação $i \rightarrow j$. Esses dados, junto com os valores de calor de deterioração, são lidos dos arquivos em formato ENDF.

Quando as equações de Bateman são escritas para cada nuclídeo, o resultado é um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem acopladas. Os acoplamentos entre os nuclídeos formam cadeias de transmutação longas e complicadas com vários ramos. As magnitudes dos coeficientes de transmutação variam amplamente e as meias-vidas correspondentes variam de milissegundos a bilhões de anos. Além disso, o intervalo de tempo varia. Quando o combustível é irradiado no reator, o intervalo de tempo é geralmente contado em dias. Para um cálculo de inventário radioativo, o intervalo de tempo pode se estender a milhares ou até milhões de anos. A complexidade das equações de esgotamento e os problemas numéricos decorrentes da ampla variação dos coeficientes inspiraram várias soluções ao longo dos anos. Serpent tiene dos métodos integrados para resolver estas ecuaciones de agotamiento. A primeira opção é o método da cadeia linear, também chamado de Transmutation Path Analysis (TTA). A segunda alternativa, usada por padrão, é o Método de Aproximação Racional de Chebyshev (CRAM), uma solução exponencial de matriz avançada desenvolvida especificamente para o código Serpent (SERPENT DEVELOPER TEAM, 2020).

As equações de Bateman podem ser resolvidas analiticamente se as complicadas cadeias de transmutação forem primeiro resolvidas em um conjunto de subcadeias lineares, ou trajetórias. Esta é a ideia do método de Análise de Trajetória de Transmutação (TTA). De acordo com a teoria, a concentração do nuclídeo k em uma cadeia linear a partir do nuclídeo 1 é dada por (LEPPÄNEN, 2008):

$$N_k(t) = \frac{N_1(0)}{\lambda_k} \sum_{i=1}^k \lambda_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j - \lambda_i} \right) \exp(-\lambda_i t) \quad (47)$$

Onde $N_1(0)$ é a concentração do nuclídeo inicial em $t = 0$. A vantagem do método TTA é que nem a grande variação nos coeficientes de transmutação nem a duração do intervalo de tempo têm qualquer impacto na precisão numérica do cálculo. O método também é relativamente fácil de implementar em sua forma básica, usando

um loop recursivo. O principal problema do TTA, da forma como está atualmente implementado no código Serpent, é que o método não pode tratar cadeias que formam um ciclo fechado. A equação quebra se o mesmo nuclídeo for encontrado duas vezes na cadeia, o que ocorre, por exemplo, com reações consecutivas (n, γ) e $(n, 2n)$. Cortes devem ser aplicados para encerrar cadeias sem importância, o que complica as rotinas de cálculo e pode levar a resultados inesperados devido à perda de dados (LEPPÄNEN, 2008).

Talvez a abordagem mais popular para resolver as equações de Bateman seja formular o problema em notação de matriz a:

$$n' = An \quad n(0) = n_0$$

Onde $n(t) \in R^n$ é o vetor de concentração e $A \in R^{n \times n}$ é a matriz de queima contendo os coeficientes de decaimento e transmutação dos nuclídeos no material irradiado. A solução geral deste sistema pode ser escrita:

$$n(t) = e^{At} n_0 \quad (48)$$

Onde o exponencial da matriz At é definido pela expressão da série de potências:

$$e^{At} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (At)^k \quad (49)$$

E $A^0 = I$ é a matriz identidade.

Existem vários algoritmos para calcular a matriz exponencial, mas muitos deles são inadequados para cálculos de queima, onde os coeficientes de decaimento e transmutação variam amplamente. Esta abordagem é ideal na medida em que permite grandes autovalores arbitrários em todo o eixo real negativo e pode, portanto, tratar prontamente até mesmo os nuclídeos de vida curta simultaneamente com os nuclídeos de vida longa. Além disso, o valor do intervalo de tempo máximo prático pode ser usado sem comprometer a precisão computacional. Também é computacionalmente muito eficaz, tornando-se um método atraente para resolver as equações de Bateman (LEPPÄNEN, 2008).

3.3.2. OpenFOAM

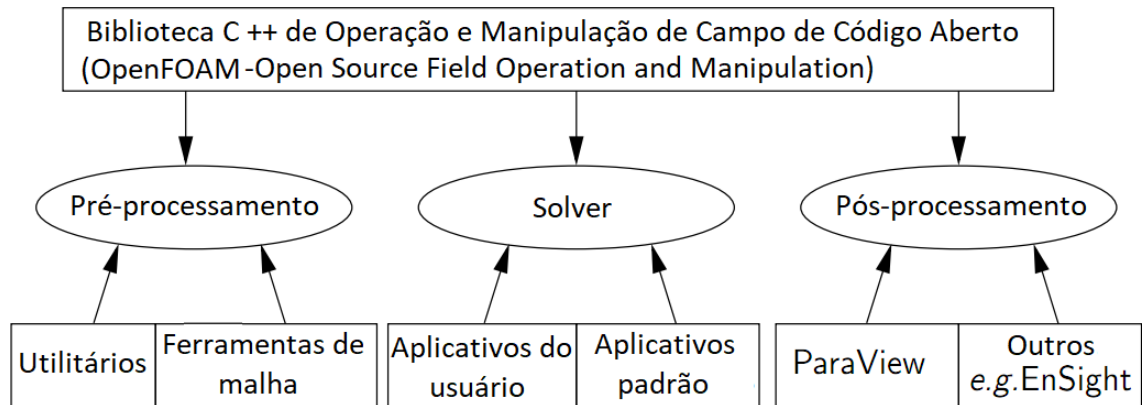
Para o estudo termohidráulico, o código OpenFOAM foi escolhido. OpenFOAM foi criado por Henry Weller em 1989 sob o nome de "FOAM" e foi lançado como um programa freeware sob o nome de "OpenFOAM" por Henry Weller, Chris Greenshields e Mattijs Janssens em dezembro de 2004, através da OpenCFD, a empresa que eles

fundaram. Desde então, o OpenFOAM continuou a ser gerenciado e desenvolvido com novas versões lançadas ao público a cada ano. É organizado em um conjunto de módulos C ++ que permitem a resolução de problemas, desde fluxos de fluidos complexos envolvendo reações químicas, turbulência e transferência de calor, até acústica, mecânica dos sólidos e eletromagnética (OPENFOAM, 2020).

OpenFoam é atualizado profissionalmente a cada seis meses para incluir desenvolvimentos patrocinados pelo cliente e contribuições da comunidade. Ele é testado de forma independente por especialistas em aplicativos do tipo OpenCFD do ESI Group (Engineering System International), parceiros de desenvolvimento e clientes selecionados, e é respaldado pela infraestrutura global, valores e compromisso do Grupo ESI. A garantia de qualidade é baseada em testes rigorosos projetados para avaliar o comportamento de regressão, uso de memória, desempenho de código e escalabilidade, antes que novas versões sejam lançadas. O OpenFOAM inclui ferramentas para criar malha em torno de geometrias complexas e para processamento e visualização de dados e muito mais. Quase todos os cálculos podem ser executados em paralelo como padrão para tirar o máximo proveito dos processadores multicore e computadores com multiprocessadores de hoje (OPENFOAM, 2020).

O OpenFOAM é antes de tudo uma biblioteca C ++, usada principalmente para criar executáveis, conhecidos como aplicativos. Os aplicativos se enquadram em duas categorias: solucionadores, cada um projetado para resolver um problema específico na mecânica do contínuo; e utilitários, que são projetados para executar tarefas que envolvem manipulação de dados. Novos solucionadores e utilitários podem ser criados por seus usuários com algum conhecimento pré-requisito do método subjacente, física e técnicas de programação envolvidas. O OpenFOAM é fornecido com ambientes de pré e pós-processamento. A interface para o pré e pós-processamento são utilitários OpenFOAM, garantindo assim o manuseio consistente de dados em todos os ambientes. A estrutura geral do OpenFOAM é mostrada na Figura 22.

Figura 22. Visão geral da estrutura do OpenFOAM



Fonte: Adaptado de OPENFOAM (2020)

O formato de entrada/saída dos arquivos é projetado para ser extremamente flexível para permitir ao usuário modificar a entrada/saída em aplicativos OpenFOAM tão facilmente quanto possível. A entrada/saída segue um conjunto simples de regras que tornam os arquivos extremamente fáceis de entender, ao contrário de muitos pacotes de software comerciais cujo formato de arquivo pode ser intuitivamente difícil de entender (OPENFOAM, 2020).

O método de computação paralela usado pelo OpenFOAM é conhecido como decomposição de domínio, no qual a geometria e os campos associados são divididos em pedaços e alocados em processadores separados para solução. O processo de computação paralela envolve: decomposição de malha e campos; executando o aplicativo em paralelo; e pós-processamento do caso decomposto. A execução paralela usa a implementação openMPI de domínio público da interface de passagem de mensagem padrão (MPI) (OPENFOAM, 2020).

A malha e os campos são decompostos usando o utilitário `decomposePar`. O objetivo básico é quebrar o domínio com esforço mínimo, mas de forma a garantir uma solução bastante econômica. A geometria e os arquivos são divididos de acordo com um conjunto de parâmetros especificados em um dicionário denominado `decomposeParDict` que deve estar localizado no diretório do sistema do caso de interesse. O usuário pode escolher entre quatro métodos de decomposição, especificados pela palavra-chave do método:

simple: decomposição geométrica simples em que o domínio é dividido em partes por direção, por ex. 2 peças na direção x, 1 na direção y e etc.

hierarchical: decomposição geométrica hierárquica que é igual a simples, exceto pelo usuário especificar a ordem em que a divisão direcional é feita, por exemplo, primeiro na direção y, depois na direção x etc.

scotch: decomposição Scotch que não requer entrada geométrica do usuário e tenta minimizar o número de limites do processador. O usuário pode especificar um peso para a decomposição entre processadores, por meio de um processo opcional ou palavra-chave.

manual: decomposição manual, onde o usuário especifica diretamente a alocação de cada célula para um determinado processador.

Ao pós-processamento de casos que foram executados em paralelo, o usuário pode:

- reconstruir a malha e os dados de campo para recriar o domínio e os campos completos, que podem ser pós-processados normalmente.
- pós-processar cada segmento do domínio decomposto individualmente.
- usar o ParaView por meio da opção paraFoam -vtk e selecione o decomposedCase da GUI em que o caso será montado internamente

Definição das condições de contornos

A fronteira da malha é fornecida em uma lista chamada Boundary. A fronteira é dividida em patches (regiões), onde cada patch na lista tem seu nome como palavra-chave, que é a escolha do usuário. Um patch pode incluir uma ou mais áreas encerradas no contorno da superfície que não precisam necessariamente estar fisicamente conectadas. Os tipos de patch são especificados na malha e nos arquivos de campo de um caso OpenFOAM. As palavras-chave usadas para especificar os tipos básicos e geométricos no OpenFOAM estão resumidas na Tabela 11.

Tabela 11. Tipos de patch básicos.

Chave de seleção	Descrição
Path	O tipo de path básico para uma condição de patch que não contém informações geométricas ou topológicas sobre a malha (com exceção da parede), por exemplo, uma entrada ou uma saída.
SymmetryPlane	Plano de simetria

Empty	Embora o OpenFOAM sempre gere geometrias em 3 dimensões, ele pode ser instruído a resolver em 2 (ou 1) dimensões especificando uma condição vazia especial em cada patch cujo plano é normal para a 3ª (e 2ª) dimensão para a qual nenhuma solução é necessária.
Wedge	Para casos axi-simétricos bidimensionais, por ex. um cilindro, a geometria é especificada como uma cunha de pequeno ângulo
Cyclic	Usado para geometrias repetidas, por exemplo feixes de tubos de trocador de calor.
Wall	Existem casos em que um patch que coincide com uma parede precisa ser identificável como tal, particularmente quando a modelagem especializada é aplicada nos limites da parede. Usado para funções de parede em fluxo turbulento.
Processor	Se um código estiver sendo executado em paralelo, em vários processadores, a malha deve ser dividida para que cada processador calcule aproximadamente o mesmo número de células. Os limites entre as diferentes partes da malha são chamados de limites do processador.

Os usuários devem especificar as condições de contorno para cada campo resolvido. As condições de contorno são organizadas em categorias para facilitar a navegação, compreendendo (OPENFOAM, 2020):

Basic: Tipos básicos.

- fixedValue
- fixedGradient
- mixed

Constraint: Restrições geométricas.

- Symmetry
- Wedge
- Empty
- Cyclic

Derived: Condições especializadas

- fixedProfile: para especificar um perfil de uma variável.
- swirlFlowRateInletVelocity: para especificar a entrada de velocidade para um fluxo turbulento fornecendo taxa de fluxo
 - inletOutlet: condição de saída com manuseio de fluxo reverso
 - codedFixedValue: valor fixo definido pela codificação do usuário

Ao todo, existem mais de 70 condições de contorno.

Modelos termofísicos

Os modelos termofísicos são usados para descrever casos onde a energia térmica, compressibilidade ou transferência de massa são importantes. O OpenFOAM permite que as propriedades termofísicas sejam constantes, ou funções de temperatura, pressão e composição. A energia térmica pode ser descrita na forma de entalpia ou energia interna. A relação $p - v - T$ pode ser descrita com várias equações de estado ou como sistema isobárico. O dicionário `thermophysicalProperties` é lido por qualquer solucionador que usa a biblioteca de modelos termofísicos. Um modelo termofísico é construído no OpenFOAM como um sistema de pressão-temperatura $p - T$ a partir do qual outras propriedades são calculadas. Existe uma entrada de dicionário obrigatória chamada `thermoType` que especifica o modelo termofísico completo que é usado na simulação. A modelagem termofísica começa com uma camada que define a equação básica de estado e, em seguida, adiciona outras camadas para a modelagem termodinâmica, transporte e mistura. As propriedades termofísicas básicas são especificadas para cada espécie a partir dos dados de entrada (OPENFOAM, 2020).

Modelos de turbulência

O dicionário `turbulenceProperties` é lido por qualquer solucionador que inclua modelagem de turbulência. Dentro desse arquivo está a palavra-chave `simulationType` que controla o tipo de modelagem de turbulência a ser usado:

Laminar: não usa modelos de turbulência

RANS: usa modelagem de tensão média de Reynolds (RANS).

LES usa os modelos de turbulência Simulação das Grandes Escalas (LES, Large Eddy Simulation) ou Simulação dos Vórtices Desprendidos (DES, Detached Eddy Simulation).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos para o núcleo do IPWR SMR proposto. O capítulo está dividido em duas partes. Na primeira são apresentados os resultados obtidos para o cálculo dos parâmetros neutrônicos, os quais foram calculados através do programa Serpent. Na segunda são apresentados os resultados do cálculo dos parâmetros termohidráulicos, utilizando o programa OpenFoam.

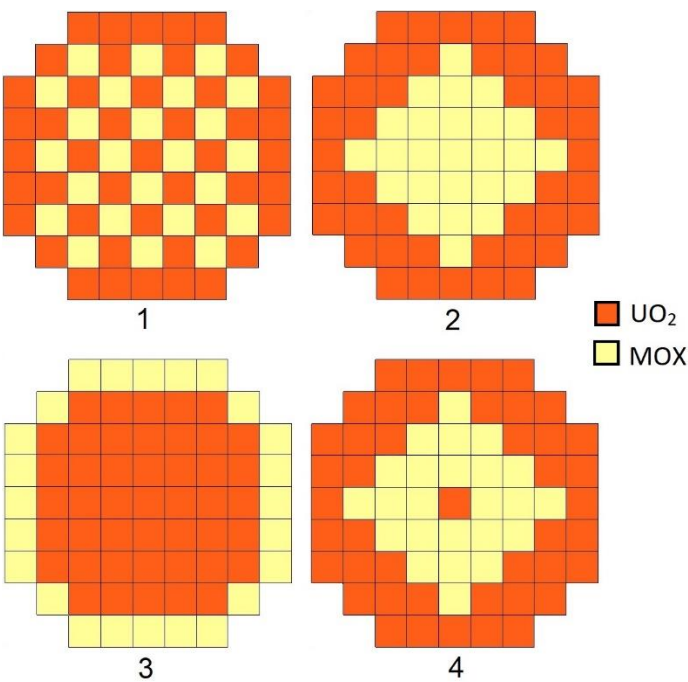
4.1. RESULTADOS NEUTRÔNICOS

4.1.1. Cálculos neutrônicos do núcleo sem absorventes queimáveis

Como primeiro estudo foram estudadas diferentes configurações para a distribuição do combustível MOX no núcleo do SMR tipo IPWR. O núcleo foi considerado parcialmente carregado com combustível MOX, para garantir um ciclo prolongado de 48 meses. Seguindo esse objetivo, um terço do núcleo (aproximadamente 24 conjuntos) possui combustível MOX, e o restante combustível UO_2 , com enriquecimento de 4,95% em peso de ^{235}U . Quatro padrões de carregamento de conjuntos de combustível MOX foram investigados para estudar os ciclos de combustível propostos (Figura 23). O critério de seleção do padrão de carga foi obter valores máximos dos fatores de potência radial de pico no núcleo, durante o ciclo do combustível, iguais ou inferiores aos obtidos para o caso de referência em que todos os conjuntos possuem combustível UO_2 . Os cálculos para o caso de referência foram realizados em (ROSALES GARCÍA *et al.*, 2018).

