



UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
CENTRO TECNOLÓGICO  
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

**DISSERTAÇÃO DE  
MESTRADO**

**“MODELAMENTO MATEMÁTICO  
E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL  
EM LIBERAÇÕES ACIDENTAIS DE  
HEXAFLUORETO DE URÂNIO”**

UNIVERSIDADE  
FEDERAL  
FLUMINENSE

**ALUNO:**  
Josué Clementino de Medeiros.

**ORIENTADOR:**  
Prof. D. Sc. Gláucio Soares da Fonseca

**COORIENTADOR:**  
Prof. Ph. D. José Adilson de Castro

JOSUÉ CLEMENTINO DE MEDEIROS

**“MODELAMENTO MATEMÁTICO E SIMULAÇÃO  
COMPUTACIONAL EM LIBERAÇÕES ACIDENTAIS  
DE HEXAFLUORETO DE URÂNIO”**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial a obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica.

**Orientador:**

Prof. D. Sc. Gláucio Soares da Fonseca-UFF

Volta Redonda

2019

M488

Medeiros, Josué Clementino de, - ,  
Modelamento matemático e simulação computacional em  
liberações acidentais de hexafluoreto de urânio / Josué Clementino  
de Medeiros. – Volta Redonda, RJ: 2019.

189 f. : il. color.

Orientador: Prof<sup>o</sup>. Dr<sup>o</sup>. Gláucio Soares da Fonseca.

Co-orientador: Prof<sup>o</sup>. Dr<sup>o</sup>. José Adilson de Castro.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal Fluminense,  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica.

1. Modelamento matemático 2. Ciclo do combustível nuclear  
3. Análise de risco I. Título II. Fonseca, Gláucio Soares da  
III. Castro, José Adilson de IV. Produção intelectual

CDD 621.4838

Bibliotecária responsável: Roberta Campos - CRB7/6067

**JOSUÉ CLEMENTINO DE MEDEIROS**

**“MODELAMENTO MATEMÁTICO E SIMULAÇÃO  
COMPUTACIONAL EM LIBERAÇÕES ACIDENTAIS  
DE HEXAFLUORETO DE URÂNIO”**

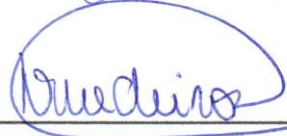
Aprovada em 12 de novembro de 2019

**Banca Examinadora:**



---

Prof. Dr. Gláucio Soares da Fonseca – Presidente da Banca  
EEIMVR – UFF – Universidade Federal Fluminense



---

Prof. Dr. Neil de Medeiros.

EEIMVR – UFF – Universidade Federal Fluminense



---

Dr. Gullit Diego Cardoso dos Anjos

INB – Indústrias Nucleares do Brasil S.A.

Volta Redonda

2019

As flores mais lindas do meu jardim, minhas filhas Manuela e Gabriela Baêta.

À mulher que desejo passar o resto da vida ao seu lado, minha esposa Daniele Baêta.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pelo dom da vida e pelas oportunidades de desenvolvimento e aprendizado que tem me concedido ao longo desta trajetória.

À toda minha família por todo apoio, incentivo e torcida necessária para alcançar meus objetivos, desde os tempos de graduação. Em especial aos meus pais José e Maria, símbolo de humildade e zelo por mim.

Ao meu irmão Leonardo pela pessoa especial que é e o que representa em minha vida.

A todos que colaboraram de alguma forma para o andamento desta dissertação, em especial aos amigos que conheci neste programa Duílio, Fabiana, Fernanda, Léo, Mara e Matheus.

Ao professor Gláucio pelo apoio nesta defesa e preocupação pelo correto andamento de todos o processo e ao professor José Adilson pela paciência e pelas inúmeras mensagens trocadas do Japão ao fim desta dissertação, com incentivo e troca de ideias ao meu trabalho. Tenho por eles admiração em promover o conhecimento científico e me mostrar que sempre podemos aprender.

