



Universidade Federal  
do Rio de Janeiro  

---

Escola Politécnica

ANÁLISE CFD DO ESCOAMENTO E DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR DE  
CO<sub>2</sub> SUPERCRÍTICO EM UM MICRO REATOR MODULAR

Carolina da Silva Bourdot Dutra

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia Nuclear da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro.

Orientador: Su Jian

Rio de Janeiro  
Março de 2020

ANÁLISE CFD DO ESCOAMENTO E DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR DE  
CO<sub>2</sub> SUPERCRÍTICO EM UM MICRO REATOR MODULAR

Carolina da Silva Bourdot Dutra

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO  
CURSO DE ENGENHARIA NUCLEAR DA ESCOLA POLITÉCNICA  
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE  
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE  
ENGENHEIRO NUCLEAR.

Examinado por:

---

Prof. Su Jian, D.Sc.

---

Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.

---

Dr. Marcos Bertrand de Azevedo, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
MARÇO DE 2020

da Silva Bourdot Dutra, Carolina

ANÁLISE CFD DO ESCOAMENTO E  
DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR DE CO<sub>2</sub>  
SUPERCRÍTICO EM UM MICRO REATOR  
MODULAR/Carolina da Silva Bourdot Dutra. –

Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2020.

XII, 53 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Su Jian

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/  
Curso de Engenharia Nuclear, 2020.

Referências Bibliográficas: p. 51 – 53.

1. CFD. 2. CO<sub>2</sub> Supercrítico. 3. Micro  
Reator Modular. 4. Termo-hidráulica. I. Jian,  
Su. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola  
Politécnica, Curso de Engenharia Nuclear. III. Análise  
CFD do escoamento e da Transferência de Calor de CO<sub>2</sub>  
Supercrítico em um Micro Reator Modular

*À minha mãe (in memoriam).*

# Agradecimentos

Aos meus pais, por terem prezado pela minha educação, principalmente à minha mãe, por ter sido minha fonte de inspiração para me tornar uma mulher forte e independente.

Ao professor Su Jian, que acompanha minha trajetória acadêmica há quatro anos, por sempre acreditar e exigir meu máximo potencial. Sua orientação foi essencial para a minha formação como engenheira nuclear.

Aos professores e funcionários do PEN/UFRJ pela dedicação na formação dos futuros engenheiros nucleares do Brasil.

Ao colegas do Laboratório de Simulação e Métodos em Engenharia (LASME), em especial ao Felipe, pela disposição em me ensinar e por todos os momentos de distração com caipirinhas.

Aos meus colegas de curso por compartilharem comigo os desafios do dia-a-dia e me divertirem nos momentos difíceis da graduação. Sem as conversas diárias com café e pão de queijo eu não teria conseguido seguir em frente.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/ UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Nuclear.

## ANÁLISE CFD DO ESCOAMENTO E DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR DE CO<sub>2</sub> SUPERCRÍTICO EM UM MICRO REATOR MODULAR

Carolina da Silva Bourdot Dutra

Março/2020

Orientador: Su Jian

Curso: Engenharia Nuclear

Este trabalho tem como objetivo analisar o comportamento termo-hidráulico estacionário do CO<sub>2</sub> supercrítico por meio da modelagem computacional do subcanal de arranjo triangular do Micro Reator Modular (MMR) do KAIST (Korea Advanced Institute of Science and Technology).

O modelo matemático é composto pelas equações de Navier-Stokes de média de Reynolds (RANS), com o modelo de turbulência  $k-\omega$  SST (Shear Stress Transport) para o fluido refrigerante no subcanal e a equação de condução de calor para o combustível e revestimento. As propriedades termodinâmicas do CO<sub>2</sub> são implementadas a partir de dados do National Institute of Standards and Technology (NIST). As equações de transporte foram resolvidas utilizando uma ferramenta comercial de CFD (fluidodinâmica computacional), o ANSYS-Fluent.

Inicialmente, um modelo geométrico foi construído, com a utilização do software ICEM-CFD, composto por combustível, interstício, revestimento, refrigerante e duas regiões adiabáticas da vareta combustível. Foi feita uma análise de convergência de malha e o estudo do escoamento no subcanal. Então, a vazão mássica foi variada para verificar o comportamento do fator de atrito e do número de Nusselt como função do número de Reynolds, demonstrando a adequabilidade do uso de correlações conhecidas para o escoamento do CO<sub>2</sub> supercrítico.

*Palavras Chave*— CFD, CO<sub>2</sub> Supercrítico, Micro Reator Modular, Termo-hidráulica

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Engineer.

CFD ANALYSIS OF THE FLOW AND THE HEAT TRANSFER OF  
SUPERCRITICAL CO<sub>2</sub> IN A MICRO MODULAR REACTOR

Carolina da Silva Bourdot Dutra

March/2020

Advisor: Su Jian

Course: Nuclear Engineering

In this work we present and analyze the steady-state thermal-hydraulic behavior of the supercritical CO<sub>2</sub> through the computational modeling of the triangular arrayed rod bundle subchannel of the KAIST (Korea Advanced Institute of Science and Technology) MMR.

The mathematical model was composed of the Reynolds-averaged Navier-Stokes equations (RANS), with the  $k-\omega$  SST (Shear Stress Transport) turbulence model for the coolant fluid in the subchannel and the heat conduction equation for the fuel and cladding. The thermodynamic properties of CO<sub>2</sub> were implemented from National Institute of Standards and Technology (NIST) data. The transport equations were solved using a commercial CFD (Computational Fluid Dynamics) tool, ANSYS-Fluent.

Initially, a geometric model was constructed, using the ICEM-CFD software, composed of fuel, gap, cladding, coolant and two adiabatic regions of the fuel rod. It was performed a mesh sensitivity study and the study of the flow in the subchannel. Variation of mass flow rate showed the behavior of friction factor and Nusselt number as a function of the Reynolds number, demonstrating the use of different well-know frictional factor correlations for supercritical CO<sub>2</sub> flow.

**Keywords**— CFD, Supercritical CO<sub>2</sub>, Micro Modular Reactor, Thermal-hydraulics

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação . . . . .	2
1.2 Objetivo . . . . .	3
1.3 Organização do trabalho . . . . .	3
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1 Fluidos Supercríticos na Indústria Nuclear . . . . .	5
2.2 Propriedades do CO <sub>2</sub> Supercrítico . . . . .	6
2.3 Reatores Refrigerados a Gás . . . . .	9
2.4 Micro Reator Modular (MMR) . . . . .	9
2.5 Fluidodinâmica computacional aplicada a escoamentos em feixes de vareta	11
<b>3 Metodologia</b>	<b>13</b>
3.1 O Problema Físico . . . . .	13
3.2 Modelo do Transporte do Fluido Refrigerante . . . . .	15
3.2.1 Equação da continuidade, ou conservação de massa: . . . . .	15
3.2.2 Equação da conservação da quantidade de movimento: . . . . .	15
3.2.3 Equação da conservação da energia: . . . . .	15
3.2.4 Equação de Estado . . . . .	16
3.3 Modelo de turbulência . . . . .	17
3.3.1 Equações de médias de Reynolds (RANS) . . . . .	17
3.3.2 Modelo k- $\omega$ SST . . . . .	18
3.4 Modelo de Condução de Calor na Vareta Combustível . . . . .	19
3.4.1 Geração de calor na vareta . . . . .	20
3.4.2 Equação fundamental da calorimetria . . . . .	20
3.4.3 Parâmetros adimensionais . . . . .	20
3.5 Fluidodinâmica Computacional (CFD) . . . . .	23
3.5.1 Método dos Volumes Finitos . . . . .	23
3.5.2 Descrição das equações governantes . . . . .	23
3.5.3 Metodologia CFD . . . . .	24



<b>4</b>	<b>Resultados e discussões</b>	<b>30</b>
4.1	Validação das Propriedades do CO <sub>2</sub> Supercrítico . . . . .	30
4.2	Subcanal do MMR . . . . .	37
4.2.1	Especificações geométricas e físicas . . . . .	37
4.2.2	Propriedades dos sólidos . . . . .	38
4.2.3	Malha . . . . .	38
4.2.4	Condições de Contorno e Iniciais . . . . .	40
4.3	Simulações e Resultados . . . . .	41
<b>5</b>	<b>Conclusões e Sugestões</b>	<b>49</b>
5.1	Conclusões . . . . .	49
5.2	Sugestões para trabalhos futuros . . . . .	50
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>51</b>

# Lista de Figuras

2.1	Diagrama pressão versus temperatura para o CO <sub>2</sub> . . . . .	5
2.2	Calor específico do CO <sub>2</sub> à pressão constante . . . . .	6
2.3	Densidade do CO <sub>2</sub> . . . . .	7
2.4	Condutividade do CO <sub>2</sub> . . . . .	7
2.5	Viscosidade do CO <sub>2</sub> . . . . .	8
2.6	Representação do vaso do MMR . . . . .	10
3.1	Representação do subcanal e vareta combustível modelado: (a) seção transversal e (b) visão em perspectiva 3D. . . . .	13
3.2	Representação radial (a) e axial (b) do MMR do KAIST . . . . .	14
3.3	Elemento combustível . . . . .	14
3.4	Uma célula em 3 dimensões e seus nós vizinhos . . . . .	23
3.5	Algoritmo SIMPLE . . . . .	27
4.1	Modelo geométrico do tubo circular. . . . .	31
4.2	Perda de pressão versus número de nós . . . . .	33
4.3	Representação radial das malhas 03, 06 e 08, respectivamente . . . . .	34
4.4	Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 1 . . . . .	35
4.5	Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 2 . . . . .	35
4.6	Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 3 . . . . .	36
4.7	Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 4 . . . . .	36
4.8	Representação geométrica axial do subcanal . . . . .	37
4.9	Perda de pressão versus número de nós . . . . .	39
4.10	Representação radial das malhas 03, 05 e 07, respectivamente. . . . .	40
4.11	Domínio da simulação e condições de contorno . . . . .	40
4.12	Convergência da temperatura na saída do fluido . . . . .	41
4.13	Campo de velocidade em m/s para o subcanal e a subfatia em 3 posições. . . . .	42
4.14	Campo de temperatura em K para o subcanal e a subfatia em 3 posições. . . . .	43
4.15	Fator de atrito como função do número de Reynolds comparado com correlações empíricas. . . . .	45
4.16	Correlação criada para o Fator de atrito em função do número de Reynolds. . . . .	46
4.17	Número de Nusselt calculado com a correlação de Presser como função da posição axial adimensional. . . . .	47

4.18 Número de Nusselt calculado por CFD como função da posição axial adimensional. . . . .	47
4.19 Número de Nusselt como função do número de Reynolds . . . . .	48

# Lista de Tabelas

3.1	Valores de $\phi$ de acordo com a propriedade analisada . . . . .	24
4.1	Calor específico à pressão constante do aço 316L . . . . .	32
4.2	Análise de perda de carga das malhas . . . . .	33
4.3	Condições operacionais dos casos simulados . . . . .	34
4.4	Parâmetros do projeto do KAIST MMR . . . . .	38
4.5	Calor específico do UN à pressão constante de 20 MPa . . . . .	38
4.6	Análise de perda de carga das malhas . . . . .	39
4.7	Condições de contorno . . . . .	41
4.8	Temperaturas médias nos domínios . . . . .	44
4.9	Vazões utilizadas para o cálculo, em kg/s . . . . .	44

# Capítulo 1

## Introdução

Desenvolver centrais elétricas com flexibilidade e capacidade suficiente para suprir a crescente demanda energética e, simultaneamente, mitigar as mudanças climáticas tem sido um dos maiores desafios da atualidade. Para tal, é necessário que haja a implantação em larga escala de tecnologias de geração de energia com baixa emissão de carbono. Novas centrais nucleares são essenciais para diminuir a dependência mundial dos combustíveis fósseis, solucionar a crise energética e reduzir a quantidade de gases de efeito estufa (GEE) emitidos no meio ambiente.

Durante os últimos 70 anos, a energia nuclear tem sido um recurso estabelecido e comprovado: limpa, confiável e econômica. No entanto, o acidente de Fukushima, em 2011, gerou grande desconfiança e preocupação na área de geração de energia nuclear. Então, foi necessário o aumento do investimento financeiro e tecnológico em novos sistemas de segurança para garantir a integridade das centrais nucleares, o que tornou seu custo de implantação extremamente alto. Portanto, alternativas para a redução de seu custo devem ser estudadas.

Atualmente, Reatores Modulares Pequenos (Small Modular Reactors - SMRs) têm ganhado visibilidade por terem o menor impacto ambiental dentre as tecnologias de produção de eletricidade disponíveis. Os SMRs são definidos pela Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA) como reatores nucleares avançados que produzem até 300 MWe de energia por módulo. [1]

Por serem projetados para oferecer um projeto modular compacto e mais seguro, são construídos em fábricas em um curto intervalo de tempo e requerem menor investimento inicial comparado à uma central nuclear de grande porte. Por serem pequenos o suficiente para serem transportados ou realocados, podem ser utilizados para abastecer locais isolados sem infraestrutura avançada e/ou malha energética pouco desenvolvida; para cogeração de energia e dessalinização, ou serem agrupados em um único local e fornecer energia equivalente a uma usina nuclear de grande porte. Ademais, podem ser alocados

próximos aos usuários, como em complexos residenciais, hospitais e bases militares. Desta forma, é possível inferir que o SMR é uma tecnologia emergente capaz de atender a demanda por segurança, eficiência e sustentabilidade.

Apesar de a maior parte dos SMRs que estão sendo desenvolvidos serem fisicamente menores que as grandes plantas nucleares existentes, muitos não são completamente modularizados pois seus projetos são baseados na tecnologia da água como refrigerante. Uma forma de reduzir seu tamanho é com a utilização de um sistema de conversão de potência integrado no núcleo do reator, através do uso de fluidos supercríticos como refrigerante. Eles apresentam altos valores de capacidade térmica e podem ser expandidos diretamente em turbinas, através do ciclo de Brayton supercrítico, eliminando a necessidade de geradores de vapor e pressurizadores. E, por operarem em temperaturas maiores, sua eficiência é elevada, de acordo com a Segunda Lei da Termodinâmica.

## 1.1 Motivação

Reduzir o custo da eletricidade produzida por plantas nucleares é um passo crucial para dar continuidade a sua utilização no futuro. Para alcançar esse objetivo, muita pesquisa tem sido feita para simplificar os sistemas e reduzir seus custos. Além disso, as metas de sustentabilidade dos reatores da Geração IV podem ser ultrapassadas se a eficiência do ciclo aumentar. Então, busca-se um ciclo de potência com alta eficiência e com baixo consumo de recursos primários. Comparado com ciclos de vapor, ciclos fechados de turbinas a gás são, geralmente, simples, compactos, mais baratos e têm menor tempo de construção. Devido a sua simplicidade, são bem adequados para serem aplicados às técnicas de construção modular.

Fluidos supercríticos vêm sendo muito utilizados em diversas aplicações industriais, tais como em engenharia química, nuclear e espacial, como fluido de trabalho de turbomáquinas e em ciclos de potência. As características de transferência de calor de um fluido supercrítico são um parâmetro essencial para essas aplicações. O dióxido de carbono é um dos fluidos mais usados devido à sua baixa temperatura e pressão críticas, em comparação com a água, por exemplo. Além disso, por ser abundante, barato, não tóxico, inerte, amplamente conhecido e de elevada eficiência, o  $\text{CO}_2$  é ideal para ser usado como fluido refrigerante, sobretudo em Pequenos Reatores Modulares.

Um dos aspectos mais importantes em relação à segurança de um reator nuclear é o controle da temperatura do seu núcleo, que depende da capacidade do refrigerante em remover seu calor. Portanto, é desejável ter um conhecimento do comportamento termo-hidráulico do reator não somente para o controle de sua operação como também para evitar acidentes.

## 1.2 Objetivo

Com o objetivo de investigar as propriedades termo-hidráulicas do CO<sub>2</sub> supercrítico, o presente trabalho busca modelar, via simulações de fluidodinâmica computacional (CFD) com o código comercial ANSYS-Fluent, o escoamento turbulento desse fluido em um subcanal de arranjo triangular do MMR da KAIST [2] em condições operacionais normais.

Embora seja um fluido amplamente conhecido, alguns aspectos da natureza termo-hidráulica desse fluido foram pouco pesquisados, apesar dele ser usado em várias aplicações. Portanto, pretende-se investigar as correlações existentes para fluidos comuns e verificar sua aplicabilidade para o CO<sub>2</sub> supercrítico.

Para reduzir o tempo computacional o presente trabalho foi desenvolvido baseando-se na análise termo-hidráulica de um único subcanal, considerando que todos os subcanais apresentam escoamentos idênticos e paralelos. Foi escolhida uma geometria com vareta combustível centralizada no subcanal, para simplificar a criação da malha computacional e a imposição das condições de contorno.

## 1.3 Organização do trabalho

Este trabalho foi dividido em 5 capítulos. O Capítulo 1 apresenta uma contextualização sobre a energia nuclear nos dias atuais com uma breve introdução sobre SMRs e fluidos supercríticos. Nele há a motivação e objetivo para a realização deste projeto.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica com os principais fundamentos necessários para o entendimento deste trabalho, desde fluidos supercríticos a reatores resfriados à gás e SMRs. Também são apresentados alguns trabalhos experimentais e numéricos realizados a respeito de escoamento de fluidos em subcanais de reatores nucleares.

O Capítulo 3 apresenta o problema físico, objeto de estudo, e a metodologia utilizada para a realização das simulações CFD. Nele há as equações governantes de conservação, para a resolução do modelo matemático de transporte do fluido no subcanal, modelo de turbulência, parâmetros adimensionais usados no tratamento de dados e equações usadas na condução dos materiais sólidos. Também é explicada como funciona o método da Fluidodinâmica Computacional, passo-a-passo.

O Capítulo 4 trata dos detalhes das simulações realizadas, desde a construção da geometria do modelo apresentado no capítulo anterior e suas considerações físicas até as condições de contorno e iniciais utilizadas. Por fim, são apresentados e discutidos os resultados encontrados.

Finalmente, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões do estudo proposto e as sugestões para possíveis trabalhos futuros.



# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Neste capítulo será apresentado um resumo dos principais conceitos sobre fluidos supercríticos e reatores refrigerados a gás, necessários para a discussão desenvolvida ao longo deste trabalho, assim como sua contextualização na indústria nuclear. Em seguida, será explicado brevemente o modelo de reator escolhido como objeto deste estudo. Por fim, será apresentada uma compilação dos principais trabalhos realizados acerca de escoamentos em feixe de varetas.

