

ANÁLISE DE CONDUÇÃO DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE EM UMA  
VARETA COMBUSTÍVEL NUCLEAR

Felippe Celestino Moreira

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientador: Su Jian

Rio de Janeiro

Maio de 2013

ANÁLISE DE CONDUÇÃO DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE EM UMA  
VARETA COMBUSTÍVEL NUCLEAR

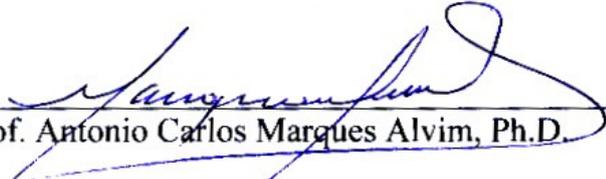
Felippe Celestino Moreira

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO  
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA  
(COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE  
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE  
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:



Prof. Su Jian, D.Sc.



Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.



Profª. Maria de Lourdes Moreira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MAIO DE 2013

Moreira, Felipe Celestino

Análise de Condução de Calor com Mudança de Fase em uma Vareta Combustível Nuclear/Felippe Celestino Moreira. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XV, 106 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Su Jian

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2013.

Referencias Bibliográficas: p. 102-106.

1. Mudança de Fase. 2. Condução de Calor. 3. Acidente Nuclear. I. Su, Jian II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

A Deus,  
aos Meus Pais, Otávio e Carmen,  
e meu irmão, Matheus.

## AGRADECIMENTOS

Concluir um curso de mestrado da COPPE é uma tarefa difícil que demanda disciplina, dedicação e tempo, porém a recompensa obtida é muito gratificante. Este mestrado não seria concluído se não fosse pela ajuda de diversas pessoas que me apoiaram durante esta jornada.

Agradeço à minha família, em especial meu pai e minha mãe pela formação e educação na minha vida.

À minha companheira e amiga, Taís por todo seu apoio, ajuda e paciência durante todos esses anos que passamos juntos.

Agradeço a todos os verdadeiros amigos, que sempre estiveram presentes e contribuíram para que todo esse trabalho fosse menos difícil.

À equipe LASME pelas contribuições, força e estímulo durante todo o período.

À Marinha do Brasil, que me acolheu e contribuiu para a minha formação e agora faz parte de minha vida.

Agradeço ao comandante Yran Maia, que tornou possível a finalização da dissertação nesta reta final do mestrado.

Finalmente quero agradecer ao professor Su Jian pelo incentivo na inscrição para o mestrado, orientação, confiança, contribuição e apoio que contribuíram decisivamente para a dissertação do mestrado. Quero agradecer também ao professor Su por todos os ensinamentos aprendidos durante a minha passagem pelo LASME que irei levar para o resto da vida.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## ANÁLISE DE CONDUÇÃO DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE EM UMA VARETA COMBUSTÍVEL NUCLEAR

Felippe Celestino Moreira

Maio/2013

Orientador: Su Jian

Programa: Engenharia Nuclear

O derretimento de varetas combustíveis é um fenômeno importante para a análise e simulação de acidentes severos de reatores nucleares. Este trabalho tem por objetivo desenvolver modelos matemáticos de condução de calor unidimensional com mudança de fase em duas regiões, para a simulação de uma vareta combustível composta por pastilha combustível e revestimento de liga de zircônio. O modelo unidimensional de condução de calor com mudança de fase, na formulação de entalpia, foi resolvido usando-se um método explícito de diferenças finitas. Dois modelos de parâmetros concentrados foram desenvolvidos para o mesmo problema físico, o clássico e o aperfeiçoado baseado na aproximação de Hermite para integrais. Perfis de temperatura e da propagação da frente de derretimento para o conjunto pastilha revestimento foram obtidos para diferentes valores da taxa volumétrica de geração de calor e do coeficiente de transferência de calor entre a vareta e o fluido refrigerante, comparando-se as soluções dos três modelos matemáticos. A evolução do problema de derretimento de uma vareta foi dividida em quatro etapas e o tempo de cada etapa também foram comparados para os diferentes modelos. As soluções apresentaram boa concordância quando utilizada uma geração de calor pequena, e soluções diferentes para altos valores de geração de calor.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

HEAT CONDUCTION ANALYSIS WITH PHASE CHANGE  
IN A NUCLEAR FUEL ROD

Felippe Celestino Moreira

May/2013

Advisor: Su Jian

Department: Nuclear Engineering

The fuel rod melting is an important phenomenon for severe accidents analysis and simulation of nuclear reactors. This work aims to develop mathematical models of one-dimensional heat conduction with phase change in two regions. Simulation of a fuel rod is performed consisting of fuel pellet and clad of zirconium alloy. The enthalpy formulation of one-dimensional heat conduction model with phase change was solved using an explicit finite difference method. Classical and improved lumped models were developed for the same physical problem. The improved lumped models were based on the Hermite integrals approximation. Temperature profiles and boundary phase change for the entire fuel and clad were obtained for different values of the volumetric heat generation and heat transfer coefficient between the coolant and the rod. The solutions were compared between the three models. The evolution of the rod melting problem is divided into four steps and the time for each step was also compared to different models. The solutions showed good agreement for a small heat generation and little different for high values of heat generation.

# Sumário

<b>Índice de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Índice de Tabelas</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xiv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação . . . . .	1
1.2 Problema Físico . . . . .	3
1.3 Objetivos . . . . .	8
1.4 Organização do trabalho . . . . .	10
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>11</b>
2.1 Problema de Stefan . . . . .	12
2.2 Métodos de Solução . . . . .	13
2.2.1 Método de entalpia . . . . .	17
2.2.2 Parâmetros concentrados . . . . .	19
2.3 Problemas com geração volumétrica de calor . . . . .	22
2.4 Problema com condição de contorno de 3 <sup>o</sup> tipo . . . . .	24
2.5 Problemas aplicados a reatores nucleares . . . . .	25
2.6 Resumo e comentários . . . . .	27
<b>3 Fundamentos e Formulação Matemática</b>	<b>29</b>
3.1 A equação da condução de calor . . . . .	29
3.1.1 Condição de contorno . . . . .	32
3.1.2 Adimensionalização . . . . .	34

3.1.3	Mudança de fase . . . . .	35
3.2	Formulação matemática . . . . .	38
3.2.1	Derretimento . . . . .	39
3.2.2	Formulação por entalpia . . . . .	40
<b>4</b>	<b>Método de Solução</b>	<b>43</b>
4.1	Diferenças Finitas . . . . .	43
4.1.1	Propagação da interface . . . . .	47
4.2	Parâmetros concentrados . . . . .	48
4.2.1	Parâmetros concentrados clássico . . . . .	50
4.2.2	Parâmetros concentrados aperfeiçoados . . . . .	52
4.2.3	Solução apresentada por Chen et al. (1976) . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>58</b>
5.1	Resultados pelo método de entalpia . . . . .	62
5.2	Resultados por parâmetros concentrados . . . . .	72
5.2.1	Solução clássica . . . . .	73
5.2.2	Solução aperfeiçoada . . . . .	75
5.3	Reator com potência plena . . . . .	77
5.4	Reator com calor residual . . . . .	85
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>91</b>
<b>A</b>	<b>Propriedades dos Materiais</b>	<b>94</b>
A.1	Pastilha Combustível ( $UO_2$ ) . . . . .	94
A.2	Revestimento (Zircônio) . . . . .	98
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>102</b>

# Lista de Figuras

1.1	Núcleo parcialmente derretido do reator de TMI . . . . .	2
1.2	Elemento combustível (Carr et al., 2013) . . . . .	4
1.3	Montagem da pastilha, vareta e elemento combustível (Souza, 2013) .	4
1.4	Pastilha combustível de $UO_2$ (Ulmer-Scholle, 2013) . . . . .	5
1.5	Revestimento de liga de Zircônio da vareta combustível (Gray, 2013)	5
1.6	Problema unidimensional do conjunto pastilha e revestimento . . . . .	6
2.1	Oscilações da solução por método de entalpia (Voller e Cross, 1981) .	18
2.2	Solução por método de entalpia modificado (Voller e Cross, 1981) . .	19
3.1	Volume infinitesimal de um sólido qualquer . . . . .	30
3.2	Esquema para um caso de derretimento . . . . .	36
3.3	Entalpia em função da temperatura com mudança de fase (Özisik, 1993) . . . . .	41
4.1	Domínio do nó central . . . . .	45
4.2	Propagação da interface ao longo do ponto $i$ . . . . .	48
5.1	Comparação entre malhas da temperatura para $t = 30s$ com potência total e $h = 0$ . . . . .	61
5.2	Regime permanente da entalpia para a operação normal do reator . .	62
5.3	Regime permanente da temperatura para a operação normal do reator	63
5.4	Evolução da energia em acidente com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ pelo método de entalpia . . . . .	64
5.5	Evolução da temperatura em acidente com potência total e $h =$ $0, 2kW/m^2K$ pelo método de entalpia e propriedades constantes . . .	65

5.6	Evolução da temperatura em acidente com potência total, $h = 0, 2kW/m^2K$ e propriedades variáveis . . . . .	65
5.7	Temperatura após o fim do derretimento do revestimento com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	66
5.8	Temperatura após o fim do derretimento da pastilha combustível com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	67
5.9	Entalpia da pastilha em $t = 74s$ com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	68
5.10	Temperatura da pastilha em $t = 74s$ com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	69
5.11	Entalpia da pastilha em $t = 99, 5s$ com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	69
5.12	Temperatura da pastilha em $t = 99, 5s$ com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	70
5.13	Temperatura em função da entalpia em $r = 0$ . . . . .	70
5.14	Propagação da interface do revestimento pelo método de entalpia com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	71
5.15	Propagação da interface do combustível pelo método de entalpia com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	71
5.16	Evolução da temperatura em acidente por parâmetros concentrados clássico com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	73
5.17	Propagação da interface do combustível por parâmetros concentrados clássico com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	74
5.18	Propagação da interface do revestimento por parâmetros concentrados clássico com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	74
5.19	Evolução da temperatura na etapa 1 por parâmetros concentrados aperfeiçoado com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	76
5.20	Temperatura do revestimento na etapa 2 por parâmetros concentrados aperfeiçoado com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	76
5.21	Evolução da temperatura na etapa 3 por parâmetros concentrados aperfeiçoado com potência total e $h = 0, 2kW/m^2K$ . . . . .	77
5.22	Perfil de temperatura na etapa 1 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e $h = 0, 1kW/m^2K$ . . . . .	80

5.23	Perfil de temperatura na etapa 2 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e $h = 0,1kW/m^2K$ . . . . .	81
5.24	Perfil de temperatura na etapa 3 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e $h = 0,1kW/m^2K$ . . . . .	82
5.25	Perfil de temperatura na etapa 4 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e $h = 0,1kW/m^2K$ . . . . .	82
5.26	Propagação da mudança de fase do revestimento por parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e $h = 0,1kW/m^2K$	83
5.27	Propagação da mudança de fase do combustível por parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e $h = 0,1kW/m^2K$	83
5.28	Calor residual após o desligamento do reator . . . . .	85
5.29	Evolução da energia no acidente com calor residual pelo método de entalpia . . . . .	86
5.30	Evolução da temperatura no acidente com calor residual pelo método de entalpia . . . . .	87
5.31	Evolução da temperatura no acidente com calor residual por parâmetros concentrados . . . . .	88
5.32	Perfil de temperatura para $t = 699,6s$ com calor residual pelo método de entalpia . . . . .	88
A.1	Entalpia da pastilha combustível . . . . .	95
A.2	Calor específico da pastilha combustível . . . . .	95
A.3	Condutividade térmica da pastilha combustível . . . . .	96
A.4	Densidade da pastilha combustível . . . . .	97
A.5	Entalpia do revestimento de zircônio . . . . .	98
A.6	Calor específico do revestimento de zircônio . . . . .	99
A.7	Condutividade térmica do revestimento de zircônio . . . . .	100
A.8	Densidade do revestimento de zircônio . . . . .	101

# Lista de Tabelas

5.1	Parâmetros de um reator PWR . . . . .	58
5.2	Propriedades médias para a pastilha de urânio . . . . .	59
5.3	Tempo de processamento e derretimento para diferentes malhas com potência total e $h = 0$ . . . . .	60
5.4	Comparação entre propriedade constante e variável com potência to- tal e $h = 0,2kW/m^2K$ . . . . .	64
5.5	Tempo total das etapas para cada método com potência total e $h = 0$	78
5.6	Tempo total das etapas para cada método com potência total e $h =$ $0,01kW/m^2K$ . . . . .	78
5.7	Tempo total das etapas para cada método com potência total e $h =$ $0,1kW/m^2K$ . . . . .	79
5.8	Tempo total das etapas para cada método com potência total e $h =$ $0,2kW/m^2K$ . . . . .	79
5.9	Tempo total das etapas para cada método com calor residual . . . . .	89

# Lista de Símbolos

$A$	Área [ $m^2$ ]
$c_p$	Calor específico à pressão constante [ $J/(kgK)$ ]
$d$	Diâmetro [ $m$ ]
$E$	Energia [ $J$ ]
$g$	Geração volumétrica de calor [ $W/m^3$ ]
$h$	Coefficiente de transferência de calor por convecção [ $W/(m^2K)$ ]
$H$	Entalpia [ $J$ ]
$k$	Condutividade térmica [ $W/(mK)$ ]
$L$	Calor latente [ $J/kg$ ]
$m$	massa [ $Kg$ ]
$n$	Vetor unitário normal a superfície
$N$	Ponto de discretização
$P$	Pressão
$\dot{Q}$	Taxa de transferência de calor [ $W/s$ ]
$r$	Raio [ $m$ ]
$R_f$	Raio do combustível [ $m$ ]
$R_{ci}$	Raio da parede interna ao revestimento [ $m$ ]

$R_{co}$	Raio da parede externa ao revestimento [ $m$ ]
$s$	Posição da interface líquido-sólido [ $m$ ]
$t$	tempo [ $s$ ]
$T$	Temperatura [ $K$ ]
$v_s$	Velocidade da interface [ $m/s$ ]
$V$	Volume [ $m^3$ ]
$\alpha$	Difusividade térmica [ $m^2/s$ ]
$\rho$	Massa específica [ $kg/m^3$ ]
$\Delta r$	Distância entre dois nós subsequente [ $m$ ]
$\Delta t$	Passo de tempo [ $s$ ]

## Subscritos

$av$	Média espacial
$c$	Revestimento
$f$	Combustível
$g$	Espaçamento entre revestimento e pastilha ("gap")
$i$	Discretização espacial
$m$	ponto de fusão ou derretimento
$n$	Discretização temporal
$l$	Domínio líquido
$s$	Domínio sólido
$w$	Parede
$\infty$	Refrigerante

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Motivação

É notório que a engenharia nuclear dedica um grande esforço na área de segurança voltada para usinas nucleares. Porém apesar de todos os avanços e estudos na área de controle do reator e prevenção de acidentes em centrais nucleares, sempre existem possibilidades de acidentes, mesmo que estas sejam muito remotas e improváveis.

Exemplos disso foram os acidentes nucleares ocorridos na usina de Three Mile Island (TMI) nos Estados Unidos em 1979, Chernobyl na Ucrânia em 1987, e recentemente Fukushima no Japão em 2011. Devido a falhas nos sistemas de segurança e nos sistemas de controle de emergência, uma central nuclear pode deixar de operar apropriadamente, o que leva ao superaquecimento do núcleo. Desta forma, o núcleo fica sujeito a um possível derretimento de seus componentes e em casos mais extremos a integridade física do vaso do reator também pode ser comprometida. Tal evento com derretimento parcial ou integral do núcleo é denominado de acidente severo, o qual ocorreu em TMI e Fukushima. A figura 1.1 mostra o ocorrido no reator da unidade 2 de TMI, o qual desencadeou em derretimento parcial de seu núcleo e seus componentes.

Por exemplo, no acidente mais recente, o desastre iniciou na usina de Fukushima devido ao terremoto, que interrompeu a distribuição de energia elétrica. Conseqüentemente, as barras de controle foram acionadas das unidades 1, 2 e 3, des-

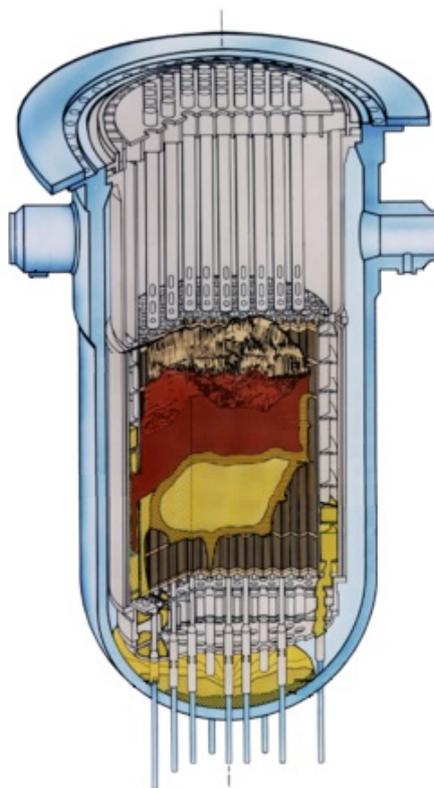


Figura 1.1: Núcleo parcialmente derretido do reator de TMI

ligando o reator e assim o calor residual gerado pelos produtos de fissão deveria ser removido. Com a falta de energia, o primeiro sistema de refrigeração foi comprometido. Em seguida, foram acionadas as bombas a diesel, que logo em seguida ficaram inutilizadas devido ao tsunami, que destruiu os sistemas diesel geradores, fazendo com que o segundo sistema de segurança ficasse inutilizável. Após isso foram acionadas as baterias, um terceiro sistema de emergência, que duraram aproximadamente oito horas, e também não foram suficientes, acarretando no derretimento de três de seus reatores. Apesar de todo robusto sistema de segurança, o acidente não pôde ser evitado, confirmando por isso que as chances de acidentes não podem ser em hipótese alguma, descartadas.

O derretimento do núcleo é considerado um acidente nuclear muito sério, pois a partir do conceito de defesa em profundidade, o mesmo destrói duas barreiras de proteção, são elas o revestimento e as pastilhas combustíveis. E posteriormente, o rompimento dos outros sistemas de contenção, que pode levar à liberação de produtos altamente radioativos para o meio ambiente. Outro grande problema é que após

o derretimento, a tentativa de resfriamento do núcleo com água passa a ser ineficaz, devido à grande camada de metal na fase líquida.

Durante um acidente, o comportamento do combustível é basicamente determinado pela resolução da equação de condução de calor (IAEA, 2007). Logo o estudo da condução de calor em regimes transiente com possibilidade de mudança de fase, especificamente de derretimento (liquidificação), é importante para ajudar não somente a entender, mas também a prever o comportamento de um reator nos casos mais extremos e, principalmente saber a situação no interior do núcleo em caso de um acidente severo. Assim, entender melhor o comportamento do derretimento dos componentes das duas primeiras barreiras de defesa de uma central nuclear é um trabalho de fundamental importância.

Com o foco no problema de condução de calor com mudança de fase, essa dissertação visou a implementação de diferentes de dois diferentes métodos, e na possível melhoria das mesmas O que possibilita testes com materiais diferentes dos usados atualmente, dando uma ideia do comportamento e funcionalidade de tais materiais.

## 1.2 Problema Físico

Usinas nucleares são instalações industriais empregadas para produzir eletricidade a partir de energia nuclear, que se caracterizam através de fissão nuclear com reação em cadeia que geram calor. Em todo mundo, os reatores amplamente utilizados são os reatores de água pressurizada (PWR) devido à sua maior confiabilidade. Nestes reatores, o calor gerado no núcleo aquece o refrigerante do sistema primário, que por sua vez converte a água de alimentação do sistema secundário em vapor no gerador de vapor, para posteriormente ser usado para girar turbinas e produzir energia elétrica.

A dissertação consiste no estudo de condução de calor com mudança de fase de uma vareta combustível nuclear, que se localiza no núcleo do reator. O reator é composto por um arranjo de elementos combustíveis que varia conforme o modelo do reator. Na figura 1.2 é possível observar um único elemento combustível de um reator

PWR e as varetas combustíveis montadas nele. O refrigerante escoar externamente as varetas, absorvendo energia na forma de calor.

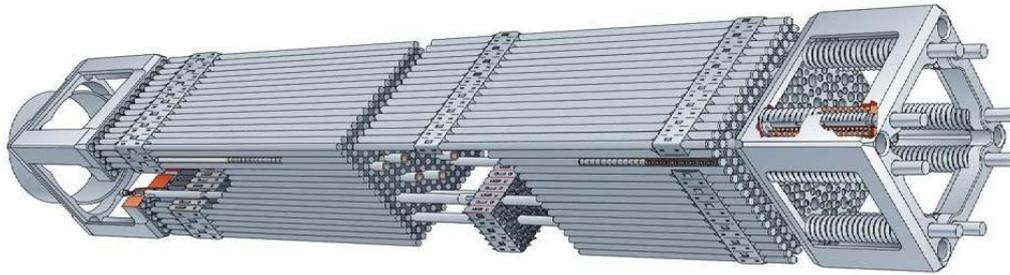


Figura 1.2: Elemento combustível (Carr et al., 2013)

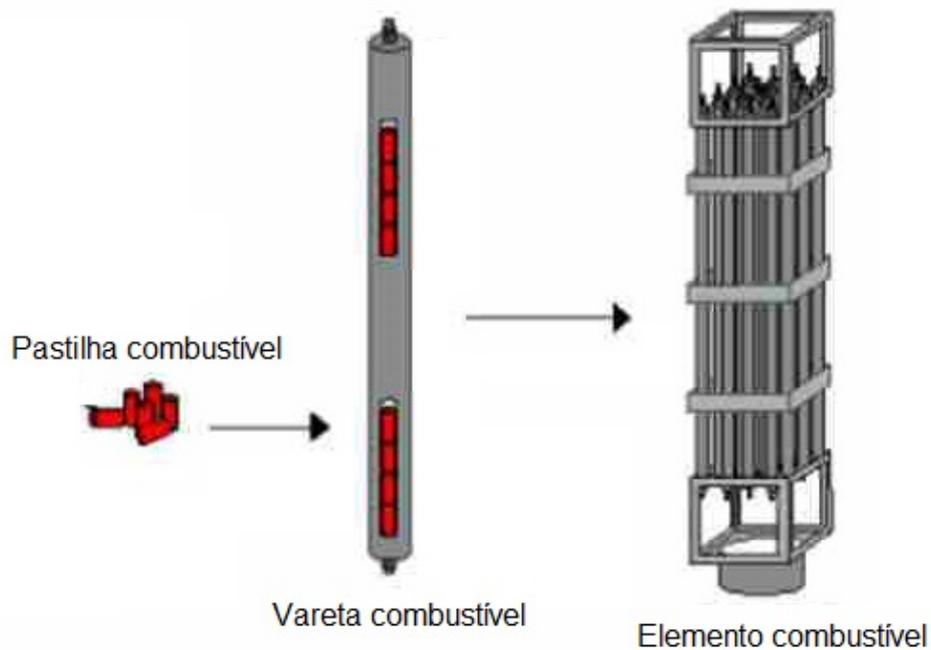


Figura 1.3: Montagem da pastilha, vareta e elemento combustível (Souza, 2013)

A figura esquemática 1.3 ajuda a ver como é feita a montagem. Centenas de pastilhas combustíveis são inseridas dentro de uma vareta combustível, e assim as varetas são fechadas. Com a pastilha dentro do elemento, no espaço entre ambos é inserido um gás inerte. Deste modo, as varetas carregadas com as pastilhas podem ser montadas. Por exemplo, no caso de Angra 2 são 236 varetas no total, montadas junto à barra de controle, gerando um elemento combustível.

A pastilha combustível (figura 1.4) é um combustível cerâmico formado de

dióxido de urânio ( $UO_2$ ) enriquecido. O núcleo do elemento  ${}^{235}_{92}U$  é fissionado a partir dos nêutrons, se tornando a fonte de energia necessária para uma usina nuclear.



Figura 1.4: Pastilha combustível de  $UO_2$  (Ulmer-Scholle, 2013)



Figura 1.5: Revestimento de liga de Zircônio da vareta combustível (Gray, 2013)

Já o revestimento da vareta combustível (figura 1.5) é composto por uma liga de zircônio, as quais as mais comuns são zircaloy-2, zircaloy-4 e zirlo. Além do zircônio, a liga possui outros importantes elementos com concentrações abaixo de 2%, por exemplo, para o Zircaloy-4 têm-se estanho, ferro e cromo. A liga de zircônio foi escolhida como revestimento devido às suas boas propriedades mecânicas, a excelente resistência à corrosão e a alta permeabilidade a nêutrons térmicos (Lobo, 2002).

Para analisarmos o caso em que ocorre o derretimento do núcleo, o problema físico de geração de calor no núcleo do reator será formulado com o conjunto básico de pastilha combustível e revestimento do combustível. Será analisada a transferência de calor e a mudança de fase nesse conjunto que apresenta um formato cilíndrico.

Para tal, a análise será reduzida a um problema unidimensional, como mostrado na figura 1.6. Os cálculos da composição de um conjunto de pastilha de urânio e revestimento serão aplicados somente na direção radial do problema. Tal simplificação faz com que os perfis circunferencial e longitudinal sejam descartados.

Se levarmos em consideração que o perfil circunferencial da temperatura e da energia do conjunto não variam, pois a geração de calor e o resfriamento do refrigerante são uniformes em toda direção circunferencial, esta direção pode ser descartada. Já para a simplificação da direção longitudinal do reator, pode ser explicada com uma pequena difusão longitudinal quando comparado ao radial.

Além disso, algumas outras considerações foram realizadas no trabalho. Não será considerada variações na temperatura do refrigerante e na variação da reatividade durante a evolução do acidente. Após o derretimento do revestimento, o problema físico não será modificado, desconsiderando a possível queda das pastilhas. Também não foram considerados o envelhecimento da pastilha e desta forma, as variações do espaçamento entre o revestimento e a pastilha.

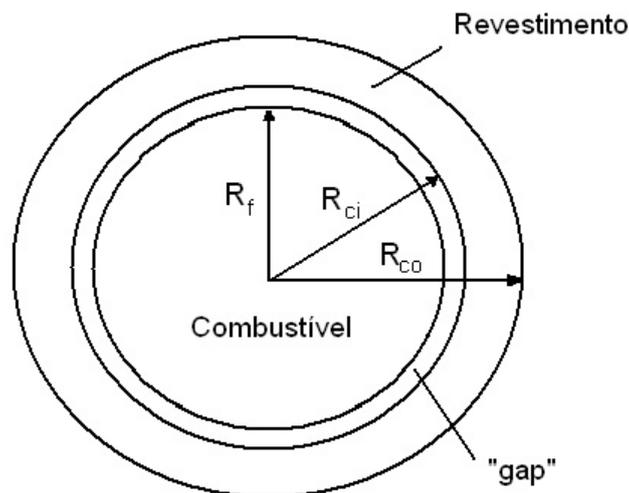


Figura 1.6: Problema unidimensional do conjunto pastilha e revestimento

Em caso de acidente que excede as bases de projeto e que acarreta falhas em

estruturas, sistemas ou componentes, impedindo dessa forma a refrigeração do núcleo do reator conforme projetada, levando a uma degradação significativa do mesmo, ou seja, acidente severo (CNEN, 1997), o conjunto da pastilha e revestimento acaba se aquecendo até o seu derretimento, como pode ser visto na figura 1.1. Desta maneira, o conjunto estudado na figura 1.6 seguirá as seguintes etapas, segundo Chen et al. (1976):

1. Fase transiente antes de qualquer derretimento;
2. Fase do derretimento do revestimento;
3. Fase transiente antes do derretimento da pastilha de urânio;
4. Fase do derretimento da pastilha de urânio.

Inicialmente, antes de qualquer uma das etapas acima, o reator opera em regime permanente, em que o perfil de temperatura é mantido o mesmo ao longo do conjunto, ou varia pouco com os períodos transientes do reator devido à sua criticalidade. Porém, devido a algum acidente em que o reator perde a capacidade de trocar o calor gerado pela pastilha de combustível com o resto do núcleo, o conjunto entrará na etapa 1. Após o início do acidente, a etapa 1 tratará do aquecimento do conjunto. O combustível sempre terá um perfil de temperatura maior que a do revestimento, porém o aumento de temperatura faz com que o revestimento atinja a temperatura de fusão primeiro (temperatura em torno de  $2100K$ ), iniciando assim a etapa 2.

Como a temperatura da superfície interna do revestimento é maior que a externa, a temperatura de fusão primeiramente é atingida na parede interna do revestimento ( $r = R_{ci}$ ), assim é na etapa 2 em que ocorre todo o derretimento do revestimento, terminando quando o revestimento tenha se tornado totalmente líquido, ou seja, a interface de mudança de fase tenha atingido a parede externa ( $r = R_{co}$ ). Note que durante toda a etapa 2 a pastilha de urânio continua se aquecendo.

A etapa 3 se inicia após o derretimento do revestimento. Esta etapa é calculada de forma similar a etapa 1, com a pastilha sólida e o revestimento na fase líquida

sendo aquecidas sem mudança de fase. Até que, finalmente, o centro do combustível atinge a sua temperatura de fusão, terminando esta etapa.

A última etapa começa com o derretimento do ponto mais quente de todo reator, o centro da pastilha de urânio com uma temperatura de cerca de  $3200K$ . A interface de derretimento se propaga até atingir a parte externa da pastilha ( $R_f$ ). Com isso todo conjunto é derretido, finalizando assim a etapa 4, onde todo combustível foi exposto.

Observa-se que as etapas 1 e 3 apresentam uma solução sem mudança de fase, onde existem duas regiões fixas e acopladas para a solução. Entretanto as etapas 2 e 4 são mais complicadas, pois o que antes era uma região se transformou em duas, somando um total de três regiões. Além disso, as regiões de mudança de fase não são fixas, estas se apresentam de maneira móvel de acordo com a solução, complicando ainda mais a sua solução.

### 1.3 Objetivos

Este trabalho visa realizar soluções de condução de calor para casos que envolvam acidente no núcleo de um reator PWR, especificamente analisar o comportamento da pastilha de dióxido de urânio e seu revestimento de liga de zircônio, sob condições de alta temperatura em que o derretimento do núcleo é ocasionado.

Neste caso serão implementadas duas soluções. A primeira será utilizando o método por entalpia, onde é empregada uma discretização da equação por diferenças finitas com formulação explícita, com diferenças centradas no espaço e diferença avançada no tempo. O outro método empregado será os de parâmetros concentrados clássicos e os parâmetros concentrados aperfeiçoado, que teoricamente devem apresentar aproximações melhores do que a versão clássica.

Como a condução de calor rege predominantemente o problema, todos os cálculos serão em torno da equação de condução de calor. Será obtida uma solução de condução de calor transiente para um problema unidimensional na direção radial. Todo o procedimento será feito com a presença de mudança de fase, o que leva a solução de equações não lineares. Será resolvida a equação de condução com geração

de calor para a modelagem da pastilha, já para a modelagem do revestimento a equação de condução não apresentará geração de calor. O acidente pode ser simulado através da variação do coeficiente de transferência de calor do refrigerante.

Com o objetivo de manter o problema original, as condições de contornos serão modeladas de acordo com o problema físico. O centro apresenta o ponto mais quente do perfil de temperatura, implicando a derivada igual a zero e temperatura finita. Já a condição de contorno da parte externa do combustível e a parte interna do revestimento serão dados pela interface entre ambos, que é acoplado pelo fluxo convectivo de calor que atravessa o espaçamento entre eles, onde será considerado o tamanho do espaçamento. Por fim, a condição de contorno externa ao elemento combustível será modelada pelo fluxo convectivo do refrigerante. Na situação de acidente será representado pela a mudança no coeficiente de transferência de calor.

Foram consideradas as propriedades como condutividade térmica, calor específico e densidade diferente entre o sólido e o líquido calculadas como uma média na temperatura para cada fase para todos os métodos utilizados. Além disso, foi calculado a solução com as propriedades variando com a temperatura ao longo de todo processo utilizando o método da entalpia, com o objetivo de analisar a influência das propriedades.

Será obtida a solução numérica pelo método de entalpia, utilizando diferenças finitas e também uma formulação para parâmetros concentrados clássicos e aperfeiçoado utilizando o programa Wolfram Mathematica. Para tal, as soluções serão comparadas entre si, podendo ser analisada as temperaturas atingidas em cada fase e até mesmo o tempo de cada fase do problema. Para as etapas em que ocorre o derretimento, será possível observar a propagação da interface de mudança de fase em todo o raio ao longo do tempo. Serão analisadas duas situações distintas, são elas: Acidente com reator em operação, e o reator desligado com o calor residual. As situações são diferenciadas através da geração de calor presente em cada caso.

Apesar da análise ter por objetivos reatores PWR, a solução pode ser empregada em qualquer reator de vareta combustível que utilize tal configuração. Com isso o programa será capaz, a partir de médias das propriedades para sólido e líquido da pastilha e revestimento e da geometria do núcleo, de prever o tempo aproximado

para o derretimento de um determinado ponto da vareta, além do desenvolvimento da temperatura ao longo do tempo e da posição radial do derretimento.

## 1.4 Organização do trabalho

O capítulo 1 fez uma breve introdução, com a motivação para a execução do trabalho devido a acidentes nucleares em que ocorreram acidentes severos. Segue-se a explicação do problema físico, do conjunto de pastilha de urânio e o revestimento de liga de zircônio que foi abordado na hipótese de um acidente, e por último os objetivos que serão atingidos ao final da dissertação. Já o capítulo 2 traz uma revisão bibliográfica com os trabalhos realizados e as soluções de alguns modelos que foram apresentados para mudança de fase, focando na solução pelo método de entalpia utilizando diferenças finitas e parâmetros concentrados, além de análises de condução de calor na área de engenharia nuclear.

O capítulo 3 apresenta a equação de condução de calor, suas típicas condições de contorno e o complexo problema de mudança de fase, especificamente o derretimento. Posteriormente é apresentada a formulação matemática do problema físico que será resolvido. Já no capítulo 4 é apresentado o método de solução pelo método de entalpia e parâmetros concentrados clássico e aperfeiçoado. No capítulo 5 são apresentadas as soluções encontradas para as diferentes situações do problema, e então discutidas o resultado comparando os métodos. O capítulo 6, que é último capítulo, faz uma conclusão de toda a dissertação, apresentando algumas sugestões para trabalhos futuros.

## Capítulo 2

# Revisão Bibliográfica

Toda análise de condução de calor que tenha o emprego de mudança de fase serviu como base para o entendimento do trabalho a ser elaborado. É claro que trabalhos que envolvam geração de calor e condições de contorno de fluxo convectivo também serão muito importantes. Serão mostradas soluções analíticas e suas limitações, além dos diferentes modelos numéricos que podem contornar tais problemas, comparando-os entre si. O emprego de soluções de condução de calor que envolvam de alguma forma o problema físico abordado neste trabalho, mesmo que não haja mudança de fase, também será apresentado como forma de obter-se uma melhor compreensão do problema.

