



INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Projeto conceitual do núcleo de um reator Small Modular Reactor do tipo
PWR para um submarino de propulsão nuclear utilizando o método de
Monte Carlo**

THAIS DUARTE TAVARES

**Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área
de Tecnologia Nuclear - Reatores**

Orientadora:

Profa. Dra. Gaiânê Sabundjian

São Paulo

2024

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Projeto conceitual do núcleo de um reator Small Modular Reactor do tipo
PWR para um submarino de propulsão nuclear utilizando o método de
Monte Carlo**

Versão Corrigida

Versão Original disponível no IPEN

THAIS DUARTE TAVARES

**Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do Grau
de Mestre em Ciências na Área
de Tecnologia Nuclear - Reatores**

Orientadora:

Profa. Dra. Gaiânê Sabundjian

São Paulo

2024

Fonte de Financiamento: Centro de Coordenação de Estudos da Marinha em São Paulo (CCEMSP)

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Como citar:

TAVARES, T. D. ***Projeto conceitual do núcleo de um reator Small Modular Reactor do tipo PWR para um submarino de propulsão nuclear utilizando o método de Monte Carlo***. 2024. 109 f. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN, São Paulo. Disponível em: <<http://repositorio.ipen.br/>> (data de consulta no formato: dd/mm/aaaa)

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de geração automática da Biblioteca IPEN, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Tavares, Thais Duarte

Projeto conceitual do núcleo de um reator Small Modular Reactor do tipo PWR para um submarino de propulsão nuclear utilizando o método de Monte Carlo / Thais Duarte Tavares; orientadora Gaiânê Sabundjian. -- São Paulo, 2024.
109 f.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Nuclear (Reatores) -- Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 2024.

1. Small Modular Reactor. 2. Submarino com propulsão nuclear. 3. código OpenMC. I. Sabundjian, Gaiânê, orient. II. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Autor: Thais Duarte Tavares

Título: Projeto conceitual do núcleo de um reator *Small Modular Reactor* do tipo PWR para um submarino de propulsão nuclear utilizando o método de Monte Carlo

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Nuclear da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Data: 16/05/2024

Banca Examinadora

Profa. Dra. Gaianê Sabundjian

Instituição: IPEN/CNEN

Julgamento: Aprovado

Dr. Thiago Carluccio

Instituição: CTMSP

Julgamento: Aprovado

Dr. Gregório Soares de Souza

Instituição: AMAZUL

Julgamento: Aprovado

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, Luiz e Heliene, que, com grandes esforços e muita dedicação, sempre buscaram me proporcionar a melhor educação possível e me mostraram que o maior bem que podemos ter nessa vida é o conhecimento.

Ao meu esposo, Thiago, que pôde compartilhar desse período ímpar comigo! Disposto a escutar e acolher meus tantos anseios nesse tempo, trazendo acalento e paz.

À minha querida orientadora Dra. Gaiânê, que com seu espírito dócil e gentil, muito confiou em mim, me ajudando em cada passo dessa caminhada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Grande Autor da vida! Aquele que com sua infinita bondade me concede o dom da vida!

Agradeço imensamente à minha querida amiga, conselheira, orientadora e professora Dra. Gaiânê Sabundjian! Ela que, com extremo profissionalismo e um cuidado maternal, iluminou meus passos nessa trajetória, tornando-a, sem dúvida, muito mais leve.

Agradeço aos Prof. Dr. Hélio Yoriyaz e Prof. Dr. Paulo De Tarso Siqueira pelos ensinamentos que me introduziram ao método de Monte Carlo e ao programa MCNP4C.

Agradeço à Marinha do Brasil que me proporcionou esse tempo para dedicar-me ao aprimoramento da minha capacidade profissional e ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) pela oportunidade de aprender e poder desenvolver esse projeto.

RESUMO

TAVARES, T. D. **Projeto conceitual do núcleo de um reator *Small Modular Reactor* do tipo PWR para um submarino de propulsão nuclear utilizando o método de Monte Carlo**. 2024, 109 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN-CNEN/SP. São Paulo.

A responsabilidade de proteger as águas jurisdicionais brasileiras é uma tarefa constitucional da Marinha do Brasil e de grande importância para a preservação dos recursos naturais presentes nesta área. Para tanto, é preciso que se tenham embarcações capazes de cumprir com essa missão. A utilização de submarinos, especialmente com propulsão nuclear, contribui sobremaneira para a permanente vigilância. No entanto, os desafios tecnológicos para a obtenção de um submarino com propulsão nuclear são enormes, entre eles a construção de uma planta nuclear embarcada adequada às demandas de operação do submarino, com alto grau de segurança, compactidade e longos ciclos de abastecimento. Para atender a esses critérios, o conceito de projeto dos reatores *Small Modular Reactors* (SMRs) é bastante interessante, pois são reatores com elevada segurança, de pequeno porte e com previsão de maior duração dos ciclos de operação. O objetivo deste estudo é realizar o projeto conceitual do núcleo de um reator SMR do tipo *Pressurized Water Reactor* (PWR) para a propulsão de um submarino utilizando o Método de Monte Carlo com o código OpenMC. Para tanto, o estudo foi dividido em etapas, iniciando por uma modelagem simples do núcleo, homogênea, para a qual foram avaliados diferentes tamanhos de núcleo, níveis de baixo enriquecimento do combustível, tipos de refletores e quantidade de material absorvedor. Posteriormente, é proposta uma primeira configuração heterogênea, mais realista, para alguns núcleos com maior possibilidade de emprego. Os resultados obtidos são coerentes com outros projetos de plantas SMR que estão em curso.

Palavras-chave: *Small Modular Reactor*, submarino com propulsão nuclear, código OpenMC.

ABSTRACT

TAVARES, T. D. **Conceptual design of a PWR type Small Modular Reactor core for a nuclear powered submarine using Monte Carlo method.** 2024, 109 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN-CNEN/SP. São Paulo.

The responsibility to protect Brazilian jurisdictional waters is a constitutional task of the Brazilian Navy and of great importance for the preservation of the natural resources present in this area. To do so, it is necessary to have vessels capable of carrying out this mission. The use of submarines, especially with nuclear propulsion, greatly contributes to permanent surveillance. However, the technological challenges in obtaining a submarine with nuclear propulsion are enormous, including the construction of an on-board nuclear plant suitable for the submarine's operating demands, with a high degree of safety, compactness and long refueling cycles. To meet these criteria, the design concept of Small Modular Reactors (SMRs) is very interesting, as they are reactors with high safety, small size and expected longer operating cycles. The objective of this study is to carry out the conceptual design of the core of a *Pressurized Water Reactor* (PWR) type SMR reactor for the propulsion of a submarine using the Monte Carlo Method with code OpenMC. In order to do so, the study was divided into stages, starting with a simple, homogeneous core modeling, for which different core sizes, levels of low enriched fuel, types of reflectors and quantity of absorbing material were evaluated. Subsequently, a first heterogeneous, more realistic configuration is proposed for some cores with greater possibility of use. The results obtained are consistent with other SMR plant projects that are underway.

Key words: Small Modular Reactor, nuclear powered submarine, software OpenMC.

LISTA DE TABELAS

	Página
Tabela 1 – Projetos de reatores de pequeno porte	26
Tabela 2 – Alguns projetos de SMR em desenvolvimento.....	28
Tabela 3 – Características de alguns submarinos de ataque com propulsão nuclear.....	37
Tabela 4 – Descrição das fases de uma missão típica para o submarino adotado	39
Tabela 5 – Dias à Máxima Potência (DMP) considerados	40
Tabela 6 – Total de DMP durante a vida do submarino	40
Tabela 7 – Características principais do submarino-tipo utilizadas no estudo	41
Tabela 8 – Comparação dos valores de k_{eff} para núcleos heterogêneo e homogêneo, com e sem material absorvedor	45
Tabela 9 – Valores das frações volumétricas estimadas para algumas plantas PWR.....	46
Tabela 10 – Concentrações volumétricas de moderador, combustível e revestimento para o primeiro estudo	47
Tabela 11 – Parâmetros de entrada adotados nas simulações.....	50
Tabela 12 – Razão entre a altura e o diâmetro equivalente (H/D) de algumas plantas PWR	51
Tabela 13 – Resumo das características dos núcleos da primeira etapa.....	51
Tabela 14 – Exemplo do material utilizado na primeira etapa – mistura homogênea.....	52
Tabela 15 – Diâmetro da pastilha combustível e espessura do revestimento para alguns projetos PWR.....	56
Tabela 16 – Características da vareta combustível utilizada no estudo.....	57
Tabela 17 – Razão moderador-combustível utilizada nas primeiras etapas do estudo.....	60
Tabela 18 – Número de elementos combustíveis para cada arranjo proposto.....	62
Tabela 19 - Intervalo de tempo utilizado para cálculo da queima dos núcleos	66
Tabela 20 - Configuração final do elemento combustível para cada enriquecimento.....	80
Tabela 21 – Porcentagem de retirada das barras de controle para obter núcleos críticos....	82

Tabela 22 – Valores de k_{eff} ao longo do período de queima.....	85
Tabela 23 – Novos valores de k_{eff} com 20% de inserção das barras de controle.....	90
Tabela 24 – Resumo da conformidade entre os núcleos estudados com os requisitos do submarino	90
Tabela 25 – Frações necessárias para cálculo da fração mássica do nuclídeo na célula ...	100

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1 – Extensão da Amazônia Azul	23
Figura 2 – Perfil básico de operação adotado para uma missão típica do submarino-tipo..	39
Figura 3 – Corte transversal e vista de topo da geometria do modelo a) heterogêneo sem absorvedor, b) heterogêneo com absorvedor e c) homogêneo	45
Figura 4 – Evolução do desvio padrão em relação ao número de ciclos da simulação	49
Figura 5 – Representação da geometria utilizada para os cálculos da primeira etapa.....	51
Figura 6 – Representação da geometria utilizada para os cálculos da segunda etapa	53
Figura 7 – Representação da geometria utilizada para os cálculos da terceira etapa com absorvedor em anel.....	55
Figura 8 – Valores de k_{eff} em função da razão moderador-combustível para diâmetros de pastilha combustível de 8,5 mm, 9,0 mm e 9,5 mm	57
Figura 9 – Variação do k_{eff} com a razão moderador-combustível	58
Figura 10 – Representação da geometria utilizada para estudo da razão moderador-combustível.....	59
Figura 11 – Comportamento do k_{eff} em função da razão moderador-combustível para diversos enriquecimentos	59
Figura 12 – Possíveis arranjos para os elementos combustível com a) 24 EC, b) 26 EC, e c) 32 EC	62
Figura 13 – Modelo do núcleo com 32 EC com arranjo 15x15. Vista superior	63
Figura 14 – Visualização da grade espaçadora modelada no OpenMC	64
Figura 15 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 60% de água.....	68
Figura 16 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 55% de água.....	69

Figura 17 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 50% de água.....	69
Figura 18 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 45% de água.....	69
Figura 19 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 3,5%	70
Figura 20 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 7%	71
Figura 21 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 10%	71
Figura 22 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 15%	71
Figura 23 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 19,5%	72
Figura 24 – Comportamento do k_{eff} para diferentes volumes de núcleo para fração volumétrica de água de 60%, enriquecimento de 3,5% e a) refletor de água e b) refletor de aço	73
Figura 25 – Comportamento do k_{eff} para diferentes frações volumétricas de água com núcleo de volume $0,6\text{ m}^3$, enriquecimento de 3,5% e a) refletor de água e b) refletor de aço	73
Figura 26 – Comportamento do k_{eff} para diferentes enriquecimentos de combustível para fração volumétrica de água de 45%, volume do núcleo de $0,6\text{ m}^3$ e a) refletor de água e b) refletor de aço.....	74
Figura 27 – Comparação entre a eficiência do refletor de água com o de aço para enriquecimentos de 3,5%	75
Figura 28 – Comparação entre a eficiência do refletor de água com o de aço para enriquecimentos de 7%	75
Figura 29 – Valores de k_{eff} para núcleo com refletor e enriquecimento de 3,5%	76
Figura 30 – Valores de k_{eff} para núcleo com refletor e enriquecimento de 7%	76

Figura 31 – Valores de $keff$ para núcleo com refletor e enriquecimentos de 10%, 15% e 19,5% com fração volumétrica de água de 45%	77
Figura 32 – Valores de $keff$ para o núcleo homogêneo com absorvedor diluído, volume de 0,6 m ³ , enriquecimento de 3,5% e refletor de 15% do valor do diâmetro do núcleo	77
Figura 33 – Comportamento do $keff$ para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 3,5% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel	78
Figura 34 – Comportamento do $keff$ para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 5% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel	78
Figura 35 – Comportamento do $keff$ para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 7% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel	79
Figura 36 – Comportamento do $keff$ para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 10% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel	79
Figura 37 – Curvas de criticalização para núcleos com enriquecimento de 3,5%, 5%, 7% e 10%	82
Figura 38 – Fluxo de nêutrons nos núcleos com enriquecimento de a) 3,5% em z= 35 cm, b) 5% em z = 37 cm, c) 7% em z=42 cm e d) 10% em z=46 cm.....	83
Figura 39 – Comportamento do $keff$ em função dos dias de operação à máxima potência para diversos enriquecimentos.....	84
Figura 40 – Comportamento do $keff$ com a formação de ¹³⁵ Xe e ¹⁴⁹ Sm para enriquecimento de 3,5%	85
Figura 41 – Comportamento do $keff$ com a formação de ¹³⁵ Xe e ¹⁴⁹ Sm para enriquecimento de 5%	85
Figura 42 – Comportamento do $keff$ com a formação de ¹³⁵ Xe e ¹⁴⁹ Sm para enriquecimento de 7%	86

Figura 43 – Comportamento do <i>keff</i> com a formação de ^{135}Xe e ^{149}Sm para enriquecimento de 10%	86
Figura 44 – Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 3,5%	87
Figura 45– Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 5%	87
Figura 46 – Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 7%	87
Figura 47 – Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 10%	88
Figura 48 – Estimativa da queima dos núcleos analisados	88

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CAD	Desenho Assistido por Computador (<i>Computer Aided Design</i>)
DMP	Dias à Máxima Potência
EC	Elemento Combustível
f	Fator de utilização térmica
HALEU	Combustível de urânio de baixo enriquecimento e alto desempenho (<i>High-Assay Low-Enriched Uranium</i>)
k_{eff}	Fator de multiplicação efetivo
LWR	Reator nuclear a água leve (<i>Light Water Reactor</i>)
MMC	Método de Monte Carlo
MW _(e)	Megawatts elétricos
MW _(th)	Megawatts térmicos
NRC	<i>United States Nuclear Regulatory Commission</i>
p	Probabilidade de escape à ressonância
pcm	Parte por cem mil
PWR	Reator nuclear a água pressurizada (<i>Pressurized Water Reactor</i>)
SMR	Reator Modular de Pequeno Porte (<i>Small Modular Reactor</i>)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Objetivo	20
1.2	Motivação do trabalho	20
1.3	Organização da dissertação	21
2	REVISÃO DA LITERATURA	22
2.1	Emprego dos submarinos militares	22
2.1.1	A importância dos submarinos para a Defesa Nacional	22
2.1.2	Características dos submarinos nucleares	23
2.1.3	Desafios do projeto de plantas nucleares embarcadas	24
2.2	Os reatores do tipo <i>Small Modular Reactor</i> (SMR)	25
2.2.1	O surgimento dos SMRs	25
2.2.2	Principais características técnicas	29
2.2.3	Principais características econômicas	31
2.3	Método de Monte Carlo	33
3	MATERIAIS E MÉTODOS	36
3.1	Modelo adotado de submarino	36
3.2	O código OpenMC	41
3.3	Modelo adotado do núcleo do reator	42
3.3.1	Tipo de mistura	42
3.3.2	Composição do núcleo	46
3.4	Determinação dos parâmetros da simulação	49
3.5	Desenvolvimento do trabalho	50
3.5.1	Primeira etapa: modelo homogêneo simples	50
3.5.2	Segunda etapa: modelo homogêneo com refletor	52
3.5.3	Terceira etapa: modelo homogêneo com refletor e absorvedor	54
3.5.4	Quarta etapa: modelo heterogêneo	55
3.5.5	Quinta etapa: análise da queima do núcleo	64
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	68
4.1	Resultados da primeira etapa: núcleo homogêneo simples	68
4.2	Resultados da segunda etapa: núcleo homogêneo com refletor	72
4.3	Resultados da terceira etapa: núcleo homogêneo com refletor e absorvedor	77
4.4	Resultados da quarta etapa: núcleo heterogêneo	80

4.5	Resultados da quinta etapa: avaliação da queima do núcleo	84
4.6	Conformidade entre os resultados obtidos aos requisitos do submarino.....	89
5	CONCLUSÕES	91
5.1	Sugestões para trabalhos futuros.....	92
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	94
	APÊNDICE A – Determinação do material para os dados de entrada do OpenMC ..	98
	APÊNDICE B – Determinação das frações volumétricas para terceira etapa	108

1 INTRODUÇÃO

A utilização de submarinos como uma estratégia militar não é algo novo, na verdade, o primeiro submarino empregado para fins militares teria sido o *American Turtle*, colocado em operação em 1776 na Guerra da Independência dos Estados Unidos, embora os registros sejam bastante duvidosos da eficácia do meio¹. Esse submarino, de bem pequena dimensão e movido pela força braçal de seu tripulante, teria sido capaz de colocar um explosivo na embarcação britânica *Eagle*¹. O registro ainda é contestado pelos ingleses.

Ao longo dos anos, a tecnologia dos submarinos foi sendo aprimorada para que se passasse a ter maior autonomia, com propulsão a vapor e, posteriormente, a motores diesel e baterias, e maior capacidade bélica, pela implementação dos torpedos. Durante as Guerras Mundiais, a utilização dos submarinos de forma estratégica se tornou muito evidente, garantindo à Alemanha domínio sob o oceano Atlântico na Primeira Guerra Mundial e aos Estados Unidos a hegemonia no oceano Pacífico na Segunda Grande Guerra (DARÓZ, 2021).

Não obstante, o desejo de desenvolver submarinos ainda mais eficientes, com maior autonomia e discrição, ou seja, menos tempo de navegação na superfície onde podem ser facilmente detectados, continuou crescendo até que, em 1954, foi lançado o primeiro submarino com propulsão nuclear, o *USS Nautilus*, da marinha norte-americana, portando um reator do tipo *Pressurized Water Reactor* (PWR)². Esse submarino continha a bordo um reator nuclear como principal fonte de geração de energia e não motores a diesel. O reator do *USS Nautilus* foi desenvolvido pela Westinghouse. Para tanto, o primeiro projeto de reator a água pressurizada (PWR), S1W (“S” refere-se à submarino, “1” à primeira geração e “W” à projetista Westinghouse), foi instalado no Laboratório Nacional de Engenharia de Idaho para realização de testes e verificação de funcionalidade. Aprimoramentos na planta deram origem ao reator S2W que foi efetivamente instalado no *USS Nautilus*.

A grande vantagem encontrada no projeto deste novo tipo de reator à água pressurizada foi sua compactidade e alta confiabilidade. Considerando o espaço limitado de

¹ *Connecticut River Museum, ‘Turtle’ Submarine*, disponível em <<https://ctrivermuseum.org/turtle-submarine/>>. Acesso em: 11 jan. 2024.

² *Submarine Force Library and Museum Association, History of USS Nautilus*, disponível em: <<https://ussnautilus.org/history-of-uss-nautilus/>>. Acesso em: 25 jan. 2024.

um submarino, era fundamental que o reator desenvolvido apresentasse estas características, feito conseguido pela Westinghouse com os projetos dos S1W e S2W. O conceito do reator a água pressurizada foi tão bem-sucedido que, anos mais tarde, o PWR tornou-se o tipo de reator mais difundido em todo o mundo não só na propulsão de submarinos, mas, principalmente, na indústria nuclear civil para geração de energia elétrica.

Desde o *Nautilus*, as marinhas ao redor do mundo buscaram, e algumas ainda buscam, adquirir esse tipo de submarino, não só para a defesa estratégica de suas águas territoriais e efeito dissuasório, mas, também, como uma demonstração de prestígio internacional, tendo em vista que os submarinos com propulsão nuclear estão presentes nas armadas de apenas seis países: Estados Unidos da América, Rússia, Reino Unido, França, China e Índia (WORLD NUCLEAR ASSOCIATION, 2023).

O Brasil tem buscado desenvolver seu primeiro submarino com propulsão nuclear, o “Álvaro Alberto”, com previsão de lançamento em 2033 (MARINHA DO BRASIL, 2020). Embora este projeto já esteja avançado, é vista como uma oportunidade futura de desenvolvimento para o Brasil a implementação de reatores ainda mais compactos e seguros nos submarinos, tais como os projetos dos *Small Modular Reactors* (SMRs) que têm sido desenvolvidos em diversos países. Esses pequenos reatores apresentam conceitualmente características ideais para o ambiente naval, em especial submarinos, em virtude da grande restrição de espaço para acomodar uma planta nuclear na embarcação.

Os SMRs são reatores nucleares com potência elétrica entre 10 a 300 MW_(e), projeto integral e intrinsecamente seguros. O principal objetivo desses projetos é apresentar soluções para os problemas relacionados aos grandes reatores de potência das Gerações II e III, em especial no tocante ao aumento da segurança de operação e redução do custo inicial de implementação.

A maior segurança na operação é advinda do projeto integral, no qual todos os equipamentos do circuito primário estão contidos dentro de um grande vaso de pressão, e da segurança intrínseca, buscando sistemas passivos de segurança. Para a redução do custo inicial de implantação, no projeto dos SMRs busca-se possibilitar uma associação progressiva de novas unidades para que o investimento inicial não seja tão elevado e a capacidade da central nuclear possa crescer à medida que mais recursos sejam disponibilizados. Assim, espera-se que seja possível expandir a utilização da energia nuclear como fonte para produção de energia elétrica por mais países, especialmente os menos desenvolvidos economicamente, e em localidades mais remotas (INGERSOLL e CARELLI, 2021).

Devido às vantagens observadas na concepção dos SMRs, vários projetos desse tipo de planta estão em curso, tais como o NuScale (EUA), CAREM (Argentina), SMART (Coreia do Sul), ACP100 (China), KLT-40S (Rússia), UK SMR (Reino Unido), entre outros. Esses projetos encontram-se em fases diferentes, mas de modo geral, buscam por uma maior longevidade dos ciclos de operação e possivelmente uma cogeração, para aproveitar a planta também para outras finalidades como fonte de calor industrial e dessalinização da água para produção de água potável (INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2020).

Para o Brasil, o estudo de plantas SMRs é muito importante e possibilita diversas aplicações. Dentro da indústria de defesa, pode ser utilizado para os futuros projetos de submarinos com propulsão nuclear ou até outras embarcações maiores, como um porta-aviões, por exemplo. Há, ainda, a perspectiva de utilizar essas plantas para diversificação da malha energética, levando energia elétrica para partes mais distantes do país que ainda não se encontram conectadas à malha energética nacional, tais como diversas comunidades ribeirinhas ou fronteiriças que não têm energia elétrica ou a tem somente por meio de geradores a diesel/gasolina por um tempo limitado do dia.

Assim, neste trabalho, será estudado o núcleo de um reator SMR do tipo PWR para utilização em um submarino com propulsão nuclear, com possível aproveitamento para geração de energia elétrica para pequenas comunidades ou plataformas de petróleo *offshore*.

1.1 Objetivo

O objetivo deste trabalho é:

- a) Realizar o projeto conceitual de um núcleo de reator SMR do tipo PWR para ser empregado em um submarino com propulsão nuclear, por meio de um estudo qualitativo e simplificado de diversas possíveis configurações para o núcleo, utilizando o Método de Monte Carlo e visando a atingir o máximo de tempo possível de operação do submarino sem a necessidade de reabastecimento do combustível;
- b) Propor uma primeira modelagem mais realista, heterogênea, do núcleo do reator baseado nos resultados obtidos na análise anterior, avaliando a duração do núcleo e sua compatibilidade com o tempo de operação previsto para o submarino.

1.2 Motivação do trabalho

A Marinha do Brasil já realizou o projeto dos reatores para as plantas nucleares do LABGENE e SCPN Álvaro Alberto, sendo o conhecimento adquirido vital para o

desenvolvimento tecnológico do Brasil. Assim, a motivação deste trabalho é manter a capacidade adquirida de realizar o projeto dos núcleos de reatores nucleares do tipo PWR. Portanto, essa capacidade pode ser empregada em novos projetos de submarinos com propulsão nuclear e, também, para plantas de pequeno porte capazes de fornecer energia elétrica para comunidades que se encontram fora da malha energética, necessitando de geradores movidos à combustíveis fósseis, ou plataformas de petróleo em alto mar.

1.3 Organização da dissertação

A presente dissertação segue o Guia para elaboração de dissertações e teses documento oficial do Programa de Pós-graduação em Tecnologia Nuclear do IPEN/USP (IGAMI e VIEIRA, 2017).

O Capítulo 1 apresenta uma breve introdução sobre o desenvolvimento dos submarinos com propulsão nuclear, os conceitos e projetos em curso dos reatores SMRs, além dos objetivos do trabalho, a motivação e estruturação da dissertação.

Uma breve revisão da literatura é apresentada no Capítulo 2. Inicialmente, é abordada a importância dos submarinos com propulsão nuclear, suas principais características e desafios ao seu projeto. Posteriormente, é apresentado um resumo sobre os reatores SMRs, suas características e vantagens e alguns projetos em andamento no mundo. Por fim, são descritos os conceitos do método de Monte Carlo

No Capítulo 3, os materiais e métodos são descritos. Esse capítulo enfoca no desenvolvimento dos modelos do núcleo do reator para cada etapa do estudo, apresentando as simplificações consideradas, bem como o objetivo pretendido em cada etapa.

No Capítulo 4, os resultados das simulações numéricas realizadas com o código OpenMC são apresentados juntamente com uma análise da coerência dos resultados obtidos com base na literatura.

As conclusões obtidas no presente estudo, assim como propostas para estudos futuros estão descritas no Capítulo 5.

São dois os apêndices incluídos. O Apêndice A apresenta a modelagem utilizada para cálculo das frações mássicas dos núclídeos presentes na composição do material empregue no dado de entrada do OpenMC para os casos com mistura homogênea. No Apêndice B, é descrita a alteração na fração volumétrica dos componentes do núcleo do reator realizada para inclusão do material absorvedor em forma de anel na terceira etapa de estudo.

2 REVISÃO DA LITERATURA

A revisão da literatura é composta de breves resumos sobre os aspectos mais importantes que compõem o trabalho, tais como as plantas nucleares embarcadas, com foco principal nos submarinos militares, o conceito de projeto dos reatores SMRs, demonstrando alguns projetos em curso e, por fim, o emprego do Método de Monte Carlo (MMC) dentro da indústria nuclear.

2.1 Emprego dos submarinos militares

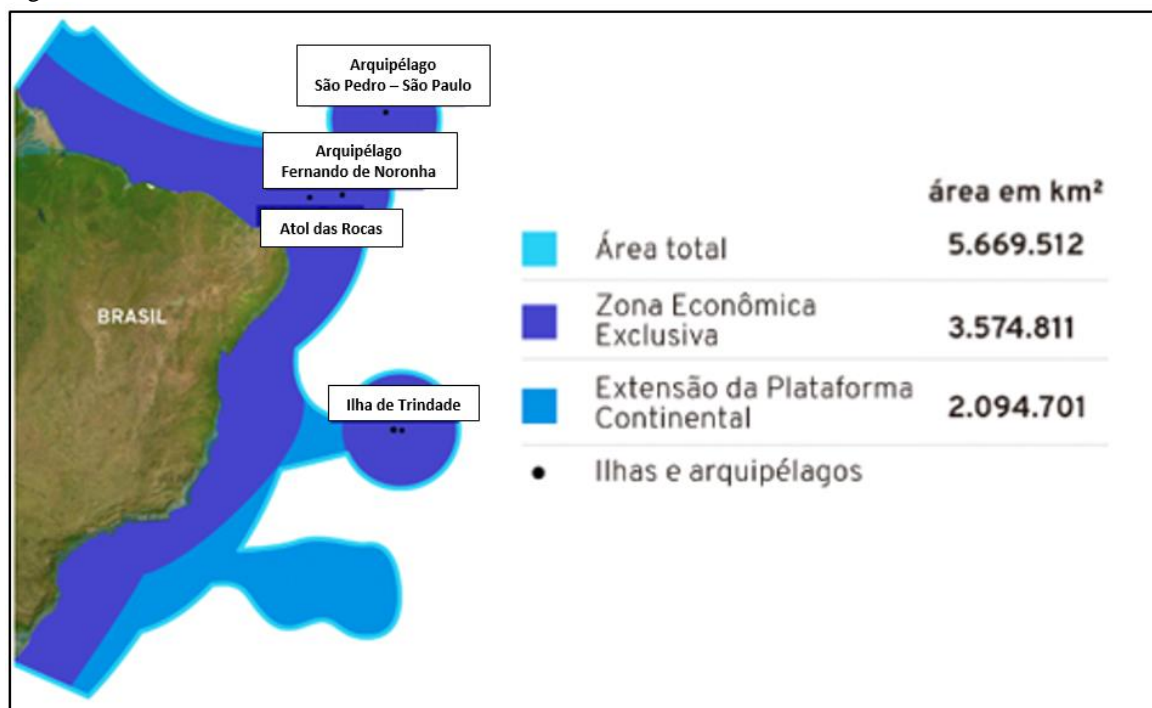
2.1.1 A importância dos submarinos para a Defesa Nacional

O Brasil é o 16º país com maior extensão de costa marítima do mundo, possuindo nada menos que quase 6 milhões de km² de área marítima, incluindo a Zona Econômica Exclusiva e a Extensão da Plataforma Continental (CENTRAL INTELLIGENCE AGENCY, 2018).

A fim de chamar atenção para a importância dessa extensa área brasileira, a Marinha do Brasil criou o conceito de Amazônia Azul. Segundo a própria Marinha do Brasil, esta é a região que compreende a superfície do mar, águas sobrejacentes ao leito do mar, solo e subsolo marinhos contidos na extensão atlântica que se projeta a partir do litoral até o limite exterior da Plataforma Continental brasileira, conforme mostrado na Figura 1 (MARINHA DO BRASIL, 2019). Por ela, mais de 95% do comércio exterior brasileiro trafega e cerca de 95% do petróleo nacional é extraído.

É da Marinha do Brasil o dever institucional de proteger a Amazônia Azul por meio do controle de área marítima, negação do uso do mar, ou seja, impedir que forças navais estrangeiras explorem ou utilizem as águas territoriais brasileiras sem autorização e, ainda, dificultar o controle dos mares por esquadras inimigas, projeção do poder naval sobre terra e contribuição para a dissuasão (BRASIL, 2016). Para tanto, são necessários meios para realizar a proteção das áreas e contribuir com a dissuasão. Entre estes, existem os meios de superfície, que englobam navios como fragatas, corvetas e patrulhas; os aeronavais, compostos por aeronaves de asa rotativa e fixa que contribuem para o patrulhamento e, por fim, os submarinos.

Figura 1 – Extensão da Amazônia Azul



Fonte: LINKI³, 2024.

Dentre os meios navais existentes, um dos mais eficazes em contribuir para a dissuasão é o submarino e, em especial, o com propulsão nuclear. Pois, devido à sua discrição e armamentos, é um meio que ajuda a criar o efeito psicológico desejado nos inimigos, isto é, fazê-los avaliar o risco de desferir um ataque frente às possíveis consequências de retaliação. No entanto, embora tenham um custo mais elevado tanto de fabricação quanto de manutenção, ele apresenta outras vantagens estratégicas que o torna uma importante embarcação para a marinha.

2.1.2 Características dos submarinos nucleares

Nos submarinos “convencionais”, a principal fonte de energia a bordo são grandes bancos de baterias que suprem toda a demanda de energia elétrica do navio, tanto para o Motor Elétrico de Propulsão (MEP) quanto para os demais equipamentos da embarcação, que são recarregados por motores a diesel acoplados a geradores. Já nos submarinos com propulsão nuclear, a principal fonte de energia é oriunda de um reator nuclear de potência acoplado a um ciclo de Rankine. Assim, os submarinos convencionais precisam se aproximar da superfície de tempos em tempos para fazer a captação do oxigênio necessário para o funcionamento dos motores a diesel e recarga das baterias. Essa

³LINKI: Pereira, R. Gazeta do Povo. Disponível em: <<https://www.gazetadopovo.com.br/republica/amazonia-azul-brasil-potencia-militar-atlantico>>. Acesso em: 10 mar. 2024.

necessidade não ocorre nos submarinos de propulsão nuclear em decorrência da característica anaeróbica da fonte energética.

Em virtude disso, o submarino com propulsão nuclear é bem mais discreto que o com propulsão a diesel. A taxa de indiscrição de um submarino é a razão entre o tempo em que o submarino está na superfície ou muito próximo dela (i.e., cota periscópica) e o tempo total de missão. Ou seja, quanto mais um submarino navega na superfície mais indiscreto é e, conseqüentemente, mais facilmente poderá ser detectado por outras embarcações, contrariando sua principal vantagem que é a ocultação de sua localização. Como nos submarinos convencionais é necessário emergir à superfície frequentemente, ele se torna um meio muito mais indiscreto que o submarino de propulsão nuclear que não precisa emergir à superfície para obter energia.