### 2.1 Fluidos Supercríticos na Indústria Nuclear

Quando a temperatura e a pressão de uma substância são ambas maiores que seus respectivos valores críticos ela é definida como fluido supercrítico. A transição supercrítica do dióxido de carbono, por exemplo, ocorre a 7,38 MPa e 30,98°C (304,13K)[3].

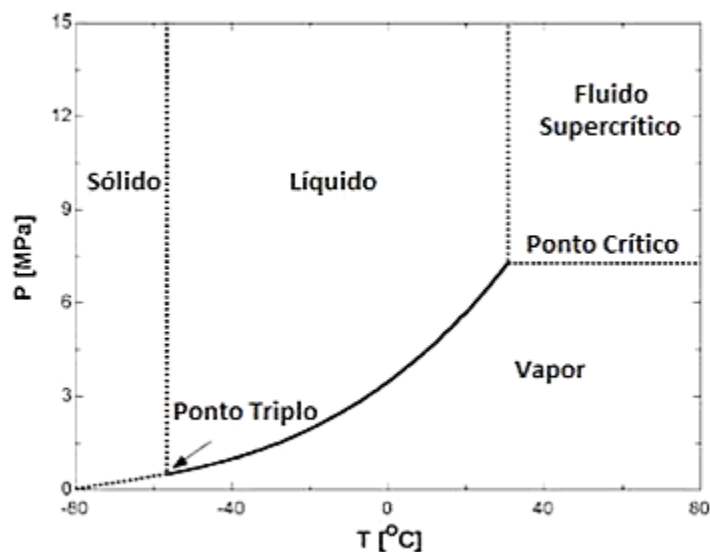


Figura 2.1: Diagrama pressão versus temperatura para o CO<sub>2</sub>

Uma das aplicações deste tipo de fluido é no Reator a Água Supercrítica (SCWR -

Supercritical Water Reactor), da Geração IV. Ele é um reator avançado, ainda em fase de desenvolvimento, que apresenta maior eficiência e tamanho reduzido, se comparado com os tradicionais LWRs (Reator à Água Leve). Os conceitos do SCWR combinam as experiências de projeto e operação obtidas de centenas de reatores refrigerados à água (PWR) com as de usinas de energia fóssil operadas com água supercrítica (SCW) [4].

No entanto, o uso de água supercrítica apresenta alguns desafios. Seu ponto crítico apresenta temperatura e pressão muito elevadas e ela possui caráter corrosivo, o que pode ser um problema na escolha do material. Por este motivo, o  $\text{CO}_2$  é, na maioria das aplicações, o fluido preferível.

## 2.2 Propriedades do $\text{CO}_2$ Supercrítico

Com o objetivo de conhecer o comportamento das propriedades termofísicas do  $\text{CO}_2$  após o ponto de transição supercrítica, os gráficos a seguir apresentam as curvas para capacidade e condutividade térmica, viscosidade e densidade em função da temperatura e para cinco pressões diferentes.

Observa-se, assim, que as propriedades físicas e termodinâmicas do fluido alteram-se rapidamente quanto mais próximo do ponto crítico e tendem a se estabilizar com o aumento de temperatura.

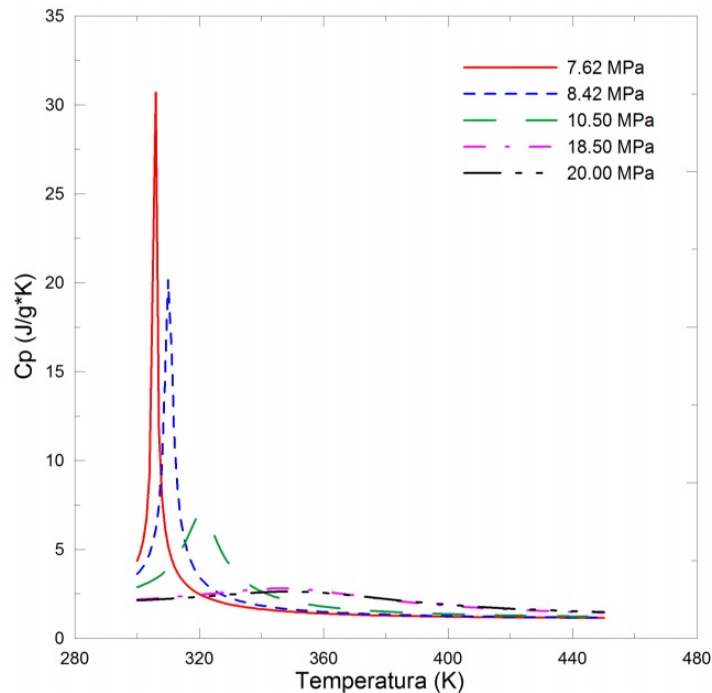


Figura 2.2: Calor específico do  $\text{CO}_2$  à pressão constante

Na Figura 2.2, vemos que à medida que a pressão aumenta além do ponto crítico,

o pico do calor específico é amenizado e o fluido tende a se comportar como gás ideal, ou seja, é possível medir sua variação como função da temperatura. Nas demais Figuras 2.3, 2.4 e 2.5, podemos observar um comportamento semelhante, tanto para a densidade, quanto para a condutividade e a viscosidade. As alterações que ocorrem no ponto crítico são mitigadas a medida que a pressão se afasta da pressão crítica. [3]

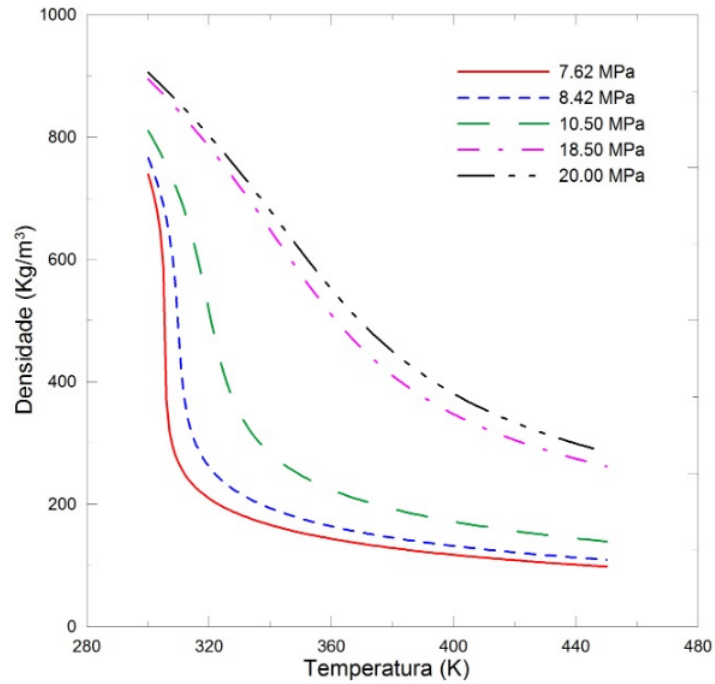


Figura 2.3: Densidade do CO<sub>2</sub>

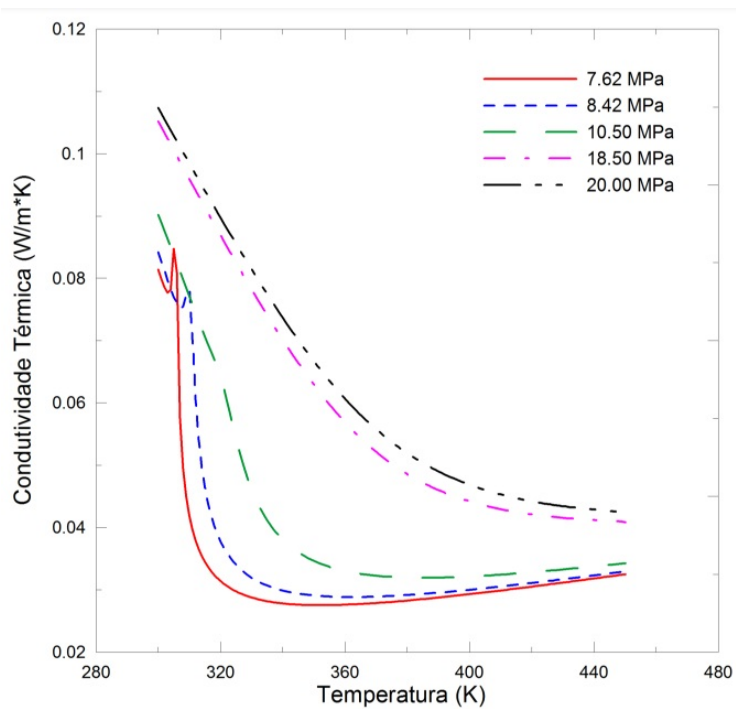


Figura 2.4: Condutividade do CO<sub>2</sub>

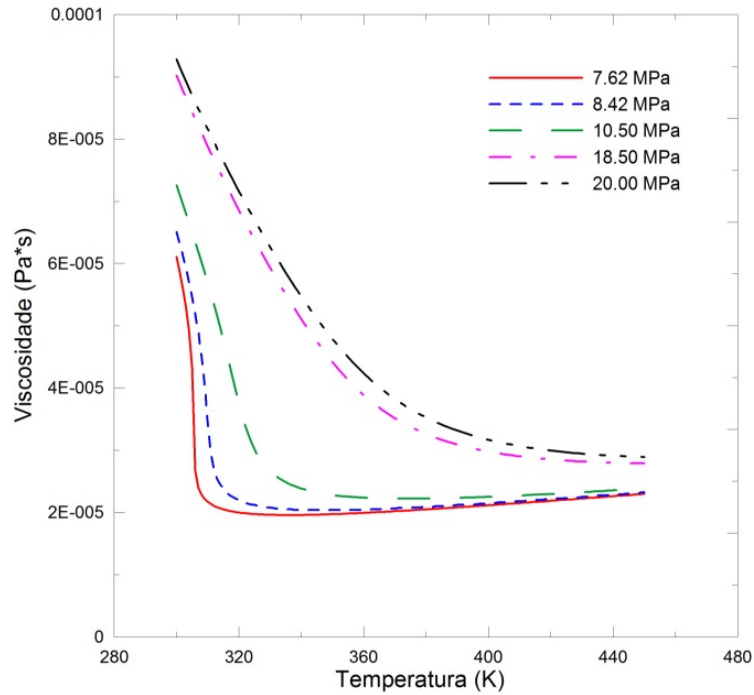


Figura 2.5: Viscosidade do CO<sub>2</sub>

A eficiência do ciclo é máxima na temperatura pseudocrítica do CO<sub>2</sub>. No entanto, é difícil mantê-la constante e qualquer queda de temperatura tornará o fluido subcrítico, tornando o escoamento bifásico, podendo levar à cavitação e portanto danos aos componentes do reator.

Dada a importância de compreender as propriedades termodinâmicas do CO<sub>2</sub> supercrítico, diversas análises experimentais e simulações numéricas têm sido feitas. DUFFEY e PIORO [5] fizeram um estudo comparativo entre diversos trabalhos experimentais publicados com transferência de calor no escoamento de dióxido de carbono em tubos circulares verticais e horizontais. FATIMA [3] investigou o comportamento termo-hidráulico de fluidos supercríticos em tubos horizontais semicirculares. KIM e KIM [6] e BRUCH *et al.* [7] quantificaram o fenômeno de transferência de calor de um fluido supercrítico utilizando uma instalação experimental de escoamento ascendente em um tubo vertical. BOVARD *et al.* [8] investigaram, por meio de simulações numéricas, o efeito da aceleração do fluido e do empuxo no coeficiente de transferência de calor do CO<sub>2</sub> e da água supercríticos em um tubo vertical.

PIORO [9] investigou as pesquisas sobre convecção forçada de fluidos a pressões supercríticas, principalmente água, CO<sub>2</sub> e R-12. Ele verificou que algumas correlações para fluidos supercríticos possuem diferenças de até 200%, portanto, é necessário que sejam feitos mais estudos para se chegar a correlações que sejam confiáveis.

## 2.3 Reatores Refrigerados a Gás

Em 1956, os reatores nucleares Calder Hall, no Reino Unido, foram os primeiros a produzirem energia elétrica em escala comercial. Eles eram chamados de Magnox pois usavam varetas de metal de urânio natural como combustível com um revestimento de liga de magnésio e refrigerados a  $\text{CO}_2$ . Dando continuidade a esta tecnologia, os britânicos desenvolveram o Reator Avançado Refrigerado a Gás (AGR), que usava  $\text{UO}_2$  enriquecido como combustível, permitindo atingir maiores temperaturas e, portanto, maior eficiência energética. Atualmente, os reatores refrigerados a gás são a segunda tecnologia mais comum de reatores para uso comercial e representam cerca de três por cento do número total de reatores em operação no mundo.[10]

Apesar de estarem em uso apenas no Reino Unido, o interesse internacional pelo desenvolvimento de Reatores Refrigerados a Gás de Alta Temperatura (HTGR) está aumentando. Refrigerados a hélio, eles podem fornecer eletricidade eficiente e economicamente, além de produzir calor de processo, que pode ser usado para produção de hidrogênio e aplicações de baixa temperatura, como dessalinização da água do mar e aquecimento urbano.

Em contrapartida, há alguns anos, um reator rápido de larga escala (2400MWt) resfriado a  $\text{CO}_2$  supercrítico e utilizando o ciclo de Brayton foi estudado pelo MIT, por POPE [11] e HANDWERK [12], como uma alternativa ao Hélio. A principal vantagem no uso do  $\text{CO}_2$  supercrítico é que ele opera a temperaturas menores, e, ainda sim, atinge uma alta eficiência térmica.

## 2.4 Micro Reator Modular (MMR)

O Reator Modular Pequeno (SMR) é um novo tipo de reator nuclear que pode oferecer uma energia mais flexível, segura e com melhor custo benefício, como uma alternativa às grandes centrais nucleares convencionais. A Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA) define um SMR como um reator que gera uma potência de até 300 MWe. Eles são projetados para serem produzidos em uma fábrica e então seus módulos são transportados para a instalação na localização desejada. Recentemente, eles têm recebido mais atenção, especialmente, após o acidente de Fukushima em 2011, já que eles podem remover o calor de decaimento passivamente de forma a prevenir este tipo de acidente. Além disso, devido ao seu baixo custo e a flexibilidade na implantação, SMRs são bem adequados para serem destinados aos países em desenvolvimento, com um sistema de rede elétrica relativamente pequeno.

Apesar do tamanho pequeno do núcleo dos SMRs refrigerados a água, o volume necessário para o sistema de conversão potência é significativo utilizando o ciclo de vapor de Rankine. Conseqüentemente, o SMR inteiro não pode ser tão compacto. No entanto, a

atratividade do SMR pode ser aumentada se o núcleo do reator e o sistema de conversão forem integrados, reduzindo o tamanho do sistema inteiro. Substituir o ciclo de vapor Rankine pelo ciclo de gás de Brayton reduz a unidade de conversão de potência, já que ele permite que o trocador de calor, responsável por grande parte do volume total, seja substancialmente menor [13].

O objeto de estudo do presente trabalho é um Micro Reator Modular (Micro Modular Reactor - MMR), que vem sendo desenvolvido pela KAIST (Korea Advanced Institute of Science and Technology) [2]. Neste projeto o núcleo é resfriado diretamente pelo CO<sub>2</sub> supercrítico, que passa para o sistema de conversão de potência diretamente, sem nenhum trocador de calor intermediário. Como resultado, tanto o núcleo quanto módulo de conversão de potência encontram-se integralmente em um vaso do reator, tornando o MMR do KAIST extremamente compacto e modular, ao ponto de ser transportável em um caminhão. Todos os demais componentes também são integrados em um pequeno vaso do reator.

Sua potência térmica é de 36,2 MWt com uma vida de 20 anos sem necessidade de recarga de combustível. Para aumentar a fração de volume do combustível no núcleo, um combustível de alta densidade, o mononitreto de urânio (UN), é usado. Este combustível, por sua vez, é pouco enriquecido, como um pré requisito para o reator poder ser alocado em uma região isolada, de modo a não contribuir para a proliferação.

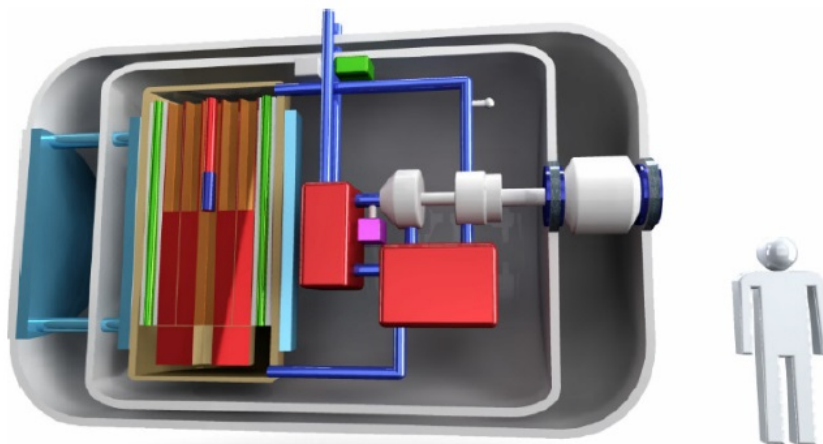


Figura 2.6: Representação do vaso do MMR [2]

Na Figura 2.6 podem ser vistos todos os componentes do MMR da KAIST instalados em um único vaso de pressão do reator, que, por sua vez, é protegido por um forte vaso para minimizar a probabilidade de perda de calor e radioatividade. A pressão e as temperaturas foram determinadas de forma a maximizar a eficiência de conversão de potencia e satisfazer a compatibilidade dos materiais do núcleo.

## 2.5 Fluidodinâmica computacional aplicada a escoamentos em feixes de varetas

Análises de Fluidodinâmica Computacional (Computational Fluid Dynamics - CFD) têm a capacidade de prever o comportamento termo-hidráulico do refrigerante no núcleo do reator. Isto contribui para aumentar a compreensão acerca dos fenômenos que ocorrem dentro do reator, levando a um funcionamento mais seguro e eficiente da central nuclear. No entanto, é necessário que sejam realizados experimentos para validar as simulações numéricas dos escoamentos. [14]

Neste sentido, HOOPER e WOOD [15] realizaram um estudo experimental do escoamento turbulento monofásico em subcanais de arranjo quadrático com diferentes números de Reynolds e verificaram que a velocidade do escoamento secundário representa menos de 1% da velocidade média total, portanto, ele pode ser desconsiderado.