Além da evidente importância na área nuclear, como foi mostrado na introdução, o problema de mudança de fase se faz presente em diversas áreas. Ele ocorre em processos metalúrgicos, em solidificação de moldes, na engenharia ambiental e uma vasta aplicação na indústria de processo. Atualmente a mudança de fase tem sido estudada principalmente em sistemas de armazenamento de energia térmica, analisando a aplicação de materiais de mudança de fase (PCM - Phase Change Materials). Esses materiais de armazenagem de energia térmica são aplicados em diversas áreas como foi mostrada por Zalba et al. (2003).

Como mencionado anteriormente, a mudança de fase não é um problema de fácil solução. Grande parte disso é devido à sua condição de contorno, que varia de acordo com a propagação da solidificação ou fusão, fazendo com que a posição do contorno tenha que ser determinada como parte da solução.

Devido à ampla gama de aplicação da mudança de fase, aliado à grande dificuldade para obter soluções para o problema, observam-se na literatura muitos estudos relacionados à esta área.

## 2.1 Problema de Stefan

Clapeyron e Lamé (1831) estudaram pela primeira vez um problema envolvendo contornos móveis. Mais tarde, Stefan (1891) realizou uma análise do derretimento da calota polar, cuja família de problemas recebeu seu nome, o problema de Stefan. Para tal foi definido o número de Stefan,

$$St_e = \frac{c_p \Delta T}{L_m}. \quad (2.1)$$

O número de Stefan é um número adimensional que relaciona a capacidade calorífica e o calor latente do material em uma dada mudança de fase. Inicialmente ele foi concebido para problemas com regiões semi-infinitas, porém ele pode ser facilmente aproximado para problemas de regiões limitada. Note que no caso de propriedades físicas diferentes, o problema apresentará dois números de Stefan, um para a fase sólida e outro para a fase líquida.

Anos atrás, a única maneira de entender esta classe de problemas era por métodos analíticos. Neste mesmo trabalho, Stefan (1891) encontrou a solução exata para o problema, que foi chamado de método de Neumann. A solução é expressa em termos da função erro. Esse problema foi resolvido para coordenadas retangulares, que posteriormente foi estendido para coordenadas cilíndricas. A solução é obtida a partir das considerações iniciais como: condições de contorno de temperatura prescrita, soluções de regiões semi-infinitas, propriedades constantes e condição inicial de temperatura uniforme.

Devido à simplicidade da formulação do método de Neumann, ficou clara a necessidade de estudos mais detalhados nessa área para a soluções de casos mais reais. Abaixo serão mostrados trabalhos que apresentaram soluções analíticas e soluções numéricas, com surgimento mais recente (a partir da década de 70). Note que serão mostrados alguns trabalhos que foram mais importantes para a compreensão da evolução das soluções, e então nem todas as metodologias serão mostradas.

Muitos autores tentaram obter soluções analíticas que aperfeiçoem o método de Neumann. Motivado pelo cálculo de congelamento em lagos através do ar frio em sua superfície em que a interface se propague de acordo com a profundidade do lago, York e Badfalo (1968) resolveram a equação diferencial por superposições de soluções. Diferente do método de Neumann, foi utilizado uma placa com uma região limitada. A solução exata pode ser encontrada aplicando-se um número infinito de superposições, o que de forma prática não é possível. A exatidão da solução dependerá do número de superposições que será empregada.

Sahin e Dincer (2000) conseguiram uma solução aproximada com fluxo convectivo e uma região unidimensional limitada, realizando uma solução um pouco diferente. Para o estudo da solidificação, a equação de condução de calor para a fase líquida foi encontrada utilizando-se uma aproximação para regime permanente, tornando o problema de uma única região, neste caso a formação da região sólida. A equação diferencial para a fase sólida é aproximada por um polinômio de segunda ordem. Apesar de serem incorporadas as condições de contorno de fluxo convectivo, a solução é adequada quando a mudança de fase atinge o regime permanente antes do derretimento por completo do sistema, ou quando a condutividade térmica da fase em regime permanente é muito alta e a sua espessura é muito pequena. As aproximações fazem com que esta solução se afaste do problema aqui estudado, já que o referente estudo apresenta duas regiões antes da ocorrência de qualquer mudança de fase.

Como já era esperado para um problema de mudança de fase, as soluções analíticas, mesmo com aproximações, têm o seu emprego extremamente limitado. Então as soluções híbridas e numéricas se fazem necessárias. Nas próximas seções, será mostrada uma série de soluções numéricas encontrada na literatura.

## 2.2 Métodos de Solução

A limitada aplicação das soluções analíticas e o grande interesse no estudo do problema de Stefan resultaram em um amplo número de métodos de soluções para a mudança de fase. Dentre as possíveis métodos de soluções, têm-se:

- Método de iteração variacional;
- Método de solução HBI;
- Método de solução por parâmetros concentrados;
- Método de solução por perturbação;
- Método de malha fixa;
- Método de malha variável;
- Método de passo de tempo variável;
- Método de entalpia.

Para fins didáticos os métodos acima podem ser subdivididos em métodos híbridos e métodos numéricos. Os métodos híbridos são aqueles em que a parte inicial da solução é desenvolvida analiticamente com aproximações da metodologia, facilitando um posterior cálculo numérico. São exemplos dessa abordagem: Método de iteração variacional, método de solução por perturbação, método de solução HBI e método de solução por parâmetros concentrados. Os métodos numéricos são aqueles em que o esforço está em encontrar a solução discretizada da equação diferencial parcial de condução de calor. São exemplos dessa abordagem: Métodos de malha fixa, método de malha variável, método de passo de tempo variável e método de entalpia.

O método de iteração variacional (VIM, *Variational Iteration Method*) é um método novo para cálculo analítico com solução aproximada. O método é baseado na aplicação da solução por operadores lineares e não lineares. Jafari (2008) solucionou o problema de Stefan utilizando esse método, o qual por ser recente, e não apresentar estudos significativos sobre o potencial para a solução em problemas mais complexos, impossibilita qualquer aplicação mais detalhada do mesmo.

O método de balanço integral de calor (HBM, *Heat balance integral method*) foi desenvolvido na década de 60. Apesar de ser um método antigo, foi muito estudado e apresentou bons resultados para problemas de Stefan. A solução se baseia em função do desenvolvimento de um perfil de temperatura previamente estudado. Por exemplo, podem ser encontrados na bibliografia soluções para casos de

perfil linear (Bell, 1978), perfil quadrático (Tarasuk et al., 1987) e perfil exponencial (Myers, 2010). Bell (1978) mostrou o modelo de HBM para derretimento onde foram aplicadas subdivisões da geometria para a apresentação de resultados mais refinados. Tarasuk et al. (1987) realizaram a solução por HBM utilizando o método de entalpia, provando que o método de entalpia funciona muito bem para os problemas simples.

Apesar do refinamento da solução ao longo dos anos, tal solução ainda é aplicada em problemas relativamente simples. Nestes casos são estudados a propagação em uma única região, ou seja, o perfil através da região de menor interesse é mantida constante. Nada impede que o método seja estendido e usado no problema que será estudado, porém não seria o mais indicado já que não existem estudos com múltiplas regiões.

O método de parâmetros concentrados será revisado adiante. Apesar de ser uma metodologia mais recente para mudança de fase, este foi escolhido devido à facilidade de implementação para casos mais complicados, apresentando estudos para casos da engenharia nuclear, que também serão vistos posteriormente.

Solução por perturbação é outro método que é utilizado em mudança de fase, que foi iniciado na década de 70. Devido a sua essência de perturbação, a solução é validada somente para pequenos números de Stefan, e será mostrado um trabalho com maior grau de complexidade para o método utilizando geração de calor.

Os métodos acima exigem um tratamento analítico e por isso apresentam baixa aplicabilidade. Desta forma o estudo por métodos numéricos são os mais indicados. Abaixo serão mostrados métodos numéricos como malha fixa, malha variável, passo de tempo variável e método de entalpia.

Hu e Argyropoulos (1996) mostrou os métodos que utilizam malha fixa e malha variável. O método que utiliza uma malha fixa é de formulação mais simples, onde todo sistema é discretizado normalmente e a propagação da interface propaga de modo irrestrito na malha. Já a formulação com malha variável é muito mais complexa. A ideia é manter a interface de mudança de fase sempre no mesmo nó fazendo com que a discretização comprima e estique de acordo com a propagação. A solução por entalpia faz com que a equação seja escrita em termos da entalpia do material, mantendo a relação entre entalpia e temperatura.

No mesmo trabalho, Hu e Argyropoulos (1996) revisaram os trabalhos de solidificação e derretimento por modelos numéricos, com o uso de diferenças finitas, elementos finitos e método de elemento de contorno. Hu e Argyropoulos (1996) observaram que o sucesso de elementos finitos e método de elemento de contorno encontram-se no controle de geometrias complexas, porém também são conhecidos por consumirem mais tempo em termos computacionais e de programação. Por causa da simplicidade na formulação, a técnica de diferenças finitas é, de senso comum, a mais popular na literatura.

Hu e Argyropoulos (1996) também compararam os resultados analíticos para o problema de malha fixa e variável, concluindo que a solução com malha variável apresenta resultados mais acurados, porém sua implementação é muito mais complexa. Foi observado também que a solução pelo método de entalpia apresenta um alto número de publicações, sendo a mais utilizada na literatura.

O algoritmo utilizando o passo de tempo variável é a metodologia mais nova encontrada na literatura, a qual foi apresentada por Zhaochun et al. (2011). O algoritmo funciona calculando um novo passo de tempo, onde a cada passo de tempo a interface de mudança de fase se propaga de um nó para o próximo. O autor comparou com a solução analítica, e obteve ótimos resultados. Entretanto Zhaochun et al. (2011) concluíram que o método possivelmente apresenta solução para problemas de duas regiões (sólida e líquida), mas ainda precisa ser estudado. Apesar da metodologia de passo de tempo variável apresentar um grande potencial para soluções mais complexas, ainda é muito cedo para a utilização deste novo algoritmo numérico.

Com o objetivo de comparar várias metodologias de solução, Caldwell e Kwan (2004) implementaram a solução de algumas metodologias como perturbação, HBI, entalpia e malha variável. Para o problema de Neumann, as soluções foram comparadas com a solução analítica e todas apresentaram ótimos resultados. Caldwell e Kwan (2004) compararam as metodologias em um problema sem solução analítica, para geometria esférica e cilíndrica. Todos os métodos apresentaram resultados similares, concluindo que todos os métodos são de confiança para a solução do problema de Stefan.

Apesar dos resultados similares, Caldwell e Kwan (2004) observaram algumas peculiaridades para cada metodologia. O método HBI apresentou bons resultados para condições de contorno constantes, porém a extensão para outras condições de contorno foi muito complicada. Além disso, apresentou uma formulação muito complicada, sendo utilizado normalmente com o propósito de validação. O método de perturbação também apresentou formulação complicada, em que se utiliza um alto número de variáveis. Como já foi explicado acima, Caldwell e Kwan (2004) mostraram que a solução funciona para um pequeno número de Stefan. Para aproximações mais detalhada, o modelo pode funcionar bem para número de Stefan de até 0,7. O método de entalpia apresentou formulação simples, com um esforço dedicado à sua programação. Porém, a necessidade de método iterativo faz com que o procedimento computacional seja mais demorado, e a solução apresenta oscilações próximas à interface de mudança de fase. Já o método de malha variável apresentou um tempo computacional menor quando comparado com os outros, o que possibilita alta acurácia para com o refinamento da malha. Porém esta metodologia necessita de um solução inicial, para que possa funcionar.

### 2.2.1 Método de entalpia

Os métodos citados acima resolvem os problemas de mudança de fase, porém não são analisados para um problema mais complexo: com geração de calor, condições de contorno mais complexas e principalmente múltiplas regiões, como no estudo proposto para esse trabalho. Para isso, a formulação por entalpia parece ser uma boa opção. Como já foi falado acima, apesar da solução apresentar uma formulação mais simplificada e ótimos resultados pontuais para a temperatura e propagação da interface, esta formulação pode apresentar respostas com oscilações numéricas sem sentido físico em torno da interface de derretimento. Podemos observar a oscilação no gráfico da figura 2.1, que mostra a evolução temporal da temperatura em um determinado ponto da geometria.

Outro problema recorrente é o custo computacional, em que a solução implícita apresenta um método iterativo e a solução explícita necessita de um baixo passo de tempo. Pham (1985) mostrou na literatura que pode ocorrer do custo computacional

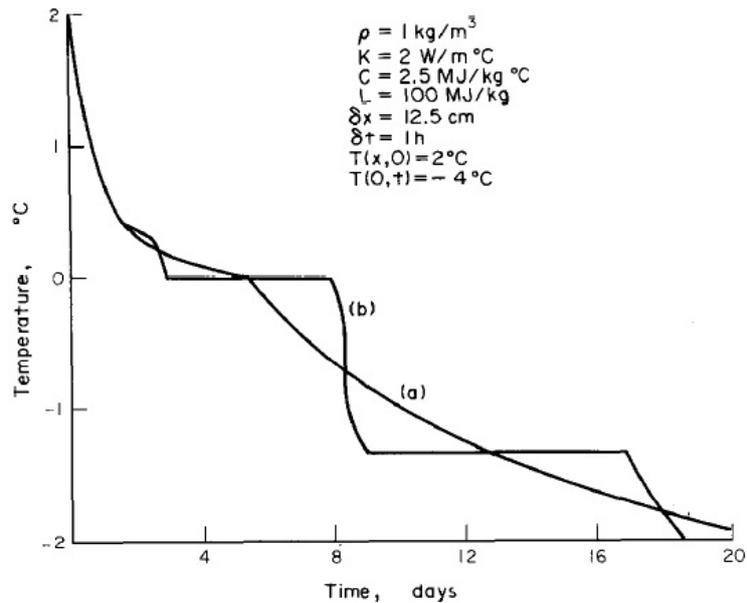


Figura 2.1: Oscilações da solução por método de entalpia (Voller e Cross, 1981)

ser maior para o caso da solução implícita. Devido a isso, muitos trabalhos foram realizados a fim de minimizar tal problema. Um bom exemplo foi o trabalho de Pham (1985), em que o problema foi solucionado acoplando a solução de entalpia explícita e uma solução por temperatura utilizando a capacidade volumétrica.

Para o gráfico da figura 2.1, Voller e Cross (1981) fez um trabalho muito importante para contornar o problema da oscilação. O mais importante é que o procedimento não modificou a base da solução do método de entalpia, e os resultados foram encontrados para uma metodologia explícita e apresentaram erros menores que 0.1% quando comparados com soluções analíticas. Como resultado do procedimento, a figura 2.2 mostra o perfil da temperatura no tempo para uma posição fixa.

Segundo Voller (1985), o procedimento pode ser aplicado também para uma metodologia implícita, minimizando as oscilações. Também foram mostradas várias metodologias implícitas, inclusive um novo conceito de solução por entalpia, criado por Voller (1985), onde o calor latente é tratado como uma fonte de calor variável no tempo. Neste trabalho foi feita a revisão de várias soluções. Todas apresentaram resultados similares, porém a nova metodologia implicou em um menor esforço computacional.

Vale a pena reforçar que a metodologia por entalpia necessita de um modelo

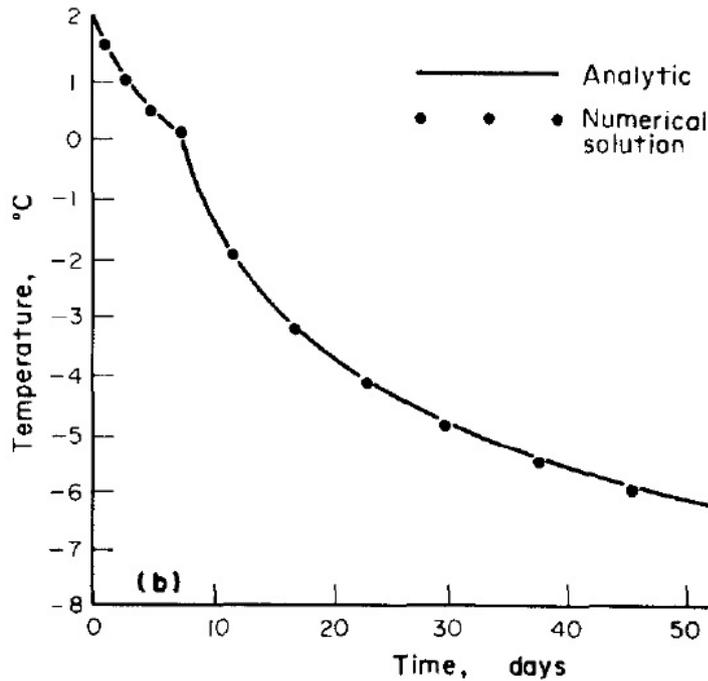


Figura 2.2: Solução por método de entalpia modificado (Voller e Cross, 1981)

de discretização. Todas as soluções mostradas acima apresentam uma discretização por diferenças finitas, mas outros modelos se fazem presentes. Como por exemplo, a solução de Krabbenhoft et al. (2007), que apresentou uma solução para o problema com região única utilizando a formulação de entalpia com a metodologia de elementos finitos implícitos. Porém este tipo de solução para o problema é pouco utilizado, sendo mais comum a solução por diferenças finitas (Hu e Argyropoulos, 1996). Por isso, em todo trabalho foi utilizada a discretização somente por diferenças finitas.

Apesar das desvantagens do método como a oscilação numérica e o custo computacional elevado, que aos poucos são contornados, o método apresenta algumas vantagens fundamentais. São elas a maior facilidade de implementação e resultados mais acurados quando comparado com a solução por diferenças finitas clássica (Hu e Argyropoulos, 1996).

## 2.2.2 Parâmetros concentrados

Mennig e Ozisik (1985) desenvolveram uma formulação de parâmetros concentrados aperfeiçoada para condução de calor com mudança de fase, que inicialmente

chamaram de aproximação da integral acoplada. O trabalho foi voltado para a solução da posição da interface de mudança de fase no derretimento de uma placa semi-infinita. Desta forma, os esforços foram voltados para encontrar uma equação diferencial para a posição da interface. Para placa semi-infinita existe apenas uma região, ou seja, uma equação diferencial para a condução de calor e outra para a interface. Já para a região de tamanho infinito apresenta temperatura constante, não sendo necessário cálculos. Nesta primeira formulação aperfeiçoada de parâmetro concentrado foi utilizada a regra do trapézio para a aproximação das integrais.

Posteriormente, Cotta et al. (1990) aplicaram a formulação para placas de espessura finita, utilizando condições de contorno de temperatura prescrita em cada superfície. Inicialmente a placa é totalmente sólida e a temperatura da parede que estiver acima da temperatura de derretimento iniciará a propagação do derretimento. Neste caso o problema apresenta duas regiões: uma sólida e outra líquida, fazendo com que sejam introduzidas novas equações ao problema inicial.

A solução da posição da interface foi realizada para a aproximação de integral pela regra do trapézio e com uma aproximação de maior ordem. As soluções serão iguais, já que com condição de contorno de temperatura constante as suas derivadas serão zero. Porém, caso a temperatura na parede que inicia a propagação fosse variável com o tempo, teríamos soluções diferentes.

Para ambos os trabalhos, com a vantagem de uma solução não muito complexa, os resultados foram obtidos analiticamente após as aproximações das integrais. E as soluções apresentaram boa acurácia quando comparados com soluções por diferença finita.

Depois disso, muitos trabalhos de transferência de calor utilizaram parâmetros concentrados aperfeiçoados. Corrêa e Cotta (1998) fizeram a solução geral de problemas difusivos com condições de contorno de convecção e um termo fonte na equação, porém obtiveram a solução para uma única região. Neste trabalho, Corrêa e Cotta (1998) compararam as soluções de parâmetros concentrados clássico e parâmetros concentrados aperfeiçoado de diferentes ordens com a solução analítica do problema. Foi possível observar que as soluções com um baixo número de Biot ( $Bi$ ) foram todas validadas com a solução analítica. Porém quando o número de

Biot foi maior do que 0,1 ( $Bi > 0,1$ ) a solução clássica foi degradada apresentando péssimos resultados, mostrando que essa aproximação é limitada para problemas com o número de Biot baixo, ou seja, onde a transferência de calor por convecção na superfície é pequena quando comparada com a condução de calor do corpo. Já para parâmetros concentrados aperfeiçoados, as soluções para um alto número de Biot continuam acuradas com um desvio médio menor do que 2%.

Pouco tempo depois, Regis et al. (2000) implementaram o problema para um caso de engenharia nuclear real de vareta combustível, sem a presença de mudança de fase. Utilizou coordenadas cilíndricas para representação do revestimento e do combustível. Neste caso, a análise é muito mais complexa devido à modelagem das duas regiões com condições de contorno de convecção para ambas, já que também foi considerado o espaçamento entre ambos, modelado pelo coeficiente de transferência de calor. Novamente as soluções de parâmetros concentrados foram comparadas com diferenças finitas. O número de Biot foi controlado pelo coeficiente de transferência de calor do fluido do núcleo, que nesta real situação apresentou altos valores. Com a variação do coeficiente de transferência de calor, as regiões simularam um transiente que após certo tempo atingiram o regime permanente. Regis et al. (2000) verificaram novamente que a solução de parâmetros concentrados clássico não foi satisfeita, principalmente para o perfil da temperatura média do combustível, onde há uma maior variação de temperatura. E novamente, a modelagem parâmetros concentrados teve uma ótima concordância com a solução numérica para toda faixa de números de Biot.

Novamente sem a presença de mudança de fase, foi realizada por Su e Cotta (2001) uma análise hidráulica acoplada com a neutrônica do núcleo para um reator PWR, em que era analisado o transiente de calor no conjunto pastilha revestimento. Sabendo-se que a mudança da reatividade ou a perda parcial do refrigerante do circuito primário do reator reduz o escoamento do núcleo, e implica em um transiente de calor para a potência, temperatura do revestimento, do combustível e até mesmo para a temperatura do refrigerante, foram comparados os parâmetros concentrados clássico com o aperfeiçoado. No caso de inserção de reatividade, as soluções apresentaram perfis parecidos, porém com resultados diferentes. Já no caso de perda

parcial de escoamento as soluções são completamente diferentes.

Depois disso, foram abordados alguns trabalhos de parâmetros concentrados, onde eram comparadas as soluções de parâmetros clássicos com parâmetros aperfeiçoados. Su (2001) comparou para uma placa com um resfriamento assimétrico, onde as duas condições de contornos eram de fluxo convectivo, diferente em cada lado. Como esperado, a solução clássica e regra de trapézio apresentaram piores resultados. Outro avanço de parâmetros concentrados aperfeiçoado realizada por Su et al. (2009) foi solução em placas com a introdução da condutividade térmica dependente da temperatura, com variação linear para diminuir o esforço computacional. Novamente a solução de parâmetros concentrados aperfeiçoados apresentam ótimas soluções quando comparadas com soluções numéricas.

Pode-se observar que em todos os trabalhos de parâmetros concentrados para equação de condução de calor sem mudança de fase, as soluções aperfeiçoadas apresentaram ótimos resultados. Já as soluções de parâmetros concentrados clássico não são indicadas para número de Biot altos. Não existem muitos trabalhos envolvendo mudança de fase, e não foi encontrado nenhum trabalho quando a mudança de fase envolve múltiplas regiões e condições de contorno de fluxo convectivo.

Porém quando comparado com outros métodos híbridos ou métodos analíticos aproximados, este é o método mais indicado para a modelagem do problema físico deste trabalho, pois apresenta uma formulação mais concisa, facilitando a implementação para o problema com múltiplas regiões. O mais importante é que tal método já foi estudado para solucionar um problema físico muito parecido com o proposto.

## 2.3 Problemas com geração volumétrica de calor

Existem muitos trabalhos que mostraram as modelagens utilizadas acima, porém trabalhos que implementam a geração volumétrica de calor na equação de condução foram pouco estudados. Segundo Jiji e Gaye (2006) uma das principais aplicabilidades é em varetas combustíveis de reator nuclear. A introdução desse termo faz com que não exista solução analítica.

Devido a isso, Crepeau e Siahpush (2008) encontraram uma solução analítica

aproximada semi-estacionária unidimensional com coordenadas cilíndricas para condição de contorno de temperatura prescrita na parede do cilindro. A propagação do derretimento é realizada de dentro para fora, como em uma vareta de um reator nuclear. O regime estacionário foi considerado para a equação de calor, encontrando a solução analítica para as fases sólida e líquida, precisando somente satisfazer a equação da interface para que a sua propagação seja encontrada. Posteriormente Crepeau et al. (2009) compararam a mesma solução com a solução de um modelo usando a fluidodinâmica computacional (CFD), no programa Ansys Fluent. A comparação mostrou que a solução apresentou boa concordância para número de Stefan menor do que um e que a solução coincidiu quando o derretimento entra em regime permanente, como era esperado.

A implementação de um termo fonte na equação foi estudada por Yu et al. (2010) utilizando o método de perturbações. A solução foi obtida para um problema de solidificação, em que foi suposto que a geração volumétrica de calor afetaria somente a fase sólida. A solução apresentou bons resultados somente para baixos números de Stefan e um erro considerável com o seu aumento. Yu et al. (2010) concluiu que tal solução não foi apropriada, pois a geração de calor afetará ambas as fases. Desta forma, a aplicação de geração de calor para as duas fases precisa ser estudada.

Ambos os métodos se mostram de pouca utilidade para o problema de derretimento do conjunto pastilha e revestimento, já que apesar de todo o esforço para a solução com a implementação da geração de calor, a solução é aproximada. Seria interessante obter a solução, se o problema físico atingisse o regime permanente, calculando-se o tempo exato, porém com um perfil sem sentido físico. A solução aproximada híbrida em que pode ser implementada a geração de calor é por parâmetros concentrados, pois o termo fonte pode ser facilmente integrado durante a solução. Esta facilidade ficará exemplificada abaixo em trabalhos aplicados a reatores nucleares.

Não existem trabalhos específicos para o uso de métodos numéricos com um termo fonte, pois para soluções numéricas a adição de um termo fonte não traz nenhuma dificuldade para a formulação e implementação do método. Porém nada

se pode afirmar quanto ao exato comportamento das oscilações numéricas do método de entalpia, quando a mudança de fase ocorre justamente devido ao termo fonte de geração de calor.

## 2.4 Problema com condição de contorno de 3º tipo

Assim como o termo fonte de geração de calor, a condição de contorno de 3º tipo presente no problema físico também dificulta a formulação e implementação. Apesar de toda dificuldade, Zubair e Chaudhry (1994) conseguiram encontrar a solução exata para mudança de fase com equação do 3º tipo (fluxo convectivo), que foi resolvida utilizando a função erro. Este trabalho apresentou a solução exata mais complexa para problemas de mudança de fase, porém ainda assim foi aplicada a uma placa semi-infinita. A solução quando aplicada a condição de contorno de temperatura constante reduz-se à solução de Neumann. Tal trabalho pôde ajudar na análise da solução por outros métodos através de comparação de resultados.

Wang e Ma (1994) apresentaram a solução utilizando o método HBI utilizando um domínio finito e com solução nas duas fases. Essa solução fez com que o método HBI pudesse ser utilizado em soluções mais complexas. Também foi desenvolvido um modelo experimental utilizando quatro módulos de resfriamento termoelétrico. O experimento foi realizado para o congelamento da água destilada e degaseificada, e então os processos tiveram seus procedimentos comparados. Wang e Ma (1994) concluíram que a técnica experimental foi efetiva para condição de contorno de 3º tipo, e que a duração do derretimento foi maior experimentalmente do que a solução matemática, devido à convecção natural que ocorre no líquido ser negligenciada na solução numérica.

A aplicação da condição de contorno de 3º tipo mostrada acima é diferente da desejada para o problema de condução de calor em vareta combustível. É muito comum encontrar soluções em que o derretimento ou o congelamento da geometria ocorre exclusivamente devido à sua condição de contorno. No caso da vareta combustível o derretimento da pastilha ocorre devido ao termo de geração de calor, e à condição de contorno convectiva, que agem acoplando as regiões. Especifica-

mente, para a região do revestimento, ambas as condições de contorno são de fluxo convectivo, em que o fluxo de calor se propaga ocasionando o derretimento.

A priori, o método de parâmetros concentrados não apresenta dificuldades na implementação desse tipo de condição de contorno. Chen et al. (1976) implementaram a solução de mudança de fase utilizando o modelo clássico de parâmetros concentrados. Porém, as soluções utilizando parâmetros concentrados aperfeiçoados com mudança de fase não foram encontradas na bibliografia.

A solução por método de entalpia utilizando diferenças finitas não levaram em consideração as condições de contorno mais complexas. As equações serão a mesma quando as condições de contorno são de temperatura constante, o que não ocorre para os outros tipos de contorno. Nas regiões convectivas será aplicada a metodologia de nó fictício. Esses aprimoramentos para solução pelo método de entalpia serão descritos mais adiante, os quais implicarão em novas equações para nós específicos da malha.

## 2.5 Problemas aplicados a reatores nucleares

Existem muitos trabalhos aplicados à condução de calor em varetas combustíveis sem a mudança de fase, em que se estuda o comportamento de fases transientes em LWR com diferentes soluções numéricas, um exemplo disso foi Ghiaasiaan et al. (1985).

Neste trabalho foram utilizados vários métodos numéricos, analisando transientes rápidos e lentos em caso do núcleo descoberto e enchimento do núcleo em um LOCA. Ghiaasiaan et al. (1985) concluíram que em transientes um pouco mais lentos, com o descobrimento do núcleo, os métodos apresentaram bons resultados. Já para transientes mais rápidos, como o enchimento do núcleo, o resultado por parâmetros concentrados clássicos não foi muito acurado quando comparado com os outros.

Existem muitos estudos da condução de calor transiente utilizando parâmetros concentrados, devido à sua facilidade de formulação. Alguns desses tipos de trabalhos já foram falados acima, como por exemplo Regis et al. (2000) e Su e Cotta

(2001). Porém Chen et al. (1976) modelaram a condução de calor com mudança de fase em varetas combustíveis. Devido à dificuldade de encontrar trabalhos com mudança de fase em reatores nucleares que utilizassem outras metodologias de solução. O trabalho de Chen et al. (1976) foi muito importante para o nosso estudo, já que outros trabalhos não foram encontrados.

Chen et al. (1976) elaboraram um modelo de parâmetros concentrados clássico para condução de calor com mudança de fase com uma série de simplificações. Foram assumidos as propriedades médias iguais nas fases sólida e líquida, tanto para a pastilha quanto para o revestimento, o tamanho do gap não foi considerada, fazendo com que o raio do combustível seja o mesmo que o raio interno do revestimento. Porém o coeficiente de transferência de calor foi considerado como uma resistência na passagem; A transferência de calor no espaçamento entre a pastilha e o revestimento foi mantida constante durante todo o processo; A solução temporal foi linearizada. Para facilitar a análise, as equações foram divididas em diferentes etapas:

- Fase transiente antes do derretimento do revestimento;
- Fase do derretimento do revestimento;
- Fase transiente antes do derretimento da pastilha de urânio;
- Fase do derretimento da pastilha de urânio.

Apesar de ser realizada uma solução unidimensional com temperatura média do revestimento e da pastilha, a solução foi estendida para a direção longitudinal, com soluções pontuais em diferentes termos de geração de calor nesta direção.

Este trabalho foi motivado por reatores de teste para LMFBR, em que o fluido refrigerante é o sódio, comparando-se o tempo de derretimento. Nesta situação a metodologia foi comparada com o código SAS, um programa de análise de acidentes com sódio em LMFBR baseado em resultados experimentais. Obteve-se boa concordância quando comparado o tempo de derretimento do revestimento com o derretimento de 95% do código SAS, o ponto máximo em que o código experimental apresenta resultado. Comparou-se o tempo de derretimento do combustível e do

revestimento para diferentes direções axiais com outro código, cuja soluções tiveram uma ótima concordância.

Chen et al. (1976) concluíram que a solução apresentou um grande potencial, com uma simples formulação e pouco esforço computacional, determinando o tempo de eventos importantes em caso de acidente, com uma relativa confiabilidade.

Não foi encontrado na literatura nenhum código aberto utilizando qualquer metodologia numérica, para modelar o problema de derretimento em varetas combustíveis.

## 2.6 Resumo e comentários

Foi apresentada a importância da solução de problemas envolvendo mudança de fase, aplicando-se em um grande número de problemas de engenharia. Portanto foram feitos muitos trabalhos para o problema de mudança de fase, em que seus autores utilizaram uma vasta gama de metodologia para sua solução. A mudança de fase apresentou solução analítica apenas em casos simplificados (Sahin e Dincer, 2000), a qual é utilizada para comparação com outros métodos. Porém quando analisa-se o problema do conjunto pastilha revestimento, onde as regiões estão acopladas e com condição de contorno de convecção e geração de calor, poucas soluções são realmente aplicáveis ao problema proposto.

Das soluções híbridas que exigem um maior esforço para a sua formulação, os métodos de HBI e parâmetros concentrados são o mais indicado. Devido a alguns trabalhos já terem sido voltados para a engenharia nuclear, principalmente o realizado por Chen et al. (1976), isto fez com que a aplicação de parâmetros concentrados seja uma boa opção. A escolha faz com que a utilização de parâmetros concentrado aperfeiçoado de Mennig e Ozisik (1985) deva ser averiguada neste trabalho.

Observaram-se inúmeras soluções numéricas para o problema de mudança de fase, em que Hu e Argyropoulos (1996) mostrou que a discretização mais utilizada é diferenças finitas. Os melhores modelos numéricos encontrados foram o método de entalpia e método de malha variável. O método de malha variável apresenta uma formulação muito complexa, fazendo com que a solução numérica a ser utilizada no

trabalho seja a metodologia por entalpia. Note-se que esta formulação apresenta dois problemas, um maior custo computacional e algumas oscilações na solução. Para evitar isso, a implementação de Voller (1985) será implementada.

Assim o problema será formulado utilizando parâmetros concentrados e o método de entalpia. É importante ressaltar que soluções que serão apresentadas neste trabalho terão um tempo total abaixo da situação real de mudança de fase, como analisado experimentalmente por Wang e Ma (1994), pois não serão implementados a convecção de calor presente na fase líquida.

# Capítulo 3

## Fundamentos e Formulação

### Matemática

Neste capítulo será apresentada a dedução da equação de condução de calor, e suas possíveis condições de contorno para a solução da equação. A equação será reduzida de acordo com a simplificação que adotaremos no trabalho. Serão relatados os fundamentos envolvendo a mudança de fase. Por último será realizada a formulação do problema com as duas regiões, combustível e revestimento, incluindo a equação do movimento da interface devido à mudança de fase, quando aquecido o conjunto.