Como a energia a bordo no submarino com propulsão nuclear é virtualmente ilimitada, o navio é capaz de realizar missões bem mais longas que os convencionais, sendo limitadas pelo fator humano físico – quantidade de mantimentos – e psicológico do confinamento e afastamento familiar. Nos submarinos convencionais, além do fator humano, também existe o fator operacional limitante da quantidade de óleo diesel que pode ser transportada a bordo, o que restringe o período máximo que o navio pode permanecer em missão sem precisar ser reabastecido.

2.1.3 Desafios do projeto de plantas nucleares embarcadas

As plantas desenvolvidas para propulsão naval, especialmente para fins militares, possuem algumas especificidades que tornam seu projeto mais complexo em relação às plantas de terra.

Primeiramente, em uma embarcação com propulsão nuclear, seja navio de superfície ou submarino, ocorre uma frequente variação da potência demandada. Ou seja, a potência do reator é variada de acordo com a velocidade que o navio precisa desenvolver. Dessa forma, é fundamental que o sistema de proteção do reator permita alterações de potência em um gradiente maior que o observado em plantas de terra, estas que operam, na maior parte do tempo, à plena carga, passando por rampas de potência apenas na partida e na parada para manutenções programadas, excetuando-se eventuais acidentes ou incidentes que necessitem o rápido desligamento da planta, sendo bem mais raros.

Existe ainda o fato da planta de propulsão naval operar em uma plataforma móvel, ou seja, que acompanha os movimentos naturais devido às ondas do mar. Isso faz com que os projetistas do reator tenham que considerar alguns aspectos que não são

encontrados em plantas em terra, tais como as acelerações decorrentes dos movimentos dinâmicos do navio (i.e., caturro, balanço, cabeceio) que precisam ser levadas em conta no projeto estrutural; os mancais e suportes que eventualmente precisarão resistir a cargas axiais; a variação do nível do líquido internamente que poderia ocasionar um descobrimento localizado do núcleo ou efeito de superfície livre. Esses aspectos tornam o projeto mais complexo, pois trazem novas condições de operação para os equipamentos.

Por fim, um fator que traz bastante dificuldade no projeto de plantas navais é a exigência de compactidade. Nas plantas de terra, existe toda uma localidade reservada para a implantação dos sistemas que permite fácil acesso aos equipamentos. Infelizmente, essa não é a realidade para os reatores nucleares embarcados. Nos navios, o espaço para a colocação da planta de potência é bem mais limitado, exigindo que todo o projeto vise a ser o mais compacto possível! Essa necessidade é ainda maior quando a embarcação é um submarino, onde o casco resistente possui entre 6 e 12 metros de diâmetro, no qual todos os equipamentos precisam ser acomodados. Portanto, o volume no qual o reator e todos os sistemas de segurança precisam ser instalados é bem reduzido, causando uma grande restrição ao projeto da planta.

Desse modo, a operação de um submarino com propulsão nuclear é muito vantajosa para o país que possui esse meio naval, entretanto, os desafios tecnológicos de projeto e construção impõem grandes dificuldades ao desenvolvimento desses meios, afinal, como envolve estratégia e tecnologia, os países que já operam esses submarinos não compartilham as informações.

2.2 Os reatores do tipo *Small Modular Reactor* (SMR)

2.2.1 O surgimento dos SMRs

Apesar de desde meados da década de 1980 o projeto de reatores SMRs estar em constante discussão, essa ideia de concepção de reatores não é exatamente nova.

Reatores de baixa potência foram amplamente projetados e empregados desde os anos 1950, mas com aplicação limitada principalmente à propulsão de navios militares e alguns civis (cargueiros e quebra-gelo) e pequena geração de energia (Tabela 1). Como a tecnologia empregada nesses projetos foi bastante promissora, muitas plantas surgiram posteriormente devido ao aumento de escala desses primeiros projetos.

Tabela 1 – Projetos de reatores de pequeno porte

Reatores	País	Tipo de Planta	Potência	Ano de operação	Finalidade
USS Nautilus (SSN-571)	EUA	PWR	~9,8 MW _(e)	1954	Propulsão submarino
Shippingport	EUA	PWR	60 MW _(e)	1958	Pesquisa
Yankee Rowe	EUA	PWR	185 MW _(e)	1960	Produção de energia elétrica
Dresden	EUA	BWR	210 MW _(e)	1960	Produção de energia elétrica
PAMIR (TES-3)	Rússia	PWR	2 MW _(e)	1961	Produção de energia elétrica para postos militares de radar
Indian Point One	EUA	PWR	275 MW _(e)	1962	Produção de energia elétrica
US Savannah	EUA	PWR	74 MW _(th)	1962	Propulsão navio cargueiro
Otto Hahn	Alemanha	PWR	38 MW _(th)	1968	Propulsão navio cargueiro
Matsu	Japão	PWR	36 MW _(th)	1972	Propulsão navio cargueiro
Sevmorput	Rússia	PWR	135 MW _(th)	1988	Propulsão navio cargueiro (com função de quebra gelo também)

Fonte: autora da dissertação.

O ressurgimento do interesse por plantas de pequeno porte emergiu da necessidade de buscar meios de viabilizar a utilização da energia nuclear por mais clientes, contornando os problemas de elevado custo inicial de investimento, elevado risco financeiro para o investidor e a incompatibilidade da potência da planta nuclear com a rede elétrica local (i.e.; grandes centrais nucleares devem essencialmente serem instaladas em locais onde o consumo elétrico seja compatível para manter a planta operando a plena carga). Desse modo, a indústria nuclear tem trazido os SMRs como uma alternativa para solucionar esses problemas-chave das grandes centrais de potência e ainda ampliar a utilização desses reatores para outras áreas como geração de calor para uso industrial ou aquecimento e dessalinização de água (INGERSOLL, D. T e CARELLI, M. D, 2021).

Os SMRs são reatores com produção entre 10 e 300 MW elétricos de potência, integrais, ou seja, com arranjo de todos componentes do circuito primário dentro do vaso do reator, e, em decorrência disso, compactos. Tais características favorecem a redução do tempo de construção e dos custos de operação e manutenção. Alguns projetos são ainda capazes de prover características mais flexíveis em sua operação por meio da variação de potência, podendo alterar sua capacidade de produção entre 20% e 100% do seu máximo

(COOK e ESPEL, 2019). Por fim, parte dos SMRs em desenvolvimento consideram a utilização de combustível de urânio de baixo enriquecimento e alto desempenho (HALEU, do inglês *High-Assay Low-Enriched Uranium*), proporcionando ciclos de reabastecimento mais longos do que a maioria dos reatores atuais em operação.

De acordo com a Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA – em inglês *International Agency Energy Atomic - IAEA*), aproximadamente 72 SMRs estão em desenvolvimento no mundo, o que representa um aumento de 40% em relação a 2018 (INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2020; INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2018).

Os SMRs propostos pelas empresas projetistas são uma evolução de reatores de água leve de Geração II e Geração III / III+ (LWR) em operação em todo o mundo, pois estes reatores possuem décadas de experiência operacional e regulatória. Estes reatores representam aproximadamente 50% dos projetos SMRs que estão em desenvolvimento e os outros 50% dos projetos de SMRs correspondem a reatores de Geração IV (Gen IV SMR) que incorporam outros tipos de refrigerantes (metal líquido, gás ou sais fundidos), combustível avançado e configurações inovadoras, conforme apresentado na Tabela 2. Os projetos de SMRs que se encontram em desenvolvimento são bastante diversos no tocante ao tipo de configuração, combustível e refrigerante utilizados e no nível de licenciamento. De acordo com o publicado pela *Nuclear Energy Agency* (2021), os projetos dos SMRs podem ser divididos em cinco categorias, que são:

- a) uma unidade LWRs – SMRs: reatores refrigerados à água leve, tecnologia já bastante sedimentada, e que podem substituir pequenas unidades de combustível fóssil ou serem implantados como geração distribuída;
- b) multi-módulos LWRs – SMRs: reatores refrigerados à água leve com vários módulos, podem ser operados como substitutos de cargas de médio porte ou serem implantados como geração distribuída;
- c) móvel/transportável: reatores refrigerados à água leve que podem ser facilmente movidos de um local para outro, sendo os reatores de embarcações incluídos nesta categoria;
- d) Geração IV (Gen IV) SMRs: reatores que empregam tecnologias avançadas que não sejam LWRs e incluem muitos dos conceitos que já foram estudados pela Geração IV Internacional;
- e) Micro/Mini Modular Reactors (MMRs): reatores que representam projetos com menos de 10 MW_(e) de capacidade, frequentemente tem a capacidade de operação

semiautônoma e com melhor transportabilidade em relação aos SMRs maiores. São reatores baseados em LWRs com uma ampla capacidade de aplicações tecnológicas, incluindo a Gen IV. MMRs são principalmente destinados à operação fora da rede, em locais remotos onde deverá competir com as outras fontes de energia (NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2021).

Tabela 2 – Alguns projetos de SMR em desenvolvimento

Projeto de Reator	Potência Nominal (MW _e)	Eficiência	Ciclo de operação (meses)	Aplicação desejada	País	Empresa
Refrigerado a água leve (PWR) (Geração III/III⁺)						
ACP100	125	32%	24	Energia elétrica Aquecimento Produção de vapor Dessalinização	China	CNNC/ Guodian
CAREM	30	30%	14 ⁴	Energia elétrica Dessalinização	Argentina	CNEA/ INVAP
KLT-40S	35	23%	30-36	Energia elétrica Calor industrial Dessalinização	Rússia	OKBM
NuScale	60	30%	24	Energia elétrica Calor industrial	Estados Unidos	NuScale Power/Fluor
RITM-200	53	32%	72-84	Energia elétrica Fornecimento de calor Dessalinização	Rússia	OKBM
SMART	107	29%	30	Energia elétrica Aquecimento Calor industrial Dessalinização	Coréia do Sul	KAERI
SMR-160	160	30%	24	Energia elétrica Geração de hidrogênio Aquecimento Dessalinização	Estados Unidos	Holtec
UK SMR	443	35%	18-24	Energia elétrica	Reino Unido	Rolls-Royce e parceiras
Nuward	2x170	34%	24	Energia elétrica	França	EDF e parceiras
Refrigerado a água leve (BWR) (Geração III/III⁺)						
BWRX-300	270-290	31-33%	12-24	Energia elétrica (regime segue-carga) Aquecimento Calor industrial	Estados Unidos/ Japão	GE-Hitachi
Refrigerado a gás (Geração IV)						
EM²	265	53%	360	Energia elétrica Uso de alta temperatura	Estados Unidos	General Atomics
GT-MHR	288	48%	25	Energia elétrica Produção de hidrogênio	Rússia	OKBM
HTR-PM	210	42%	Online ⁵	Energia elétrica	China	INET Tsinghua University

⁴ Período previsto para o protótipo.

⁵ Elemento combustível do tipo esférico com revestimento. É inserido continuamente no reator enquanto em operação.

Tabela 2 – Alguns projetos de SMR em desenvolvimento (continuação)

Projeto de Reator	Potência Nominal (MW _(e))	Eficiência	Ciclo de operação (meses)	Aplicação desejada	País	Empresa
Refrigerado a gás (Geração IV)						
Xe-100	82,5	41%	Online ⁵	Calor industrial Dessalinização Energia elétrica	Estados Unidos	X Energy, LLC
Refrigerado a sódio (Geração IV)						
4S	10/50	33%/37%	NA ⁶	Energia elétrica Produção de hidrogênio e oxigênio	Japão	Toshiba
PRISM	311	37%	12-26 ⁷	Energia elétrica Queima de combustível usado de LWR	Estados Unidos	GE-Hitachi
Refrigerado a chumbo (Geração IV)						
SVBR-100	100	36%	84-96	Energia elétrica Aquecimento Recondicionamento de NPP de reatores com vida útil expirada Dessalinização	Rússia	JSC EDB
BREST	300	43%	30 - 50	Demonstração e estudo dos sistemas de segurança Energia elétrica ⁸	Rússia	AKME-Engineering
Refrigerado a sal fundido (Geração IV)						
IMSR⁹	195	44%	84	Energia elétrica (possibilidade de regime segue-carga)	Canadá	Terrestrial Energy, Inc.
LFTR¹⁰	250	42%	Contínuo ¹¹	Energia elétrica	Estados Unidos	Flibe Energy, Inc.

Fonte: autora da dissertação.

2.2.2 Principais características técnicas

A concepção de SMR baseia-se nos ideais de pequeno e modular. O pequeno refere-se à potência elétrica fornecida, variando entre 10 e 300 MW_(e). Já o modular, refere-se a uma única unidade que, ao ser acoplada com algum sistema de conversão de energia (p.ex., ciclo Rankine, ciclo Brayton), fornece o produto desejado (energia elétrica, água dessalinizada, calor para indústria ou aquecimento residencial). Assim, esse pequeno reator,

⁶ Núcleo projetado para 30 anos de operação para o dado de 10 MWe e para 10 anos para o de 50 MWe.

⁷ A depender da finalidade do reator escolhida.

⁸ Após os testes operacionais, a planta será comissionada para produção de energia elétrica.

⁹ IMSR: *Integral Molten Salt Reactor*.

¹⁰ LFTR: *Liquid Fluoride Thorium Reactor*.

¹¹ Combustível U²³³ é gerado durante operação por meio da transmutação do Th²³².

além de poder ser empregado para geração de energia para locais não conectados à rede elétrica principal, tais como localidades remotas, ilhas, plataformas petrolíferas, pode também vir a substituir antigas termoelétricas a carvão e, também, ser empregado para propulsão naval.

Algumas características chave do projeto dos SMRs são vantagens que advêm exatamente em função do tamanho reduzido dessas plantas. Essas características, listadas abaixo, têm sido empregadas na maioria dos projetos em desenvolvimento (NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2021):

- **Projeto integral:** integração de todos os componentes do sistema de geração de vapor em um único vaso de pressão. Nesta configuração, o inventário de refrigerante existente dentro do vaso de pressão é substancialmente maior do que se teria em um sistema não integral, favorecendo a transferência de calor e aumentando a inércia térmica do sistema. Consequência disso é um projeto mais robusto, intrinsecamente seguro, em virtude da redução da quantidade das grandes tubulações de água, e com operação e manutenção simplificados;
- **Segurança intrínseca:** a baixa potência de saída requer núcleos menores que possuem maior razão de área superficial por volume, o que favorece a eficiência dos sistemas passivos de segurança em condições normais e anormais de operação. Com o aumento da confiabilidade nos sistemas passivos, é possível simplificar o projeto do reator com menos sistemas integrados para garantir a segurança;
- **Menor inventário do núcleo:** essa característica traz benefícios tanto para a planta em si quanto para seu local de instalação. Para a planta, um menor inventário do núcleo possibilita a redução da blindagem requerida e da exposição a doses pelos operadores. Em relação às proximidades, quanto menor o inventário nuclear, menor a probabilidade de ocorrência de um acidente e menor a energia capaz de promover uma eventual liberação de material radioativo. Com isso, é possível reduzir a área da Zona de Planejamento de Emergência e, por conseguinte, instalar um SMR bem perto de onde a energia é necessária;
- **Modularização e capacidade de fabricação aprimoradas:** o pequeno porte dos SMRs facilita a fabricação, transporte, içamento e pré-montagem de

muitos equipamentos, permitindo aumentar o nível de manufatura executado nas fábricas e reduzindo o in loco, o que melhora a produção e reduz custos;

- **Flexibilidade aprimorada:** em virtude de suas características próprias de projeto, os SMRs podem ter uma operação otimizada em regime segue-carga, facilitando a implementação em localidades com demanda de energia variável. Ainda, a flexibilidade dessas plantas se refere também a sua capacidade de implantação, podendo ser empregadas em locais mais diversos com menores restrições, e também ao seu emprego, como a geração combinada de energia elétrica e outros subprodutos (p. ex., calor industrial, dessalinização).

Em relação à tecnologia do combustível, para possibilitar uma entrada mais rápida no mercado, muitos projetos de SMRs do tipo LWR (mais relacionados à Geração III/III⁺) utilizam elementos combustíveis semelhantes aos já empregados nos grandes reatores de potência, inclusive no tocante ao nível de enriquecimento girando abaixo dos 5%. Não obstante, alguns projetos, em virtude da queima prevista e da tecnologia utilizada, possibilitam o uso de combustível reprocessado ou óxidos mistos (MOX). Essa abordagem visa a aproveitar as instalações de produção de combustível já existentes e contribuir para a redução dos resíduos da indústria nuclear.

Existem, ainda, vários outros projetos que consideram o uso de combustível de urânio de baixo enriquecimento e de alto desempenho (HALEU) com níveis de enriquecimento entre 5% e 19,75%. Contudo, é um combustível que ainda não é produzido em escala comercial, tendo em vista que as centrais nucleares em operação utilizam enriquecimento até no máximo 6%. Por isso, o desenvolvimento de novas instalações para o ciclo do combustível será fundamental para suprir essa necessidade vindoura. Caso isso não ocorra, o desenvolvimento dos SMRs avançados pode ser severamente limitado.

2.2.3 Principais características econômicas

Para que os SMRs possam de fato tornarem-se competitivos no mercado e ganharem espaço, vários aspectos econômicos têm sido considerados pelos projetistas para que o projeto se torne viável. O fator preponderante nos SMRs é o ganho por meio da produção em série, diferentemente das grandes centrais nucleares cuja economicidade é baseada no ganho de escala, ou seja, maior potência instalada. Para tanto, a indústria nuclear tem focado em quatro pontos fundamentais para que a redução global de custos seja possível (NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2021):

- **Simplificação do projeto:** em decorrência da adoção de projetos integrais com sistemas passivos de segurança aprimorados, foi possível realizar várias simplificações em sistemas tradicionais de grandes plantas nucleares. Muitos projetos utilizam menos bombas de resfriamento, alguns até não possuem bomba alguma, com conseqüente diminuição de tubulações, válvulas e acessórios. Mas as simplificações podem se estender, também, para a forma de se estruturar a central nuclear. Para o caso do acoplamento de múltiplas unidades SMRs, é possível utilizar uma única sala de controle, um único prédio de turbinas, por exemplo, minimizando ainda mais os custos de instalação dessas estruturas;
- **Padronização:** resulta em grande redução de custos por meio do aprendizado em se fabricar, montar e construir as plantas por todos os participantes da cadeia produtiva, aprimorando o processo produtivo como um todo. A padronização não significa que todos os reatores SMRs do mesmo tipo serão absolutamente iguais, mas sim, que possuirão a mesma arquitetura global e mesma especificação para os sistemas de geração de vapor e segurança. Essa padronização é um fator importante que a indústria nuclear precisará pensar à medida que os projetos dos SMRs começarem a ser construídos;
- **Modularização e construção em fábrica:** implica dividir a planta em vários módulos menores que possam ser construídos na fábrica, transportados e integrados de forma a simplificar a montagem final. A grande vantagem desse processo, é que, em virtude do tamanho reduzido dos módulos, é possível realizar a fabricação em indústrias especializadas que garantam maior controle de qualidade, não dependendo necessariamente de indústrias próximas ao local de implantação do reator;
- **Maximização da construção em fábrica e minimização da construção no local:** o custo de montagem no local normalmente é superior ao de montagem nas fábricas, além de questões de emprego de técnicas mais sofisticadas de fabricação que são mais facilmente implementadas e controladas nas fábricas que nos locais de instalação da planta, que também leva a redução dos custos de fabricação.

Uma das grandes vantagens pretendidas com a padronização dos SMRs é viabilizar um processo de licenciamento mais simplificado. Isso aceleraria a implementação

dos reatores de pequeno porte em locais diversos por um custo menor. Esse seria mais um fator contribuindo para a disseminação do uso dos SMRs.

As características dos SMRs de baixa potência, alto grau de segurança, compacidade e durabilidade do núcleo com longos períodos de operação apresentam grande aderência às necessidades de projeto de plantas nucleares para propulsão naval. Estima-se que submarinos norte-americanos, britânicos e franceses já utilizem reatores nucleares integrais em projetos que seriam bastante semelhantes aos SMRs em desenvolvimento. Portanto, aprofundar o estudo nesse tipo de planta é bastante interessante para o Brasil, tanto para fins militares de aplicação em futuros projetos de submarinos como para indústria não militar.

2.3 Método de Monte Carlo

Em 1949, o método de Monte Carlo (MMC) foi formalizado por meio da publicação do artigo "*Monte Carlo Method*" de Stanislaw Ulam e John Von Neumann. Esses cientistas trabalhavam no desenvolvimento de armas nucleares no Laboratório de Los Alamos nos anos de 1940, em virtude da Segunda Guerra Mundial, quando nomearam uma classe de métodos matemáticos que estavam sendo empregados com o nome Monte Carlo. O nome é uma referência à cidade de Monte Carlo, capital do Principado de Mônaco, famosa pelos seus cassinos nos quais a aleatoriedade dos resultados é suspostamente o elemento central de seus jogos de azar.

Ulam utilizou métodos de amostragem estatística para solucionar o problema da difusão de nêutrons em material sujeito à fissão nuclear. Embora essa abordagem estatística não fosse exatamente nova, esses cálculos eram muito tediosos e demorados pois eram feitos por dispositivos mecânicos. Entretanto, Ulam teve a oportunidade de utilizar um computador eletrônico, desenvolvido durante a guerra, que tornou os cálculos muito mais rápidos, possibilitando uma aplicação mais prática do método. É fato que, embora o método de Monte Carlo não dependa intrinsecamente de um computador para ser realizado, o avanço da computação com capacidade de processamento e memória cada vez maiores tornou bem mais difundido o emprego do método para a solução de problemas de diversas áreas como mercados financeiros, jogos, engenharia, geologia, entre outros.

O Método de Monte Carlo pode ser descrito como sendo aquele que envolve o uso deliberado de números aleatórios em um cálculo que tem a estrutura de um processo estocástico. Sendo o processo estocástico aquele que apresenta uma sequência de estados cujas evoluções são determinadas por eventos randômicos (KALOS e WHITLOCK, 2008).

A facilidade do método é que não é necessário solucionar as equações diferenciais que descrevem determinado fenômeno, todavia, é preciso que esse fenômeno seja possível de ser modelado em termos de funções densidade de probabilidade. Um número aleatório é, então, utilizado para se fazer a amostragem da função de densidade de probabilidade, obtendo um resultado possível. Após a realização de um número bastante elevado de amostragens, o conjunto dos resultados obtidos é tratado estatisticamente, estimando o valor da solução e, também, o erro de aproximação, ou seja, o desvio padrão da média, que será tão menor quanto mais amostragens forem realizadas. Assim, embora o Método de Monte Carlo possa não ser capaz de fornecer resultados exatos, é bastante eficaz em produzir resultados precisos, isto é, tão próximos do valor exato da solução quanto menor for o desvio padrão da média conseguido na análise.

Desse modo, é possível pensar de forma simplista que o método de Monte Carlo é a repetição sucessiva de um experimento, que, nesse caso, é numérico, e quanto mais experimentos são realizados, melhor é o resultado. Por isso que o método só passou a ser empregado de forma mais intensa juntamente com o avanço da capacidade computacional, que permitiu a solução de problemas cada vez mais complexos de forma bem mais rápida.

Este método se tornou bastante difundido na indústria nuclear porque consegue trazer excelentes resultados sem a necessidade de solucionar as equações diferenciais que regem o fenômeno.

O transporte da radiação é naturalmente um processo estocástico e, portanto, passível de ser modelado pelo MMC. As diversas possibilidades de interação das partículas com a matéria (i.e.; absorção, espalhamento, fissão) são caracterizadas pelas seções de choque de cada interação, que nada mais são que a probabilidade de ocorrência de determinada interação. Portanto, o MMC engloba a amostragem de todas as variáveis (no tempo e espaço) que fazem parte da simulação da equação de transporte, conseguindo estimar com precisão o fenômeno físico em análise.

Desde a década de 1980, códigos de cálculo de transporte utilizando o MMC foram sendo aprimorados como ferramentas úteis na física de reatores. Isto é coincidente com o avanço tecnológico dos computadores que propiciaram um robustecimento dos códigos, fornecendo mais opções de cálculos. Desde então, diversos códigos têm sido desenvolvidos e aprimorados como o MCNP, Serpent, OpenMC entre outros.

Um dos códigos mais utilizados no mundo na área nuclear é o MCNP. Desenvolvido pelo grupo de física aplicada do Laboratório Nacional de Los Alamos (*Los Alamos National Laboratory LANL*), cujo primeiro lançamento data de 1983. Atualmente, o

código é capaz de realizar o transporte de diversas partículas (como nêutrons, fótons, prótons, elétrons entre outras), sendo de propósito geral, energia contínua, geometria generalizada e com dependência temporal (WERNER et al., 2017). Outro código de grande utilização na indústria nuclear é o Serpent. Também é um código de energia contínua, tridimensional de multi-propósito para transporte de nêutrons e fótons desenvolvido no Centro Técnico de Pesquisa da Finlândia (*VTT Technical Research Centre of Finland*) desde o ano de 2004 (LEPPÄNEN, 2015). Ambos códigos possuem a capacidade de realizar cálculos de criticalidade e também de depleção nos núcleos de reatores, além de já possuírem as bibliotecas de seção de choque, como as ENDF/B-VII.0 e ENDF/B-VII.1, integradas.

Entretanto, os dois programas possuem licença controlada, sendo necessária sua aquisição. Nesse contexto, surgiu o OpenMC, sendo desenvolvido inicialmente no Grupo de Física de Reatores Computacional da Instituto de Tecnologia de Massachusetts em 2011. Atualmente, conta com a colaboração para o contínuo desenvolvimento do código de universidades e laboratórios (ROMANO, P. K et al., 2015). Embora este código seja mais simples em termos de partículas transportadas, ainda é capaz de realizar o cálculo de criticalidade e também de queima do núcleo, mantendo a vantagem de ser um código de licença aberta.

Desta forma, em virtude dos objetivos pretendidos com este trabalho, o OpenMC foi escolhido para ser a principal ferramenta computacional do estudo.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo serão descritos o submarino adotado como base para o projeto do núcleo, o programa computacional utilizado no cálculo e as cinco etapas distintas nas quais o trabalho foi dividido.

3.1 Modelo adotado de submarino

Uma das primeiras fases do projeto é determinar para qual submarino o reator será projetado. Afinal, as características de tamanho, velocidade máxima desejável e perfil de operação da embarcação determinarão os requisitos de potência e durabilidade do núcleo.

Assim, a fim de levantar características gerais que bem representem um submarino típico de ataque (do termo em inglês *Ship Submersible Nuclear Powered Attack* – SSN) para ser tomado como base para o presente trabalho, foram coletados dados sobre alguns submarinos SSN já projetados. Como a maioria desses dados são, em geral, valores confidenciais e, portanto, protegidos pelas marinhas e projetistas, nem sempre as informações estão plenamente disponíveis e quando estão, é possível talvez não correspondam totalmente à realidade. Os dados compilados estão descritos na Tabela 3, ressaltando que as informações que não foram encontradas estão apresentadas com uma (?).

Para se determinar a potência térmica adequada para o submarino típico, primeiro é preciso estipular os valores de potência propulsiva e carga hotel desejáveis. A carga hotel é a soma de todas as demandas por energia elétrica a bordo do navio que não incluam a propulsão diretamente, isto é, o motor elétrico de propulsão¹², ou seja, engloba, inclusive, os equipamentos elétricos do ciclo de potência (i.e., bombas, reguladores, válvulas). Para determinar a potência propulsiva necessária é preciso determinar o deslocamento do navio, bem como a velocidade que se deseja atingir.

Assim, analisando os dados apresentados na Tabela 3, observa-se que um submarino de 6.500 toneladas corresponde a um submarino nuclear de porte médio – não tão pequeno como os da classe Rubis e nem tão grande como os da classe Akula – sendo, por isso, escolhido esse deslocamento para o submarino-tipo do estudo. Nota-se, ainda, que

¹² Os submarinos por requerem uma operação silenciosa, com baixo ruído, são normalmente dotados de motores elétricos para a propulsão (MEP). Assim, grande parte da energia elétrica produzida no navio é destinada a alimentar o MEP e não é considerada como carga hotel, mas sim, carga propulsiva.

é desejável uma velocidade enquanto submerso de pelo menos 25 nós. Com essas informações é possível determinar a potência propulsiva necessária para esse submarino por meio da Equação (1) (IPPOLITO, 1990).

Tabela 3 – Características de alguns submarinos de ataque com propulsão nuclear

Classe de Submarino	País	Potência térmica [MW _(th)]	Velocidade Max submerso [nós]	Duração da missão [dias]	Diâmetro [m]	Deslocamento submerso [t]
Álvaro Alberto ¹³	Brasil	48	25	(?)	9,8	6.000
Los Angeles	EUA	148	32	(?)	10,06	6.927
Virginia	EUA	210	32	(?)	10,3	7.800 (superfície)
Trafalgar	UK	(?)	29	(?)	9,8	5.300
Astute	UK	(?)	30	90	10,7	7.400-7.800
Akula	Rússia	190	33	100	13,5	12.770
Rubis	França	48	25	45	7,6	2.670
Suffren	França	150	>25	70	8,8	5.100
Shang	China	(?)	30	80	11	6.000
Han	China	90	25	(?)	10	5.550
Arihant ¹⁴	Índia	85	24	(?)	15	7.000

Fonte: autora da dissertação adaptado do LINK2¹⁵.

$$P = 0,06977C_d V^{\frac{2}{3}} v^3 \quad (1)$$

Onde:

P : potência propulsiva mecânica (kW)

C_d : coeficiente de arrasto

V : deslocamento volumétrico (m³)

v : velocidade de avanço (nós)

Utilizando um valor mínimo para o coeficiente de arrasto C_d de 0,025, a potência propulsiva mecânica demandada pelo submarino-tipo é de 9,5 MW_(e). Se ainda for

¹³ Ainda em fase de projeto.

¹⁴ Submarino do tipo balístico. Ainda não há submarinos de ataque projetados pela Índia operados pela marinha indiana.

¹⁵ **LINK2**: A tabela foi elaborada com base em diversas referências: Disponível em: <<https://www.militarytoday.com/navy.htm>>. Acesso em: 05 jun. 2023; Disponível em: <<https://www.naval.com.br/blog/2020/08/27/como-esta-o-projeto-do-submarino-nuclear-brasileiro/>>. Acesso em 05 jun. 2023; Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/S6G_reactor>. Acesso em: 05 jun.2023; Disponível em:< https://en.wikipedia.org/wiki/S9G_reactor>. Acesso em: 05 jun. 2023.

considerado a eficiência combinada do propulsor mais sistema de transmissão de 75%, a potência elétrica necessária para esse sistema propulsivo é de 12,7 MW_(e). Considerando que a carga hotel do navio varia com sua velocidade, especialmente em virtude dos equipamentos da propulsão, será considerada uma carga hotel da ordem de 4,5% da potência térmica do reator.

Para determinar a potência térmica do reator, é importante avaliar a eficiência do ciclo de potência. Em casos de grandes usinas nucleares, é possível chegar a valores da ordem de 30-35%, entretanto, em virtude das limitações de espaço para implantação de equipamentos que contribuam para o aumento da eficiência do ciclo – como duas turbinas, uma de alta e outra de baixa pressão com remoção de umidade entre ambas, pré-aquecedores, regeneradores –, dificilmente essa eficiência será atingida. Portanto, será considerada uma eficiência do ciclo térmico de 25%. Desse modo, a potência térmica necessária para atender a carga hotel e propulsiva de 25 nós é em torno de 62 MW_(th). Em virtude da imprecisão dos valores do coeficiente de arrasto C_d , que pode variar bastante impactando a potência propulsiva necessária, e de demanda de carga hotel, é interessante que a potência térmica real seja um pouco maior, a fim de garantir uma margem de segurança para o atendimento do requisito de velocidade. Portanto, a potência térmica do reator foi fixada em 75 MW_(th).

Outro fator importante para o cálculo do núcleo do reator para a propulsão naval é como o navio será utilizado, ou seja, o tempo real de operação para que se possa prever a queima do combustível e, conseqüentemente, a duração do núcleo. Para tanto, é preciso determinar qual a duração das missões, quantas missões serão realizadas durante a vida e qual o perfil de operação, isto é, velocidade desenvolvida, em cada missão.

Embora a autonomia do submarino nuclear seja virtualmente ilimitada, ela é restringida por fatores humanos como já supracitado. Portanto, a missão dependerá da quantidade de mantimentos que é possível levar a bordo para suprir a tripulação, bem como de uma condição física e mental saudável. Nesse contexto, a fim de que o estudo possa explorar algumas possibilidades de duração do núcleo, serão consideradas quatro durações típicas de missão. Pelo tamanho escolhido de 6.500 toneladas, uma missão de 60 a 75 dias no mar em patrulha é bastante razoável, mas ainda serão consideradas missões de 45 e 90 dias. Entre uma missão e outra é necessário um período atracado na base para possibilitar o reabastecimento dos gêneros para a tripulação, bem como a execução de manutenções de baixa complexidade, portanto, será considerado um período de trinta dias entre as missões. Logo, os períodos completos de duração de uma missão que serão avaliados no estudo serão de 45+30 dias, 60+30 dias, 75+30 dias e 90+30 dias.