RENKSIZBULUT e HADALLER [16] fizeram uma investigação experimental da distribuição da tensão cisalhante na parede, da velocidade média axial e da intensidade da turbulência no escoamento completamente desenvolvido da água em um subcanal composto por 6 varetas. Eles demonstraram que os escoamentos em subcanais podem ser comparados aos escoamentos em tubos, com boas aproximações, e que a velocidade secundária deles pode ser desprezada. Também concluíram que a intensidade da turbulência é maior em arranjos quadráticos em relação aos triangulares.

Por meio de um estudo experimental do escoamento turbulento monofásico em subcanais de arranjo quadrático, HOOPER [17], concluiu que a axissimetria do escoamento é extremamente dependente da razão pitch-diâmetro ( $P/D$ ). Ele verificou que as intensidades turbulentas são maiores em subcanais e que crescem com a diminuição de  $P/D$ .

A análise CFD foi utilizada por LIU e FERNG [18] para investigar as características termo-hidráulicas do escoamento em um arranjo quadrático de 3x3 varetas. Os números de Nusselt encontrados nas simulações apresentaram concordância com os dados experimentais e com a correlação analisada, portanto, foi confirmada a capacidade da CFD em prever este tipo de fenômeno.

Através do código comercial de CFD StarCD em subcanais de arranjo quadrático, HORVÁTH e DRESSEL [19] variaram a razão pitch-diametro para encontrar a melhor malha e modelo de turbulência a ser utilizado em geometrias mais complexas. Eles concluíram que a resolução da malha é de extrema importância para representar adequadamente o modelo de turbulência.

DEBRAH *et al.* [20] realizaram simulações com o código CFD STAR-CCM+ do

escoamento da água supercrítica no subcanal de 1/8 de um elemento combustível de arranjo quadrático utilizando o modelo de turbulência  $k-\omega$  SST e compararam os resultados com diversas correlações. Eles verificaram que a temperatura excedeu o limite de projeto em uma das paredes.

Também com o código CFD STAR-CCM+, o modelo de turbulência  $k-\omega$  SST foi usado por PALOMINO e EL-GENK [21] para analisar as quedas de pressão da água e sódio líquido em subcanais de arranjo hexagonal de diferentes tamanhos e geometrias. Foram desenvolvidas correlações para o fator de atrito sob escoamento laminar, transitório e turbulento que demonstraram concordância com dados experimentais.

SHARMA *et al.* [22] utilizaram o código ANSYS-CFX para investigar os efeitos da variação das propriedades do  $\text{CO}_2$  logo acima do ponto crítico e com baixos números de Reynolds, usando arranjo hexagonal e modelo de turbulência  $k-\epsilon$ . Foi verificada uma forte dependência do coeficiente de transferência de calor com altos fluxos de calor na parede, em que um aumenta em função do outro.

Por meio da análise CFD da transferência de calor do sódio líquido em subcanal central de arranjo hexagonal, PALOMINO e EL-GENK [23] investigaram o efeito da variação de potência em um reator pequeno com combustível de monóxido de urânio. Verificou-se uma alta eficiência térmica com a temperatura alcançada, ainda dentro das margens de segurança do reator.

Até então, poucos trabalhos foram realizados em subcanais hexagonais, sobretudo com fluidos supercríticos. Um deles foi o estudo 2D utilizando o código ANSYS-Fluent da água supercrítica em um 1/4 de subcanal quadrático e 1/6 de um subcanal hexagonal, feito por CHEN *et al.* [24]. Eles concluíram que os resultados numéricos estavam de acordo com os experimentais e maiores coeficientes de transferência de calor mitigam a não uniformidade da transferência do mesmo.



# Capítulo 3

## Metodologia

Neste capítulo serão apresentados o problema físico e a metodologia utilizada para a análise de fluidodinâmica computacional realizada neste trabalho. Inicialmente, é mostrado o problema físico a ser modelado. Em seguida, são apresentadas as equações que governam o problema físico, assim como a descrição do modelo de turbulência adotado e as equações de condução de calor para a modelagem do combustível e revestimento. Então, tem-se as correlações e os parâmetros adimensionais utilizados para a análise dos resultados encontrados nas simulações. Por fim, são apresentados os principais conceitos da Fluidodinâmica Computacional, desde o Método dos Volumes Finitos até a metodologia utilizada em sua resolução.

### 3.1 O Problema Físico

O problema estudado neste projeto é o escoamento e transferência de calor do  $\text{CO}_2$  supercrítico no subcanal de um Micro Reator Modular acoplado a uma vareta combustível com revestimento, como ilustrado na Figura 3.1.

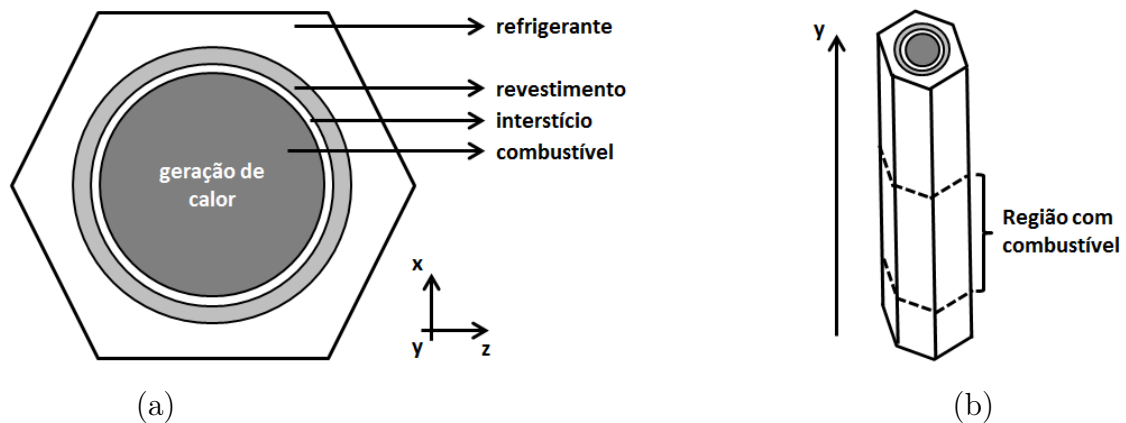


Figura 3.1: Representação do subcanal e vareta combustível modelado: (a) seção transversal e (b) visão em perspectiva 3D.

O modelo geométrico do problema físico possui um arranjo triangular com uma vareta

de combustível centralizada e é composto por:

- Fluido refrigerante;
- Revestimento;
- Interstício;
- Três domínios combustíveis:
  - Combustível inferior (adiabático)
  - Combustível intermediário (com geração de calor)
  - Combustível superior (adiabático)

Na Figura 3.2 temos a configuração do núcleo, que consiste em 18 elementos combustíveis hexagonais e um refletor com 12 tambores de controle (drum-type) para ajustar a reatividade.

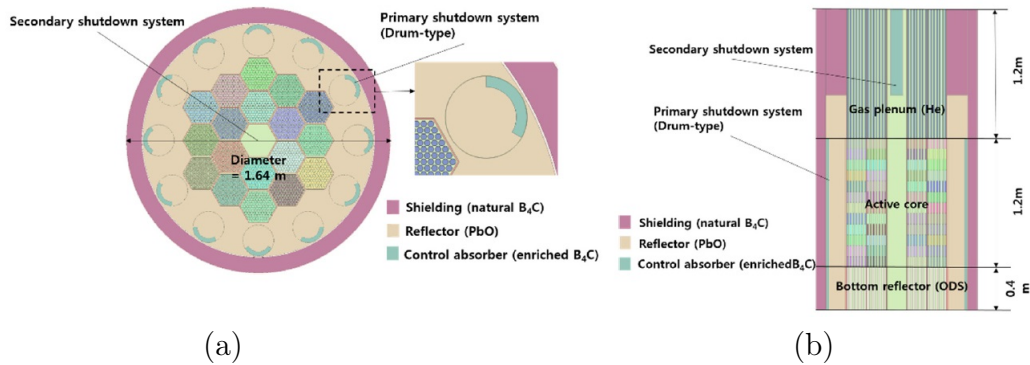


Figura 3.2: Representação radial (a) e axial (b) do MMR do KAIST [2].

Cada elemento combustível é composto por 127 varetas combustíveis de mononitreto de urânio (UN), como mostrado na Figura 3.3. As frações de volume do combustível, refrigerante e estrutura são de 54,5%, 30,6% e 14,9%, respectivamente, em cada elemento combustível.

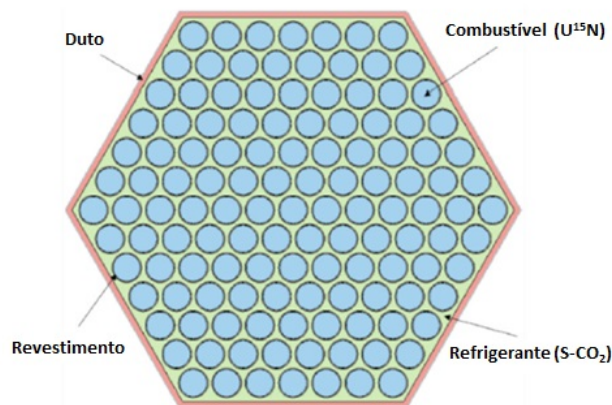


Figura 3.3: Elemento combustível [2]

## 3.2 Modelo do Transporte do Fluido Refrigerante

O modelo matemático para o transporte do fluido refrigerante no subcanal é composto pelas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia, e a equação de estado do CO<sub>2</sub> supercrítico. [25] [26]

### 3.2.1 Equação da continuidade, ou conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

onde  $\rho$  é a massa específica do fluido refrigerante e  $\mathbf{u}$  é o vetor de velocidade.

Para fluidos incompressíveis, nos quais  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ , essa equação se transforma em:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.2)$$

### 3.2.2 Equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho g, \quad (3.3)$$

onde  $\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}$  é o produto vetorial do vetor velocidade,  $\mathbf{u}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$  é o tensor de tensões viscosas,  $p$  é a pressão, e  $g$  é aceleração gravitacional.

Para escoamentos incompressíveis a Equação (3.3) pode ser reescrita como:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho g. \quad (3.4)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade do fluido.

### 3.2.3 Equação da conservação da energia:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) = \nabla \cdot (k \nabla T) - p \nabla \cdot \mathbf{u} + \Phi, \quad (3.5)$$

onde  $e$  é a energia interna,  $T$  é a temperatura,  $k$  é a condutividade térmica do fluido,  $\Phi$  é a dissipação viscosa, definida como  $\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}$ . A geração volumétrica de calor no fluido refrigerante é desprezada.

Para fluidos incompressíveis e com propriedades físicas constantes a equação de conservação de energia pode ser simplificada para a equação da temperatura:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \nabla T = \alpha \nabla^2 + \frac{\Phi}{\rho C_p}, \quad (3.6)$$

onde  $C_p$  é o coeficiente de capacidade térmica à pressão constante e  $\alpha$ , o coeficiente de difusividade térmica:

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p}. \quad (3.7)$$

### 3.2.4 Equação de Estado

A equação de estado é necessária para complementar as equações de conservação. Neste trabalho, utilizou-se um modelo de gás ideal compressível através de uma subrotina disponível no software ANSYS-Fluent. Esta função utiliza a equação desenvolvida por SPAN e WAGNER [27], em termos da energia livre de Helmholtz, que descreve adequadamente o comportamento do CO<sub>2</sub> próximo ao ponto crítico. [28]

A energia de Helmholtz é representada em sua forma adimensional por:

$$\phi(\delta, \tau) = \phi^o(\delta, \tau) + \phi^r(\delta, \tau) \quad (3.8)$$

onde,

$$\phi(\delta, \tau) = \frac{A(\rho, T)}{RT} \quad (3.9)$$

sendo que a primeira parte da equação descreve o comportamento do gás ideal ( $\phi^o$ ) e a segunda representa a contribuição residual do fluido ( $\phi^r$ ). As variáveis independentes são a densidade reduzida  $\delta$  e o inverso da temperatura reduzida  $\tau$ , definidos, respectivamente, por:

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_c} \quad (3.10)$$

$$\tau = \frac{T_c}{T} \quad (3.11)$$

onde  $\rho_c$  e  $T_c$  representam a densidade crítica e a temperatura crítica, respectivamente.

SPAN e WAGNER [27] propuseram em sua correlação as seguintes expressões, sendo a primeira para parte ideal  $\phi^o(\delta, \tau)$  e a segunda para parte residual  $\phi^r(\delta, \tau)$ :

$$\phi^o(\delta, \tau) = \ln(\delta) + a^1 + a^2\tau + a^3\ln(\tau) + \sum_{i=4}^8 a^i \ln[1 - \exp(-\tau\theta_i^o)], \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \phi^r(\delta, \tau) = & \sum_{i=1}^7 n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} + \sum_{i=8}^{34} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} e^{-\delta c_i} + \\ & + \sum_{i=35}^{39} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} e^{-\alpha_i(\delta-e_i)^2 - \beta_i(\tau-\gamma_i)^2} + \sum_{i=40}^{42} n_i \Delta^{b_i} \delta e^{-C_i(\delta-1)^2 - D_i(\tau-1)^2} \end{aligned} \quad (3.13)$$

sendo  $\Delta$  definido por:

$$\Delta = \left\{ (1 - \tau) + A_i [(\delta - 1)^2]^{1/(2\beta)_i} \right\}^2 + B_i [(\delta - 1)^2]^{a_i} \quad (3.14)$$

Todos os coeficientes e expoentes das equações 3.12 e 3.13 são tabelados em função de  $i$ . As derivadas de  $\phi$ , expressas em séries de potências, também são conhecidas e apresentadas por SPAN e WAGNER [27], encerrando assim, a equação constitutiva utilizada para descrever o fluido.

### 3.3 Modelo de turbulência

#### 3.3.1 Equações de médias de Reynolds (RANS)

Na média de Reynolds, as variáveis da solução exata das equações de Navier-Stokes são decompostas entre a média e os componentes flutuantes. [25] [29] Para os componentes de velocidade temos:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3.15)$$

onde  $\bar{u}_i$  e  $u'_i$  são os componentes de velocidade média e flutuante, respectivamente ( $i = 1, 2, 3$ ).

Da mesma forma, para pressão e outras quantidades escalares temos:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (3.16)$$

onde  $\Phi$  denota um escalar como pressão, energia ou concentração de espécies.

Substituindo as expressões dessa forma para as variáveis do escoamento na continuidade instantânea e nas equações de momento, e tirando uma média no tempo, temos as equações de média de momento. Elas podem ser escritas na forma cartesiana:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\overline{\rho u'_i u'_j}) \quad (3.18)$$

As Equações (3.17) e (3.18) são chamadas de Equações de Navier-Stokes de Média de Reynolds. Elas têm a mesma forma geral que as equações instantâneas, mas com a velocidade e as demais variáveis representadas como médias. Essas tensões de Reynolds  $-\overline{\rho u'_i u'_j}$  são incógnitas adicionais que devem ser modeladas para fechar o sistema de equações governantes.

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \begin{pmatrix} -\overline{\rho u'^2} & -\overline{\rho u'v'} & -\overline{\rho u'w'} \\ -\overline{\rho u'v'} & -\overline{\rho v'^2} & -\overline{\rho v'w'} \\ -\overline{\rho u'w'} & -\overline{\rho v'w'} & -\overline{\rho w'^2} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

### 3.3.2 Modelo k- $\omega$ SST

MENTER [30] notou que os resultados do modelo  $k-\epsilon$  são adequados para capturar as propriedades do escoamento livre, porém insatisfatórios para tratar dos efeitos da camada limite com gradientes de pressão adversos. Isso o levou a desenvolver um modelo híbrido, o  $k-\omega$  SST (*ShearStressTransport*), que combina as vantagens dos dois métodos  $k-\omega$  e  $k-\epsilon$ . Enquanto o modelo  $k-\omega$  é usado na região próxima à parede, o modelo  $k-\epsilon$  é usado na região de escoamento turbulento completamente desenvolvido, longe da parede.

Ele é, portanto, muito mais estável e o melhor modelo para aplicações gerais, além de ter fácil convergência, justificando sua escolha. Suas equações são derivadas das equações de média de Reynolds (RANS) e estão descritas a seguir [31].

Energia cinética turbulenta,  $k$ :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \nu_t \left( \frac{1}{F_1^{-1} \sigma_{k1}} + \frac{1}{(1-F_1)^{-1} \sigma_{k2}} \right) \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \beta_k k \omega. \quad (3.20)$$

Taxa de dissipação específica,  $\omega$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \nu_t \left( \frac{1}{F_1^{-1} \sigma_{\omega 1}} + \frac{1}{(1-F_1)^{-1} \sigma_{\omega 2}} \right) \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ &+ (1-F_1) \frac{2}{\sigma_{\omega 2} \nu} \left( \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right) - [F_1 \beta_{\omega 1} + (1-F_1) \beta_{\omega 2}] \omega^2 + [F_1 \alpha_1 + (1-F_1) \alpha_2] \frac{\omega}{k} P_k, \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde:

$$P_k = \nu_t \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij}. \quad (3.22)$$

Instabilidades numéricas podem ser causadas pelas diferenças na viscosidade dos dois modelos. Sendo assim, são utilizadas as funções de mistura,  $F_1$  e  $F_2$ , para alcançar uma transição suave entre os dois modelos. Elas são fundamentais para tornar o método viável e são baseadas na distância da superfície e nas variáveis de escoamento. Ambas são similares e podem ser definidas como:

$$F_1 = \tanh(\arg^4) \quad (3.23)$$

onde,

$$arg = \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta_k \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_\omega \sigma_{\omega 2} y^2} \right] \quad (3.24)$$

e

$$CD_\omega = \max \left[ 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right]. \quad (3.25)$$

A viscosidade turbulenta,  $\nu_t$ , é limitada para prevenir o acúmulo em regiões estagnadas e é definida por:

$$\nu_t = \frac{\alpha k}{\max(\alpha \omega, SF_2)}, \quad (3.26)$$

onde  $S$  é uma medida invariante da taxa de deformação. As constantes presentes nas equações assumem os seguintes valores:

- $\alpha_1 = 2$ ;
- $\alpha_2 = 1$ ;
- $\alpha_{w1} = 2$ ;
- $\alpha_{w2} = 1/0,856$ ;
- $\beta_k = 9/100$ ;
- $\beta_{w2} = 0,0828$ .