#### 3.1 A equação da condução de calor

Considerando a condução de calor em um volume infinitesimal, como mostrado na figura 3.1. O balanço de energia neste elemento será dado por:

$$\underbrace{\left( \begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{da quantidade de} \\ \text{energia do volume} \end{array} \right)}_I = \underbrace{\left( \begin{array}{c} \text{Taxa de geração} \\ \text{de calor} \\ \text{no volume} \end{array} \right)}_{II} + \underbrace{\left( \begin{array}{c} \text{Taxa de calor} \\ \text{que atravessa} \\ \text{cada face} \end{array} \right)}_{III}$$
$$\frac{\Delta E}{\Delta t} = \dot{E}_{gerada/elemento} + \sum_c \dot{Q}_c \cdot n_c \quad (3.1)$$

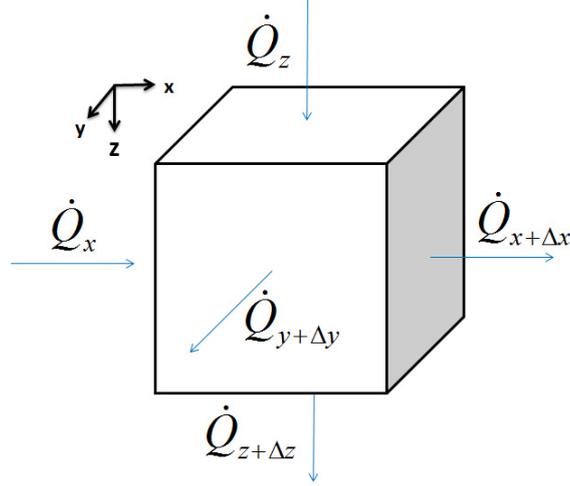


Figura 3.1: Volume infinitesimal de um sólido qualquer

Para um volume infinitesimal sólido em que a variação de energia é encontrada somente na forma de calor, o termo I da equação será:

$$\frac{E_{t+\Delta t} - E_t}{\Delta t} = \partial m c_p \frac{T_{t+\Delta t} - T_t}{\Delta t} = \rho c_p \partial v \frac{T_{t+\Delta t} - T_t}{\Delta t}.$$

Passado ao limite para  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\rho c_p \partial v \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{T_{t+\Delta t} - T_t}{\Delta t} = \rho c_p \partial v \frac{\partial T}{\partial t}.$$

Já no termo II da equação, a energia gerada por elemento pode ser facilmente visto como:

$$\dot{E}_{gerada/elemento} = q''' \partial v.$$

No termo III, o somatório da taxa de calor que atravessa a face será:

$$\sum_c \dot{Q}_c \cdot n_c = \sum_c q_c'' \cdot n_c A_c.$$

Note que em  $\dot{q} \cdot n$ , onde  $n$  é a direção da face do volume, o sinal apresenta valor positivo para os fluxos que entram no elemento e negativo para os que saem do elemento, assim:

$$\sum_c q_c'' \cdot n_c A_c = (q_x'' - q_{x+\Delta x}'') A_x + (q_y'' - q_{y+\Delta y}'') A_y + (q_z'' - q_{z+\Delta z}'') A_z,$$

onde,  $A_x = \Delta y \Delta z$ ,  $A_y = \Delta x \Delta z$  e  $A_z = \Delta x \Delta y$ .

Multiplicando e dividindo cada termo por seu comprimento característico, e fazendo o limite para  $\Delta x, \Delta y$  e  $\Delta z \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta x, \Delta y \text{ e } \Delta z \rightarrow 0} \left( \frac{-(q''_{x+\Delta x} - q''_x)}{\Delta x} + \frac{-(q''_{y+\Delta y} - q''_y)}{\Delta y} + \frac{-(q''_{z+\Delta z} - q''_z)}{\Delta z} \right) \partial v = \\ = \left( -\frac{\partial q''_x}{\partial x} - \frac{\partial q''_y}{\partial y} - \frac{\partial q''_z}{\partial z} \right) \partial v, \end{aligned}$$

em que  $\partial v = \Delta x \Delta y \Delta z = \partial x \partial y \partial z$ . A equação acima para a taxa de calor que atravessa a face pode ser reescrita como:

$$\left( -\frac{\partial q''_x}{\partial x} - \frac{\partial q''_y}{\partial y} - \frac{\partial q''_z}{\partial z} \right) \partial v = -\nabla \cdot \vec{q}'' \partial v.$$

Finalmente os termos da equação 3.1 podem ser substituídos:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \partial v = q''' \partial v - \nabla \cdot \vec{q}'' \partial v. \quad (3.2)$$

A equação acima para um volume elementar pode ser integrada para um volume  $V$  genérico:

$$\int_V (\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}) \partial v = \int_V (q''' - \nabla \cdot \vec{q}'') \partial v. \quad (3.3)$$

Para a solução da equação acima, teremos a solução para um sólido isotrópico que:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = q''' - \nabla \cdot \vec{q}'' \quad (3.4)$$

A equação 3.4 ainda se apresenta com duas variáveis ( $T$  e  $\dot{q}$ ). Para reduzir a apenas uma variável utiliza-se a lei de Fourier, dada por:

$$\vec{q}'' = -k \nabla T. \quad (3.5)$$

Com isso a equação da condução de calor pode ser reescrita em função apenas da temperatura:

$$\rho c_p \frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T(\vec{r}, t)) + q'''(\vec{r}, t). \quad (3.6)$$

Seja a condutividade térmica homogênea e independente ao longo do volume, e definindo difusividade térmica  $\alpha = k/(\rho c_p)$  e geração constante no espaço e no tempo,  $q'''(\vec{r}, t) = g$ :

$$\frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T(\vec{r}, t) + \frac{g}{\rho c_p}. \quad (3.7)$$

A equação que governa o problema estudado nessa dissertação pode ser obtida utilizando coordenadas cilíndricas para um problema unidimensional na direção radial. Note que serão estudadas geometrias com e sem geração de calor.

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial t} = \alpha \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) + \frac{g}{\rho c_p}. \quad (3.8)$$

### 3.1.1 Condição de contorno

Agora que possuímos a equação de condução de calor, vemos que a equação 3.7 tridimensional necessita de uma condição inicial e seis condições de contorno, duas para cada direção. Consequentemente a equação 3.8 unidimensional deverá apresentar uma condição inicial e duas condições de contorno. As condições de contornos podem ser da seguinte forma: temperatura especificada, fluxo de calor especificado, condição de contorno de convecção e radiação (Çengel, 2009).

#### Tipo 1: Temperatura prescrita

É a forma mais fácil de especificar as condições de contorno, onde simplesmente é necessário especificar a temperatura naquela superfície exposta. Para uma dada superfície a condição é expressa como:

$$T(R, t) = T_0, \quad (3.9)$$

onde  $T_0$  é a temperatura especificada em uma distância  $R$  genérica. Essa temperatura pode ser constante ou variar com o tempo.

#### Tipo 2: Fluxo prescrito

Quando é possível saber ou determinar a taxa de transferência de calor e assim o fluxo de calor  $q''$  na superfície, a condição de contorno na superfície pode ser determinada pela lei de Fourier:

$$q''(R, t) = q_w'' = -k \frac{\partial T(R, t)}{\partial r}, \quad (3.10)$$

onde  $q_w''$  é o fluxo especificado em uma distância  $R$  genérica. O sinal do fluxo  $q_w''$  será positivo caso represente a entrada no domínio e negativo caso esteja saindo do

domínio. Existem dois casos especiais desse tipo de condição de calor, que são fluxo adiabático e simetria. O caso de fluxo adiabático é obtido com superfícies isoladas que reduz drasticamente o fluxo de calor nela, fazendo com que este fluxo possa ser considerado zero: ( $q_0'' = 0$ ).

$$-k \frac{\partial T(R, t)}{\partial r} = q_0'' = 0. \quad (3.11)$$

Desta forma a condição de contorno da superfície a uma distância  $R$  genérica será:

$$\frac{\partial T(R, t)}{\partial r} = 0. \quad (3.12)$$

Com relação a problemas com simetria térmica, que podem ocorrer em uma geometria simétrica, como por exemplo, em uma vareta combustível. O problema pode ser representado com a metade da geometria e o plano central pode ser analisado com simetria. A simetria faz com que os fluxos de calor se anulem, ou seja  $q_0'' = 0$ , fazendo com que a mesma equação 3.12 possa ser utilizada.

Note que para ambos os casos a primeira derivada da temperatura na face é zero, fazendo com que a função da temperatura tenha de seja perpendicular a face, tendo essa face um ponto de temperatura máximo ou mínimo.

### **Tipo 3: Fluxo convectivo**

Este tipo de condição de contorno é comumente encontrado, onde a superfície está exposta a um meio com uma dada temperatura. O balanço de energia na superfície indica que o calor continua a fluir de um corpo para o meio à sua volta na mesma taxa, e muda de condução para convecção na superfície, ou vice-versa:

$$-k \frac{\partial T(R, t)}{\partial r} = h(T(R, t) - T_\infty), \quad (3.13)$$

onde  $T_\infty$  é a temperatura do meio no qual a superfície está exposta. Note que a temperatura  $T(R, t)$  não é conhecida e pode ser determinada uma vez que temos a solução de  $T(\vec{r}, t)$ .

### **Condição de contorno de radiação**

Em aplicações em que a superfície está exposta a uma região de vácuo, não ocorre troca de calor por convecção. Desta maneira a radiação passa a ser o único

mecanismo de transferência de calor, com isso o balanço de energia da condição de contorno será:

$$-k \frac{\partial T(R, t)}{\partial r} = \epsilon \sigma (T^4(R, t) - T_s^4), \quad (3.14)$$

sendo  $\sigma$  a constante de Stefan-Boltzmann ( $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{W/m}^2 \text{K}^4$ ),  $\epsilon$  a emissividade do material e  $T_s$  é a temperatura do sumidouro de radiação. Note que diferentemente das três condições de contorno mostradas anteriormente, que são lineares, esta condição é não linear devido à equação 3.14 apresentar temperatura elevado a quarta potência, o que torna a solução mais complicada.

### 3.1.2 Adimensionalização

Às vezes é conveniente adimensionalizar as equações, pois diminuem o número de variáveis que controlam o problema físico sem que haja perda de informação, o que ajuda na compreensão do comportamento da equação. Abaixo será mostrado a adimensionalização da equação da condução de calor para coordenadas cilíndricas unidimensional (equação 3.8).

Inicialmente, normaliza-se a temperatura e o raio:

$$\theta = \frac{T - T_\infty}{T_0 - T_\infty}, \quad (3.15)$$

$$\eta = \frac{r}{R}. \quad (3.16)$$

Desta forma:

$$T = \theta(T_0 - T_\infty) + T_\infty, \quad (3.17)$$

$$r = \eta R. \quad (3.18)$$

Logo a derivada parcial espacial será:

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \eta}. \quad (3.19)$$

Assim com as equações 3.17, 3.18 e 3.19, a equação 3.8 pode ser reescrita:

$$(T_0 - T_\infty) \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\alpha}{\eta R} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta R \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) (T_0 - T_\infty) + \frac{g}{\rho c_p}, \quad (3.20)$$

$$\frac{R^2}{\alpha} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) + \frac{g_0 R^2}{k(T_0 - T_\infty)}. \quad (3.21)$$

Logo o termo de geração e o termo temporal adimensionalizado será, respectivamente:

$$G = \frac{g_0 R^2}{k(T_0 - T_\infty)}, \quad (3.22)$$

$$\tau = \frac{\alpha t}{R^2}. \quad (3.23)$$

Com isso finalmente a equação pode ser reescrita na sua forma adimensional:

$$\frac{\partial \theta(\eta, \Gamma)}{\partial \tau} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta \frac{\partial \theta(\eta, \Gamma)}{\partial \eta} \right) + G. \quad (3.24)$$

### 3.1.3 Mudança de fase

Problemas de derretimento (fusão) e congelamento (solidificação) são importantes em várias aplicações em engenharia, como por exemplo, produção de gelo, congelamento de alimentos, solidificação de materiais em fundição, entre outros. A solução para tal problema é dificultada devido a presença de uma interface entre o sólido e o líquido que se movimenta ao longo do tempo. A interface física entre as fases não é bem definida no espaço com a evolução no tempo. Deste modo é de fundamental importância que a localização desse contorno seja encontrada, de modo que a equação de calor possa ser resolvida. A interface traz consigo uma não linearidade que será explicitada posteriormente, e por isso fica muito complicado obter uma solução exata. Logo soluções aproximadas, semi-analíticas ou de métodos numéricos devem ser usadas para a resolução de tal problema (Özsisik, 1993).

Agora será mostrada a formulação para mudança de fase de problemas unidimensionais com derretimento. Um dos contornos é submetido a uma alta temperatura, um fluxo de calor, ou até mesmo uma geração de calor no sólido. Então o sólido começa a derreter quando atinge a sua temperatura de fusão no ponto de maior temperatura, fazendo com que o derretimento se propague com uma velocidade  $v_s$ , terminando assim que todo sólido tenha mudado de fase. Para uma melhor visualização, a figura 3.2 apresenta um esquema do derretimento com movimento da interface.

Desta maneira podemos escrever a equação de condução de calor para a fase

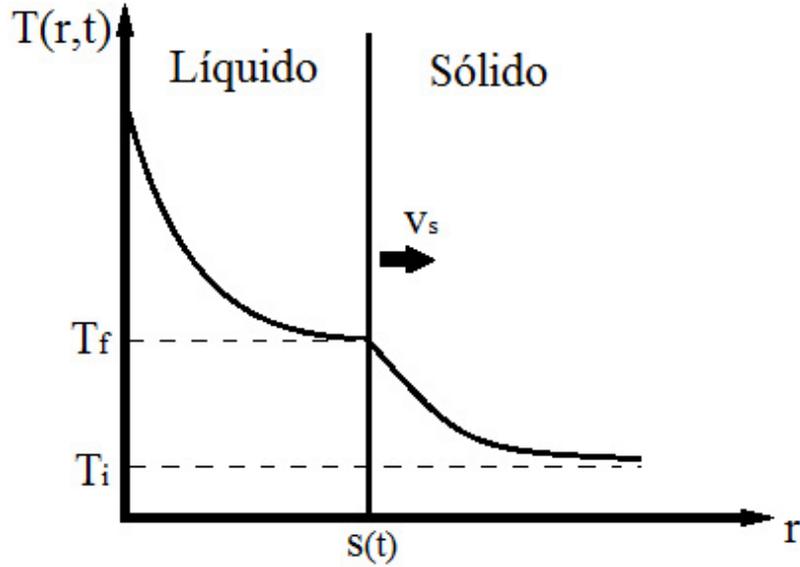


Figura 3.2: Esquema para um caso de derretimento

líquida e sólida, respectivamente:

$$\frac{\partial T_l(r,t)}{\partial t} = \alpha \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_l(r,t)}{\partial r} \right), \quad R_0 < r < s(t), \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial T_s(r,t)}{\partial t} = \alpha \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_s(r,t)}{\partial r} \right), \quad s(t) < r < R_1. \quad (3.26)$$

A posição da interface  $s(t)$  deve ser determinada como parte da solução, fazendo com que tenhamos três incógnitas a serem determinadas ( $T_l$ ,  $T_s$  e  $s(t)$ ) e duas equações. Logo uma terceira equação precisa ser considerada, sendo esta o balanço de energia na interface:

$$\left( \begin{array}{c} \text{fluxo de calor} \\ \text{que atravessa} \\ \text{a fase líquida} \end{array} \right) - \left( \begin{array}{c} \text{fluxo de calor} \\ \text{que atravessa} \\ \text{a fase sólida} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{Taxa de calor} \\ \text{absorvida durante} \\ \text{o derretimento} \end{array} \right),$$

ou seja,

$$-k_l \frac{\partial T_l}{\partial r} - \left( -k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) = \rho L \frac{\partial s(t)}{\partial r}, \quad r = s(t). \quad (3.27)$$

Observe que  $\frac{\partial s(t)}{\partial r} = v_s$ , deste modo:

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial r} = \rho L v_s(t), \quad r = s(t). \quad (3.28)$$

É fácil observar que a condição de contorno na interface entre o sólido e o líquido para ambas as equações 3.25 e 3.26 é dado por:

$$T_l(r,t) = T_s(r,t) = T_m, \quad r = s(t). \quad (3.29)$$

A equação 3.28 para interface não levou em consideração a diferença de densidade entre as duas fases. Existem algumas substâncias como água, bismuto e antimônio que apresentam a densidade do líquido maior que a do sólido ( $\rho_l > \rho_s$ ). Porém normalmente a densidade do sólido é maior que a do líquido ( $\rho_s > \rho_l$ ) como o material estudado no trabalho. Para tal caso onde  $\rho_s > \rho_l$ , a velocidade da interface na fase líquida deverá ser maior e a conservação de massa na interface por unidade de área é dada por:

$$\rho_l(v_s + v_l) = \rho_s v_s. \quad (3.30)$$

Então a fração extra da velocidade da fase líquida será:

$$v_l = \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_l} v_s. \quad (3.31)$$

Realizando a conservação de energia na interface, a taxa de calor absorvida no derretimento da interface será:

$$\rho_s H_s v_s - \rho_l H_l (v_s - v_l) = (\rho_s H_s - \rho_l H_l) v_s - \rho_l H_l v_l. \quad (3.32)$$

Substituindo a velocidade da fase de líquido teremos:

$$(\rho_s H_s - \rho_l H_l) v_s - \rho_l H_l v_l = \rho_s (H_s - H_l) v_s. \quad (3.33)$$

Como o calor latente  $L = (H_s - H_l)$ , finalmente a equação 3.28 pode ser reescrita para  $\rho_s > \rho_l$ :

$$k_s \frac{\partial T_s(r, t)}{\partial r} - k_l \frac{\partial T_l(r, t)}{\partial r} = \rho_s L v_s(t). \quad (3.34)$$

É importante ressaltar que caso o problema na fase líquida seja dominado pela convecção, o termo da difusão pode ser substituído e então o balanço de energia na interface seria dado por:

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} - h(T_f - T_\infty) = \rho_s L v_s. \quad (3.35)$$

Abaixo será mostrado a não linearidade que está implícita ao problema da movimentação da barreira. Fazendo a derivada total na equação 3.29 para um problema unidimensional:

$$dT_s(r, t)|_{r=s(t)} = dT_l(r, t)|_{r=s(t)} = dT_f,$$

$$\left[ \frac{\partial T_s}{\partial r} \partial r + \frac{\partial T_s}{\partial t} \partial t \right]_{r=s(t)} = \left[ \frac{\partial T_l}{\partial r} \partial r + \frac{\partial T_l}{\partial t} \partial t \right]_{r=s(t)} = 0. \quad (3.36)$$

Dividindo por  $\partial t$ :

$$\left[ \frac{\partial T_s}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial T_s}{\partial t} \right]_{r=s(t)} = \left[ \frac{\partial T_l}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial T_l}{\partial t} \right]_{r=s(t)} = 0. \quad (3.37)$$

Isolando a variação temporal da interface,

$$\frac{\partial s(t)}{\partial t} = v_s = -\frac{\partial T_s / \partial t}{\partial T_s / \partial r} = -\frac{\partial T_l / \partial t}{\partial T_l / \partial r}. \quad (3.38)$$

A equação de balanço de energia na interface, equação 3.34, pode ser reescrita substituindo  $v_s$  para qualquer um dos termos:

$$k_s \frac{\partial T_s(r, t)}{\partial r} - k_l \frac{\partial T_l(r, t)}{\partial r} = -\rho_s L \left( \frac{\partial T_s / \partial t}{\partial T_s / \partial r} \right). \quad (3.39)$$

Agora a não linearidade da equação da interface pode ser vista com facilidade, fazendo com que a solução do problema, quando inserido a mudança de fase, fique mais complicado.

## 3.2 Formulação matemática

Agora será mostrada a formulação matemática para o combustível e para o revestimento, como mostra na figura 1.6. Para a região do combustível, onde há geração de calor devido aos produtos de fissão quando desligado ou a energia gerada pela fissão, a equação da condução de calor (3.8) e suas condições de contorno podem ser escritas da seguinte forma:

$$\rho_f c_{pf} \frac{\partial T_f}{\partial t} = k_f \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_f}{\partial r} \right) + g, \quad 0 < r < R_f, \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial T_f}{\partial r} = 0, \quad r = 0, \quad (3.41)$$

$$-k_f \left[ \frac{\partial T_f}{\partial r} \right]_{r=R_f} = \frac{R_g}{R_f} h_g (T_f(r = R_f) - T_c(R_{ci})), \quad r = R_f. \quad (3.42)$$

A condição de contorno 3.41 é devido à simetria apresentada no centro da pastilha de  $UO_2$ , ou seja, em  $r = 0$ . É neste ponto que se inicia o derretimento da pastilha. A condição de contorno 3.42 é dada pela transferência de calor presente

no espaçamento entre o revestimento e a pastilha combustível. Esta condição de contorno faz com que as duas regiões do conjunto sejam acopladas, apresentando um termo da temperatura do revestimento na solução da equação para a pastilha.

A região do revestimento compreendida entre  $R_{ci} \leq r \leq R_{co}$  é modelada da seguinte maneira:

$$\rho_c c_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial t} = k_c \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_c}{\partial r} \right), \quad R_{ci} < r < R_{co}, \quad (3.43)$$

$$-k_c \left[ \frac{\partial T_c}{\partial r} \right]_{r=R_{ci}} = \frac{R_g}{R_{ci}} h_g (T_f(R_f) - T_c(r = R_{ci})), \quad r = R_{ci}, \quad (3.44)$$

$$-k_c \left[ \frac{\partial T_c}{\partial r} \right]_{r=R_{co}} = h_\infty (T_c(r = R_{co}) - T_\infty), \quad r = R_{co}. \quad (3.45)$$

Assim como na equação 3.42, a condição de contorno 3.44 é devido ao fluxo convectivo na parede interna do revestimento, e é a partir desta que ocorre o aquecimento da região. Já a condição de contorno 3.45 é devido à convecção de calor do refrigerante do reator.

Os regimes transientes são analisados a partir da mudança do coeficiente de transferência de calor, fazendo com que o refrigerante perca a capacidade de remover o calor. Outra importante variável que deveria ser conhecida é a temperatura do refrigerante, que em casos de acidente pode variar ao longo do tempo, fazendo com que o fluxo de calor para o refrigerante seja reduzido.

### 3.2.1 Derretimento

A perda da capacidade de resfriar o núcleo faz com que diminua o coeficiente de transferência de calor e a temperatura do núcleo aumentará até que a temperatura de derretimento seja atingida. A região do revestimento ou do combustível será dividida em duas regiões, uma para a fase líquida e outra para a fase sólida. Assim a equação 3.40 que governa a condução de calor para a pastilha será separada em duas fases:

$$\frac{\partial T_{fl}(r, t)}{\partial t} = \alpha_{fl} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{fl}(r, t)}{\partial r} \right) + \frac{g}{\rho_{fl} c_{pfl}}, \quad 0 < r < s_f(t), \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial T_{fs}(r, t)}{\partial t} = \alpha_{fs} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{fs}(r, t)}{\partial r} \right) + \frac{g}{\rho_{fs} c_{pfs}}, \quad s_f(t) < r < R_f. \quad (3.47)$$

A equação para o revestimento e as condições de contorno continuam inalteradas para a pastilha. No caso em que ocorra o derretimento do revestimento, a equação 3.43 será dividida em:

$$\frac{\partial T_{cl}(r, t)}{\partial t} = \alpha_{cl} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{cl}(r, t)}{\partial r} \right), \quad R_{ci} < r < s_c(t), \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial t} = \alpha_{cs} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial r} \right), \quad s_c(t) < r < R_{co}. \quad (3.49)$$

Seguindo a mesma lógica, as outras equações continuam inalteradas. Note que se caso tivéssemos o derretimento simultâneo das regiões, as equações 3.40-3.43 seriam divididas.

A posição da mudança de fase será determinada como parte da solução, logo outra equação de balanço de energia na interface será considerada:

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial r} = \rho_s L v_s(t), \quad r = s(t). \quad (3.50)$$

As equações 3.46, 3.47 (no caso de derretimento do combustível) ou as equações 3.48 e 3.49 (no caso de derretimento do revestimento) com a equação da interface 3.50, além de suas condições de contorno, devem ser resolvidas para se chegar à solução do problema.

### 3.2.2 Formulação por entalpia

Na formulação mostrada acima, a equação da energia é escrita separadamente para as fases sólidas e líquidas, e a temperatura é a variável dependente acoplada entre as fases pela interface, fazendo com que a formulação seja complicada. Para evitar estes problemas e a não linearidade da equação da interface, utiliza-se o método por entalpia. O problema é extremamente simplificado, pois é resolvida uma única equação de energia, onde não é necessário considerar as fases sólida e líquida separadamente e a equação da interface não se faz necessária. A figura 3.3 mostra a mudança de fase para entalpia em função da temperatura.

Para o caso *a* da figura, a entalpia pode ser escrita como:

$$h = \begin{cases} c_{ps}T & \text{se } T \leq T_m; \\ H_s + c_{pl}T & \text{se } T \geq T_m. \end{cases} \quad (3.51)$$

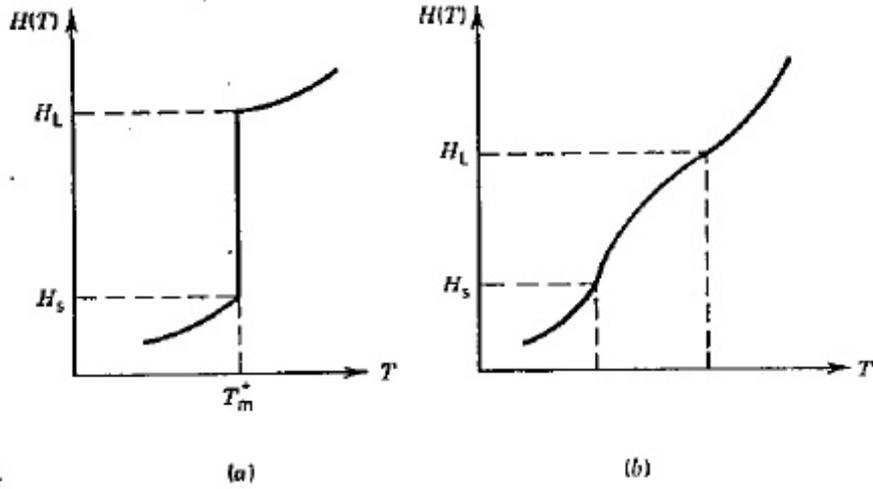


Figura 3.3: Entalpia em função da temperatura com mudança de fase (Özsisik, 1993)

Ayasoufi et al. (2004) definiram a entalpia da seguinte forma:

$$H = \rho h = \rho \int_0^T c_p dT + \phi L_m, \quad (3.52)$$

onde  $\phi = 0$  para fase sólida e  $\phi = 1$  para a fase líquida. Utilizando a definição a equação de condução de calor será:

$$\frac{\partial H(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla(k \nabla T(H)) + g(\vec{r}, t), \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + g. \quad (3.54)$$

Para a equação 3.54 ser resolvida, é necessário transformar os termos de temperatura em função da entalpia. Desta forma a entalpia deve ser modelada pela mudança de fase. Para a entalpia na fase sólida, a equação 3.52 será:

$$H = \rho_s \left( \int_0^T c_p dT \right) = \rho_s c_{ps} T. \quad (3.55)$$

Já para a entalpia na fase líquida:

$$\begin{aligned} H &= \rho_s \left( \int_0^{T_m} c_p dT + L_m \right) + \rho_l \int_{T_m}^T c_p dT \\ &= \rho_s (c_{ps} T_m + L_m) + \rho_l c_{pl} (T - T_m). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Para as substâncias de comportamento dado pela figura 3.3 (a), onde existe um ponto fixo para a temperatura de mudança de fase  $T_m$ , as equações 3.55 e 3.56

podem ser invertidas para calcular a temperatura em função da entalpia:

$$T = \begin{cases} \frac{H}{\rho_s c_{ps}} & \text{se } H < H_s; \\ T_m & \text{se } H_s \leq H < H_l; \\ \frac{H-H_l}{\rho_l c_{pl}} + T_m & \text{se } H \geq H_l. \end{cases} \quad (3.57)$$

onde,

$$H_s = \rho_s c_{ps} T_m, \quad (3.58)$$

$$H_l = \rho_s (c_{ps} T_m + L_m). \quad (3.59)$$

A função 3.57 é referente a substâncias que apresentam um ponto de fusão singular. No caso das substâncias (b) da figura 3.3 que apresenta uma região de mudança de fase, ou seja, a mudança de fase ocorre em uma região entre  $T_{ms}$  e  $T_{ml}$ , para este caso a solução pode ser calculada da mesma maneira e a região de mudança de fase é feita uma interpolação linear, deste modo a temperatura seria:

$$T = \begin{cases} \frac{H}{\rho_s c_{ps}} & \text{se } H < H_s; \\ H \frac{T_{ml} - T_{ms}}{H_l - H_s} + \frac{H_l T_{ms} - H_s T_{ml}}{H_l - H_s} & \text{se } H_s \leq H < H_l; \\ \frac{H-H_l}{\rho_l c_{pl}} + T_m & \text{se } H \geq H_l. \end{cases} \quad (3.60)$$

# Capítulo 4

## Método de Solução

Neste capítulo será apresentada a metodologia aplicada à solução para o derretimento do conjunto de pastilha e revestimento. Já foi apresentado que a solução para tal problema é dificultada devido à presença de uma interface entre o sólido e líquido que se movimenta ao longo do tempo. A interface física entre as fases não é bem definida no espaço com a evolução no tempo. Além disso, a interface traz consigo uma não linearidade. Para encontrar a solução, primeiro será mostrada a solução numérica utilizando método de entalpia com discretização por diferenças finitas, mostrando todo o procedimento de cálculo. Posteriormente será mostrada a solução das equações utilizando parâmetros concentrados clássico e aperfeiçoado.

### 4.1 Diferenças Finitas

A equação diferencial parcial será discretizada utilizando-se diferenças finitas explícitas. Será adotada a formulação por entalpia pela equação 3.54. Inicialmente será feita a discretização genérica para um ponto  $i$  qualquer do domínio do problema e um tempo  $n$  qualquer. Utilizando diferença avançada para a derivada temporal:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{H_i^{n+1} - H_i^n}{\Delta t}. \quad (4.1)$$

O termo da derivada espacial será discretizada utilizando diferenças centrais

da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) &= \frac{1}{r_i} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{k_i r_i T_{i+1/2}^n - k_i r_i T_{i-1/2}^n}{\Delta r} \right) \\ &= k_{i+1/2} \left( \frac{r_{i+1/2}}{r_i} \right) \frac{T_{i+1}^n - T_i^n}{\Delta r^2} + k_{i-1/2} \left( \frac{r_{i-1/2}}{r_i} \right) \frac{T_{i-1}^n - T_i^n}{\Delta r^2} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Deste modo, a solução explícita para o domínio  $0 < i \leq Nco$  será escrita da seguinte forma:

$$H_i^{n+1} = H_i^n + \sigma_i^+ \left( \frac{r_{i+1/2}}{r_i} \right) (T_{i+1}^n - T_i^n) + \sigma_i^- \left( \frac{r_{i-1/2}}{r_i} \right) (T_{i-1}^n - T_i^n) + G, \quad (4.3)$$

onde,

$$r_i = i\Delta r, \quad (4.4)$$

$$\sigma_i^+ = \frac{k_{i+1/2}\Delta t}{\Delta r^2}, \quad (4.5)$$

$$\sigma_i^- = \frac{k_{i-1/2}\Delta t}{\Delta r^2}, \quad (4.6)$$

$$G = g\Delta t. \quad (4.7)$$

Note que a condutividade térmica pode ser diferente para os limites do nó  $i$ , ou seja, no limite  $i + 1/2$  e  $i - 1/2$ , devido à mudança de fase no nó  $i$ . A cada passo de tempo a condutividade térmica deverá ser averiguada para cada nó. Se o ponto em questão ainda não atingiu a entalpia máxima da fase sólida ( $H_s$ ) ambos os nós serão dados para a fase sólida. Se a entalpia de líquido for atingida, então significa que os nós estarão na fase líquida. Se a entalpia do ponto  $i$  está em transição, significa que cada limite representa uma fase. Isto pode ser facilmente observado da seguinte forma:

$$\begin{cases} k_{i-1/2} = k_{i+1/2} = k_s & \text{se } H_i < H_s; \\ k_{i-1/2} = k_l \text{ e } k_{i+1/2} = k_s & \text{se } H_s \leq H_i < H_l; \\ k_{i-1/2} = k_{i+1/2} = k_l & \text{se } H_i \geq H_l. \end{cases} \quad (4.8)$$

Para alguns pontos da malha em específico existem algumas peculiaridades. No nó central da geometria ( $i = 0$ ), com a condição de contorno 3.41, a equação discretizada 4.3 não será utilizada. Para este nó em específico será discretizado utilizando o tratamento do nó central. O domínio do nó central pode ser visto na figura 4.1, onde será integrada a equação de entalpia:

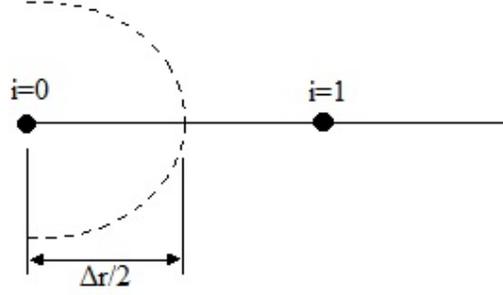


Figura 4.1: Domínio do nó central

$$\int_0^{\Delta r/2} \frac{\partial H}{\partial t} 2\pi r dr = \int_0^{\Delta r/2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) 2\pi r dr + \int_0^{\Delta r/2} g 2\pi r dr. \quad (4.9)$$

Integrando a equação 4.9 e utilizando a condição de contorno 3.41, temos:

$$\frac{\Delta r^2}{8} \frac{\partial H}{\partial t} = \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{\Delta r/2} + \frac{\Delta r^2}{8} g. \quad (4.10)$$

Discretizando a equação acima utilizando diferenças avançadas no tempo e diferenças centrais no espaço, teremos uma nova equação para o nó  $i = 0$ :

$$H_0^{n+1} = H_0^n + 4\sigma_0^+(T_1^n - T_0^n) + G. \quad (4.11)$$

Note que o  $\sigma_0^+$  segue a equação 4.5 que apresenta um  $k_{1/2}$  que é calculado através da equação 4.8. A equação 4.11 é utilizada somente no centro da região da pastilha de combustível.

Para as outras condições de contorno (equações 3.42, 3.44, 3.45) será utilizada a própria equação 4.3. Porém isso faz com que apareça um nó fora da malha, conhecido como nó fictício. A solução para estes nós serão através de suas condições de contorno nos seguintes pontos:

$$\begin{aligned} r = R_f &\longrightarrow i = Nf, \\ r = R_{ci} &\longrightarrow i = Nci, \\ r = R_{co} &\longrightarrow i = Nco. \end{aligned} \quad (4.12)$$

É fácil observar que os nós fictícios serão em  $i = Nf + 1$ ,  $i = Nci - 1$  e  $i = Nco + 1$ . Como exemplo iremos discretizar a condição de contorno 3.45:

$$-kc_i \frac{T_{Nco+1}^n - T_{Nco-1}^n}{2\Delta r} = h_\infty (T_{Nco}^n - T_\infty). \quad (4.13)$$

Desta forma podemos calcular o nó fictício  $i = Nco + 1$  da malha como:

$$T_{Nco+1}^n = T_{Nco-1}^n - 2 \frac{\Delta r h_\infty}{k_{C_{Nco}}} (T_{Nco}^n - T_\infty). \quad (4.14)$$

Os nós fictícios de  $i = Nf + 1$  e  $i = Nci - 1$  são calculados da mesma maneira, que são respectivamente:

$$T_{Nf+1}^n = T_{Nf-1}^n - 2 \frac{\Delta r h_g}{k_{f_{Nf}}} (T_{Nf}^n - T_{Nci}^n), \quad (4.15)$$

$$T_{Nci-1}^n = T_{Nci+1}^n + 2 \frac{\Delta r h_g}{k_{C_{Nci}}} (T_{Nf}^n - T_{Nci}^n). \quad (4.16)$$

Note que para esses casos a condutividade térmica será calculada diferente da equação 4.8, pois a condutividade térmica é dada no próprio nó. Mais detalhes desta solução serão mostrados mais abaixo para o ponto exato em que ocorre a mudança de fase. Na situação acima a condutividade térmica será:

$$\begin{cases} k_i = k_s & \text{se } H_i < H_m; \\ k_i = k_l & \text{se } H_i \geq H_m. \end{cases} \quad (4.17)$$

onde,

$$H_m = \rho_s (c_{ps} T_m + \frac{L_m}{2}). \quad (4.18)$$

Após o cálculo de toda entalpia em um determinado passo de tempo, é necessário obter o valor da temperatura em cada tempo para que a solução possa evoluir ao longo do tempo, então a equação 3.57 discreta será:

$$T_i^{n+1} = \begin{cases} \frac{H}{\rho_s c_{ps}} & \text{se } H_i^{n+1} < H_s; \\ T_m & \text{se } H_s \leq H_i^{n+1} < H_l; \\ \frac{H-H_l}{\rho_l c_{pl}} + T_m & \text{se } H_i^{n+1} \geq H_l. \end{cases} \quad (4.19)$$

Deste modo toda a solução ao longo do tempo pode ser obtida. É importante ressaltar que as propriedades das equações devem ser escolhidas da pastilha para os nós até  $i = Nf$  e propriedades do revestimento para nós a partir de  $i = Nci$ . Assim podemos utilizar apenas uma equação para todo o problema.