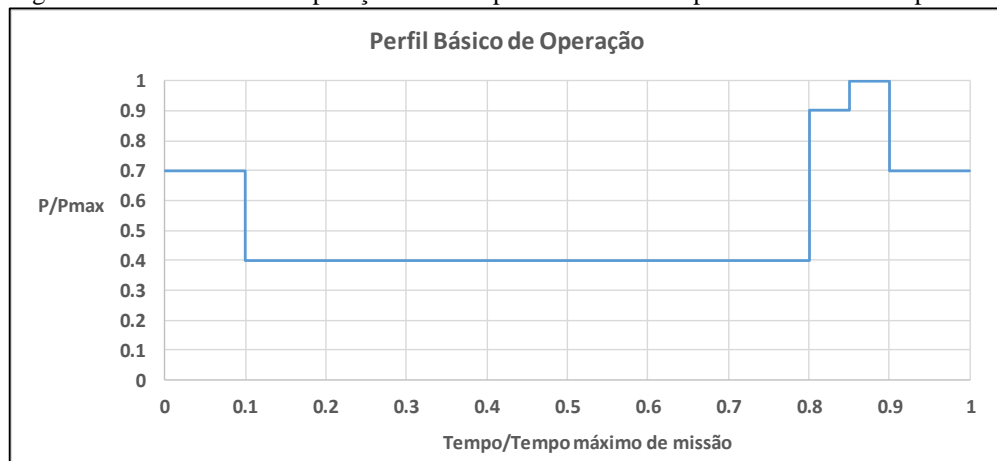
Diferentemente de uma central nuclear para produção de energia elétrica que opera à plena carga na maior parte do tempo, o submarino varia a velocidade de acordo com a demanda operativa do momento. Dessa forma, é preciso construir um perfil de operação que melhor represente a utilização do meio pela marinha para que se possa traduzir esse perfil em Dias à Máxima Potência (DMP), sendo possível estabelecer um objetivo de durabilidade do núcleo. Assim, estimou-se um formato de missão típica que será empregado para as quatro durações estipuladas. Esse perfil é descrito na Tabela 4 e demonstrado no gráfico da Figura 2.

Tabela 4 – Descrição das fases de uma missão típica para o submarino adotado

Cenário	Descrição	Percentual da Velocidade Max (V/V_{MAX})	Duração do cenário na missão	Potência térmica do reator ($MW_{(th)}$)
Deslocamento I	Deslocamento da base até a área de vigilância	0,7	10%	25,7
Vigilância	Período de vigilância da área estipulada	0,4	70%	4,8
Alta Velocidade	Período reservado para algum exercício	0,9	5%	54,7
Máxima Velocidade	Período reservado para algum exercício	1	5%	75
Deslocamento II	Retorno da área de vigilância para a base	0,7	10%	25,7

Fonte: autora da dissertação.

Figura 2 – Perfil básico de operação adotado para uma missão típica do submarino-tipo



Fonte: autora da dissertação.

Tomando por base o perfil apresentado Tabela 4 e o tempo de duração das missões estimado, se determina, então, a equivalência entre a missão típica e dias de operação à máxima potência, conforme apresentado na Tabela 5.

Tabela 5 – Dias à Máxima Potência (DMP) considerados

Dias em operação	Dias na base	Total de missões por ano	Dias de operação no mar por ano	Equivalência em dias à máxima potência	DMP considerados
45	30	4,8	219	43,8	50
60	30	4	243	48,6	55
75	30	3,43	261	52,1	60
90	30	3	274	54,7	65

Fonte: autora da dissertação.

De modo geral, as marinhas consideram a vida útil de um submarino de trinta anos de serviço, entretanto, a embarcação não passa todo esse período em operação, pois existem as paradas para reabastecimento de suprimentos e realização das manutenções, que efetivamente reduzem o tempo real de operação do navio. Desse modo, tomando por hipótese que o submarino realize uma manutenção de médio porte a cada dois anos com duração de três meses e uma manutenção de grande porte a cada seis anos com duração de dezoito meses, os trinta anos de operação se reduzem a 24 anos efetivamente. Assim sendo, a quantidade total de dias de operação à máxima potência para cada duração específica de missão é apresentado na Tabela 6.

Tabela 6 – Total de DMP durante a vida do submarino

Duração da missão	DMP por ano	DMP totais na vida do submarino	Energia total demandada [GWd]
45+30	50	1200	90
60+30	55	1320	99
75+30	60	1440	108
90+30	65	1560	117

Fonte: autora da dissertação.

Na Tabela 7, é apresentado um resumo das características do submarino para o qual este estudo foi desenvolvido. Vale ressaltar, que essas características são fundamentais e tornam o projeto do reator único e personalizado para cada submarino.

Tabela 7 – Características principais do submarino-tipo utilizadas no estudo

Característica	Valor
Deslocamento submerso (toneladas)	6.500 t
Velocidade máxima submerso (mínima desejável)	25 nós
Potência propulsiva mínima ($MW_{(e)}$)	12,7
Carga hotel ($MW_{(e)}$)	4,5% da potência térmica do reator
Eficiência do propulsor e sistema de transmissão	75%
Eficiência do ciclo de potência	25%
Potência térmica do reator	75 $MW_{(th)}$
Duração da missão (<i>endurance</i>) ¹⁶ / Dias à plena carga por ano considerados	45+30 dias / 50 dias 60+30 dias / 55 dias 75+30 dias / 60 dias 90+30 dias / 65 dias
Anos efetivos de operação	24

Fonte: autora da dissertação.

3.2 O código OpenMC

O código OpenMC é um *software* originalmente desenvolvido pelos membros do Grupo de Física de Reatores Computacional do Instituto de Tecnologia de Massachusetts em 2011. Atualmente, conta com a contribuição de diversas universidades e laboratórios que continuam aprimorando as capacidades do código. Desse modo, o OpenMC é um código de simulação baseado no Método de Monte Carlo para simulação do transporte de nêutron e fóton. É capaz de realizar os cálculos para fontes fixas e multiplicativas (cálculos de criticalidade) e cálculos de multiplicação subcrítica, utilizando modelos com geometria construída ou de representativa de CAD (ROMANO, P. K et al., 2015).

O OpenMC é estruturado em um conjunto de arquivos XML. Para que o programa execute, três arquivos são indispensáveis: materiais (*materials.xml*), especificação da geometria (*geometry.xml*) e especificação das configurações (*settings.xml*). Além destes, mais dois são opcionais, mas desejáveis: especificação dos estimadores (*tallies.xml*) e especificação de plotagem da geometria (*plots.xml*).

Para problemas de criticalidade que envolvem uma fonte multiplicativa, como é o caso do presente estudo, o programa utiliza o Método das Gerações Sucessivas para calcular o valor do fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) (LIEBEROTH, 1968). Uma grande vantagem do emprego do código é a possibilidade de utilizar bibliotecas de seções de choque já pré-geradas e disponíveis para serem utilizadas no código, como por exemplo a ENDF/B-

¹⁶ A duração da missão é composta por dois períodos, sendo o primeiro de dias no mar, ou seja, dias em que o submarino de fato permanece navegando, e o segundo período corresponde à parada no porto para reabastecimento de gêneros e pequenas rotinas de manutenção. Assim, a duração da missão de 45+30 dias equivale a 45 dias no mar e 30 dias no porto.

VII.1. Dessa forma, poupa-se bastante tempo com a geração de das seções de choque adequadas ao estudo.

Outra vantagem do OpenMC é a capacidade de realizar o cálculo da queima (*burnup*), especificando quais materiais se deseja avaliar. No código, o conjunto de equações de transmutação que definem a evolução das densidades dos núclídeos no material são resolvidas utilizando-se as taxas de reação de transmutação. Assim, a composição atualizada do material em algum momento futuro é usada para determinar as novas taxas de reação. O processo é, então, repetido por tantos intervalos de tempo quanto o usuário especificar (ROMANO, PAUL K. et al., 2021).

Dessa forma, o código OpenMC foi escolhido para ser utilizado como a principal ferramenta para realizar o estudo apresentado neste trabalho, das diversas configurações de núcleos do reator a serem propostas. Foi utilizada no estudo a biblioteca de seções de choque ENDF/B-VII.1, particularizada para a temperatura do material em análise.

3.3 Modelo adotado do núcleo do reator

3.3.1 Tipo de mistura

O primeiro passo do trabalho é desenvolver um modelo que seja adequado para o projeto conceitual do núcleo do reator conforme pretendido. Inicialmente, foi preciso definir se o modelo do reator a ser adotado nas análises seria do tipo heterogêneo, como são os reatores reais, ou homogêneo, não realista, mas mais simples para se iniciar o projeto conceitual de um reator.

Um reator homogêneo é aquele no qual o combustível encontra-se diluído, homogeneamente distribuído, no moderador, diferentemente do reator heterogêneo, no qual existe uma separação física bem definida entre o combustível (varetas combustíveis), moderador e material absorvedor (elementos de controle).

Embora a simplificação do estudo com o emprego de um modelo homogêneo seja interessante, essa abordagem implica algumas alterações na física de reatores envolvida que precisam ser entendidas.

O fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , representa a razão entre o número de nêutrons em um geração n pelo número de nêutrons na geração precedente $n-1$. Assim, conhecendo-se o valor do k_{eff} , pode-se determinar a população de nêutrons no reator e, conseqüentemente, a condição na qual se encontra, ou seja, se subcrítico, $k_{eff} < 1$, crítico, $k_{eff} = 1$, ou supercrítico, $k_{eff} > 1$. Desse modo, é utilizada uma equação, conhecida como

equação dos seis fatores, Equação (2), para didaticamente demonstrar como obter o valor do k_{eff} , ressaltando o balanço entre os nêutrons produzidos e os perdidos no sistema. Essa equação surge do fato de ser possível determinar o k_{eff} com base na composição (materiais) e geometria do reator, aplicando-se uma análise probabilística no tocante à trajetória do nêutron dentro do núcleo (STACEY, 2007).

$$k_{eff} = \eta \cdot \varepsilon \cdot p \cdot f \cdot P_{NT} \cdot P_{NR} \quad (2)$$

Onde:

- η : número médio de nêutrons produzidos por nêutron térmico absorvido no combustível;
- ε : fator de fissão rápida. Descreve a contribuição das fissões rápidas em relação ao número total de fissões;
- p : probabilidade de escape a ressonância. Descreve a fração de nêutrons que chegam à faixa térmica de energia, sobrevivendo à absorção ocorrida na faixa de ressonância;
- f : fator de utilização térmica. Descreve a fração de nêutrons térmicos que é absorvida no combustível;
- P_{NT} : probabilidade de os nêutrons térmicos não saírem do sistema;
- P_{NR} : probabilidade de os nêutrons rápidos não saírem do sistema.

Assim, no reator homogêneo, ocorrem alguns fenômenos que influenciam nos fatores da Equação (2). Entre eles (STACEY, 2007):

- **Redução na probabilidade de escape da ressonância (p):** em um reator homogêneo, devido à dispersão do combustível, há um aumento considerável da probabilidade de um nêutron com energia na faixa das ressonâncias de colidir com uma molécula do combustível e, dessa forma, ser capturado. Quando o combustível é agrupado em varetas, ou placas, um nêutron rápido pode escapar da matriz de combustível e ir para a região do moderador, na qual pode ser termalizado sem a presença de núcleos de ^{238}U , aumentando, assim, o valor de p quando comparado à dispersão homogênea de combustível;
- **Redução no fator de fissão rápida (ε):** da mesma forma que ocorre com o p , a probabilidade de fissão rápida decresce muito com o combustível disperso, pois aumenta a chance de um nêutron sofrer logo a primeira interação já com uma molécula de moderador, perdendo sua energia. Quando

o combustível é concentrado numa matriz, assim que nascem os nêutrons rápidos, só há núclídeos do combustível, aumentando a probabilidade de que ocorra uma fissão rápida;

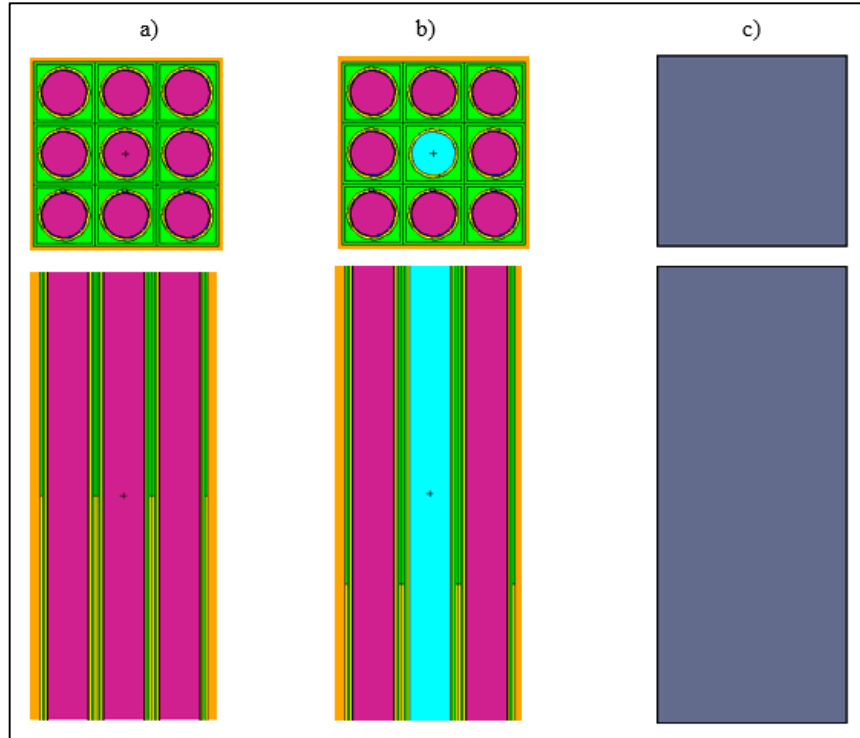
- **Ausência de autoblindagem de energia e espacial:** quando existe a presença de fortes absorvedores, como barras de controle ou uma região de ressonância do material, a probabilidade de absorção do nêutron aumenta bastante, ocasionando uma queda no fluxo neutrônico dependente da energia nas proximidades. Essa redução no fluxo de nêutrons é conhecida como autoblindagem de energia e acarreta numa diminuição da absorção de nêutrons. Ainda, a organização do combustível em varetas faz com que a absorção de nêutrons seja mais provável nas camadas exteriores do combustível, reduzindo significativamente o fluxo de nêutrons dentro do combustível. Portanto, as camadas externas atuam como uma blindagem para as internas, denominada de blindagem espacial. Assim, as autoblindagens de energia e espacial influenciam aumentando significativamente a probabilidade de escape da ressonância (p), efeito esse observado em reatores heterogêneos devido à sua geometria.

Portanto, a homogeneização dos componentes do reator, sem nenhuma estratégia de compensação como a utilização de seções de choque homogeneizadas, acarreta em subestimação dos valores dos k_{eff} . Ainda assim, como o propósito do estudo é realizar um projeto conceitual do núcleo do reator, verificando a viabilidade de várias configurações possíveis, bem como, realizar uma análise qualitativa e comparativa entre elas, adotar o modelo homogêneo pode ser um ótimo recurso para reduzir a complexidade do problema, otimizando o custo computacional, e permitindo ampliar a gama de configurações iniciais analisadas.

Então, para avaliar a perda de precisão com essa simplificação, foram simulados oito casos: núcleo heterogêneo e homogêneo, a quente e a frio, com e sem absorvedor. Em ambas configurações foram utilizadas as mesmas frações volumétricas dos componentes (moderador, combustível, revestimento e absorvedor). Para tanto, foi realizado um modelo de um núcleo heterogêneo bastante simples com 9 varetas no total com altura de 100 cm e *pitch* de 1,26 cm e, também, o de um núcleo homogêneo correspondente (Figura 3). Para o reator a frio, foi adotada a temperatura de 293 K para todos os materiais, enquanto que a quente, na configuração homogênea, foi adotado 583 K para a mistura, enquanto que, no

modelo heterogêneo, adotou-se 600 K para o moderador e o revestimento e 900 K para o combustível. Esses modelos foram, então, simulados para verificação do k_{eff} (Tabela 8).

Figura 3 – Corte transversal e vista de topo da geometria do modelo a) heterogêneo sem absorvedor, b) heterogêneo com absorvedor e c) homogêneo



Fonte: autora da dissertação.

Tabela 8 – Comparação dos valores de k_{eff} para núcleos heterogêneo e homogêneo, com e sem material absorvedor

Modelo	Heterogêneo	Homogêneo	Máxima diferença relativa $\left(\frac{MAXHet - MINHom}{MAXHet} 100\%\right)$
	k_{eff}	k_{eff}	
A frio sem absorvedor	$1,34443 \pm 0,00022$	$1,26297 \pm 0,00019$	6,1%
A frio com absorvedor	$0,86186 \pm 0,00025$	$0,32520 \pm 0,00008$	62,3%
A quente sem absorvedor	$1,22680 \pm 0,00020$	$1,16553 \pm 0,00019$	5,0%
A quente com absorvedor	$0,73672 \pm 0,00022$	$0,34165 \pm 0,00007$	53,6%

Fonte: autora da dissertação.

Conforme os resultados vistos na Tabela 8, pode-se verificar que a perda de exatidão é inferior à 10%, valor de erro aceitável dentro de um projeto conceitual geral e inicial do núcleo, para o caso sem absorvedor, embora de fato ocorra a redução do valor do k_{eff} conforme previsto na teoria citada anteriormente. Entretanto, ao inserir o material

absorvedor, a ausência da autoblindagem torna-se bastante relevante, aumentando sobremaneira o erro relativo entre as duas abordagens.

Logo, embora o arranjo mais comum na indústria seja o heterogêneo, para fins de uma primeira análise dimensional e de viabilidade do reator sendo proposto, considera-se que a abordagem homogênea sem absorvedor é satisfatória, pois, apesar de mais simplificada, permite analisar, com mais velocidade, uma maior gama de diferentes arranjos e configurações para o núcleo desse reator.

3.3.2 Composição do núcleo

Partindo do pressuposto de que as análises iniciarão com o núcleo homogêneo, é preciso determinar as frações volumétricas dos componentes, o enriquecimento do combustível e os volumes dos núcleos.

3.3.2.1 Fração volumétrica

A fração volumétrica dos componentes é bastante importante, em especial a relação entre a quantidade de moderador e combustível, pois isso determina a razão moderador-combustível do reator.

A fim de se determinar valores médios representativos das frações volumétricas, foi realizada uma análise de algumas plantas PWR de grande porte, tendo em vista que dados mais precisos de plantas SMRs ainda não são de fácil acessibilidade, pois muitas plantas estão em fase de projeto (Tabela 9).

Tabela 9 – Valores das frações volumétricas estimadas para algumas plantas PWR

Projeto	Frações Volumétricas	Referência
AP-1000	59,08% H ₂ O 29,67% UO ₂ 10,10% Zr-4	Valores estimados a partir dos documentos disponibilizados pela NRC (NRC, 2022) ¹⁷
US-EPR	60,99% H ₂ O 26,44 UO ₂ 11,70% Zr-4	Valores estimados a partir dos documentos disponibilizados pela NRC (NRC, 2022) ¹⁸
Angra II	56,88% H ₂ O 28,44% UO ₂ 13,87% Zr-4	Valores estimados a partir dos documentos disponibilizados no FSAR do projeto (ELETROBRÁS TERMONUCLEAR, 2007).

Fonte: autora da dissertação.

¹⁷ Para o reator AP-1000, o documento encontra-se disponível em:

<<https://www.nrc.gov/docs/ML1117/ML11171A445.pdf>> . Acesso em: 24 set. 2023.

¹⁸ Para o reator US-EPR, o documento encontra-se disponível em: ,

<<https://www.nrc.gov/docs/ML1322/ML13220A678.pdf>> . Acesso em: 24 set. 2023.

Baseado nos dados da Tabela 9, foram adotadas quatro frações volumétricas de água para o estudo, de 60% a 45%, a fim de poder explorar diferentes valores da razão moderador-combustível e verificar o impacto na criticalidade do núcleo. Complementarmente, a concentração de revestimento foi atrelada à de combustível, tendo em vista que quanto maior a quantidade de combustível, também maior será a do revestimento. Analisando os dados da Tabela 9, adotou-se a fração volumétrica de revestimento equivalente à 40% da fração volumétrica de combustível para todos os casos.

Foi considerado para o estudo os mesmos materiais largamente empregados na indústria nuclear, utilizando a água leve como moderador, dióxido de urânio como combustível e o Zircaloy-4[®] como o revestimento. As frações volumétricas finais adotadas são apresentadas na Tabela 10.

Tabela 10 – Concentrações volumétricas de moderador, combustível e revestimento para o primeiro estudo

Configuração	Moderador (H ₂ O)	Combustível (UO ₂)	Revestimento (Zr-4)
1	60%	28,57%	11,43%
2	55%	32,14%	12,86%
3	50%	35,71%	14,29%
4	45%	39,29%	15,71%

Fonte: autora da dissertação

3.3.2.2 Enriquecimento do combustível

A concentração do elemento físsil ²³⁵U também foi variada de forma a verificar o impacto dos diferentes níveis de enriquecimento. Como o utilizado largamente na indústria gira em torno de 3,5 a 5,5%, optou-se por escolher enriquecimento de 3,5% e 7%. Também para explorar as possibilidades com o combustível HALEU que está sendo largamente estudado, foram, também, incluídos os enriquecimentos de 10%, 15% e 19,5%. Como o Brasil é signatário do Tratado de Não Proliferação de Armas Nucleares, é vedado ao país o enriquecimento de combustível acima de 20%.

Com base nos valores de fração volumétrica e enriquecimento, as frações mássicas de cada nuclídeo presente nos materiais constituintes do núcleo foram calculadas. Essa informação é necessária como dado de entrada para o código OpenMC.

3.3.2.3 Volume do núcleo

O volume do núcleo precisa ser condizente com a potência a ser extraída e a necessidade de se ter uma boa durabilidade, evitando repetidos períodos de indisponibilidade do submarino para troca do combustível. Entretanto, deve, também, levar em consideração

as restrições de espaço existentes dentro de um submarino para acomodação da planta nuclear.

Assim, para maximizar o tempo de operação do submarino, é desejável pelo menos 10 anos de operação sem abastecimento, sendo, portanto, necessários ao menos 650 DMP de acordo com a Tabela 7. Conhecida a potência do reator e considerando 200 MeV de energia média liberada por fissão, é possível determinar o consumo mínimo de ^{235}U por meio da taxa de fissão (negligenciando a fissão no ^{238}U), a partir da Equação (3) (OLANDER, 1985).

$$\begin{aligned}
 {}^{235}\text{U} [\text{kg}] &= \text{Taxa de fissão} \left[\frac{\text{fissão}}{\text{dia}} \right] * \text{DMP} * \frac{235 \text{ g } {}^{235}\text{U}}{1 \text{ mol}} \quad (3) \\
 &\quad * \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \text{ átomos}} \\
 {}^{235}\text{U} [\text{kg}] &= \frac{\text{Pot}[\text{MW}]}{Q \left[\frac{\text{MeV}}{\text{fissão}} \right]} * \frac{1 \text{ MeV}}{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ MJ}} * \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ dia}} * \text{DMP} * \frac{235 \text{ g } {}^{235}\text{U}}{1 \text{ mol}} \\
 &\quad * \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \text{ átomos}} \\
 {}^{235}\text{U} [\text{kg}] &= 78,92 \frac{\text{g}}{\text{dia}} * 650 \text{ DMP} \\
 {}^{235}\text{U} [\text{kg}] &= 51,3 \text{ kg}
 \end{aligned}$$

Esta concentração de ^{235}U resulta em torno de 1.600 kg de UO_2 com enriquecimento de 3,5%. Tomando por base a menor concentração de UO_2 , da Tabela 10, de 28,57% do núcleo e uma densidade média de $10,96 \text{ g/cm}^3$, o menor tamanho de núcleo é de $0,511 \text{ m}^3$. Por conveniência, foi adotado, então, volume mínimo de $0,6 \text{ m}^3$.

Em relação ao volume máximo, analisou-se alguns projetos de SMRs de potência semelhante ao do estudo. O CAREM, por exemplo, de $100 \text{ MW}_{(\text{th})}$ possui um volume do núcleo ativo da ordem de $2,2 \text{ m}^3$ (ERFANINIA et al., 2016). Se for considerado, ainda, que um submarino nuclear tem um casco resistente em torno de 10 m (Tabela 3) e que acima do núcleo ativo muitos equipamentos ainda precisam ser instalados, um volume de 2 m^3 é razoável tanto para atingir a potência desejável quanto para ser arranjado a bordo do navio.

3.4 Determinação dos parâmetros da simulação

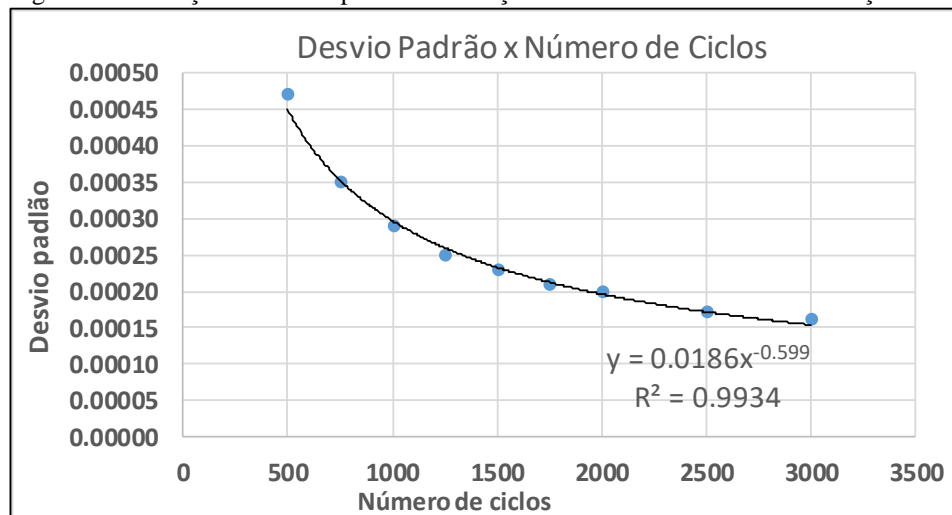
Definido que o modelo adotado seria o homogêneo, foi realizado um estudo prévio para se determinar os valores dos parâmetros a serem utilizados durante as primeiras simulações.

Para o cálculo da criticalidade, alguns dados de entrada precisam ser fornecidos ao código. O primeiro é a quantidade de partículas por geração, no qual o número da população de nêutrons em cada geração é especificado. De acordo com especialistas, o mínimo recomendado é de 10.000 (BROWN, 2009). Então, optou-se por utilizar 15.000 partículas por geração.

Outros dois parâmetros bastante importantes são o número total de ciclos (*batches*) e o número de ciclos inativos (*inactive batches*). O total de ciclos a serem utilizados influencia na precisão do resultado, isto é, no tamanho do desvio padrão da média obtido, e quanto mais ciclos, menor a incerteza no cálculo. Enquanto isso, a quantidade de ciclos inativos, ou seja, ciclos iniciais desprezados para a composição estatística dos resultados, é utilizada para garantir que houve a convergência espacial da fonte (pontos de fissão) e que, desse modo, é seguro começar a acumular os resultados análise estatística.

Então, alguns casos foram simulados avaliando a redução do desvio padrão com o aumento do número de ciclos totais, mantendo-se constante o número de ciclos iniciais desprezados (Figura 4).

Figura 4 – Evolução do desvio padrão em relação ao número de ciclos da simulação



Fonte: autora da dissertação.

Segundo a literatura, o desvio padrão da média é inversamente proporcional à raiz quadrada do número de histórias, tendo exatamente esse comportamento sido observado

na Figura 4 (KALOS e WHITLOCK, 2008). Assim, com 1.500 ciclos já se obtém um valor aceitável de desvio padrão, na ordem de 23 pcm com custo computacional razoável de 30 minutos (*Workstation* com Intel Core i5-6500 CPU @ 3.20GHz e 8 GB de RAM), para a quantidade de casos que se pretende rodar. Essa quantidade total de ciclos foi considerada aceitável pois apenas será utilizado o k_{eff} como parâmetro de comparação entre os núcleos. Caso a distribuição de potência, por exemplo, também fosse considerada, o número total de ciclos deveria ser aumentado, pois este parâmetro apresenta uma convergência mais lenta que o k_{eff} . Assim, um resumo dos valores utilizados para especificar o cálculo de criticalidade está apresentado na Tabela 11.

Tabela 11 – Parâmetros de entrada adotados nas simulações

Parâmetros de entrada no OpenMC	Descrição do Parâmetro	Valor
<i>Number of Particles per Generation</i>	Número de nêutrons por geração	15.000
<i>Number of Inactive Batches</i>	Número de ciclos iniciais desprezados	200
<i>Number of Batches</i>	Número de ciclos totais	1.500

Fonte: autora da dissertação.

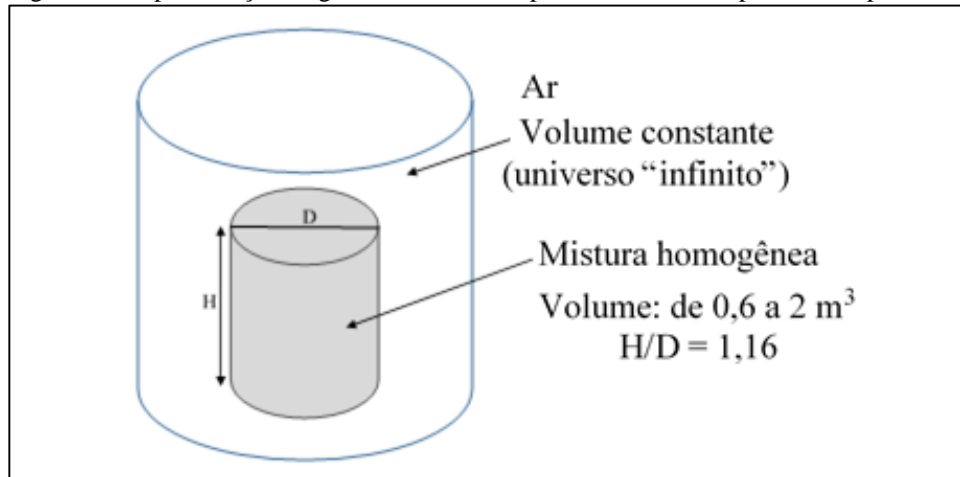
3.5 Desenvolvimento do trabalho

3.5.1 Primeira etapa: modelo homogêneo simples

Para a primeira etapa do trabalho, o foco foi realizar uma ampla gama de simulações exploratórias para determinar as melhores configurações a serem estudadas nas próximas etapas. O objetivo foi obter núcleos com valores aceitáveis de k_{eff} que pudessem ocasionar uma reação em cadeia autossustentada, mas que fossem passíveis de controle com a inserção posterior de material absorvedor. Ou seja, buscou-se por configurações que resultassem em núcleos supercríticos que posteriormente pudessem atingir a criticalidade com a inserção de material absorvedor.

Assim, a geometria adotada para o núcleo do reator foi a de um cilindro composto pela mistura homogênea, imerso em outro cilindro de ar (Figura 5). Variou-se o volume, em passos de $0,2 \text{ m}^3$ entre os limites de $0,6 \text{ m}^3$ até 2 m^3 . Para determinar o diâmetro e a altura do núcleo, foi considerada uma razão entre a altura e o diâmetro do núcleo (H/D) de 1,16, conforme valores médios observados do projeto de outras plantas de potência (Tabela 12). A altura dos núcleos simulados representa a altura ativa dos elementos combustíveis e o diâmetro, o diâmetro equivalente.

Figura 5 – Representação da geometria utilizada para os cálculos da primeira etapa



Fonte: autora da dissertação.

Tabela 12 – Razão entre a altura e o diâmetro equivalente (H/D) de algumas plantas PWR

Projeto	Potência térmica [MW _(th)]	Razão H/D
AP-1000	3.415	1,4035
US-EPR	4.590	1,1150
Angra II	3.771	1,0818
US-APWR	4.451	1,0810
NuScale	160	1,3289
Valor médio ponderado pela potência térmica		1,1603

Fonte: autora da dissertação adaptado da NRC¹⁹.

O núcleo foi simulado com temperatura média de 310 °C em todos os casos, portanto, a quente, para representar a operação em regime permanente.

Na Tabela 13 é apresentado o compilado das características dos núcleos que foram combinadas para resultar na simulação dos 160 núcleos iniciais.

Tabela 13 – Resumo das características dos núcleos da primeira etapa

Volume do núcleo	Fração Volumétrica dos Componentes H ₂ O – UO ₂ – Zr-4	Enriquecimento do Combustível	Temperatura
0,6 a 2 m ³ , passos de 0,2 m ³ Geometria cilíndrica com relação H/D= 1,16	60% - 28,57% - 11,43% 55% - 32,14% - 12,86% 50% - 35,71% - 14,29% 45% - 39,29% - 15,71%	3,5%, 7%, 10%, 15% e 19,5%	310 °C

Fonte: autora da dissertação.