A Tabela 12 apresenta os resultados, no estado BOC, obtidos para os valores de k_{eff} e os coeficientes de potência máxima de pico para as quatro configurações analisadas. O último padrão de carga foi o que melhor atendeu ao requisito imposto. Em seguida, decidiu-se simular os ciclos de combustível com as diferentes composições de combustível MOX propostas utilizando essa distribuição.

Figura 23. Configurações estudadas para distribuição de conjuntos com combustível MOX no núcleo.



Fonte: A autora (2025)

Tabela 12.Resultados, no estado BOC, obtidos para os valores de keff e os coeficientes de potência máxima de pico para as quatro configurações analisadas

	ThPu		ThU		ThUPu		UO ₂	
Núcleo	Keff	FP _{max}	Keff	FP _{max}	Keff	FP _{max}	Keff	FP _{max}
1	1,24023	1,53	1,29855	1,83	1,23027	1,48	1,33658	1,63
2	1,24428	1,46	1,28843	1,4	1,23967	1,45		
3	1,32904	2,35	1,33426	2,14	1,32823	2,39		
4	1,24583	1,42	1,29025	1,38	1,24023	1,44		

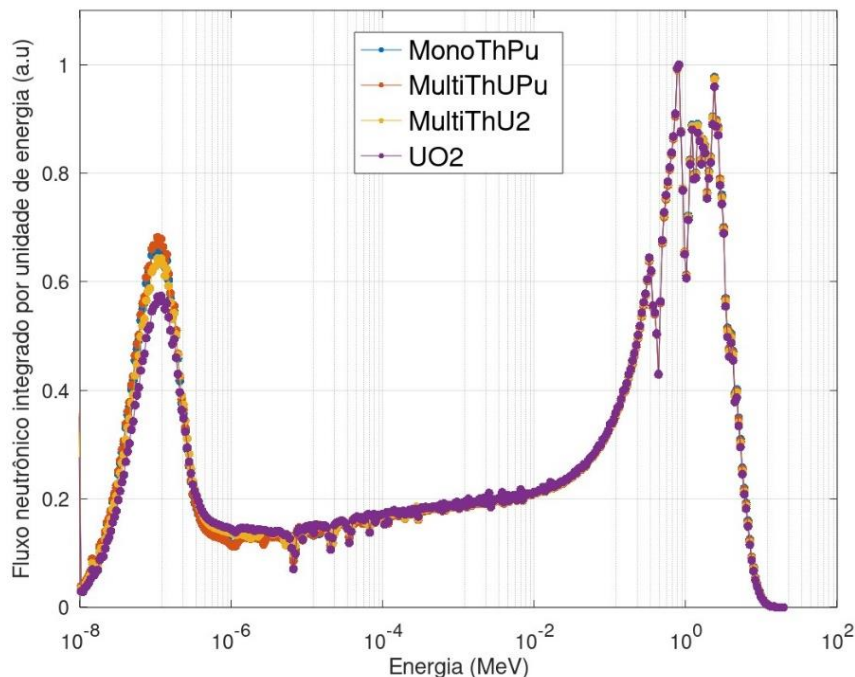
4.1.2. Calculo do espectro neutrônico

O uso de combustível MOX no núcleo do iPWR proposto modifica o espectro de fluxo de nêutrons em relação ao caso de referência que usa totalmente combustível UO_2 . A Figura 24 mostra o espectro de nêutrons para todas as composições consideradas. O espectro foi normalizado para um valor integrado de energia. O eixo

das abcissas considera intervalos de letargia de igual largura para contar os nêutrons detectados. Para a contagem foram considerados 500 intervalos. Nos cálculos de autovalores, 50 mil histórias e 500 ciclos foram considerado, atingindo um desvio padrão inferior a 15 pcm em todos os casos.

Um efeito de endurecimento do espectro de nêutrons devido à introdução de plutônio é notado na diminuição do valor máximo na região térmica, bem como uma ligeira mudança em direção a valores de energia mais altos. O espectro de nêutrons mais próximo do caso padrão é o do MultiThU2, que é uma composição que não contém plutônio. A maior dureza do espectro corresponde ao menor excesso de reatividade no início do ciclo (BOC), que analisaremos a seguir.

Figura 24. Espectro de nêutrons para os casos considerados



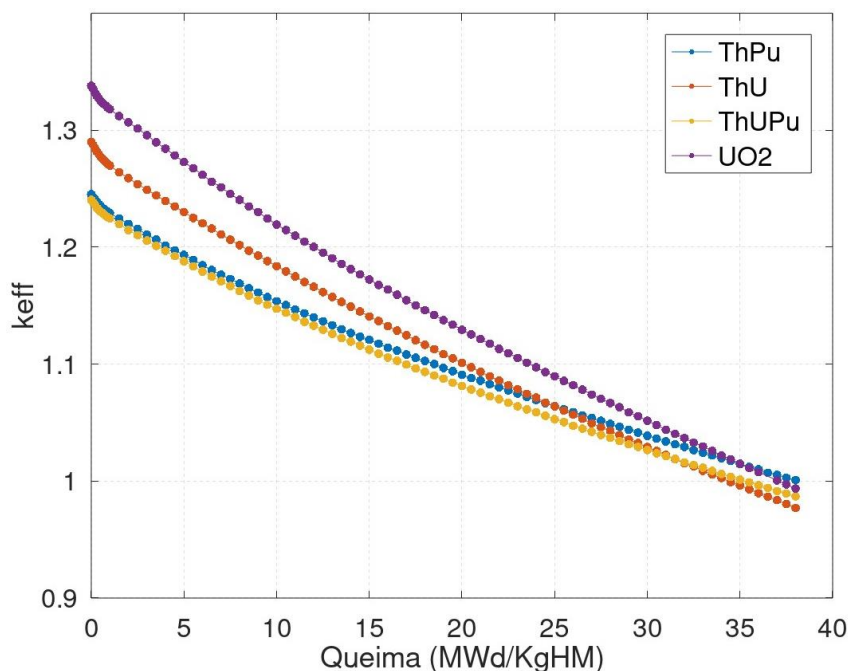
Fonte: A autora (2025)

4.1.3. Ciclo de combustível

Usando o padrão de carga de combustível previamente selecionado e considerando as três composições propostas para combustíveis MOX e o caso com todos os conjuntos de combustíveis com UO₂, os ciclos de combustível estendidos do iPWR proposto foram simulados. A Figura 25 mostra a variação do fator de

multiplicação efetivo (K_{eff}) em relação a queima do combustível para as diferentes composições de combustível (MOX e caso de referência).

Figura 25. Valores do fator de multiplicação efetivo (K_{eff}) versus queima do combustível para os casos simulados.



Fonte: A autora (2025)

A Tabela 13 fornece o valor de excesso de reatividade em pcm no início do ciclo, a queima final alcançada e a duração do ciclo para cada caso simulado. Em todos os cálculos, K_{eff} foi estimado com menos de 14 pcm de incerteza. Os valores médios de queimado do núcleo para os ciclos de combustível propostos estão entre 34 e 38 MWd/KgHM. O ciclo de referência, usando UO_2 como combustível, tem uma duração de aproximadamente 4 anos. No entanto, apresenta o maior excesso de reatividade inicial a ser controlado, exigindo uso de barras de controle e absorvedores queimáveis. As configurações de combustível usando plutônio reciclado têm menor excesso de reatividade inicial. Os ciclos de combustível que usam urânio reciclado alcançam durações menores. No caso do MultiThU2, está um pouco longe dos 48 meses esperados. Nessa composição seria possível aumentar a proporção de massa do urânio reciclado para obter um ciclo de combustível mais longo.

Tabela 13. Resultados dos parâmetros do ciclo de combustível para as composições de combustível simuladas.

Misturas	Número de Conjuntos MOX	Reatividade no BOC (pcm)	Queima (MWd/KgHM) e duração do ciclo (anos)
MonoThPu	24	24312	38,00 / 3,99
MultiThUPu	24	23807	35,00 / 3,68
MultiThU2	24	28713	34,00 / 3,55
UO2	-	33505	37,00 / 3,98

4.1.4. Fatores de pico radial de potência do núcleo

Um dos parâmetros a serem avaliados ao propor composições de núcleo com combustíveis MOX são os fatores de pico radial de potência (PFs). Sabe-se que o projeto original do núcleo iPWR proposto com UO₂ completo atinge fatores de pico radial de potência de núcleo relativamente altos em relação aos PWRs padrão (ROSALES GARCÍA *et al.*, 2018). Isso se deve às dimensões reduzidas do núcleo e ao alto enriquecimento utilizado, necessário para obter o comprimento esperado para o ciclo de combustível estendido. O objetivo do projeto do núcleo com as novas propostas para o uso do combustível MOX é não exceder os PFs obtidos para o caso de referência.

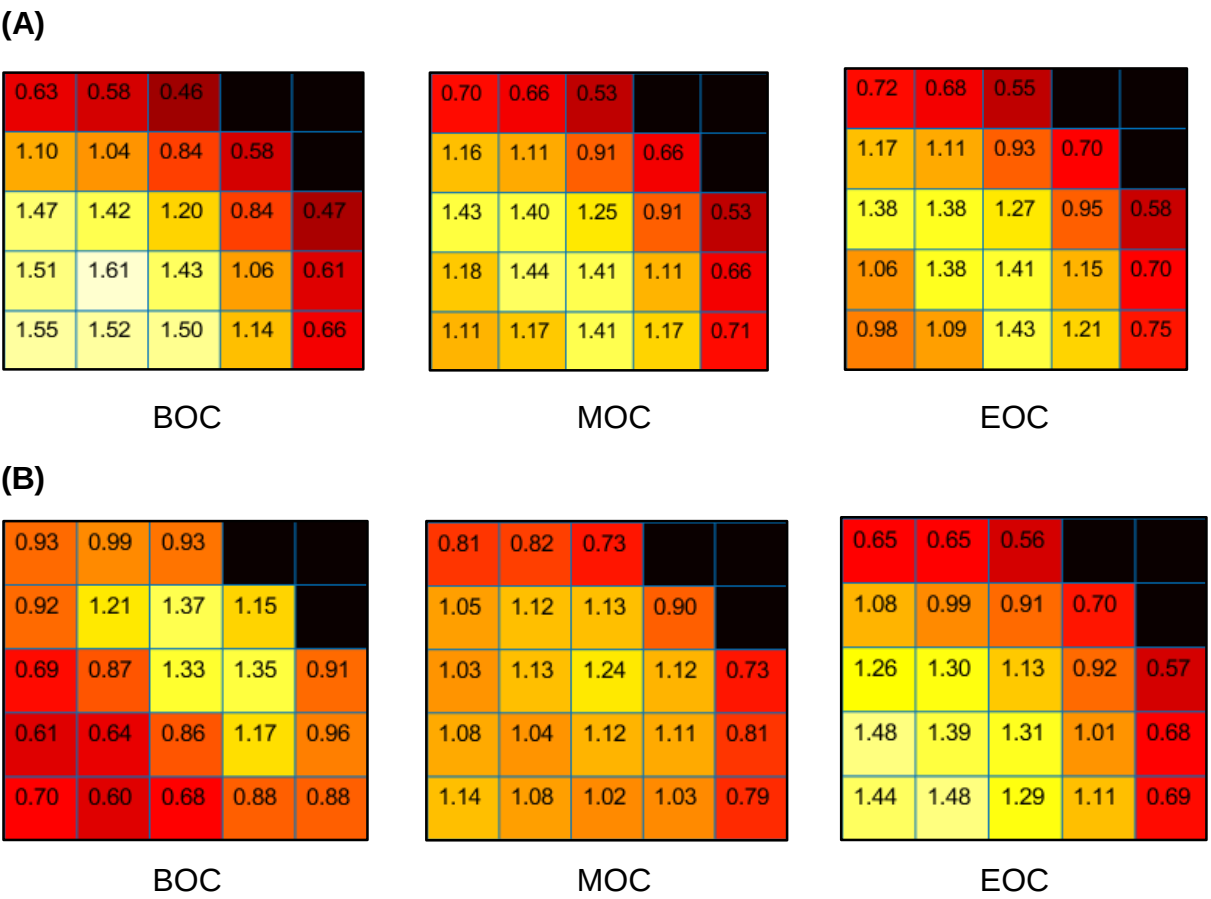
A Figura 26 mostra as distribuições dos fatores de pico de potência radial do núcleo em simetria de quarto, no BOC, no meio do ciclo (MOC) e no EOC para os quatro casos estudados. Analisando a Figura 26.(A) para o caso com UO₂, o valor máximo de PF diminui com o aumento da queima do combustível e se move em direção a um conjunto de combustível na zona intermediária do núcleo. O valor mais alto é alcançado no BOC e é igual a 1,61.

No caso em que o combustível MOX foi usado com plutônio da primeira reciclagem (MonoThPu Figura 26.B), o valor máximo de PF no BOC está localizado em um conjunto de combustível intermediário composto por UO₂. Quando a depleção aumenta, o perfil de liberação de energia radial se achata. No EOC, o valor máximo de PF é maior do que no BOC e se move em direção aos conjuntos centrais compostos de combustível MOX. Os valores máximos de PF obtidos ao longo de todo o ciclo são sempre menores do que o caso de referência.

Para os casos usando combustível multi-reprocessado misturado com tório, um perfil de energia radial liberada mais plano é obtido. Os valores máximos de PF obtidos

foram 1,41 para o caso MultiThUPu (Figura 26.C) e 1,40 para o caso MultiThU2 (Figura 26.D), ambos em BOC. Para todas as configurações estudadas usando combustível MOX, valores máximos de PF menores do que aqueles alcançados para o caso de referência são obtidos.

Figura 26. (A) Fatores de pico de potência radial no BOC, MOC, EOC para o caso de referência de UO2. (B) Fatores de pico de potência radial em BOC, MOC, EOC para o caso MonoThPu. (C) Fatores de pico de potência radial em BOC, MOC, EOC para o caso MultiThUPu. (D) Fatores de pico de potência radial em BOC, MOC, EOC para o caso MultiThU2.