Para inicializar o problema foi dado um perfil da temperatura constante qualquer para todos os nós:

$$T_i^0 = T_0, \quad (4.20)$$

e como no início todo domínio se apresenta no estado sólido, a entalpia será dada por:

$$H_i^0 = c_{ps}T_i^0. \quad (4.21)$$

A solução é calculada com as equações acima, utilizando um falso transiente com as condições de operação normal do reator, então o problema acaba convergindo para uma solução em regime permanente. A partir dessa solução inicial para a operação normal, o problema é finalmente iniciado para um caso de acidente no reator.

Note que para garantir a estabilidade do método explícito é necessário que:

$$\sigma < 0,5. \quad (4.22)$$

#### 4.1.1 Propagação da interface

Para minimizar os problemas de oscilações numéricas encontradas na solução por entalpia, Voller e Cross (1981) fizeram uma interpretação detalhada da propagação da interface para cada elemento. Com isso foi criado um algoritmo que será aperfeiçoado para um caso mais genérico, em que as propriedades variam. Podemos observar na figura 4.2 a propagação da interface ao longo de um nó  $i$  qualquer. A posição exata da barreira neste encontra-se a uma distância  $S\Delta r$  antes da passagem pelo nó. Nesta situação genérica a entalpia de todo o domínio do ponto  $i$  será aproximadamente o somatório da entalpia da fase sólida com a entalpia da fase líquida:

$$H_i\Delta r = (\rho_s(cp_sT_m + L) + \rho_l c_{pl}(T_i - T_m))S\Delta r + \rho_s c_{ps}T_m(1 - S)\Delta r. \quad (4.23)$$

Como  $S$  é fração do elemento que é líquido, a propagação da interface devido ao derretimento ocorre exatamente em  $S = 1/2$ , onde  $T_i = T_m$ . Neste exato momento a equação 4.23 será simplificada:

$$H_m = H_i = \rho_s(cp_sT_m + \frac{L_m}{2}). \quad (4.24)$$

Analisando a evolução temporal para o ponto  $i$ , é fácil observar que se  $H_i^n < H_m$  e  $H_i^{n+1} > H_m$ , significa que a mudança de fase ocorreu neste ponto durante o

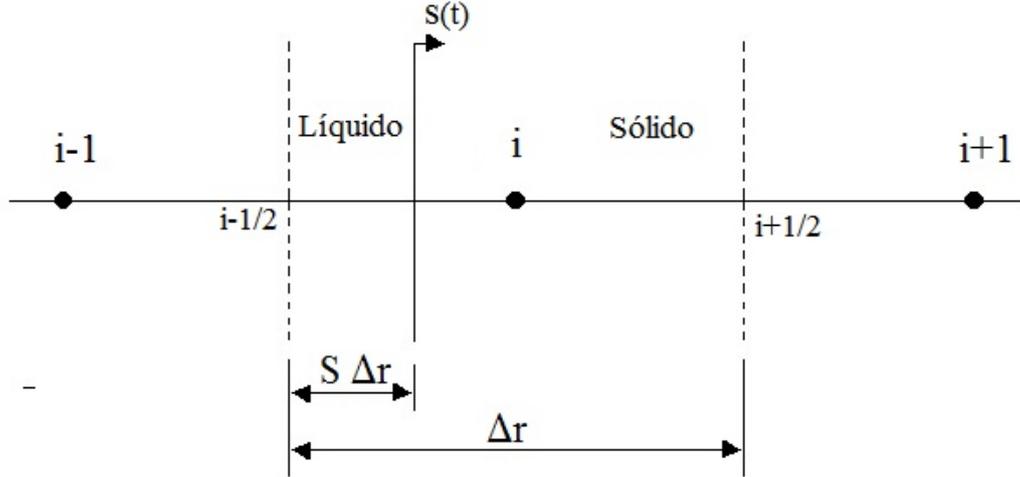


Figura 4.2: Propagação da interface ao longo do ponto  $i$

passo de tempo entre  $n$  e  $n + 1$ . O tempo aproximado na qual a mudança de fase ocorrerá será:

$$t_i = (j + \phi_i)\Delta t, \quad (4.25)$$

onde  $\phi$  pode ser estimado, com uma interpolação linear da entalpia durante o passo de tempo:

$$\phi_i = \frac{H_m - H_i^n}{H_i^{n+1} - H_i^n}. \quad (4.26)$$

Para finalizar a aproximação, a temperatura para o nó  $i$  no tempo  $t_i$  será exatamente  $T_m$ . Já as temperaturas nos outros pontos podem ser facilmente calculadas através de uma interpolação linear no exato momento em que ocorreu a mudança de fase:

$$T_p^{n+X_i} = X_i(T_p^{n+1} - T_p^n) + T_p^n, \quad p \neq i. \quad (4.27)$$

Assim a propagação da interface pode ser analisada ao longo do tempo. Entretanto o número de pontos da propagação da interface e da função da temperatura, conseqüentemente da entalpia, será limitado pelo número de pontos da malha.

## 4.2 Parâmetros concentrados

Abaixo será discutida a solução de parâmetros concentrados. Inicialmente será apresentada a solução clássica aplicada para a solução transiente, com e sem

mudança de fase. Posteriormente será proposta uma aproximação melhorada que terá um menor erro, quando comparada com a solução clássica. Este método consiste em realizar uma média espacial, fazendo com que a temperatura média varie apenas com o tempo. Desta forma irão surgir na equação final, além da temperatura média, termos temporais de temperatura na posição do limite de integração. Para eliminar a dependência desses termos, utilizamos aproximações para os termos da temperatura.

Para eliminar derivada espacial, precisamos definir temperatura média para ambas as regiões, que são definidos para o combustível e revestimento, respectivamente:

$$T_{fsav}(t) = \frac{1}{\pi R_f^2} \int_0^{R_f} T_{fs}(r, t) 2\pi r dr, \quad (4.28)$$

$$T_{csav}(t) = \frac{1}{\pi(R_{co}^2 - R_{ci}^2)} \int_{R_{ci}}^{R_{co}} T_{cs}(r, t) 2\pi r dr. \quad (4.29)$$

Para começar, explicaremos a solução na fase inicial do problema, que ocorre logo após o acidente, onde acontece o aquecimento das regiões sem mudança de fase. É necessário integrar a equação 3.40 entre  $[0, R_f]$  e a equação 3.43 entre  $[R_{ci}, R_{co}]$ :

$$\int_0^{R_f} \frac{\partial T_{fs}(r, t)}{\partial t} 2\pi r dr = \int_0^{R_f} \alpha_{fs} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{fs}(r, t)}{\partial r} \right) 2\pi r dr + \int_0^{R_f} \frac{g}{\rho_{fs} c p_{fs}} 2\pi r dr, \quad (4.30)$$

$$\int_{R_{ci}}^{R_{co}} \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial t} 2\pi r dr = \int_{R_{ci}}^{R_{co}} \alpha_{cs} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial r} \right) 2\pi r dr, \quad (4.31)$$

o que implica em,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int_0^{R_f} T_{fs}(r, t) r dr \right) = \alpha_{fs} \left[ r \frac{\partial T_{fs}(r, t)}{\partial r} \right]_0^{R_f} + \frac{g}{\rho_{fs} c p_{fs}} \left[ \frac{r^2}{2} \right]_0^{R_f}, \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{R_{ci}}^{R_{co}} T_{cs}(r, t) r dr \right) = \alpha_{cs} \left[ r \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial r} \right]_{R_{ci}}^{R_{co}}. \quad (4.33)$$

Utilizando as equações de temperatura média (4.28 e 4.29), as condições de contorno (3.41, 3.42, 3.44 e 3.45) e realizando algumas manipulações matemáticas teremos as equações finais para o combustível e o revestimento, respectivamente:

$$\frac{\partial T_{fsav}(t)}{\partial t} = \Sigma_{sf}(T_{cs}(R_{ci}, t) - T_{fs}(R_f, t)) + Q_s, \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial T_{csav}(t)}{\partial t} = \Sigma_{sco}(T_\infty - T_{cs}(R_{co}, t)) + \Sigma_{sco}(T_{fs}(R_f, t) - T_{cs}(R_{ci}, t)), \quad (4.35)$$

onde,

$$\Sigma_{sf} = 2\alpha_{fs} \frac{h_g}{k_{fs} R_f}, \quad (4.36)$$

$$\Sigma_{sco} = 2\alpha_{cs} \frac{h_\infty R_{co}}{k_{cs}(R_{co}^2 - R_{ci}^2)}, \quad (4.37)$$

$$\Sigma_{sci} = 2\alpha_{cs} \frac{h_g R_{ci}}{k_{cs}(R_{co}^2 - R_{ci}^2)}, \quad (4.38)$$

$$Q_s = \frac{g}{\rho_{fs} c p_{fs}}. \quad (4.39)$$

Observe que as equações 4.34 e 4.35 apresentam termos de temperatura pontuais nos limites da integral que não são conhecidos. Logo estes termos precisam ser aproximados.

### 4.2.1 Parâmetros concentrados clássico

A aproximação clássica faz com que a temperatura de todos os pontos de sua região seja igual à própria temperatura média, ou seja:

$$T_{fs}(R_f, t) = T_{fsav}(t), \quad (4.40)$$

$$T_{csav}(t) = T_{cs}(R_{ci}, t) = T_{cs}(R_{co}, t). \quad (4.41)$$

Substituindo nas equações 4.34 e 4.35, obtemos:

$$\frac{\partial T_{fsav}(t)}{\partial t} = \Sigma_{sf}(T_{cs}(R_{ci}, t) - T_{fsav}(t)) + Q_s, \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial T_{csav}(t)}{\partial t} = \Sigma_{sco}(T_\infty - T_{csav}(t)) + \Sigma_{sci}(T_{fsav}(t) - T_{csav}(t)). \quad (4.43)$$

As equações 4.42 e 4.43 podem ser calculadas para encontrar a solução do problema. Entretanto essa primeira solução acima serve somente quando não ocorre a mudança de fase em nenhuma das regiões. Para a etapa 1, onde o conjunto encontra-se na fase sólida as duas equações acima descrevem a solução. Na etapa 3, onde a pastilha de urânio continua na fase sólida e o revestimento na fase líquida, as equações serão as mesmas, com as constantes  $\Sigma$  da equação 4.43 para a fase líquida.

Para a etapa em que ocorre a mudança de fase, como por exemplo, a etapa 2 em que ocorre a mudança de fase no revestimento, a aproximação de parâmetros concentrados clássicos será,

$$T_{csav}(t) = T_{cs}(R_{ci}, t) = T_{cs}(R_{co}, t) = T_{cm}, \quad (4.44)$$

fazendo com que não possa ser utilizada a equação de condução de calor nesta região, a equação 3.43. Nesta situação uma nova equação de conservação de energia para todo o domínio do revestimento deve ser considerada:

$$\frac{\partial E_c}{\partial t} = \dot{Q}_{w_{ci}} - \dot{Q}_{w_{co}}. \quad (4.45)$$

Como toda a região estará em mudança de fase, toda a variação de energia será de calor latente, ou seja:

$$\frac{\partial \rho Vol L_m}{\partial t} = \dot{q}_{w_{ci}} A_{ci} - \dot{q}_{w_{co}} A_{co}. \quad (4.46)$$

Para a geometria cilíndrica, e utilizando as condições de contorno e aproximações 4.40 e 4.44, teremos:

$$\rho L_m \frac{\partial (\pi s_c(t)^2) dz}{\partial t} = h_g (T_{fav}(t) - T_{cm}) 2\pi R_{ci} dz - h_\infty (T_{cm} - T_\infty) 2\pi R_{co}. \quad (4.47)$$

Simplificando a equação, chegamos finalmente à equação para o revestimento:

$$\rho_s L c_m \frac{\partial s_c(t)}{\partial t} = 2R_{co} h_\infty (T_\infty - T_{cm}) + 2R_{ci} h_g (T_{fsav}(t) - T_{cm}). \quad (4.48)$$

Especificamente na etapa 2, resolve-se a equação 4.42 e depois calcula-se o seu verdadeiro tempo de duração através da equação 4.48. É importante lembrar que a temperatura média do revestimento em todo processo será aproximadamente  $T_{cm}$ .

Na solução da etapa 4 ocorre algo similar à etapa 2. Nesta etapa a temperatura média da pastilha é aproximada por,

$$T_{fs}(R_f, t) = T_{fsav}(t) = T_{fm}. \quad (4.49)$$

O que impossibilita o uso da sua equação de condução de calor. Neste caso a solução será encontrada calculando primeiro a equação para a temperatura do revestimento que está na fase líquida:

$$\frac{\partial T_{clav}(t)}{\partial t} = 2\alpha_{cl} \frac{h_\infty R_{co}}{k_{cl}(R_{co}^2 - R_{ci}^2)} (T_\infty - T_{csav}(t)) + 2\alpha_{cl} \frac{h_g R_{ci}}{k_{cl}(R_{co}^2 - R_{ci}^2)} (T_{fm} - T_{csav}(t)). \quad (4.50)$$

E para calcular a duração de toda etapa, será utilizada a equação de conservação de energia para a pastilha, que de maneira análoga a etapa 2:

$$\rho_s L f_m \frac{\partial s_f(t)}{\partial t} = -2h_g R_f (T_{fm} - T_{csav}(t)) + g. \quad (4.51)$$

## 4.2.2 Parâmetros concentrados aperfeiçoados

É fácil observar que a aproximação de parâmetros concentrados clássico é muito simples, e pode apresentar erros consideráveis na solução final. Devido a isso, outra possível aproximação para os termos da temperatura será realizada. Estes termos podem ser aproximados entre si através das integrais da temperatura e do fluxo de calor. Neste trabalho, a aproximação de integral utilizada foi desenvolvida por *Hermite* (1878), que é expressa em função da combinação linear da integrante e suas derivadas, e a representação  $H_{a,b}$  é dada por:

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x)dx = \sum_{\nu=0}^a C_{\nu}(a,b)(h)^{\nu+1}y^{[\nu]}(x=x_0) + \sum_{\nu=0}^b C_{\nu}(b,a)(-1)^{\nu}(h)^{\nu+1}y^{[\nu]}(x=x_1), \quad (4.52)$$

onde,

$$h = x_1 - x_0, \quad (4.53)$$

$$C_{\nu}(a,b) = \frac{(a+1)!(a+b+a-\nu)!}{(\nu+1)!(a-\nu)!(a+b+2)!}. \quad (4.54)$$

Serão utilizadas as aproximações  $H_{0,0}$  e  $H_{1,1}$ , que são reduzidas a respectivamente:

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x)dx \cong \frac{h}{2}(y(x_0) + y(x_1)), \quad (4.55)$$

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x)dx \cong \frac{h}{2}(y(x_0) + y(x_1)) + \frac{h^2}{12}(y'(x_0) - y'(x_1)). \quad (4.56)$$

As equações acima foram reduzidas às aproximações que também são conhecidas por regra do trapézio e regra do trapézio corrigida. Os erros associados às aproximações  $H_{0,0}$  e  $H_{1,1}$  serão:

$$E_{0,0} = -\frac{h^3}{12}y''(\xi), \xi \in (x_0, x_1), \quad (4.57)$$

$$E_{0,0} = +\frac{h^5}{720}y^{iv}(\xi), \xi \in (x_0, x_1). \quad (4.58)$$

Neste trabalho a aproximação  $H_{0,0}$  será utilizada para o fluxo de calor e a aproximação  $H_{1,1}$  será utilizada para integral da temperatura. De modo genérico, teremos:

$$\int_{x_0}^{x_1} \left( \frac{dT(r,t)}{dr} \right) dr \cong \frac{h}{2} \left( \left[ \frac{dT(r,t)}{dr} \right]_{r=x_0} + \left[ \frac{dT(r,t)}{dr} \right]_{r=x_1} \right), \quad (4.59)$$

$$\int_{x_0}^{x_1} rT(r, t)dr \cong \frac{h}{12}((5x_0 + x_1)T(x_0, t) + (5x_1 + x_0)T(x_1, t)) + \frac{h^2}{12} \left( x_0 \left[ \frac{dT(r, t)}{dr} \right]_{r=x_0} - x_1 \left[ \frac{dT(r, t)}{dr} \right]_{r=x_1} \right). \quad (4.60)$$

É fácil ver que as integrais acima apresentam as seguintes soluções exatas:

$$\int_{x_0}^{x_1} \left( \frac{dT(r, t)}{dr} \right) dr = T(x_1, t) - T(x_0, t), \quad (4.61)$$

$$\int_{x_0}^{x_1} rT(r, t)dr = \frac{(x_1^2 - x_0^2)}{2} T_{av}(t). \quad (4.62)$$

Assim as duas aproximações para os termos da temperatura serão realizadas através da união das equações 4.59 com a 4.61, e das equações 4.60 com 4.62. Note que para o caso de mudança de fase a equação de condução de calor não será invalidada com na versão clássica, pois haverá uma temperatura média para a fase líquida e uma temperatura média para a fase sólida. Como a solução de parâmetros concentrados clássicos é mais complicada, ela será detalhada abaixo para cada etapa específica.

## Etapa 1

Como as duas equações 4.34 e 4.35 apresentam cinco variáveis temporais, o sistema pode ser completado utilizando uma aproximação para a integral da temperatura e do fluxo de calor de ambas as regiões. Para o combustível, no limite  $[0, R_f]$  da integral do fluxo de calor (4.59 e 4.61) e da integral da temperatura (4.60e 4.62), utilizando as condições de contorno serão, respectivamente:

$$T_{fs}(Rf, t) - T_{fs}(0, t) = \frac{h_g R_f}{2K_{fs}} (T_{cs}(R_{ci}, t) - T_{fs}(Rf, t)), \quad (4.63)$$

$$T_{fsav}(t) = \frac{1}{6} (5T_{fs}(Rf, t) + T_{fs}(0, t)) - \frac{R_f h_g}{6k_{fs}} (T_{cs}(R_{ci}, t) - T_{fs}(Rf, t)). \quad (4.64)$$

Já para o revestimento teremos:

$$\begin{aligned} & T_{cs}(R_{co}, t) - T_{cs}(R_{ci}, t) = \\ & = \frac{R_{co} - R_{ci}}{2} \left[ \frac{h_\infty}{k_{cs}} (T_\infty - T_{cs}(R_{co}, t)) + \frac{h_g}{k_{cs}} (T_{cs}(R_{ci}, t) - T_{fs}(Rf, t)) \right], \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$T_{csav}(t) = \frac{R_{co} + 5R_{ci}}{6(R_{co} + R_{ci})} T_{cs}(R_{ci}, t) + \frac{5R_{co} + R_{ci}}{6(R_{co} + R_{ci})} T_{cs}(R_{co}, t) + \frac{R_{co} - R_{ci}}{6(R_{co} + R_{ci})} \left[ \frac{R_{ci} h_g}{k_{cs}} (T_{cs}(R_{ci}, t) - T_{fs}(R_f, t)) - \frac{R_{co} h_\infty}{k_{cs}} (T_\infty - T_{cs}(R_{co}, t)) \right]. \quad (4.66)$$

## Etapa 2

As etapas 1 e 2 apresentam a mesma solução para a pastilha de combustível, já que a pastilha continua sólida. Porém a região do revestimento inicia o seu derretimento, apresentando então uma diferente solução. Neste caso, introduzimos as temperaturas médias na fase líquida e sólida para o revestimento:

$$T_{clav}(t) = \frac{1}{\pi(s_c^2(t) - R_{ci}^2)} \int_{R_{ci}}^{s_c(t)} T_{cl}(r, t) 2\pi r dr, \quad (4.67)$$

$$T_{csav}(t) = \frac{1}{\pi(R_{co}^2 - s_c^2(t))} \int_{s_c(t)}^{R_{co}} T_{cs}(r, t) 2\pi r dr. \quad (4.68)$$

Integrando a equação 3.25 entre  $[R_{ci}, s_c(t)]$  para a região líquida e entre  $[s_c(t), R_{co}]$  para a região sólida:

$$\int_{R_{ci}}^{s_c(t)} \frac{\partial T_{cl}(r, t)}{\partial t} 2\pi r dr = \int_{R_{ci}}^{s_c(t)} \alpha_{cl} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{cl}(r, t)}{\partial r} \right) 2\pi r dr, \quad (4.69)$$

$$\int_{s_c(t)}^{R_{co}} \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial t} 2\pi r dr = \int_{s_c(t)}^{R_{co}} \alpha_{cs} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial r} \right) 2\pi r dr. \quad (4.70)$$

Utilizando a *regra da integral de Leibniz*, a definição das temperaturas médias (4.67 e 4.68) e algumas manipulações matemáticas:

$$(s_c^2(t) - R_{ci}^2) \frac{dT_{clav}(t)}{dt} + 2s_c(t) \frac{\partial s_c(t)}{\partial t} (T_{clav}(t) - T_{cs}(s, t)) = 2\alpha_{cl} \left[ r \frac{\partial T_{cl}(r, t)}{\partial r} \right]_{R_{ci}}^{s_c(t)}, \quad (4.71)$$

$$(R_{co}^2 - s_c^2(t)) \frac{dT_{csav}(t)}{dt} + 2s_c(t) \frac{\partial s_c(t)}{\partial t} (T_{cs}(s, t) - T_{csav}(t)) = 2\alpha_{cs} \left[ r \frac{\partial T_{cs}(r, t)}{\partial r} \right]_{s_c(t)}^{R_{co}}, \quad (4.72)$$

Definindo a função do fluxo e a temperatura no ponto em que ocorre mudança de fase por:

$$V(t) = \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=s(t)}, \quad (4.73)$$

$$T_{cl}(s_c(t), t) = T_{cs}(s_c(t), t) = T_{cm}. \quad (4.74)$$

Com as condições de contorno, introduziu-se termos de temperatura nos limites do intervalo, e termo do fluxo de calor na mudança de fase que devem ser eliminados. Novamente as integrais são obtidas pela aproximação de Hermite, sendo a aproximação de derivada espacial da temperatura por Hermite  $H_{1,1}$ , e do fluxo de calor por Hermite  $H_{0,0}$ .

Para a fase líquida no limite  $[s_c(t), R_{ci}]$  da integral do fluxo de calor (4.59 e 4.61) e da integral da temperatura (4.60e 4.62), as equações utilizando as condições de contorno serão respectivamente:

$$T_{cm} - T_{cl}(R_{ci}, t) = \frac{s_c(t) - R_{ci}}{2} \left( V_{cl}(t) + \frac{h_g}{2K_{cl}} (T_{cl}(R_{ci}, t) - T_{fs}(Rf, t)) \right), \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} T_{clav}(t) &= \frac{s_c(t) + 5R_{ci}}{6(s_c(t) + R_{ci})} T_{cl}(R_{ci}, t) + \frac{5s_c(t) + R_{ci}}{6(s_c(t) + R_{ci})} T_{cm} + \\ &+ \frac{s_c(t) - R_{ci}}{6(s_c(t) + R_{ci})} \left[ \frac{R_{ci}h_g}{k_{cl}} (T_{cl}(R_{ci}, t) - T_{fs}(Rf, t)) - s_c V_{cl}(t) \right]. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Já para a parte sólida do revestimento no limite  $[R_{ci}, s_c(t)]$  teremos:

$$T_{cs}(R_{co}, t) - T_{cm} = \frac{R_{co} - s_c(t)}{2} \left[ \frac{h_\infty}{k_{cs}} (T_\infty - T_{cs}(R_{co}, t)) + V_{cs}(t) \right], \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} T_{csav}(t) &= \frac{R_{co} + 5s_c(t)}{6(R_{co} + s_c(t))} T_{cm} + \frac{5R_{co} + s_c(t)}{6(R_{co} + s_c(t))} T_{cs}(R_{co}, t) + \\ &+ \frac{R_{co} - s_c(t)}{6(R_{co} + s_c(t))} \left[ s_c(t) V_{cs}(t) - \frac{R_{co}h_\infty}{k_{cs}} (T_\infty - T_{cs}(R_{co}, t)) \right]. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Para fechar o sistema de equações utiliza-se a equação da interface:

$$\rho_{cs} L_{cm} \frac{\partial s_c(t)}{\partial t} = k_{cs} V_{cs}(s_c, t) - k_{cl} V_{cl}(s_c, t). \quad (4.79)$$

Desta forma as variáveis podem ser escritas em função de  $T_{fsav}$ ,  $T_{clav}$ ,  $T_{csav}$  e  $s_c$  e então resolvido um sistema de quatro equações diferenciais para se obter a solução da fase 2.

### Etapa 3

A etapa 3 apresenta uma solução idêntica a etapa 1, com diferença nas propriedades para o revestimento, pois neste momento o revestimento estará na fase líquida.

## Etapa 4

A última etapa apresenta solução parecida com a etapa 2. Porém com o intervalo de derretimento diferente, onde a fase líquida do combustível irá de  $[0, s_f(t)]$  e a fase sólida de  $[s_f(t), R_f]$ . Outra diferença é a presença de geração de calor presente nessas equações. A metodologia é a mesma apresentada na fase 2, em que as equações serão escritas em função de  $T_{flav}$ ,  $T_{fsav}$ ,  $T_{clsav}$  e  $s_f$ .

### 4.2.3 Solução apresentada por Chen et al. (1976)

A título de ilustração será mostrada a solução realizada por Chen et al. (1976). O autor desenvolveu uma solução simplificada com soluções lineares, e montou uma tabela de todo o cálculo que será apresentada abaixo para cada etapa.

#### Etapa 1

$$T_c(t) = \begin{cases} T_{c0} + \frac{Q}{C_c}(t) & \text{se } t \leq \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}; \\ T_{c0} + \frac{Q}{C_f + C_c} \left( \frac{C_f^2}{C_f + C_c} + t \right) & \text{se } t > \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}. \end{cases} \quad (4.80)$$

$$T_f(t) = \begin{cases} T_{f0} & \text{se } t \leq \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}; \\ T_{f0} - \frac{C_f C_c}{(C_f + C_c)^2} (T_{f0} - T_{c0}) + \frac{Q}{C_f + C_c}(t) & \text{se } t > \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}. \end{cases} \quad (4.81)$$

onde,  $T_{f0}$  e  $T_{c0}$  são as temperaturas médias antes do acidente e as constantes são dadas por:

$$C_f = \frac{R_f \rho_f c p_f}{2h_g}, \quad (4.82)$$

$$C_c = \frac{(R_{co}^2 - R_f^2) \rho_c c p_c}{2R_f h_g}, \quad (4.83)$$

$$Q = \frac{R_f g}{2h_g}. \quad (4.84)$$

Note que, nesta aproximação  $R_{ci} = R_f$ .

## Etapa 2

Nesta etapa a temperatura do revestimento será  $T_c(t) = T_{cm}$ . A temperatura do combustível dependerá do tempo total da etapa 1 ( $t_1$ ). Caso  $t_1 \leq \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}$ :

$$T_f(t) = \begin{cases} T_{f0} + (T_{cm} - T_{c0}) \frac{t-t_1}{C_f} & \text{se } t - t_1 \leq C_f; \\ T_{f0} + (T_{cm} - T_{c0}) & \text{se } t - t_1 > C_f. \end{cases} \quad (4.85)$$

Caso contrário,

$$T_f(t) = \begin{cases} T_{f0} + \frac{(T_{f0} - T_{c0})}{C_f + C_c} (C_c + t - t_1) & \text{se } t - t_1 \leq C_f; \\ T_{f0} + (T_{cm} - T_{c0}) & \text{se } t - t_1 > C_f. \end{cases} \quad (4.86)$$

## Etapa 3

Seja  $t_2$  o tempo total ao final da etapa 2 e  $T_f(t_2)$  a temperatura do combustível no final da etapa 2:

$$T_c(t) = \begin{cases} T_{cm} + \frac{1}{C_c} (T_f(t_2) - T_{cm})(t - t_2) & \text{se } t - t_2 \leq \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}; \\ T_{cm} + \frac{(T_{f0} - T_{c0})}{C_f + C_c} \left( \frac{C_f (T_f(t_2) - T_{cm})}{T_{f0} - T_{c0}} + t - t_2 - \frac{C_f C_c}{C_f + C_c} \right) & \text{se } t - t_2 > \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}. \end{cases} \quad (4.87)$$

$$T_f(t) = \begin{cases} T_f(t_2) - \frac{1}{C_f} (T_f(t_2) - T_{cm} - T_{f0} + T_{c0})(t - t_2) & \text{se } t - t_2 \leq \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}; \\ T_f(t_2) - \frac{(T_{f0} - T_{c0})}{C_f + C_c} \left( \frac{C_c (T_f(t_2) - T_{cm})}{T_{f0} - T_{c0}} - t + t_2 - \frac{C_c^2}{C_f + C_c} \right) & \text{se } t - t_2 > \frac{C_f C_c}{C_f + C_c}. \end{cases} \quad (4.88)$$

## Etapa 4

A temperatura da pastilha combustível será  $T_f(t) = T_{fm}$ . Já temperatura do revestimento não foi linearizada, sendo calculada da seguinte forma:

$$T_c(t) = T_{fm} - (T_{fm} - T_c(t_3)) \exp\left(-\frac{t - t_3}{C_c}\right), \quad (4.89)$$

sendo  $t_3$  o tempo total ao final da etapa 3 e  $T_c(t_3)$  a temperatura do revestimento no final da etapa 3.

# Capítulo 5

## Resultados

Neste capítulo serão mostrados todos os parâmetros que foram adotados para a solução do problema. Posteriormente será feita uma breve análise de convergência da malha da solução pelo método de entalpia. Serão mostradas as condições iniciais, em que o reator está em operação normal antes do acidente. E os resultados em caso de acidentes com e sem o desligamento adequado do reator, analisando os perfis de temperatura e a propagação da interface, que serão comentados e discutidos.

A primeira e importante tarefa para obter a solução, é encontrar os típicos dados do reator PWR que será simulado. Para um reator PWR, a sua geometria e propriedades foram encontradas no Todreas e Kazimi (1990), e podem ser vistos na tabela 5.1.

Tabela 5.1: Parâmetros de um reator PWR

<b>Parâmetros</b>	<b>Valor</b>
$h_g [kW/m^2K]$	6,4695
$q''' [KW/m^3]$	318121
$R_f [mm]$	4,1
$R_{ci} [mm]$	4,18
$R_{co} [mm]$	4,75
$T_\infty [K]$	578

Note que foi realizada uma média para a temperatura do refrigerante entre

a entrada e a saída que será utilizada na solução do problema. Como não foi encontrado informações para a temperatura do refrigerante, em caso de acidente no núcleo do reator, será assumido que a transferência de calor para o refrigerante seja pequena e então a sua temperatura não mudará ao longo do tempo.

Além da geometria, também são necessárias as propriedades das fases sólida e líquida para a pastilha de urânio e para o revestimento de zircônio. Estes dados são muito difíceis de encontrar na literatura, principalmente para o revestimento de zircaloy-4, a liga mais utilizada nas varetas combustíveis. Para os dados que não foram encontrados para esta liga, foram utilizados os dados do zircônio bruto, que são mais fáceis de serem encontrados. Estas propriedades foram retiradas de IAEA (2006) e Fink (2000) e feita a média radial para a fase líquida e a fase sólida de cada região. A tabela 5.2 mostra as propriedades para o caso com propriedades médias.

Tabela 5.2: Propriedades médias para a pastilha de urânio

Propriedades	Combustível		Revestimento	
	Sólido	Líquido	Sólido	Líquido
$\rho$ [ $kg/m^3$ ]	10330	8220	6415	5878
$k$ [ $W/mK$ ]	2,8	2,5	30,8	37,0
$cp$ [ $J/kgK$ ]	421	351	390	546
$L_m$ [ $kJ/kg$ ]		260		155
$T_m$ [ $K$ ]		3120		2150

Todos os métodos de solução descritos no capítulo 4 foram implementados no programa *Wolfram Mathematica 7*.

Antes de iniciarmos a análise de qualquer resultado, é importante escolher o tamanho da malha que deverá ser utilizada para a solução do problema por diferenças finitas. Inicialmente, o programa foi executado utilizando três malhas diferentes, com 13, 25 e 50 nós. Para facilitar a comparação foi utilizado  $h_\infty = 0$  e  $q''' = g = 318121kW/m^3$ , ou seja, para um caso em que o reator não seja desligado adequadamente e hipoteticamente o conjunto de vareta combustível não transfira seu calor produzido ao refrigerante. Esta situação foi utilizada, pois é onde o derre-

timento de todo conjunto ocorrerá de maneira mais rápida, facilitando a análise da malha.

Para facilitar a análise foi elaborada a tabela 5.3, onde é mostrado o resultado encontrado para o tempo em que ocorre todo o derretimento do revestimento e da pastilha de combustível para cada malha. Além disso, é mostrado o tempo total de processamento do programa simulado em um mesmo computador para cada malha e com um tempo físico de 50s.

Tabela 5.3: Tempo de processamento e derretimento para diferentes malhas com potência total e  $h = 0$

Nº de pontos	Tempo de processamento	Tempo de derretimento	
		Revestimento	Pastilha
13	10s	22,625s	45,995s
25	55s	22,619s	45,982s
50	7min	22,616s	45,978s

Ao analisarmos os dados mostrados na tabela podemos ver claramente que os resultados do tempo de derretimento são praticamente o mesmo para qualquer uma das três malhas com uma diferença no quarto dígito significativo. Porém o custo computacional aumenta muito com o aumento do número de pontos. Isso ocorre devido à solução explícita, que para manter a estabilidade da solução, o refinamento faz com que seja necessário diminuir o passo de tempo. Devido as propriedades da condutividade térmica para o revestimento ser uma ordem de grandeza maior que a condutividade térmica do combustível, faz com que o revestimento seja o grande vilão para a estabilidade da solução.