Um exemplo da especificação do material da mistura homogênea para entrada de dados no OpenMC pode ser visto na Tabela 14. Para cada fração volumétrica diferente e

¹⁹ NRC, Design Certification Applications for New Reactors, disponível em: <<https://www.nrc.gov/reactors/new-reactors/large-lwr/design-cert.html>>. Acesso em: 24 set. 2023.

enriquecimento diferente, uma nova composição de material tem que ser definida. Para tanto, foi elaborada uma planilha em Excel para realizar o cálculo das frações mássicas para o dado de entrada do material no código. Esse procedimento é descrito no Apêndice A.

Os resultados dessa etapa foram analisados e os núcleos que apresentaram valores de k_{eff} inferiores a 1,26 foram considerados para a próxima etapa de estudo. Este parâmetro foi estipulado como um valor alvo para um reator real, sendo um balizador para a análise de viabilidade dos resultados. Embora o valor pareça elevado, idealmente buscam-se valores de k_{eff} os mais elevados possíveis para maior duração do núcleo e manutenção da reatividade mesmo na presença de Xenônio e outros produtos de fissão. Além do mais, é preciso levar em consideração que os valores de k_{eff} são subestimados pelo modelo homogêneo, então, espera-se que estes núcleos, se modelados heterogeneamente, apresentem k_{eff} na ordem de 1,32. Estes resultados são apresentados no Capítulo 4 item 4.1.

Tabela 14 – Exemplo do material utilizado na primeira etapa – mistura homogênea

Enriquecimento		3,5%	
Frações Volumétricas		60% H ₂ O - 28,57% UO ₂ - 11,43% Zr-4	
Densidade		4,4830 g/cm ³	
Material	Composição em massa [%wt]	Material	Composição em massa [%wt]
H-1	0,01497	Sn-117	0,00018
O-16	0,20172	Sn-118	0,00060
U-235	0,02156	Sn-119	0,00021
U-238	0,59449	Sn-120	0,00082
Zr-90	0,08327	Sn-122	0,00011
Zr-91	0,01836	Sn-124	0,00015
Zr-92	0,02837	Cr-50	6,97983E-06
Zr-94	0,02938	Cr-52	0,00013
Zr-96	0,00483	Cr-53	1,61775E-05
Sn-112	2,29376E-05	Cr-54	4,10286E-06
Sn-114	1,58857E-05	Fe-54	1,88826E-05
Sn-115	8,25544E-06	Fe-56	0,00030
Sn-116	0,00035	Fe-57	0,01497

Fonte: autora da dissertação.

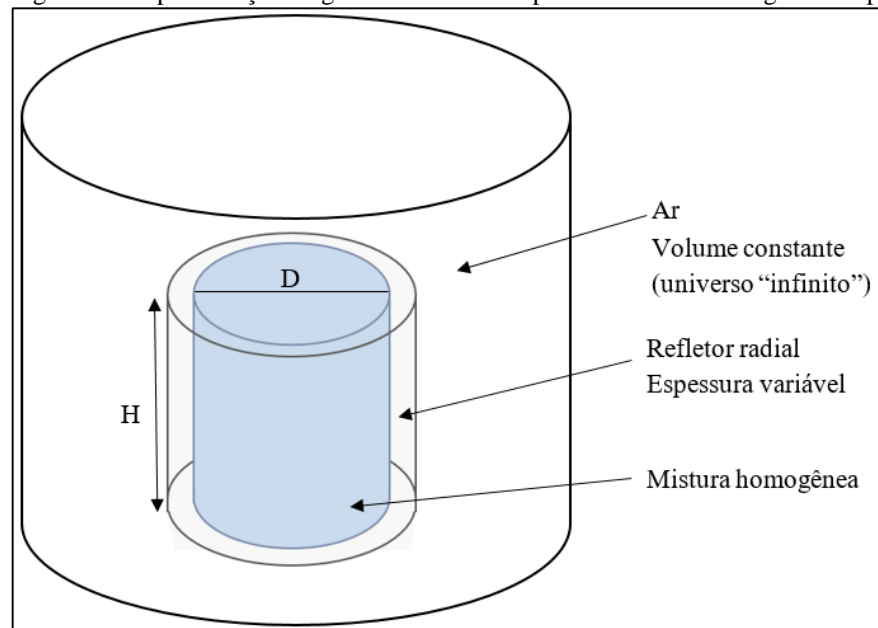
3.5.2 Segunda etapa: modelo homogêneo com refletor

Na segunda etapa do estudo, o objetivo foi integrar um refletor radial para aprimorar o desempenho do núcleo com a redução da fuga de nêutrons.

Inicialmente, realizou-se uma análise para verificar a eficiência de dois refletores distintos: de água e aço AISI 304. A água é um refletor conhecido pelas boas propriedades de espalhamento e baixa absorção. O aço forma o refletor pesado, que auxilia na redução da fuga de nêutrons, especialmente rápidos, que atingiriam o vaso do reator causando fragilização pela irradiação. Nessa etapa do estudo não foi realizada nenhuma análise de um refletor combinado de água e aço, tendo em vista que outros estudos semelhantes não demonstraram uma melhora expressiva no desempenho em virtude da combinação dos materiais (KANG et al., 2016; KOŠT’ÁL et al., 2022).

Para averiguar uma espessura ótima, foram simulados refletores com espessura variando de 10% até 50% do valor do diâmetro do núcleo (Figura 6). Isso foi feito para que se garantisse a mesma condição de reflexão nos núcleos de tamanhos diferentes, uma vez que uma espessura fixa pode ser muito mais representativa para o núcleo de $0,6 \text{ m}^3$ do que para o de $2,0 \text{ m}^3$.

Figura 6 – Representação da geometria utilizada para os cálculos da segunda etapa



Fonte: autora da dissertação.

Primeiramente, foram simulados todos os núcleos de $0,6 \text{ m}^3$ até $2,0 \text{ m}^3$ com a fração volumétrica de água de 60% da configuração 1, conforme Tabela 10, e enriquecimento de 3,5%, visando verificar se o aumento do k_{eff} se comportaria da mesma forma para todos os volumes de núcleo. Na sequência, foram simulados núcleos de $0,6 \text{ m}^3$, com enriquecimento de 3,5% para todas as configurações de frações volumétricas, novamente para averiguar se o ganho no k_{eff} seria semelhante para as diferentes frações

volumétricas. Por fim, a análise foi repetida para o volume do núcleo de $0,6 \text{ m}^3$ e fração volumétrica de água de 45%, mas variando o grau de enriquecimento do combustível. Essa análise inicial tem por objetivo verificar a estabilidade do comportamento do k_{eff} com a variação do volume do núcleo, da fração volumétrica dos componentes e do grau de enriquecimento do combustível. Assim, tem-se por objetivo garantir que o estudo realizado para apenas uma configuração seja representativo de todas as composições de núcleos levantadas na etapa um.

Após verificar a estabilidade do comportamento do k_{eff} , para fins de comparação dos refletores, foram apenas simulados núcleos com fração volumétrica de água de 45% e $0,6 \text{ m}^3$ de volume, variando os enriquecimentos. Os resultados dos refletores de água e aço foram comparados de modo a analisar o de melhor performance. Esses resultados são apresentados no Capítulo 4, item 4.2.

3.5.3 Terceira etapa: modelo homogêneo com refletor e absorvedor

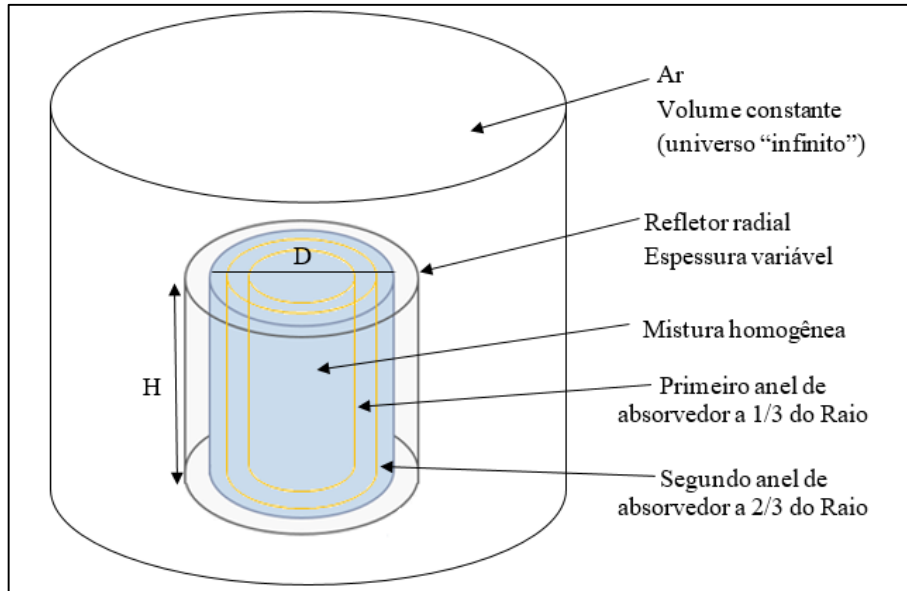
Na terceira etapa, o objetivo foi realizar a incorporação de material absorvedor no núcleo de forma a atingir valores de k_{eff} entre 0,8 e 0,9, garantindo que seja possível manter o núcleo subcrítico.

Inicialmente, foi inserido no núcleo, de forma homogênea, material absorvedor constituído de liga ternária de Prata-Índio-Cádmio, com concentração de 80% de Ag, 15% de In e 5% de Cd para simular o efeito das barras de controle. A fração volumétrica correspondente ao material absorvedor inserida no núcleo foi variada entre 0,1% e 2,2%, sendo esse valor descontado da fração inicial de água (moderador). Assim, as quatro configurações, apresentadas na Tabela 10, sofreram uma pequena alteração, reduzindo a fração volumétrica de água para a inclusão do absorvedor e mantendo as frações volumétricas de combustível e revestimento inalteradas. Ressalta-se que não foi incluído boro solúvel na composição do núcleo, uma vez que não é comum a utilização de boro em plantas embarcadas em virtude da dificuldade de controle constante da concentração e necessidade de equipamentos volumosos para isso.

Posteriormente, visando uma representação mais realista, mas ainda com simplificações, o material absorvedor foi incluído na forma de dois anéis concêntricos dispostos a $1/3$ e $2/3$ do raio do núcleo, sendo o segundo anel a $2/3$ com o dobro de material do primeiro anel a $1/3$ a fim de manter equilibrada a distribuição do absorvedor no núcleo, conforme representado na Figura 7. A fração de material absorvedor, variada de 0,1% até 4%, foi, novamente, descontada da fração volumétrica de água e as frações de combustível

e revestimento foram reajustadas para que a massa desses materiais permanecesse inalterada mesmo com a inserção dos anéis de material absorvedor. Essa modelagem é apresentada em mais detalhes no Apêndice B.

Figura 7 – Representação da geometria utilizada para os cálculos da terceira etapa com absorvedor em anel



Fonte: autora da dissertação.

Com isso, as curvas do k_{eff} em função da fração de material absorvedor foram comparadas a fim de averiguar com qual concentração o núcleo atingiria a criticalidade, como pode ser visto no Capítulo 4 item 4.3.

3.5.4 Quarta etapa: modelo heterogêneo

A evolução do modelo do núcleo de homogêneo para heterogêneo é algo bastante natural no processo de aumento progressivo da complexidade do núcleo em projeto de um reator nuclear.

Assim, nessa etapa do trabalho, buscou-se modelar os núcleos com uma configuração heterogênea, mas ainda simplificada. Nesse momento, apenas foram inseridos no núcleo os componentes já previamente estudados. Portanto, o modelo ainda não inclui, por exemplo, outros componentes estruturais ou varetas combustíveis com adição de veneno queimável.

Portanto, o objetivo desta etapa foi modelar um núcleo heterogêneo para cada enriquecimento com uma configuração que garanta a operação segura do reator. Ao final, as curvas de criticalização foram levantadas para determinar com qual elevação das barras de controle o núcleo atinge o estado crítico.

3.5.4.1 Especificação da vareta combustível

A vareta combustível foi estipulada baseada, novamente, em valores médios encontrados na indústria nuclear, conforme apresentado na Tabela 15.

Tabela 15 – Diâmetro da pastilha combustível e espessura do revestimento para alguns projetos PWR

Projeto	Diâmetro da pastilha de combustível [mm]	Espessura do revestimento [mm]
CAREM	7,6	0,625
NUWARD	8,11	0,6
IRIS	9,5	0,635
SMART	8,05	0,64
NuScale	8,11	0,6

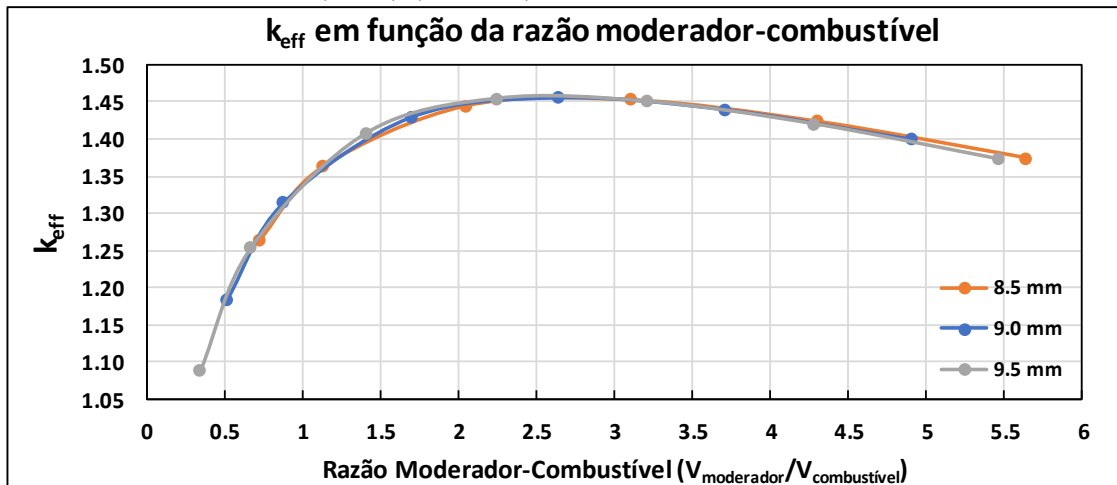
Fonte: autora da dissertação adaptado do LINK3²⁰.

A espessura do revestimento foi determinada em 0,6 mm, em consonância com os dados mostrados na Tabela 15. Para definição do diâmetro, foi realizada uma breve análise da alteração no valor do k_{eff} em função do aumento do diâmetro. É esperado que o k_{eff} cresça com o aumento do diâmetro da pastilha combustível, devido ao aumento da quantidade de material físsil, embora esse ganho passe a não ser mais expressivo para diâmetros muito maiores em virtude dos efeitos de autoblindagem se tornarem cada vez mais influentes (TAHERANPOUR e TALAEI, 2013).

Assim, foram simulados três diâmetros de pastilha combustível, 8,5 mm, 9 mm e 9,5 mm, variando a razão moderador-combustível e com enriquecimento constante igual 3,5%. As curvas do k_{eff} pela razão moderador-combustível foram levantadas e podem ser vistas na Figura 8.

²⁰LINK3: A tabela foi elaborada com base em diversas referências: Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/-/retrieve/pii/S0149197016301913>>. Acesso em: 01 nov. 2023. Disponível em: <https://www.politesi-polimi.it/retrieve/a67ed944-f121-49a9-9192-4898cdd5e586/Master_Thesis_Ashwin_Bala_Vidya.pdf>. Acesso em 15 nov. 2023. Disponível em: <<https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/20007630>>. Acesso em: 15 nov. 2023. Disponível em: <<https://www.nrc.gov/docs/ML2022/ML20224A492.pdf>>. Acesso em: 04 mar. 2023.

Figura 8 – Valores de k_{eff} em função da razão moderador-combustível para diâmetros de pastilha combustível de 8,5 mm, 9,0 mm e 9,5 mm



Fonte: autora da dissertação.

Observa-se que o comportamento é bastante similar dos três diâmetros, não apresentando alterações significativas, então, optou-se por utilizar o diâmetro intermediário de 9 mm, cujo pico de reatividade foi ligeiramente superior ao dos demais.

Desse modo, as características da vareta combustível utilizada no estudo são apresentadas resumidamente na Tabela 16.

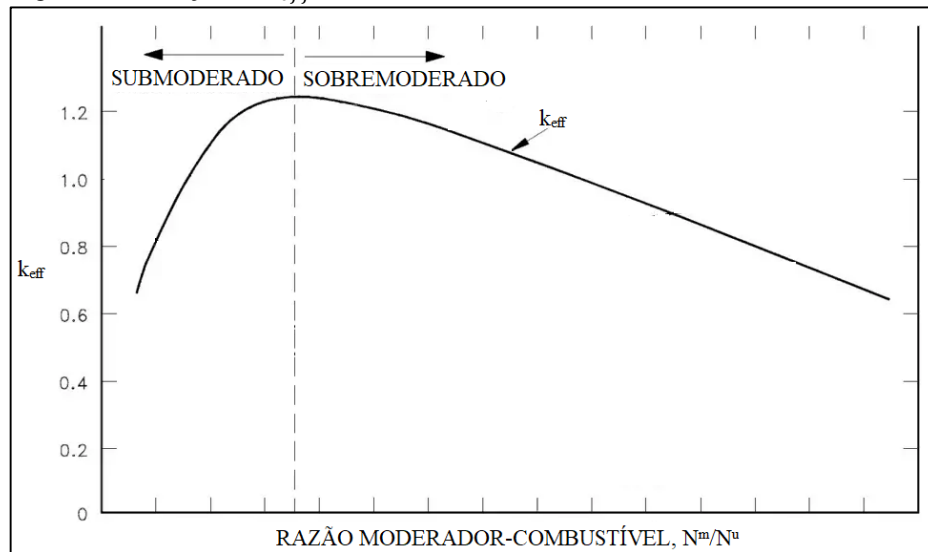
Tabela 16 – Características da vareta combustível utilizada no estudo

Característica	Valor
Material	UO ₂
Revestimento	Zircaloy-4
Enriquecimento	Variável (3,5%, 5%, 7%, 10%, 15% e 19,5%)
Diâmetro da pastilha	9 mm
Espessura do <i>gap</i> (preenchido de hélio)	0,2 mm
Espessura do revestimento	0,6 mm
Diâmetro externo da vareta	10,6 mm

Fonte: autora da dissertação.

3.5.4.2 Especificação da razão moderador-combustível

No modelo heterogêneo do reator, um fator bastante importante é a razão entre o moderador e o combustível, ou seja, razão entre o volume do moderador e do combustível. Esse parâmetro influencia diretamente na segurança do reator, pois a relação do k_{eff} em função desta razão apresenta um ponto de máximo, ocasionando duas regiões de comportamentos distintos (Figura 9).

Figura 9 – Variação do k_{eff} com a razão moderador-combustível

Fonte: adaptado do LINK421, 2024.

A curva da Figura 9 apresenta um ponto de pico que representa o balanço entre dois fatores que competem entre si: fator de utilização térmica (f) e a probabilidade de escape da ressonância (p), dois componentes da fórmula dos seis fatores, mostrada na Equação (2) (LEWIS, 2008). O aumento da quantidade de moderador, e, portanto, da razão moderador-combustível, favorece uma melhor moderação, aumentando o fator de utilização térmica. No entanto, esse aumento ocorre até certo ponto, no qual a absorção de nêutrons no moderador passa a ser muito elevada, reduzindo o valor do k_{eff} .

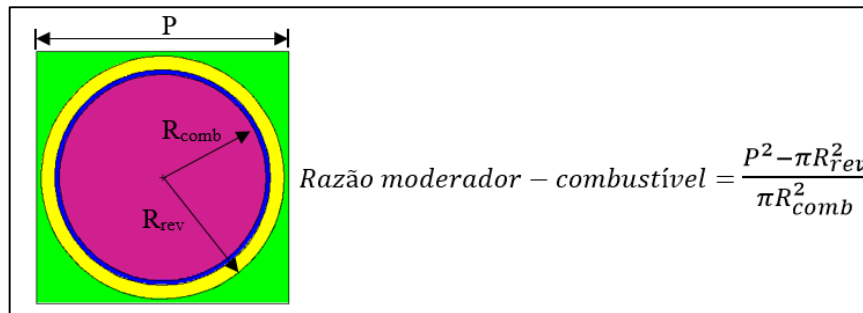
Para que haja a operação intrinsecamente segura, o que é uma característica dos projetos SMRs do tipo PWRs, é preciso que o reator esteja na região da submoderação, pois, em caso de perda de moderador, a reatividade é naturalmente reduzida, provocando o *feedback* negativo de temperatura (LEWIS, 2008). Desse modo, idealmente, com o reator a frio, a razão moderador-combustível deve estar próxima ao pico da curva para que durante a operação a quente, se encontre na região de submoderação.

Desse modo, foi verificada a variação do k_{eff} com a razão moderador-combustível para os diversos enriquecimentos em estudo. O objetivo é avaliar quais razões de moderação são seguras para serem consideradas no projeto, bem como determinar o passo ideal (*pitch*) entre as varetas combustíveis. Consequentemente, o tamanho do Elemento Combustível (EC) poderá ser determinado (TAHERANPOUR e TALAEI, 2013).

²¹ **LINK4:** *Nuclear Power*. Disponível em <<https://www.nuclear-power.com/nuclear-power/reactor-physics/reactor-dynamics/moderator-to-fuel-ratio/>>. Acesso em: 15 mar 2024.

Foi, então, simulada uma vareta combustível imersa em um pequeno volume de água de mesma altura da vareta, conforme demonstrado na Figura 10. A quantidade de moderador foi progressivamente aumentada, com incrementos uniformes no valor do passo (*pitch*), enquanto o diâmetro da vareta combustível foi mantido constante (TAHERANPOUR e TALAEI, 2013).

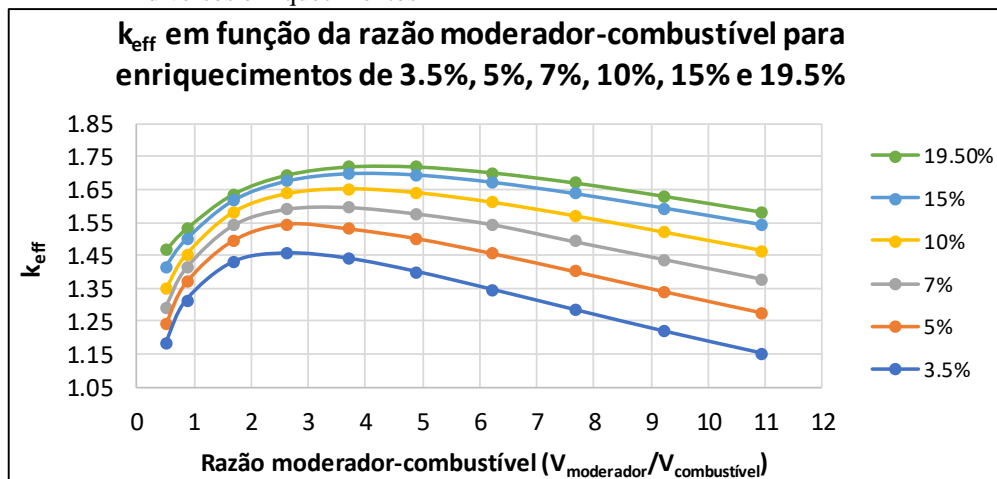
Figura 10 – Representação da geometria utilizada para estudo da razão moderador-combustível



Fonte: autora da dissertação.

As simulações foram realizadas considerando o reator a frio, ou seja, temperatura de 293 K, condição na qual é mais reativo em virtude da ausência do alargamento da ressonância e redução de pico que ocorre com o aumento da temperatura, ou seja, em virtude da não ocorrência do efeito Doppler e, também, do aumento da densidade do moderador. Desse modo, garante-se que o reator não saia da condição de submoderação quando desligado e, conseqüentemente, passe a não ter mais o *feedback* negativo de temperatura. Na Figura 11, estão mostradas as curvas resultantes do estudo para os diversos níveis de enriquecimento.

Figura 11 – Comportamento do k_{eff} em função da razão moderador-combustível para diversos enriquecimentos



Fonte: autora da dissertação.

Considerando a primeira etapa do estudo realizada, as razões de moderação utilizadas variaram entre 2,10 e 1,15 (Tabela 17).

Tabela 17 – Razão moderador-combustível utilizada nas primeiras etapas do estudo

Fração Volumétrica dos Componentes H ₂ O – UO ₂ – Zr-4	Razão moderador-combustível
60% - 28,57% - 11,43%	2,10
55% - 32,14% - 12,86%	1,71
50% - 35,71% - 14,29%	1,40
45% - 39,29% - 15,71%	1,15

Fonte: autora da dissertação.

Portanto, com a razão de 1,15 é possível obter uma planta mais compacta e com maior concentração de combustível, características bastante relevantes para o projeto em estudo, e dentro da faixa de moderação desejada, conforme visto na Figura 11.

Desse modo, o passo entre as varetas combustíveis que atende a essa razão moderador-combustível é de 12,7 mm.

3.5.4.3 Especificação do elemento combustível

Conhecida a razão entre o moderador e o combustível a ser empregada no projeto, pode-se determinar o diâmetro equivalente do núcleo associando-se a equação da definição da razão moderador-combustível, Equação (4), ao balanço térmico médio do núcleo, Equação (5). Ainda, mantendo a relação empregada nas outras etapas de estudo entre altura e diâmetro do núcleo (H/D) de 1,16 tem-se (BRENNEN, 2014):

$$RMC = \frac{V_{moderador}}{V_{combustível}}$$

$$RMC = \frac{V_{núcleo} - V_{rev}}{V_{comb}}$$

$$RMC = \frac{\pi * R_{núcleo}^2 H_{núcleo} - N_v \pi R_{rev}^2 H_{núcleo}}{N_v \pi R_{comb}^2 H_{núcleo}}$$

$$N_v = \frac{R_{núcleo}^2}{RMC \cdot R_{comb}^2 + R_{rev}^2} \quad (4)$$

$$P = N_v H_{n\u00facleo} * \bar{q}'$$

$$P = \frac{R_{n\u00facleo}^2}{RMC \cdot R_{comb}^2 + R_{rev}^2} 1,16 * 2R_{n\u00facleo} * \bar{q}'$$

$$R_{n\u00facleo} = \sqrt[3]{\frac{P(RMC \cdot R_{comb}^2 + R_{rev}^2)}{1,16 * 2 * \bar{q}'}} \quad (5)$$

Sendo:

RMC: raz\u00e3o moderador – combust\u00edvel

V_{n\u00facleo}: volume do n\u00facleo [cm³]

V_{rev}: volume do combust\u00edvel com revestimento [cm³]

V_{comb}: volume das pastilhas combust\u00edveis [cm³]

R_{n\u00facleo}: raio equivalente do n\u00facleo [cm]

R_{comb}: raio da pastilha combust\u00edvel [cm]

R_{rev}: raio externo da vareta combust\u00edvel com o revestimento [cm]

H_{n\u00facleo}: altura do n\u00facleo [cm]

N_v: n\u00famero de varetas combust\u00edveis

P: pot\u00eancia do n\u00facleo [W]

\bar{q}' : taxa de gera\u00e7\u00e3o de calor linear [W/cm]

A taxa de gera\u00e7\u00e3o de calor linear, \bar{q}' , \u00e9 um par\u00e2metro importante para o desempenho do combust\u00edvel e precisa ser controlado. Nos reatores SMRs (PWR) esse par\u00e2metro varia entre 85 e 100 W/cm. Logo, ser\u00e1 assumido, inicialmente, o valor de projeto de 95 W/cm. Assim, resolvendo a Equa\u00e7\u00e3o (5), tem-se um di\u00e2metro equivalente de 111,83 cm. Retornando \u00e0 Equa\u00e7\u00e3o (4), obt\u00eam-se um total de aproximadamente 6.086 varetas combust\u00edveis. Com rela\u00e7\u00e3o \u00e0 altura, se for mantido \u00e0 rela\u00e7\u00e3o de *H/D* de 1,16, ter-se-ia 129,72 cm. No entanto, foi adotada uma altura de 120 cm para manter o volume do n\u00facleo abaixo de 1,2 m³ e, com isso, mais compacto. Portanto, a rela\u00e7\u00e3o *H/D* torna-se 1,07.

As varetas combust\u00edveis s\u00e3o inseridas em elementos combust\u00edveis, cujos arranjos mais utilizados s\u00e3o quadrados de 17x17, 16x16 ou 15x15. Tomando por base uma composi\u00e7\u00e3o b\u00e1sica para o elemento combust\u00edvel, a quantidade total necess\u00e1ria de elementos combust\u00edveis para cada arranjo pode ser determinada, conforme Tabela 18. Como premissa,

foram adotadas varetas de controle com o mesmo diâmetro do combustível, ou seja, 9 mm, e revestimento em Zircaloy-4 com 0,6 mm de espessura.

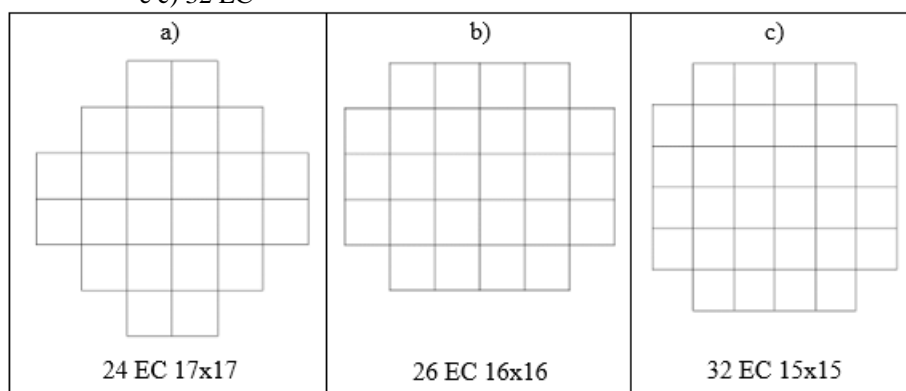
Tabela 18 – Número de elementos combustíveis para cada arranjo proposto

Parâmetro	Tipo de arranjo		
	17x17	16x16	15x15
Número de varetas combustíveis	264	236	206
Número de varetas de controle	24	22	18
Número de canais de instrumentação	1	0	1
Número de EC mínimos para 6.086 varetas combustíveis	23,05	25,79	29,54
Número considerado de arranjos	24	26	32
Total atualizado de varetas combustíveis	6.336	6.136	6.592

Fonte: autora da dissertação.

Dessa forma, como visto na Tabela 18, o núcleo pode ser arranjado com 24 EC com 17x17, 26 EC com 16x16 ou 32 EC com 15x15. Entretanto, é interessante que o arranjo dos elementos combustíveis dentro do núcleo possua a mesma quantidade de elementos centrais na horizontal e vertical de forma a se aproximar ao máximo de um formato cilíndrico. Logo, as melhores configurações geométricas para arranjar 24, 26 e 32 elementos combustíveis consideradas nestes estudos estão representadas na Figura 12.

Figura 12 – Possíveis arranjos para os elementos combustíveis com a) 24 EC, b) 26 EC, e c) 32 EC

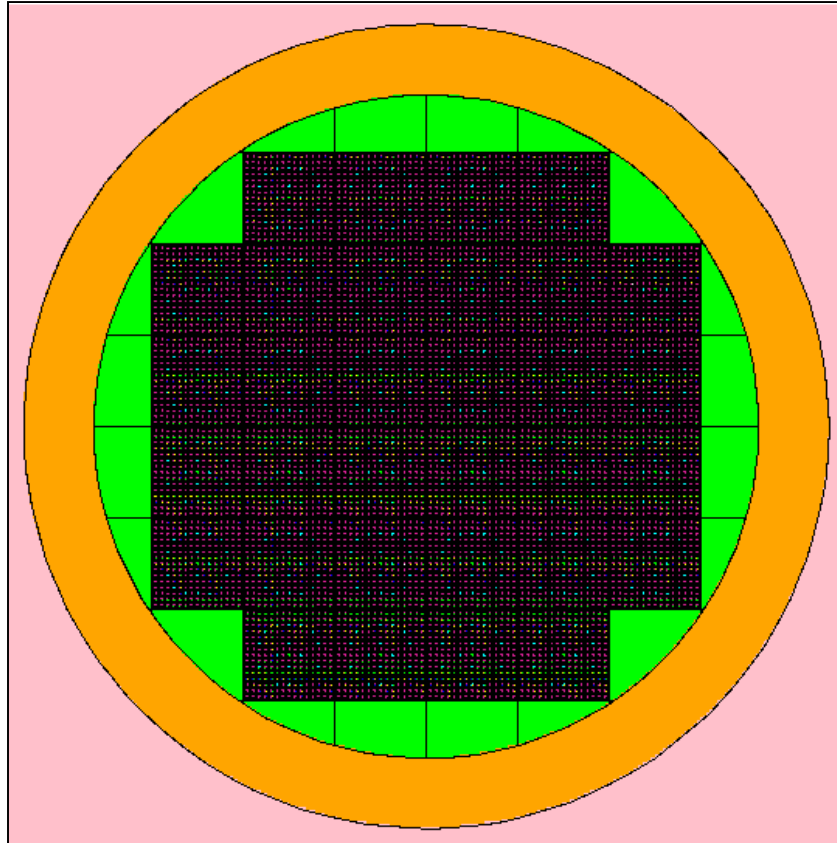


Fonte: autora da dissertação.