(C)



BOC



MOC



EOC

(D)



BOC



MOC



EOC

Fonte: A autora (2025)

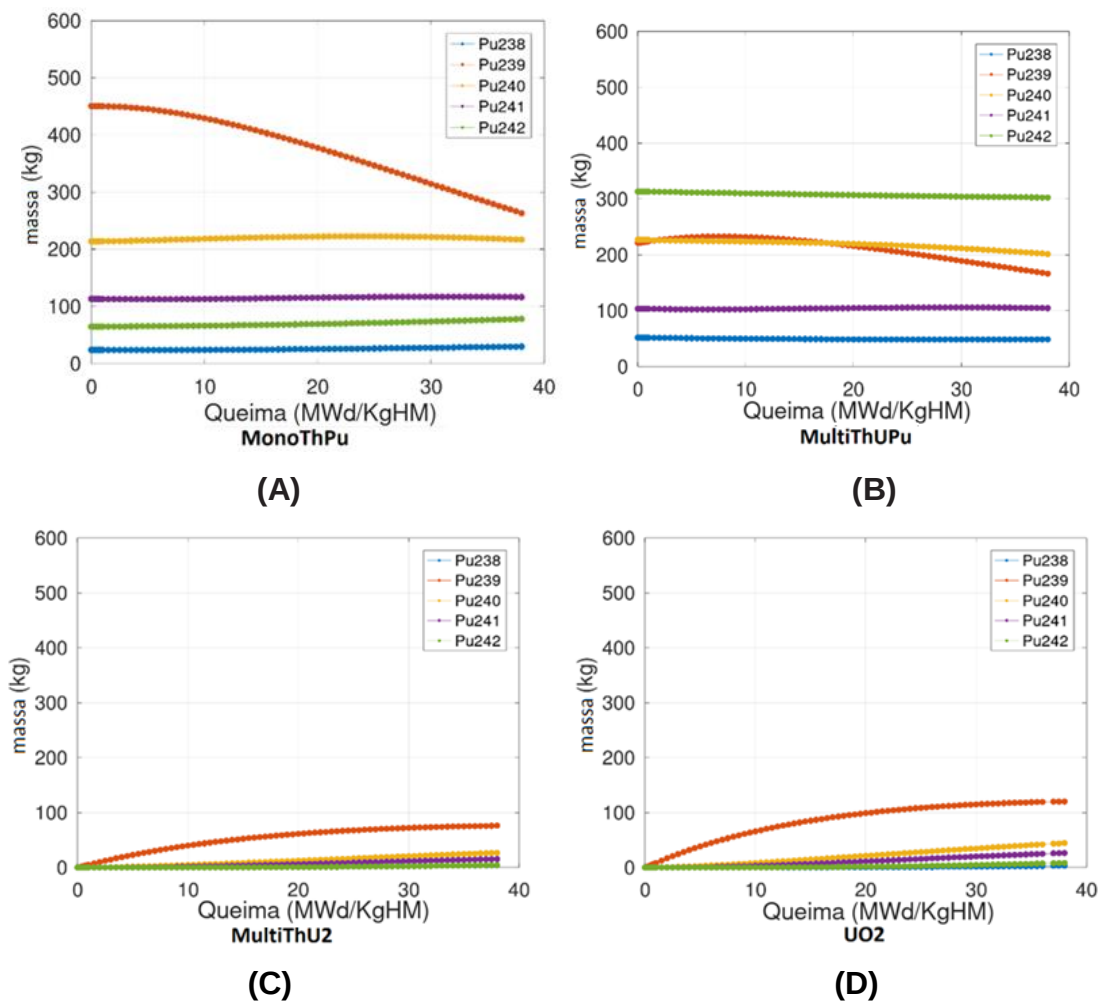
4.1.5. Análise da queima do combustível no núcleo

O uso do combustível MOX busca reduzir os estoques de plutônio e MA. Além disso, é possível produzir energia com os isótopos físséis acumulados no combustível reciclado. A comparação do comportamento dos diferentes ciclos de combustível propostos em relação às variações das massas dos isótopos de plutônio com o aumento do queimado para todo o núcleo permite a verificação do cumprimento deste objetivo. A Figura 27 mostram as dependências das massas dos isótopos de plutônio com os valores de queimado nas composições de combustível analisadas neste estudo. Aqui, as massas dos isótopos de plutônio dos conjuntos de combustível MOX e aquelas dos conjuntos de combustível UO₂ que completam o núcleo são consideradas. Na mistura MonoThPu (Figura 27.A), observamos que o uso de tório como material fértil reduz a massa inicial de ²³⁹Pu em até 59%. Os outros isótopos de plutônio demonstram uma pequena variação com a queima.

No caso que usam plutônio de multi-reciclagem (MultiThUPu Figura 27.D), os vetores de isótopos de plutônio têm uma alta proporção de ²⁴⁰Pu e ²⁴²Pu.

Considerando todos os conjuntos de combustível, MOX e UO₂, há uma ligeira redução de ambos os isótopos com o queimado até 91% em MultiThUPu para ²⁴⁰Pu, e, até 97% para ²⁴²Pu. O acúmulo de isótopos de plutônio no caso MultiThU2 (Figura 27) mostra comportamento qualitativo semelhante ao caso padrão de UO₂, embora quantitativamente muito menor, devido à ausência de ²³⁸U no combustível MOX.

Figura 27. Massas de isótopos de plutônio versus queima do combustível para as composições de combustível do núcleo estudadas (A, B e C).



Fonte: A autora (2025)

Um dos parâmetros que caracteriza a eficiência do ciclo de combustível em reatores de fissão é o fator de conversão. Sabe-se que para reatores nucleares que trabalham com espectro térmico esse fator é sempre menor que 1. Especificamente, para reatores LWR, onde o moderador é um absorvedor relativamente forte de nêutrons térmicos, o fator de conversão médio será próximo de 0,6 (BROWN; WORRALL; TODOSOW, 2017). Para analisar o comportamento do fator de conversão

para as diferentes composições propostas, foi calculado como a relação entre a taxa de produção físsil e a taxa de perda físsil. A taxa de produção físsil inclui reações (n, gama) com ^{232}Th , ^{232}U , ^{234}U , ^{238}U , ^{238}Pu e ^{242}Pu , e reações (n, 2n) com ^{234}U , ^{236}U , ^{240}Pu e ^{242}Pu . A taxa de perda físsil inclui reações de fissão com ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu e ^{241}Pu , captura e reações (n, xn) com os mesmos isótopos físseis.

A Tabela 14 fornece os valores do fator de conversão no EOC para as composições de combustível propostas. Em todos os casos, pode-se observar que os valores são ligeiramente maiores do que o caso de referência. Além disso, os valores mais altos são obtidos para os casos com multi-reprocessamento.

Tabela 14. Fator de conversão para composições de combustível propostas

UO2	MonoThPu	MultiThUPu	MultiThU2
0,61	0,63	0,64	0,67

Uma das questões que podem ser analisadas quando o combustível MOX é queimado é a variação no vetor de isótopos de plutônio, que impacta na nova etapa hipotética de reciclagem. A Tabela 15 mostra os valores inicial e final dos vetores de isótopos de plutônio para as quatro composições usando plutônio reciclado. Nos casos de primeira reciclagem, observa-se um aumento na fração de ^{238}Pu , aproximando-se da fração dos casos multi-reprocessados. O ^{239}Pu tem sua diminuição mais significativa quando o isótopo fértil é o tório. No caso de reprocessamento múltiplo com tório como isótopo fértil e urânio e plutônio como combustível reprocessado (MultiThUPu), o isótopo que aumenta significativamente sua participação no vetor de composição é ^{242}Pu . Isso se deve à alta razão captura-fissão do isótopo ^{241}Pu , o valor calculado foi de 0,36.

Tabela 15. Vetor de isótopos de plutônio, no início do ciclo (BOC) e no fim do ciclo (EOC) para composições que usam plutônio.

	MonoThPu		MultiThUPu	
	BOC	EOC	BOC	EOC
Pu238	2,70	4,84	5,58	6,59
Pu239	51,06	32,03	23,91	13,61
Pu240	24,22	32,90	24,51	25,21
Pu241	12,80	17,45	11,16	12,66
Pu242	7,30	12,77	33,80	41,93
Am241	1,92		1,04	

A Tabela 16 permite a comparação das mudanças no vetor de isótopos de urânio e a porcentagem de variação nas massas de isótopos de urânio para os dois casos que usam reciclagem múltipla e tório como material fértil. Na composição do combustível MultiThUPu, obtém-se uma variação muito pequena do vetor de isótopos de urânio. O isótopo físsil ^{233}U tem uma massa muito pequena, pois coexiste com ^{239}Pu . Isso é causado pela baixa participação, apenas 5%, de urânio reciclado na mistura. A razão captura-fissão do ^{233}U é a mais baixa de todos os isótopos físeis (menor que 0,15), o que caracteriza sua eficiência no espectro de nêutrons considerado. No caso do MultiThU2, há a maior redução do isótopo ^{233}U , pois aqui ele é praticamente o único isótopo físsil presente.

Tabela 16. Vetores de isótopos de urânio e porcentagem de variação das massas de isótopos de urânio.

	MultiThUPu				MultiThU2			
	Vetor BOC	Vetor EOC	Variação (%)	Massa Final (gr/tn)	Vetor BOC	Vetor EOC	Variação (%)	Massa Final (gr/tn)
U238	0,03	0,03	103	15	0,09	0,12	101	63
U237		0,01		6		0,02		11
U236	9,03	9,14	101	4479	12,97	16,37	98	8881
U235	11,69	12,01	97	5883	7,21	8,70	94	4719
U234	26,45	26,39	88	12927	29,63	35,01	92	18995
U233	52,59	52,23	103	25583	49,79	39,51	62	21437
U232	0,21	0,19	88	92	0,31	0,28	70	151

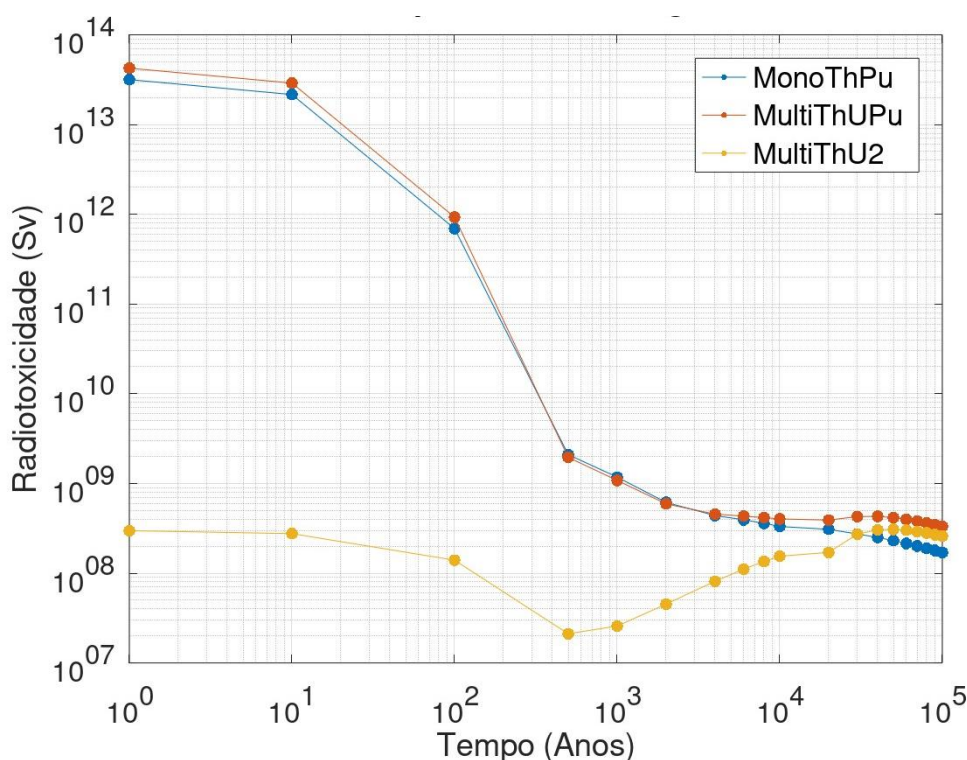
A Tabela 17 mostra as massas finais acumuladas para os principais MAs nas composições de combustível MOX. Nos casos com combustível de uma primeira reciclagem de plutônio, valores de massa final muito semelhantes são obtidos. Com exceção do ^{237}Np , que é formado a partir do ^{236}U e aparece menos em combustíveis sem urânio. Nos casos com multirreciclagem de plutônio, as massas finais dos isótopos de amerício e ^{244}Cm são maiores. Na composição de combustível MultiThU2 que não contém plutônio nem o isótopo ^{238}U , as massas de AMs acumuladas são esparsas, e apenas uma quantidade apreciável de ^{237}Np se acumula.

Tabela 17. Massas finais (gr) de actínídeos menores por TnHM inicial.

MA	MonoThPu	MultiThUPu	MultiThU2
Np237	15	516	879
Am241	2648	2178	
Am243	2088	3854	
Cm242	435	313	
Cm244	835	1114	
Cm245	84	100	

A Figura 28 mostra a radiotoxicidade total devido à ingestão do combustível MOX descarregado para os diferentes casos estudados. Para cálculos de radiotoxicidade, foram usados coeficientes das bibliotecas Serpent. A dependência temporal da radiotoxicidade foi estimada usando um modelo de decaimento exponencial, no qual as massas de cada isótopo no final do passo de tempo foram multiplicadas pela atividade específica e pelo coeficiente de radiotoxicidade.

Figura 28. Radiotoxicidade total devido à ingestão do combustível MOX descarregado.



Fonte: A autora (2025)

Como pode ser visto na Figura 28, a maior diferença no comportamento de radiotoxicidade é obtida para o caso MultiThU2. Nos primeiros 100 anos, o principal contribuinte para a radiotoxicidade é ^{244}Cm , e no combustível de descarga do caso MultiThU2 não temos esse isótopo. Nos outros casos, a radiotoxicidade em função do tempo mostra comportamento semelhante. Após 1000 anos, a radiotoxicidade de longo prazo é dominada por ^{241}Am , ^{240}Pu e ^{239}Pu . No longo prazo (após 50.000 anos), é dominada por ^{229}Th e ^{240}Pu . O caso MultiThUPu é o que atinge os maiores valores de radiotoxicidade no longuíssimo prazo, porque é a estratégia de combustível que

obtém as maiores quantidades de ^{229}Th no combustível de descarga, sendo este isótopo o principal contribuinte para a radiotoxicidade no longuíssimo prazo.

4.1.6. Parâmetros de nêutrons atrasados

O número de grupos de nêutrons atrasados no modelo de código Serpent depende da biblioteca de dados nucleares usada. Em nosso estudo, foi usada a biblioteca JEFF-3.1, que considera 8 grupos. A Tabela 18 mostra a fração efetiva de nêutrons atrasados (β_{effect}) e o valor médio da constante de decaimento para os núcleos precursores de nêutrons atrasados (λ) no BOC e EOC. Os valores efetivos de β no BOC são ligeiramente inferiores aos obtidos com a composição de referência. Isso ocorre porque ^{239}Pu e ^{233}U têm uma fração menor de nêutrons atrasados para fissões térmicas (0,00260 para ^{233}U e 0,00210 para ^{239}Pu) do que ^{235}U (0,00650). No EOC, os valores efetivos de β são semelhantes para as diferentes composições de combustível analisadas e também ligeiramente inferiores ao UO_2 . Os resultados dos valores da constante de decaimento não têm diferenças significativas com o caso de referência.

Tabela 18. Parâmetros de nêutrons atrasados em BOC e EOC para todas as composições de combustível simuladas.

	β_{effect} no BOC (pcm)	β_{effect} no EOC (pcm)	λ no BOC (s ⁻¹)	λ no EOC (s ⁻¹)
MonoThPu	628	459	0,454	0,476
MultiThUPu	636	470	0,454	0,465
MultiThPu	567	476	0,430	0,447
UO2	713	536	0,457	0,492

4.1.7. Coeficientes de reatividade do moderador

Os coeficientes de reatividade de temperatura e vazão são relevantes para estabelecer a segurança de um novo projeto do núcleo usando combustível MOX. Os coeficientes de reatividade de temperatura do moderador (MTC) foram calculados no BOC nas composições de combustível propostas para o núcleo iPWR. Os MTCs foram calculados nos estados de potência nominal variando apenas a temperatura e a densidade do moderador e considerando o envenenamento por ^{135}Xe . O núcleo foi considerado sem absorvedores queimáveis e barras de controle inseridas. Todas as simulações foram realizadas com 50 mil histórias e 500 ciclos com um desvio padrão menor que 0,30 pcm/K. O MTC foi calculado como:

$$MTC = \frac{\rho^{T_2} - \rho^{T_1}}{T_2 - T_1} = \frac{\frac{1}{K_{eff}^{T_1}} - \frac{1}{K_{eff}^{T_2}}}{T_2 - T_1} \quad (50)$$

Onde ρ^{T_i} é o valor de reatividade, T_i é o valor de temperatura e $K_{eff}^{T_i}$ é o fator de multiplicação efetivo na temperatura do estado i .