O gráfico 5.1 teve como objetivo verificar as três soluções ao longo do domínio. Neste gráfico podemos observar que a malha com 13 pontos apresenta a solução ligeiramente menor que a malha de 25 e 50 pontos, que por sua vez estão sobrepostas, gerando resultados iguais.

Podemos inferir que a malha com 50 pontos é superestimada, uma vez que o seu custo computacional é muito alto. A malha de 13 pontos possui um pequeno

erro quando comparados com os outros, porém ainda satisfatórios. Como o tempo de processamento da malha de 25 pontos não é grande e não apresenta erro quando comparado com a malha de 50 pontos, inicialmente será utilizado no trabalho a malha de 25 nós. Porém caso o custo computacional aumente muito com o aumento do tempo físico da simulação, será utilizado a malha com 13 pontos. Note que a malha de 25 nós possui 5 pontos para o revestimento e 20 pontos para a pastilha.

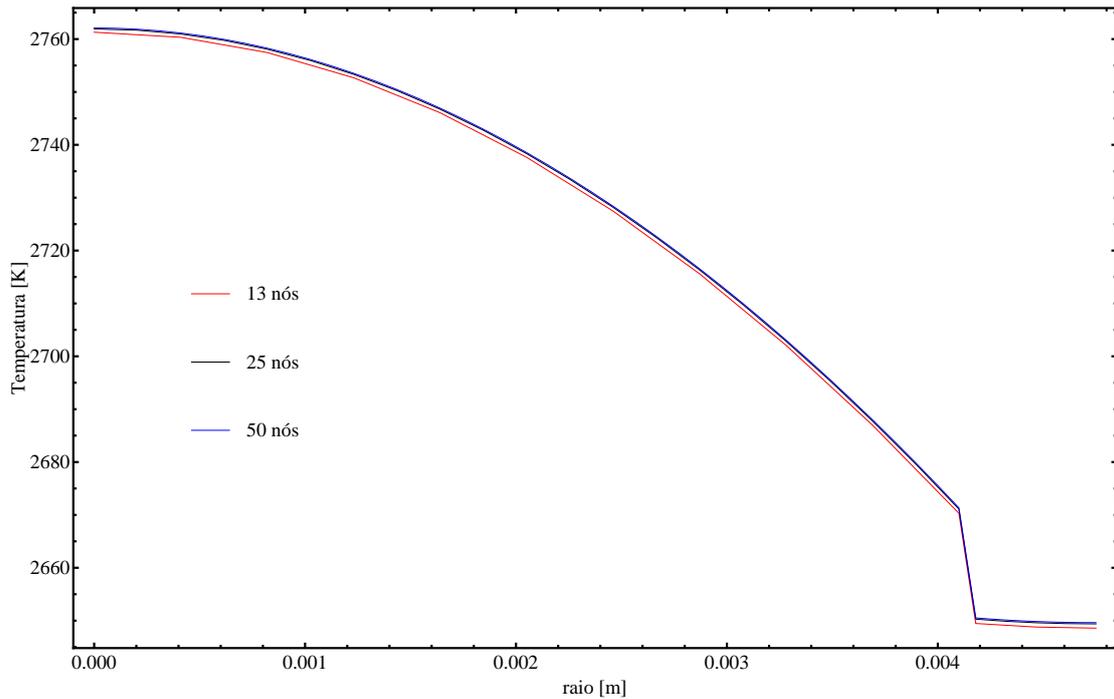


Figura 5.1: Comparação entre malhas da temperatura para  $t = 30s$  com potência total e  $h = 0$

Para compararmos as soluções de parâmetros concentrados e o método de entalpia, nós utilizaremos diferentes valores para o coeficiente de transferência de calor. Para uma mesma temperatura do refrigerante, coeficientes maiores que  $0,2kW/m^2K$  fazem com que o derretimento para o conjunto não ocorra. Logo valores de coeficiente de transferência de calor maiores do que este não são importantes para esse trabalho e não serão utilizados.

Os valores foram escolhidos de acordo com Todreas e Kazimi (1990), onde os valores de  $0,1kW/m^2K$  e  $0,2kW/m^2K$  seriam para casos de convecção natural em líquidos e o valor de  $0,01kW/m^2K$  seria para gás a baixa pressão. Já a parede

adiabática seria para o caso mais extremo de todos, no qual a vareta não troca nenhum calor com o combustível.

## 5.1 Resultados pelo método de entalpia

Nesta seção serão mostrados os resultados obtidos envolvendo a solução por entalpia. Para visualizar os gradientes e perfis de temperatura e entalpia, foi utilizada a potência total com um  $h = 0, 2kW/m^2K$  com a malha de 25 pontos.

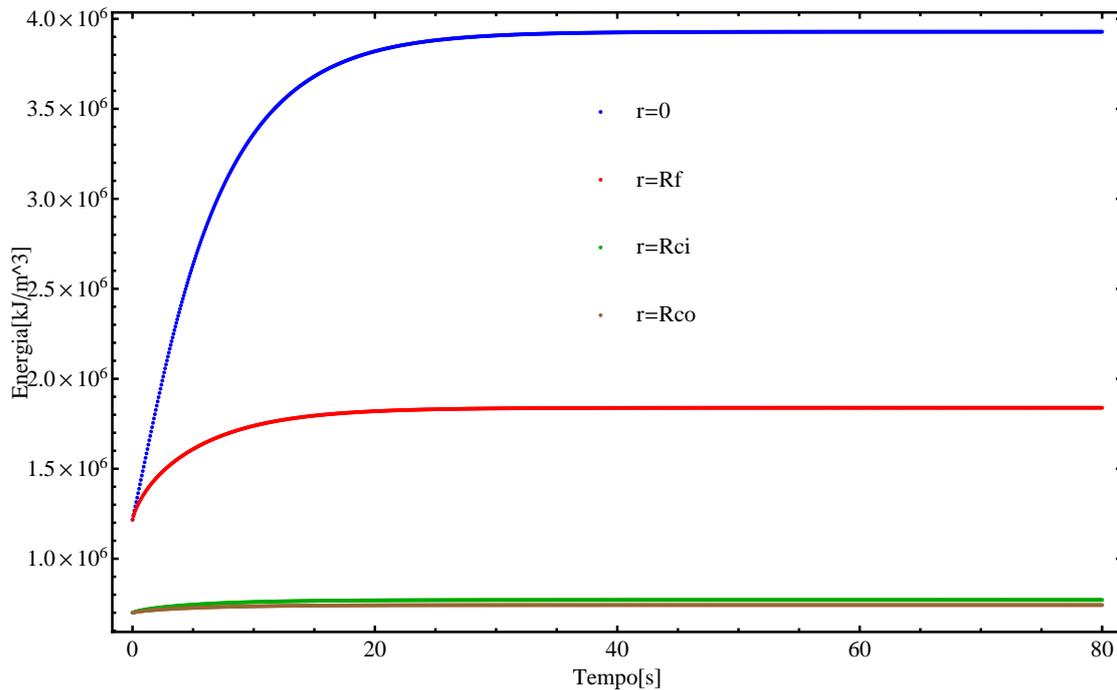


Figura 5.2: Regime permanente da entalpia para a operação normal do reator

Para simular o acidente que pode ocorrer em um reator nuclear, precisamos de uma condição inicial de antes do acidente. Esta condição será dada pela operação e funcionamento normal do reator PWR. Deste modo foi dado um chute inicial para todos os pontos com valores iguais a temperatura do refrigerante, e assim o programa foi rodado para o coeficiente de transferência de calor típico para uma condição normal de operação,  $h_{\infty} = 34kW/m^2K$ . O cálculo do regime permanente pode ser visto nas figuras 5.2 e 5.3.

As figuras 5.4 e 5.5 mostram a evolução das variáveis de energia e tempera-

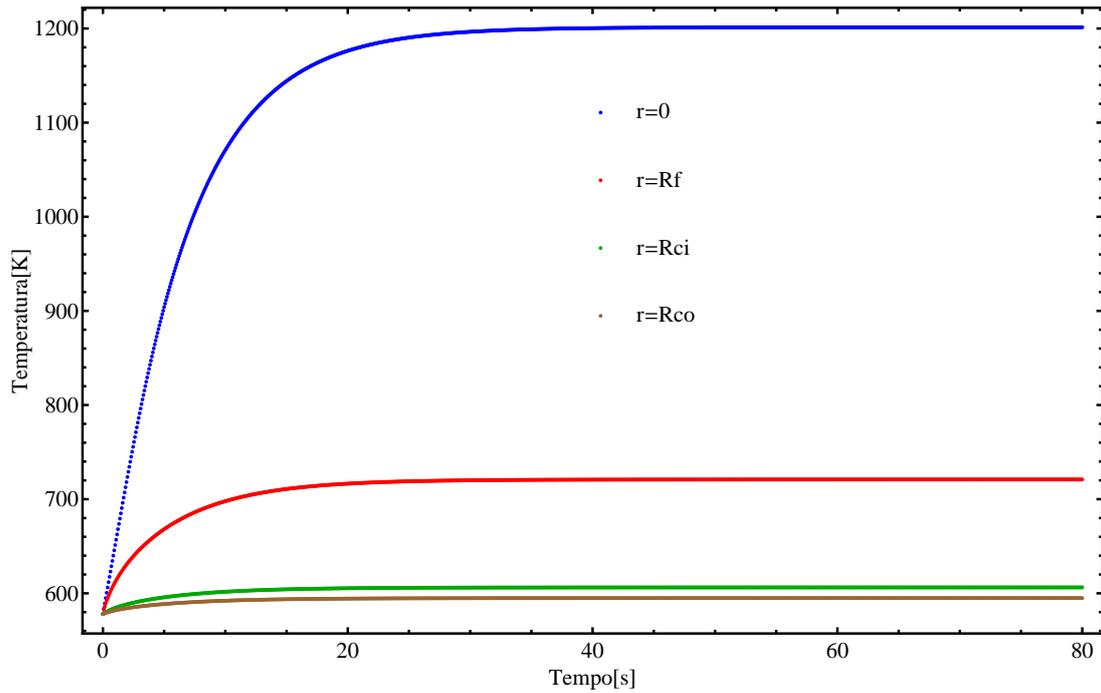


Figura 5.3: Regime permanente da temperatura para a operação normal do reator

tura, respectivamente. São mostrados os principais pontos do conjunto da vareta combustível, ou seja, onde ocorre a maior e a menor temperatura de cada região. Nesses gráficos podem ser visto o comportamento dessas variáveis. A mudança de fase para energia ocorre de acordo com o salto de entalpia e a temperatura tem um perfil constante e oscilatório.

Podemos observar que a variação de temperatura e de entalpia em todo revestimento é muito pequena e não podem ser diferenciadas nessas figuras. Observamos também que o revestimento apresenta um pequeno salto energético e sua mudança de fase ocorre bem rápida quando comparado com todo o processo.

O combustível apresenta maior variação entre as temperaturas devido à sua menor condutividade térmica. O salto energético de sua mudança de fase é maior que o do revestimento durando um tempo bem maior, que pode ser avaliado pelo salto energético entre o centro e a parte externa da pastilha. A temperatura apresenta uma oscilação devida ao comportamento da solução pelo método de entalpia.

Com o objetivo de comparar a aproximação de propriedades médias em cada fase, foi realizado a solução para a temperatura com as propriedades variando ao

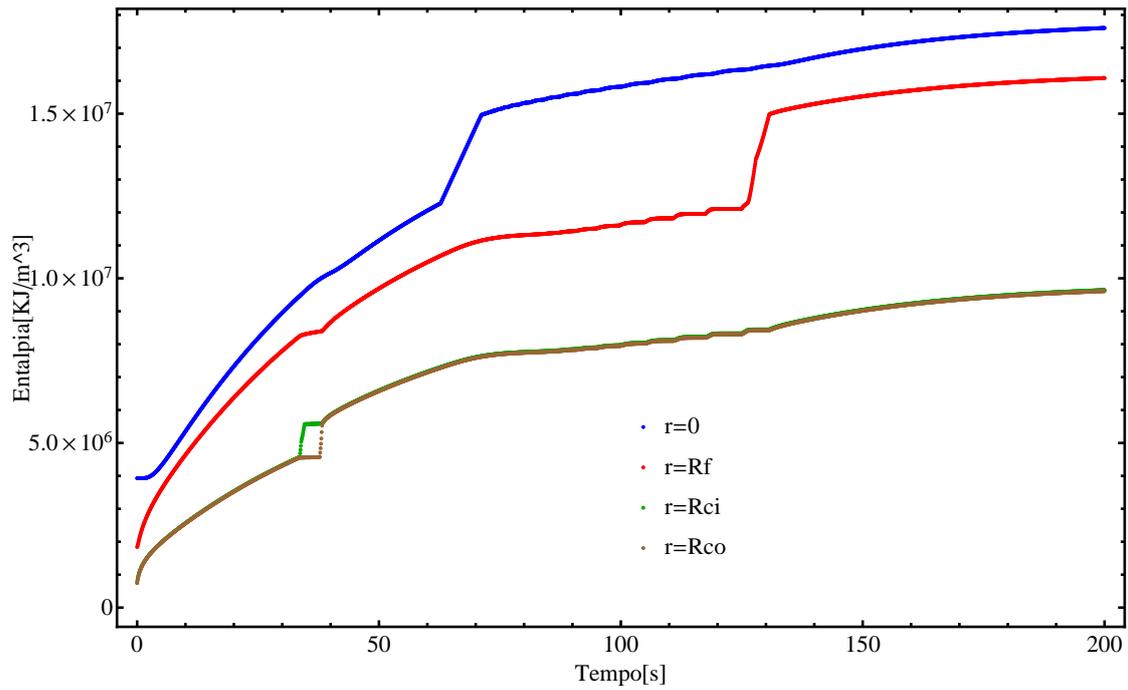


Figura 5.4: Evolução da energia em acidente com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$  pelo método de entalpia

longo de todo tempo, que pode ser vista na figura 5.6. Essa solução apresenta um alto custo computacional quando comparado com a solução com propriedades constantes.

Tabela 5.4: Comparação entre propriedade constante e variável com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

Propriedade	Duração da etapa em segundos			
	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Constante	33,60	4,65	24,47	67,94
Variável	29,52	3,71	27,96	60,24

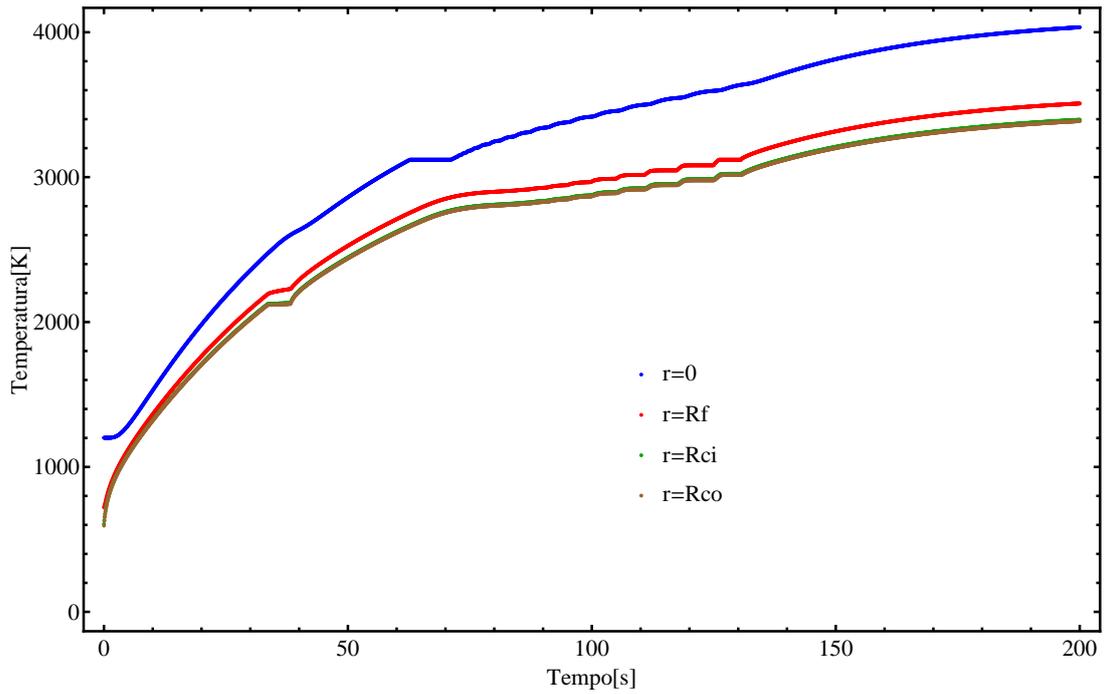


Figura 5.5: Evolução da temperatura em acidente com potência total e  $h = 0, 2kW/m^2K$  pelo método de entalpia e propriedades constantes

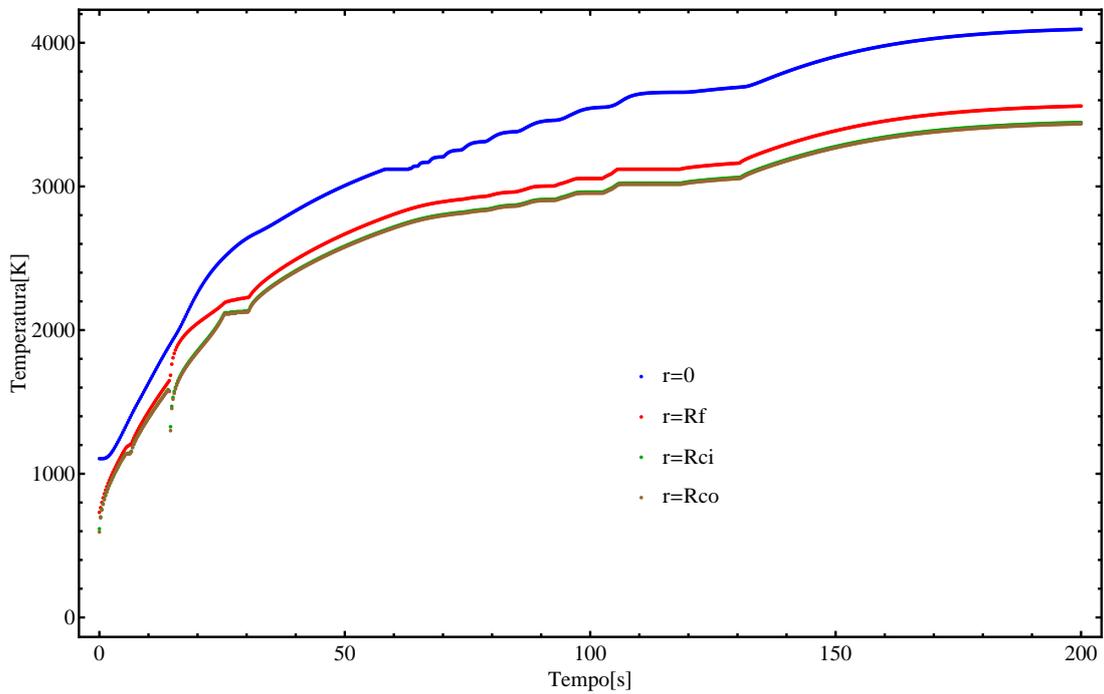


Figura 5.6: Evolução da temperatura em acidente com potência total,  $h = 0, 2kW/m^2K$  e propriedades variáveis

A tabela 5.4 compara os tempos de cada etapa para as soluções com propriedades constantes e propriedades variável com a temperatura. Observa-se que o erro relativo atingiu até 20% nas etapas iniciais e erros bem menores para as últimas etapas. O alto erro para as etapas 1 e 2 ocorreu devido a grande variação da condutividade térmica para a fase sólida, tanto para o revestimento, quanto para o combustível. Como as propriedades apresentam uma menor variação para a fase líquida e com uma menor faixa de temperatura para a etapa 3, os erros das últimas etapas foram menores. De modo geral, a solução com propriedades constante é superestimada. Porém a diminuição do termo fonte e do coeficiente de transferência de calor faz com que esse erro das etapas iniciais seja minimizado.

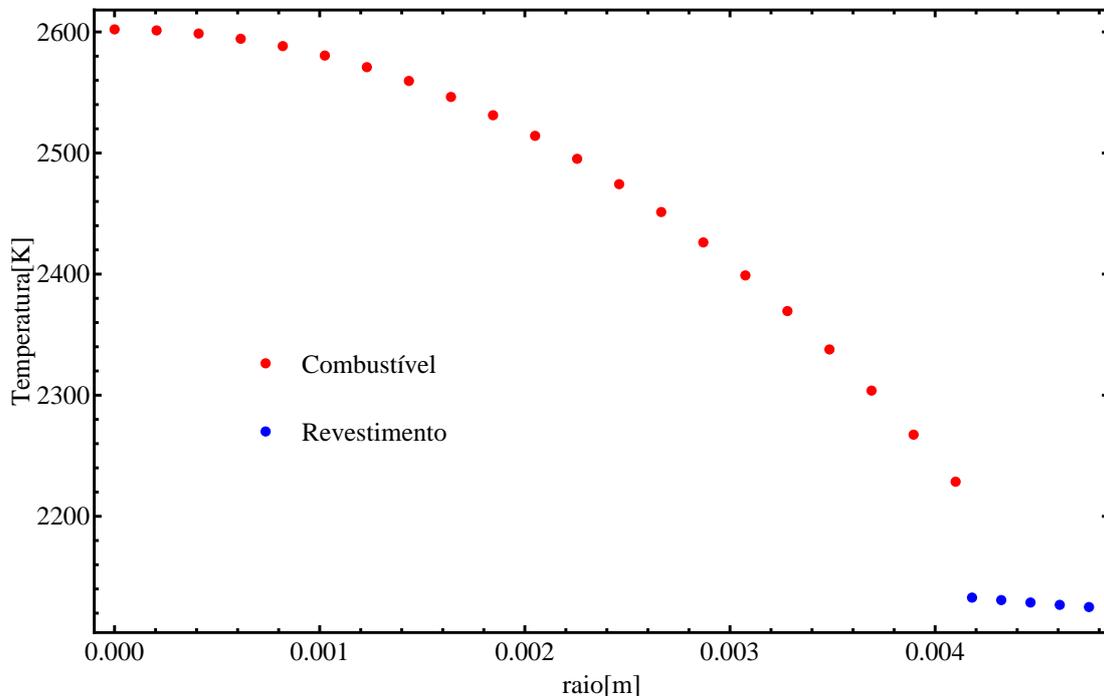


Figura 5.7: Temperatura após o fim do derretimento do revestimento com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

A situação mostra que todo o conjunto atinge o estado líquido antes dos 150s quando a linha vermelha tem o salto energético, e podemos observar que após os 200s está prestes a atingir o regime permanente quando todos os perfis estão se estabilizando.

Nos gráficos 5.7 e 5.8 podemos analisar com maior facilidade o perfil de tempe-

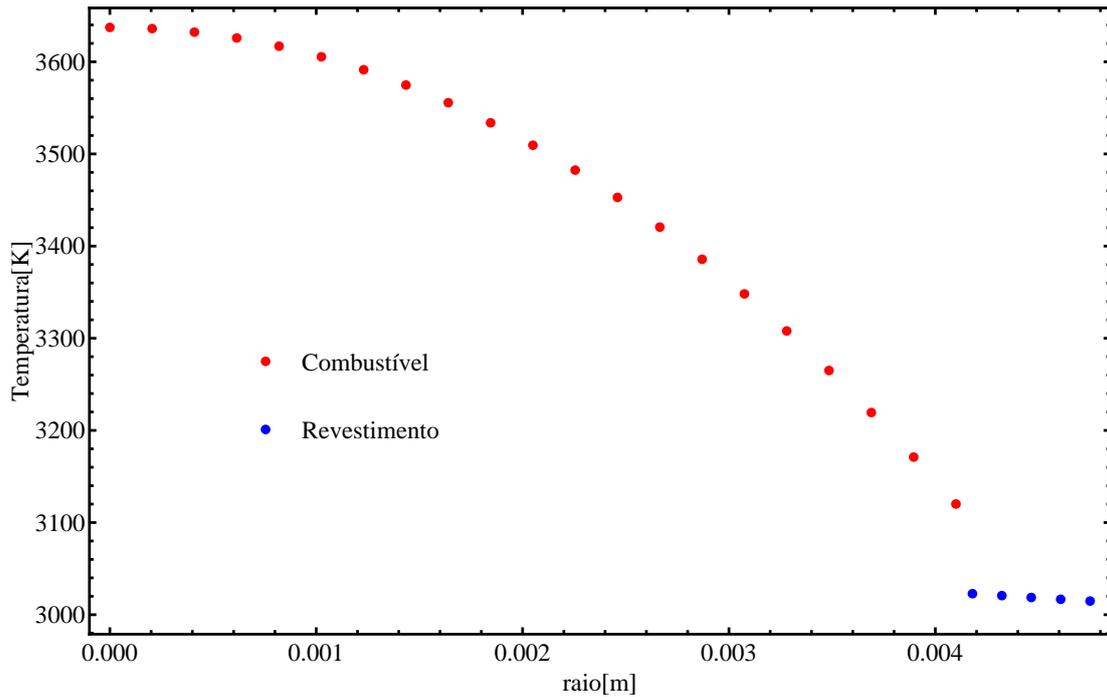


Figura 5.8: Temperatura após o fim do derretimento da pastilha combustível com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

ratura do conjunto em dois tempos distintos. Vemos que a diferença de temperatura para a pastilha de combustível é considerável, cerca de  $500K$  de diferença. Porém o revestimento que envolve a pastilha de urânio tem uma distribuição mais uniforme o que implica em uma solução mais uniforme. Além disso, a espessura do revestimento é muito pequena, o que faz com que seja difícil avaliar e diferenciar a sua temperatura. Note que, para casos em que o coeficiente de transferência de calor ou a potência seja menor, esses perfis de temperatura tendem a ser mais suaves, apresentando uma mudança de fase com menos oscilações numéricas.

Logo se torna pouco atrativo analisar o perfil da temperatura e entalpia do revestimento, quando este se encontra em mudança de fase. Nas figuras 5.9, 5.10, 5.11 e 5.12 são observados o perfil da temperatura e entalpia para diferentes tempos do derretimento da pastilha, em que os pontos vermelhos representam a fase líquida e os pontos azuis representam a fase sólida.

Em  $t = 74s$  a interface de derretimento passa exatamente pelo sétimo nó da malha. Podemos ver na figura 5.9 o salto da entalpia devido ao calor latente de

fusão, no qual os primeiros pontos já passaram. Nesta situação podemos ver que o perfil de temperatura para ambas as fases são bem definido e diferentes, como mostra a figura 5.10. O mesmo podemos observar nas figuras 5.11 e 5.12 em  $t = 99,5s$  onde ocorre o derretimento do décimo sexto ponto da malha. Porém devido ao perfil parabólico do problema e sua solução a mudança de fase se torna mais suave.

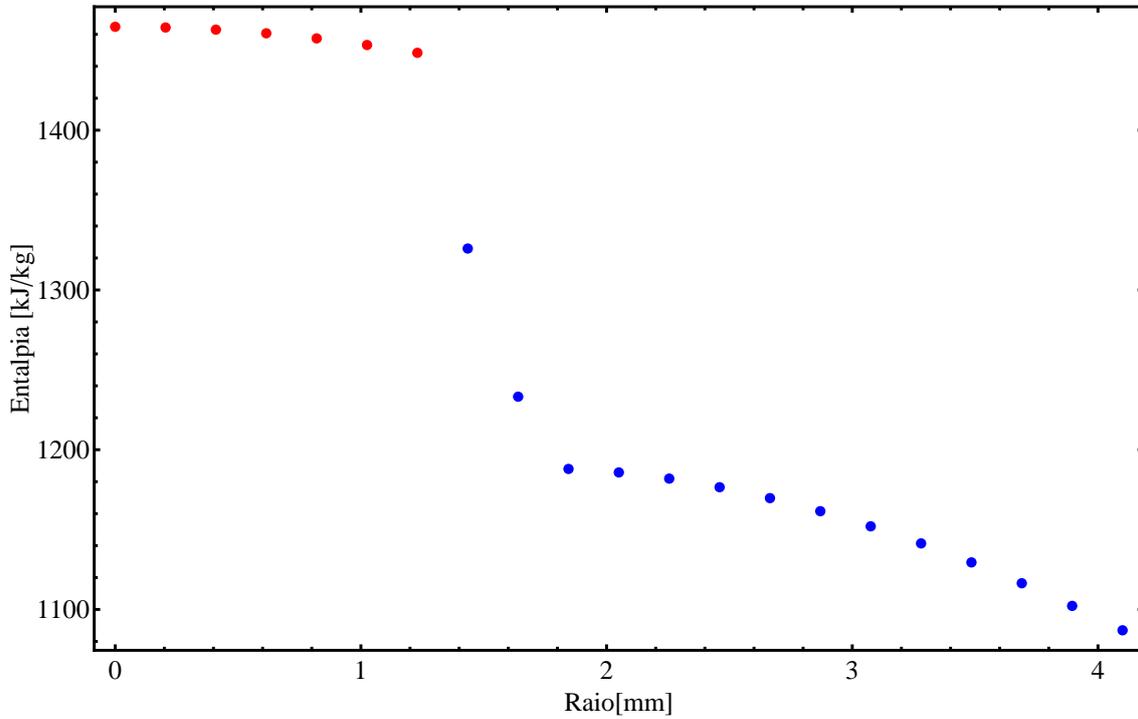


Figura 5.9: Entalpia da pastilha em  $t = 74s$  com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

Com o objetivo de mostrar o comportamento da função de conversão de entalpia para temperatura, a função foi analisada no centro da pastilha. A figura 5.13 mostra que a temperatura permanece constante ao longo do aumento de entalpia durante o calor latente. O nó precisa vencer o calor latente para que a mudança de fase ocorra completamente e assim possa voltar a aumentar sua temperatura com o aumento de sua energia.

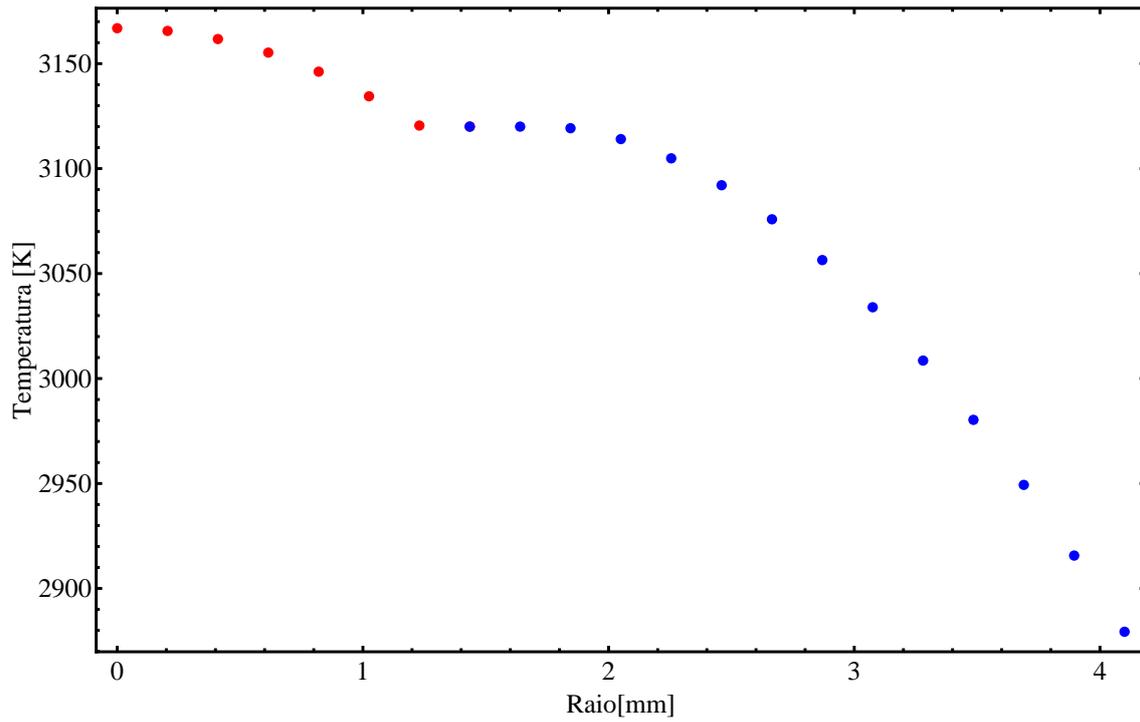


Figura 5.10: Temperatura da pastilha em  $t = 74s$  com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

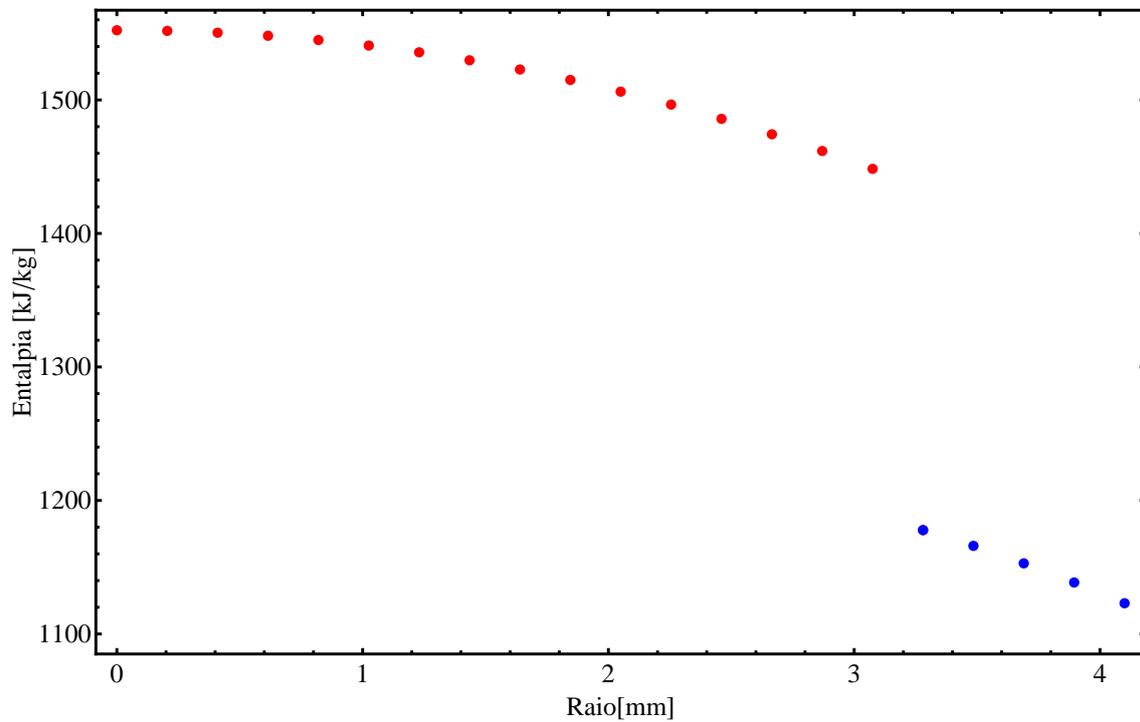


Figura 5.11: Entalpia da pastilha em  $t = 99,5s$  com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