É possível notar que o arranjo de 32EC com 15x15 é o que apresenta a configuração mais compacta, pois obtém-se um número maior de varetas combustíveis para um mesmo diâmetro de núcleo. Portanto, esse foi o arranjo escolhido inicialmente para esta quarta etapa do estudo (Figura 13). Para a modelagem completa do núcleo, foi considerado

ainda um espaço de 0,25 cm entre os elementos combustíveis, dessa forma o diâmetro real do núcleo modelado foi de 142 cm e a espessura de refletor de 15 cm.

Figura 13 – Modelo do núcleo com 32 EC com arranjo 15x15. Vista superior



Fonte: autora da dissertação.

3.5.4.1 Especificação das grades espaçadoras

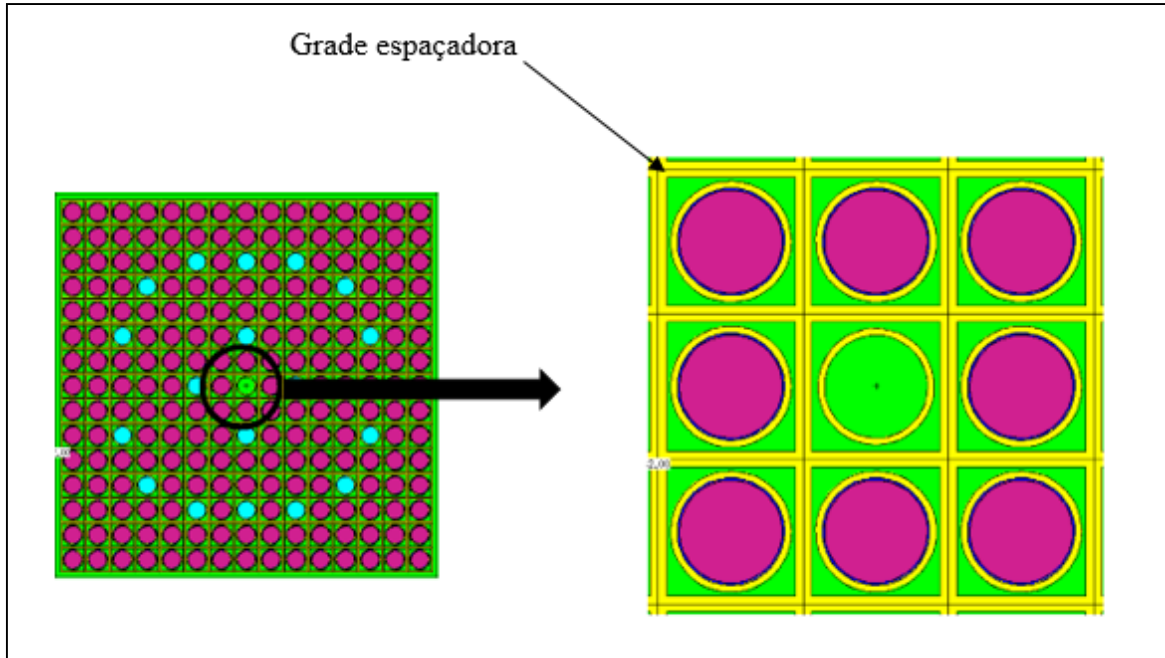
As grades espaçadoras foram consideradas no projeto do núcleo pois influenciam na absorção total de nêutrons no núcleo.

Tal como nas primeiras etapas nas quais a fração volumétrica total de revestimento de Zircaloy-4 foi considerada sendo de 40% da de combustível, nesta etapa também foi considerada a mesma razão. Assim, sabendo a quantidade total de combustível para cada composição de núcleo, a massa total de Zircaloy-4 foi determinada. Como os revestimentos das varetas combustíveis, de controle e dos canais de instrumentação já são de Zr-4, a massa destinada às grades espaçadoras foi estimada como a diferença entre a massa total que deveria estar contida no núcleo e a massa já presente nos revestimentos.

Posteriormente, essa massa foi distribuída em quatro grades espaçadoras de 4 cm de altura cada. O objetivo principal dessa abordagem não é a verificação estrutural das

grades, mas apenas garantir que o inventário de material do núcleo ativo seja o mais próximo possível do real. A modelagem final das grades pode ser vista na Figura 14.

Figura 14 – Visualização da grade espaçadora modelada no OpenMC



Fonte: autora da dissertação.

3.5.4.2 Curvas de criticalização

Após determinar os parâmetros de definição do núcleo heterogêneo, foram calculadas as curvas de criticalização para o núcleo com os diversos enriquecimentos em estudo. Para tanto, as barras de controle foram retiradas progressivamente de dentro do núcleo, de baixo para cima, a fim de verificar com qual altura a criticalidade seria obtida. Após essa etapa, os núcleos foram novamente simulados na condição crítica para se obter os mapas de fluxo de nêutrons. Os resultados dessa etapa são apresentados no Capítulo 4, item 4.4.

3.5.5 Quinta etapa: análise da queima do núcleo

Uma etapa muito importante do projeto é determinar o tempo de duração do núcleo sem a necessidade de reabastecimento. O reabastecimento se faz necessário quando a quantidade de combustível não é suficiente para manter a reatividade do reator, atingindo valores de k_{eff} inferiores a 1.

Para isso, foi realizada a queima do núcleo utilizando a capacidade do código OpenMC, por meio do módulo *openmc.deplete*. A depleção no código é um processo vinculado que envolve os cálculos das taxas de reação pelo “operador” do transporte e o

cálculo da densidade dos núclídeos decorrentes da transmutação por algum método de integração temporal, “operador” de transmutação, ao longo de um intervalo de tempo. Assim, os resultados do cálculo do transporte alimentam o código de estimativa da depleção dos núclídeos, que por sua vez, fornece novos dados de entrada para o cálculo do transporte. Dessa forma, são dois códigos separados que rodam em conjunto. Esse processo é repetido durante todo o intervalo de tempo estipulado pelo usuário (ROMANO, PAUL K. et al., 2021). Para mais detalhes sobre a forma de cálculo da depleção com o OpenMC, o leitor é encorajado a ler o trabalho publicado por ROMANO e PAUL (2021).

No programa OpenMC não é possível fazer a alteração da altura das barras de controle dentro do núcleo ao longo da simulação do tempo de queima do núcleo, pois requer a alteração do arquivo de entrada da geometria. Entretanto, para que seja possível prolongar ao máximo a operação do submarino sem a troca do combustível, as barras de controle precisam ser movidas para compensar a queda de reatividade ocasionada pela queima do combustível e acúmulo de veneno formado, principalmente ^{135}Xe e ^{149}Sm . Portanto, simular a queima do núcleo com as barras de controle em uma posição fixa não é muito representativo.

De acordo com o realizado por FAROUKI (2019), seria necessário refazer o arquivo de entrada em cada passo de cálculo, utilizando os dados do arquivo de saída do programa para atualizar as frações mássicas de todos os isótopos envolvidos no cálculo e, tendo um novo arquivo de entrada, se atualizaria, também, a posição das barras de controle para que o núcleo permanecesse crítico.

No entanto, como o objetivo deste trabalho é fazer o projeto conceitual e uma análise preliminar do que se espera de duração do núcleo, foi adotada uma abordagem simplificada, realizando a queima sem as barras de controle no núcleo. Ou seja, foi analisado apenas o potencial de queima do núcleo ao longo do tempo de operação, admitindo-se que as barras de controle serão efetivamente suficientes para manter o reator sob controle. Desse modo, espera-se verificar quando o núcleo se tornará subcrítico.

Assim, os núcleos com enriquecimento de 3,5%, 5%, 7% e 10% foram queimados ao longo do tempo de 0 até 1.600 DMP (Tabela 19). Foi utilizado, no início, um intervalo menor de duração da queima para que fosse possível captar a alteração do perfil neutrônico em virtude da formação de ^{135}Xe . A fim de ponderar precisão e tempo de processamento, foi utilizada uma cadeia de depleção simplificada já pré-disponibilizada para uso junto ao código. Ainda, visando a otimizar o tempo de processamento, foram considerados ciclos menores no cálculo da criticalidade, empregando 30 ciclos iniciais e 100

ciclos ativos. Para que isso fosse possível sem comprometer os resultados, foi utilizado um arquivo externo com a fonte, ou seja, a distribuição inicial dos pontos de fissão, gerada em rodadas anteriores com muito mais ciclos iniciais até garantir uma boa distribuição da fonte e, assim, sua convergência (ROMANO et al., 2015). A queima foi considerada apenas no combustível, sendo realizada de maneira uniforme, não separando o combustível em diferentes regiões radiais e axiais. Esses resultados são apresentados no Capítulo 4 item 4.5.

Tabela 19 - Intervalo de tempo utilizado para cálculo da queima dos núcleos

Intervalo (<i>step</i>)	Duração do intervalo [dias]	Intervalo acumulado [DMP]
1	5	5
2	5	10
3	10	20
4	10	30
5	20	50
6	50	100
7	100	200
8	100	300
9	200	500
10	200	700
11	200	900
12	200	1.100
13	100	1.200
14	100	1.300
15	100	1.400
16	100	1.500
17	100	1.600

Fonte: autora da dissertação.

Embora com esse método seja possível ter uma dimensão da duração do núcleo, é importante ressaltar que não está sendo levado em consideração a formação de ^{149}Sm quando há o desligamento da planta, o que com certeza, devido ao perfil operativo do submarino, ocorrerá várias vezes ao longo da vida da embarcação. Durante o desligamento da planta, em virtude do decaimento do ^{149}Pr , há um aumento na formação do ^{149}Sm . No entanto, como ^{149}Sm é estável, e caso não seja queimado em operação, se acumulará no núcleo, podendo causar um envenenamento considerável a longo prazo.

Outro fator que não está sendo levado em consideração, e que também contribuirá para a redução na vida efetiva do núcleo, é que reatores não operam com nenhuma barra de controle inserida no núcleo por questões de segurança. Em operação normal, as barras de controle são inseridas aproximadamente entre 20% a 80% da altura do núcleo. Portanto, quando se atingir valores de $k_{eff} \approx 1$ sem as barras de controle, na

realidade o núcleo já estará subcrítico, pois as barras de controle estarão minimamente inseridas, mesmo que em uma posição bastante elevada, reduzindo a reatividade geral do núcleo. Ainda, as barras de controle sofrem perda de efetividade ao longo do tempo de operação, pois também queimam, ou seja, absorvem nêutrons, efeito que não está sendo considerado na análise simplificada da queima do núcleo. Isto acarretará que um percentual maior da barra de controle precise estar inserido no núcleo se comparado à uma barra nova.

Por isso, ao final do cálculo da queima, foi realizado um novo cálculo de criticalidade para verificar o real valor do k_{eff} ao final do tempo de queima, considerando as barras de controle inseridas apenas 20% no núcleo. Para tanto, a composição isotópica do combustível foi atualizada utilizando as frações atômicas do material para o *step* de queima de interesse. Essas frações podem ser recuperadas no arquivo de saída do OpenMC do cálculo de queima. Esses resultados são apresentados no Capítulo 4 item 4.6.

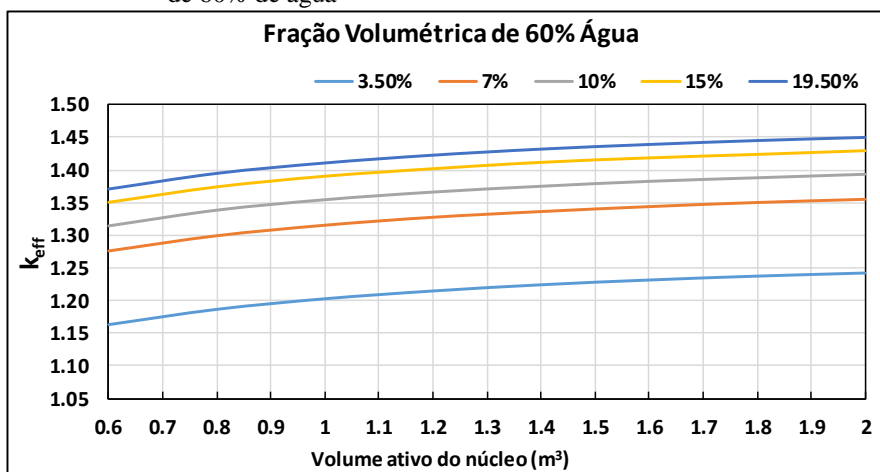
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com as simulações em cada etapa do projeto. A análise dos resultados está baseada nos artigos encontrados na literatura.

4.1 Resultados da primeira etapa: núcleo homogêneo simples

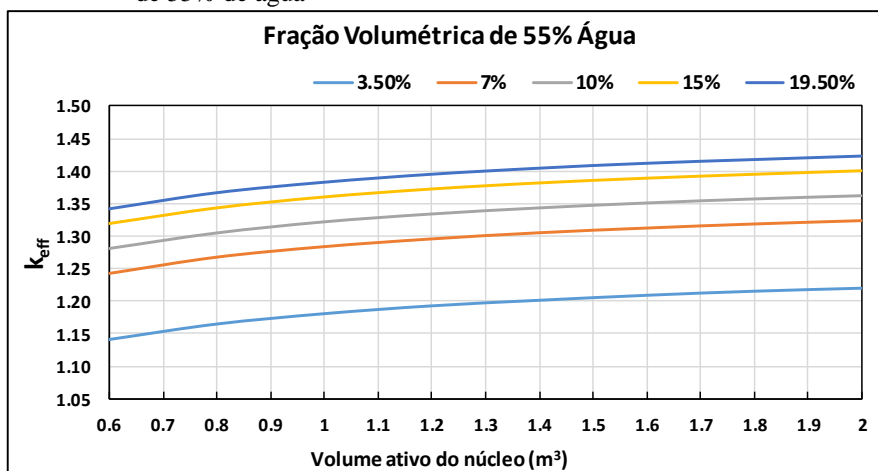
Nesta etapa do trabalho foram simulados os núcleos apenas com moderador, combustível e revestimento, misturados homogeneamente para alguns enriquecimentos e volumes de núcleo. Os resultados do k_{eff} para as diversas frações volumétricas analisadas para cada um dos enriquecimentos são apresentados da Figura 15 a Figura 18.

Figura 15 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 60% de água



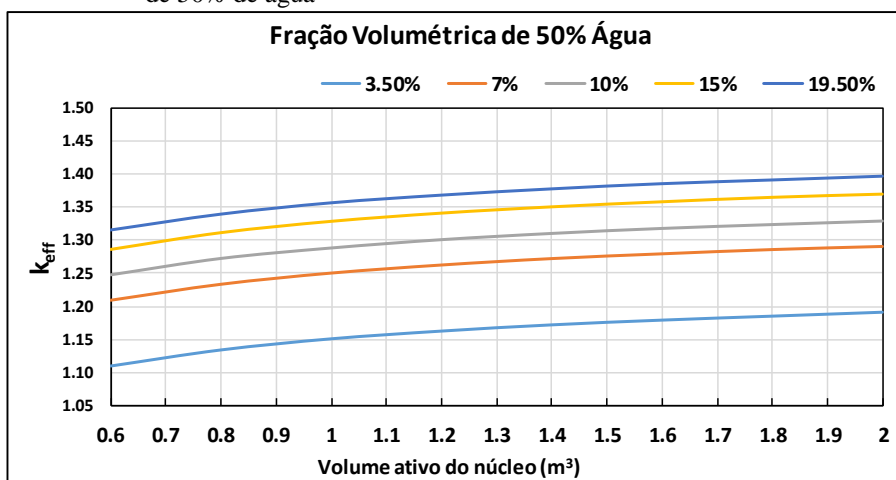
Fonte: autora da dissertação.

Figura 16 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 55% de água



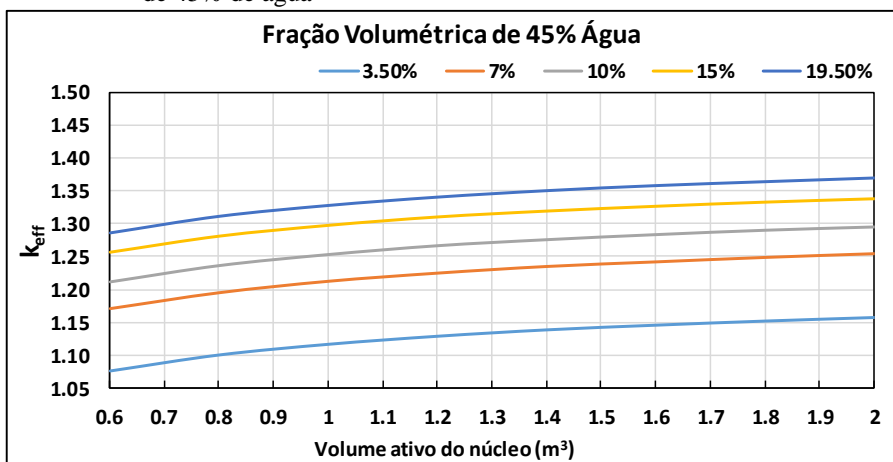
Fonte: autora da dissertação.

Figura 17 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 50% de água



Fonte: autora da dissertação.

Figura 18 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para fração volumétrica de 45% de água



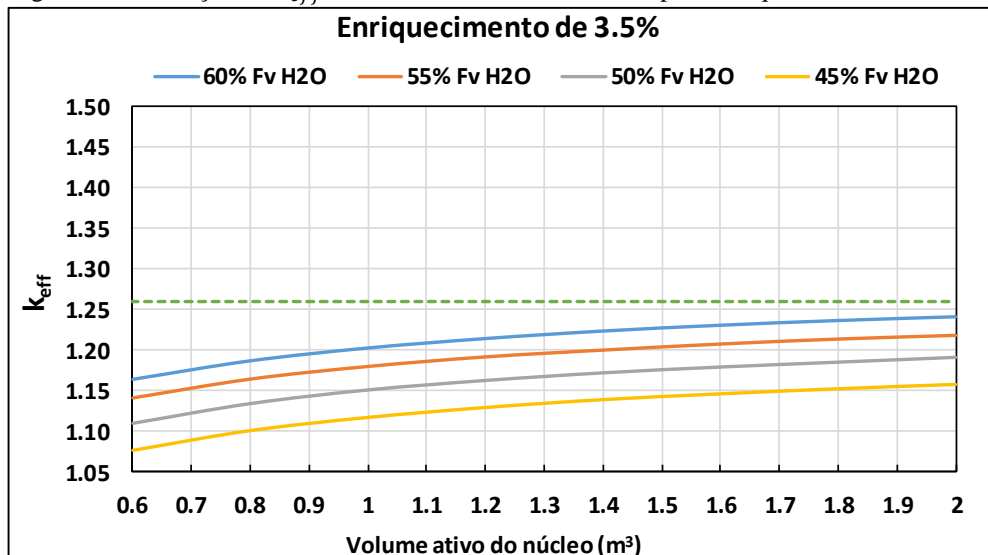
Fonte: autora da dissertação.

Cabe observar que da Figura 15 a Figura 18 os resultados são apresentados na mesma escala e, portanto, é notável que o fator de multiplicação aumenta proporcionalmente com o aumento da fração volumétrica de água e, portanto, com a razão moderador-combustível. Esse comportamento é o esperado baseado na literatura, conforme já mostrado na Figura 9.

Esse comportamento se dá em virtude da concorrência entre o fator de utilização térmica (f) e a probabilidade de escape da ressonância (p), dois componentes da fórmula dos seis fatores, mostrada na Equação (2) (LEWIS, 2008). Um aumento na razão moderador-combustível representa ter uma maior quantidade de moléculas de moderador relativamente ao combustível, o que facilita a termalização dos nêutrons. Isto reduz a chance do nêutron de ser absorvido na região de ressonância durante esse processo e, portanto, aumenta o fator p . Em contrapartida, a maior quantidade de moderador acarreta o aumento da absorção dos nêutrons nesse meio, reduzindo, assim, o fator de utilização térmica. Desse modo, como estes dois fenômenos são concorrentes, existe um ponto ótimo de equilíbrio representado pelo pico observado na curva (Figura 9).

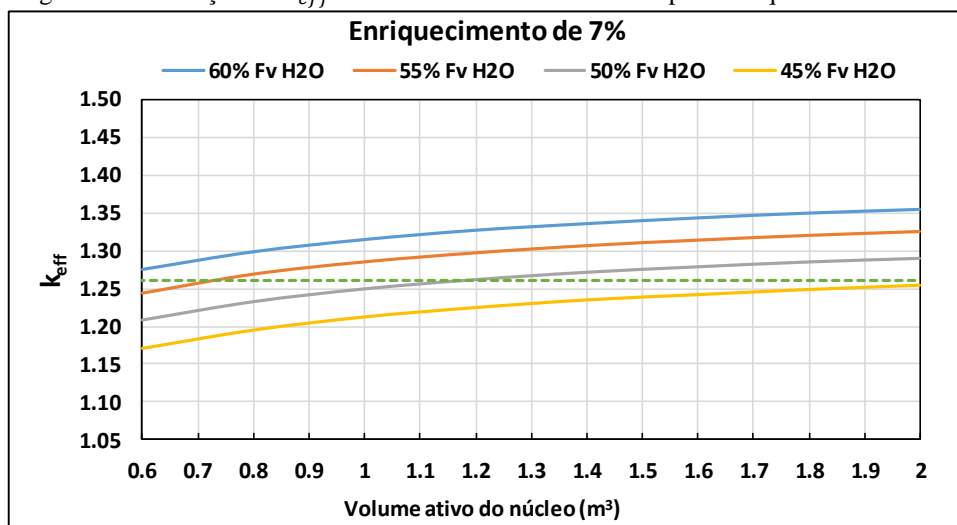
Também foi analisada a relação do k_{eff} com a variação do enriquecimento nas diferentes frações volumétricas (Figura 19 a Figura 23).

Figura 19 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 3,5%



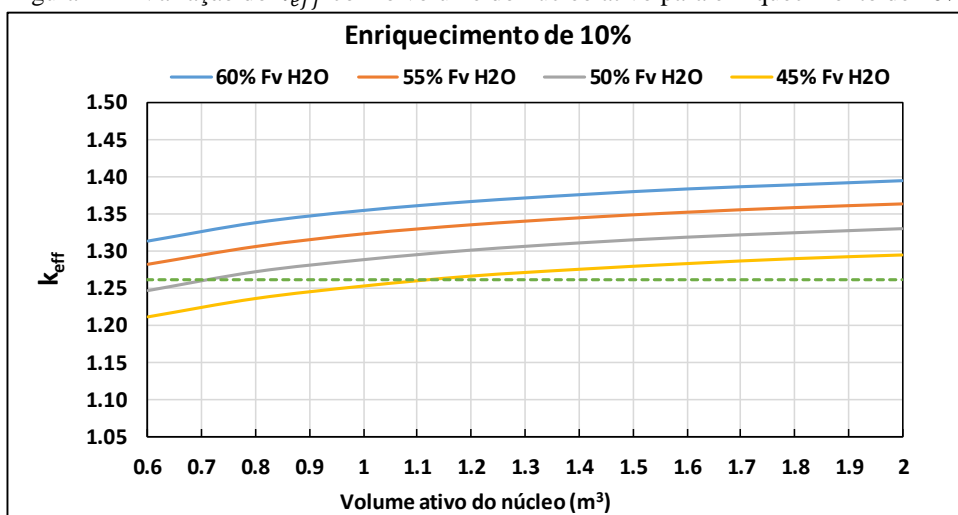
Fonte: autora da dissertação.

Figura 20 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 7%



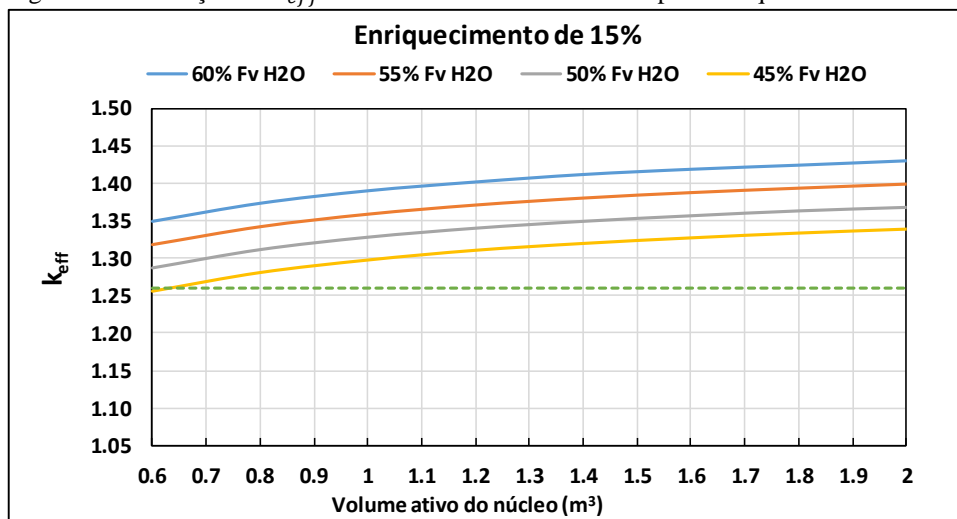
Fonte: autora da dissertação.

Figura 21 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 10%



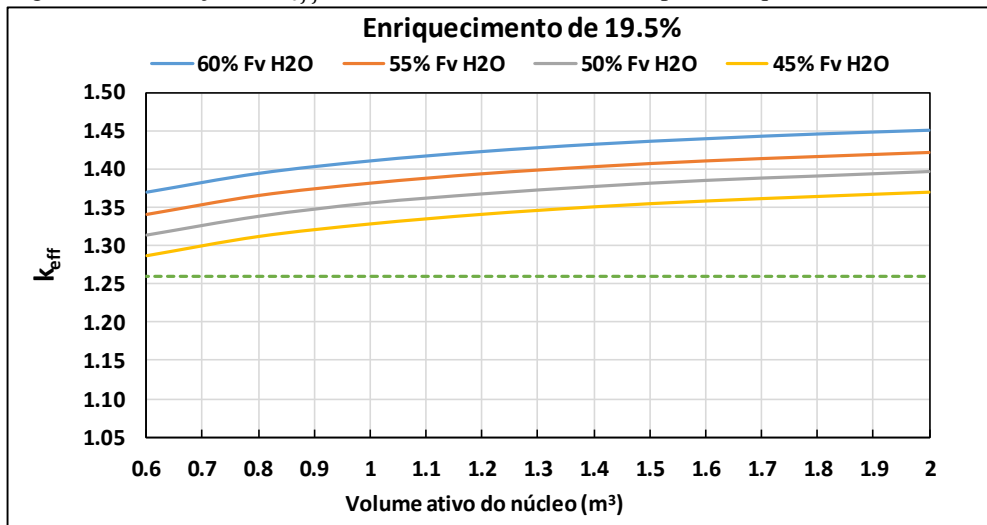
Fonte: autora da dissertação.

Figura 22 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 15%



Fonte: autora da dissertação.

Figura 23 – Variação do k_{eff} com o volume do núcleo ativo para enriquecimento de 19,5%



Fonte: autora da dissertação.

Novamente, é possível observar que o valor do k_{eff} cresce com o aumento do enriquecimento e com o volume do núcleo. Isto ocorre pelo aumento da quantidade de núclídeos físséis disponíveis.

Ainda, ressalta-se que todos os núcleos estão supercríticos e muitos estão acima do limite de 1,26 estabelecido. Especialmente nos núcleos de maior enriquecimento, como o de 15% e 19,5%, nenhuma configuração estudada atendeu ao critério. Entretanto, como o projeto conceitual em estudo é para um submarino e a maior durabilidade possível do núcleo é desejável, serão considerados para a próxima etapa do estudo os núcleos de 0,6 m³ e fração volumétrica de 45% de água para os enriquecimentos de 15% e 19,5%, a fim de analisar a diferença no comportamento com grau de enriquecimento bem superior ao praticado na indústria nuclear para produção de energia elétrica, embora comum em reatores de pesquisa.

4.2 Resultados da segunda etapa: núcleo homogêneo com refletor

Tendo em vista que a primeira parte desta etapa de estudo foi realizar uma análise da eficiência dos dois refletores, foi avaliado o comportamento do k_{eff} quando são variados: o volume do núcleo, a fração volumétrica dos componentes e, por fim, o enriquecimento. Os resultados obtidos podem ser vistos da Figura 24 a Figura 26.