### 3.4 Modelo de Condução de Calor na Vareta Combustível

O objetivo primário de uma análise térmica é determinar os campos de temperatura nos domínios e o fluxo de calor nas paredes do canal, de forma a verificar se a operação do reator encontra-se dentro dos parâmetros do projeto. [32]

A partir da equação de Fourier, obtemos o fluxo de calor superficial, sendo:

$$\vec{q}'' = -k \frac{\partial T}{\partial n} \vec{n} \quad (3.27)$$

para o caso de condução, onde  $k$  é a condutividade térmica do material e  $\vec{n}$  o vetor unitário normal à superfície, e

$$\vec{q}'' = h(T_w - T_b) \vec{n} \quad (3.28)$$

para o caso de convecção, onde  $h$  é o coeficiente de convecção,  $T_w$  a temperatura na parede e  $T_b$  a temperatura no domínio fluido.

Então, podemos escrever de forma geral a equação da energia:

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = -\nabla \cdot \vec{q}'' + q''' + \beta T \frac{DP}{Dt} + \phi \quad (3.29)$$

onde é conhecido o campo de velocidade, pressão ( $P$ ) e a geração volumétrica ( $q'''$ ).

### 3.4.1 Geração de calor na vareta

No entanto, nem sempre as equações de transferência de calor possuem uma notação eficaz para o problema proposto. No caso de um combustível nuclear, a geração de calor é volumétrica ( $q'''$ ). Então, podemos, por meio de uma correlação [33], relacionar os fluxos superficial ( $q''$ ) e linear ( $q'$ ).

$$\dot{Q} = N \langle \dot{q} \rangle = NL \langle q' \rangle = NL\pi D_{co} \langle q''_{co} \rangle = NL\pi R_f^2 \langle q''' \rangle, \quad (3.30)$$

onde  $\dot{Q}$  é a potência do núcleo,  $N$  é o número total de varetas combustíveis no núcleo,  $\dot{q}$  é a taxa de geração de calor por vareta,  $L$  é o comprimento ativo (com geração de calor),  $D_{co}$  é o diâmetro externo da vareta combustível e  $R_f$  é o raio da pastilha combustível.

### 3.4.2 Equação fundamental da calorimetria

A variação de temperatura proveniente da transferência de uma quantidade total de calor,  $Q$ , pode ser estimada analiticamente para escoamentos incompressíveis. Considerando que toda a energia gerada é transferida para o fluido, temos:

$$Q = \dot{m} C_p (T_{out} - T_{in}) \quad (3.31)$$

sendo  $T_{in}$  a temperatura de entrada do fluido,  $\dot{m}$  a vazão mássica,  $C_p$  o calor específico do fluido. Logo, sabendo esses parâmetros e rearranjando a equação, podemos calcular a temperatura de saída do fluido,  $T_{out}$ :

$$T_{out} = \frac{Q}{\dot{m} C_p} + T_{in} \quad (3.32)$$

### 3.4.3 Parâmetros adimensionais

#### Número de Nusselt (Nu)

A diferença entre as temperaturas da parede e a média no fluido podem ser obtidas através do coeficiente de transferência de calor  $h$  e do número de Nusselt, definido como [33]:

$$Nu = \frac{h D_H}{k} \quad (3.33)$$

onde,

$$D_H = \frac{4A}{P_w} \quad (3.34)$$



sendo  $D_H$  o diâmetro hidráulico,  $A$  é a área da seção transversal do escoamento e  $P_w$  o perímetro molhado.

A forma geral do número de Nusselt é obtida através da análise da camada limite. Portanto, frequentemente são necessários experimentos para definir a correlação adequada para cada tipo de problema. Para escoamentos turbulentos completamente desenvolvidos ao longo de varetas combustíveis, o número de Nusselt pode desviar significativamente devido à não uniformidade da geometria dos subcanais.

No entanto, o valor do número de Nusselt é praticamente independente das condições de contorno em fluidos não metálicos para o número de Prandtl maior que 0,7. Então, uma maneira usual de representar uma correlação de número de Nusselt para escoamentos completamente desenvolvidos é através de  $Nu$  como produto de  $Nu_\infty$  para um tubo circular, multiplicado por um fator de correção:

Correlação de Presser [33]:

$$Nu = Nu_\infty \psi, \quad (3.35)$$

onde  $Nu_\infty$  é a própria correlação de Dittus-Boelter [32].

$$Nu_\infty = 0,023Re^{0,8}Pr^{0,4}, \quad (3.36)$$

onde  $Re$  é o número de Reynolds:

$$Re = \frac{\rho V_m D_H}{\mu} \quad (3.37)$$

e  $Pr$  o número de Prandtl:

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k} \quad (3.38)$$

e, no caso de um arranjo infinito triangular e com  $1,05 < P/D < 2,2$ ,

$$\psi = 0,9090 + 0,0783 \frac{P}{D} - 0,1283e^{-2,4(\frac{P}{D}-1)}, \quad (3.39)$$

sendo  $P/D$  a razão entre Pitch e diâmetro.

### Fator de atrito turbulento

Uma expressão usada para o fator de atrito é a equação de Karman-Nikuradse [33], que devido à sua complexidade para ser usada na prática, é preferível utilizar correlações simplificadas. Dois exemplo delas, para tubos lisos, é a Correlação de Blasius para  $Re < 30.000$ :

$$f = 0,316Re^{-0,25}, \quad (3.40)$$

e a Correlação de McAdams [34] para  $30.000 < Re < 1.000.000$ :

$$f = 0,184Re^{-0,2}. \quad (3.41)$$

Cheng e Todreas[33] formularam polinômios nos quais o fator de atrito médio no feixe de varetas é obtido por meio do fator de atrito no subcanal. Estes foram feitos assumindo que a diferença de pressão através de todos os subcanais é a mesma e aplicando a condição do balanço de massa para o escoamento total no feixe de varetas em termos do escoamento no subcanal. Então, substituindo os coeficientes adequados para o caso aqui estudado, temos uma correlação específica para o fator de atrito na vareta em um subcanal interior de arranjo hexagonal:

$$f \equiv \frac{C}{Re^n}, \quad (3.42)$$

onde  $n = 0.18$  para escoamento turbulento e

$$C = 0,1458 + 0,03632(P/D - 1) - 0,03333(P/D - 1)^2. \quad (3.43)$$

Fator de atrito:

$$f = \frac{8\tau_w}{\rho u^2}, \quad (3.44)$$

onde  $\tau_w$  é a tensão cisalhante na parede (em Pa):

$$\tau_w = \frac{1}{8}f\rho V_m^2. \quad (3.45)$$

A partir do fator de atrito também podemos obter a queda de pressão:

$$\Delta P = \frac{1}{2} \frac{L}{D} f \rho V_m^2, \quad (3.46)$$

onde  $L$  é o comprimento por onde passa o fluido.

### **Velocidade adimensional: $U^+$**

A velocidade adimensional do escoamento é definida como a relação entre a velocidade do escoamento em certo ponto,  $u$ , com a velocidade de atrito na parede.

$$U^+ = \frac{u}{\sqrt{\tau_w/\rho}} \quad (3.47)$$

### **Coordenada adimensional: $y^+$**

Há a necessidade da introdução de um parâmetro que, de acordo com o modelo de turbulência adotado, caracteriza o tamanho do elemento de malha mais próximo à parede. Ele é definido como:

$$y^+ = \frac{uy}{\nu} \quad (3.48)$$

onde  $y$  é a distância da parede mais próxima,  $\nu$  é a viscosidade dinâmica do fluido e  $u$  é a velocidade do fluido.

## 3.5 Fluidodinâmica Computacional (CFD)

A fluidodinâmica computacional é a ciência que prediz o escoamento de fluidos, transferência de calor, reações químicas e outros fenômenos relacionados através de simulações numéricas feitas no computador. Para tal, ela resolve equações de conservação de massa, momento e energia. Sendo assim, ela é uma técnica potente extremamente usada em diversos processos de engenharia, complementando testes e experimentos, ao reduzir o esforço e custo necessários para realização dos mesmos. [26]

### 3.5.1 Método dos Volumes Finitos

O Fluent utiliza o Método dos Volumes Finitos, no qual o domínio é discretizado em volumes de controle, onde são resolvidas, no centro da célula, as equações de conservação. [25] As equações diferenciais parciais são discretizadas em um sistema de equações algébricas, que, então, são resolvidas numericamente para chegar à solução.

Um volume de controle típico é ilustrados na Figura 3.4, onde uma célula contendo o nó P tem seis nós vizinhos, identificados com as letras maiúsculas, e seis faces, identificadas com letras minúsculas.

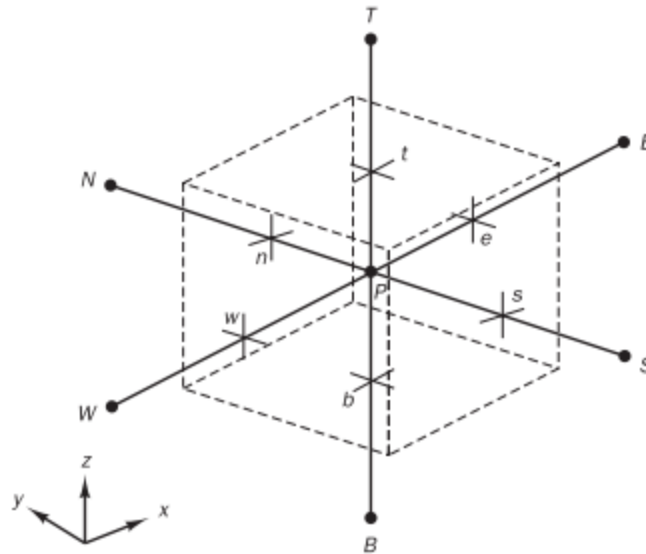


Figura 3.4: Uma célula em 3 dimensões e seus nós vizinhos [26]

### 3.5.2 Descrição das equações governantes

A equação de convecção-difusão estacionária, derivada da equação de transporte, pode ser definida como:

$$\text{div}(\rho \mathbf{u} \phi) = \text{div}(\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.49)$$

sendo a formulação integral em um volume de controle definida como:

$$\int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) dA = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma_\phi \nabla_\phi \phi) dA + \int_{CV} S_\phi dV \quad (3.50)$$

onde  $\phi$  é uma variável que pode assumir os valores listados na Tabela 3.1, segundo a propriedade que está sendo analisada,  $\Gamma_\phi$  é o coeficiente de difusão de  $\phi$  e  $S_\phi$  é o termo fonte.

Tabela 3.1: Valores de  $\phi$  de acordo com a propriedade analisada

Equação	$\Phi$
Continuidade	1
Momento em $X$	$u$
Momento em $Y$	$v$
Momento em $Z$	$w$
Energia	$E$

Essa equação representa o balanço do fluxo em um volume de controle, sendo a parte convectiva à esquerda, e a difusiva e o termo fonte à direita.

### 3.5.3 Metodologia CFD

Resolver as equações governantes e alcançar a solução do problema através da fluidodinâmica computacional exige seguir uma sequência de etapas pré-determinadas, estas apresentadas nesta seção [26].

#### Criação da Geometria

Após definidos os objetivos da modelagem, devemos definir espacialmente os domínios que queremos representar computacionalmente, sejam eles líquidos ou sólidos. A criação da geometria pode ser feita em qualquer programa de *Computer Aided Design* (CAD) que seja compatível com o ANSYS, sendo que no presente trabalho foi utilizado o software ANSYS-ICEM. Como sempre busca-se uma solução otimizada, tanto em resultados quanto em custo computacional, é preciso verificar a possibilidade de simplificar o problema por meio de simetrias, por exemplo.

#### Geração da Malha

Após criados os domínios, é necessário dividi-los em pequenas células de volumes de controle, onde serão resolvidas as equações governantes. O conjunto destas células forma a malha, que deve ser adequada para o problema que se quer resolver. A escolha do tipo de malha a ser utilizada depende de diversos aspectos, tais como:

- A complexidade do modelo geométrico;
- A precisão do resultado esperado;

- Os fenômenos que serão representados;
- A capacidade de processamento disponível.

Portanto, deve-se definir se a malha será estruturada, não estruturada ou híbrida, refinada ou grossa, se é necessário refino nas paredes para representar os efeitos da camada limite e o tipo de elemento: triangulares ou quadrangulares (2D), tetraédricos ou hexaédricos (3D).

No caso deste trabalho, foram utilizadas malhas estruturadas, sob a forma de hexaedros, que possuem o mesmo número de vizinhos, para melhor aproveitamento do método numérico com alcance de resultados mais rápidos. O mesmo software ANSYS-ICEM foi utilizado, onde, através da estratégia multibloco, um bloco inicial foi criado e associado à geometria formada por pontos, linhas e superfícies.

### **Definição do problema**

Uma vez obtidos os domínios discretizados com a criação da malha, é feita a exportação para o software onde são resolvidas as equações governantes, neste caso, o ANSYS-Fluent. Nele é feita a definição do solver, ou seja, o conjunto de dados que são alimentados pelo usuário que representa o problema físico. De forma geral, as informações são inseridas nas seguintes etapas:

- Definir a dinâmica da simulação: estacionária ou transiente;
- Definir os modelos físicos apropriados (tais como regime de escoamento e modelo de turbulência);
- Definir propriedades dos materiais;
- Definir os domínios fluidos e sólidos;
- Definir condições de operação e de contorno em todas as zonas;
- Definir valores iniciais;
- Definir os métodos de solução;
- Definir controles de solução;
- Definir critérios de convergência.

A localização e os tipos de condições de contorno são extremamente importantes para uma boa convergência e resultados acurados. A convergência, por sua vez, só é atingida quando as variáveis de uma iteração para outra são suficientemente próximas, de acordo com o critério definido. A acurácia da solução convergida depende do quão apropriado e acurados foram os modelos físicos escolhidos, as hipóteses feitas, a qualidade da malha e

os erros numéricos.

O método do solver pode ser baseado na pressão ou na densidade. Neste trabalho foi baseado na pressão, em que o campo de velocidade é obtido através da equação de momento, a conservação de massa através da correção da equação de pressão e a equação de energia é resolvida em sequência, assim como as demais equações escalares. Este tipo de solver é aplicável para uma grande quantidade de regimes de escoamento, desde os incompressíveis com baixa velocidade até os compressíveis com alta velocidade. Ele foi escolhido pois requer menos memória e permite que haja flexibilidade no processamento da solução, ao resolver as equações separadamente.

Já o método de solução escolhido foi o algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) por ser robusto e com rápida convergência. Ele realiza interpolações através do Método de Gauss para calcular a pressão nas células e, assim, computar o gradiente de pressão. As variáveis são interpoladas nas faces dos volumes de controle, resolvendo equações diferenciais de segunda ordem. O fluxograma do algoritmo SIMPLE é mostrado na Figura 3.5.

O ANSYS-Fluent requer que todas as variáveis da solução sejam inicializadas antes de começar as iterações. Neste trabalho é usada a inicialização híbrida, que faz uso de uma gama de métodos, devido à sua rapidez. Então, todas as demais variáveis são iniciadas através das médias nos domínios.

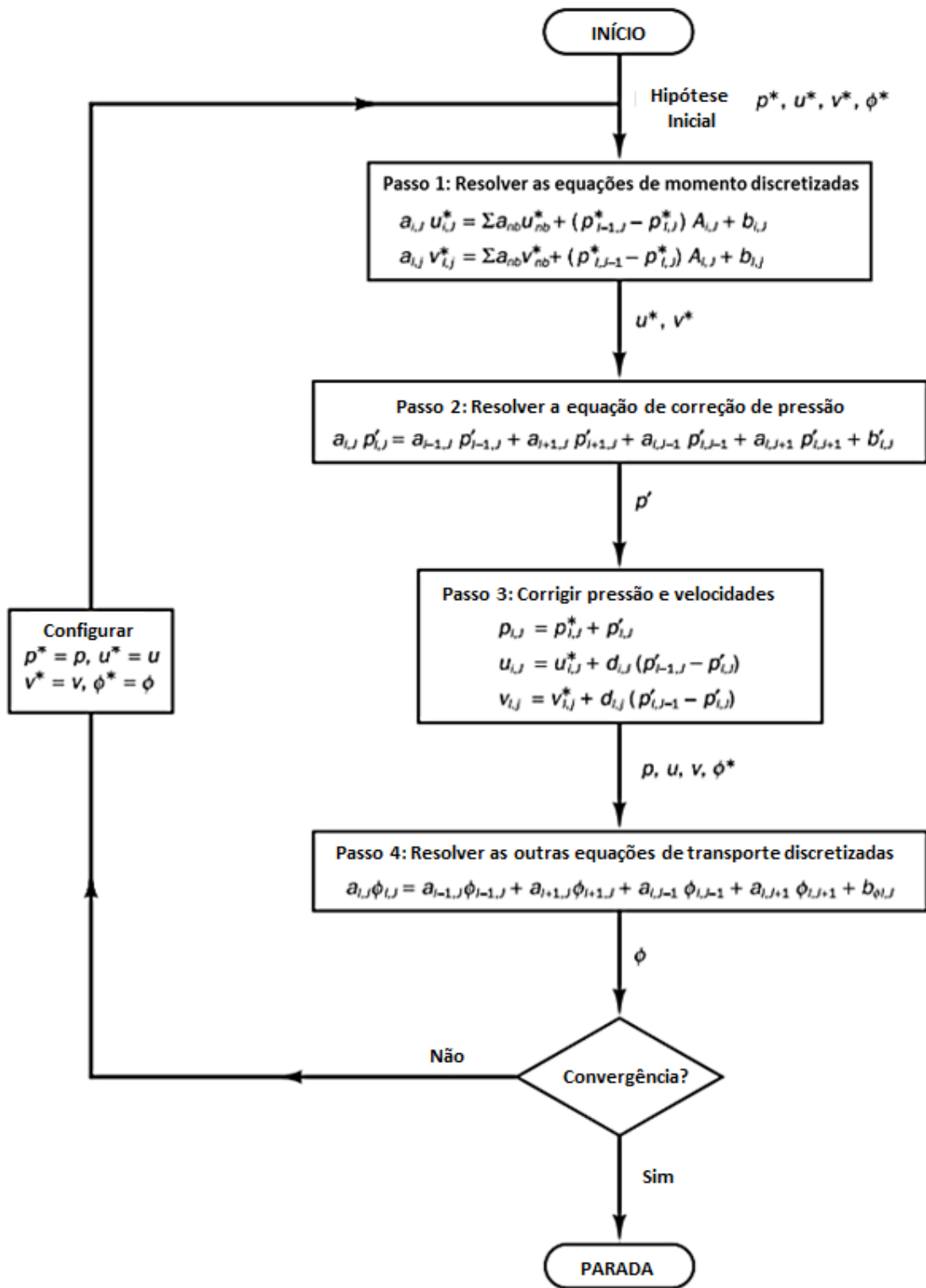


Figura 3.5: Algoritmo SIMPLE [26]

## **Processamento**

Após descrito o modelo físico na etapa anterior, dá-se início à simulação numérica, em que é feita integração das equações governantes do escoamento do fluido em todos os volumes de controles estabelecidos no domínio. Em seguida, é feita a discretização em que as equações integrais resultantes são convertidas em um sistema algébrico de equações. Só então as equações algébricas são resolvidas através de um método iterativo. Com o término deste processo, os dados podem ser processados a fim de verificar se as hipóteses estabelecidas, a malha e os modelos físicos definidos foram apropriados para representar o problema em questão.