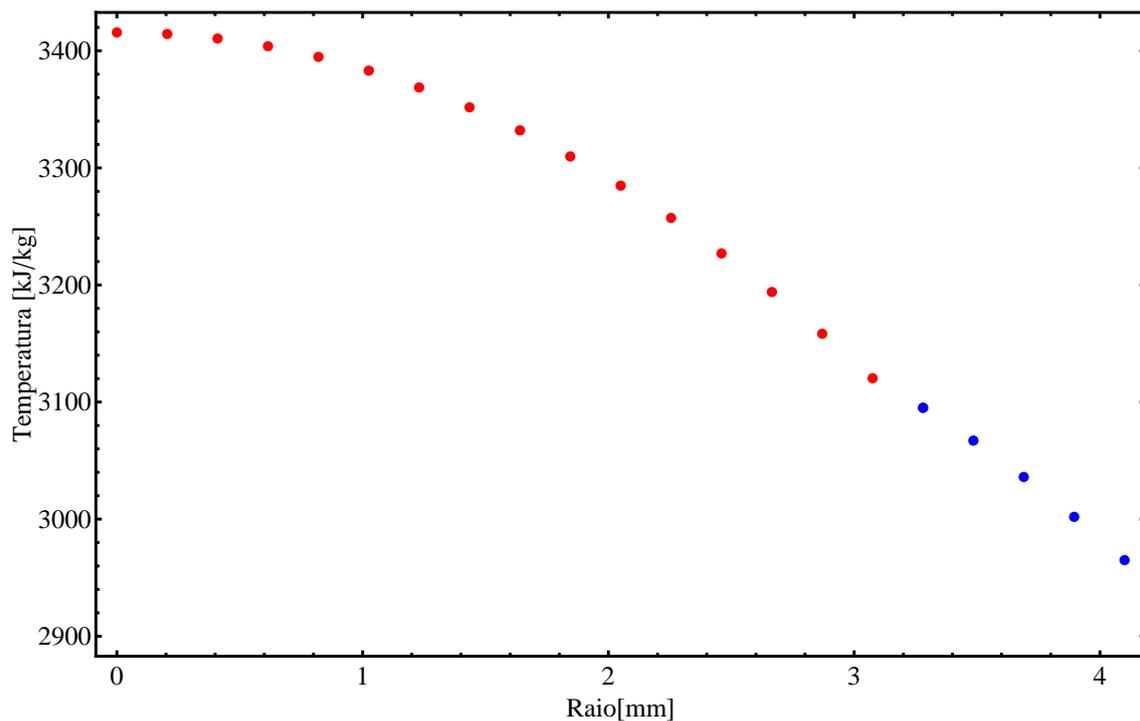


Figura 5.12: Temperatura da pastilha em  $t = 99,5s$  com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

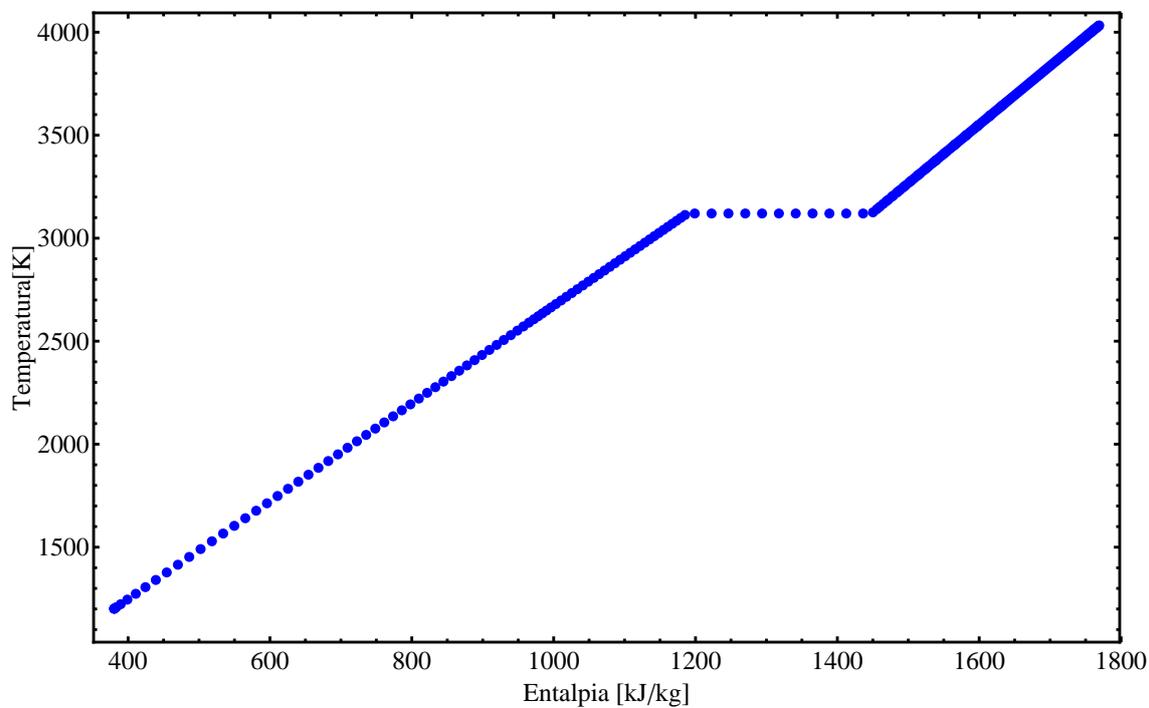


Figura 5.13: Temperatura em função da entalpia em  $r = 0$

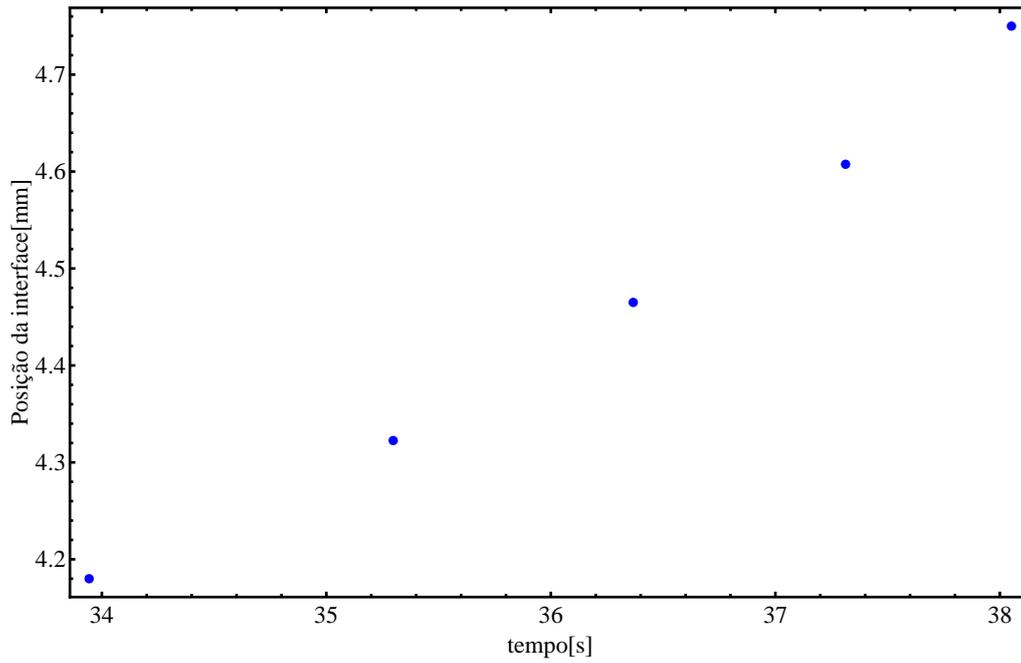


Figura 5.14: Propagação da interface do revestimento pelo método de entalpia com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

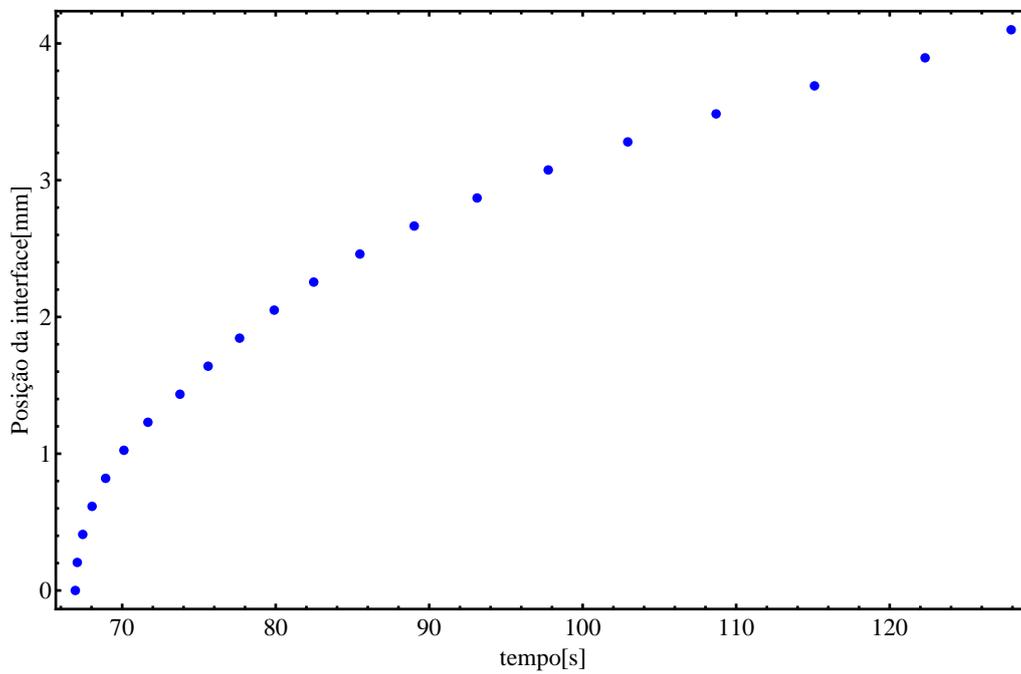


Figura 5.15: Propagação da interface do combustível pelo método de entalpia com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

Outro resultado relevante é a solução não linear da propagação da interface que pode ser observada pelo método de entalpia. Porém a posição da interface será relativa a formulação de mudança de fase utilizada, que neste trabalho sempre será a solução proposta por Voller e Cross (1981). As figuras 5.14 e 5.15 mostram essa propagação de mudança de fase ao longo do raio para o revestimento e pastilha combustível, respectivamente.

Vemos que os perfis são completamente diferentes. Normalmente a interface se propaga conforme a figura 5.14, pois inicialmente a propagação da interface acontece de maneira mais rápida e então se torna mais lenta. Porém para o revestimento isso não acontece, e o derretimento ocorre quase que de forma linear. Possivelmente isso ocorre devido à origem de seu derretimento ser bem diferente do que ocorre para a pastilha. Na pastilha o derretimento ocorre devido ao termo fonte, que faz com que o perfil parabólico tenha maiores temperaturas no centro, fazendo com que o derretimento no centro aconteça rapidamente.

Já o revestimento é aquecido através da temperatura da pastilha, que inicialmente está próxima da temperatura do revestimento, fazendo com que o derretimento não seja rápido. Como na mudança de fase a temperatura do revestimento permanece praticamente constante, o fluxo de calor se torna maior, fazendo com que a mudança de fase ocorra de maneira mais rápida. E então a temperatura do combustível passa a ser influenciada pelo revestimento, fazendo com que o derretimento se torne mais lento novamente.

## 5.2 Resultados por parâmetros concentrados

Foi implementado um programa para cada solução de parâmetros concentrados. E a expectativa era que a solução de parâmetros concentrados aperfeiçoados melhorasse a solução de parâmetros concentrados clássico.

Neste caso as condições iniciais para a solução das equações foram encontradas através da solução analítica da equação de calor em regime permanente. Consequentemente o perfil radial em regime permanente foi integrado de modo a obtermos a temperatura média para cada região. A temperatura média em operação normal

calculada foi de  $605K$  para o revestimento e  $927K$  para a pastilha de urânio.

### 5.2.1 Solução clássica

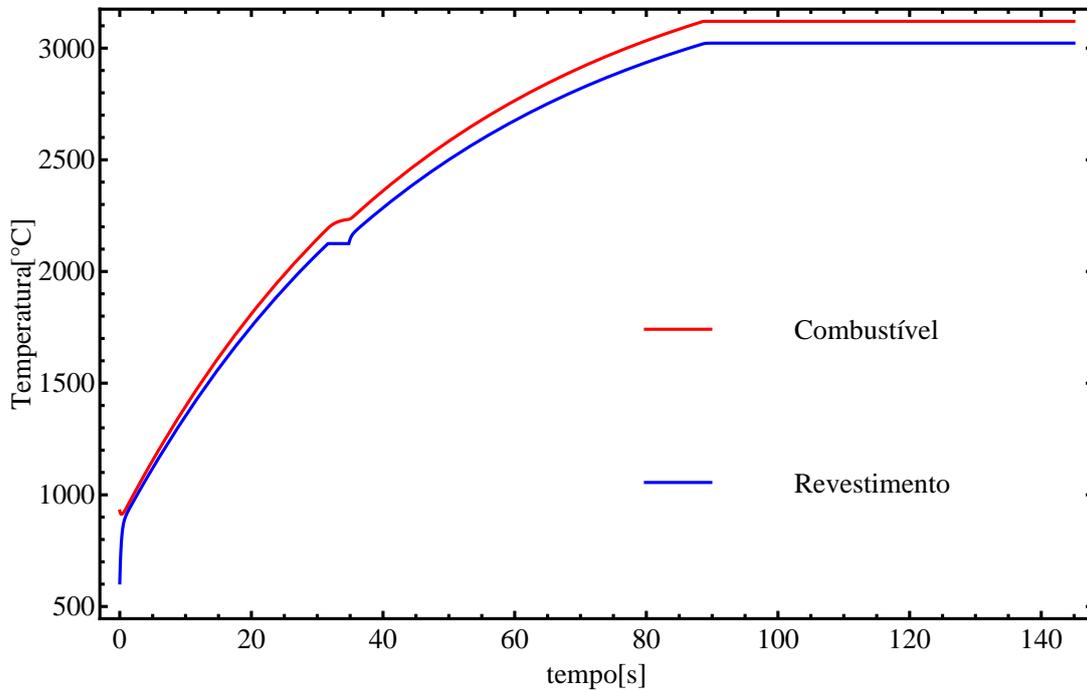


Figura 5.16: Evolução da temperatura em acidente por parâmetros concentrados clássico com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

Em um primeiro momento a solução clássica parece aproximar bem todo o problema de acidente em reatores nucleares. Porém tal solução não apresenta grandes detalhes. O problema foi resolvido etapa por etapa e todo o processo pode ser visto na figura 5.16.

Podemos observar o aumento abrupto logo no início da temperatura do revestimento na figura 5.16 que ocorre devido à diferença de transferência de calor entre a solução em regime permanente e a solução em regime transiente. Como o coeficiente diminuiu drasticamente devido a falta de capacidade do refrigerante de refrigerar o núcleo, o revestimento passou a armazenar uma maior quantidade de calor fazendo com que sua temperatura aumentasse.

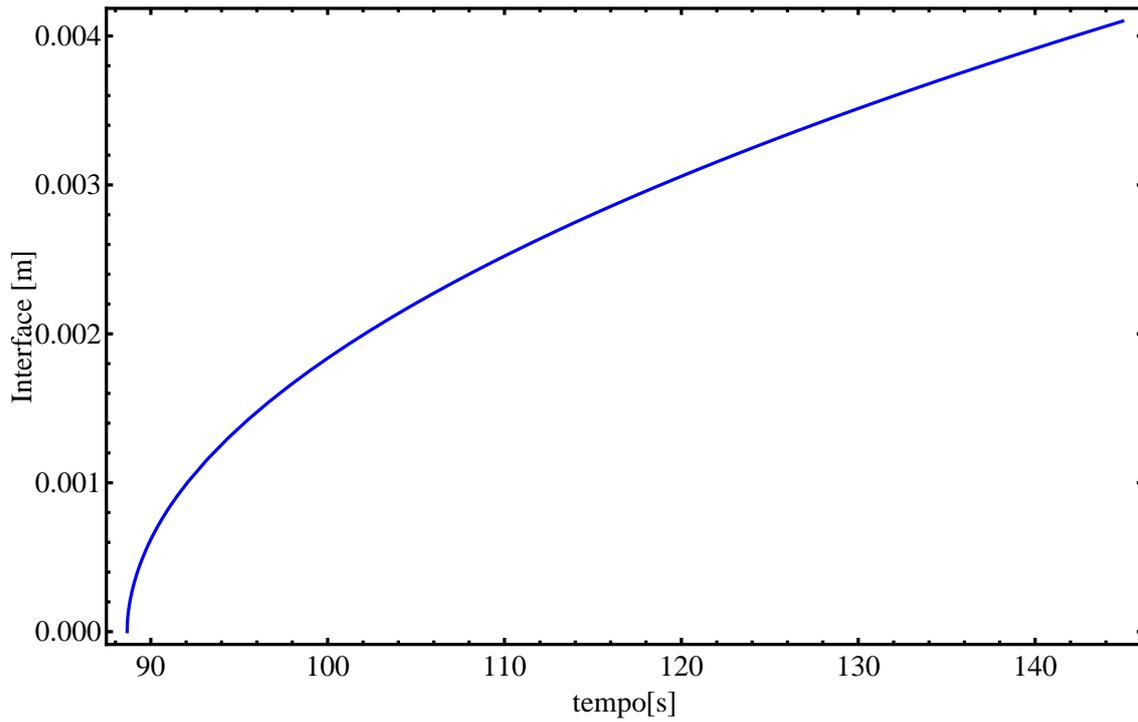


Figura 5.17: Propagação da interface do combustível por parâmetros concentrados clássico com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

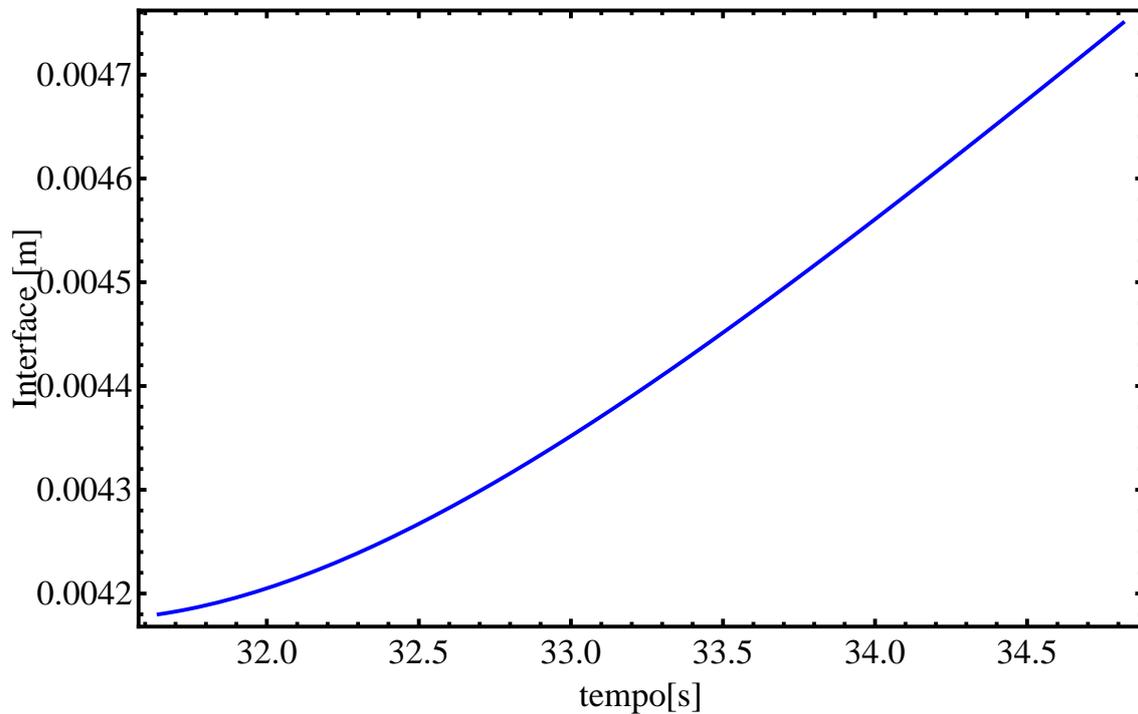


Figura 5.18: Propagação da interface do revestimento por parâmetros concentrados clássico com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

O gráfico 5.16 termina com o derretimento da pastilha combustível, então a temperatura do conjunto voltaria a aumentar, ou seja, o sistema apresenta a mesma temperatura no final do processo devido ao modelo de solução, e não significa que tenha atingido o regime permanente.

Outra importante informação que podemos adquirir da solução por parâmetros concentrados clássico é a propagação da interface das regiões, que podem ser vistos nas figuras 5.17 e 5.18. A aproximação de balanço energético realizada pelos parâmetros concentrados faz com que o seu tempo de derretimento seja subestimado, pois não é levada em consideração a difusão de calor em seu domínio, somente suas condições de contorno. Apesar de vermos a propagação da interface, a temperatura média de todo o domínio será a temperatura de derretimento em toda a propagação da interface. Esta temperatura pode ser vista na figura 5.16 e podemos perceber que acaba influenciando no perfil da outra região.

## 5.2.2 Solução aperfeiçoada

A solução aperfeiçoada ficou abaixo das expectativas, apresentando resultados sem sentido físico na última etapa de mudança de fase. Ou seja, esta solução não é confiável para a etapa de derretimento da pastilha de urânio. Porém a solução aperfeiçoada apresentam ótimos resultados para as etapas 1, 2 e 3. A falha na etapa 4 provavelmente ocorre devido a geração de calor em suas equações, que faz com que o erro da condição inicial seja amplificado, apresentando perfis de temperatura sem sentido físico. Desta forma só serão mostrados soluções de parâmetros concentrados aperfeiçoados para as três primeiras etapas.

A primeira vantagem evidente da solução de parâmetros concentrados aperfeiçoado sobre o clássico pode ser vista nas figuras 5.19, 5.20 e 5.21. A solução apresenta uma maior variedade de perfis de temperatura, que além das temperaturas médias, incluem as temperaturas das condições de contorno de cada região.

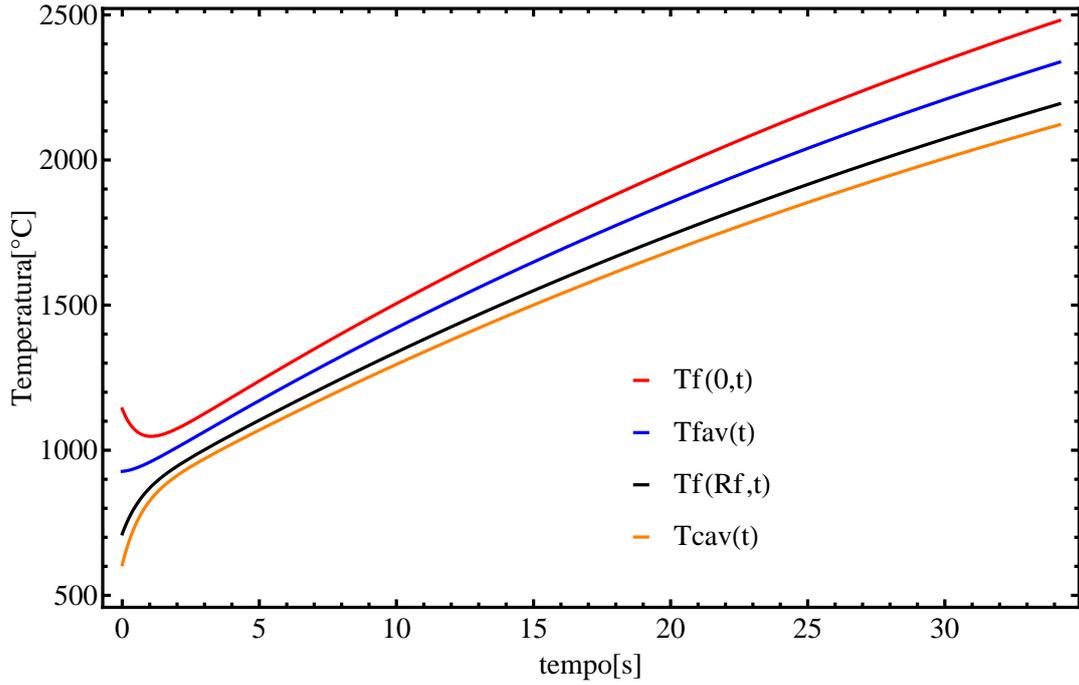


Figura 5.19: Evolução da temperatura na etapa 1 por parâmetros concentrados aperfeiçoado com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

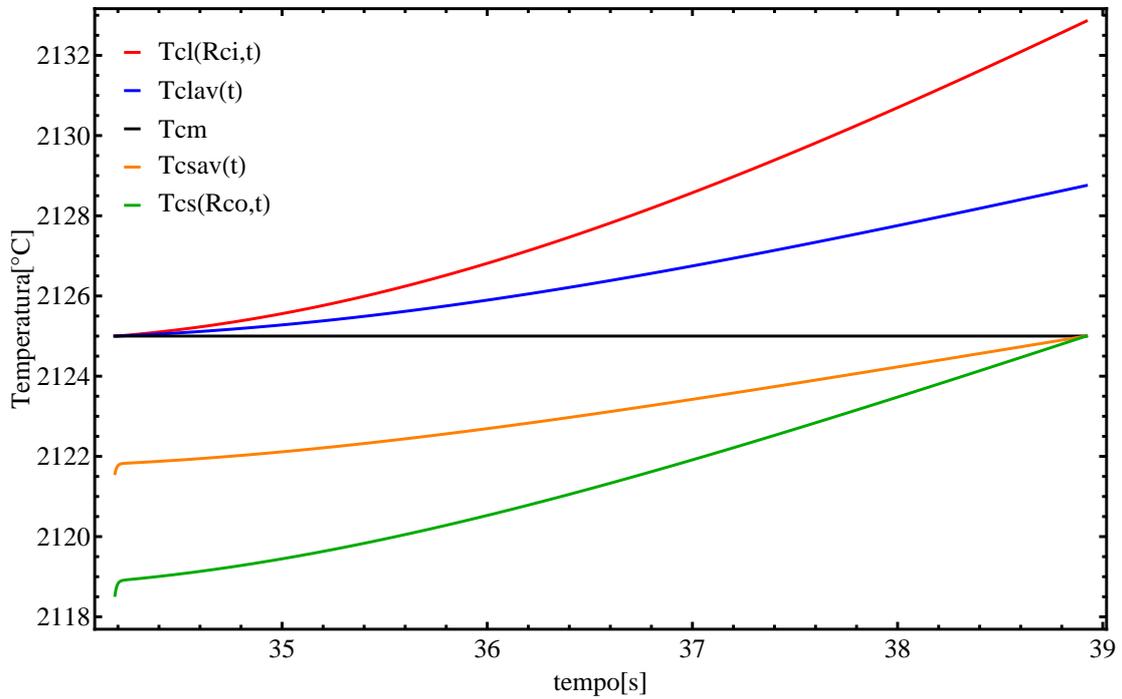


Figura 5.20: Temperatura do revestimento na etapa 2 por parâmetros concentrados aperfeiçoado com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

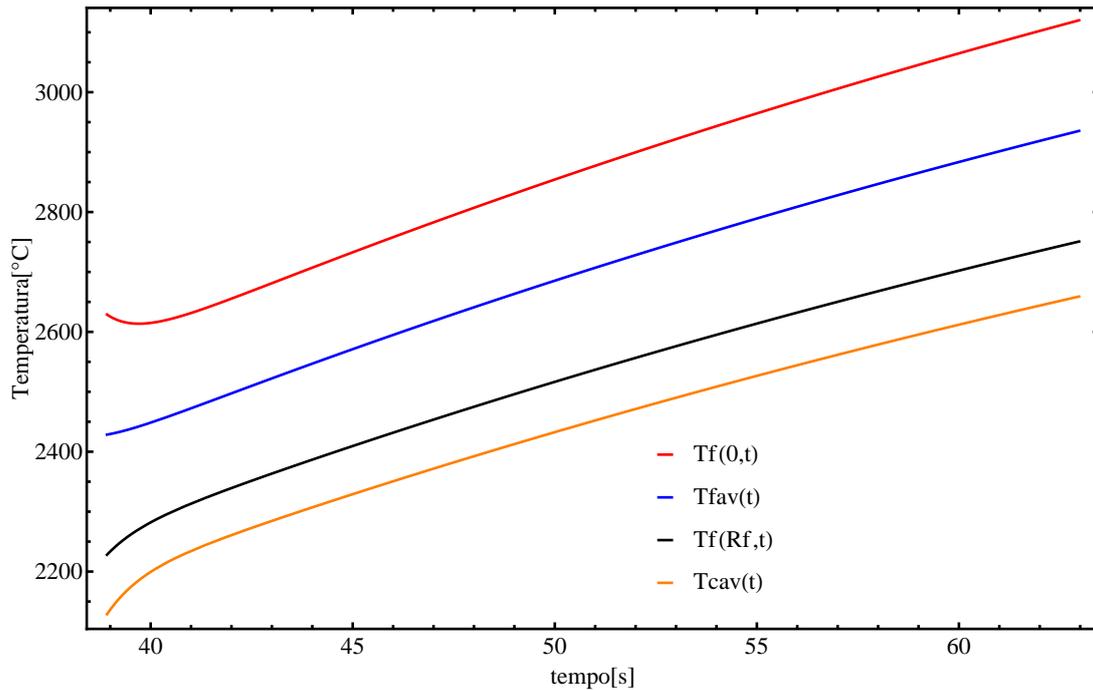


Figura 5.21: Evolução da temperatura na etapa 3 por parâmetros concentrados aperfeiçoado com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

A figura 5.20 mostra os perfis de temperatura do revestimento, em que o domínio da fase líquida e sólida varia. Inicialmente o domínio da fase líquida é pontual, e está na temperatura de derretimento. Já o domínio sólido termina da mesma forma, com a temperatura em mudança de fase. A posição da interface pode ser vista da mesma forma que a solução por parâmetros concentrados clássico.

As figuras 5.19 e 5.21 mostram os perfis nas etapas que não ocorrem a mudança de fase. Observa-se um comportamento quase linear, parecido com o que foi visto para a solução pelo método de entalpia.

### 5.3 Reator com potência plena

Será mostrada uma comparação mais detalhada para os perfis de temperatura entre as soluções apresentadas e seu comportamento para cada etapa do problema. Foi realizada a solução para os diferentes coeficientes de transferência de calor e o tempo de cada etapa pode ser visto nas tabelas 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8.

Tabela 5.5: Tempo total das etapas para cada método com potência total e  $h = 0$

Metodologia	Duração da etapa em segundos			
	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Método de Entalpia	20,15	2,47	13,39	9,97
P. C. Clássico	20,12	1,85	15,33	8,49
P. C. Aperfeiçoado	20,59	2,72	13,14	10,75

Nesta seção será considerado que o reator não tenha sido desligado e que a geração de calor que varia ao longo da vareta combustível será mantida constante a um valor médio. Isso significa que existem pontos de maior geração de calor e que o seu derretimento pode ocorrer em um menor tempo.

A tabela 5.5 apresenta a solução para a pior situação, onde as etapas acontecem com maior rapidez devido ao isolamento do conjunto. As soluções apresentam boa concordância, principalmente na etapa 1 para a solução clássica. Já a solução aperfeiçoada apresenta melhores resultados para as outras etapas. Pela tabela 5.6 vemos que o baixíssimo coeficiente de transferência de calor de  $0,01$  não apresenta uma mudança significativa no tempo da solução, ou seja, não apresenta uma melhora significativa da capacidade de remover o calor do núcleo. Porém quando comparamos as tabelas 5.5 e 5.6 observamos uma tendência de aumentar o erro entre os modelos de solução.

Tabela 5.6: Tempo total das etapas para cada método com potência total e  $h = 0,01kW/m^2K$

Metodologia	Duração da etapa em segundos			
	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Método de Entalpia	20,57	2,53	13,61	11,04
P. C. Clássico	20,47	1,89	15,86	8,87
P. C. Aperfeiçoado	21,02	2,78	13,35	11,13

Quando passamos para as tabelas 5.7 o tempo de cada etapa aumenta consideravelmente. Especificamente na tabela 5.8 o tempo das etapas 3 e 4 aumentaram

Tabela 5.7: Tempo total das etapas para cada método com potência total e  $h = 0,1kW/m^2K$

Metodologia	Duração da etapa em segundos			
	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Método de Entalpia	25,27	3,19	16,47	21,92
P. C. Clássico	24,47	2,30	23,37	14,93
P. C. Aperfeiçoado	25,80	3,42	16,11	22,54

em maior proporção, isso mostra que o sistema está próximo de atingir o regime permanente para esse coeficiente de transferência de calor.

Em todas as tabelas as etapas apresentam um menor tempo para a solução de parâmetros concentrados clássico, exceto para etapa 3. É exatamente nesta etapa que ocorre a maior discrepância para o resultado de parâmetros concentrados clássico e as outras soluções, como podemos observar na tabela 5.8. Já na etapa 1 nós vemos os melhores resultados entre as soluções.

Tabela 5.8: Tempo total das etapas para cada método com potência total e  $h = 0,2kW/m^2K$

Metodologia	Duração da etapa em segundos			
	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Método de Entalpia	33,60	4,65	24,47	67,94
P. C. Clássico	31,64	3,17	53,85	56,29
P. C. Aperfeiçoado	34,19	4,73	24,05	71,18

A solução aperfeiçoada apresenta ótimos resultados temporais em todas as etapas. Sendo muito superior nas etapas 2 e 3 quando comparada com a solução aperfeiçoada. Fazendo com que, nestas etapas seja aconselhável a utilização dessa solução, com objetivo de diminuir o erro da solução.

O derretimento de varetas combustíveis em reatores nucleares, que estão em pleno funcionamento, ocorre de maneira muito rápida. Por isso caso o refrigerante perca a capacidade de refrigerar algumas partes do reator e assim seja exposta,

fatalmente a vareta e até a pastilha poderá derreter. Claro que essa situação é muito improvável em reatores PWR.

Para melhor avaliarmos os perfis de temperatura de cada modelo e a influência do coeficiente de transferência de calor na solução, será comparada a evolução do perfil da interface e da temperatura para cada etapa específica, para um  $h = 0,1kW/m^2K$ , entre a solução clássica e o método de entalpia.