Figura 24 – Comportamento do k_{eff} para diferentes volumes de núcleo para fração volumétrica de água de 60%, enriquecimento de 3,5% e a) refletor de água e b) refletor de aço

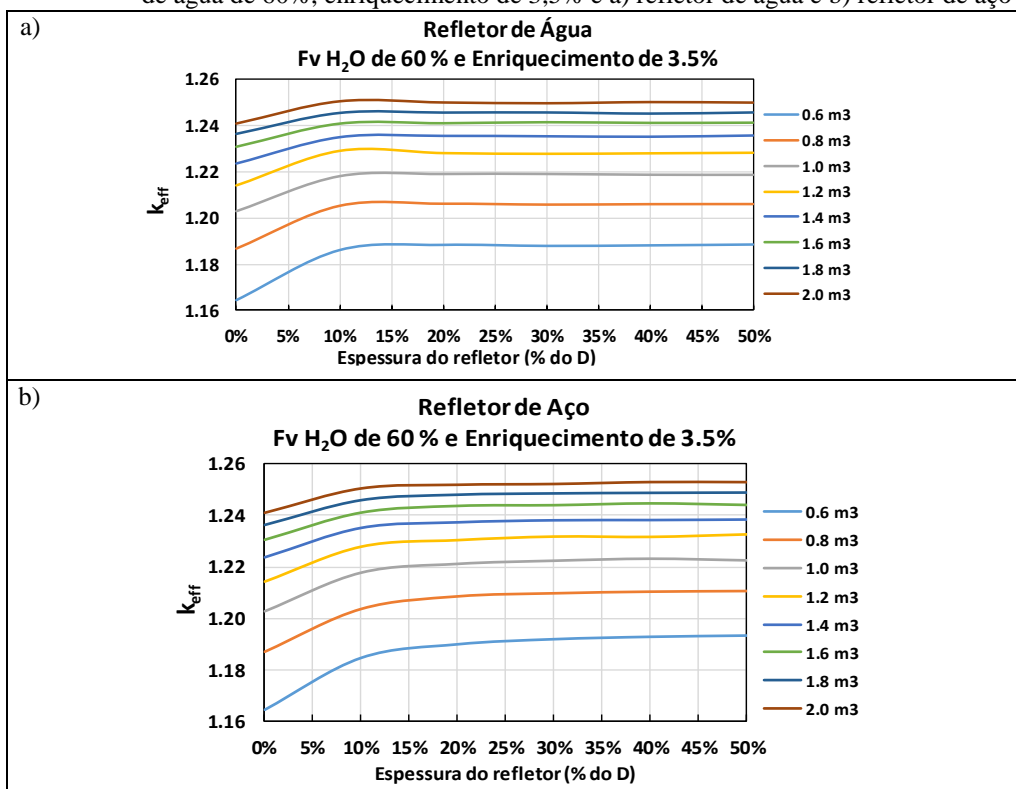


Figura 25 – Comportamento do k_{eff} para diferentes frações volumétricas de água com núcleo de volume 0,6 m³, enriquecimento de 3,5% e a) refletor de água e b) refletor de aço

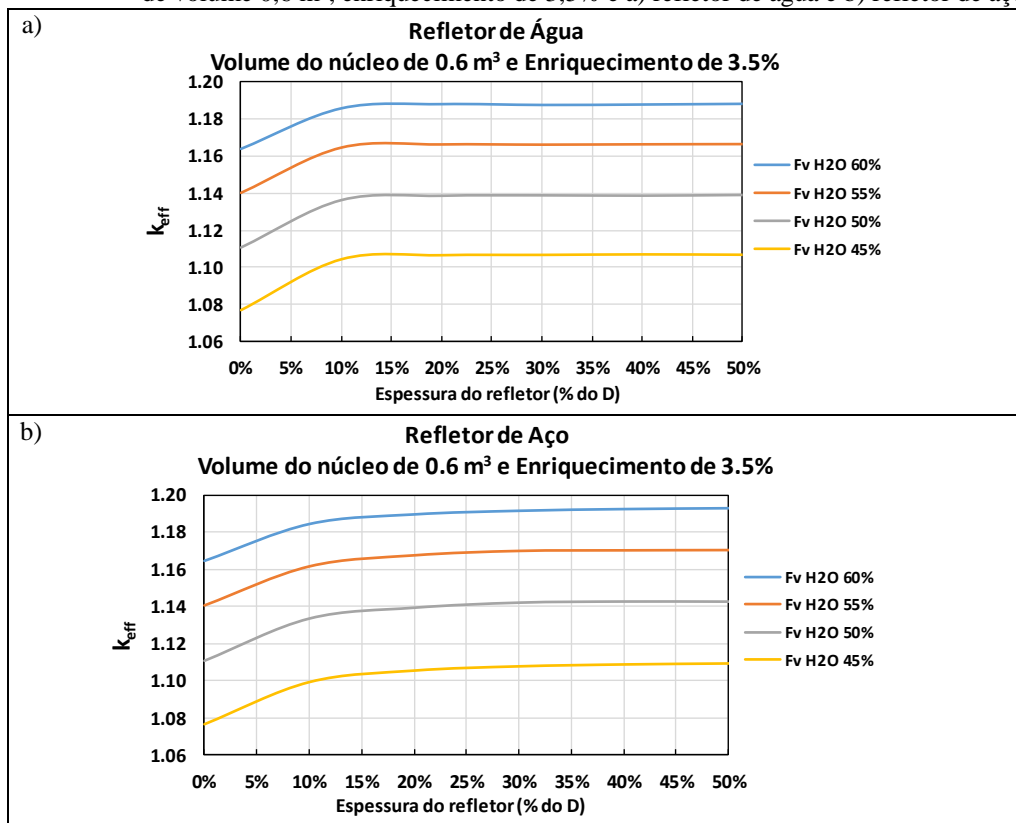
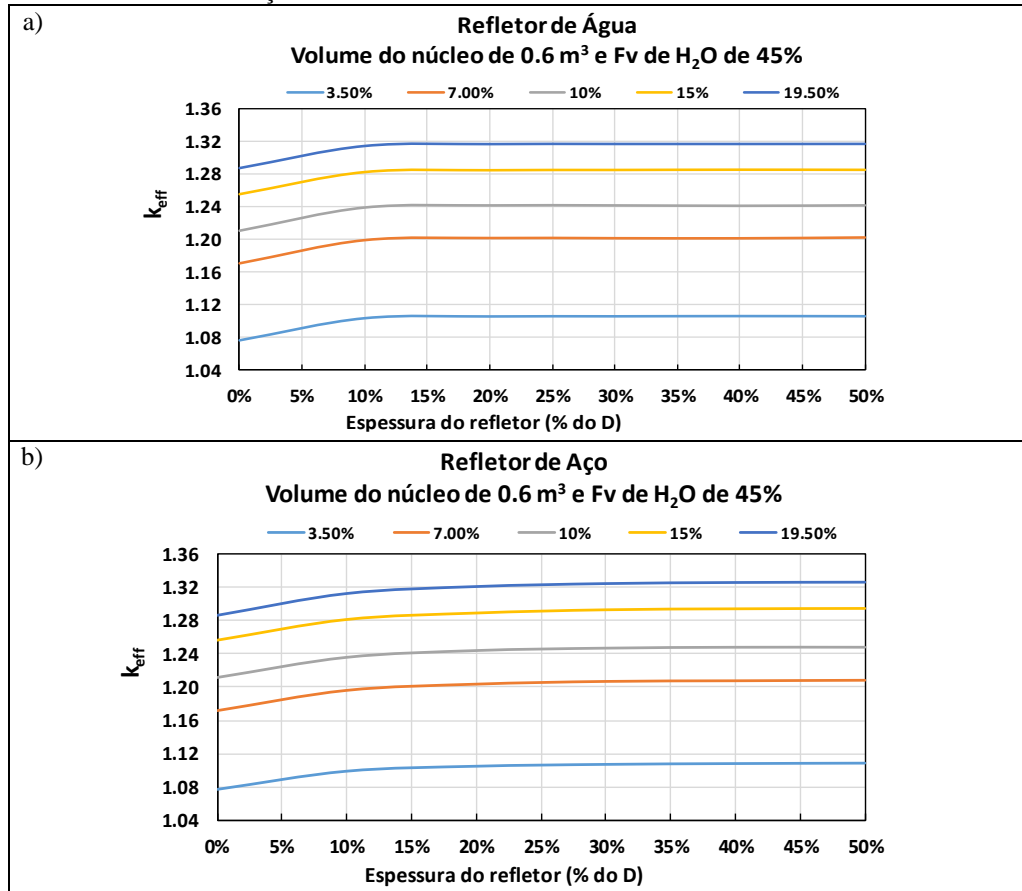


Figura 26 – Comportamento do k_{eff} para diferentes enriquecimentos de combustível para fração volumétrica de água de 45%, volume do núcleo de 0,6 m³ e a) refletor de água e b) refletor de aço

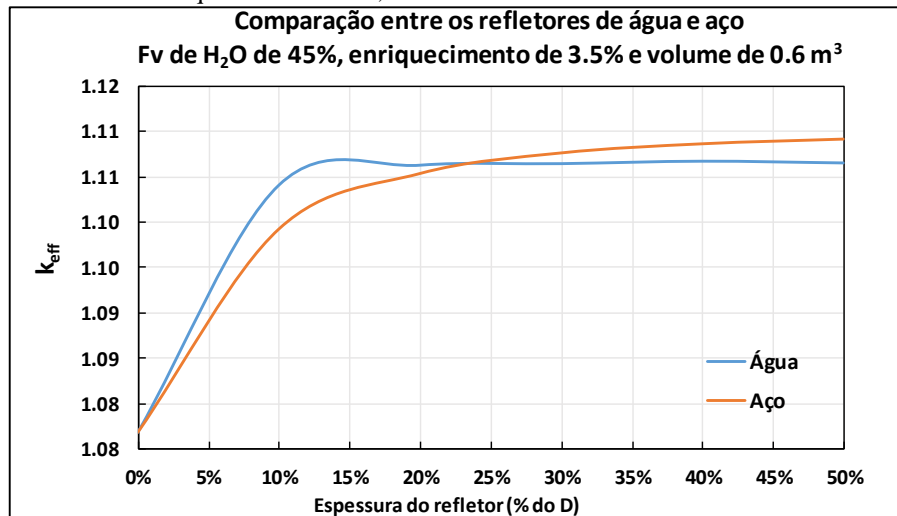


Fonte: autora da dissertação.

Os resultados mostram que o comportamento do k_{eff} não se altera em decorrência do volume do núcleo, da fração volumétrica dos componentes e do nível de enriquecimento do combustível. Assim, é possível inferir que para todos os outros núcleos, não simulados nesta etapa inicial, também sejam obtidos resultados semelhantes. Essa abordagem foi realizada para simplificar a análise, reduzindo o montante total de simulações necessárias.

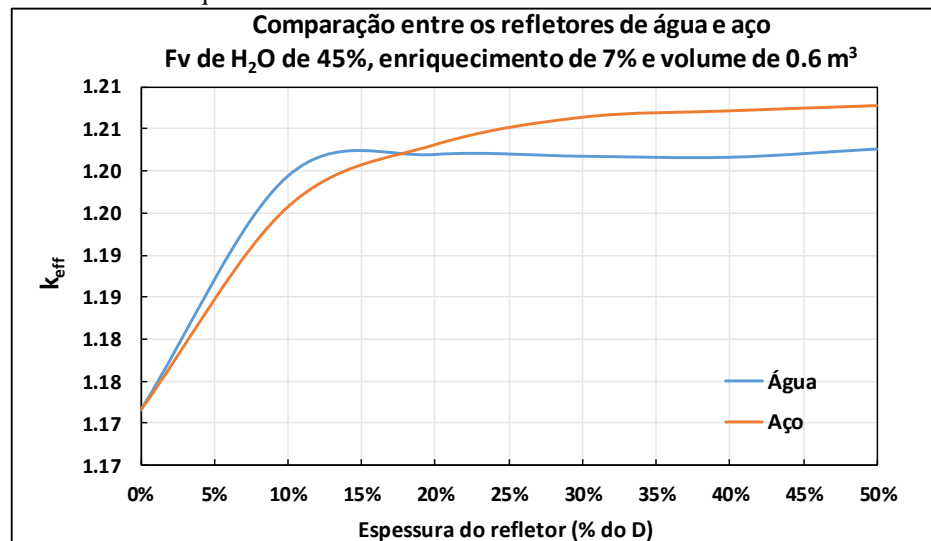
Assim, para fins de realizar a comparação entre os refletores analisados, foram simulados núcleos de 0,6 m³, fração volumétrica de 45% de água e enriquecimentos de 3,5% e 7% (Figura 27 e Figura 28).

Figura 27 – Comparação entre a eficiência do refletor de água com o de aço para enriquecimentos de 3,5%



Fonte: autora da dissertação.

Figura 28 – Comparação entre a eficiência do refletor de água com o de aço para enriquecimentos de 7%



Fonte: autora da dissertação.

Pelo observado nas Figura 27 e Figura 28, verifica-se que, até a espessura de 15% do diâmetro, é notável um ganho real no valor do k_{eff} com a inclusão dos refletores. No entanto, entre 15% e 30% existe um ganho, mas bem menos acentuado e, após a espessura de 30% do diâmetro, o ganho é praticamente nulo.

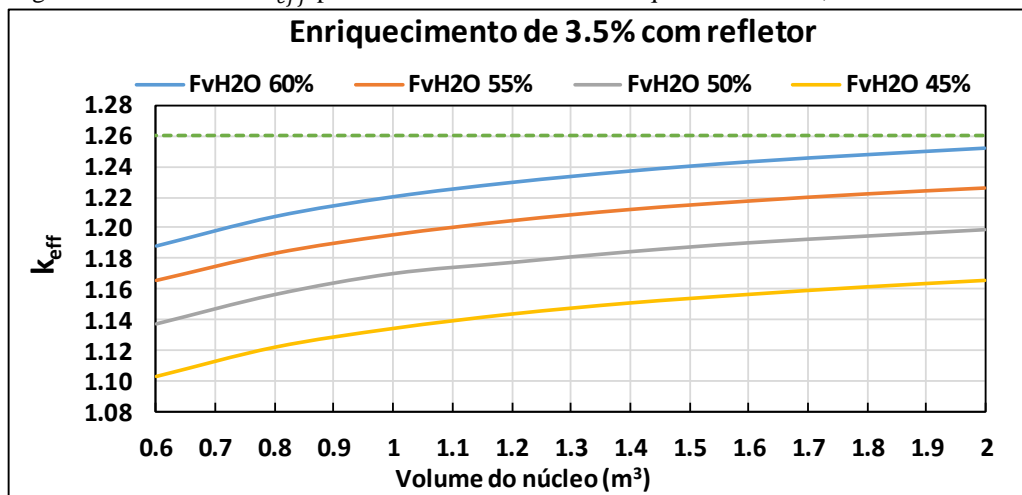
A água leve é um bom refletor, tendo em vista o baixo número atômico e características de espalhamento, além de ser mais leve para o navio. Entretanto, ao realizar o modelo do núcleo heterogêneo, que é mais realista, será necessário aumentar o diâmetro do núcleo para um valor real, maior que o diâmetro equivalente teórico, no qual seja possível

arranjar os elementos combustíveis dentro do núcleo. Assim, será naturalmente formada uma camada com maior quantidade de água radialmente ao núcleo.

Em virtude disto, optou-se por prosseguir os estudos com a inclusão do refletor pesado constituído de aço com espessura de 15% a fim de dimensionar o impacto na neutronics, devido a esse refletor. Esse tipo de refletor contribui bastante para preservar o vaso do reator, protegendo-o da fragilização por irradiação ao barrar eficientemente nêutrons, principalmente rápidos, e conferir uma boa blindagem para a tripulação contra esse tipo de radiação.

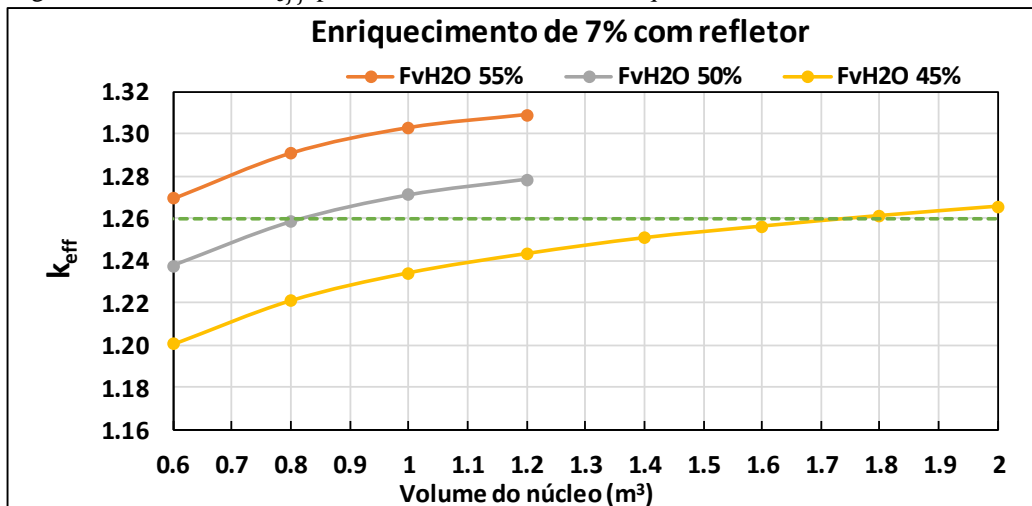
Desse modo, as simulações com os núcleos resultantes da primeira etapa foram repetidas com a inclusão do refletor escolhido (Figura 29 a Figura 31). Como esperado, os novos valores do k_{eff} são superiores aos encontrados na primeira etapa deste estudo.

Figura 29 – Valores de k_{eff} para núcleo com refletor e enriquecimento de 3,5%



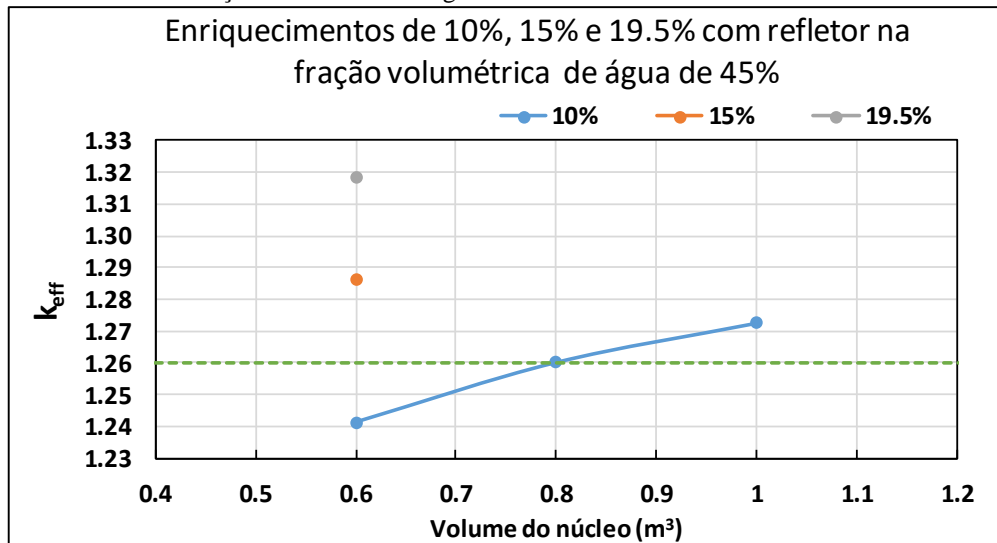
Fonte: autora da dissertação.

Figura 30 – Valores de k_{eff} para núcleo com refletor e enriquecimento de 7%



Fonte: autora da dissertação.

Figura 31 – Valores de k_{eff} para núcleo com refletor e enriquecimentos de 10%, 15% e 19,5% com fração volumétrica de água de 45%

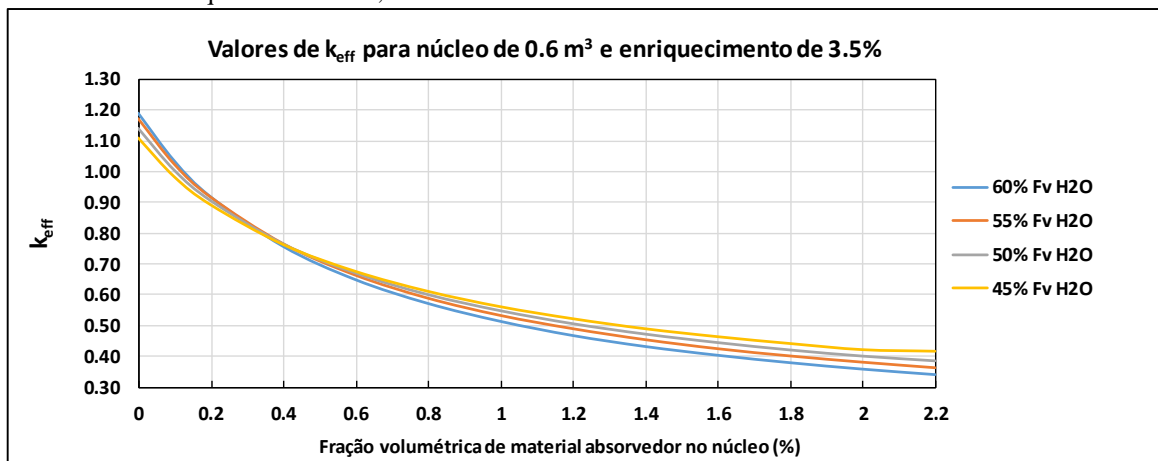


Fonte: autora da dissertação.

4.3 Resultados da terceira etapa: núcleo homogêneo com refletor e absorvedor

Na primeira parte desta etapa do trabalho a liga ternária de Ag-In-Cd foi inserida no núcleo de forma homogênea. Os resultados encontrados para o enriquecimento de 3,5% são mostrados na Figura 32.

Figura 32 – Valores de k_{eff} para o núcleo homogêneo com absorvedor diluído, volume de 0,6 m³, enriquecimento de 3,5% e refletor de 15% do valor do diâmetro do núcleo



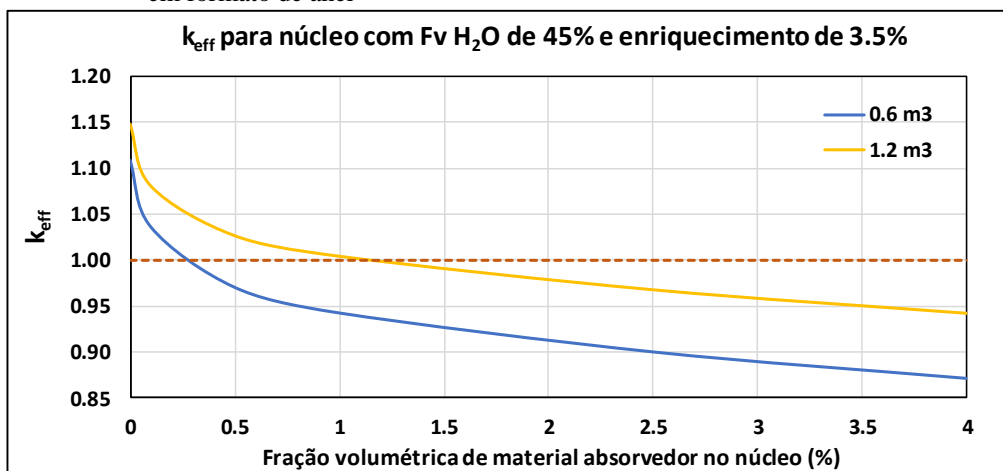
Fonte: autora da dissertação.

Como visto na Figura 32, os valores de k_{eff} sofreram uma abrupta queda com a inserção do material absorvedor no núcleo, mesmo com uma fração volumétrica bem pequena. Esse comportamento não condiz com a realidade e isso se deve à utilização do modelo homogêneo para essa simulação. Conforme explicado na seção 3.3.1, a ausência dos efeitos da autoblindagem, que ocorrem no reator heterogêneo, eleva muito a probabilidade

de captura dos nêutrons pelo material absorvedor, quando diluído homogeneamente. Assim, a utilização desse modelo para a representação da física de reatores para um PWR não traz bons resultados e deve ser alterado.

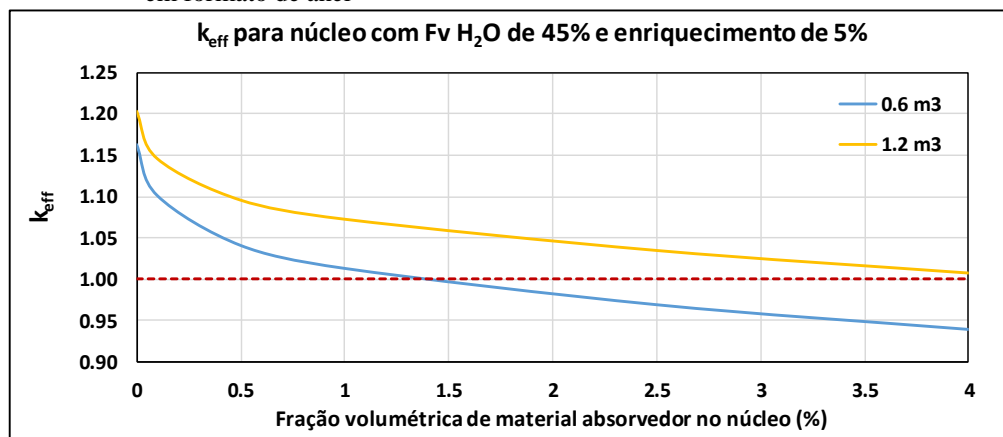
Então, foram simulados núcleos com moderador, combustível e revestimento dispersos homogeneamente, mas com o material absorvedor concentrado em dois anéis concêntricos. Os resultados são apresentados da Figura 33 a Figura 36 para as configurações com fração volumétrica equivalente à de 45% de água – equivalente pois as frações volumétricas foram alteradas para inclusão do absorvedor, descontando a fração volumétrica de absorvedor da de água e alterando a fração de combustível e revestimento para que a massa destes permanecesse constante (Apêndice B).

Figura 33 – Comportamento do k_{eff} para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 3,5% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel



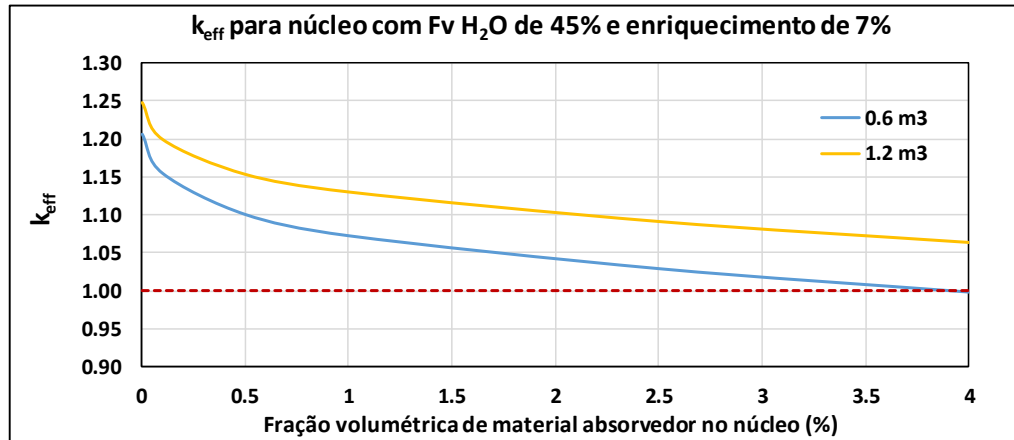
Fonte: autora da dissertação.

Figura 34 – Comportamento do k_{eff} para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 5% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel



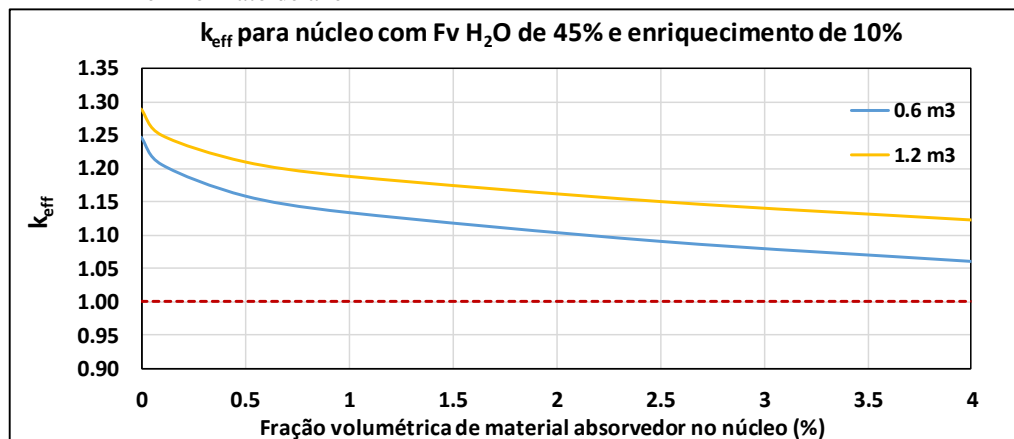
Fonte: autora da dissertação.

Figura 35 – Comportamento do k_{eff} para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 7% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel



Fonte: autora da dissertação.

Figura 36 – Comportamento do k_{eff} para núcleos com fração volumétrica de água de 45% e enriquecimento de 10% em função da fração volumétrica de material absorvedor em formato de anel



Fonte: autora da dissertação.

Primeira conclusão importante dos dados apresentados da Figura 33 a Figura 36 é que não existe a mesma queda brusca nos valores do k_{eff} , que foi observada no modelo totalmente homogêneo, ou seja, a representação das varetas de controle por dois anéis concêntricos conseguiu retratar de forma mais realista a física envolvida neste estudo.

Para os núcleos com enriquecimentos de 3,5% e 5%, valores mais próximos dos reatores atuais em operação e projeto, a criticalização é atingida com o percentual de absorvedor inserido. Entretanto, como era esperado, para enriquecimentos mais elevados, como 7% e 10%, ainda é necessário a inclusão de mais material absorvedor para reduzir a reatividade e atingir a criticalidade. Embora isto tenha ocorrido, a possibilidade de utilizar enriquecimentos maiores é bem-vinda, pois prolonga a vida útil do núcleo, reduzindo a necessidade de que o submarino pare frequentemente para troca de combustível, embora

traga outros desafios como controle da reatividade e melhora na distribuição do fluxo neutrônico. Vale observar que é importante no detalhamento do projeto aprimorar o projeto das barras de controle, pois existem outros fatores que precisam ser considerados, como o peso dos bancos, que interferem na segurança no reator e que no momento não foram levados em consideração nesta etapa de estudo.

4.4 Resultados da quarta etapa: núcleo heterogêneo

Para que fosse possível determinar as curvas de criticalização para cada núcleo com o enriquecimento diferente, a quantidade de varetas combustíveis e de controle foi customizada de modo a garantir um excesso de reatividade negativa, quando todas se encontrassem inseridas no núcleo, a fim de simular a condição de desligado a frio (293 K). Dessa forma, a intenção é garantir a segurança do reator nesta condição na qual se encontra mais reativo. Na Tabela 20, são apresentadas as configurações finais atingidas para cada núcleo, bem como os valores de k_{eff} obtidos com o reator a frio.

Tabela 20 - Configuração final do elemento combustível para cada enriquecimento

Configuração	Nível de Enriquecimento					
	3,5%	5%	7%	10%	15%	19,5%
Arranjo dos EC	32EC 15x15	32EC 15x15	32EC 15x15	32EC 15x15	24EC 17x17	24EC 17x17
Nº de varetas combustíveis por EC	206	198	194	188	236	226
Nº de varetas de controle por EC	18	26	30	36	52	62
Taxa de geração de calor linear [W/cm]	94,81	98,64	100,68	103,89	110,35	115,23
Carga de ^{235}U [kg]	170,07	233,62	320,39	443,40	625,83	778,71
k_{eff} (a frio)	0,97395 ± 0,00028	0,96556 ± 0,00027	0,96642 ± 0,00029	0,97916 ± 0,00026	1,00715 ± 0,00048	1,01265 ± 0,00055

Fonte: autora da dissertação.

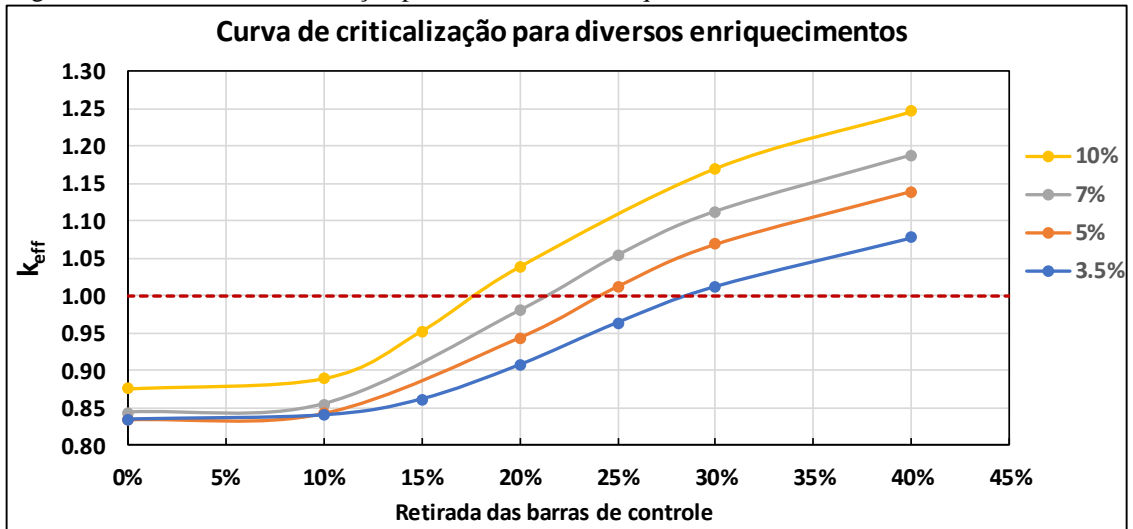
É possível verificar dos resultados da Tabela 20 que quanto maior o enriquecimento, maior a necessidade de mais barras de controle no núcleo para que se possa atingir um nível subcrítico seguro para a condição de desligado a frio. Entretanto, à medida que se aumenta o número de barras de controle, também a taxa de geração de calor linear

aumenta, devido à redução do número de varetas combustíveis totais, saindo da condição inicial estipulada de 95 W/cm, valor este plausível para os reatores SMRs. Vale ressaltar que para esse estudo as barras de controle não foram divididas em dois bancos de controle e desligamento, como normalmente se vê nos projetos dos reatores comerciais. Essa abordagem foi visando manter a simplicidade do modelo, conforme já explicado em seções anteriores.

Na Tabela 20, até o nível de enriquecimento de 10%, foi possível obter uma configuração dentro dos parâmetros estipulados, embora a taxa de geração de calor linear para o núcleo com 10% de enriquecimento já esteja levemente acima de 100 W/cm. Entretanto, para os núcleos com 15% e 19,5% de enriquecimento, mesmo alterando a configuração de 32EC 15x15 para 24EC 17x17, que é uma configuração com menor densidade de combustível, e acrescentando um alto número de varetas de controle, não se atingiu valores de k_{eff} abaixo de 1 na condição a frio. Além disso, os valores das taxas de geração de calor linear já atingiram um valor bem superior ao valor médio estipulado para este estudo (95 W/cm). Esse resultado é condizente com o obtido na primeira etapa de estudo, no qual apenas núcleos de 0,6 m³, para enriquecimento do 15% e 19,5%, atingiram valores próximos ao máximo estabelecido para o k_{eff} . Dessa forma, para que estes núcleos sejam viáveis, é preciso que novas estratégias de controle da reatividade inicial sejam empregadas, como, por exemplo, a utilização de varetas combustíveis com veneno queimável (óxido de Gadolínio- Gd₂O₃) diluído, que não são o foco deste estudo. Portanto, estes dois núcleos não foram mais considerados nas próximas análises deste estudo.

Com a configuração dos núcleos definidas, as curvas de criticalização foram traçadas conforme apresentado na Figura 37. Para esta condição, foi adotado o reator na temperatura de operação (a quente), utilizando a temperatura de 900 K para o combustível e 600 K para os demais materiais do núcleo. Ressalta-se que 6 cm de retirada de barras corresponde à 5%, tendo em vista a altura do núcleo de 120 cm.

Figura 37 – Curvas de criticalização para núcleos com enriquecimento de 3,5%, 5%, 7% e 10%



Fonte: autora da dissertação.

As curvas apresentadas na Figura 37 demonstram que os núcleos atingiram a criticalidade retirando-se as barras de controle de 15% a 30%. Como esperado, quanto menor o enriquecimento, maior é a necessidade de que as barras sejam retiradas para se atingir a criticalidade. A fim de se determinar o ponto exato no qual o núcleo se tornaria crítico, foi realizada uma interpolação simples entre os dois pontos adjacentes no qual a criticalidade foi atingida. Os resultados obtidos se encontram na Tabela 21.