Nos cálculos dos coeficientes de vazios de refrigerante completo, os dois estados limites foram considerados, o estado a 800 K com vapor e o estado a 300 K. A Tabela 19 resume os resultados para coeficientes de reatividade. Os valores obtidos para o coeficiente de temperatura do moderador são todos negativos na faixa de temperaturas de trabalho. Além disso, não difere significativamente dos valores obtidos para o caso de referência.

Tabela 19. Coeficientes de temperatura do moderador e coeficientes de vazio total do refrigerante para composições de núcleo propostas.

Temperatura (K)	MTC (pcm/K)			
	MonoThPu	MultiThUPu	MultiU2	UO2
300-400	-6,56	-6,72	-4,29	-4,93
400-500	-14,72	-14,53	-9,57	-11,15
500-600	-36,13	-35,17	-25,54	-28,83
Coeficientes de vazio total do refrigerante				
pcm	-62200	-57429	-37778	-80200
\$	-99,0	-90,1	-90,1	-112,5

Para as composições de combustível propostas, os efeitos de vazio total do refrigerante são um pouco menores em valor absoluto do que o caso com UO₂, com exceção do caso MultiThU2, que é a única composição que não contém plutônio e que atinge valores próximos ao caso de referência. Comparando os resultados obtidos para um núcleo com um terço de conjuntos de combustível MOX, com aqueles relatados em (ERNOULT *et al.*, 2015); observamos que todos os efeitos de vazio total do refrigerante são negativos em nosso estudo, enquanto no estudo de Ernoult foram relatados efeitos positivos para algumas composições.

Os coeficientes de temperatura do combustível (FTC) foram calculados:

$$FTC = \frac{\rho^{T_2} - \rho^{T_1}}{T_2 - T_1} = \frac{\frac{1}{K_{eff}^{T_1}} - \frac{1}{K_{eff}^{T_2}}}{T_2 - T_1} \quad (51)$$

Na Tabela 20 são mostrados os resultados. Para todos os casos analisados usando combustível MOX, valores negativos do coeficiente de reatividade da

temperatura do combustível são obtidos. Em todos os casos, os FTCs são maiores em valor absoluto do que aqueles obtidos para o caso de referência.

Tabela 20. Coeficientes de temperatura do combustível (FTCs) para composições de combustível propostas.

Temperatura	MonoThPu	MultiThUPu	MultiThU2	UO2
300-600	-3,04	-3,22	-3,21	-2,36
600-900	-2,30	-2,45	-2,45	-1,79
900-1200	-1,79	-1,90	-1,92	-1,58
1200-1500	-1,74	-1,78	-1,76	-1,40
1500-1800	-1,58	-1,64	-1,57	-1,30

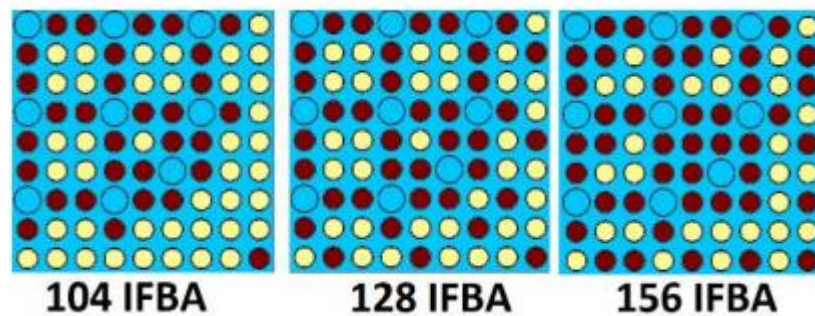
4.2. CALCULO NEUTRÔNICO USANDO VENENOS QUEMÁVEIS.

A forma como as diferentes misturas de combustíveis são distribuídas no núcleo e o grau de enriquecimento do combustível devem produzir reatividade suficiente para que o ciclo atinja a energia necessária. No estudo seguinte foram consideradas as misturas de combustíveis MonoThPu e MultiThUPu, com as quais foi possível atingir um ciclo prolongado de 48 meses. O padrão de carregamento do núcleo proposto atinge valores do K_{eff} no BOC de 1,24583 para ThPu, e 1,24023 para ThUPu. O excesso inicial de reatividade provoca a necessidade de introdução de um material absorvedor para controlar a reatividade. Como o projeto do reator proposto não utiliza boro, o gerenciamento adequado dos absorvedores quemáveis deve garantir a introdução do menor número possível de barras de controle no núcleo do reator durante o ciclo do combustível. Dois tipos de estratégias de gerenciamento de reatividade foram estudadas. Em primeiro lugar, utilizando barras do Absorvedor Integral de Combustível Westinghouse (IFBA, Integral Fuel Burnable Absorbers) e, em segundo lugar, barras de absorvedores quemáveis compostas por uma mistura de Gadolínio (Gd_2O_3) e UO_2 .

4.2.1. CONTROLE DA REATIVIDADE USANDO IFBA

Foi realizado um estudo com diferentes números de barras do tipo IFBA nos conjuntos de combustível com o objetivo de selecionar a quantidade adequada que garanta um excesso mínimo de reatividade durante o ciclo do combustível, bem como a duração desejada para um ciclo prolongado. A Figura 29 mostra como as barras foram distribuídas dentro do conjunto combustível, em quarto de simetria.

Figura 29. Distribuição das barras IFBA dentro do conjunto de combustível em quarto de simetria.



Fonte: A autora (2025)

Nas Tabela 21 e Tabela 22 os principais parâmetros do ciclo para as misturas MonoThPu e MultiThUPu são mostrados. A Figura 30 mostra a variação dos valores de K_{eff} com a queima do combustível considerando diferentes quantidades de barras de IFBA para as composições MonoThPu e MultiThUPu. Para o combustível MonoThPu, aproximadamente 37% da reatividade inicial pode ser compensada pelo uso de 156 barras IFBA em cada conjunto de combustível. Por sua vez, para o combustível MultiThUPu, até aproximadamente 22% da reatividade inicial é compensada considerando 156 barras IFBA. Em todos os casos, é alcançada uma duração do ciclo de combustível superior a 1400 EFPD.

Tabela 21. Principais parâmetros para a mistura MonoThPu

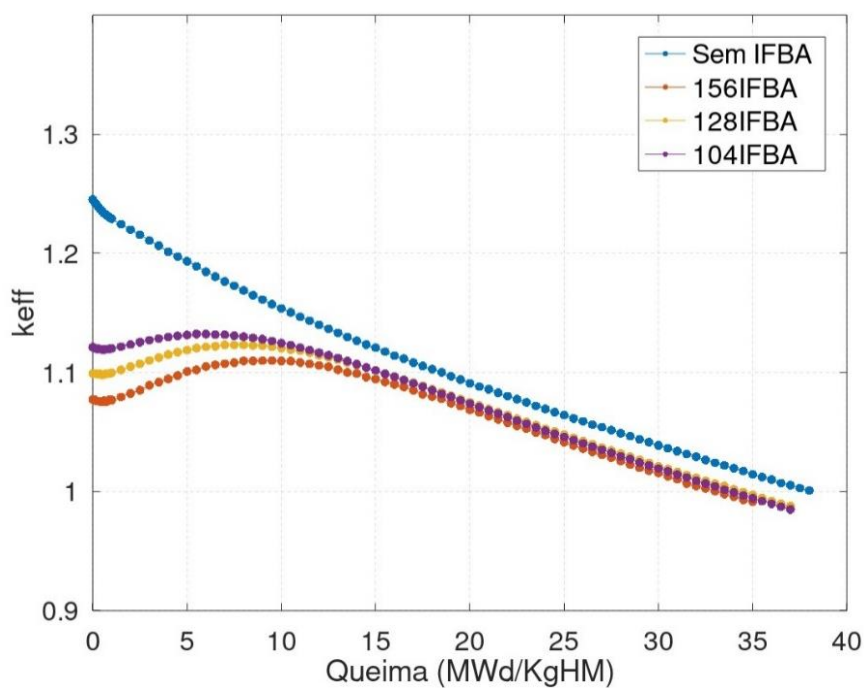
MonoThPu	K_{eff} (BOC)	Reactividad no BOC (pcm)	Queima (MWd/KgHM)
Sem IFBA	1,2452	19691	38
104	1,12117	10807	33,5
128	1,09900	9008	34
156	1,07724	7170	33

Tabela 22. Principais parâmetros para a mistura MultiThUPu.

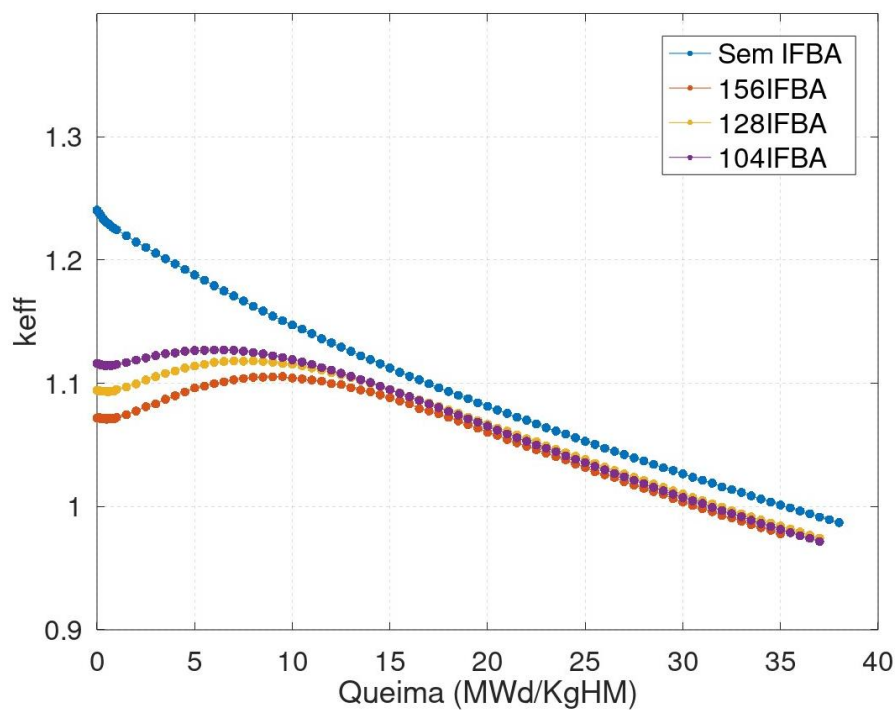
MultiThUPu	K_{eff} (BOC)	Reactividad no BOC (pcm)	Queima (MWd/KgHM)
Sem IFBA	1,24036	19378	35
104	1,11604	10397	31
128	1,09434	8620	31,5
156	1,07184	4180	30,5

Figura 30. Variação dos valores de k_{eff} com a queima do combustível para as composições MonoThPu y MultiThUPu.

(A) MonoThPu



(B) MultiThUPu

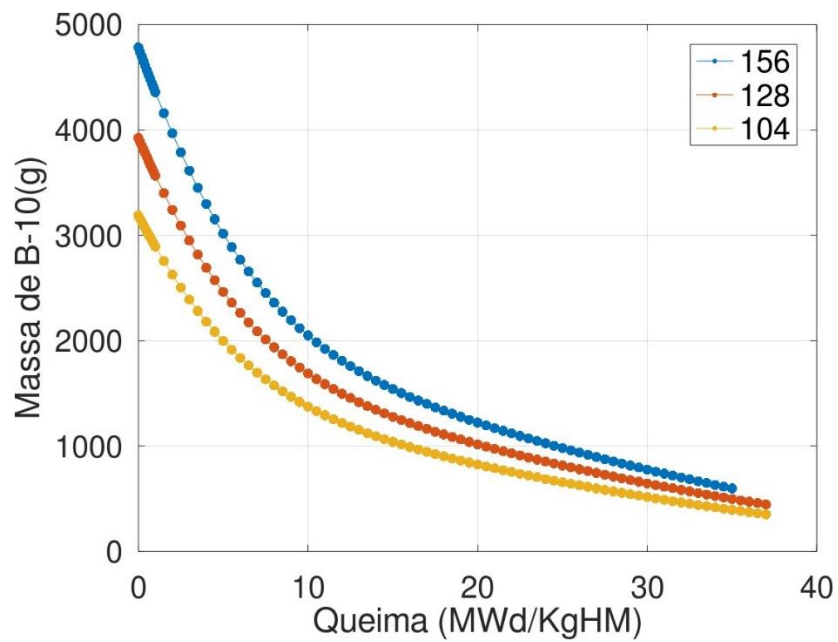


Fonte: A autora (2025)

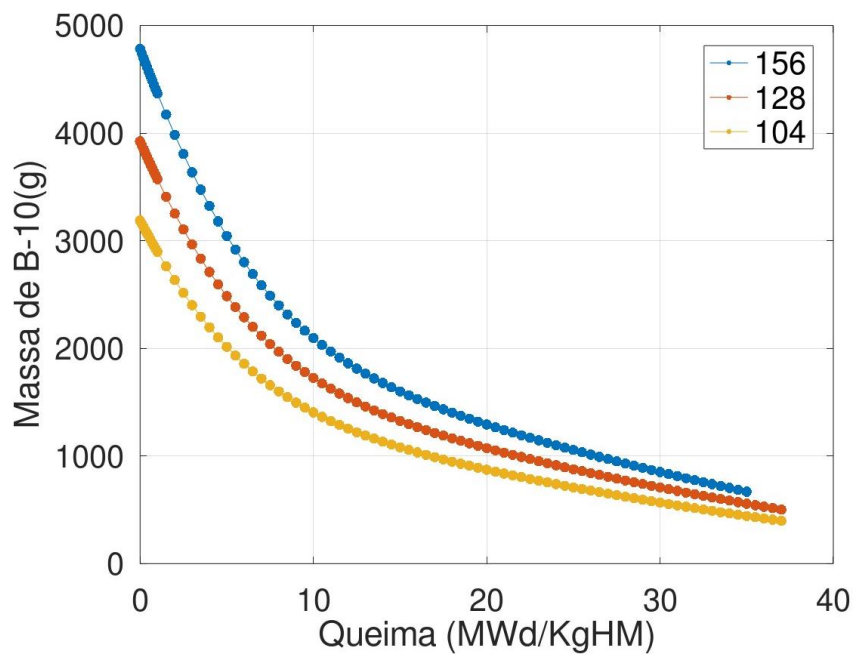
O isótopo absorvedor ^{10}B é quase completamente queimado no final do ciclo do combustível. A Figura 31 mostra a variação da massa do ^{10}B ao longo de sua vida útil no núcleo do reator.

Figura 31. Variação da massa do ^{10}B com o queimado do combustível.

(A) MonoThPu



(B) MultiThPu



Fonte: A autora (2025)

Os fatores de potência de pico do núcleo no BOC, sem e com diferentes números de barras IFBA, são mostrados nas Figura 32 e Figura 33 . Os cálculos foram realizados considerando 100000 historias e 500 ciclos. Erros relativos inferiores a 5% foram obtidos em todos os calculos de energia. Como pode ser observado, o maior valor do fator de potência de pico é obtido no padrão de carga sem barras IFBA para ambas as misturas de combustível, nos demais casos é sempre menor. O uso de barras IFBA não perturba a distribuição de energia do núcleo.

Figura 32. Fatores de potência de pico em BOC sem e com 104,128 e 156 barras de IFBA, considerando um quarto de simetria, para a mistura MonoThPu.

0.907	0.984	0.924		
0.903	1.2	1.37	1.16	
0.688	0.879	1.34	1.38	0.927
0.609	0.641	0.881	1.2	0.99
0.699	0.612	0.694	0.911	0.916

Sem IFBA

0.73	0.735	0.638		
1.02	1.04	1.02	0.804	
1.08	1.15	1.2	1.05	0.668
1.21	1.16	1.19	1.1	0.776
1.31	1.23	1.13	1.07	0.784

104

0.717	0.717	0.603		
1.09	1.08	1	0.736	
1.24	1.29	1.23	0.987	0.584
1.43	1.35	1.28	1.08	0.702
1.51	1.42	1.23	1.08	0.711

128

0.646	0.722	0.941		
0.988	0.982	0.956	0.738	
1.14	1.17	1.07	0.948	0.943
1.29	1.22	1.16	0.965	0.706
1.32	1.29	1.12	0.974	0.642

156

Fonte: A autora (2025)

Figura 33. Fatores de potência de pico em BOC sem e com 104,128 e 156 barras de IFBA, considerando um quarto de simetria, para a mistura MultiThUPu.