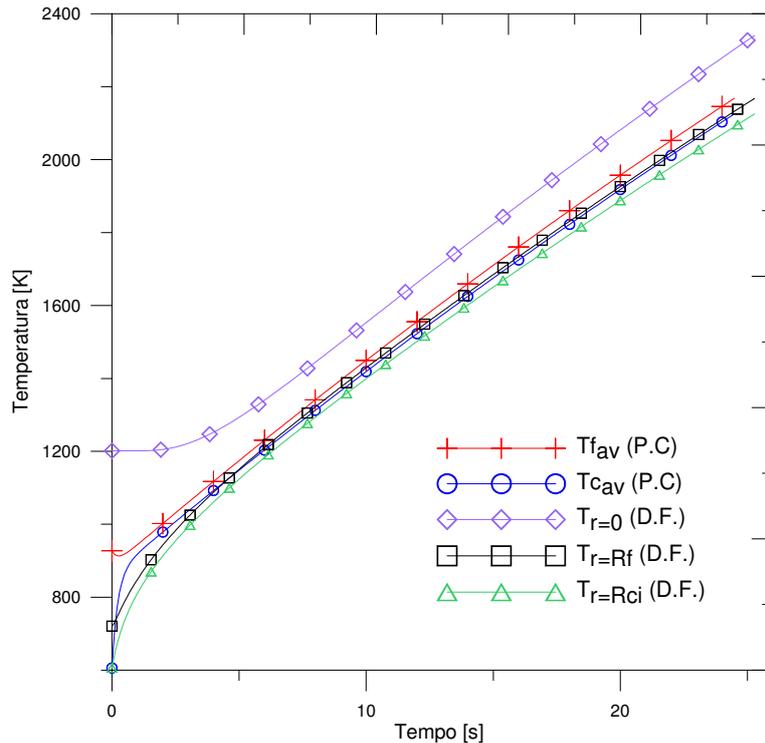


Figura 5.22: Perfil de temperatura na etapa 1 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e  $h = 0,1kW/m^2K$

Na figura 5.22 observamos que os perfis seguem muito próximos, fazendo com que o erro temporal desta etapa seja muito pequeno. Quando comparados com o método de entalpia, os perfis de parâmetros concentrados seguem com temperaturas muito próximas. Desta forma a temperatura para o revestimento é superestimada, atingindo a temperatura de fusão mais rapidamente. Na etapa 2 o perfil do revestimento também está subestimada e muito próxima da menor temperatura da vareta combustível, que pode ser visto na figura 5.23.

A etapa 3 está representada na figura 5.24, onde observamos que o perfil de

temperatura utilizando parâmetros concentrados clássicos continua subestimado. O erro temporal gerado nesta fase ocorre principalmente devido ao modo como foi definido o fim da etapa. Pelo método de entalpia, o fim da etapa ocorre após temperatura do centro do combustível atingir a temperatura de fusão. Já por parâmetros concentrados clássico, o fim da etapa acontece quando a temperatura média do combustível atinge a temperatura de mudança de fase. Como de fato a média da temperatura do revestimento ocorre depois do centro do revestimento, o tempo total da etapa 3 sempre será superestimada. Além a isso, há uma propagação do erro da etapa anterior, na qual a etapa 2 termina com a temperatura do combustível abaixo do desejado, quando comparado com o método de entalpia.

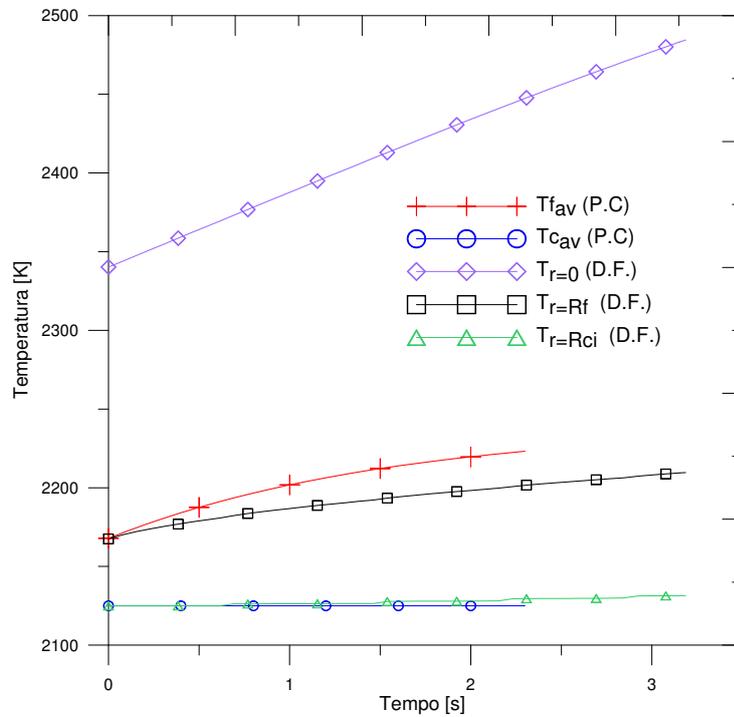


Figura 5.23: Perfil de temperatura na etapa 2 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e  $h = 0,1kW/m^2K$

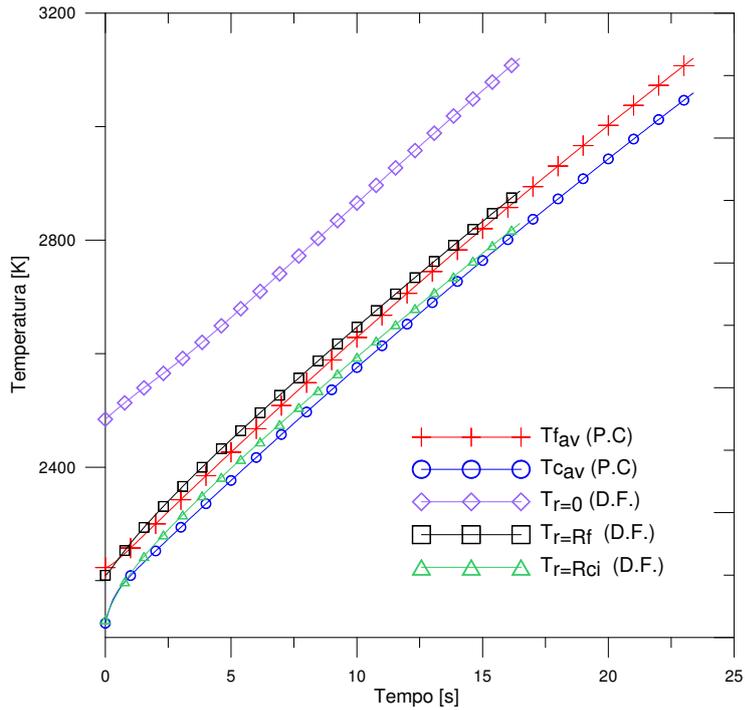


Figura 5.24: Perfil de temperatura na etapa 3 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e  $h = 0,1kW/m^2K$

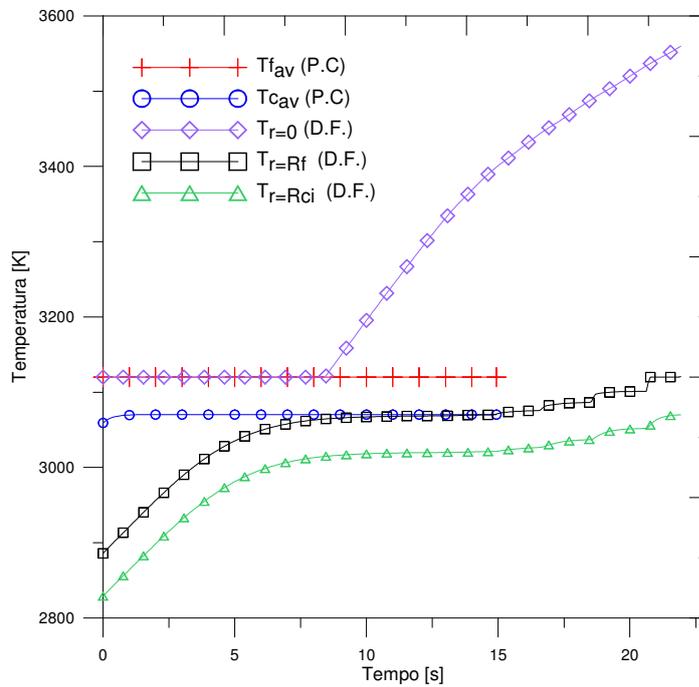


Figura 5.25: Perfil de temperatura na etapa 4 para parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e  $h = 0,1kW/m^2K$

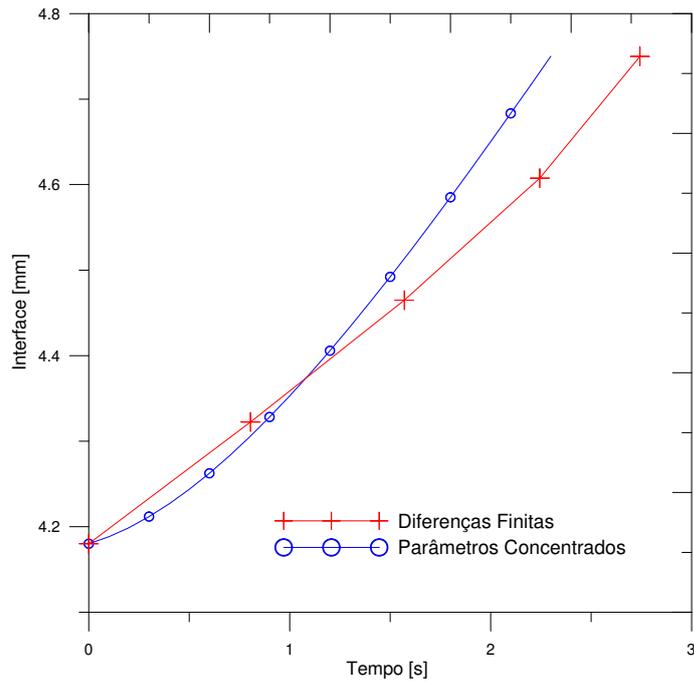


Figura 5.26: Propagação da mudança de fase do revestimento por parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e  $h = 0, 1kW/m^2K$

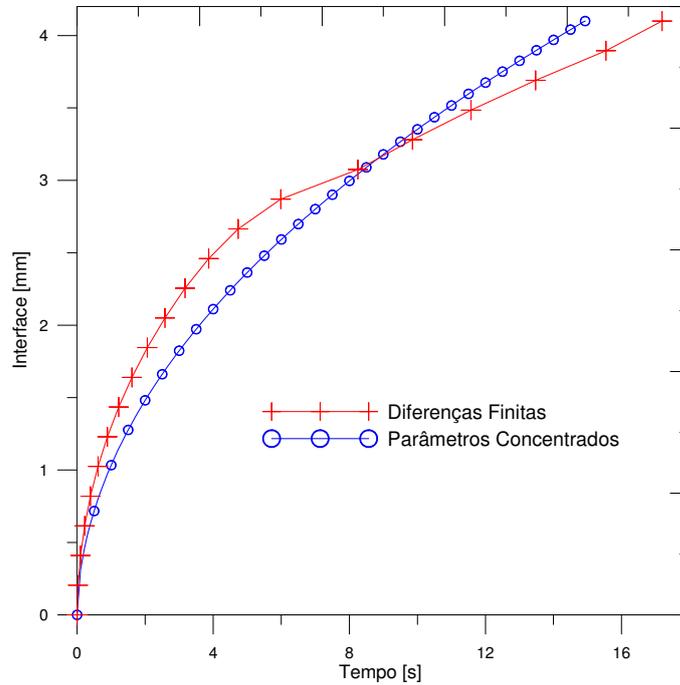


Figura 5.27: Propagação da mudança de fase do combustível por parâmetros concentrados e método de entalpia com potência total e  $h = 0, 1kW/m^2K$

A figura 5.25 mostra a última etapa do derretimento. Ao contrário das outras etapas, inicialmente os perfis calculados por parâmetros concentrados estão acima dos perfis calculados pelo método de entalpia. Pode-se observar que o perfil de parâmetros concentrados tende a se estabilizar, e a diferença entre as temperaturas do revestimento e da pastilha de combustível dependem da geração de calor e do coeficiente de transferência de calor do refrigerante. Logo a solução por parâmetros concentrados passa a depender exclusivamente da equação da interface do combustível. Já para a solução pelo método de entalpia, podemos observar que inicialmente o centro da pastilha se mantém durante certa parte do tempo na temperatura de mudança de fase.

Podemos analisar as interfaces de propagação do derretimento para cada região nas etapas com mudança de fase. A figura 5.26 e 5.27 mostram os perfis da mudança de fase para o revestimento e o combustível, respectivamente. Quando comparado as duas soluções, podemos observar um perfil parecido e um pouco mais acentuado para a solução por parâmetros concentrados, o que implica em um menor tempo de derretimento.

Observa-se que o derretimento das regiões se propaga de maneira bem diferente. No revestimento a velocidade de propagação aumenta, já a pastilha combustível inicia-se com uma alta velocidade e depois apresenta um considerável perda de velocidade de propagação. Essa diferença ocorre devido à natureza do aquecimento de cada região, o combustível apresenta o aquecimento devido ao calor produzido pelo urânio, e o revestimento devido ao aquecimento do próprio urânio.

Nesta situação, a solução de parâmetros concentrados clássico são péssimas para as etapas 2 e 3, devido as aproximações para a mudança de fase na solução do derretimento do revestimento, pois a temperatura média do combustível acaba sendo subestimada na etapa 2, fazendo com que a etapa 3 tenha uma grande duração. Este erro não ocorre com a solução aperfeiçoada, fazendo com que os resultados nesta fase seja muito bom.

## 5.4 Reator com calor residual

Com objetivo de simular uma possível situação real, como por exemplo o acidente da usina nuclear de Fukushima. Foi simulado para a situação em que o reator seja desligado e não possa ser refrigerado. Nesta situação a geração volumétrica de calor será calculada através do calor residual, que de modo geral varia ao longo do tempo em que o reator foi desligado e depende de seu tempo de funcionamento antes do acidente.

A figura 5.28 mostra o comportamento da parte da geração de calor ao longo do tempo após o desligamento. Neste trabalho utilizaremos uma situação hipotética de que o acidente iniciou-se após um ano do início do funcionamento do reator, que está representado na figura pela linha verde.

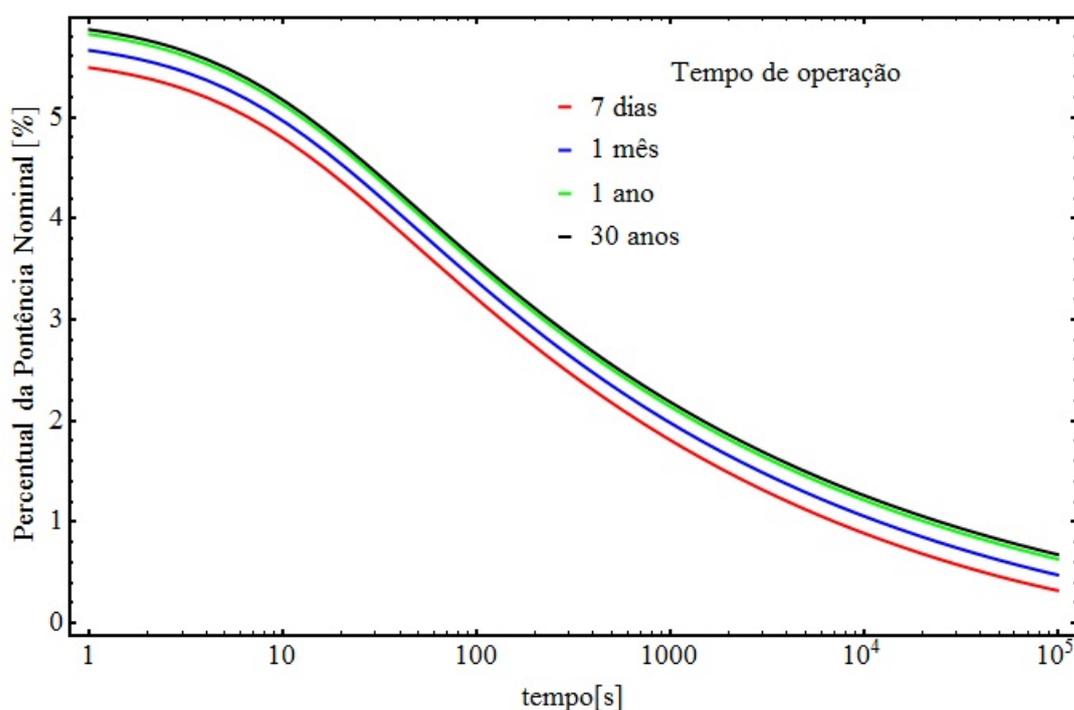


Figura 5.28: Calor residual após o desligamento do reator

Como a geração de calor cai para cerca de 6% da geração volumétrica inicial, o aquecimento do reator se torna muito lento e a utilização de coeficientes de transferência de calor faz com que o derretimento do reator não ocorra. Em alguns casos, como por exemplo com o coeficientes de cerca de 0,1, o conjunto acaba resfriando,

e se estabilizando abaixo da temperatura de operação. Para que o derretimento ocorra, o núcleo será considerado totalmente isolado, fazendo com que não troque calor com o refrigerante. Outro motivo é devido à falta de informação sobre o comportamento da temperatura do refrigerante, que neste caso apresenta uma grande influência sobre o núcleo. Para fins práticos o tempo para a exposição do núcleo será desconsiderado.

Devido ao tempo total de simulação ser muito grande, o custo computacional aumenta consideravelmente. Com o objetivo de diminuir esse custo, a solução do problema pelo método de entalpia para o calor residual será feita com a malha de 13 nós. Note que esta malha não influenciará na solução final, uma vez que a convergência da malha realizada na figura 5.1 apresenta bons resultados para uma potência maior. Com a potência residual, as diferenças de temperaturas são menores o que diminui ainda mais a influência das malhas.

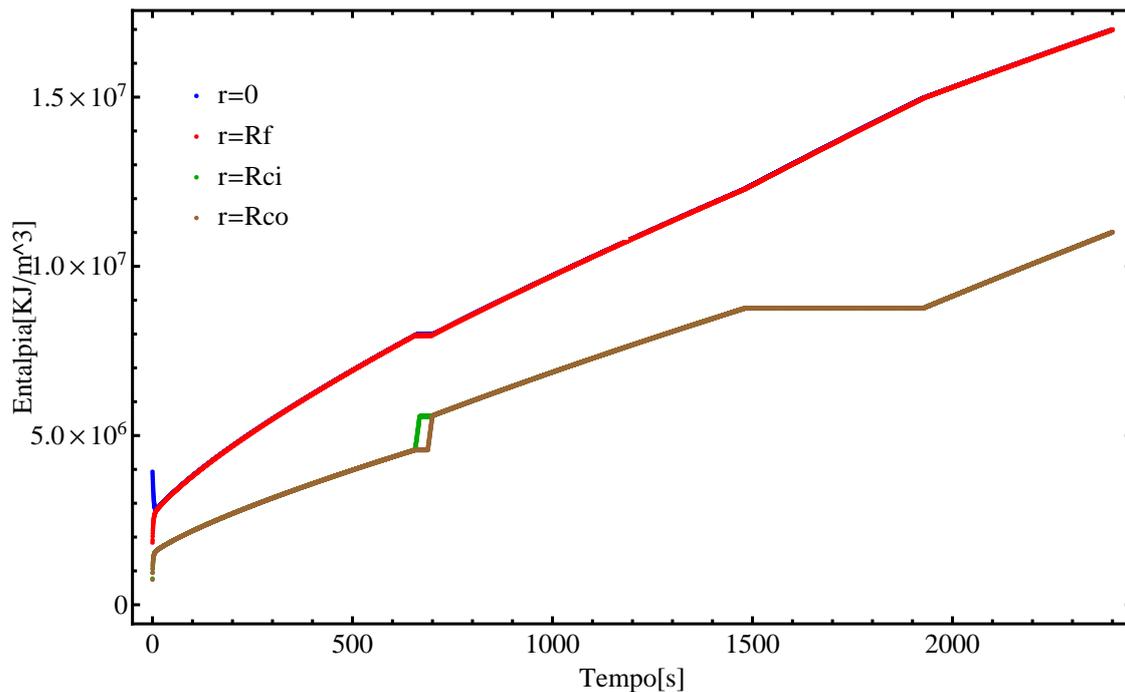


Figura 5.29: Evolução da energia no acidente com calor residual pelo método de entalpia

A evolução temporal do perfil de temperatura pode ser visto nas figuras 5.31 e 5.30 para os diferentes métodos de solução. As figuras não possibilitam a visualização

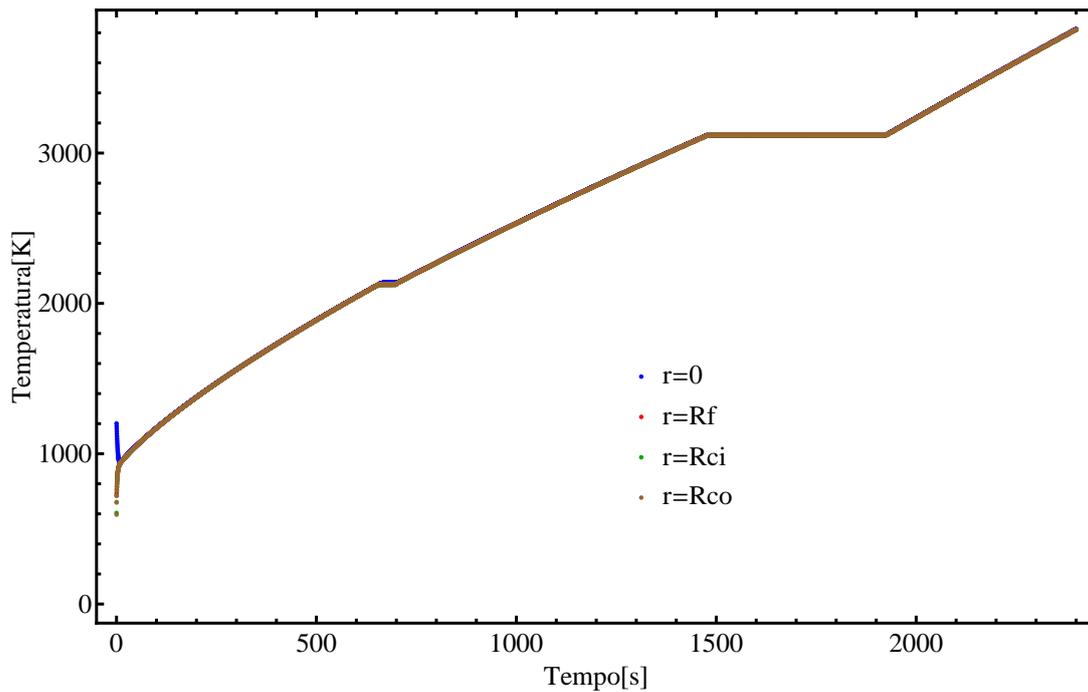


Figura 5.30: Evolução da temperatura no acidente com calor residual pelo método de entalpia

dos diferentes perfis, que mostra que a diferença de temperatura em todo o sistema é muito pequena. O mesmo acontece para o perfil de energia mostrado na figura 5.29, guardando a diferença energética entre as regiões, que obviamente dependem de suas propriedades físicas. A diferença dos perfis pode ser vista na mudança de fase do revestimento em que ocorre o salto de entalpia. Para a pastilha o salto de energia não pode ser visto, pois a sua energia aumenta lentamente devido a termo fonte.

Logo nos primeiros segundos podemos observar uma diminuição da temperatura no centro da pastilha e em sua média. Isso ocorre devido ao desligamento do reator, que faz com que a passagem abrupta de um regime estacionário para a situação de acidente tenha uma redução do coeficiente de transferência de calor e do termo fonte instantâneo. O que leva a rápida homogeneização da energia do conjunto, e conseqüentemente em sua temperatura.

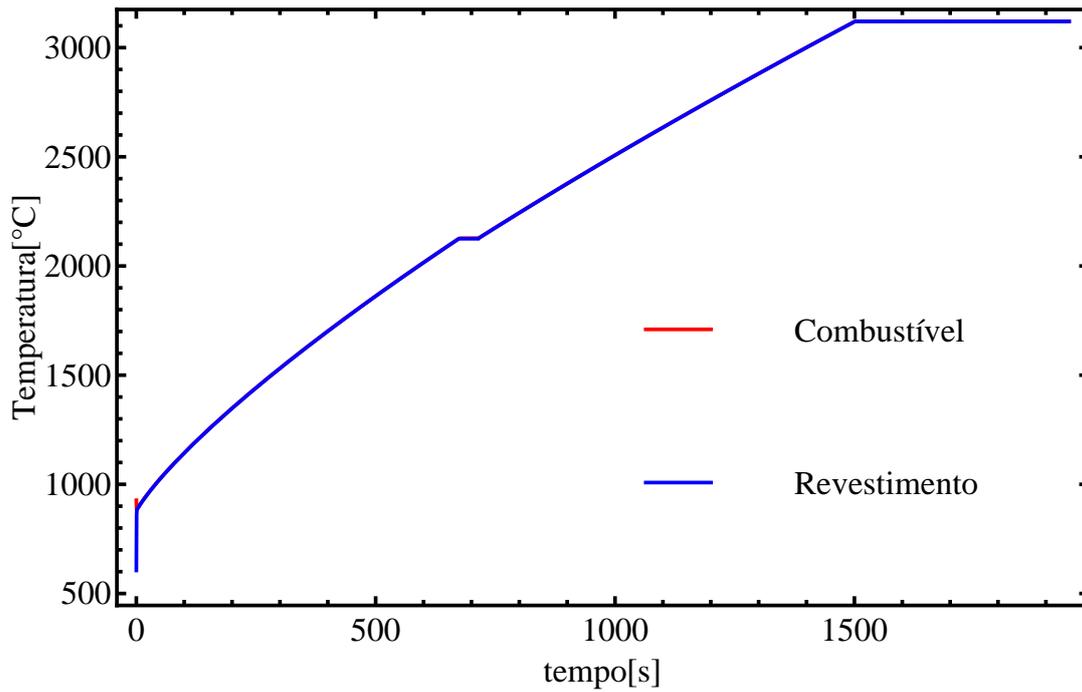


Figura 5.31: Evolução da temperatura no acidente com calor residual por parâmetros concentrados

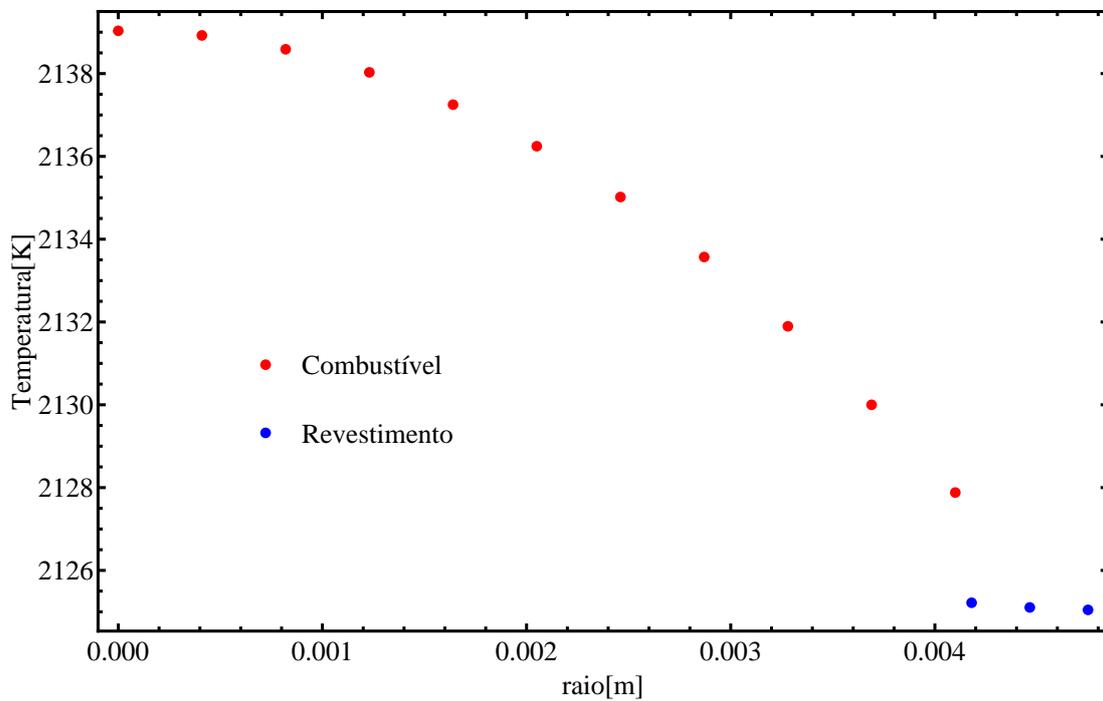


Figura 5.32: Perfil de temperatura para  $t = 699,6s$  com calor residual pelo método de entalpia

A figura 5.32 mostra o maior gradiente de temperatura do processo, que ocorre após o derretimento do revestimento. Mesmo assim apresenta uma diferença de temperatura entre o ponto mais quente e o ponto mais frio de menos de  $15K$ , durante a maior parte do tempo essa diferença é de cerca de  $2K$  para a solução pelo método de entalpia e de aproximadamente  $0.5K$  para as médias de parâmetros concentrados. A temperatura do conjunto quase homogêneo faz com que a solução por parâmetros concentrados seja muito próxima da solução pelo método de entalpia.

A tabela 5.9 compara o tempo de duração de cada etapa. De modo geral as soluções são muito próximas, desta vez a maior diferença ficou por conta das etapas transientes sem mudança de fase, na qual a solução por parâmetros concentrados apresenta maiores resultados. Já para as etapas com mudança de fase apresentou resultados mais precisos e um pouco maiores para a solução pelo método de entalpia. A etapa 1 apresentou a maior diferença, que pode ser devido ao comportamento do transiente durante os primeiros segundos.

Tabela 5.9: Tempo total das etapas para cada método com calor residual

Metodologia	Duração da etapa [s]			
	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Método de Entalpia	655,5	44,10	778,4	447,6
P. C. Clássico	673,7	41,2	786,5	447,5
P. C. Aperfeiçoado	674,19	44,08	781,79	450,75

A variação das soluções para o tempo total da simulação é de cerca de 28 segundos. E podemos dizer que as duas soluções apresentaram um resultado total para o derretimento do conjunto de aproximadamente 32 minutos. É importante ressaltar que o tempo de derretimento do material radioativo é contabilizado após a exposição de uma determinada parte da vareta. E dependendo da posição axial, esta estimativa pode ser maior ou menor, o que dependerá do seu calor gerado.

Para a situação de calor residual, através da tabela 5.9 conclui-se que a utilização de parâmetros concentrados clássica é extremamente adequada. A utilização do método de entalpia não é justificada devido ao seu custo computacional ser infini-

tamente superior. Com a pequena diferença de temperatura no conjunto durante o processo, o detalhe do comportamento do material utilizando o método de entalpia perde o seu sentido. Desta forma a utilização de parâmetros concentrados será a mais indicada entre estes métodos.

# Capítulo 6

## Conclusão

Foi observado que não existem dificuldades de formulação e desenvolvimento da equação de condução de calor quando não envolvem mudança de fase, porém a análise da equação de calor com mudança de fase implica em soluções não lineares, que devem ser tratadas para a obtenção das diferentes soluções. Para solucionar o problema de derretimento de um reator nuclear foram necessárias algumas simplificações, que implicaram em um modelo unidimensional composto do conjunto pastilha e revestimento.

Foram elaborados programas para as soluções utilizando o método de entalpia com discretização explícitas de diferenças finitas, também desenvolveu-se soluções utilizando parâmetros concentrados clássicos e aperfeiçoados. Abaixo serão mostradas as principais conclusões que podem ser retiradas a partir dos programas desenvolvidos, levando em consideração a metodologia e os resultados obtidos.

A solução pelo método de entalpia apresenta um alto custo computacional devido a necessidade de manter a estabilidade da solução. As propriedades da região do revestimento sempre limitará a estabilidade da solução e conseqüentemente necessita sempre de um passo de tempo muito pequeno. A vantagem é que com esses passos de tempo a solução não será influenciada, apresentando sempre ótimos resultados. De modo geral, metodologia de parâmetros concentrado apresenta uma formulação mais complicada, porém não apresenta custo computacional, tendo soluções imediatas.

Em todo o procedimento existiram duas variáveis do problema preponderante

no comportamento da solução. São eles o coeficiente de transferência de calor entre o refrigerante e o revestimento, e a geração interna de calor devida às fissões para o reator com potência plena ou ao calor residual para o caso do reator desligado.

Embora a influência do passo de tempo na precisão da solução não tenha importância devido a utilização da discretização explícita, a influência do número de nós precisou ser analisado. Por isso foi realizada a análise da convergência de malha para o problema com um alto valor do termo fonte, pois apresenta altos gradientes. Foi observado que uma malha com 25 pontos era o suficiente para uma solução convergida do problema.

Para simplificar o problema, as médias das propriedades se mostrou adequada, já que o maior erro relativo para a pior situação ocorreu na etapa 2 com cerca de 20%, que apresenta um pequeno tempo de ocorrência. Ou seja, a influência no tempo total de derretimento é pequena. Foi possível observar que a principal fonte de erro acontece devido a grande variação da condutividade térmica nos materiais em seu estado sólido.

As soluções apresentadas para um reator com potência plena mostram que até  $h = 0,2kW/m^2K$  os componentes tendem a derreter, e isso acontece de maneira muito rápido, variando entre um a dois minutos. O alto valor da geração interna de calor na pastilha faz com que os gradientes de temperatura sejam altos, e tendem a aumentar com o aumento do coeficiente de transferência de calor. Nestas situações, as soluções pelo método de entalpia tendem a se tornarem oscilatórias nas etapas que envolvem a mudança de fase. Já as soluções por parâmetros concentrados clássicos são boas, porém com certo erro nas etapas da mudança de fase. Porém seu maior erro ocorre na etapa 3, pois a solução da etapa anterior faz com que os dados de entrada da etapa sejam ruins, ocasionando em um erro de tempo total maior. As soluções por parâmetros concentrados aperfeiçoados são muito acuradas e apresentam ótimos resultados, sendo mais aconselhada nas etapas 2 e 3, pois são nelas em que ocorre a principal fonte de erro da solução clássica.

Quando foi simulado o caso de acidente seguido do desligamento adequado do reator e exposição do núcleo, o calor residual fez com que o derretimento do reator seja retardado, ou seja, o derretimento ocorre de maneira mais lenta. E como

não é conhecido o comportamento da temperatura do refrigerante, para a análise do derretimento foi necessário zerar o coeficiente de transferência de calor para o refrigerante, eliminando a influência do refrigerante. Como os perfis de temperatura são muito suaves e pequenos, ambos as soluções foram muito parecidas com erro de cerca de 1%. As soluções apresentaram resultados de cerca de 32 minutos para o derretimento de uma determinada vareta do núcleo. Nesta situação a utilização de todas as soluções se mostram ótimas, sendo o parâmetros concentrados a mais adequada devido aos resultados similares, quando comparado com o método de entalpia, aliado ao baixo custo computacional para essa situação.

Para a realização de trabalhos futuros seria interessante acoplar o comportamento da temperatura do refrigerante ao longo do tempo, após o início do acidente, ou incluir a variação da reatividade para a condição de acidente, o que possibilitaria verificar se ocorre alguma mudança significativa na solução. Outra importante verificação seria analisar a solução ao longo da direção axial do vaso do reator, considerando a variação da geração de calor.

Foram encontradas dificuldades para a obtenção das propriedades dos materiais para a fase líquida do revestimento, que apresenta sua liga de zircônio em constante renovação. Isso faz com que estudos detalhados sobre ligas de zircônio seja de extrema importância nessa área.

A formulação de parâmetros concentrados aperfeiçoados apresenta resultados péssimos para a etapa em que ocorre a mudança de fase do combustível, fazendo com que não seja aconselhada a sua utilização na etapa 4. Provavelmente, essa falha ocorre devido a geração de calor, que faz com que o erro da condição inicial para a etapa seja amplificado, apresentando perfis de temperatura sem sentido físico. Desta forma, um estudo importante seria averiguar novas aproximações de parâmetros concentrados aperfeiçoados para esta etapa, a fim de encontrar uma possível solução.