Tabela 21 – Porcentagem de retirada das barras de controle para obter núcleos críticos

Enriquecimento	Porcentagem de retirada das barras	k_{eff} Reator a quente e crítico
3,5%	28,74%	1,00085 ± 0,00023
5%	24,13%	1,00073 ± 0,00023
7%	21,38%	1,00108 ± 0,00023
10%	17,77%	1,00001 ± 0,00024

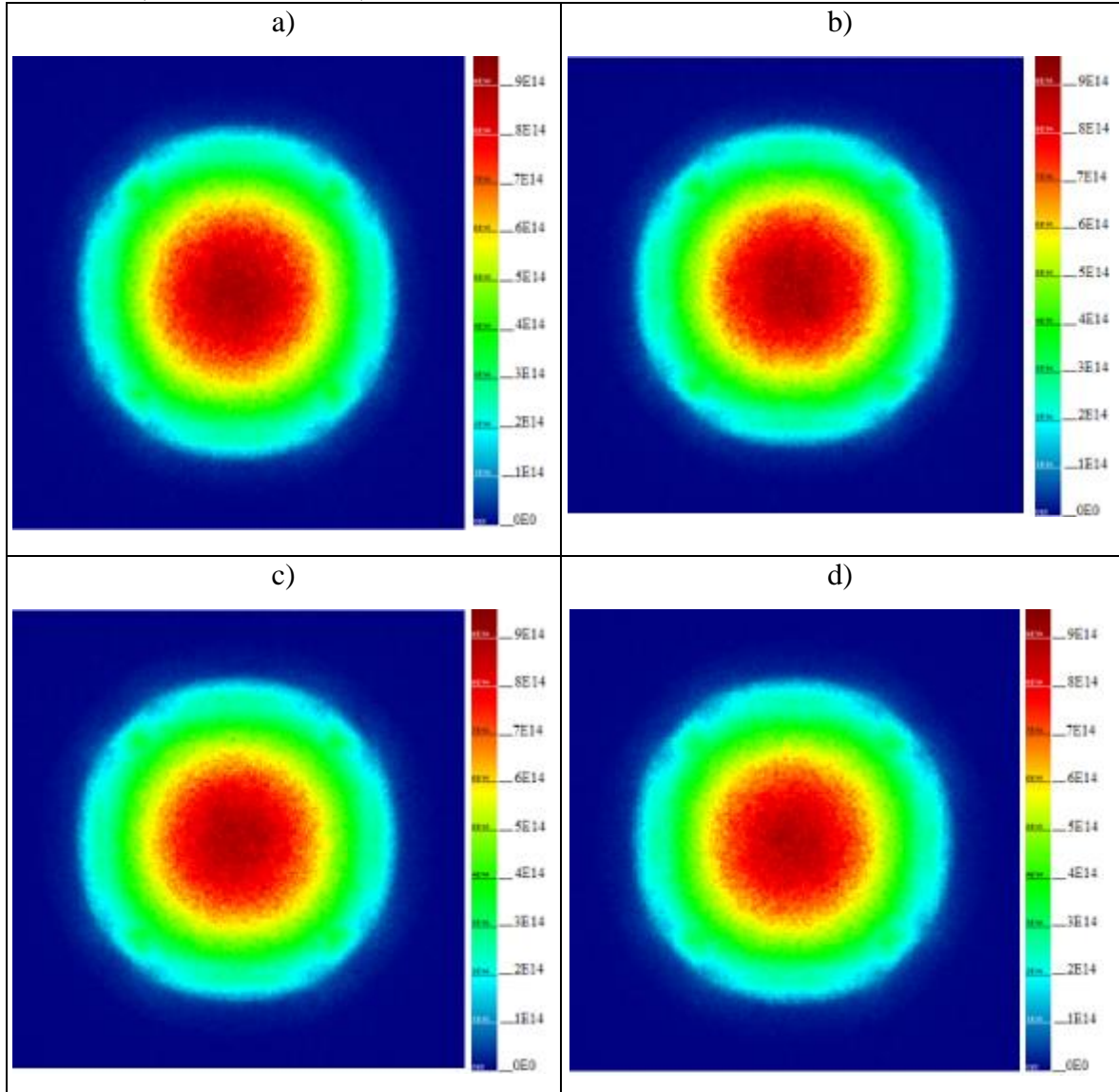
Fonte: autora da dissertação.

Observa-se por meio da Tabela 21 que, apesar de bastante simples a abordagem da interpolação, os resultados obtidos foram muito bons, obtendo-se valores de k_{eff} realmente próximos à unidade.

Nesta condição de criticalidade, também foram obtidos os mapas de distribuição do fluxo de nêutrons para todo o espectro de energia por meio de uma malha de 1 cm x 1 cm x 1 cm, traçada nos eixos x e y entre -100 e 100 cm e no eixo z de -70 cm a 70 cm (altura),

portanto, um pouco maior que o volume ocupado pelo núcleo com o refletor (Figura 38). Esses mapas permitem que seja avaliada a distribuição do fluxo ao longo do núcleo.

Figura 38 – Fluxo de nêutrons nos núcleos com enriquecimento de a) 3,5% em $z=35$ cm, b) 5% em $z=37$ cm, c) 7% em $z=42$ cm e d) 10% em $z=46$ cm



Fonte: autora da dissertação.

Por meio da Figura 38 é possível observar que a distribuição do fluxo em todos os casos é bastante semelhante, sendo bastante elevada no centro do reator e amenizando nas extremidades. Esse efeito é decorrente da concentração do combustível e da ausência de outros mecanismos para achatar mais o fluxo, deixando-o mais uniforme, como, p. ex., a utilização de veneno queimável. Também é possível observar no círculo verde quatro extremidades mais ressaltadas. Isto decorre da proximidade dos elementos combustível com o refletor sem que haja uma camada de água para contribuir com o espalhamento e,

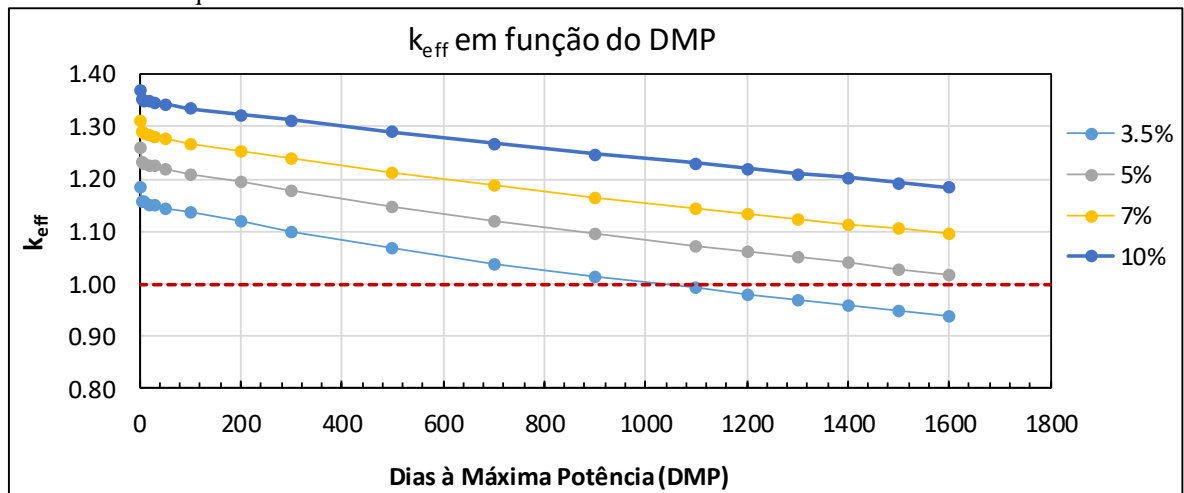
consequentemente, reduzir a fuga de nêutrons nessas regiões. Ainda, o fluxo de nêutrons obtido na ordem de 10^{14} é bastante coerente com o esperado, para potência estimada do reator de $75 \text{ MW}_{(th)}$, tal como visto no reator CAREM, com $100 \text{ MW}_{(th)}$, cujo fluxo neutrônico é da mesma ordem (ERFANINIA et al., 2016).

É importante observar que a grande diferença entre os valores de k_{eff} com todas as barras inseridas entre o reator a frio e a quente, demonstrando o quão forte é o efeito do alargamento Doppler com a temperatura do núcleo e, também, o impacto do aumento da densidade do moderador quando a frio. Por isso, quando do desenvolvimento mais detalhado do reator, é importante fazer uma análise separando as barras de controle entre os bancos de controle da potência e de desligamento do reator. Essa abordagem possibilitará um controle mais fino no ajuste de potência no reator, além de permitir uma queima axial no combustível mais uniforme.

4.5 Resultados da quinta etapa: avaliação da queima do núcleo

Realizados os cálculos de queima dos núcleos, o resultado da evolução do k_{eff} com o tempo são mostrados na Figura 39.

Figura 39 – Comportamento do k_{eff} em função dos dias de operação à máxima potência para diversos enriquecimentos



Fonte: autora da dissertação.

Pode-se observar da Figura 39 que o núcleo de 3,5% de enriquecimento é o único no qual a criticidade cai abaixo de um no período em análise. Isto ocorrerá por volta do dia 1.030 de operação. Os outros núcleos, no entanto, têm potencial de serem utilizados até o fim do período pretendido de operação do submarino, embora o de 5% de enriquecimento já esteja bem próximo de se tornar subcrítico (Tabela 22).

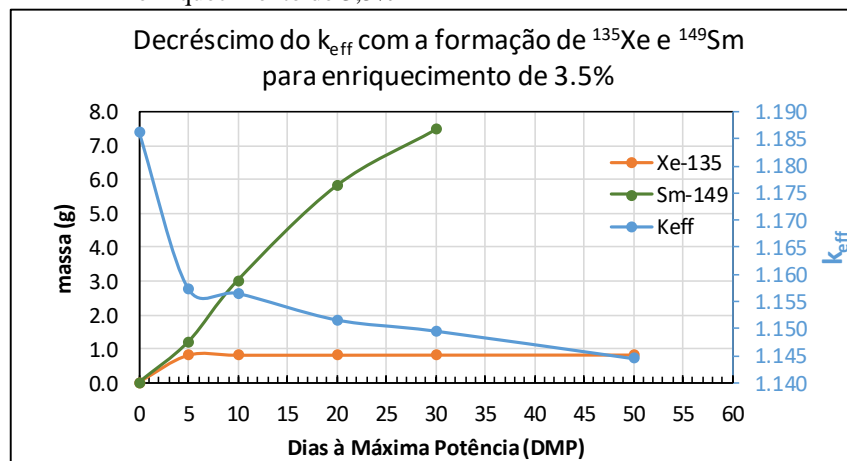
Tabela 22 – Valores de k_{eff} ao longo do período de queima

DMP	k_{eff}			
	Nível de Enriquecimento			
	3,5%	5%	7%	10%
1.200	0,97956	1,06016	1,13286	1,22032
1.300	0,97098	1,05006	1,12400	1,20904
1.400	0,96036	1,03987	1,11364	1,20344
1.600	0,93992	1,01873	1,09497	1,18418

Fonte: autora da dissertação.

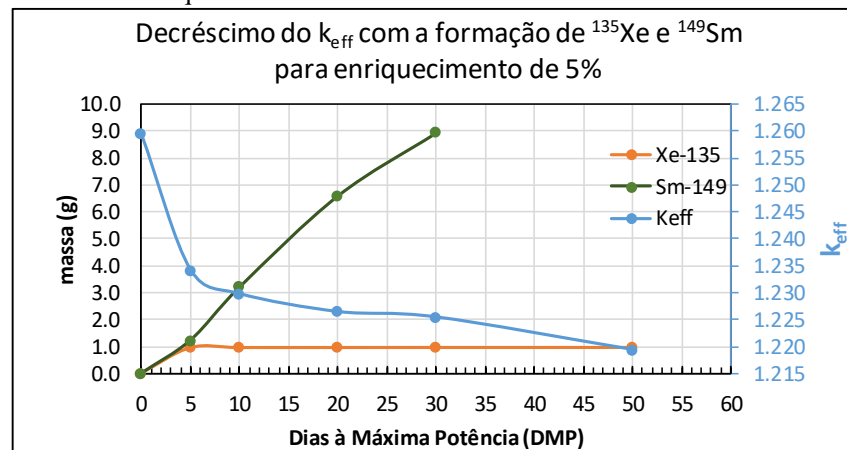
Também é possível observar uma queda mais expressiva no valor do k_{eff} no início da queima. Isso se deve à formação de venenos dentro do núcleo, como o ^{149}Sm e o pico de ^{135}Xe . Essa relação entre a formação dos venenos e a redução do k_{eff} pode ser vista com mais detalhe para cada núcleo com enriquecimento distinto da Figura 40 a Figura 43.

Figura 40 – Comportamento do k_{eff} com a formação de ^{135}Xe e ^{149}Sm para enriquecimento de 3,5%



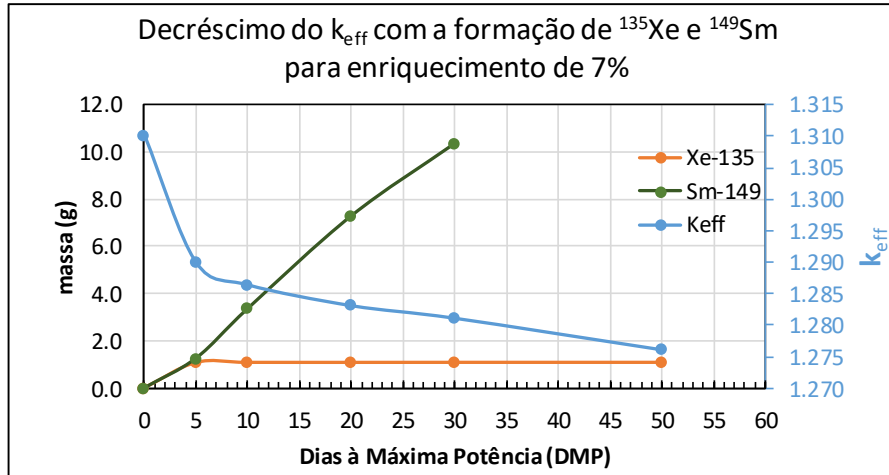
Fonte: autora da dissertação.

Figura 41 – Comportamento do k_{eff} com a formação de ^{135}Xe e ^{149}Sm para enriquecimento de 5%



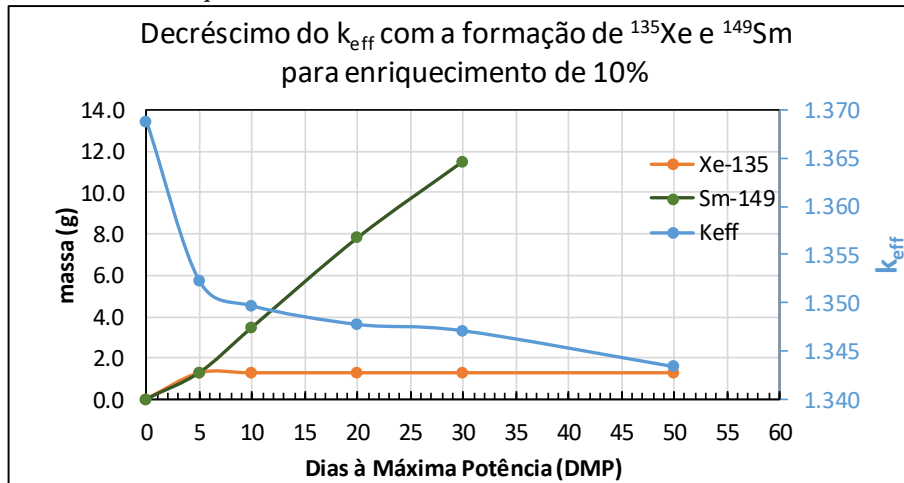
Fonte: autora da dissertação.

Figura 42 – Comportamento do k_{eff} com a formação de ^{135}Xe e ^{149}Sm para enriquecimento de 7%



Fonte: autora da dissertação.

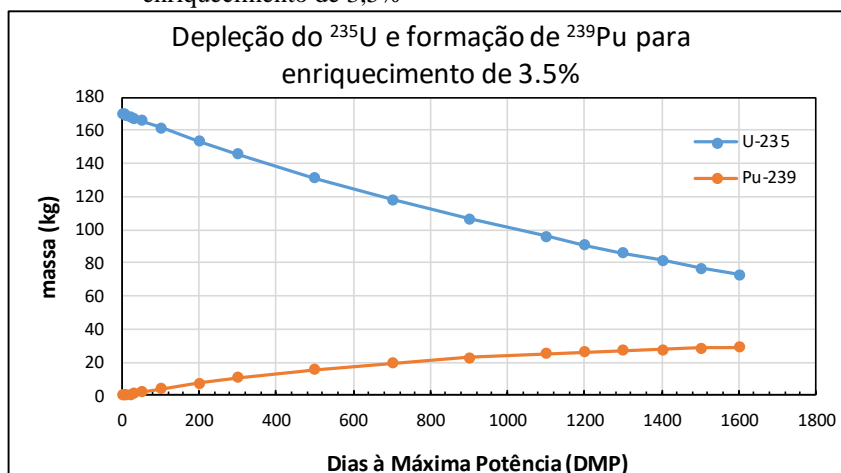
Figura 43 – Comportamento do k_{eff} com a formação de ^{135}Xe e ^{149}Sm para enriquecimento de 10%



Fonte: autora da dissertação.

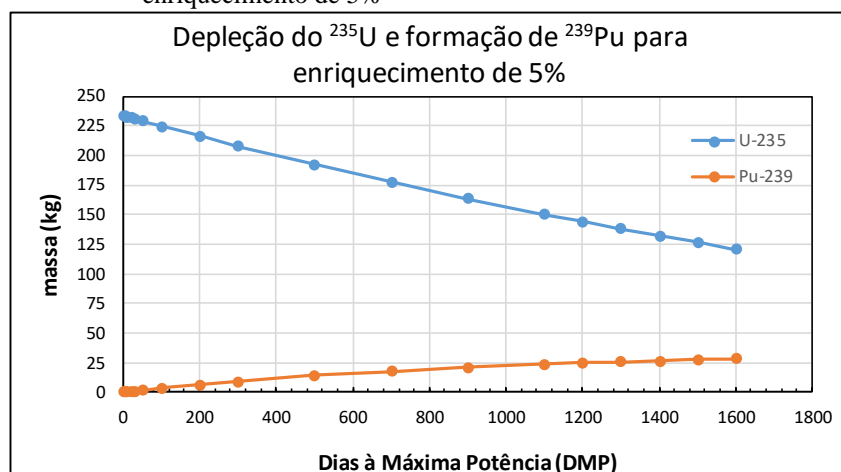
Outro fator interessante de ser analisado é a depleção do ^{235}U e formação de ^{239}Pu no núcleo. Esses resultados podem ser vistos da Figura 44 a Figura 47.

Figura 44 – Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 3,5%



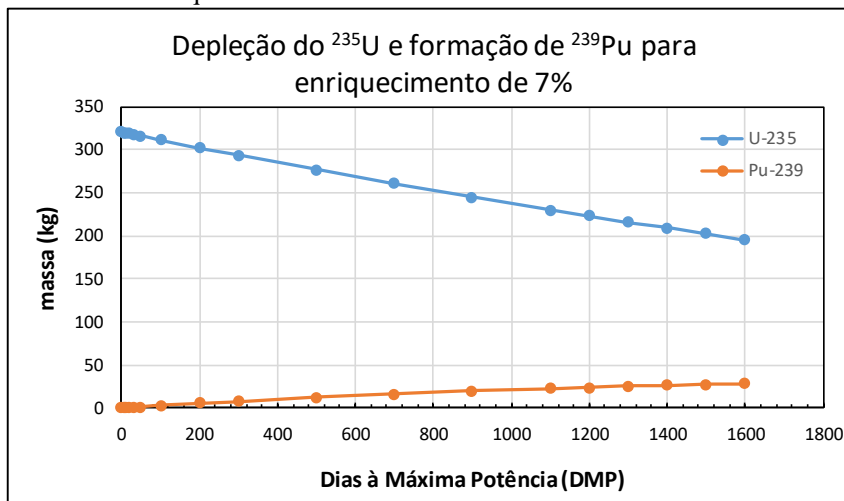
Fonte: autora da dissertação.

Figura 45– Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 5%



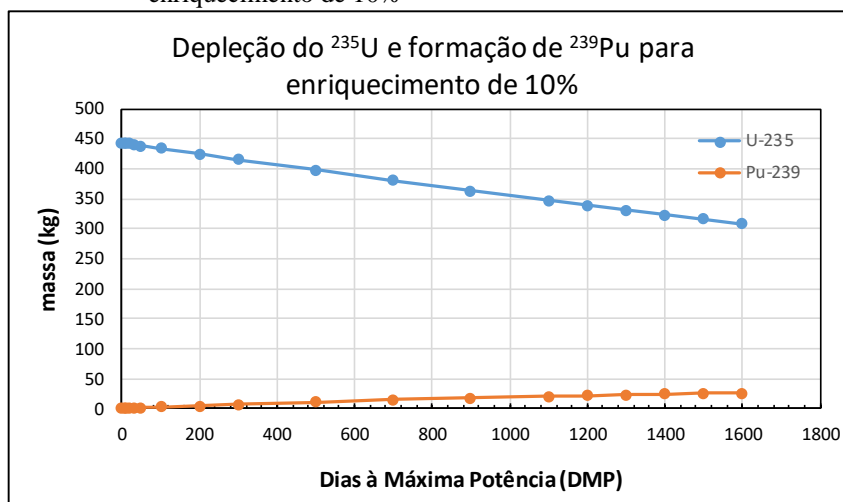
Fonte: autora da dissertação.

Figura 46 – Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 7%



Fonte: autora da dissertação.

Figura 47 – Evolução da massa de ^{235}U e de ^{239}Pu com a queima do núcleo para enriquecimento de 10%

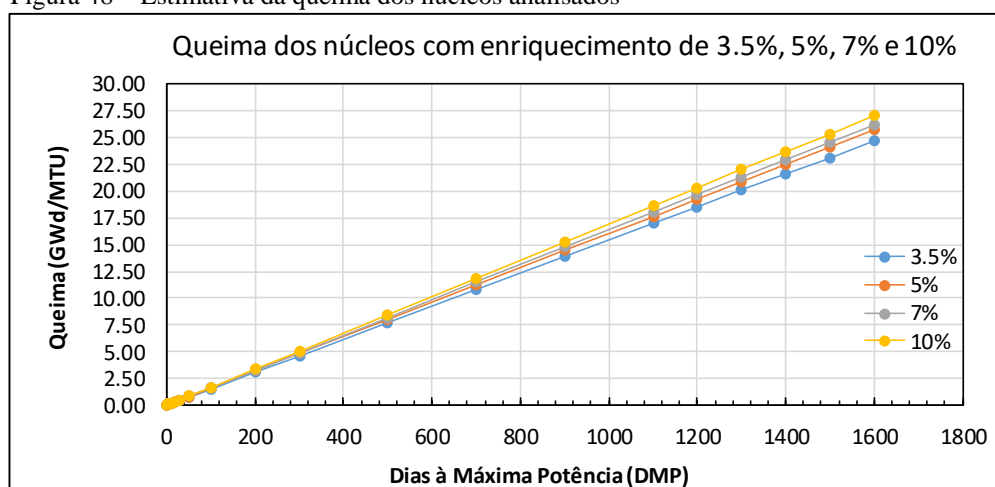


Fonte: autora da dissertação.

Embora com diferentes enriquecimentos, a quantidade de plutônio formada ao final do período de queima nos núcleos é bastante semelhante, como visto da Figura 44 a Figura 47, sendo aproximadamente de 28 kg. Em virtude da natureza físsil do ^{239}Pu , sua formação é benéfica, pois contribui para manter a reatividade do núcleo por mais tempo. Entretanto, ao final da vida do núcleo, medidas condizentes com o exigido pelo Tratado de Não Proliferação de Armas Nucleares, do qual o Brasil é signatário, serão necessárias para garantir tratamento pacífico deste resíduo.

Os valores finais de queima atingidos pelo combustível para os núcleos analisados são mostrados na Figura 48.

Figura 48 – Estimativa da queima dos núcleos analisados



Fonte: autora da dissertação.

Embora os núcleos possuam enriquecimentos diferentes, a massa total de combustível é praticamente a mesma. Dessa forma, os valores finais de queima do combustível são bastante semelhantes em todos os núcleos, sendo da ordem de 26 GWd/MTU (Figura 48). Esse valor de queima é muito próximo ao do projeto do protótipo do reator CAREM da Argentina, que é de 24 GWd/MTU (INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2020).

Entretanto, essa queima ainda é inferior ao observado em reatores de potência em operação, nos quais se pode atingir valores médios de até 60 GWd/MTU sem que haja a falha do combustível. Desse modo, os resultados obtidos sugerem que possa haver um excesso de combustível nos núcleos analisados, sendo, portanto, passível de otimização. Para tanto, é preciso considerar um balanço entre a quantidade e o desempenho do combustível e a taxa linear de geração de calor.

4.6 Conformidade entre os resultados obtidos aos requisitos do submarino

O projeto em estudo foi desenvolvido para atender a um submarino conforme descrito no item 3.1. Portanto, é preciso verificar a adequação dos núcleos estudados com os requisitos de operação do submarino. Idealmente, quanto menos reabastecimentos forem realizados ao longo da vida operativa do submarino, melhor para o navio. Portanto, comparando os resultados da queima com os perfis de duração de missão, pode-se analisar qual núcleo é o mais adequado para o submarino e qual perfil operativo será possível de adotar para operação do submarino. Também, para essa verificação, é preciso levar em consideração que um reator para um submarino precisa ter uma disponibilidade de reatividade durante todo período de sua vida. Isso garantirá que o reator será capaz de atender às demandas operacionais do navio mesmo próximo ao fim da vida do submarino, especialmente de um rápido aumento de velocidade durante alguma missão.

Como explicado no item 3.5.5, a queima do núcleo foi realizada de forma simplificada e sem as barras de controle, portanto, espera-se que os resultados apresentados na Figura 39 estejam superestimados.

Então, um cálculo de criticalidade foi realizado para averiguar se os núcleos continuariam críticos mesmo com as barras de controle inseridas 20% no núcleo. Utilizou-se a composição isotópica do combustível derivada dos dados de saída do OpenMC do cálculo de queima. Assim, foi considerada a composição isotópica de 1.200, 1.300, 1.400 e 1.600 dias de queima para representar o DMP total de 1.200, 1.320, 1.440 e 1.560 dias respectivamente. Os resultados obtidos estão apresentados na Tabela 23.

Tabela 23 – Novos valores de k_{eff} com 20% de inserção das barras de controle

DMP total	k_{eff}			
	Nível de Enriquecimento			
	3,5%	5%	7%	10%
1.200	0,97210 \pm 0,00038	1,05067 \pm 0,00041	1,12254 \pm 0,00042	1,20760 \pm 0,00042
1.320	0,96142 \pm 0,00043	1,03998 \pm 0,00036	1,11249 \pm 0,00039	1,19847 \pm 0,00041
1.440	0,95078 \pm 0,00039	1,02948 \pm 0,00041	1,10227 \pm 0,00041	1,19021 \pm 0,00041
1.560	0,93307 \pm 0,00039	1,00960 \pm 0,00039	1,08389 \pm 0,00038	1,17307 \pm 0,00041

Fonte: autora da dissertação.

Dessa forma, baseado nos resultados mostrados na Tabela 23, pode-se notar que os valores de k_{eff} são um pouco inferiores aos apresentados na Tabela 22, mas que, ainda assim, os núcleos com enriquecimento acima de 5% atendem à demanda do submarino, considerando a operação normal com as barras de controle inseridas no núcleo. Por conseguinte, dentre os núcleos analisados, o de 7% de enriquecimento é o melhor, pois possui boa ponderação entre os parâmetros de projeto analisados como durabilidade, taxa de geração de calor linear considerada e carga de combustível. Na Tabela 24, é mostrado um resumo da análise de conformidade entre os requisitos de operação para o submarino, mostrados no item 3.1, e os núcleos obtidos ao final deste estudo.

Tabela 24 – Resumo da conformidade entre os núcleos estudados com os requisitos do submarino

Enriquecimento de:	Perfil de operação do submarino			
	I	II	III	IV
	Duração: 45+30 DMP por ano: 50 DMP total: 1.200	Duração: 60+30 DMP por ano: 55 DMP total: 1.320	Duração: 75+30 DMP por ano: 60 DMP total: 1.440	Duração: 95+30 DMP por ano: 65 DMP total: 1.560
3,5%	Não atende. Antes de 1.030 DMP, o núcleo precisará ser reabastecido. Logo, ao menos um reabastecimento durante a vida do submarino			
5%	Atende			Atende. Mas o reator chega ao limite da reatividade ($k_{eff} \approx 1$) em 1.600 DMP. Requer avaliação mais detalhada da queima para garantir o atendimento.
7%	Atende			
10%	Atende No entanto, o núcleo aparenta possuir uma carga maior de combustível que o necessário para operação submarino.			

Fonte: autora da dissertação.

5 CONCLUSÕES

O emprego de meios navais movidos à propulsão nuclear, especialmente, um submarino de ataque, foi o principal motivador para a elaboração deste trabalho. Entretanto, as conclusões alcançadas no estudo poderão ser aplicadas também a outros projetos de reatores SMRs pensados para servir à indústria nuclear não militar.

Embora notadamente mais simples, o modelo homogêneo adotado nas primeiras etapas do estudo se mostrou bastante eficiente na análise comparativa dos diversos núcleos. Por meio dessa abordagem, foi possível varrer uma ampla gama de possibilidades e analisar os impactos de cada parâmetro no k_{eff} , podendo fazer uma seleção das melhores configurações para continuar as análises.

O modelo homogêneo, no entanto, já traz erros consideráveis quando há a inclusão de material absorvedor no núcleo. Todavia, pôde-se notar que a abordagem intermediária de inclusão de anéis concêntricos de material absorvedor dentro de um núcleo homogêneo foi capaz de fornecer bons resultados, mais próximos ao real esperado.

A evolução do modelo para uma abordagem heterogênea é um processo natural no desenvolvimento do projeto do núcleo de um reator. Este trabalho focou em conseguir uma primeira configuração heterogênea viável de ser implementada baseada em projetos de outros reatores. Assim, foram obtidas quatro configurações heterogêneas com 32 elementos combustíveis, arranjo 15x15 e enriquecimento de 3,5%, 5%, 7% e 10% possíveis de serem implementadas. Após realizar um estudo inicial de queima dos núcleos, observou-se que a configuração com 7% de enriquecimento já atenderia aos requisitos de operação do submarino e que a 10% de enriquecimento seria um pouco excedente. No entanto, como é necessário que o reator realmente apresente um excesso de reatividade durante todo o período de vida do submarino para permitir rápidas acelerações, é provável que o enriquecimento ideal para o núcleo do reator para este submarino seja algum valor compreendido entre o 7% e 10% de enriquecimento.

É importante ressaltar que várias verificações, no entanto, ainda carecem de serem realizadas para garantir a viabilidade completa da proposta. Ou seja, este trabalho teve foco na física de reatores e, ainda assim, simplificada, fazendo-se, portanto, necessário verificar a termohidráulica, a tecnologia do combustível, a resistência estrutural, para que,

de fato, se possa avançar no projeto conceitual dessa planta nuclear fazendo-se as alterações e otimizações pertinentes.

O emprego do OpenMC se mostrou uma ferramenta valiosa no desenvolvimento do estudo. O código é bastante versátil e consegue trazer bons resultados com bastante agilidade, considerando que possui algumas facilidades, tais como as próprias bibliotecas de seção de choque já pré-geradas, o que agiliza bastante a realização do cálculo do núcleo. Entretanto, o código não possui uma interface muito amigável (“*user friendly*”) e carece de uma boa imersão para compreensão de suas potencialidades, noções de trabalho com linha de comando e da linguagem Python para uma abordagem correta do problema a ser analisado.

Considerando as análises desenvolvidas, este trabalho fornece uma boa base para a continuação do projeto conceitual de um reator SMR do tipo PWR, tendo em vista que, dentre as diversas configurações iniciais analisadas, as mais promissoras foram selecionadas e estudadas um pouco mais a fundo.

5.1 Sugestões para trabalhos futuros

O presente estudo teve foco no desenvolvimento de um projeto conceitual, portanto, foram utilizados modelos mais simples, realizando análises dos parâmetros calculados na média do núcleo. Logo, alguns pontos de melhoria em trabalhos futuros são:

- aprofundamento do projeto neutrônico do núcleo com a inclusão de veneno queimável, elementos combustíveis com diferentes níveis de enriquecimento e separação de algumas barras de controle apenas para desligamento do reator a fim de uniformizar o fluxo de nêutrons (“achatar” o fluxo), melhorando o desempenho do combustível;
- modelagem detalhada do núcleo incluindo as diversas estruturas que não foram até então consideradas;
- realizar a verificação termohidráulica do projeto, garantindo que o resfriamento adequado do núcleo seja viável, avaliando o fluxo de calor crítico, o desvio da ebulição nucleada (DNB, do inglês *Departure from Nucleate Boiling*), fator de canal quente, entre outros relevantes para o projeto térmico;
- análise de desempenho do combustível para verificar se as condições de operação que estão sendo impostas serão suportadas pelo combustível proposto, evitando a falha;

- aprimoramento do cálculo de queima do núcleo, avaliando nos diferentes elementos combustível, bem como em alturas diferentes no mesmo elemento combustível, considerar os períodos longos de parada do submarino para manutenção de modo a aumentar a acurácia na previsão da queima e, conseqüentemente, na durabilidade do núcleo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BRASIL. *Política Nacional de Defesa Estratégia Nacional de Defesa*. Brasília: Ministério da Defesa, 2016. Disponível em: <https://www.gov.br/defesa/pt-br/arquivos/estado_e_defesa/copy_of_pnd_e_end_2016.pdf>. Acesso em: 28 jun. 2023.