0.915	1	0.955		
0.921	1.2	1.4	1.19	
0.676	0.881	1.33	1.4	0.953
0.577	0.617	0.881	1.19	1
0.622	0.576	0.675	0.918	0.913

Sem IFBA

0.741	0.759	0.664		
1.05	1.06	1.05	0.824	
1.09	1.18	1.19	1.05	0.673
1.2	1.15	1.19	1.06	0.758
1.2	1.2	1.1	1.07	0.746

104

0.676	0.677	0.582		
1.06	1.01	0.959	0.73	
1.19	1.24	1.16	0.969	0.593
1.37	1.29	1.27	1.04	0.708
1.4	1.39	1.23	1.09	0.703

128

0.668	0.79	1.11		
1.03	1.02	1.06	0.823	
1.16	1.21	1.13	1.04	1.08
1.27	1.21	1.19	0.966	0.758
1.18	1.22	1.09	0.96	0.638

156

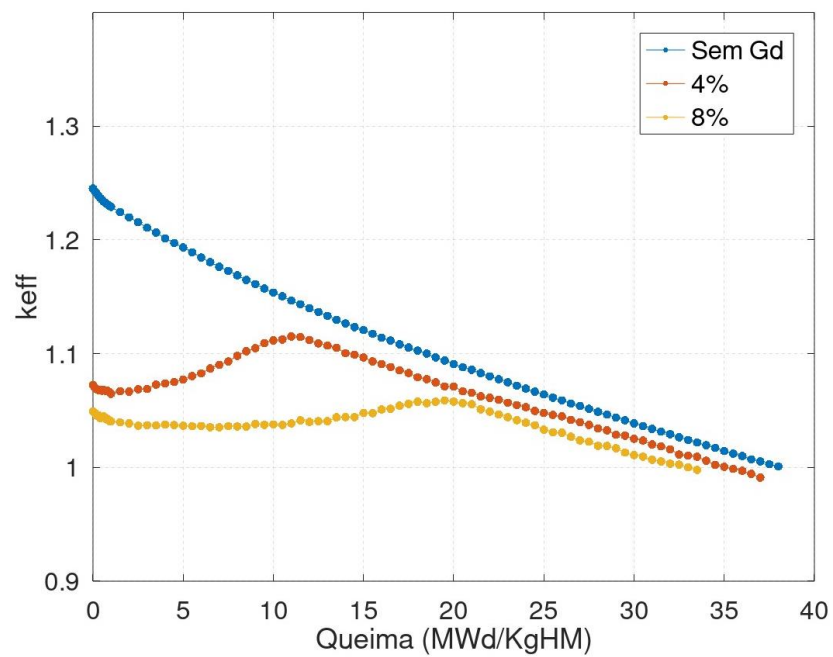
Fonte: A autora (2025)

4.2.2. CONTROLE DA REATIVIDADE USANDO Gd_2O_3

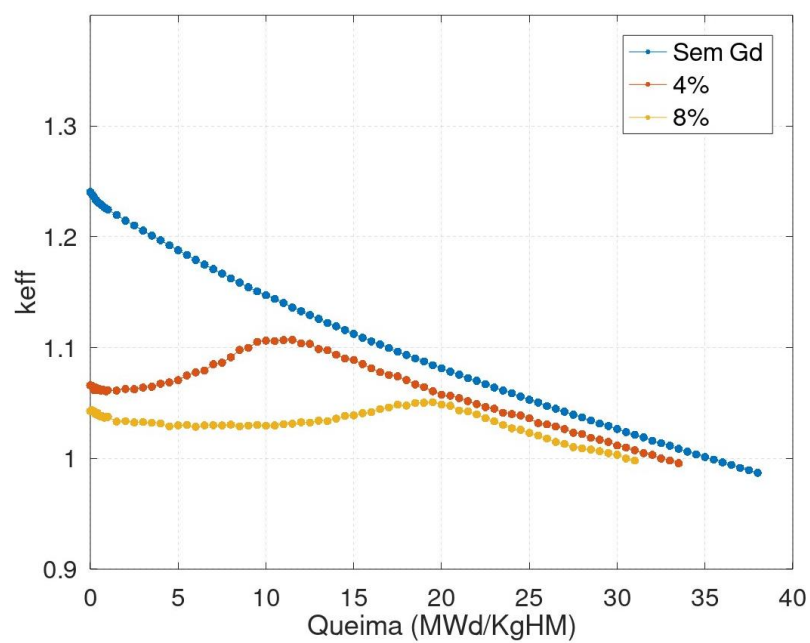
Diferentes configurações de gadolínio foram investigadas para selecionar uma configuração adequada que possa ser usada no projeto do núcleo iPWR com um ciclo de combustível estendido. Os cálculos de queimado do núcleo foram feitos considerando todos os conjuntos de combustível usando 28 barras de Gd_2O_3 com enriquecimento de gadolínio de 4 e 8% em peso. A Figura 34 descreve o desempenho de K_{eff} em relação ao queimado do combustível para as misturas analisadas.

Figura 34. Variação de K_{eff} com a queima do combustível, para diferentes concentrações de gadolínio.

(A) MonoThPu



(B) MultiThUPu



Fonte: A autora (2025)

A penalidade de reatividade obtida no fim da vida em todos os casos usando absorvedor de gadolínio é causada pela diminuição da massa do combustível físsil. A duração dos ciclos para cada caso é inferior a 48 meses. Nas Tabela 23 e Tabela 24 os principais parâmetros do ciclo para as misturas MonoThPu e MultiThUPu são mostrados. Para o combustível MonoThPu, aproximadamente 24% da reatividade inicial pode ser compensada pelo uso de 28 barras com 8% de Gd em cada conjunto de combustível. Por sua vez, para o combustível MultiThUPu, até aproximadamente 22% da reatividade inicial é compensada considerando 28 barras com 8% de Gd em cada conjunto de combustível.

Tabela 23. Principais parâmetros para a mistura MonoThPu.

MonoThPu	Keff (BOC)	Reactividad no BOC (pcm)	Queima (MWd/KgHM)
Sem Gd	1,2452	19691	38
4%	1,0724	7151	35
8%	1,0491	4680	33

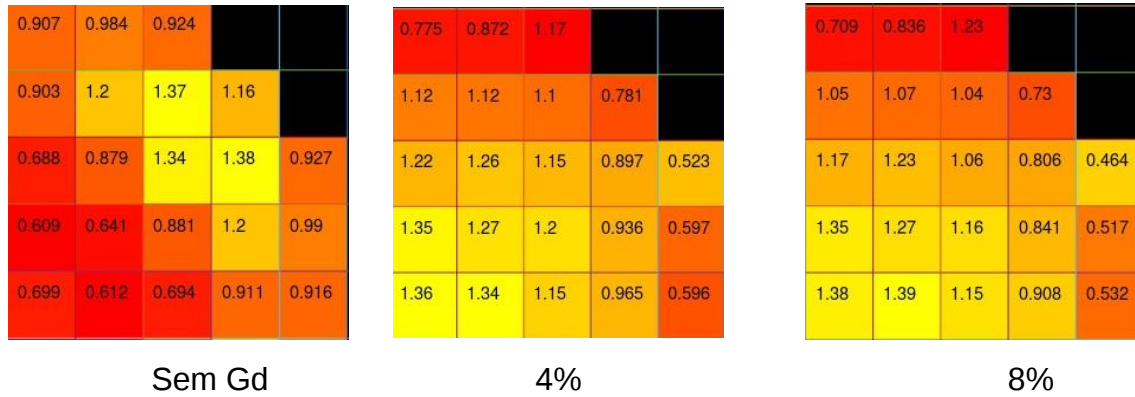
Tabela 24. Principais parâmetros para a mistura MultiThUPu

MultiThUPu	Keff (BOC)	Reactividad no BOC (pcm)	Queima (MWd/KgHM)
Sem Gd	1,24036	19378	35
4%	1,0659	6182	32
8%	1,0428	4104	31

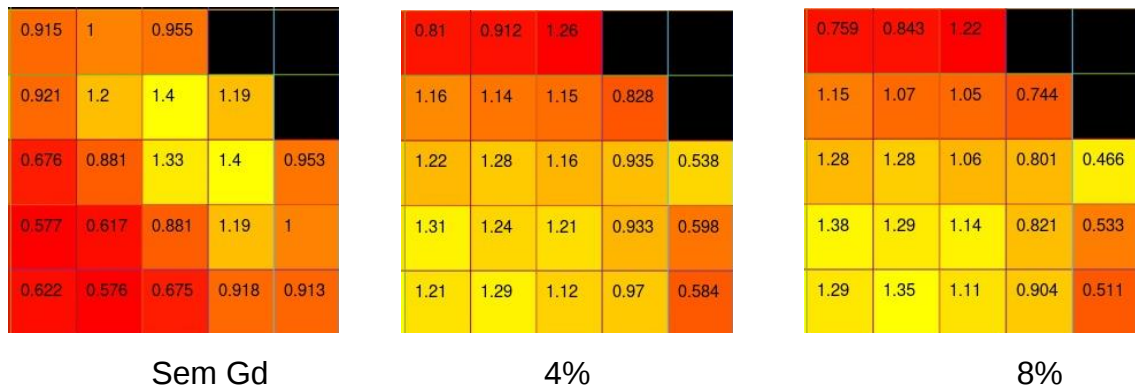
Os fatores de potência de pico do núcleo no BOC são mostrados na Figura 35. Os cálculos foram realizados considerando 100000 historias e 500 ciclos. Como pode ser observado, para ambas as misturas de combustível o fator de pico de potência não excedem os PFs obtidos para o caso de referência sem Gd.

Figura 35. Fatores de potência de pico em BOC, considerando um quarto de simetria.

(A) MonoThPu



(B) MultiThUPu



Fonte: A autora (2025)

Nas Figura 36 e Figura 37 é mostrada a variação das massas de ^{155}Gd e ^{157}Gd com a queima do combustível para as misturas estudadas. Observa-se como a massa dos isótopos ^{155}Gd e ^{157}Gd , presentes desde o início do ciclo, diminui no núcleo à medida que ocorre a queima do combustível. O isótopo ^{157}G é consumido mais rapidamente que o ^{155}Gd , devido à sua alta seção transversal de absorção de nêutrons.

Figura 36. Variação da massa de Gd155 com a queima do combustível para as misturas estudadas

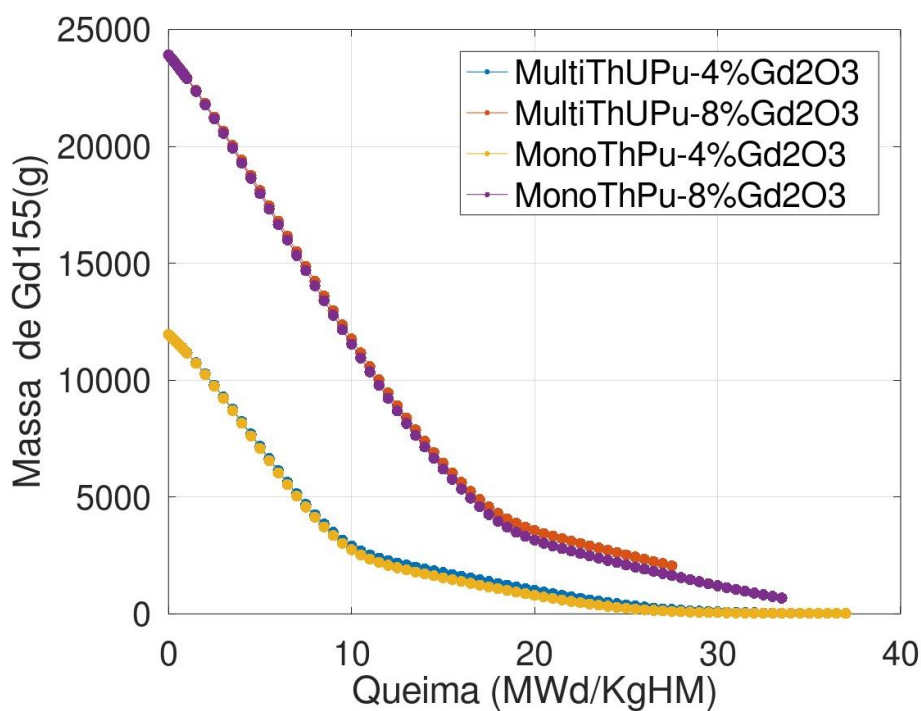
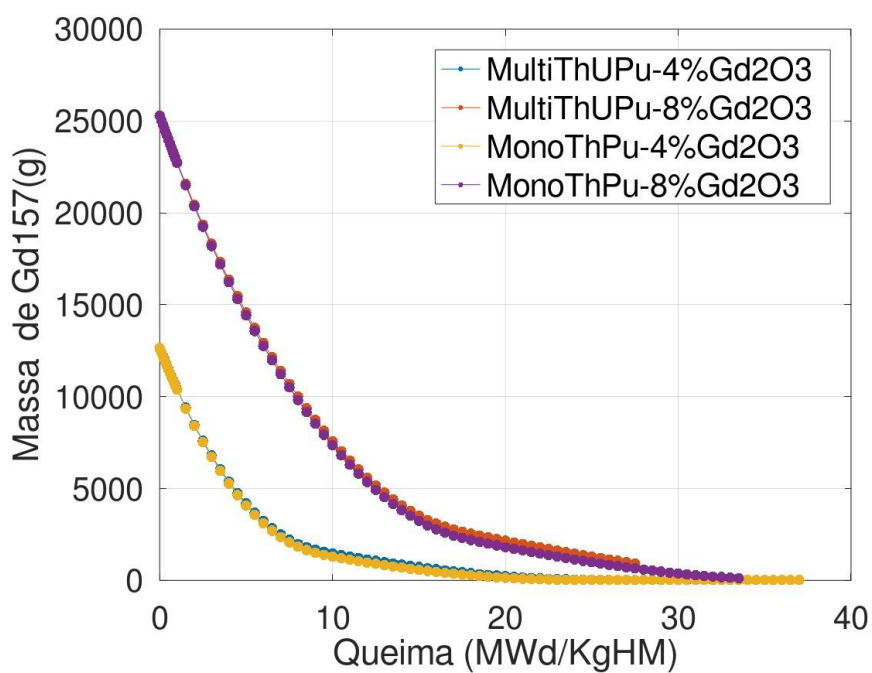


Figura 37. Variação da massa de Gd157 com a queima do combustível para as misturas estudadas.