Outro trabalho relevante seria a análise do comportamento de reatores com combustível esféricos, levando em consideração casos de acidentes com derretimento do núcleo e seus combustíveis esféricos.

# Apêndice A

## Propriedades dos Materiais

### A.1 Pastilha Combustível ( $UO_2$ )

Entalpia [ $kJ/mol$ ]

Fase sólida ( $298.15K < T < 3120K$ ):

$$H_{fs}(T) = -21,1762 + 52,1743\left(\frac{T}{1000}\right) + 43,9753\left(\frac{T}{1000}\right)^2 - 28,0804\left(\frac{T}{1000}\right)^3 + 7,88552\left(\frac{T}{1000}\right)^4 - 0,52668\left(\frac{T}{1000}\right)^5 + 0,71391\left(\frac{T}{1000}\right)^{-1}. \quad (A.1)$$

Fase líquida ( $3120K < T < 4500K$ ):

$$H_{fl}(T) = 8,0383(10^2) + 0,25136(10^{-3})T - 1,3288\frac{(10)^6}{T}. \quad (A.2)$$

Calor Específico [ $J/(molK)$ ]

Fase sólida ( $298.15K < T < 3120K$ ):

$$cp_{fs}(T) = 52,1743 + 87,951\frac{T}{1000} - 84,2411\left(\frac{T}{1000}\right)^2 + 31,542\left(\frac{T}{1000}\right)^3 - 2,6334\left(\frac{T}{1000}\right)^4 - 0,71391\left(\frac{T}{1000}\right)^{-2}. \quad (A.3)$$

Fase líquida ( $3120K < T < 4500K$ ):

$$cp_{fl}(T) = 0,25136(10^{-3}) + 1,3288\frac{(10)^6}{T^2}. \quad (A.4)$$

Note que  $1mol$  de  $UO_2 \approx 0.270kg$  de  $UO_2$ .

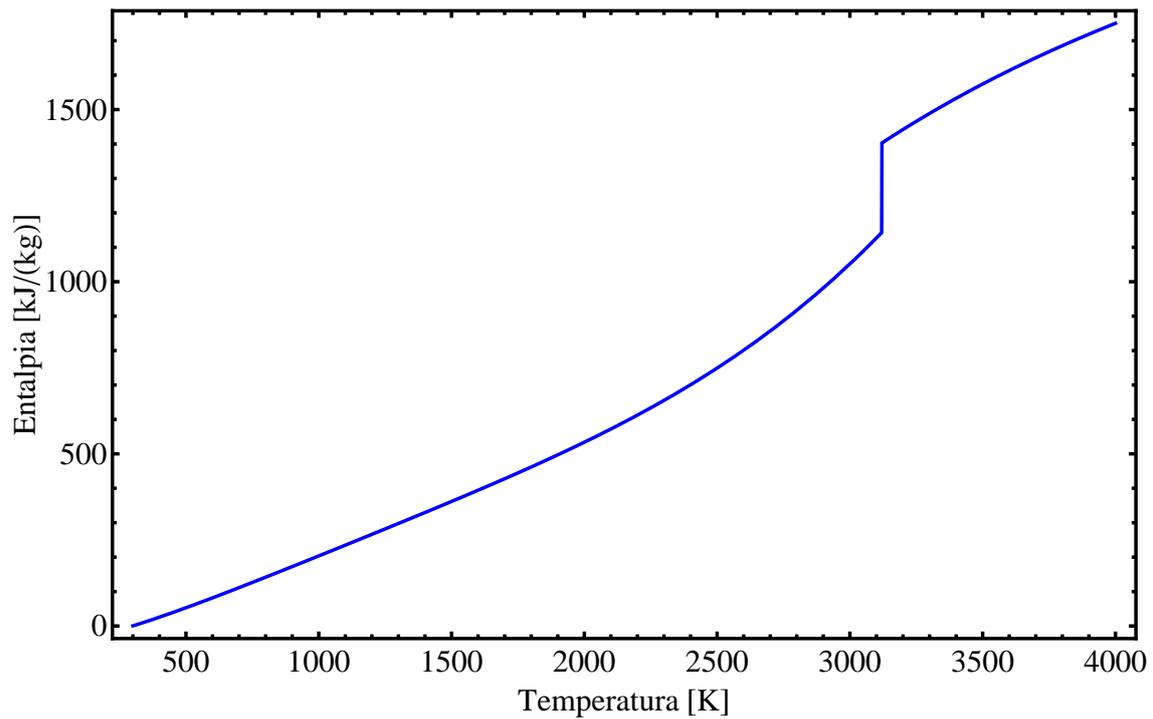


Figura A.1: Entalpia da pastilha combustível

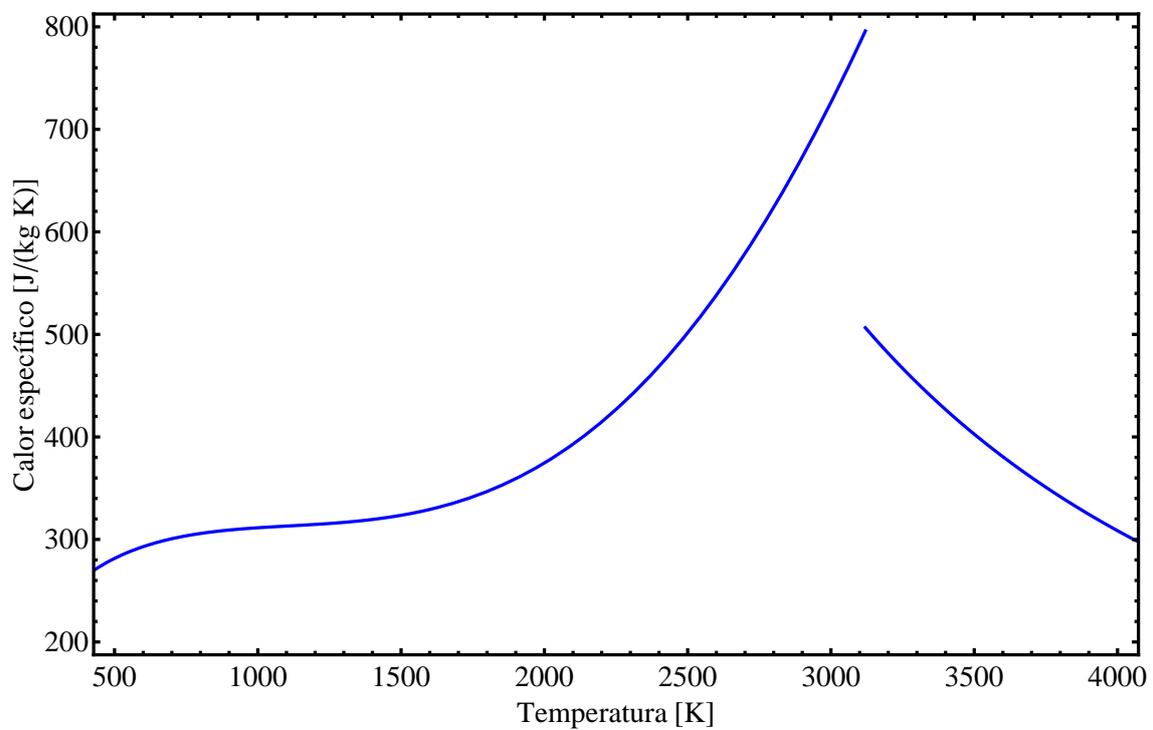


Figura A.2: Calor específico da pastilha combustível

### Condutividade Térmica [W/(mK)]

Fase sólida ( $298.15K < T < 3120K$ ):

$$k_{fs}(T) = \frac{100}{6,548 + 23,533(T/1000)} + \frac{6400}{(T/1000)^{2,5}} \exp\left[\frac{-16,35}{(T/1000)}\right]. \quad (\text{A.5})$$

Fase líquida ( $3120K < T < 4500K$ ):

$$k_{fl}(T) = 2,5. \quad (\text{A.6})$$

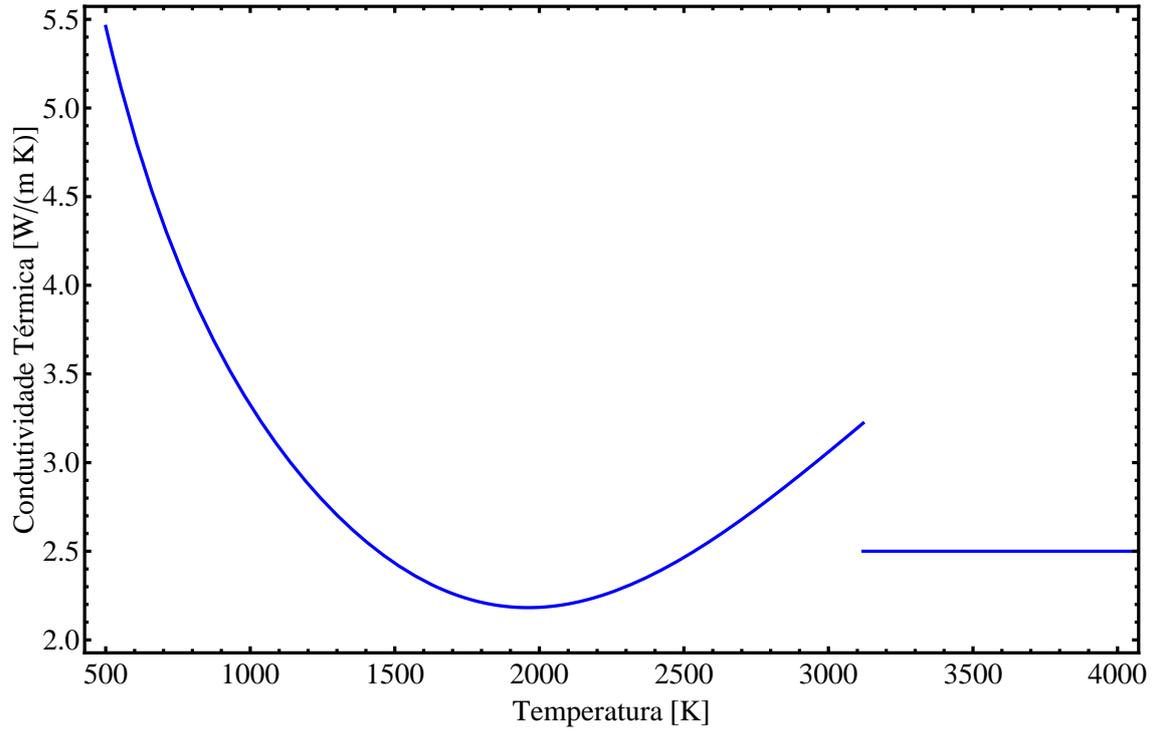


Figura A.3: Condutividade térmica da pastilha combustível

## Densidade [ $kg/(m^3)$ ]

Fase sólida ( $273K < T < 3120K$ ):

$$\rho_{fs}(T) = 10960(L(T))^3, \quad (A.7)$$

onde, se  $273K < T < 923K$ :

$$L(T) = (9,9734(10^{-1}) + 9,082(10^{-6})T - 2,705(10^{-10})T^2 + 4,391(10^{-13})T^3)^{-1},$$

ou, se  $923K < T < 3120K$ :

$$L(T) = (9,9672(10^{-1}) + 1,179(10^{-5})T - 2,429(10^{-9})T^2 + 1,219(10^{-12})T^3)^{-1}.$$

Fase líquida ( $3120K < T < 4500K$ ):

$$\rho_{fl}(T) = 8860 - 0,9285(T - 3120). \quad (A.8)$$

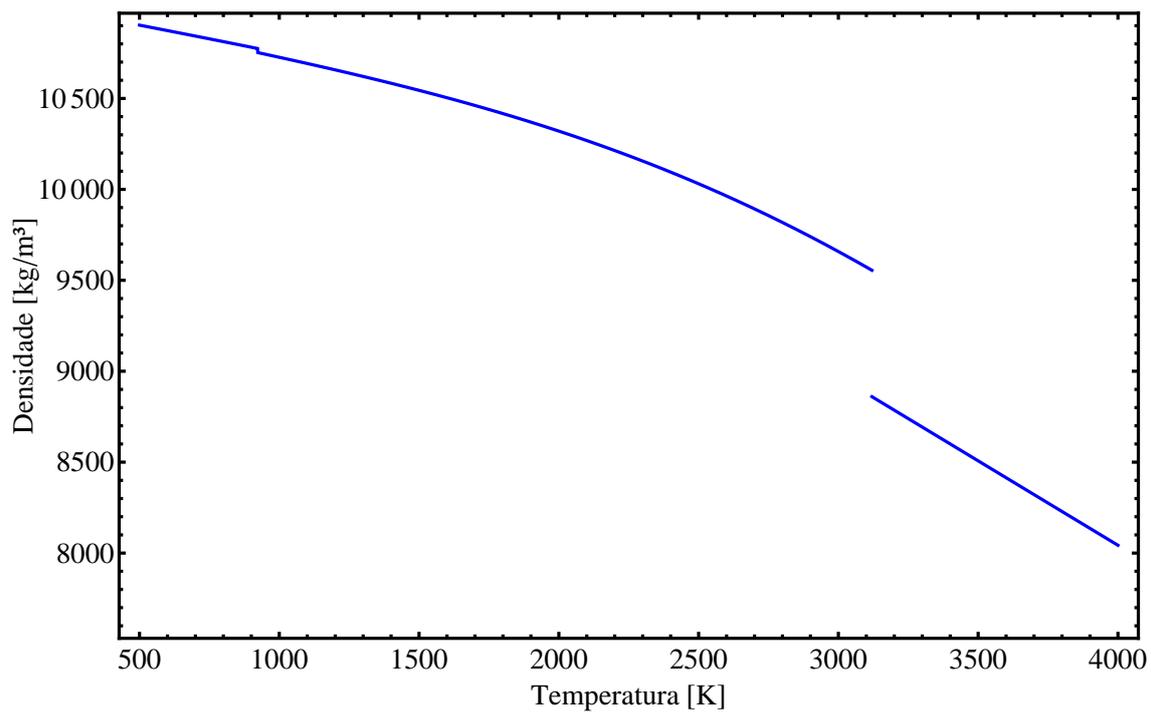


Figura A.4: Densidade da pastilha combustível

## A.2 Revestimento (Zircônio)

### Entalpia [ $kJ/mol$ ]

Fase sólida ( $298,15K < T < 2150K$ ):

Para  $T < 1100K$ :

$$H_{cs}(T) = -7827,595 + 24,1618T + 4,37791(10^{-3})T^2 + 6,9942(10^4)T^{-1}. \quad (A.9)$$

E  $1100K < T < 2150K$ :

$$H_{cs}(T) = -525,539 + 25,6074T + 3,4008(10^{-4})T^2 + 1,9458(10^{-8})T^3 + 2,2843(10^{-10})T^4 + 5,0466(10^4)T^{-1}. \quad (A.10)$$

Fase líquida ( $2150K < T < 4100K$ ):

$$H_{cl}(T) = 10^{-3}(52,389(T - 298,15) - 1,912661(10^{-2})\frac{T^2 - 298,15^2}{2} + 7,5995(10^{-6})\frac{T^3 - 298,15^3}{3} - 6,1042(10^{-10})\frac{T^4 - 298,15^4}{4}). \quad (A.11)$$

Note que  $1mol$  de zircaloy  $\approx 0.091kg$  de zircaloy.

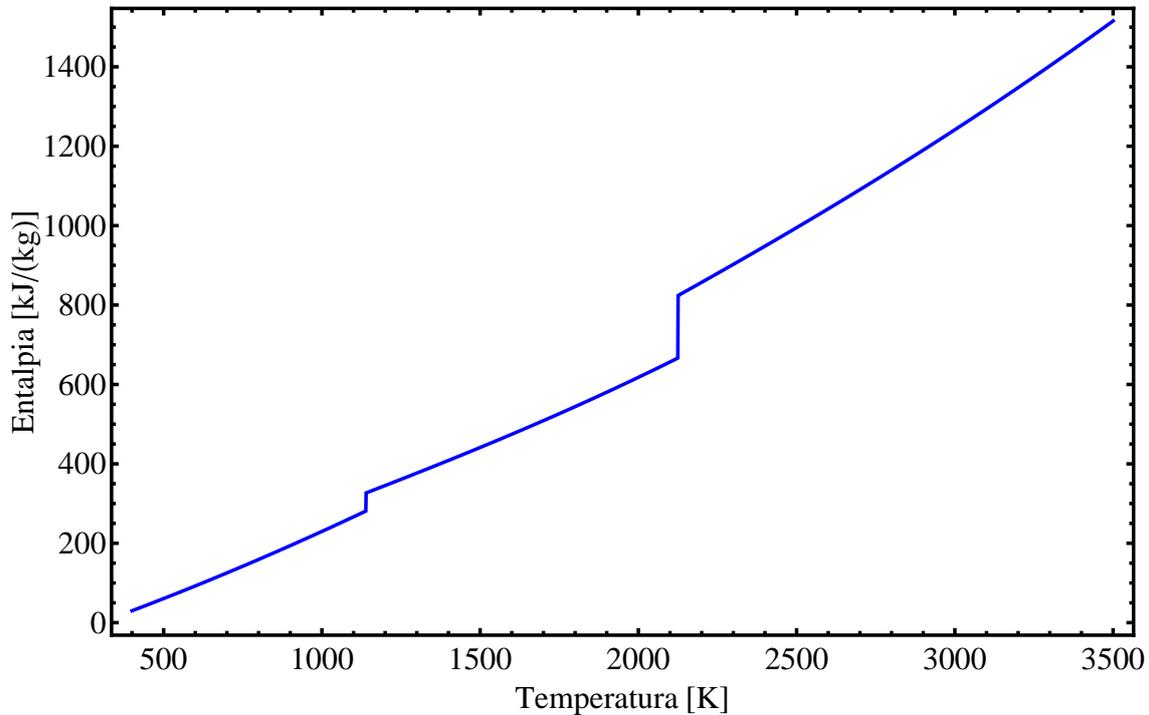


Figura A.5: Entalpia do revestimento de zircônio

## Calor Específico [ $kJ/(kgK)$ ]

Fase sólida ( $273K < T < 2150K$ ):

$$cp_{cs}(T) = \begin{cases} 255,66 + 0,1024T & \text{se } 273K < T < 1100K; \\ 255,66 + 0,1024T + f(T) & \text{se } 1100K < T < 1214K; \\ 597,1 - 0,4088T + 1,565(10^{-4})T^2 + f(T) & \text{se } 1214K < T < 1320K; \\ 597,1 - 0,4088T + 1,565(10^{-4})T^2 & \text{se } 1320K < T < 2150K. \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

onde,

$$f(T) = 1058,4 \exp \left[ \frac{(T - 1213,8)^2}{-719,61} \right].$$

Fase líquida ( $3120K < T < 4500K$ ):

$$cp_{cl}(T) = \frac{1}{0,091} (52,389 - 1,912661(10^{-2})T + 7,5995(10^{-6})T^2 - 6,1042(10^{-10})T^3). \quad (\text{A.13})$$

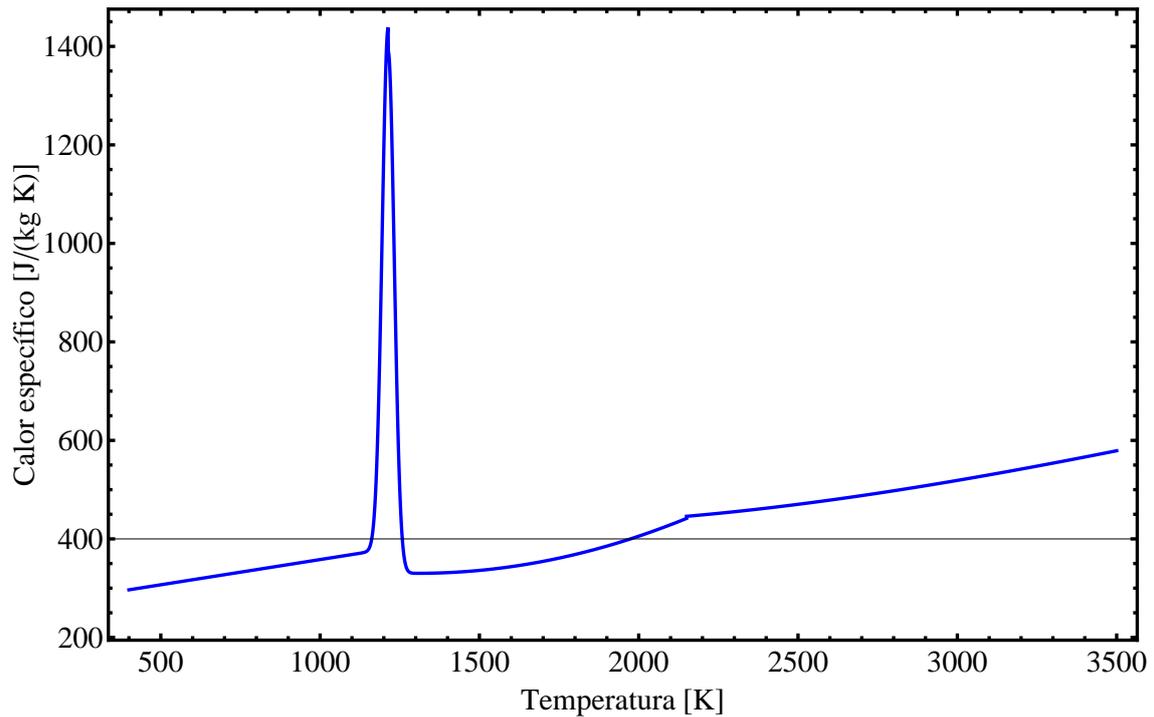


Figura A.6: Calor específico do revestimento de zircônio

## Condutividade Térmica [ $W/(mK)$ ]

Fase sólida ( $300K < T < 2150K$ ):

$$k_{cs}(T) = 12,767 - 5,4348(10^{-4})T + 8,9818(10^{-6})T^2. \quad (A.14)$$

Fase líquida ( $T > 2150K$ ):

$$k_{cl}(T) = 36,5. \quad (A.15)$$

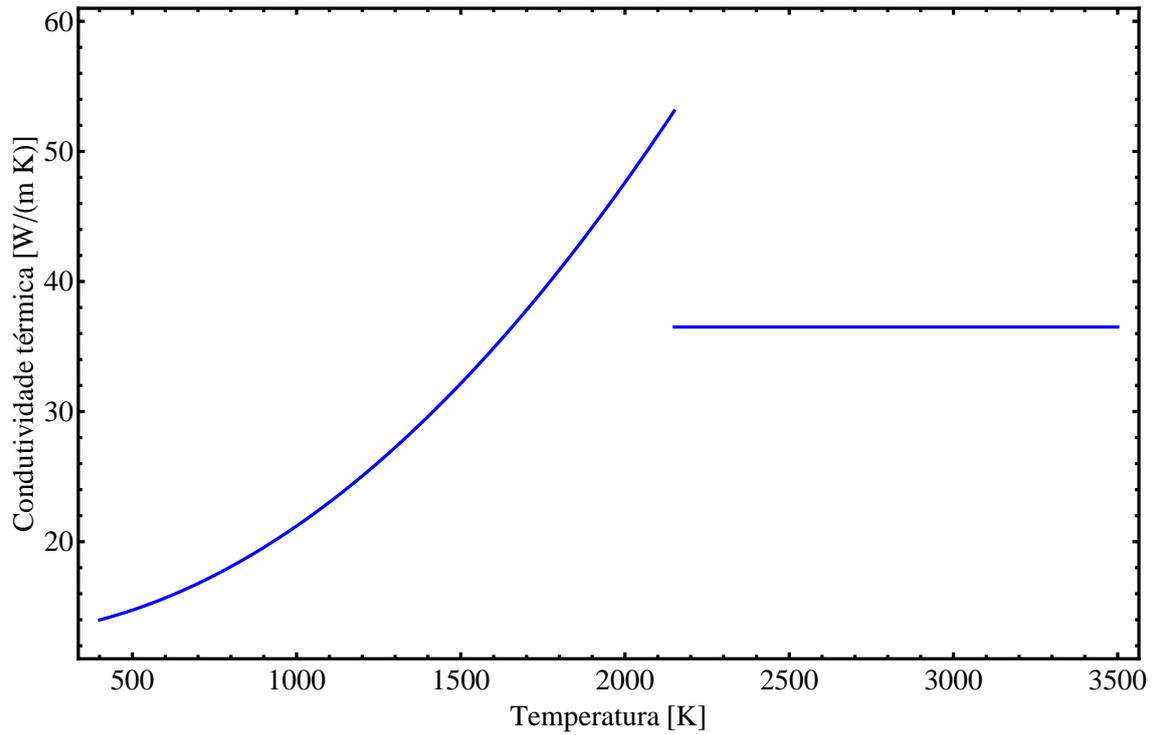


Figura A.7: Condutividade térmica do revestimento de zircônio

## Densidade [ $kg/(m^3)$ ]

Fase sólida ( $273K < T < 2150K$ ):

$$\rho_{cs}(T) = \begin{cases} 6595,2 - 0,1477T & \text{se } 273K < T < 1100K; \\ 6690 - 0,1855T & \text{se } 1100K < T < 2150K. \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

Fase líquida ( $2150K < T < 4100K$ ):

$$\rho_{cl}(T) = 6844,51 - 0,609898T + 2,05008(10^{-4})T^2 - 4,47829(10^{-8})T^3 + 3,26469(10^{-12})T^4. \quad (\text{A.17})$$

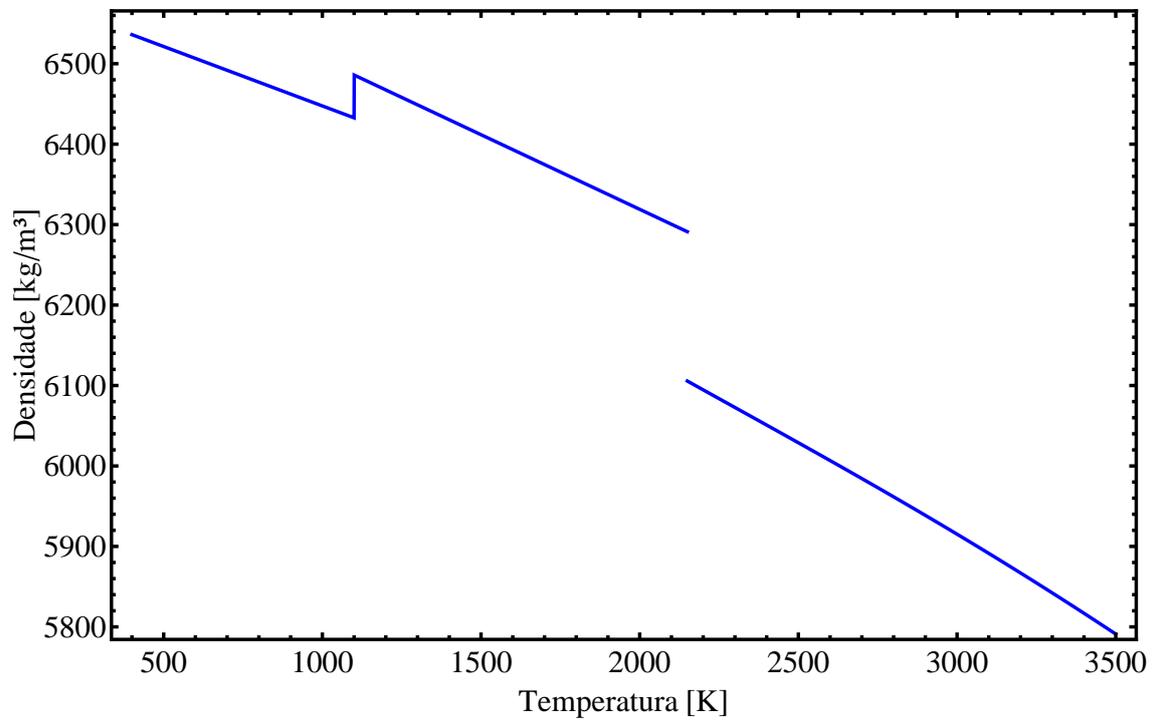


Figura A.8: Densidade do revestimento de zircônio

# Referências Bibliográficas

- Ayasoufi, A., Keith, T. G., e Rahmani, R. K. (2004). Stefan number-insensitive numerical simulation of the enthalpy method for stefan problems using the space-time conservation element and solution element method. *ASME Heat Transfer/Fluids Engineering Summer Conference*.
- Bell, G. (1978). A refinement of the heat balance integral method applied to a melting problem. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 21:1357–1362.
- Caldwell, J. e Kwan, Y. Y. (2004). Numerical methods for one-dimensional stefan problems. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 20:535–545.
- Carr, J., Wagner, R., e Vargo, R. (Acessado em 22/03/2013). Fuel assemblies in nuclear reactors. <http://me1065.wikidot.com/fuel-assemblies-in-nuclear-reactors>.
- Chen, W., Ishii, M., e Grolmes, M. (1976). Simple heat conduction model with phase change for reactor fuel pin. *Nuclear Science and Engineering*, 60:452–460.
- Clapeyron, B. P. E. e Lame, G. (1831). Memoire sur la solidification par refroidissement d'un globe solid. *Ann. Phys. Chem.*, 47:250–260.
- CNEN (1997). Segurança na operação de usinas nucleoeletricas. *Instalações nucleares*, 1.26:7.
- Corrêa, E. J. e Cotta, R. M. (1998). Enhanced lumped-diferentia formulations of diffusion problems. *Applied Mathematical Modelling*, 22:137–152.
- Cotta, R. M., Ozisik, M. N., e Mennig, J. (1990). Coupled Integral Equation Approach for Solving Phase-change Problems in a Finite Slab. *Journal of the Franklin Institute*, 327:225–234.

- Crepeau, J. e Siahpush, A. (2008). Approximate solutions to the stefan problem with internal heat generation. *Heat and Mass Transfer*, 44(7):787–794.
- Crepeau, J. C., Siahpush, A., e Spotten, B. (2009). On the stefan problem with volumetric energy generation. *Heat and Mass Transfer*, 46(1):119–128.
- Çengel, Y. A. (2009). *Transferência de Calor e Massa*. McGraw-Hill, São Paulo, 3ª edição.
- Fink, J. K. (2000). Thermophysical properties of uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 279:1–18.
- Ghiaasiaan, S., Wassel, A., e Farr, J. (1985). Heat conduction in nuclear fuel rods. *Nuclear Engineering and Design*, 85:89–96.
- Gray, T. W. (Acessado em 01/04/2013). Zirconium: Nuclear fuel rod tubes. <http://www.theodoregray.com/periodictable/Samples/040.14/index.s12.html>.
- Hermite, M. (1878). Sur la formule d'interpolation de lagrange. *J.Crelle*, 84.
- Hu, H. e Argyropoulos, S. a. (1996). Mathematical modelling of solidification and melting: a review. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 4(4):371–396.
- IAEA (2006). *Thermophysical properties database of materials for light water reactors and heavy water reactors*. International Atomic Energy Agency, Vienna.
- IAEA (2007). *Computational analysis of the behaviour of nuclear fuel under steady state, transient and accident conditions december*. International Atomic Energy Agency, Vienna.
- Jafari, H. (2008). Application of Variational Iteration Method for Stefan Problem. *Applied Mathematical Sciences*, 2(60):3001–3004.
- Jiji, L. M. e Gaye, S. (2006). Analysis of solidification and melting of PCM with energy generation. *Applied Thermal Engineering*, 26(5-6):568–575.

- Krabbenhoft, K., Damkilde, L., e Nazem, M. (2007). An implicit mixed enthalpy-temperature method for phase-change problems. *Heat Mass Transfer*, 43:233–241.
- Lobo, R. M. (2002). *Análise microestrutural do Zircaloy-4 submetido a diferentes tratamentos termo-mecânicos*. IPEN-Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Dissertação de Mestrado.
- Mennig, J. e Ozisik, M. N. (1985). Coupled Integral Equation Approach for Solving Melting or Solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 28:1481–1485.
- Myers, T. G. (2010). Optimal exponent heat balance and refined integral methods applied to stefan problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53:1119–1127.
- Özisik, M. N. (1993). *Heat Conduction*. John Wiley e Sons, Inc., New York, 2th edição.
- Pham, Q. T. (1985). A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change. 28(11):2079–2084.
- Regis, C. R., Cotta, R. M., e Su, J. (2000). Improved lumped analysis of transient heat conduction in a nuclear fuel rod. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 27(3):357–366.
- Sahin, A. Z. e Dincer, I. (2000). Analytical modelling of transient phase-change problems. *International Journal of Energy Research*, (October 1999):1029–1039.
- Souza, M. T. (Acessado em 22/03/2013). Usina nuclear. <http://www.if.ufrgs.br/tex/fis01043/20041/Moacir/usina.html>.
- Stefan, J. (1891). Über die theorie der eisbildung, insbesondere Über die eisbildung im polarmeere. *Ann. Phys. Chem.*, 42:269–286.
- Su, G., Tan, Z., e Su, J. (2009). Improved lumped models for transient heat conduction in a slab with temperature-dependent thermal conductivity. *Applied Mathematical Modelling*, 33(1):274–283.

- Su, J. (2001). Improved lumped models for asymmetric cooling of a long slab by heat convection. *Heat Mass Transfer*, 28(7):973–983.
- Su, J. e Cotta, R. M. (2001). Improved lumped parameter formulation for simplified LWR thermohydraulic analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 28(10):1019–1031.
- Tarasuk, J. D., Castle, G. S. P., Sparrow, E. M., Gregg, J. L., e Carlson, K. (1987). A heat balance integral method based on an enthalpy formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30:604–607.
- Todreas, N. E. e Kazimi, M. S. (1990). *Nuclear Systems I - Thermal Hydraulic Fundamentals*. Hemisphere Publishing Corporation, Massachusetts.
- Ulmer-Scholle, D. S. (Acessado em 01/04/2013). The basics of nuclear energy: How is nuclear power produced? <http://geoinfo.nmt.edu/resources/uranium/power.html>.
- Voller, V. R. (1985). Implicit finite-difference solutions of the enthalpy formulation of stefan problems. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 5:201–214.
- Voller, V. R. e Cross, M. (1981). Accurate solutions of of moving boundary problems using the enthalpy method. *Heat Mass Transfer*, 5:545–556.
- Wang, B.-x. e Ma, J. (1994). Freezing of water in a slab with boundary conditions of the third kind. *Journal of Thermal Science*, 3(1):15–22.
- York, N. e Badfalo, B. (1968). An Analytic Solution of Heat Conduction Problem With Phase Change. *Chinese Journal of Physics*, 6(1):29–38.
- Yu, Z.-T., Fan, L.-W., Hu, Y.-C., e Cen, K.-F. (2010). Perturbation solution to heat conduction in melting or solidification with heat generation. *Heat and Mass Transfer*, 46(4):479–483.
- Zalba, B., Marín, J., Cabeza, L., e Mehling, H. (2003). Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications. *Applied Thermal Engineering*, 23:251–283.

Zhaochun, W., Jianping, L., e Jingmei, F. (2011). A novel algorithm for solving the classical Stefan problem. *Thermal Science*, 15:39–44.

Zubair, S. M. e Chaudhry, M. A. (1994). Exact solutions of solid-liquid phase-change heat transfer when subjected to convective boundary conditions. *Warme-und Stoffubertragung*, 30:77–81.