## **Pós-Processamento**

A última etapa da simulação CFD consiste no tratamento dos dados obtidos. O pós-processamento pode ser realizado no próprio ANSYS-Fluent, de maneira limitada, ou no software CFD-Post. Neste último, é possível criar desde gráficos de contorno na linha, superfície ou volume de interesse até gradientes de pressão e temperatura ou gráficos de variações. Ambos os softwares foram utilizados nesse trabalho para a realização desta etapa.

## **Verificação e validação**

Os resultados obtidos pela simulação numérica do CFD estão sujeitos à uma série de erros e incertezas. Portanto, eles devem ser verificados e validados primeiramente para que tenham utilidade prática. Os erros são uma deficiência do modelo CFD que não são causados por falta de conhecimento, podendo ser de natureza numérica, como erros de arredondamento, discretização ou falta de convergência, erros no software ou erros humanos devido ao uso incorreto do software. Por outro lado, a incerteza é uma possível falha do modelo CFD causada pela falta de conhecimento, podendo ser proveniente da má representação do modelo físico, seja por informações limitadas, representação errada da geometria ou condições de contorno ou as simplificações excessivas e incorretas do processo.

Como os modelos matemáticos utilizados na engenharia descrevem fenômenos extremamente complexos e não-lineares, é importante analisar se os resultados obtidos são consistentes com a realidade, isto é, se o modelo tende à solução analítica, e a estabilidade da solução. Por meio desta etapa verifica se o modelo foi capaz de reproduzir o problema físico em questão.

## **Funções definidas pelo usuário - UDF**

Um dos motivos para utilização do software ANSYS-Fluent no presente trabalho foi a possibilidade de customizar o código através de funções definidas pelo usuário (User defined functions - UDF), que permitem a implementação de modelos matemáticos inexistentes no software. Elas são escritas na linguagem de programação C, com a definição de novas



equações em macros pré existentes, capazes de acessar o solver para realizar novos cálculos. Sendo assim, o solver pode ser modificado a fim de atender necessidades específicas.

# Capítulo 4

## Resultados e discussões

Neste capítulo foi realizada, primeiramente, a validação das propriedades do CO<sub>2</sub> supercrítico, fator essencial para as análises deste trabalho. Depois, seguindo as etapas da metodologia CFD apresentada no capítulo anterior, foram feitas as simulações do subcanal do MMR. Então, foram analisados os resultados encontrados.

### 4.1 Validação das Propriedades do CO<sub>2</sub> Supercrítico

A fim de validar os métodos de implementação para as propriedades do CO<sub>2</sub>, usadas futuramente nas simulações do escoamento no subcanal do feixe de varetas, o mesmo fluido foi simulado em um tubo circular vertical para quatro diferentes casos variando a vazão mássica, a pressão e o fluxo térmico na parede. Os resultados obtidos foram comparados com os dados experimentais obtidos por KIM e KIM [6] e os numéricos obtidos por BOVARD *et al.* [8].

#### Modelo geométrico do tubo

O modelo utilizado na simulação é constituído por um cilindro de aço inoxidável 316L, com diâmetro interno e externo de 4,5 mm e 6,3 mm, respectivamente, e altura de 0,9 m, como ilustrado na Figura 4.1. O CO<sub>2</sub> escoava pelo interior do tubo com as condições fixas na entrada de vazão mássica e temperatura. A parede externa do cilindro recebe um fluxo térmico constante, enquanto a parede interna está em contato com o domínio fluido.

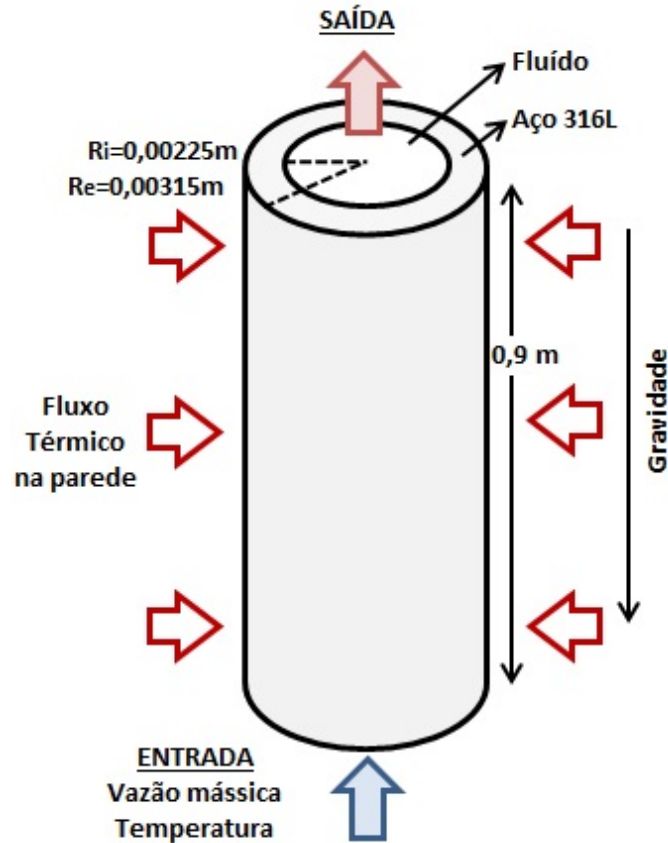


Figura 4.1: Modelo geométrico do tubo circular.

### Propriedades do tubo

Os valores das propriedades do  $\text{CO}_2$  são um fator determinante para uma análise correta do processo termodinâmico. O código de CFD utilizado permite que essas propriedades sejam introduzidas de diversas maneiras como valores constantes ou variáveis, por meio de tabelas ou correlações polinomiais programadas em linguagem C. Entretanto, sua biblioteca contém a ferramenta REFPROP (Reference fluid properties) desenvolvida pelo National Institute of Standards and Technology (NIST) e que habilitada por meio de uma “User-defined function” (UDF) disponibiliza propriedades para simulações com gases reais. O presente trabalho faz uso desta técnica, não somente para o dióxido de carbono, como também para o hélio, o qual constitui o interstício da vareta combustível.

A condutividade térmica do aço 316L, material constituinte do tubo, foi implementada por um polinômio de segundo grau:

$$k_s = 6,31 + 27,2 \times 10^{-3T} - 7,0 \times 10^{-6T^2} \quad (4.1)$$

onde  $T$  é a temperatura do material [35].

O calor específico à pressão constante foi implementado por meio dos valores da Tabela

4.1. A densidade foi considerada constante, com o valor de  $7960 \text{ kg/m}^3$ .

Tabela 4.1: Calor específico à pressão constante do aço 316L [35]

Temperatura [K]	Cp [J/kg K]
363,15	486
473,15	528
593,15	548
703,15	565
813,15	573
923,15	586
1033,15	615
1143,15	649

### Malha do tubo

Um estudo de análise de convergência de malha consiste em resolver o mesmo caso progressivamente em malhas cada vez mais refinadas para obter a malha com o melhor compromisso entre precisão e custo computacional. Cada malha é significativamente mais refinada que a anterior e a cada simulação um parâmetro de interesse é avaliado e comparado. Quando este valor se estabiliza e os erros não são mais significantes, vemos que a malha convergiu.

Para este modelo, foram desenvolvidas 9 malhas, todas utilizando o refino próximo à parede com valores de  $y^+$  menores do que 1, assegurando que haja um tratamento adequado dos efeitos da camada limite, provocados pela viscosidade.

O modelo de turbulência  $k-\omega$  SST foi escolhido graças à sua qualidade em capturar adequadamente o comportamento do escoamento próximo à parede. As simulações foram feitas sem ativação da equação da conservação de energia e com propriedades do  $\text{CO}_2$  constantes.

Tabela 4.2: Análise de perda de carga das malhas

Malha	Nós	Perda de Carga (MPa)	Erro Relativo
Malha 01	79040	0,002109	-
Malha 02	142560	0,002155	1,58%
Malha 03	267600	0,002189	1,42%
Malha 04	887760	0,002220	0,36%
Malha 05	1624320	0,002228	0,04%
Malha 06	2263800	0,002229	0%
Malha 07	3047600	0,002229	0%
Malha 08	4087440	0,002229	0%

Através da Tabela 4.2 e da Figura 4.2 pode-se observar que a malha de número 6 possui a melhor correlação entre precisão e velocidade de cálculo procurada, sendo, portanto, a malha escolhida para a continuação das simulações. Na Figura 4.3 essa malha é representada ao lado de uma malha grosseira e de uma mais refinada.

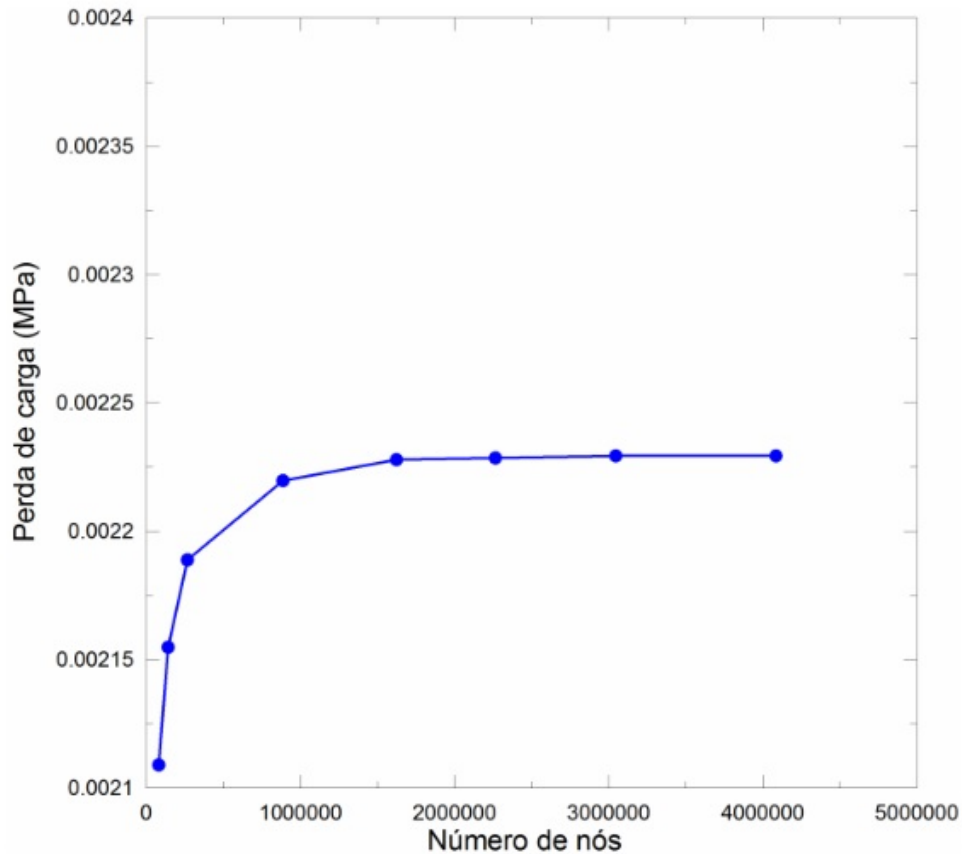


Figura 4.2: Perda de pressão versus número de nós

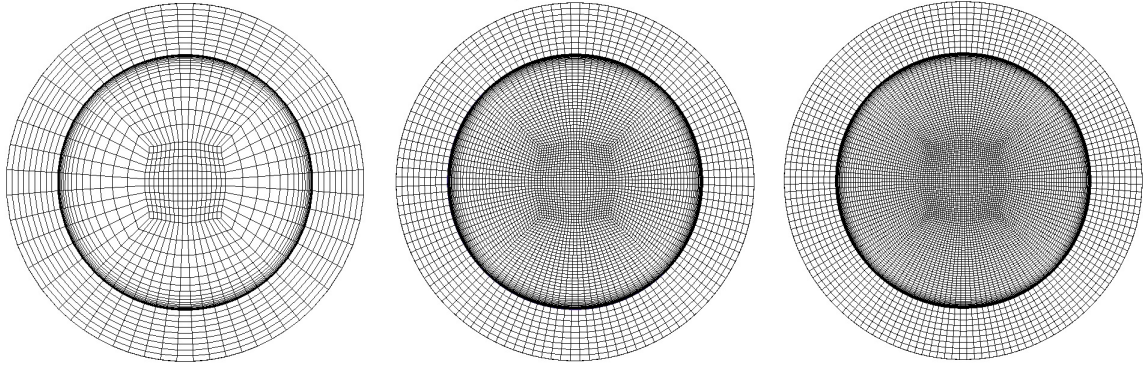


Figura 4.3: Representação radial das malhas 03, 06 e 08, respectivamente

## Resultados

Os quatro casos simulados são descritos na Tabela 4.3. Todos possuem temperatura de entrada do dióxido de carbono no tubo de 304,5 K, na qual o fluido se torna supercrítico. Entretanto, outras condições operacionais como pressão, vazão mássica e fluxo térmico foram variadas seguindo os valores descritos na tabela a seguir:

Tabela 4.3: Condições operacionais dos casos simulados

	Pressão (MPa)	Vazão mássica (kg/s)	$q''$ (kW/m <sup>2</sup> )
Caso 1	7,621	0,003753344	52
Caso 2	8,419	0,000015904	83
Caso 3	7,745	0,007777056	85
Caso 4	8,335	0,010544352	62

Os resultados apresentados nas Figuras 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 demonstraram um bom comportamento da temperatura média do fluido,  $T_b$ , no início do tubo, porém as divergências aumentam na sua segunda metade como resultado dos valores imprecisos para as propriedades termofísicas do gás simulado. Por outro lado, pode-se observar que os resultados se tornam mais coerentes com os valores da literatura quanto maior a vazão mássica. No caso 4, por exemplo, apesar da temperatura da parede,  $T_w$ , ser maior do que os dados obtidos por KIM e KIM [6] e BOVARD *et al.* [8], a curva possui o mesmo comportamento.