Ao PPGEM-UFF que me permitiu a realização deste sonho que muitos não têm a oportunidade de alcançar.

A INB pelo apoio e oportunidade de qualificação profissional junto ao PPGEM-UFF, em especial aos meus gestores pelo apoio.

Ao amor da minha vida e esposa Daniele de Azevedo Baêta, sempre companheira e incentivadora da conclusão dos meus estudos e concretização dos meus projetos pessoais e pelo apoio e cobranças em todos os momentos durante esta caminhada.

## RESUMO

As liberações acidentais de Hexafluoreto de Urânio ( $UF_6$ ) tem sido alvo de estudo no modelamento matemático dos fenômenos envolvidos, a fim de elucidar de forma mais realista as interpretações em instalações do Ciclo do Combustível Nuclear e auxiliando a Análise de Risco e Acidentes. O modelo desenvolvido neste trabalho é transiente em 3D, acopla as equações de quantidade de movimento, balanço de massa e energia, e considera os efeitos de turbulência através do modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  modificado. Tem como objetivo específico simular a ruptura catastrófica de um cilindro do tipo 30B, com 2000kg de  $UF_6$ , no estado líquido e buscar o entendimento dos mecanismos de liberação e dispersão de  $UF_6$ , desta forma as equações são resolvidas numericamente pelo método de volumes finitos implementado em linguagem Fortran 90/95. Os cenários estipulados neste trabalho foram simulados considerando as adaptações necessárias ao ajuste dos parâmetros desta liberação em condições operacionais Temperatura (80 e 93°C), vazão de exaustão (2,9 e 5,7 m<sup>3</sup>/s), taxa de liberação de  $UF_6$  (3,3, 3,6, 16,3 e 18,1 kg/s) e tempo de liberação (1 e 5 minutos) Os resultados obtidos foram satisfatórios para os cenários simulados quando comparados aos dados de outros modelos analíticos propostos em mesmas condições de temperatura, vazão de liberação, taxa de exaustão, tempo de liberação e de ocorrência do evento para explicação de fenômenos, principalmente sobre os efeitos de turbulência em liberação de  $UF_6$  e dispersão do mesmo e de particulados ( $UO_2F_2$ ) e HF. Através do estudo destes cenários pelo modelo MPHMTTP, no qual foi avaliado a influência do acréscimo da temperatura do material, que indica uma correlação direta com a pressão e taxa de liberação de  $UF_6$ , sendo explícita em relação a maior quantidade de material disperso no ambiente. Em contra partida, ao avaliar a influência do aumento na vazão do sistema de exaustão e sua relação com o tempo de liberação demonstrou comportamentos distintos do escoamento gasoso e do material particulado. Neste sentido, o modelo computacional apresentou confiabilidade frente aos perfis esperados para vetor velocidade e % de umidade e adicionalmente demonstrou o comportamento detalhado numa visualização 3D destes parâmetros no interior dos prédios, informação até então não disponibilizada pelos métodos analíticos.

**Palavras-chave:** Modelamento Matemático. Ciclo do Combustível Nuclear. Análise de Risco. Método de Volumes Finitos. Hexafluoreto de Urânio. Liberações Acidentais.