Fonte: A autora (2025)

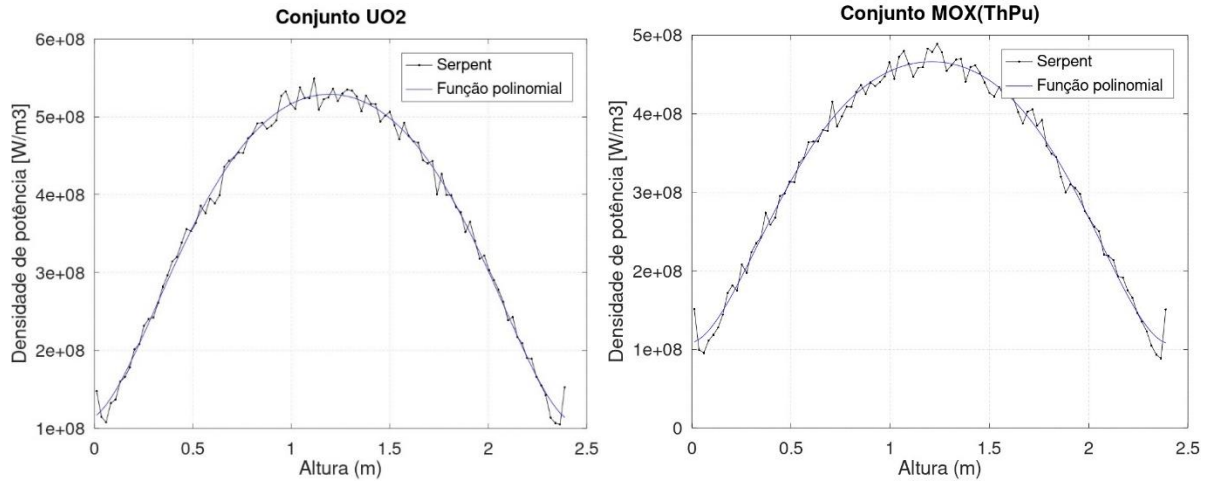
4.3. RESULTADOS TERMOHIDRAULICOS

O código Serpent permite calcular as distribuições de potência axial tanto no conjunto de combustível, quanto no subcanal, que serão usadas no cálculo termohidráulico para obter os perfis de temperatura. Para os cálculos da potência axial no subcanal, um número de 1 milhão de histórias e 1500 ciclos foi usado; e cada elemento combustível foi dividido em 100 regiões axiais de 0,024 m. Os valores obtidos no código Serpent para cada ponto da altura são ajustados usando uma função polinomial. A expressão obtida para a densidade de potência é utilizada no código OpenFoam para o cálculo termohidráulico.

A Figura 26 mostra a distribuição radial dos fatores de pico de potência do núcleo em um quarto de simetria, no início do ciclo (BOC). Para a mistura MonoThPu (Figura 26.B), o conjunto de combustível de maior potência no núcleo, com um fator de pico de 1,37, corresponde à posição de um conjunto que usa UO_2 . Dos conjuntos que usam combustível MOX ThPu, aquele com a maior potência tem um fator de pico de 0,91. Para a mistura MultiThUPu (Figura 26.C), o conjunto de combustível de maior potência no núcleo, com um fator de pico de 1,4, corresponde à posição de um conjunto que usa UO_2 . Dos conjuntos que usam combustível MOX ThUPu, aquele com a maior potência tem um fator de pico de 0,91. Para a mistura MultiThU2 (Figura 26.D), o conjunto de combustível de maior potência no núcleo, com um fator de pico de 1,4, corresponde à posição de um conjunto que usa UO_2 . Dos conjuntos que usam combustível MOX ThU2, aquele com a maior potência tem um fator de pico de 1,19.

Devido ao fato de os combustíveis (UO_2 e MOX) terem comportamento distinto para suas propriedades termofísicas, será realizado um estudo termohidráulico do subcanal que gera maior potência no núcleo, e corresponde a um conjunto com UO_2 , e um estudo do subcanal que gera maior potência para os conjuntos com combustível MOX para cada uma das misturas. As Figura 38, Figura 39 e Figura 40 mostram a distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent e a função polinomial para os subcanais a serem analisados.

Figura 38. Distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent para a mistura MonoThPu.



Fonte: A autora (2025)

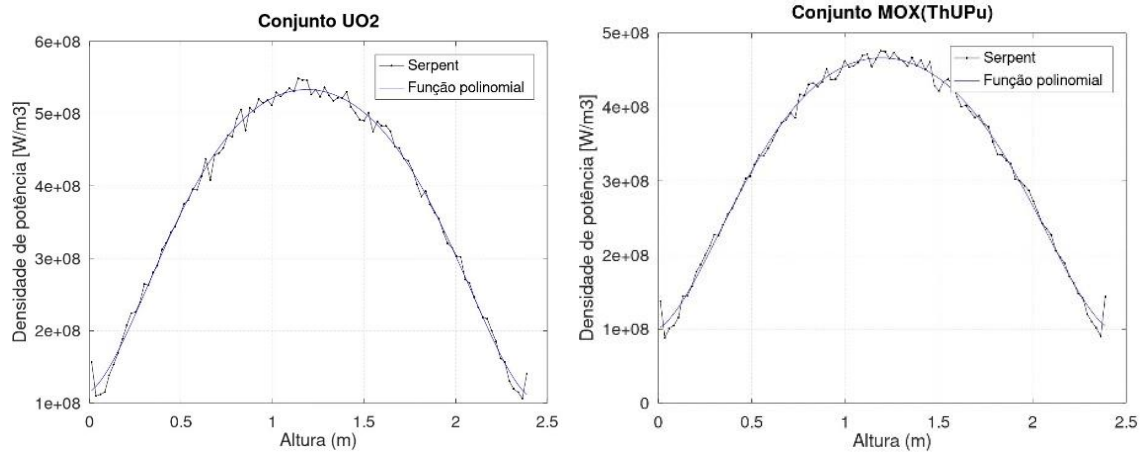
Para o canal do conjunto com UO_2 a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left(\frac{W}{m^3} \right) = 129048355.87968x^6 - 900244604.73792x^5 + 2448173381.96277x^4 - 3294989532.59887x^3 + 1930453865.84408x^2 + 102183180.5311x + 138390776.00600 \quad (52)$$

Para o canal do conjunto com $\text{MOX}(\text{ThPu})$ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left(\frac{W}{m^3} \right) = 112842263.30857x^6 - 845459664.61688x^5 + 2485107373.94954x^4 - 3592440050.02956x^3 + 2270969142.64059x^2 - 53259266.35479x + 128859652.08884 \quad (53)$$

Figura 39. Distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent para a mistura MultiThUPu.



Fonte: A autora (2025)

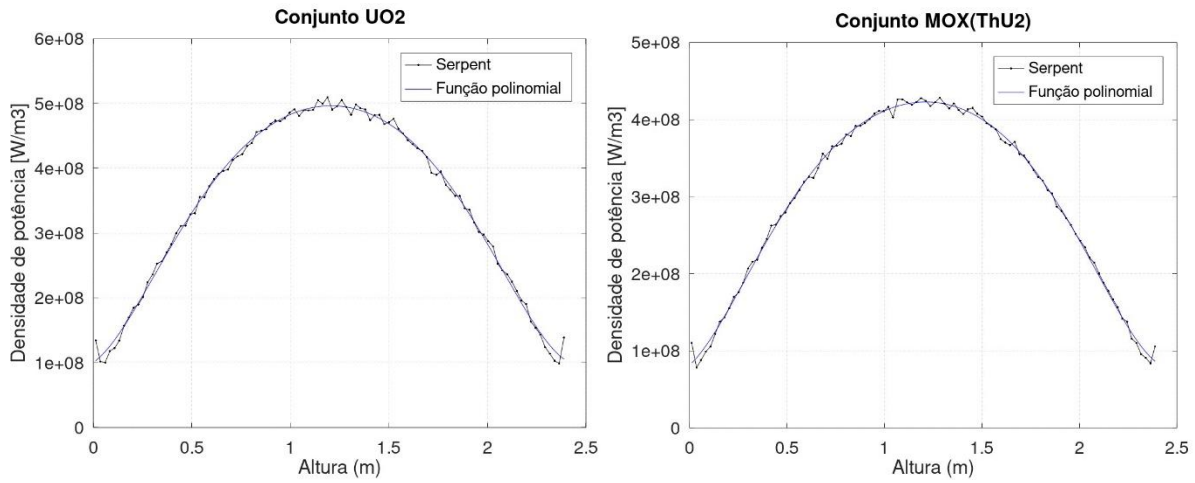
Para o canal do conjunto com UO₂ a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left(\frac{W}{m^3} \right) = 90489472.44929x^6 - 655742645.71809x^5 + 1869519594.17020x^4 - 2648593406.65383x^3 + 1577779971.20355x^2 + 173161514.4192x + 115107500.96348 \quad (54)$$

Para o canal do conjunto com MOX(ThUPu) a distribuição é ajustada pela equação:

$$P \left(\frac{W}{m^3} \right) = 73528351.47842x^6 - 533800889.46833x^5 + 1534096383.43616x^4 - 2208124799.50406x^3 + 1341462537.97987x^2 + 148244219.5482x + 100145326.87925 \quad (55)$$

Figura 40. Distribuição da densidade de potência, no BOC, calculada pelo código Serpent para a mistura MultiThU2.



Fonte: A autora (2025)

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

$$P \left(\frac{W}{m^3} \right) = 72841559.64920x^6 - 520611274.29710x^5 + 1473698603.96698x^4 - 2101803403.88866x^3 + 1249294397.52410x^2 + 209299643.4405x + 100452713.79549 \quad (56)$$

Para o canal do conjunto com MOX(ThU2) a distribuição é ajustada pela equação:

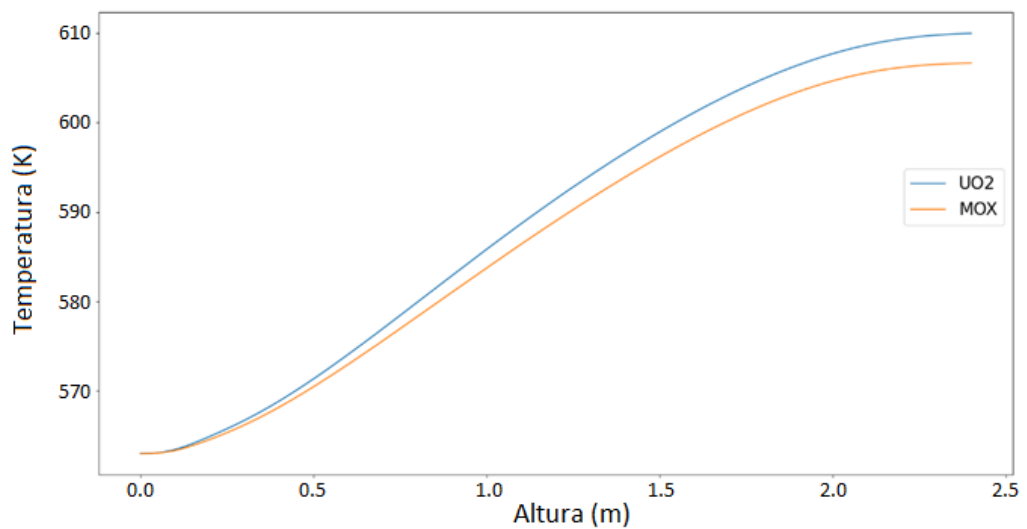
$$P \left(\frac{W}{m^3} \right) = 62416719.12130x^6 - 441064053.72920x^5 + 1223123197.30012x^4 - 1692088890.18019x^3 + 946365413.97168x^2 + 231330907.30367x + 81227645.77572 \quad (57)$$

Com as distribuições axiais da densidade de potência calculada pelo código SERPENT, foi realizado o estudo termohidráulico dos subcanais. Como primeiro resultado, foi possível observar a distribuição da temperatura axial do refrigerante no centro, ao longo da altura para o subcanal, conforme mostrado na Figura 41. Para a mistura MonoThPu, a temperatura máxima atingida na saída do núcleo é 606,68 K para o conjunto com combustível MOX ThPu, e 610,00 K para o conjunto com combustível UO₂. Para a mistura MultiThUPu, a temperatura máxima atingida na saída

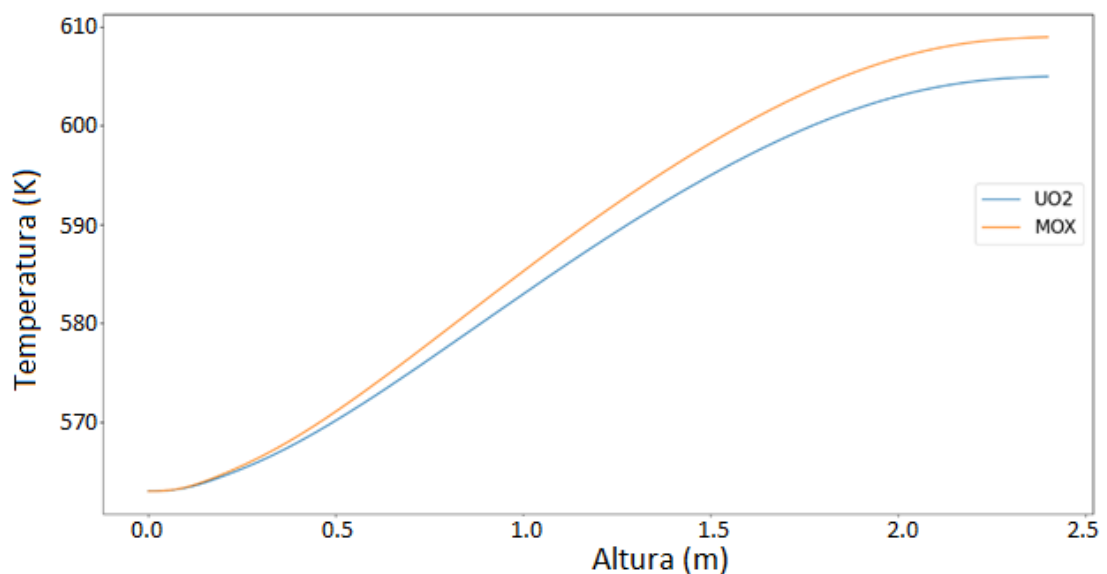
do núcleo é 608,96 K para o conjunto com combustível MOX ThPu, e 604,97 K para o conjunto com combustível UO_2 . Para a mistura MultiThU2, a temperatura máxima atingida na saída do núcleo é 600,81 K para o conjunto com combustível MOX ThU, e 605,69 K para o conjunto com combustível UO_2 . Para todos os casos estudados obtém-se uma temperatura inferior à temperatura de saturação (614,23 K) para a pressão estabelecida do refrigerante.

Figura 41. Distribuição da temperatura axial no centro do refrigerante.

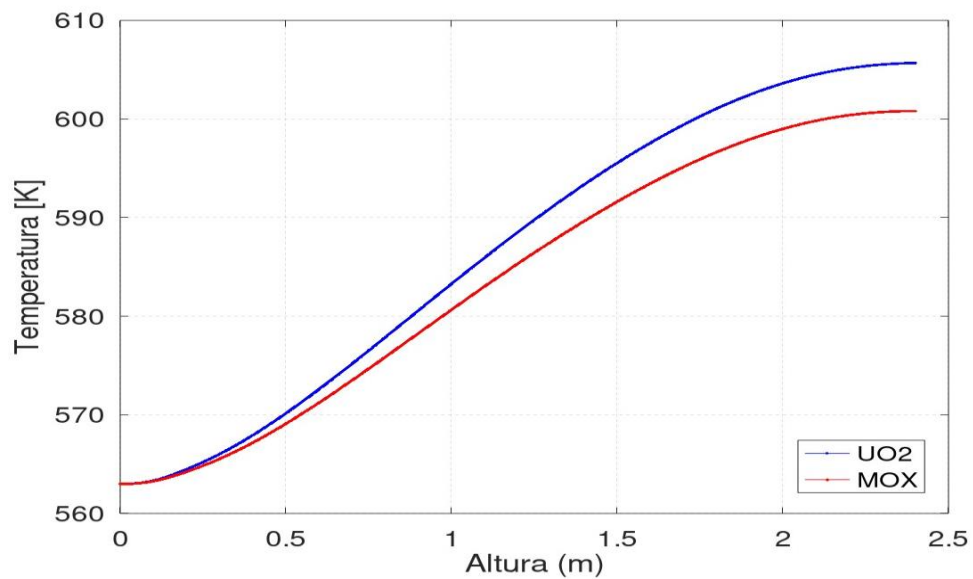
(A) MonoThPu



(B) MultiThUPu



(C) MultiThU2

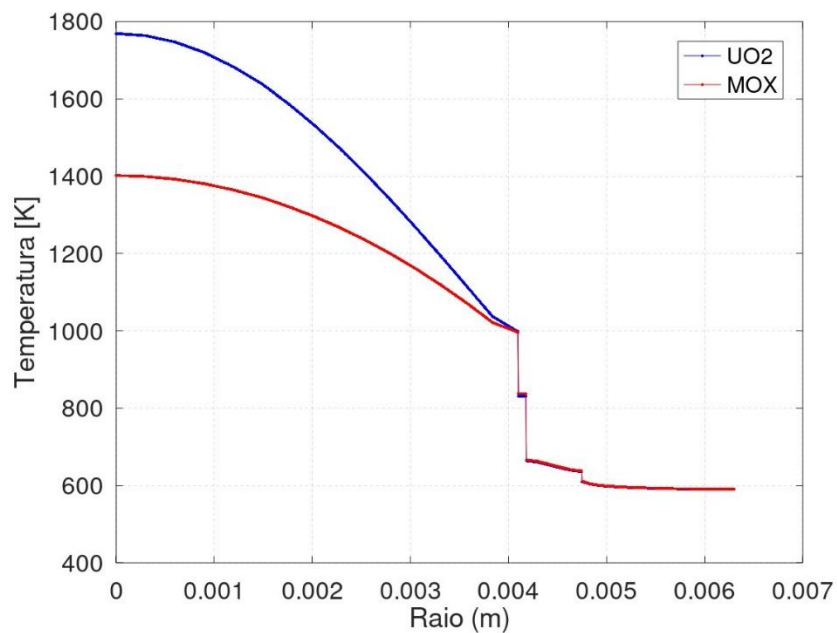


Fonte: A autora (2025)