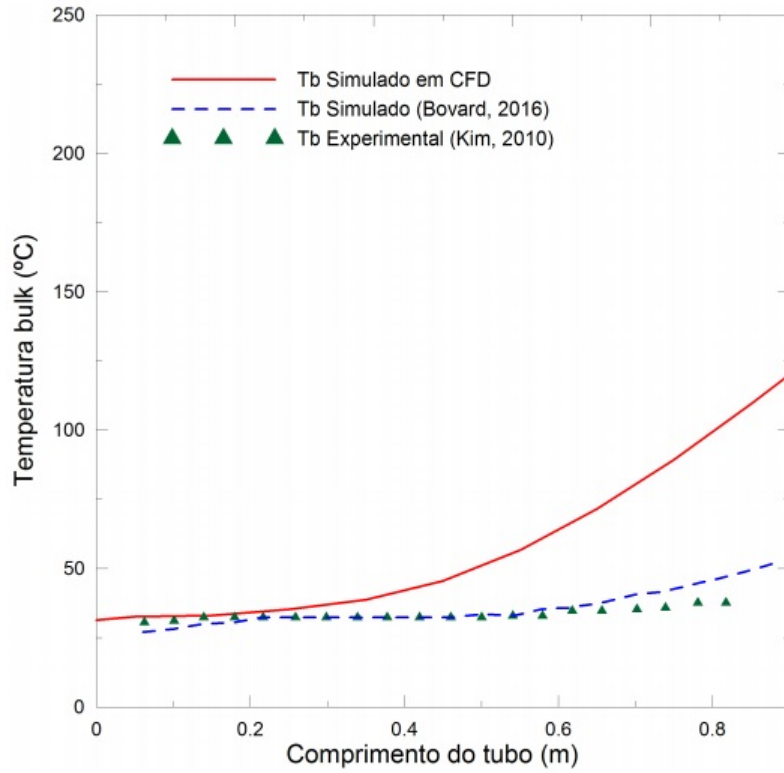


Figura 4.4: Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 1

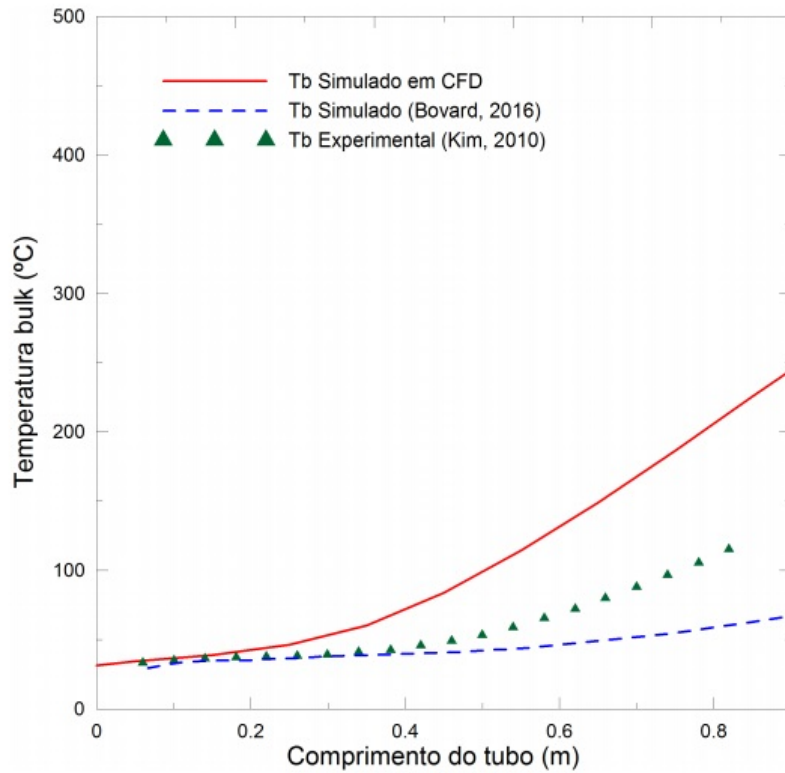


Figura 4.5: Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 2

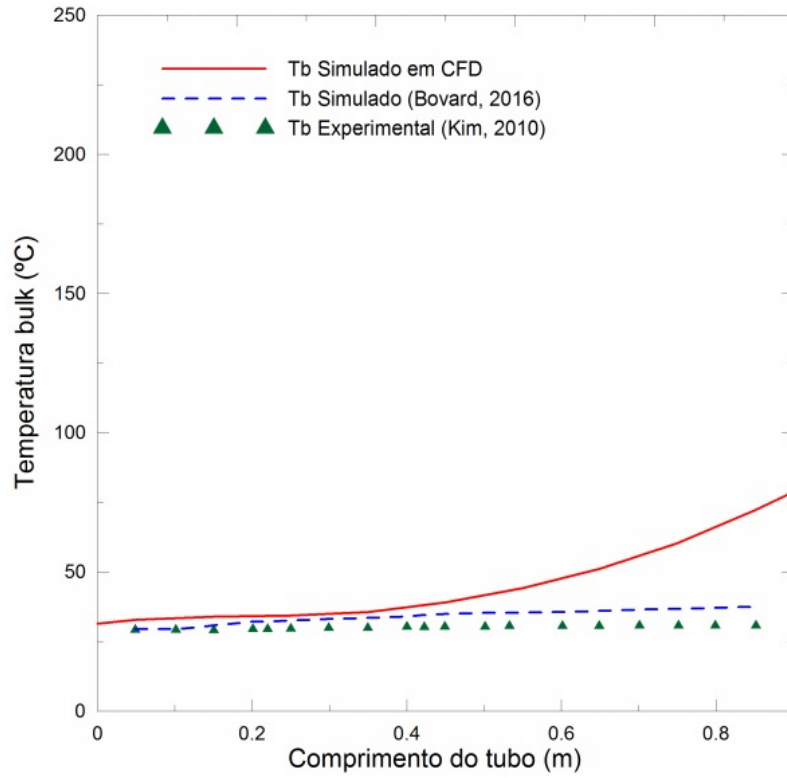


Figura 4.6: Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 3

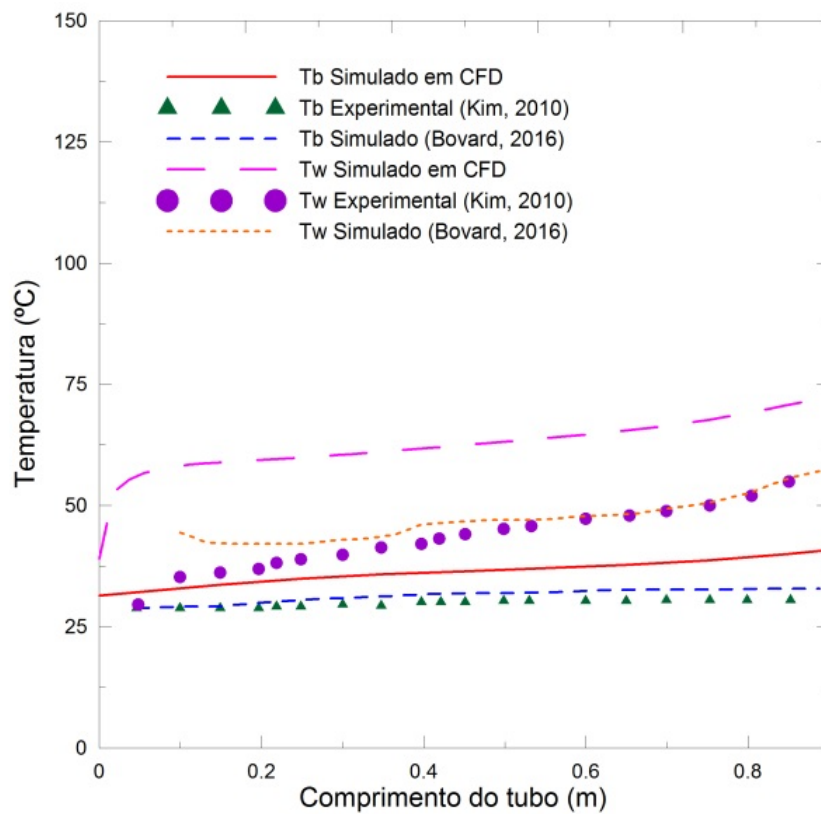


Figura 4.7: Temperatura média do fluido ao longo do tubo para o caso 4



Percebe-se, portanto, uma discrepância entre os resultados aqui obtidos e os dados da literatura. Isso pode se dar pela incapacidade do modelo de turbulência utilizado de reproduzir acuradamente o comportamento do fluido em regiões próximas às condições críticas ou pela não concordância nas definições de temperatura média no fluido,  $T_b$ , utilizadas pelos autores citados.

Conclui-se que os resultados numéricos tiveram maior concordância com a literatura com o aumento da vazão mássica, permitindo validar as correlações para o  $\text{CO}_2$  em casos de vazão mássica elevada e prosseguir com as simulações no subcanal.

## 4.2 Subcanal do MMR

A seguir são apresentados os parâmetros geométricos e físicos da vareta combustível e do fluido refrigerante presentes no subcanal do MMR. Então, é definida a malha a ser utilizada para o estudo, após realizada uma análise de convergência de malha, e são introduzidas as condições iniciais e de contorno.

### 4.2.1 Especificações geométricas e físicas

Suas dimensões são explicitadas na Tabela 4.4 e sua configuração na Figura 4.8, de acordo com o que foi proposto para o modelo de reator KAIST MMR no trabalho de YU *et al.* [2].

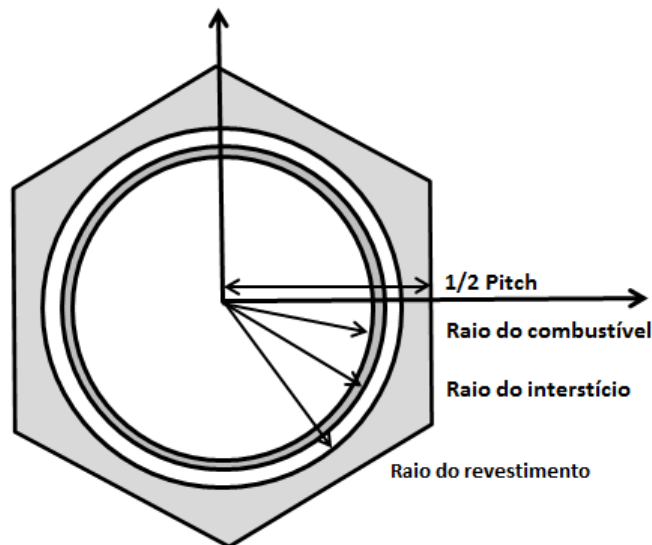


Figura 4.8: Representação geométrica axial do subcanal

Tabela 4.4: Parâmetros do projeto do KAIST MMR [2].

Raio do combustível (m)	$0,69 \times 10^{-2}$
Raio do Interstício (m)	$0,7 \times 10^{-2}$
Raio do revestimento (m)	$0,75 \times 10^{-2}$
Pitch (m)	$1,695 \times 10^{-2}$
Dimensões axiais do combustível (m)	0,4 / 1,2 (ativa) / 1,2
Altura ativa (m)	1,2

## 4.2.2 Propriedades dos sólidos

As propriedades do revestimento [33], feito de liga de zircônio, foram consideradas constantes, usando os valores para densidade, calor específico e condutividade térmica, de  $7200 \text{ kg/m}^3$ ,  $330 \text{ J/kgK}$  e  $13 \text{ W/mK}$ , respectivamente.

Para o combustível, constituído de Monóxido de Urânio (UN), o valor introduzido para a densidade foi  $13550 \text{ kg/m}^3$ . A condutividade térmica foi dada por uma correlação [36] implementada através de uma UDF:

$$k_s = 1,37T^{0,41}, \quad (4.2)$$

onde  $T$  é a temperatura do material. O calor específico à pressão constante foi implementado usando valores presentes na Tabela 4.5 e foram implementados no software usando uma interpolação linear.

É importante mencionar que este combustível tem uma temperatura alta de fusão, em torno de  $3078\text{K}$ .

Tabela 4.5: Calor específico do UN à pressão constante de  $20 \text{ MPa}$  [37].

Temperatura (K)	$C_p$ (J/kg K)
300	190,11
400	204,55
500	213,35
600	220,16
700	225,97
800	231,12
900	236,10
1000	240,75

## 4.2.3 Malha

Apesar de constituir uma malha mais complexa, sua análise de convergência foi realizada pelos mesmos procedimentos utilizados para o tubo simulado anteriormente, com

modelo de turbulência  $k-\omega$  SST. Para este modelo, foram desenvolvidas 7 malhas, todas utilizando o refino próximo à parede com valores de  $y^+$  menores do que 1, assegurando que haja um tratamento adequado dos efeitos da camada limite, provocados pela viscosidade. As simulações também foram feitas sem ativação da equação da conservação de energia e com propriedades do  $\text{CO}_2$  constantes.

Tabela 4.6: Análise de perda de carga das malhas

Malha	Nós	Perda de Carga (MPa)	Erro Relativo
Malha 01	376134	0,019714649	-
Malha 02	670814	0,024510815	19,6%
Malha 03	1036662	0,026540813	7,6%
Malha 04	1473678	0,027534708	3,6%
Malha 05	1981862	0,027972021	1,6%
Malha 06	2561214	0,028268935	1,1%
Malha 07	3211734	0,028177599	0,3%

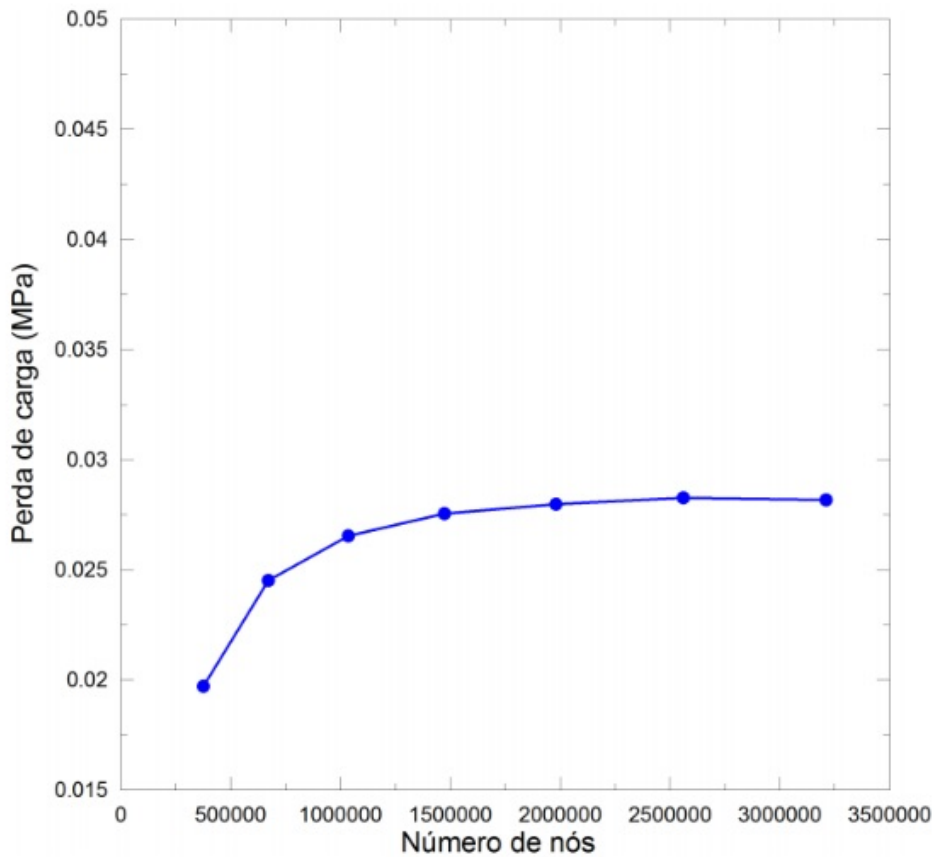


Figura 4.9: Perda de pressão versus número de nós

Observa-se, através da Tabela 4.6 e da Figura 4.9, que a malha de número 5 possui uma boa precisão e um baixo custo computacional em relação às malhas com mais elementos, sendo, portanto, a malha escolhida para as simulações do subcanal. Na Figura 4.10 essa

malha é representada ao lado de uma malha mais grosseira, à esquerda, e de uma mais refinada, à direita.

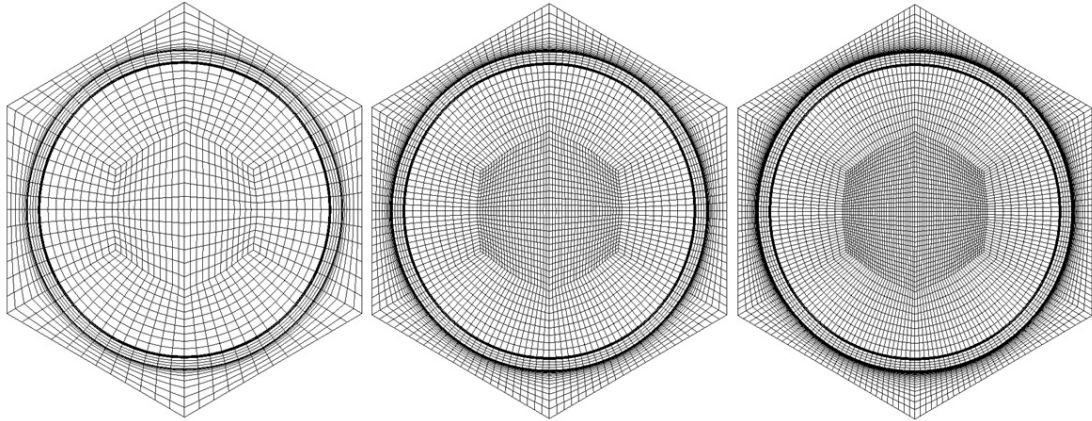


Figura 4.10: Representação radial das malhas 03, 05 e 07, respectivamente.

#### 4.2.4 Condições de Contorno e Iniciais

Uma vez convergida a malha, objetiva-se prosseguir o estudo do escoamento no subcanal utilizando-se as condições de operação típicas de um reator MMR [2], sintetizadas na Tabela 4.7, sendo capaz de descrever o comportamento do  $\text{CO}_2$  supercrítico no interior desses reatores.

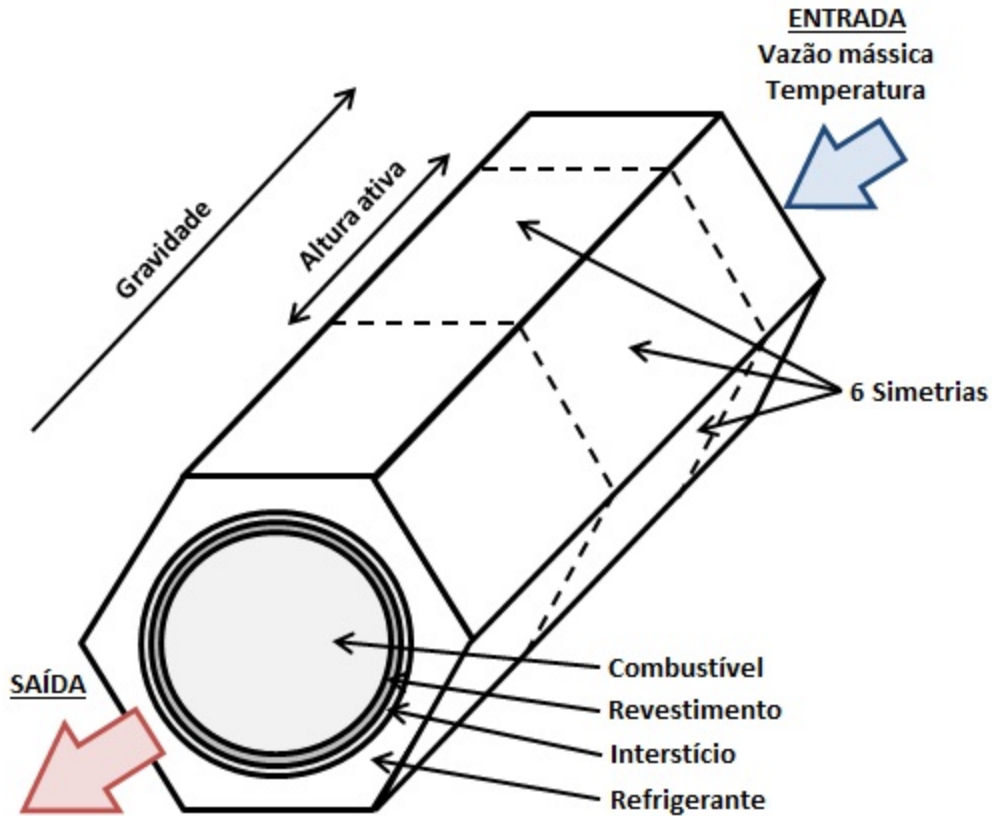


Figura 4.11: Domínio da simulação e condições de contorno

Tabela 4.7: Condições de contorno

Pressão do fluido (MPa)	20
Temperatura de entrada (K)	655
Vazão (kg/s)	0,0699579
Geração de calor volumétrico (kW/m <sup>3</sup> )	$8,45 \times 10^7$

### 4.3 Simulações e Resultados

Para a simulação, o subcanal foi inicializado frio, com  $T=655$  K, e, ao longo das iterações, todos os seus domínios foram sendo aquecidos devido à geração de calor volumétrica no combustível. Esse processo de aquecimento gradual para a temperatura média na saída do refrigerante do subcanal, até que ele atinja variações de  $10^{-7}$ , escolhido como critério de convergência, é mostrado na Figura 4.12. Apesar de o gráfico ser somente para a temperatura de saída, todas as temperaturas médias nos demais domínios apresentam comportamento semelhante.