BRENNEN, C. E. *Thermo-Hydraulics of Nuclear Reactors*. 1. ed., Califórnia: Dankat Publishing Company, 2014.

BROWN, F. *A Review of Best Practices for Monte Carlo Criticality Calculations*. Technical Report Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, set. 2009. LA-UR-09-03136. Disponível em: <https://mcnp.lanl.gov/pdf_files/TechReport_2009_LANL_LA-UR-09-03136_Brown.pdf>. Acesso em: 07 jun. 2023.

CENTRAL INTELLIGENCE AGENCY. *The World Factbook Archives - The World Factbook*. Government Publishing Office, 2018. Disponível em: <<https://www.cia.gov/the-world-factbook/about/archives/>>. Acesso em: 28 jun. 2023.

COOK, H.; ESPEL, F. , 2019. .Global Nuclear Energy Advisory. Disponível em: <https://uploads-ssl.webflow.com/5c199ba9f264d6fa684a9288/5d92e9c6e2a4d9bb1dac576b_Article%20-%20SMRs%20-%2030%20Sept%202019.pdf>. Acesso em: 04 jul. 2023.

DARÓZ, C. R. C. “A voz das Profundezas” - Guerra submarina no Pacífico durante a Segunda Guerra Mundial. *Revista Marítima Brasileira*, v. 141 n. 01/03, p. 144–156, mar. 2021.

ELETROBRÁS TERMONUCLEAR. *FINAL SAFETY ANALYSIS REPORT*. Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto UNIT 2. Itaorna: Eletrobrás, maio 2007. Rev. 10. . Acesso em: 10 set. 2023.

ERFANINIA, A.; HEDAYAT, A.; MIRVAKILI, S. M. Neutronic study of a new generation of the small modular pressurized water reactor using Monte-Carlo simulation. *Progress in Nuclear Energy*, v. 93, p. 218–230, nov. 2016.

FAROUKI, I. F. FULL-CORE BURN-UP CALCULATIONS USING MCNP6 CODE FOR THE JORDAN RESEARCH AND TRAINING REACTOR. In: RRFM 2019 PART 1, 2019, Jordânia. Disponível em: <<https://www.euronuclear.org/scientific-resources/conference-proceedings/>>. Acesso em: 10 abr. 2024.

IGAMI, M. P. Z. (Org.); VIEIRA, M. M. F. (Org.). Guia para a elaboração de dissertações e teses apresentadas no Programa de Pós-graduação do IPEN/USP. Coordenação de Mery P. Zamudio Igami e Martha Marques F. Vieira.- 3. Ed. rev. ampl. Versão on-line – São Paulo, 2017. Disponível em:

<https://www.ipen.br/portal_por/conteudo/biblioteca/arquivos/GuiaIPEN_2017-10-24_versao_4.pdf>. Acesso em: 10 mar. 2024.

INGERSOLL, D. T; CARELLI, M. D. *Handbook of Small Modular Nuclear Reactors*. 2. ed., Reino Unido: Woodhead, 2021. 612 p. Disponível em:

<<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128239162099914>>. Acesso em: 20 out. 2022.

INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Advances in Small Modular Reactor Technology Developments*. 2020 edition, Viena: IAEA, 2020. 354 p. Disponível em:

<https://aris.iaea.org/Publications/SMR_Book_2020.pdf>. Acesso em: 20 out. 2022.

INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Advances in Small Modular Reactor Technology Developments*. 2018 edition, Viena: IAEA, 2018. 258 p. Disponível em:

<https://aris.iaea.org/Publications/SMR-Book_2018.pdf>. Acesso em: 04 jul. 2023.

IPPOLITO, T. D. *Effects of Variation of Uranium Enrichment on Nuclear Submarine Reactor Design*. 1990. 257 p. Massachusetts Institute of Technology, 1990. Disponível em:

<<https://fissilematerials.org/library/ipp90.pdf>>. Acesso em: 28 jun. 2023.

KALOS, M. H.; WHITLOCK, P. A. *Monte Carlo Methods*. 2. ed., Weinheim: Wiley-VCH, 2008. 217 p.

KANG, J. K.; HAH, C. J.; CHO, S. J.; SEONG, K. B. The effects of stainless steel radial reflector on core reactivity for small modular reactor. 2016, Negeri Sembilan, Malaysia. p. 020009. Disponível em: <<https://pubs.aip.org/aip/acp/article/589939>>. Acesso em: 28 ago. 2023.

KOŠT'ÁL, M.; LOSA, E.; CZAKOJ, T.; SCHULC, M.; ŠIMON, J.; JUŘÍČEK, V.; RYPAR, V.; ULMANOVÁ, J.; TRKOV, A.; CAPOTE, R. The effect of heavy reflector on neutronic parameters of core. *Annals of Nuclear Energy*, v. 168, p. 108898, abr. 2022.

LEPPÄNEN, J. The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013. *Annals of Nuclear Energy*, v. 82, p. 142–150, 2015.

LEWIS, E. E. *Fundamentals of Nuclear Reactor Physics*. 1. ed., Burlington: Academic Press, 2008. 293 p. . Acesso em: 01 mar. 2022.

LIEBEROTH, J. A Monte Carlo Technique to Solve the Static Eigenvalue Problem of the Boltzmann Transport Equation. p. 213–219, 1968. 11. ed.,

MARINHA DO BRASIL. *Amazônia Azul*. Disponível em: <https://www.mar.mil.br/hotsites/amazonia_azul/sobre.html>. Acesso em: 28 jun. 2023.

MARINHA DO BRASIL. *PROSUB*. Disponível em: <<https://www.marinha.mil.br/programas-estrategicos/prosub>>. Acesso em: 28 jun. 2023.

Nautilus (SSN-571). Disponível em: <<http://public2.nhhcaws.local/browse-by-topic/ships/submarines/uss-nautilus.html>>. Acesso em: 11 jan. 2024.

NRC. *Design Certification Applications for New Reactors*. Disponível em: <<https://www.nrc.gov/reactors/new-reactors/large-lwr/design-cert.html>>. Acesso em: 24 set. 2023.

NUCLEAR ENERGY AGENCY. Small Modular Reactors: Challenges and Opportunities. 2021, Paris. Disponível em: <https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_57979/small-modular-reactors-challenges-andopportunities?details=true>. Acesso em: 26 maio 2022.

OLANDER, D. R. *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*. 2. ed., Springfield: Technical Information Center, 1985. 628 p.

ROMANO, P. K.; HORELIK, N. E.; HERMAN, B. R.; NELSON, A. G.; FORGET, B.; SMITH, K. OpenMC: A State-of-the-Art Monte Carlo Code for Research and Development. *Annals of Nuclear Energy*, v. 82, p. 90–97, ago. 2015.

ROMANO, Paul K.; JOSEY, C. J.; JOHNSON, A. E.; LIANG, J. Depletion capabilities in the OpenMC Monte Carlo particle transport code. *Annals of Nuclear Energy*, v. 152, p. 107989, mar. 2021.

STACEY, W. M. *Nuclear Reactor Physics*. 2. ed., Weinheim: Wiley-VCH, 2007.

TAHERANPOUR, N.; TALAEI, A. Development of practical method using a Monte Carlo code for evaluation of optimum fuel pitch in a typical VVER-1000 core. *Annals of Nuclear Energy*, v. 54, p. 129–133, abr. 2013.

“Turtle” Submarine. Disponível em: <<https://ctrivermuseum.org/turtle-submarine/>>. Acesso em: 11 jan. 2024.

WERNER, C. J.; ARMSTRONG, J. C.; BROWN, F. B.; BULL, J. S.; CASSWELL, L.; COX, L. J.; DIXON, D. A.; FORSTER III, R. A.; GOORLEY, J. T.; HUGHES III, H. G.; FAVORITE, J. A.; MARTZ, R. L.; MASHNIK, S. G.; RISING, M. E.; SOLOMON JR., C. J.; SOOD, A.; SWEEZY, J. E.; ZUKAITIS, A. J.; ANDERSON, C. A.; ELSON, J. S.; DURKEE JR., J. W.; JOHNS, R. C.; MCKINNEY, G. W.; MCMATH, G. E.; HENDRICKS, J. S.; PELOWITZ, D. B.; PRAEL, R. E.; BOOTH, T. E.; JAMES; FENSIN, M. L.; WILCOX, T. A.; KIEDROWSKI, B. C. *MCNP User's Manual Code Version 6.2*. Estados Unidos: Los Alamos National Laboratory, out. 2017. LA-UR-17-29981. Disponível em: <<http://permalink.lanl.gov/object/tr?what=info:lanl-repo/lareport/LA-UR-17-29981>>. Acesso em: 18 set. 2023.

WORLD NUCLEAR ASSOCIATION. *Nuclear-Powered Ships*. Disponível em: <<https://www.world-nuclear.org/information-library/non-power-nuclear-applications/transport/nuclear-powered-ships.aspx>>. Acesso em: 15 set. 2023.

APÊNDICE A – Determinação do material para os dados de entrada do OpenMC

O código OpenMC possui um padrão para inserção do material a ser utilizado nos cálculos. A identificação do material é realizada pela atribuição de um número de identificação (ID) e pode-se progressivamente incluir núclídeos a esse material juntamente com a fração atômica ou mássica, especificadas pela entrada “ao” ou “wo” respectivamente, na descrição do material. Outra informação importante sobre o material a ser fornecida no código é sua densidade. Esta deve ser fornecida para cada célula descrita na geometria do problema.

Como nas primeiras etapas do estudo foi empregado o modelo homogêneo, o material precisava contemplar todos os componentes de interesse, isto é, a água, o combustível (dióxido de urânio), o revestimento (Zircaloy-4) e, posteriormente, o material absorvedor (liga de Ag-In-Cd), de acordo com as frações volumétricas e níveis de enriquecimento que estavam sendo considerados. Assim, para cada combinação de fração volumétrica dos componentes e enriquecimento do combustível, novas frações mássicas dos núclídeos eram necessárias.

Para tanto, foi desenvolvida uma planilha em *Excel* que facilitasse o cálculo das frações mássicas de todos os isótopos considerados no cálculo com base na modelagem relatada abaixo.

Fração mássica dos núclídeos na célula

A fração mássica de um núclídeo em uma célula é o resultado da multiplicação de três outras frações, Equação (6):

$$F_{mnc} = F_{mnc} * F_{mem} * F_{mne} \quad (6)$$

Onde:

F_{mnc} : fração mássica do núclídeo na célula

F_{mnc} : fração mássica de cada material na célula

F_{mem} : fração mássica de cada elemento em amostra de cada material

F_{mne} : fração mássica de cada núclídeo(isótopo) em amostra de cada elemento

A F_{mnc} é determinada pela razão entre a massa do material (M_m) de interesse e a massa total da célula, Equação (7).

$$F_m^i mc = \frac{M_m^i}{M_{total}} \quad (7)$$

Mas a massa do material é determinada pela fração volumétrica de cada material presente na composição do núcleo vezes a densidade do material. Logo, a fração mássica é dada pela Equação (8):

$$F_m^i mc = \frac{F_{vol}^i * V_{total} * \rho^i}{\sum_{j=1}^l F_{vol}^j * V_{total} * \rho^j} \quad (8)$$

Onde:

V_{total} : volume total da célula

F_{vol}^i : fração volumétrica do i – ésimo material da célula

F_{vol}^j : fração volumétrica do j – ésimo material da célula

ρ^i : densidade do i – ésimo material da célula

ρ^j : densidade do j – ésimo material da célula

l : número total de materiais presentes na composição da célula

Desse modo, por exemplo, as $F_m^i mc$ para a Configuração 1 de frações volumétricas utilizada na primeira etapa de cálculo, Equação (9) a Equação (11), são:

Configuração I: 60% H₂O - 28,57% UO₂ - 11,43% Zr-4

$$F_m^{H_2O} mc = \frac{0,6 * 1 * 0,703}{0,6 * 1 * 0,703 + 0,2857 * 1 * 10,96 + 0,1143 * 1 * 6,56} = 0,098028 \quad (9)$$

$$F_m^{UO_2} mc = \frac{0,2857 * 1 * 10,96}{0,6 * 1 * 0,703 + 0,2857 * 1 * 10,96 + 0,1143 * 1 * 6,56} = 0,727715 \quad (10)$$

$$F_m^{Zr^4} mc = \frac{0,1143 * 1 * 6,56}{0,6 * 1 * 0,703 + 0,2857 * 1 * 10,96 + 0,1143 * 1 * 6,56} = 0,174257 \quad (11)$$

A fração mássica de cada elemento em amostra de cada material ($F_m em$) é consequência da composição química do material. Por exemplo, a água é constituída de dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio. Logo, a fração mássica de cada elemento, Equações (12) e (13), é:

$$F_m^H em = \frac{2 * ma_H}{ma_{\acute{a}gua}} \quad (12)$$

$$F_m^O em = \frac{ma_O}{ma_{\acute{a}gua}} \quad (13)$$

A $F_m ne$ é encontrada utilizando-se a fração atômica de cada nuclídeo em amostra de cada elemento ($F_a ne$), conforme Equação (14):

$$F_m^i ne = \frac{m_a^i * F_a^i ne}{\sum_{k=1}^e m_a^k * F_a^k ne} \quad (14)$$

Onde:

m_a^i : massa atômica do i – ésimo nuclídeo

$F_a^i ne$: fração atômica do i – ésimo nuclídeo

m_a^k : massa atômica do k – ésimo nuclídeo

$F_a^k ne$: fração atômica do k – ésimo nuclídeo

e : total de nuclídeos presentes na composição do elemento

A $F_a^i ne$ é determinada pela abundância isotópica do elemento encontrada na natureza. Assim, na Tabela 25, são apresentadas algumas frações e como calculá-las para cada nuclídeo existente na composição do material do núcleo na mistura homogênea.

Tabela 25 – Frações necessárias para cálculo da fração mássica do nuclídeo na célula

Material	Elemento	$F_m em$	Nuclídeos	$F_a ne$	$F_m ne$
Água (H ₂ O)	Hidrogênio	$\frac{2 * ma_H}{ma_{\acute{a}gua}} = 0,111$	¹ H (2x)	1	1
	Oxigênio	$\frac{ma_O}{ma_{\acute{a}gua}} = 0,889$	¹⁶ O	1	1
Dióxido de Urânio (UO ₂)	Urânio	Depende do enriquecimento	²³⁵ U	Depende do enriquecimento	
			²³⁸ U	Depende do enriquecimento	
	Oxigênio	Depende do enriquecimento	¹⁶ O	1	1
Zircaloy-4 (Zr-4)	Zircônio	$\frac{m_{Zr}}{m_{Zr-4}} = 0,982$	⁹⁰ Zr	0.5145	$\frac{m_{Zr90} * F_a^{Zr90} ne}{\sum_1^5 m_a^{Zr} * F_a^{Zr} ne}$
			⁹¹ Zr	0.1122	$\frac{m_{Zr91} * F_a^{Zr91} ne}{\sum_1^5 m_a^{Zr} * F_a^{Zr} ne}$
			⁹² Zr	0.1715	$\frac{m_{Zr92} * F_a^{Zr92} ne}{\sum_1^5 m_a^{Zr} * F_a^{Zr} ne}$

Tabela 25 – Frações necessárias para cálculo da fração mássica do núclídeo na célula (continuação)

Material	Elemento	F_{mem}	Nuclídeos	F_{ane}	F_{mne}
Zircaloy-4 (Zr-4)	Zircônio	$\frac{m_{Zr}}{m_{Zr-4}} = 0,982$	^{94}Zr	0.1738	$\frac{m_{Zr94} * F_a^{Zr94} ne}{\sum_1^5 m_a^{Zr} * F_a^{Zr} ne}$
			^{96}Zr	0.028	$\frac{m_{Zr96} * F_a^{Zr96} ne}{\sum_1^5 m_a^{Zr} * F_a^{Zr} ne}$
	Estanho	$\frac{m_{Sn}}{m_{Zr-4}} = 0,015$	^{112}Sn	0.0097	$\frac{m_{Sn112} * F_a^{Sn112} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{114}Sn	0.0066	$\frac{m_{Sn114} * F_a^{Sn114} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{115}Sn	0.0034	$\frac{m_{Sn115} * F_a^{Sn115} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{116}Sn	0.1454	$\frac{m_{Sn116} * F_a^{Sn116} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{117}Sn	0.0768	$\frac{m_{Sn117} * F_a^{Sn117} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{118}Sn	0.2422	$\frac{m_{Sn118} * F_a^{Sn118} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{119}Sn	0.0859	$\frac{m_{Sn119} * F_a^{Sn119} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{120}Sn	0.3258	$\frac{m_{Sn120} * F_a^{Sn120} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{122}Sn	0.0463	$\frac{m_{Sn122} * F_a^{Sn122} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
			^{124}Sn	0.0579	$\frac{m_{Sn124} * F_a^{Sn124} ne}{\sum_1^{10} m_a^{Sn} * F_a^{Sn} ne}$
	Cromo	$\frac{m_{Cr}}{m_{Zr-4}} = 0,001$	^{50}Cr	0.04345	$\frac{m_{Cr50} * F_a^{Cr50} ne}{\sum_1^4 m_a^{Cr} * F_a^{Cr} ne}$
			^{52}Cr	0.83789	$\frac{m_{Cr52} * F_a^{Cr52} ne}{\sum_1^4 m_a^{Cr} * F_a^{Cr} ne}$
			^{53}Cr	0.09501	$\frac{m_{Cr53} * F_a^{Cr53} ne}{\sum_1^4 m_a^{Cr} * F_a^{Cr} ne}$
			^{54}Cr	0.02365	$\frac{m_{Cr54} * F_a^{Cr54} ne}{\sum_1^4 m_a^{Cr} * F_a^{Cr} ne}$
	Ferro	$\frac{m_{Fe}}{m_{Zr-4}} = 0,002$	^{54}Fe	0.05845	$\frac{m_{Fe54} * F_a^{Fe54} ne}{\sum_1^4 m_a^{Fe} * F_a^{Fe} ne}$
			^{56}Fe	0.91754	$\frac{m_{Fe56} * F_a^{Fe56} ne}{\sum_1^4 m_a^{Fe} * F_a^{Fe} ne}$
			^{57}Fe	0.02119	$\frac{m_{Fe57} * F_a^{Fe57} ne}{\sum_1^4 m_a^{Fe} * F_a^{Fe} ne}$
^{58}Fe			0.00282	$\frac{m_{Fe58} * F_a^{Fe58} ne}{\sum_1^4 m_a^{Fe} * F_a^{Fe} ne}$	

Tabela 25 – Frações necessárias para cálculo da fração mássica do núclídeo na célula (continuação)

Material	Elemento	F_{mem}	Nuclídeos	F_{ane}	F_{mne}
Absorvedor (Ag-In-Cd)	Prata	$\frac{m_{Ag}}{m_{abs}} = 0,8$	^{107}Ag	0.51839	$\frac{m_{Ag107} * F_a^{Ag107} ne}{\sum_1^2 m_a^{Ag} * F_a^{Ag} ne}$
			^{109}Ag	0.48161	$\frac{m_{Ag109} * F_a^{Ag109} ne}{\sum_1^2 m_a^{Ag} * F_a^{Ag} ne}$
	Índio	$\frac{m_{In}}{m_{abs}} = 0,15$	^{113}In	0.04281	$\frac{m_{In113} * F_a^{In113} ne}{\sum_1^2 m_a^{In} * F_a^{In} ne}$
			^{115}In	0.95719	$\frac{m_{In115} * F_a^{In115} ne}{\sum_1^2 m_a^{In} * F_a^{In} ne}$
	Cádmio	$\frac{m_{Cd}}{m_{abs}} = 0,05$	^{106}Cd	0.01245	$\frac{m_{Cd106} * F_a^{Cd106} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
			^{108}Cd	0.00888	$\frac{m_{Cd108} * F_a^{Cd108} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
			^{110}Cd	0.1247	$\frac{m_{Cd110} * F_a^{Cd110} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
			^{111}Cd	0.12795	$\frac{m_{Cd111} * F_a^{Cd111} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
			^{112}Cd	0.24109	$\frac{m_{Cd112} * F_a^{Cd112} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
			^{113}Cd	0.12227	$\frac{m_{Cd113} * F_a^{Cd113} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
			^{114}Cd	0.28754	$\frac{m_{Cd114} * F_a^{Cd114} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$
^{116}Cd	0.07512	$\frac{m_{Cd116} * F_a^{Cd116} ne}{\sum_1^8 m_a^{Cd} * F_a^{Cd} ne}$			

Fonte: autora da dissertação.

Então, utilizando a Equação (8) e a Tabela 25, a fração mássica de cada núclídeo presente na mistura homogênea do núcleo pode ser determinada.

Outro parâmetro importante para a especificação do material no código é a densidade do material na célula. Quando o material é único, isto é, ou só água ou só combustível, a densidade será a própria do material. No entanto, por se tratar de uma mistura homogênea, é necessário ponderar as densidades dos materiais constituintes para se obter a densidade equivalente da célula, de acordo com a Equação (15).

$$\rho_{célula} = \frac{\sum_{i=1}^l F_{vol}^i * V_{total} * \rho^i}{V_{total}} \quad (15)$$

Onde:

ρ : densidade da célula

ρ^i : densidade do i – ésimo material da célula

Frações relevantes de ^{235}U , ^{238}U e ^{16}O no combustível

Conforme mostrado na Tabela 25, as frações mássica do elemento no material ($F_m em$), atômica e mássica do nuclídeo no elemento ($F_a ne$ e $F_m ne$) são variáveis de acordo com o enriquecimento do combustível. Então, para possibilitar o estudo, é preciso determinar essas frações em função do enriquecimento.

O nível de enriquecimento é definido pela quantidade de ^{235}U presente no combustível. Naturalmente, o ^{235}U é encontrado com abundância em torno de 0,7% apenas, enquanto o ^{238}U é praticamente todo o restante. Quando se faz o processo de aumentar a quantidade de ^{235}U em uma amostra de urânio, diz-se que o urânio foi enriquecido. Portanto, um enriquecimento do 5%, por exemplo, representa uma quantidade de 5% de ^{235}U no combustível. Assim, a fração mássica do nuclídeo no elemento pode ser determinada diretamente pelo enriquecimento, conforme mostrado na Equação (16):

$$\begin{aligned} F_m^{U235} ne &= E \\ F_m^{U238} ne &= 1 - E \end{aligned} \quad (16)$$

Onde:

E : nível de enriquecimento do combustível

Considerando, então, uma amostra de urânio enriquecido composta apenas de ^{235}U e ^{238}U , a relação entre a massa de ^{235}U e ^{238}U com o nível de enriquecimento pode ser dada utilizando a definição do enriquecimento, Equação (17):

$$E = \frac{M_{U235}}{M_{total}}, \text{ mas } M_{total} = M_{U235} + M_{U238} \quad (17)$$

$$E = \frac{M_{U235}}{M_{U235} + M_{U238}}$$

$$\frac{M_{U235}}{M_{U238}} = \frac{E}{1 - E}$$

Onde:

M_{total} : massa da amostra de urânio

M_{235} : massa de ^{235}U na amostra

M_{238} : massa de ^{238}U na amostra

Sabendo que a massa da amostra é dada pelo número de átomos que a compõe vezes a massa atômica, pode-se determinar a fração atômica de um nuclídeo na amostra do elemento conforme Equação (18):

$$M_{U235} = NA_{U235} * ma_{U235} \text{ e } M_{U238} = NA_{U238} * ma_{U238}$$

$$\frac{M_{U235}}{M_{U238}} = \frac{NA_{U235} * ma_{U235}}{NA_{U238} * ma_{U238}}$$

$$\text{Mas } \frac{NA_{U235}}{NA_{U238}} = \frac{F_a^{U235} ne}{F_a^{U238} ne}, \text{ logo}$$

$$\frac{M_{U235}}{M_{U238}} = \frac{F_a^{U235} ne}{F_a^{U238} ne} * \frac{ma_{U235}}{ma_{U238}}$$

$$\frac{F_a^{U235} ne}{F_a^{U238} ne} = \frac{\frac{M_{U235}}{M_{U238}}}{\frac{ma_{U235}}{ma_{U238}}}$$

$$\frac{F_a^{U235} ne}{F_a^{U238} ne} = \frac{E}{1 - E} * \frac{ma_{U238}}{ma_{U235}} \quad (18)$$

No entanto, a soma das frações atômicas dos nuclídeos em uma amostra é igual a 1. Portanto, tem-se a Equação (19):

$$F_a^{U235}ne + F_a^{U238}ne = 1, \text{então}$$

$$F_a^{U235}ne = \left(\frac{E}{1-E} * \frac{ma_{U238}}{ma_{U235}} \right) * F_a^{U238}ne$$

$$F_a^{U235}ne = \left(\frac{E}{1-E} * \frac{ma_{U238}}{ma_{U235}} \right) * (1 - F_a^{U235}ne)$$

$$F_a^{U235}ne = \frac{\left(\frac{E}{1-E} * \frac{ma_{U238}}{ma_{U235}} \right)}{1 + \left(\frac{E}{1-E} * \frac{ma_{U238}}{ma_{U235}} \right)}$$

(19)

$$F_a^{U238}ne = 1 - F_a^{U235}ne$$

Onde:

NA_{U235} : número de átomos de ^{235}U na amostra

NA_{U238} : número de átomos de ^{238}U na amostra

ma_{U235} : massa atômica ^{235}U

ma_{U238} : massa atômica ^{238}U

$F_a^{U235}ne$: fração atômica de ^{235}U em amostra do elemento

$F_a^{U238}ne$: fração atômica de ^{238}U em amostra do elemento

Tendo determinado a fração dos ^{235}U e ^{238}U em uma amostra de urânio (elemento), pode-se determinar a fração atômica do nuclídeo e, conseqüentemente, a fração mássica, no dióxido de urânio (UO_2), Equação (20), assim tem-se:

$$F_a nm = F_a em * F_a ne \quad (20)$$

Onde:

$F_a nm$: fração atômica do nuclídeo em amostra do material

$F_a em$: fração atômica do elemento em amostra do material

$F_a ne$: fração atômica do nuclídeo no elemento

Como no UO_2 tem-se dois átomos de oxigênio para cada de urânio, as frações atômicas dos elementos em amostra de material são dadas pela Equação (21).

$$F_a^U em = \frac{1}{3} \quad (21)$$

$$F_a^O em = \frac{2}{3}$$

Portanto, as frações atômicas dos núclídeos em amostra do material são dadas pela Equação (22):

$$F_a^{U235} nm = F_a^U em * F_a^{U235} ne \quad (22)$$

$$F_a^{U238} nm = F_a^U em * F_a^{U238} ne$$

$$F_a^{O16} nm = F_a^{O16} em * F_a^{O16}$$

Considerando que o oxigênio seja majoritariamente composto de ^{16}O , então a F_a^{O16} é praticamente 1. Multiplicando as frações atômicas pela massa atômica, tem-se a massa do elemento na amostra, conforme Equações (23) a (25).

$$M^U = M^{U235} + M^{U238} \quad (23)$$

$$M^U = F_a^{U235} nm * ma_{U235} + F_a^{U238} nm * ma_{U238}$$

$$M^O = F_a^{O16} nm * ma_{O16} \quad (24)$$

$$F_m^U em = \frac{M^U}{M^U + M^O} \quad (25)$$

$$F_m^O em = \frac{M^O}{M^U + M^O}$$

Outro parâmetro que precisa ser determinado e varia com o nível de enriquecimento é a densidade do combustível. A nova densidade pode ser determinada com base na densidade do combustível sem enriquecimento, ou seja, com concentrações naturais. Então, supondo duas amostras de combustível, uma natural e outra enriquecida, de mesmo volume, Equação (26), tem-se:

$$\rho_{nat} = \frac{M_{nat}^{UO_2}}{V_{amostra}} \quad e \quad \rho_{enr} = \frac{M_{enr}^{UO_2}}{V_{amostra}} \quad (26)$$

$$\rho_{enr} = \frac{M_{enr}^{UO_2}}{M_{nat}^{UO_2}} * \rho_{nat}$$

A densidade do dióxido de urânio com abundância natural é de 10,97 g/cm³. As massas, no entanto, são determinadas pela quantidade de moléculas vezes a massa atômica da molécula, conforme as Equações de (27) a (29).

$$M_{enr} = NM_{UO_2enr} * mm_{UO_2enr} \quad (27)$$

$$M_{enr} = (NA^{U235} * ma_{U235})_{enr} + (NA^{U238} * ma_{U238})_{enr} + (NA^{O16} * ma_{O16})_{enr}$$

$$M_{enr} = (F_a^{U235}nm * ma_{U235})_{enr} + (F_a^{U238}nm * ma_{U238})_{enr} \\ + (F_a^{O16}nm * ma_{O16})_{enr}$$

$$M_{nat} = NM_{UO_2nat} * mm_{UO_2nat} \quad (28)$$

$$M_{nat} = (NA^{U235} * ma_{U235})_{nat} + (NA^{U238} * ma_{U238})_{nat} + (NA^{O16} * ma_{O16})_{nat}$$

$$M_{nat} = (F_a^{U235}nm * ma_{U235})_{nat} + (F_a^{U238}nm * ma_{U238})_{nat} \\ + (F_a^{O16}nm * ma_{O16})_{nat}$$

$$\frac{M_{enr}}{M_{nat}} = \frac{(F_a^{U235}nm * ma_{U235})_{enr} + (F_a^{U238}nm * ma_{U238})_{enr} + (F_a^{O16}nm * ma_{O16})_{enr}}{(F_a^{U235}nm * ma_{U235})_{nat} + (F_a^{U238}nm * ma_{U238})_{nat} + (F_a^{O16}nm * ma_{O16})_{nat}} \quad (29)$$

Onde:

NM: número de moléculas na amostra de UO₂

mm: massa molecular do UO₂

Com relação entre massas definidas e sabendo a densidade o UO₂ com abundância natural de ²³⁵U, a nova densidade é determinada, Equação (26).

APÊNDICE B – Determinação das frações volumétricas para terceira etapa

Durante a terceira etapa de estudo, a inclusão do absorvedor foi realizada primeiramente de forma homogênea e, posteriormente, como dois anéis concêntricos. Nesta última, foi necessário readequar as frações volumétricas dos componentes para que a massa final dos componentes permanecesse a mesma nas duas configurações, com o material absorvedor diluído homogeneamente (massa inicial) e incluído como anel (massa nova).

Como explicado no item 3.5.3, a fração volumétrica de absorvedor foi descontada da de água, devendo o combustível e o revestimento permanecerem inalterados. Dessa forma, tem-se o balanço de massa conforme Equações (30) e (31).

$$m_{N_{H_2O}} = m_{i_{H_2O}} \quad (30)$$

$$\rho_{N_{H_2O}} * Fv_{N_{H_2O}} * (V_{total} - Fv_{abs} * V_{total}) = \rho_{H_2O} * V_{total} * (Fv_{i_{H_2O}} - Fv_{abs})$$

$$Fv_{N_{H_2O}} (1 - Fv_{abs}) = Fv_{i_{H_2O}} - Fv_{abs}$$

$$Fv_{N_{H_2O}} = \frac{Fv_{i_{H_2O}} - Fv_{abs}}{1 - Fv_{abs}}$$

$$m_{N_{UO_2/Zr4}} = m_{i_{UO_2/Zr4}} \quad (31)$$

$$\rho_{UO_2/Zr4} * Fv_{N_{UO_2/Zr4}} * (V_{total} - Fv_{abs} * V_{total})$$

$$= \rho_{UO_2/Zr4} * Fv_{i_{UO_2/Zr4}} * V_{total}$$

$$Fv_{N_{UO_2/Zr4}} = \frac{Fv_{i_{UO_2/Zr4}}}{1 - Fv_{abs}}$$

Onde:

$m_{N_{H_2O}}$: massa nova de H_2O

$m_{N_{UO_2/Zr4}}$: massa nova de UO_2 ou de $Zr - 4$

$m_{i_{H_2O}}$: massa inicial de H_2O

$m_{i_{UO_2/Zr4}}$: massa inicial de UO_2 ou de $Zr - 4$

$Fv_{N_{H_2O}}$: fração volumétrica nova de H_2O

$Fv_{N_{UO_2/Zr4}}$: fração volumétrica nova de UO_2 ou $Zr - 4$

$Fv_{i_{H_2O}}$: fração volumétrica inicial de H_2O

$Fv_{i_{UO_2/Zr_4}}$: fração volumétrica inicial de UO_2 ou $Zr - 4$

Fv_{abs} : fração volumétrica de material absorvedor

ρ_{H_2O} : densidade da água

ρ_{UO_2/Zr_4} : densidade do UO_2 ou $Zr - 4$

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Diretoria de Pesquisa, Desenvolvimento e Ensino
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 – Cidade Universitária CEP: 05508-000
Fone/Fax(0XX11) 3133-8908
SÃO PAULO – São Paulo – Brasil
<http://www.ipen.br>

**O IPEN é uma Autarquia vinculada à Secretaria de Desenvolvimento,
associada
à Universidade de São Paulo e gerida técnica e administrativamente pela
Comissão Nacional de Energia Nuclear, órgão do
Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações.**