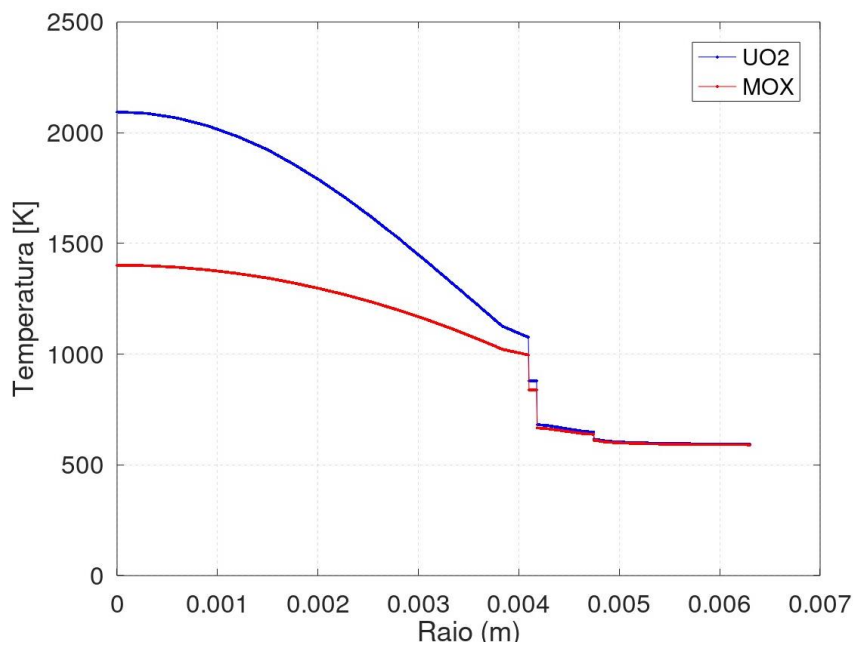
A variação radial da temperatura é mostrada na Figura 42. Há uma queda acentuada na temperatura à medida que o raio no elemento combustível aumenta, especialmente na área da lacuna (hélio). Para a mistura MonoThPu a temperatura máxima encontrada no revestimento foi de 664,29 K para o MOX ThPu e 672,54 K para o UO₂. Para mistura MultiThUPu a temperatura máxima obtida no revestimento foi de 670,33 K para o conjunto com MOX ThUPu e 659,13 K para o UO₂. Para a mistura MultiThU2, os conjuntos com UO₂, a temperatura máxima do revestimento atingiu 667,85 K, enquanto para os conjuntos com ThU, a temperatura máxima foi de 647,9 K. Para todos os casos, as temperaturas do revestimento ficaram bem abaixo dos 1477,59 K, valor reportado como limite em situações de acidente.

Figura 42. Distribuição da temperatura radial na barra de combustível.

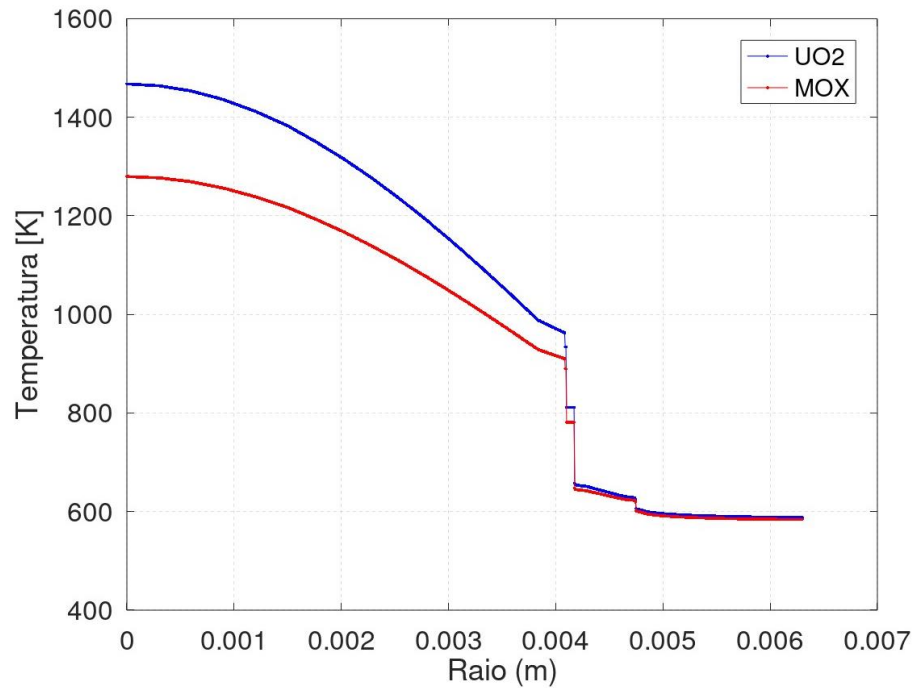
(A) MonoThPu



(B) MultiThUPu



(C) MultiThU2

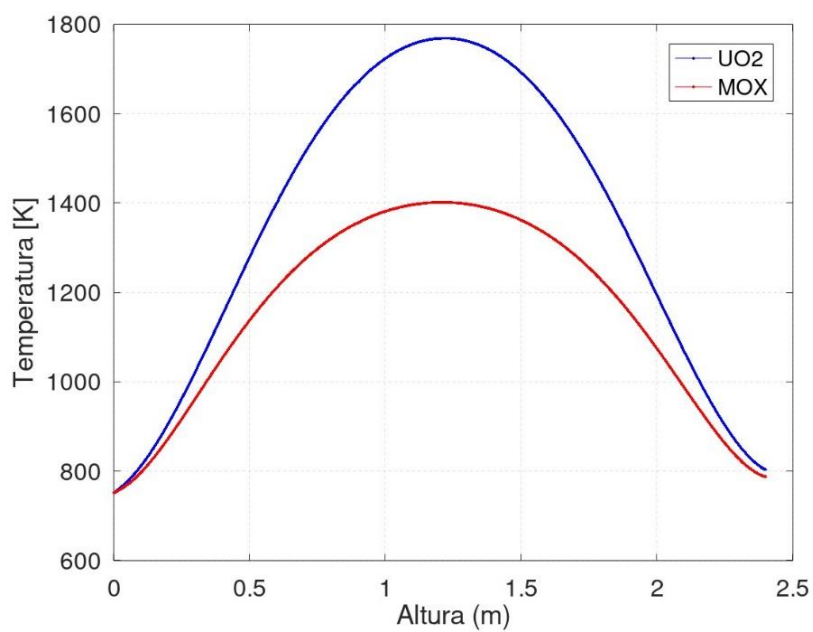


Fonte: A autora (2025)

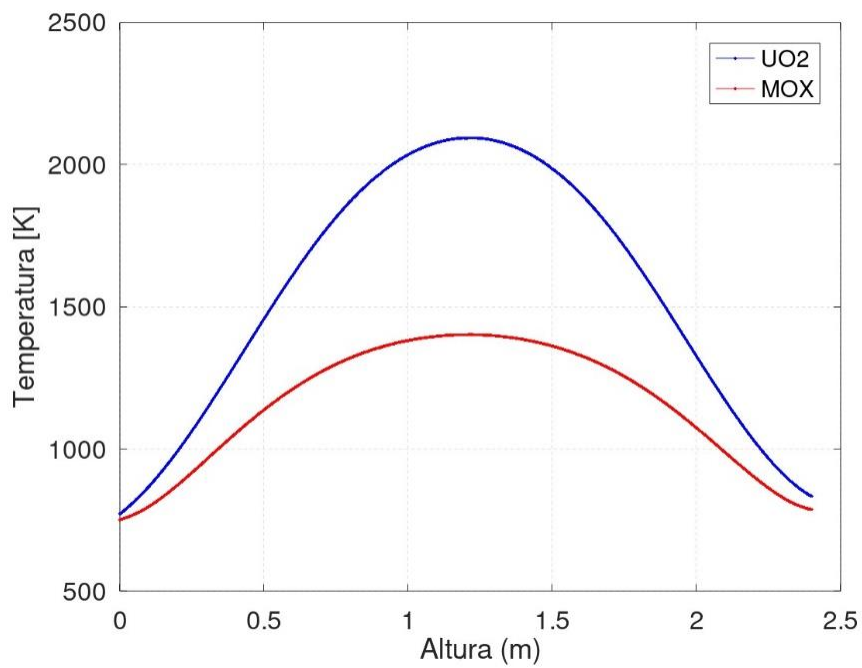
Na Figura 43 é mostrada a temperatura axial no centro do combustível. Para a mistura MonoThPu a temperatura máxima atingida é 1400,98 K para o combustível MOX ThPu, bem abaixo do ponto de fusão (3651 K), e 1769,04 K para o combustível UO₂, abaixo do ponto de fusão (3120 K). Para a mistura MultiThUPu a temperatura máxima atingida é 1401,78K para o combustível MOX ThUPu, bem abaixo do ponto de fusão (3651 K), e 2090,91K K para o combustível UO₂, abaixo do ponto de fusão (3120 K). Para a mistura MultiThU2, no subcanal com UO₂, a temperatura máxima alcançada foi de 1468,8 K, consideravelmente abaixo dos 3120 K do ponto de fusão. No subcanal com (Th,U)O₂, a temperatura máxima atingida foi de 1280 K, bem inferior aos 3220 K do ponto de fusão do (Th,U)O₂.

Figura 43. Distribuição da temperatura axial no centro do combustível.

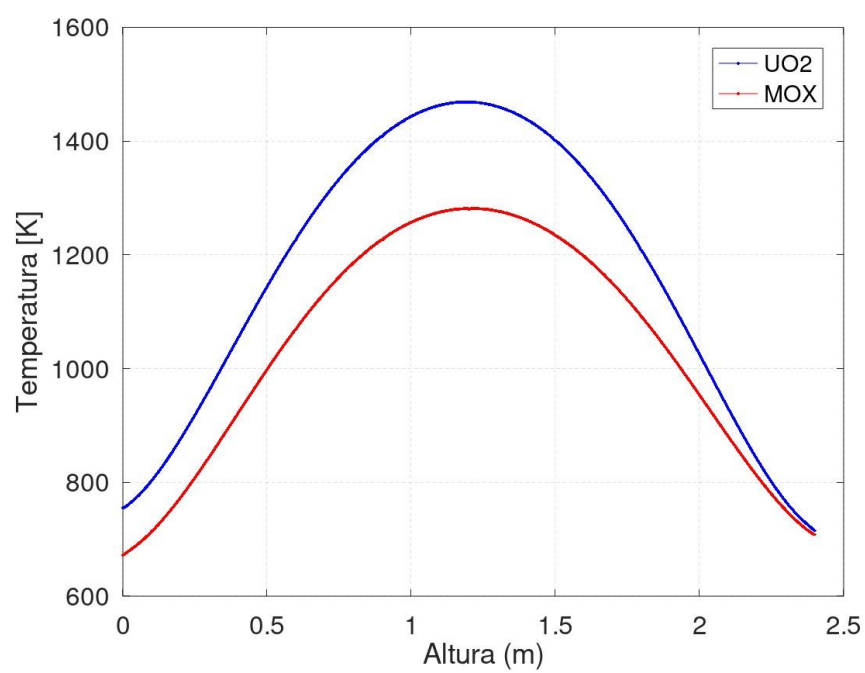
(A) MonoThPu



(B) MultiThUPu



(C) MultiThU2



Fonte: A autora (2025)

Conclusões

No presente trabalho foi realizada a análise do núcleo de um reator modular pequeno do tipo água pressurizada integral que utiliza como combustível diferentes composições de misturas de óxidos de Tório-Plutônio, Tório-Urânio e Tório-Urânio-Plutônio. Foi desenvolvido um modelo computacional que permite o cálculo e otimização dos parâmetros físico-neutrônicos e o cálculo dos parâmetros termohidráulicos do núcleo proposto. Com esse objetivo foram utilizados os códigos Serpent para o cálculo neutrônico e o programa OpenFoam para o cálculo termohidráulico.

Três configurações básicas foram estudadas com combustíveis baseados em tório: MonoThPu, MultiThUPu e MultiThU2. Foram estudadas diferentes configurações para a distribuição do combustível MOX no núcleo do SMR tipo iPWR. O padrão de carregamento que atinge os valores máximos mais baixos do fator de potência radial de pico é aquele em que os conjuntos de combustível MOX estão localizados em direção ao centro do núcleo.

Em todos os casos analisados há um endurecimento do espectro de fluxo de nêutrons em relação ao caso de referência. Esse efeito é mais forte nos casos em que o combustível MOX tem uma fração de massa de plutônio maior. Esses casos mostram um menor valor de excesso de reatividade inicial, a ser controlado por absorvedores queimáveis e/ou barras de controle inseridas. Sendo essa uma vantagem sobre a composição padrão. Foi calculada a variação do keff com a queima do combustível para as misturas com o objetivo de manter o núcleo crítico durante os 4 anos de trabalho do reator, utilizando como referência o caso em que todos os conjuntos de combustível possuem UO₂. Foram obtidos valores médios de queima de combustível entre 34 e 38 MWd/KgHM. As configurações de combustível que utilizam plutônio reciclado apresentam menor excesso de reatividade inicial. Por sua vez, os ciclos de combustível que utilizam urânio reciclado alcançam tempos de operação mais curtos. No caso do MultiThU2, está um pouco longe dos 48 meses esperados. Nesta composição seria possível aumentar a proporção em massa de urânio reciclado para obter um ciclo de combustível mais longo. Para as três misturas de combustíveis foi obtido o coeficiente de pico máximo para o estado BOC. Para todos os casos estudados, os valores máximos dos PFs são inferiores, em todos os tempos do ciclo do combustível, aos obtidos para o caso de referência.

A variação isotópica do núcleo foi analisada para as três configurações de combustível e comparada com o caso de referência. Obteve-se que no caso que utiliza plutônio da primeira reciclagem, pode-se observar que ao utilizar o tório como material fértil a massa inicial de ^{239}Pu é reduzida em até 59%. Os outros isótopos de plutônio apresentam pequenas variações com o esgotamento do combustível em ambos os casos. Nesta perspectiva, os ciclos de combustível que utilizam o tório como material fértil são vantajosos. Nos casos em que é utilizado plutônio proveniente de reciclagem múltipla, as frações mássicas dos isótopos mais pesados são elevadas. Nestas composições, no final do ciclo do combustível consegue-se uma ligeira diminuição nas massas de ^{240}Pu e ^{242}Pu . Considerando apenas o comportamento dos conjuntos de combustível MOX, concluiu-se que para os casos com plutônio da primeira reciclagem, a maioria dos isótopos sofre uma redução considerável, exceto ^{238}Pu e ^{242}Pu . Em casos de multi-reciclagem, todos os isótopos pesados iniciais diminuem suas massas, exceto o ^{241}Am .

Os valores do fator de conversão no EOC para as composições de combustível propostas foram calculados. Em todos os casos os valores são ligeiramente maiores do que o caso de referência. Além disso, os valores mais altos são obtidos para os casos com multi-reprocessamento. Para o caso MultiThU2, o maior valor do fator de conversão, a maior diminuição na massa inicial de ^{233}U , bem como o menor acúmulo de MAs são obtidos. Embora, com essa composição de combustível, o menor comprimento de ciclo seja alcançado.