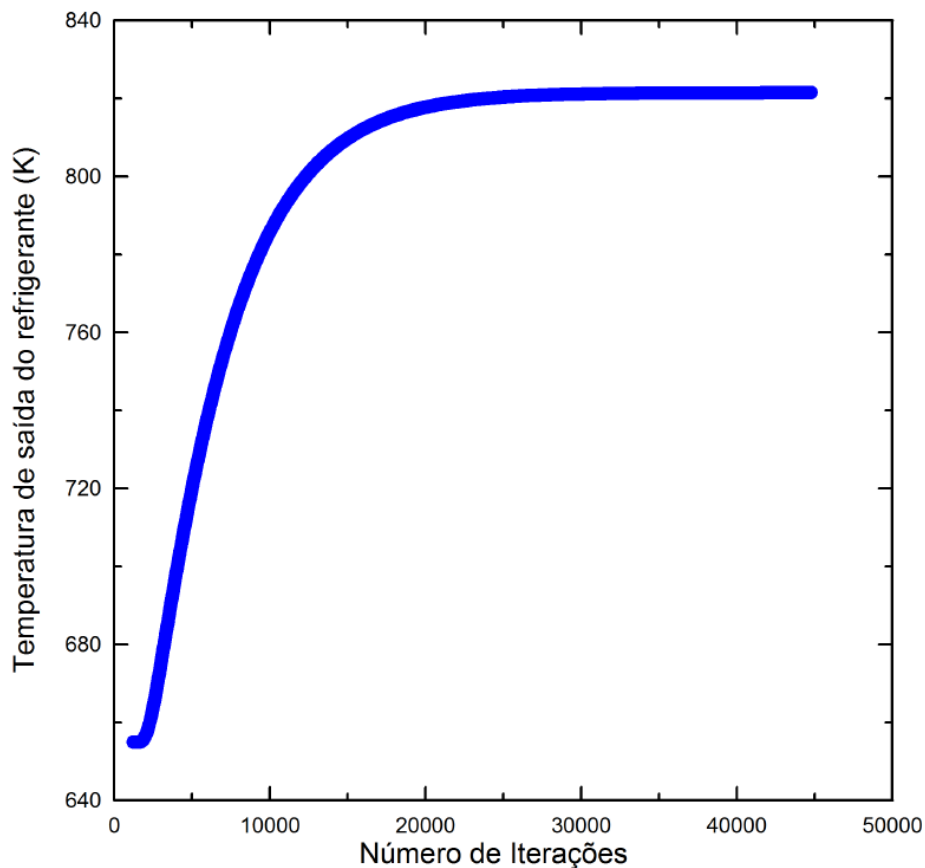


Figura 4.12: Convergência da temperatura na saída do fluido

Os campos de velocidade e temperatura na direção radial são representados em três posições do subcanal ( $Z = -1,0\text{m}$ ,  $Z = 0\text{m}$ , central, e  $Z = 1,00\text{m}$ ), como pode ser visto nas Figuras 4.13 e 4.14.

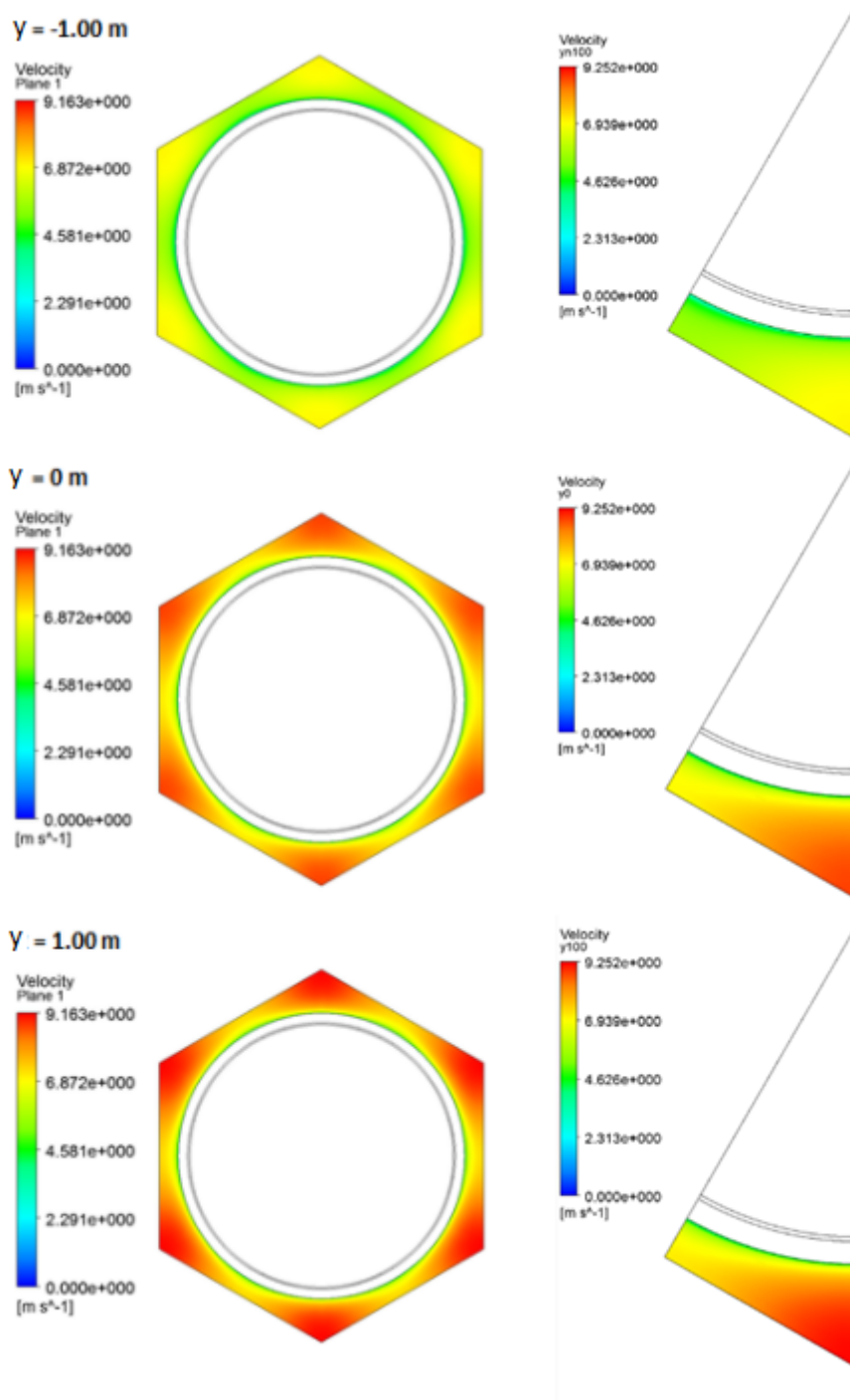


Figura 4.13: Campo de velocidade em m/s para o subcanal e a subfatia em 3 posições.

A fim de simplificar as simulações e reduzir o custo computacional, o subcanal foi dividido em 12 partes. Os resultados numéricos obtidos tanto para o subcanal, quanto para a subfatia, e os calculados por [2] encontram-se na Tabela 4.8. Além disso, os campos de velocidade e temperatura na direção radial também são representados em três posições da subfatia ( $Z = -1,0\text{m}$ ,  $Z = 0\text{m}$ , central, e  $Z = 1,00\text{m}$ ), as mesmas do subcanal, como

pode ser visto nas Figuras 4.13 e 4.14.

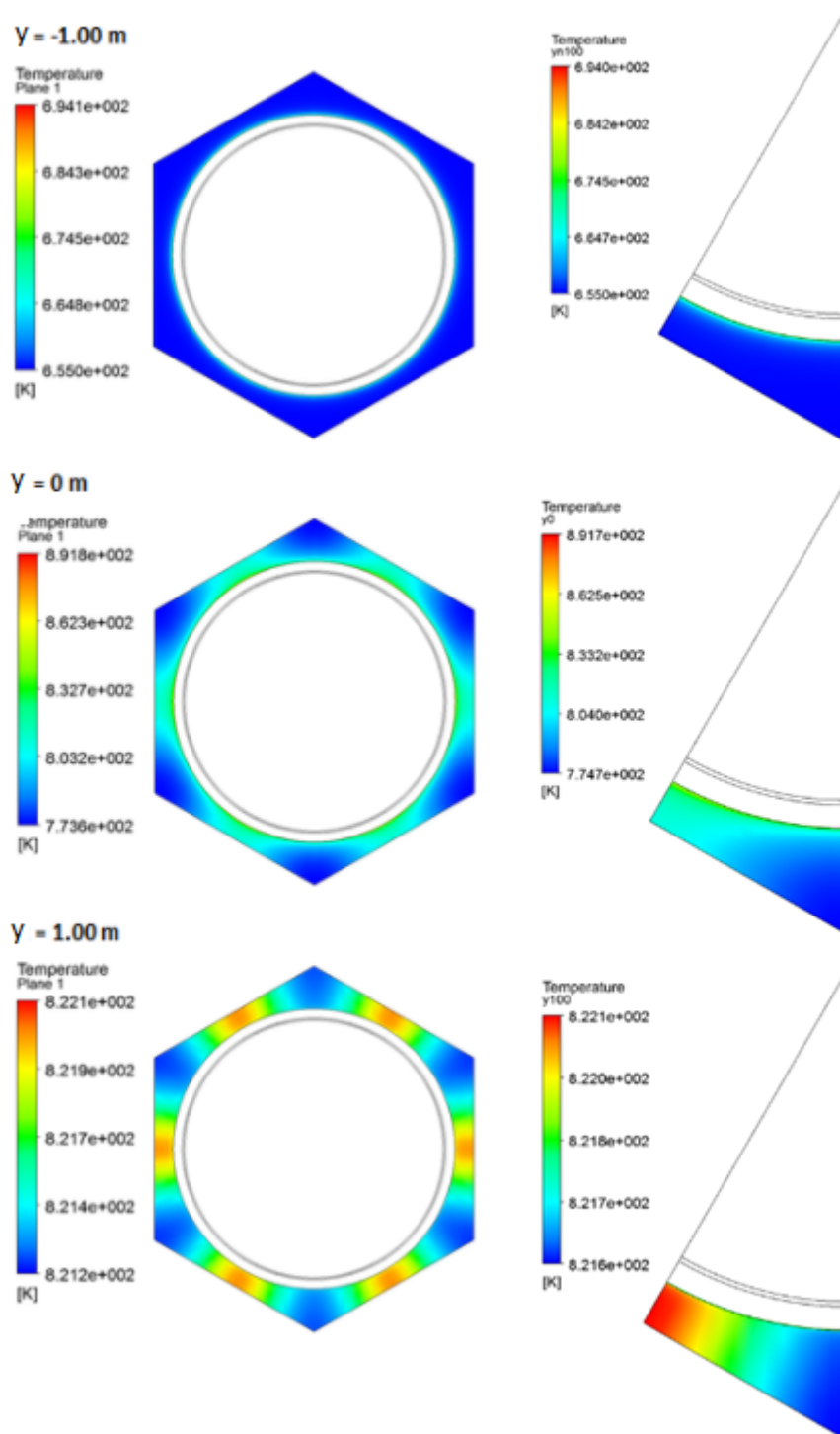


Figura 4.14: Campo de temperatura em K para o subcanal e a subfatia em 3 posições.

Observando as Figuras, pode-se concluir que o problema aqui representado possui natureza simétrica. Também podemos ver que há concordância entre os dois modelos ao comparar as temperaturas médias dos domínios. Portanto, podemos prosseguir os cálculos

com a subfatia, e assim, reduzir o tempo gasto por simulação.

Tabela 4.8: Temperaturas médias nos domínios

	Yu et al.	subcanal	subfatia
Entrada (K)	655	654,98103	654,98182
Simetria do fluido (K)	-	760,76703	761,0396
Revestimento (K)	-	801,59111	801,46558
Interstício (K)	-	805,91385	805,79514
Combustível (K)	-	1199,7985	1198,7326
Saída (K)	823	821,49554	821,75461

Como a temperatura mais alta atingida pelo domínio inteiro foi de 1292,25 K no combustível, podemos observar que a temperatura máxima em cada domínio não viola as condições de segurança para um reator nuclear, já que o ponto de fusão do combustível de 3078 K não foi alcançado.

É possível observar que o campo de velocidade aumenta ao longo da seção transversal com o aumento da temperatura, por causa da expansão do gás, e possui menor velocidade próximo à vareta, devido ao atrito com a parede. O refrigerante é aquecido porque ele remove calor da vareta combustível. Portanto, as temperaturas do subcanal são maiores próximo à parede tanto axialmente quanto radialmente.

Após esse processo, a vazão mássica foi diminuída, como pode ser visto na Tabela 4.9, a fim de variar o número de Reynolds do escoamento e calcular o fator de atrito em sua função. O mesmo também foi calculado através da relação de Blasius para  $Re < 30.000$ , pela relação de McAdams para  $30.000 < Re < 1.000.000$ , e através da correlação para o subcanal hexagonal interior do TODREAS e KAZIMI [33].

Tabela 4.9: Vazões utilizadas para o cálculo, em kg/s

Vazão original	0,005829825
Vazão 1	0,002914913
Vazão 2	0,001943275
Vazão 3	0,001457456
Vazão 4	0,001165965
Vazão 5	0,000971638
Vazão 6	0,000832832
Vazão 7	0,000728728
Vazão 8	0,000647758
Vazão 9	0,000582983
Vazão 10	0,000529984



Como mostrado na Figura 4.15, o número de Reynolds da ordem de  $10^4$  confirma que o  $\text{CO}_2$  neste trabalho apresenta um comportamento turbulento. Observa-se que para  $Re < 30,000$ , o fator de atrito calculado pela simulação concorda com a correlação de Blasius. Para  $Re > 30,000$ , a curva calculada pelo CFD tem o mesmo comportamento que a de McAdams, mas há uma diferença estática ao longo da mesma, o que é compreensível, já que a correlação de McAdams é bem geral. Por outro lado, para Reynolds maiores o fator de atrito é descrito melhor pela correlação de Cheng e Todreas, já que ela é específica para o subcanal com vareta interior e arranjo hexagonal em escoamentos turbulentos.

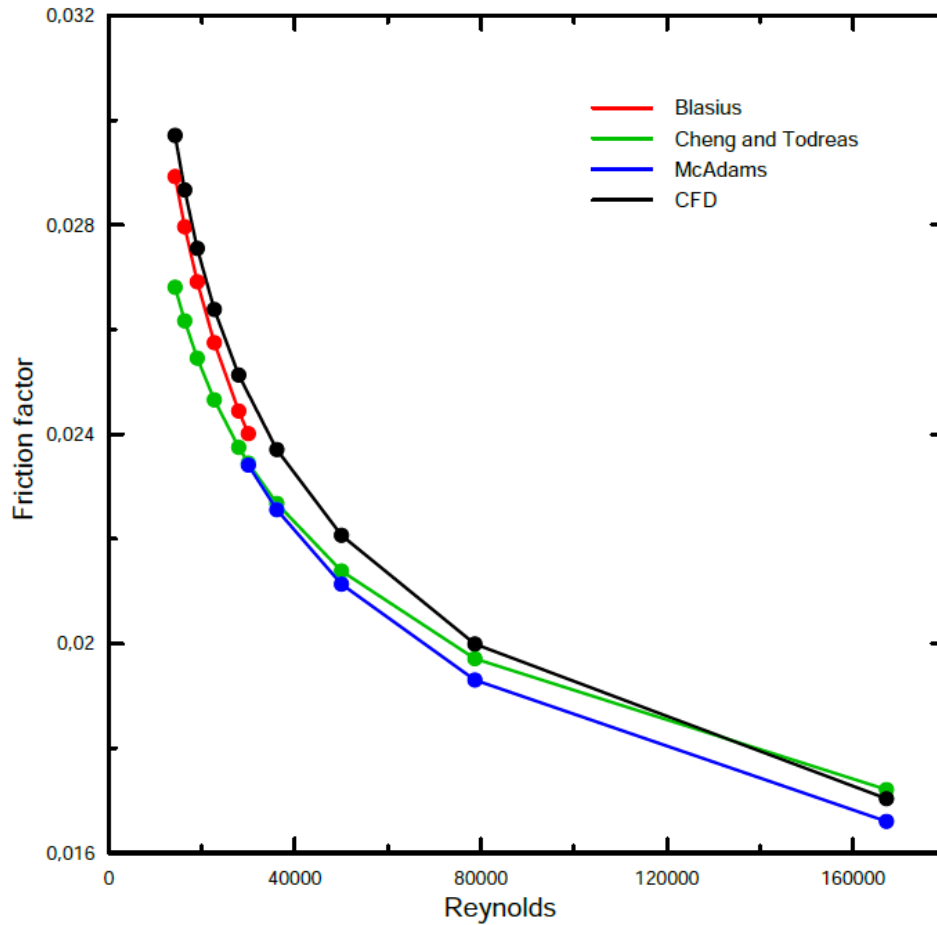


Figura 4.15: Fator de atrito como função do número de Reynolds comparado com correlações empíricas.

A seguir foi gerada uma correlação para melhor representar o escoamento do  $\text{CO}_2$  supercrítico em um subcanal de arranjo hexagonal com vareta interior, válida para números de Prandtl compreendidos entre 0,71 e 0,77. Na Figura 4.16 pode-se observar o gráfico em  $\ln$  representando a reta da correlação encontrada.

$$f = 0,3113Re^{-0,2488} \quad (4.3)$$

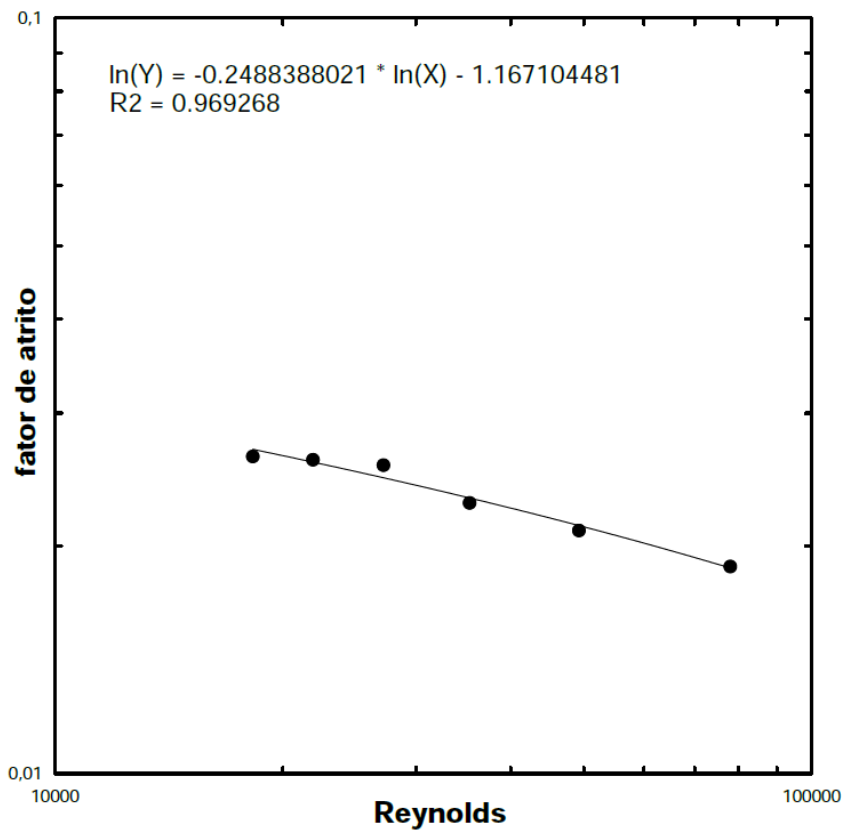


Figura 4.16: Correlação criada para o Fator de atrito em função do número de Reynolds.