O comportamento dos parâmetros de nêutrons atrasados, bem como os coeficientes de temperatura do moderador e do combustível, e os efeitos de vazio total do refrigerante são semelhantes para as composições de núcleo propostas e o caso padrão. Portanto, esses parâmetros não são uma limitação para as análises de segurança do núcleo a fim de demonstrar a viabilidade do uso dos projetos de núcleo propostos.

Para compensar o excesso de reatividade e obter maior uniformidade de potência, o comportamento físico-neutrônico do núcleo foi estudado utilizando venenos queimáveis tipo IFBA e gadolínio. Diversas distribuições com barras IFBA foram investigadas para selecionar o número adequado de barras IFBA no projeto do núcleo iPWR, o que garante um excesso mínimo de reatividade a quente durante o ciclo do combustível e o comprimento estendido desejado. Em todos os casos, um

ciclo de combustível estendido de mais de 1400 EFPDs é alcançado. O uso de barras IFBA não perturba a distribuição de potência radial do núcleo.

As estratégias de controle de reatividade a quente usando gadolínia foram apresentadas em dois casos. A penalidade de reatividade obtida no fim da vida em todos os casos é menor que 1400 pcm, e maior do que no caso da estratégia de controle de reatividade a quente com barras IFBA. O acima representa uma diminuição na duração do ciclo de combustível. A massa dos isótopos ^{155}Gd e ^{157}Gd , presentes desde o início do ciclo, diminui no núcleo à medida que o combustível queima. O isótopo ^{157}Gd é consumido mais rapidamente que o ^{155}Gd , devido à sua alta seção transversal de absorção de nêutrons.

Foi desenvolvido um modelo computacional da seção crítica do núcleo, baseado no código OpenFoam, que permite o cálculo dos parâmetros termohidráulicos mais importantes. As distribuições de potência utilizadas para o cálculo foram as obtidas pelo Serpent.

Foi calculada a distribuição da temperatura axial do refrigerante no centro, ao longo da altura do subcanal. As temperaturas máximas obtidas para todos os casos estudados são inferiores à temperatura de saturação da água.

Foi calculada a distribuição de temperatura no combustível na seção mais quente, onde se obtém que a temperatura máxima para todos os tipos de combustível está no centro do combustível, e é inferior à temperatura do ponto de fusão. A temperatura na superfície externa do revestimento foi calculada para cada caso, e os resultados foram obtidos bem abaixo de 1477,6 K, que é a temperatura limite para casos de acidentes.

REFERÊNCIAS

- ADE, B. *et al.* Safety and Regulatory Issues of the Thorium Fuel Cycle. **U.S.NRC**, 2014. Disponível em: <<http://www.osti.gov/servlets/purl/1146984/>>.
- AMATULLAH, A. *et al.* Comparative analysis on small modular reactor (SMR) with uranium and thorium fuel cycle. **Nuclear Engineering and Design**, 2024. v. 418, p. 112934. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549324000360>>.
- BROWN, N. R.; WORRALL, A.; TODOSOW, M. Impact of thermal spectrum small modular reactors on performance of once-through nuclear fuel cycles with low-enriched uranium. **Annals of Nuclear Energy**, 2017. v. 101, p. 166–173.
- CARELLI, M. D.; INGERSOLL, D. T. **Handbook of small modular nuclear reactors**. [S.l.]: Elsevier Ltd, 2014.
- CHRISTOPHER W. LAPP; MICHAEL W. GOLAY. Modular design and construction techniques for nuclear power plants. **Nuclear engineering and design**, 1997. v. 172.
- CUDRNAK, P.; NECAS, V. Optimization of fuel assembly with gadolinium for LWRs. **Journal of Power of Technologies**, 2011. v. 91, n. 4, p. 186–190.
- CUMMINS, W. E.; MATZIE, R. Design evolution of PWRs: Shippingport to generation III+. **Progress in Nuclear Energy**, 2018. v. 102, p. 9–37. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2017.08.008>>.
- DANTAS, V. Informativo da Associação Brasileira de Energia Nuclear. **Revista Brasil Nuclear**, 2014. n. 42, p. 36.
- DURAZZO, M. *et al.* Phase studies in the UO₂-Gd₂O₃ system. **Journal of Nuclear Materials**, 2010. v. 400, n. 3, p. 183–188.
- ERIGHIN, M. A. A 48-month extended fuel cycle for the B&W mPower™ small modular nuclear reactor. **International Conference on the Physics of Reactors 2012, PHYSOR 2012: Advances in Reactor Physics**, 2012. v. 2, p. 1315–1330.
- ERNOULT, M. *et al.* Advanced plutonium management in PWR, complementarity of thorium and uranium. **Progress in Nuclear Energy**, 2015. v. 78, p. 330–340. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.pnucene.2014.09.012>>.
- FOAD, B.; MANSOUR, H.; AZIZ, M. Neutronic and burn-up calculations of heterogeneous Thorium/Uranium fuel in pressurized water reactors. **Kerntechnik**, 2010. v. 75, n. 5, p. 271–276.
- FUKUSHIMA, S. *et al.* The effect of gadolinium content on the thermal conductivity of near-stoichiometric (U,Gd)O₂ solid solutions. **Journal of Nuclear Materials**, 1982. v. 105, n. 2–3, p. 201–210.
- GALAHOM, A. A.; MOHSEN, M. Y. M.; AMRANI, N. Explore the possible advantages of using thorium-based fuel in a pressurized water reactor (PWR) Part 1: Neutronic analysis. **Nuclear Engineering and Technology**, 2022. v. 54, n. 1, p. 1–10. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1738573321004435>>.
- GLASSTONE, S.; SESONSKE, A. **Nuclear Reactor Engineering: Reactor systems**

engineering. FOURTH EDI ed. [S.l.]: Springer-Science+Business Media, B.V., 2010. V. C.

GODFREY, A. T. VERA core physics benchmark progression problem specifications. **Consortium for Advanced Simulation og LWRs**, 2014. n. 793, p. 1–189.

HALFINGER, J.; HAGGERTY, M. D. The B&W mPower™ Scalable, Practical Nuclear Reactor Design. **Nuclear Technology**, 1 maio. 2012. v. 178, p. 164–169.

HIDAYATULLAH, H.; SUSYADI, S.; SUBKI, M. H. Design and technology development for small modular reactors - Safety expectations, prospects and impediments of their deployment. **Progress in Nuclear Energy**, 2015. v. 79, p. 127–135. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.pnucene.2014.11.010>>.

HIPPEL, F. VON; MACKERRON, G. Alternatives To MOX: Direct-disposal options for stockpiles of separated plutonium. **International Panel on Fissile Materials Alternatives**, 2015. v. 104, n. 1, p. 13–15.

HUSSEIN, E. M. A. Emerging small modular nuclear power reactors: A critical review. **Physics Open**, 2020. v. 5, n. August, p. 100038. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physo.2020.100038>>.

IAEA. Characteristics and Use of Urania-Gadolinia Fuels. 1995. p. 1–191.

IAEA. Thorium fuel cycle — Potential benefits and challenges. **Nuclear Fuel Cycle and Materials Section International Atomic Energy Agency**, 2005.

IAEA. Thermophysical properties database of materials for light water reactors and heavy water reactors. **IAEA-TECDOC-1496**, 2006.

IAEA. Thermophysical Properties of Materials For Nuclear Engineering: A Tutorial and Collection of Data. **Nuclear Power Technology Development Section**, 2008.

IAEA. Nuclear Fuel Cycle Information System. **International Atomic Energy Agency**, 2009. n. April, p. 1–82.

IAEA. **Advances in Small Modular Reactor Technology Developments**. [S.l.]: [s.n.], 2014.

IAEA. **PRIS - Home**. **iaea**. Disponível em: <<https://www.iaea.org/pris/>>.

IAEA. **Uranium Resources , Production and Demand**. [S.l.]: [s.n.], 2018a.

IAEA. Advances in Small Modular Reactor Technology Developments. **A Supplement to: IAEA Advanced Reactors Information System (ARIS)**, 2018b.

IAEA. Thorium Resources as Co- and By- products of Rare Earth Deposits. **IAEA TECDOC Series-1892**, 2019a. p. 82.

IAEA. Waste from Innovative Types of Reactors and Fuel Cycles. **IAEA Nuclear Energy Series**, 2019b. v. No. NW-T-1, p. 1–132.

IAEA. EXAMEN DE LA TECNOLOGÍA NUCLEAR DE 2020. **Organismo Internacional de Energía Atómica**, 2020a.

IAEA. **Advances in Small Modular Reactor Technology Developments**. [S.l.]: [s.n.], 2020b.

IAEA. World Uranium Geology , Exploration , Resources and Production. Vienna, Austria: IAEA, 2020c, p. 988.

IAEA. Nuclear Technology Review 2024. 2024. n. 68, p. 128.

ISOTALO, A. **Computational Methods for Burnup Calculations with Monte Carlo Neutronics**. [S.l.]: [s.n.], 2013.

KASTEN, P. R. Review of the Radkowsky Thorium reactor concept. **Science & Global Security**, 1998. v. 7, n. 3, p. 237–269.

KESSIDES, I. N. The future of the nuclear industry reconsidered: Risks, uncertainties, and continued promise. **Energy Policy**, 2012. v. 48, n. June, p. 185–208.

KITCHER, E. D.; CHIRAYATH, S. S. Neutronics and thermal hydraulics analysis of a small modular reactor. **Annals of Nuclear Energy**, 2016. v. 97, n. December 2013, p. 232–245. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2016.07.019>>.

KORNECKI, K.; WISE, C. F. The role of advanced nuclear reactors and fuel cycles in a future energy system. **PNAS Nexus**, 2024. v. 3, n. 2, p. pgae030. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/pnasnexus/pgae030>>.

LANGLOIS, R. N. Modularity in technology and organization. **Journal of Economic Behavior and Organization**, 2002. v. 49, n. 1, p. 19–37.

LAUNDER, B.; SPALDING, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flow Computer Methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 1 mar. 1974. v. 3, p. 269–289.

LEPPÄNEN, J. **PSG2 / Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code**. [S.l.]: [s.n.], 2008.

LOCATELLI, G.; BINGHAM, C.; MANCINI, M. Small modular reactors: A comprehensive overview of their economics and strategic aspects. **Progress in Nuclear Energy**, 2014. v. 73, p. 75–85. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.pnucene.2014.01.010>>.

LOVASIC, Z. Spent Fuel Reprocessing Options. **Nuclear Fuel Cycle and Materials Section**, 2008. n. August, p. 151.

MARQUES, J. G. Evolution of nuclear fission reactors: Third generation and beyond. **Energy Conversion and Management**, 2010. v. 51, n. 9, p. 1774–1780. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2009.12.043>>.

MME. Resenha Energética Brasileira Ano Base 2019. **Resenha energética brasileira ano base 2019**, 2020. p. 32.

MME. Boletim Mensal novembro/2024. **Boletim Mensual de Energia**, 2024. p. 5.

NIAN, V. Global developments in advanced reactor technologies and international cooperation. **Energy Procedia**, 2017. v. 143, p. 605–610. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.12.734>>.

NUCLEAR ENERGY AGENCY. Introduction of thorium in the nuclear fuel cycle Short-to long-term considerations. **Nuclear Energy Agency**, 2015. v. 1, p. 133. Disponível em: <<https://www.oecd-neo.org/science/pubs/2015/7224-thorium.pdf>>.

NUCLEAR ENERGY AGENCY [NEA]. **Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems**. [S.l.]: [s.n.], 2014.

OECD. **Advanced Nuclear Fuel Cycles and Radioactive Waste Management**. [S.l.]: [s.n.], 2006.

OECD. **the Use of Thorium in the Nuclear Fuel Cycle**. [S.l.]: NUCLEAR ENERGY AGENCY ORGANISATION FOR ECONOMIC CO-OPERATION AND DEVELOPMENT, 2015.

OPENFOAM. OpenFOAM wiki. 2020. Disponível em: <<https://openfoamwiki.net>>.

ORGANISMO INTERNACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA IAEA. Examen de la Tecnología Nuclear de 2023. Informe del Director General. 2023. n. 67, p. 11. Disponível em: <https://www.iaea.org/sites/default/files/gc/gc60inf-2_sp.pdf>.

OWUSU, D.; HOLBROOK, M. R.; SABHARWALL, P. Regulatory and Licensing Strategy for Microreactor Technology. [S.l.]: Idaho National Laboratory, 2018.

PIORO, I. L.; RODRIGUEZ, G. H. Chapter 2 - Generation IV International Forum (GIF). In: PIORO, I. L. (Org.). **Handbook of Generation IV Nuclear Reactors (Second Edition)**. Woodhead Publishing Series in Energy. Second Edi ed. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2023, p. 111–132.

PLACE, R. Thermal-hydraulic design of the B&W mPOWER™ SMR. **American Nuclear Society**, 2017. n. May.

RODRÍGUEZ-PENALONGA, L.; SORIA, Y. M. A review of the nuclear fuel cycle strategies and the spent nuclear fuel management technologies. **Energies**, 2017. v. 10, n. 8.

ROSALES GARCÍA, J. A. *et al.* New stage on the neutronics and thermal hydraulics analysis of a small modular reactor core. **International Journal of Nuclear Energy Science and Technology**, 2018. v. 12, n. 4, p. 400.

ROSNER, R.; GOLDBERG, S. Small Modular Reactors – Key to Future Nuclear Power Generation in the U.S. **Energy Policy Institute at the University of ...**, 2011. n. July.

SANDERS, C. E.; WAGNER, J. C. **Study of the Effect of Integral Burnable Absorbers for PWR Burnup Credit**. [S.l.]: [s.n.], 2002.

SCARANGELLA, M. J. An extended conventional fuel cycle for the B&W mPower™ small modular nuclear reactor. **International Conference on the Physics of Reactors 2012, PHYSOR 2012: Advances in Reactor Physics**, 2012. v. 2, n. April 2012, p. 1726–1737.

SERPENT DEVELOPER TEAM. **Serpent Wiki**. Disponível em: <http://serpent.vtt.fi/mediawiki/index.php/Transient_simulations>.

SINGH, J.; BARNERT, H. Modular design concept for the HTR on the basis of AVR. **International Nuclear Information System**, 1982. Disponível em: <https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:14783994>.

STUCKERT, J.; PALAGIN, A. On the thermo-physical properties of Zircaloy-4 and ZrO₂ at high temperatures. **Nuclear Safety Institute Russian Academy of Science, Moscow**, 2002. n. January.

SUTHARSHAN, B. *et al.* The AP1000™ reactor: Passive safety and modular design. **Energy Procedia**, 2011. v. 7, p. 293–302. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2011.06.038>>.

TONG, L. S.; WEISMAN, J. **Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors**. [S.l.]: [s.n.], 1982. V. 56.

TSIGE-TAMIRAT, H. Neutronics assessment of the use of thorium fuels in current pressurized water reactors. **Progress in Nuclear Energy**, 2011. v. 53, n. 6, p. 717–721. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0149197011000540>>.

TULENKO, J.; SUBHASH, G. Development of an enhanced accident-tolerant composite UO₂ fuel pellet with a dopant of SiC whiskers. **OECD/NEA Workshop on Accident Tolerant Fuels of LWRs**, 2012. p. 31–32.

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

UGURU, E. H. *et al.* A comparative study on the impact of Gd₂O₃ burnable neutron absorber in UO₂ and (U, Th)O₂ fuels. **Nuclear Engineering and Technology**, 2020. v. 52, n. 6, p. 1099–1109. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1738573319305042>>.

WILCOX, D. **Turbulence Modeling for CFD (Third Edition) (Hardcover)**. [S.l.]: [s.n.], 2006.

WRIGLEY, P. A. *et al.* Module layout optimization using a genetic algorithm in light water modular nuclear reactor power plants. **Nuclear Engineering and Design**, 2019. v. 341, n. November 2018, p. 100–111.

ZELIANG, C. *et al.* Integral PWR-type small modular reactor developmental status, design characteristics and passive features: A review. **Energies**, 2020. v. 13, n. 11.