Então, a influência do número de Reynolds na transferência de calor no comprimento ativo do combustível foi estudada como indicado pela fórmula do número de Nusselt. Com ela, o número de Nusselt foi calculado utilizando parâmetros obtidos da simulação em 7 posições axiais distintas. Além disso, ele também foi estimado utilizando a correlação de Presser. Essa comparação entre os dois números de Nusselt calculados em função da posição adimensional axial é mostrada nas Figuras 4.17 e 4.18.

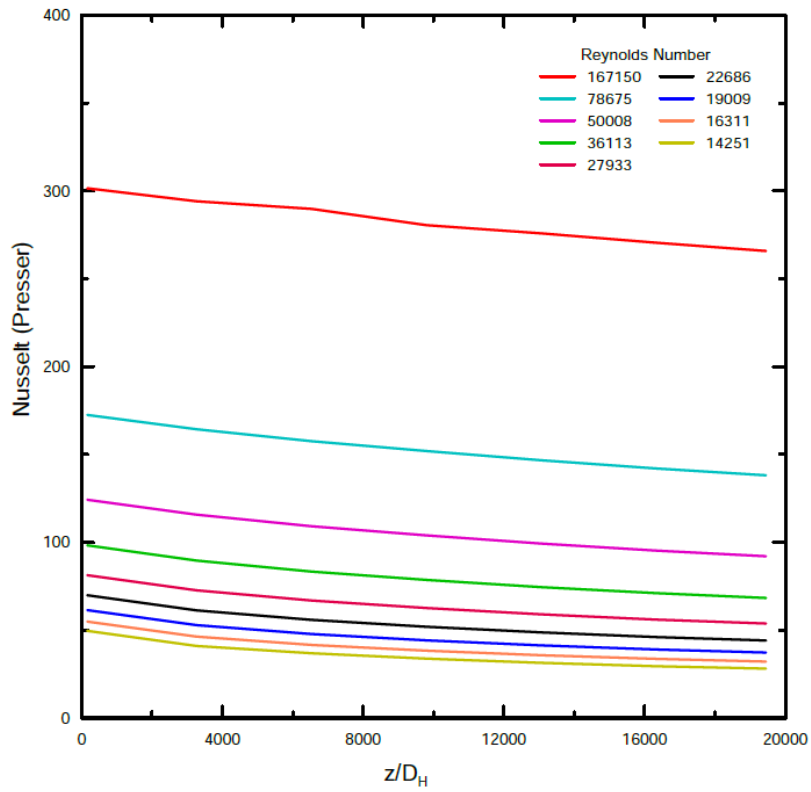


Figura 4.17: Número de Nusselt calculado com a correlação de Presser como função da posição axial adimensional.

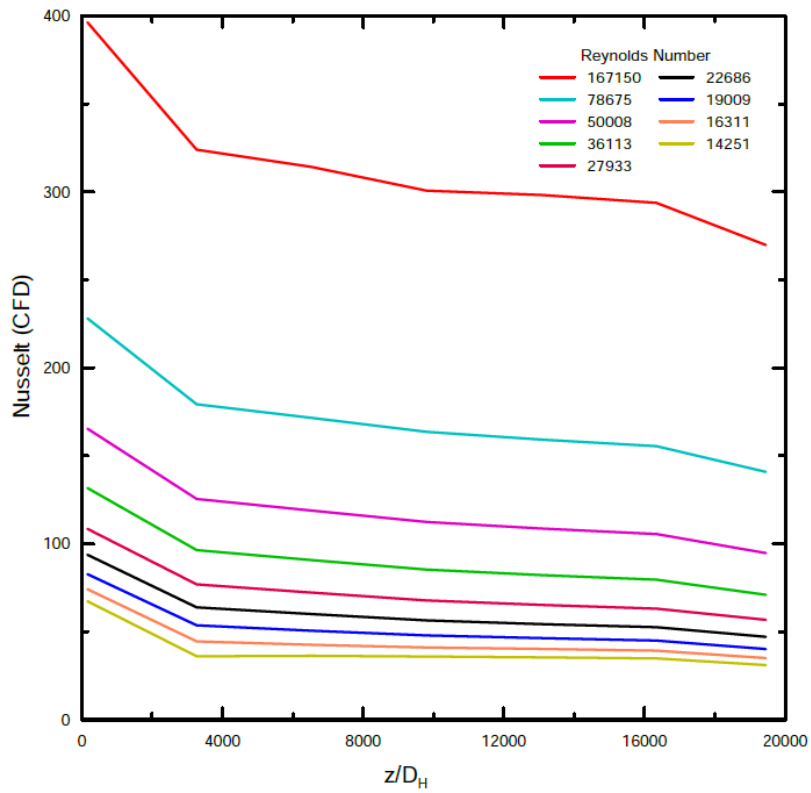


Figura 4.18: Número de Nusselt calculado por CFD como função da posição axial adimensional.

Como pode ser visto, as duas curvas dos números de Nusselt calculadas são bem similares. No entanto, há uma diferença na interface próxima à parte não ativa do comprimento do combustível. Isso se deve, provavelmente, a um erro numérico da simulação, causado pela mudança abrupta na condição de contorno, que é a geração de calor.

Na Figura 4.19, é possível observar que o número de Nusselt na última seção ativa aquecida como função do número de Reynolds.

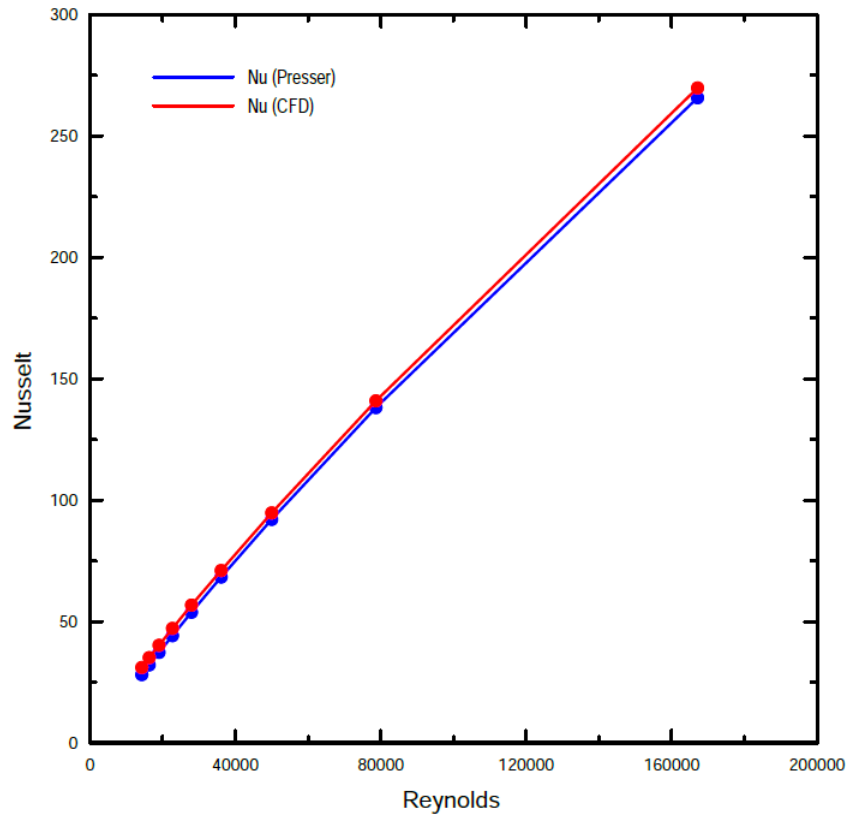


Figura 4.19: Número de Nusselt como função do número de Reynolds

Com isso, podemos concluir que as curvas estão bem próximas e que a correlação de Presser descreve bem o nosso problema. Portanto, não é necessário gerar uma nova correlação para descrever este modelo.

# Capítulo 5

## Conclusões e Sugestões

O presente trabalho apresenta uma investigação sobre o comportamento das propriedades do CO<sub>2</sub> supercrítico para um escoamento em um tubo com aquecimento na parede e no subcanal interior de arranjo hexagonal de um Micro Reator Modular. Neste capítulo serão apresentadas as conclusões aqui obtidas assim como as sugestões propostas para o prosseguimento deste estudo.

### 5.1 Conclusões

A partir dos resultados obtidos nas simulações do código comercial de CFD ANSYS-Fluent, foi possível observar os campos de velocidade e temperatura do escoamento do CO<sub>2</sub> supercrítico ao longo do subcanal e realizar comparações com correlações existentes na literatura.

Um dos pontos mais importantes é que a temperatura nos domínios não excedeu os limites previstos no projeto. A velocidade do fluido aumentou ao longo do subcanal, devido à expansão do gás. Também foi possível verificar os efeitos causados pela camada limite, já que a velocidade junto à parede foi nula.

Com as variadas vazões mássicas, observamos que a correlação de Blasius para  $Re < 30.000$  e a de TODREAS e KAZIMI [33] para  $30.000 < Re < 100.000$  são capazes de representar bem o fator de atrito do CO<sub>2</sub> supercrítico em um subcanal interior de arranjo hexagonal. No entanto, para melhor representar o problema físico deste trabalho, foi criada uma correlação para  $0,71 < Pr < 0,77$ .

Contudo, a correlação de Presser nos permitiu calcular o número de Nusselt, principalmente próximo à última seção de fluido aquecido com erros extremamente pequenos em relação ao que foi calculado através das simulações numéricas. Sendo assim, não se observou a necessidade da criação de uma correlação de Nusselt em função de Reynolds.

Pode-se concluir que o modelo numérico desenvolvido no presente trabalho descreve bem o comportamento termo-hidráulico do CO<sub>2</sub> em um subcanal de um MMR, assim como as correlações utilizadas, mesmo que não específicas para fluidos supercríticos.

## 5.2 Sugestões para trabalhos futuros

Após a fundamentação do modelo termo-hidráulico realizada neste trabalho, pretende-se prosseguir com o mesmo realizando um acoplamento neutrônico. Dessa forma, será possível prever o comportamento deste tipo de reator sob a influência de perturbações, como por exemplo, a inserção da reatividade positiva.

Sendo assim, poderá ser estabelecido um modelo físico com conexão entre a geração de potência regida pela neutrônica e a remoção de calor feita pelo escoamento do CO<sub>2</sub>, importante para a verificação da segurança em um reator, sobretudo sob condições adversas.

# Referências Bibliográficas

- [1] CARELLI, M. D., INGERSOLL, D. T. *Handbook of Small Modular Nuclear Reactors*. Cambridge, Reino Unido, Woodhead Publishing, 2014.
- [2] YU, H., HARTANTO, D., MOON, J., et al. “A Conceptual study of a supercritical CO<sub>2</sub>-cooled”, *Energies*, v. 8, pp. 13938–13952, 2015.
- [3] FATIMA, R. *Numerical investigation of thermal hydraulic behavior of supercritical carbon dioxide in compact heat exchangers*. Tese de Doutorado, Texas A&M University, Texas, USA, 2010.
- [4] SILVA, G. C. G. R. *Modelagem computacional da circulação natural do CO<sub>2</sub> supercrítico*. Tese de Mestrado, POLI/UFRJ, 2019.
- [5] DUFFEY, R. B., PIORO, I. L. “Experimental heat transfer of supercritical carbon dioxide flowing inside channels (survey)”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 235, pp. 913–924, 2005.
- [6] KIM, D. E., KIM, M. H. “Experimental study of the effects of flow acceleration and buoyancy on heat transfer in a supercritical fluid flow in a circular tube”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 240, pp. 3336–3349, 2010.
- [7] BRUCH, A., BONTEMPS, A., COLASSON, S. “Experimental investigation of heat transfer of supercritical carbon dioxide flowing in a cooled vertical tube”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 51, pp. 2489–2598, 2009.
- [8] BOVARD, S., ABDI, M., NIKOU, M. R. K., et al. “Numerical investigation of heat transfer in supercritical CO<sub>2</sub> and water turbulent flow in circular tubes”, *The Journal of Supercritical Fluids*, v. 119, pp. 81–103, 2017.
- [9] PIORO, I. L. “Current status of research on heat transfer in forced convection of fluids at supercritical pressures”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 354, pp. 110207, 2019.
- [10] IAEA. *Advances in High Temperature Gas Cooled Reactor Fuel Technology*. Vienna, Áustria, International Atomic Energy Agency, 2012.
- [11] POPE, M. A. *Thermal hydraulic Design of a 2400 MWt Direct Supercritical CO<sub>2</sub>-Cooled fast Reactor*. Tese de Doutorado, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, USA, 2004.

- [12] HANDWERK, C. S. *Optimized Core Design of a Supercritical Carbon Dioxide-Cooled Fast Reactor*. Tese de Doutorado, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, USA, 2007.
- [13] DOSTAL, V. *A Supercritical Carbon Dioxide Cycle for Next Generation Nuclear Reactors*. Tese de Doutorado, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, USA, 2004.
- [14] RIBEIRO, F. P. *Simulação CFD com acoplamento neutrônico de um subcanal de um PWR sob condições de inserção de reatividade e parada de bomba*. Tese de Mestrado, POLI/UFRJ, 2017.
- [15] HOOPER, J. D., WOOD, D. H. “Fully developed rod bundle flow over a large range of reynolds number”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 83, pp. 31–46, 1984.
- [16] RENKSIZBULUT, M., HADALLER, G. I. “An Experimental Study of Turbulent Flow Through a Square-Array Rod Bundle”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 91, pp. 41–55, 1986.
- [17] HOOPER, J. D. “Developed single phase turbulent flow through a squared-pitch rod cluster”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 60, pp. 365–379, 1980.
- [18] LIU, C. C., FERNG, Y. M. “Numerically simulating the thermal-hydraulic characteristics within the fuel rod bundle using CFD methodology”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 240, pp. 3078–3086, 2010.
- [19] HORVÁTH, A., DRESSEL, B. “Numerical simulations of squared arrayed rod bundles”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 247, pp. 168–182, 2012.
- [20] DEBRAH, S. K., SHITSI, E., CHABI, S., et al. “Assesment of heat transfer correlations in the sub-channels of proposed rod bundle geometry for supercritical water reactor”, *Heliyon*, v. e, pp. 02927, 2019.
- [21] PALOMINO, L. M., EL-GENK, M. S. “Friciton factor correlation for hexagonal bundles of bare tubes/rods and with flat and scalloped walls”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 353, pp. 110230, 2019.
- [22] SHARMA, D., PANDEY, K. M., CHANDRASHEKHARAPRATAP, C. “Computational Study of Effect of Varying Properties of Carbon Dioxide on Convective heat Transfer in Sub Channels Flow at a Pressure just Above the Critical Value”. In: *5th International Conference of Materials Processing and Characterization (ICMPC 2016)*, pp. 1293–1302, 2017.
- [23] PALOMINO, L. M., EL-GENK, M. S. “CFD and thermal-hydraulic analyses of liquid sodium heat transfer in 19-rod hexagonal bundles with scalloped walls”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 144, pp. 118637, 2019.



- [24] CHEN, J., GU, H., XIONG, Z. “A circumferentially non-uniform heat transfer model for subchannel analysis of tight rod bundles”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 121, pp. 50–61, 2018.
- [25] ANSYS. *ANSYS Fluent Theory Guide*. Pensilvania, USA, ANSYS, Inc., 2013.
- [26] VERSTEEG, H., MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. Essex, England, PEARSON, 2007.
- [27] SPAN, R., WAGNER, W. “A new equation of state for carbon dioxide covering the fluid region from the triple-point temperature to 1100at pressures up to 800 MPa”, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, v. 25, pp. 1509–1596, 1996.
- [28] SANTOS, L. B. *Simulação Computacional de Escoamento de CO<sub>2</sub> em Impelidor de Compressor Centrifugo*. Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, 2015.
- [29] VIEIRA, C. B. “*Simulação computacional de convecção natural turbulenta em cavidades com geração de calor volumétrica*”. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brazil, 2014.
- [30] MENTER, F. R. “Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications”, *AIAA Journal*, v. 32, 1994.
- [31] WILCOX, D. C. “Formulation of the k-omega Turbulence Model Revisited”, *AIAA Journal*, pp. 2823–2838, 2008.
- [32] INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. Rio de Janeiro, Brasil, LTC Editora, 2008.
- [33] TODREAS, N. E., KAZIMI, M. S. *Nuclear Systems I*. New York, USA, Taylor & Francis, 1990.
- [34] MCADAMS, W. H. *Heat Transmission*. New York, USA, McGraw-Hill, 1954.
- [35] BSSA. “Elevated temperature physical properties of stainless steels”. 2017. Disponível em: <<http://www.bssa.org.uk/topics.php?article=139>>.
- [36] TAKAHASHI, Y., MURABAYASHI, M., AKIMOTO, Y., et al. “Uranium mononitride: heat capacity and thermal conductivity from 298 to 1000 K”, *Journal of Nuclear Materials*, v. 38, pp. 303–308, 1971.
- [37] ROSS, S. B., EL-GENK, M. S., MATTHEWS, R. B. “Thermal conductivity correlation for uranium nitride fuel between 10 and 1923 K”, *Journal of Nuclear Materials*, v. 151, pp. 313–317, 1988.