## ABSTRACT

Accidental releases of Uranium Hexafluoride ( $UF_6$ ) have been the subject of study in the mathematical modeling of the phenomena involved, in order to more realistically elucidate the interpretations in installations of the Nuclear Fuel Cycle and assisting the Analysis of Risk and Accidents. The model developed in this work is transient in 3D, coupled the equations of momentum, mass balance and energy, and considers the effects of turbulence through the modified  $\kappa$ - $\epsilon$  model. Its specific objective is to simulate the catastrophic rupture of a type 30B cylinder, with 2000 kg of  $UF_6$ , in liquid state and to seek an understanding of the  $UF_6$  release and dispersion mechanisms, thus the equations are solved numerically by the finite volume method implemented in Fortran 90/95 language. The scenarios stipulated in this work were simulated considering the necessary adaptations to adjust the parameters of this release in operational conditions Temperature (80 and 93°C), exhaust flow (2,9 and 5,7  $m^3/s$ ),  $UF_6$  release rate (3,3, 3,6, 16,3 and 18,1 kg/s) and release time (1 and 5 minutes) The results obtained were satisfactory for the simulated scenarios when compared to data from other analytical models proposed under the same conditions for explanation of phenomena, mainly about the effects of turbulence in  $UF_6$  release and dispersion of  $UF_6$  and particulates ( $UO_2F_2$ ) and HF. Through the study of these scenarios using the MPHMTTP model, in which the influence of the increase in the temperature of the material was evaluated, which indicates a direct correlation with the pressure and release rate of  $UF_6$ , being explicit in relation to the greater amount of material dispersed in the environment. On the other hand, when evaluating the influence of the increase in the flow of the exhaust system and its relationship with the release time, it demonstrated different behaviors of the gas flow and of the particulate material. In this sense, the computational model showed reliability compared to the expected profiles for velocity and humidity% vector and additionally demonstrated the detailed behavior in a 3D visualization of these parameters inside the buildings, as well as the%  $UF_6$  volume and  $UO_2F_2$  and HF concentration, information not made available by analytical methods.

**Keywords:** Mathematical Modeling. Nuclear Fuel Cycle. Risk Analysis. Finite Volume Method. Uranium Hexafluoride. Accidental Release.



## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Tipos de Cilindros usados no Ciclo do Combustível Nuclear .....	35
Tabela 2– Base de projeto do sistema de amostragem e recomposição .....	36
Tabela 3 – Propriedades do UF <sub>6</sub> .....	41
Tabela 4 - Valores de Referência Relativos aos Efeitos Nocivos do HF .....	45
Tabela 5 - Supostos Efeitos do HF na Saúde .....	45
Tabela 6– Toxicidade do UF <sub>6</sub> .....	46
Tabela 7- Supostos Efeitos do UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> na Saúde .....	46
Tabela 8– Exemplos de Termo Fonte Químico.....	55
Tabela 9– Definição de modelos de parâmetros .....	60
Tabela 10: Equações do Modelo de Turbulência .....	83
Tabela 11: Constantes do modelo k-ε .....	84
Tabela 12: Resumo da estequiometria da hidrólise de UF <sub>6</sub> .....	93
Tabela 13: Resumo da estequiometria da hidrólise de UF <sub>6</sub> .....	95
Tabela 14: Formalização dos coeficientes cinéticos .....	96
Tabela 15: Formalização constante cinética da hidrólise de UF <sub>6</sub> .....	96
Tabela 16: Concentração de aerossóis medidos após liberação de UF <sub>6</sub> .....	97
Tabela 17: Fases e espécies químicas consideradas no modelo .....	99
Tabela 18: Reações Químicas Consideradas no Modelo .....	100
Tabela 19: Entalpia Padrão de Formação.....	100
Tabela 20– Dados do prédio de processo.....	103
Tabela 21– Condições de contorno e dados iniciais para simulação.....	103
Tabela 22- Cenários de Eventos Postulados para o Ciclo do combustível nuclear (CCN) .....	104
Tabela 23- condições de operação no interior do prédio de processo. ....	108
Tabela 24- - Dependência da Fração, f, na Temperatura Inicial de Armazenamento. ....	109
Tabela 25- - Características de termos fontes seguidos de liberação de UF <sub>6</sub> .....	111
Tabela 26: Casos Simulados e parâmetros operacionais.....	113
Tabela 27: Casos Simulados e concentrações de U e HF.....	132

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema do Ciclo do Combustível Nuclear (CCN) .....	25
Figura 2 – Ciclo Aberto do Combustível Nuclear.....	26
Figura 3 – Ciclo Fechado do Combustível Nuclear .....	26
Figura 4 - Ciclo do Combustível Nuclear no Brasil.....	27
Figura 5 - Reconversão do UF <sub>6</sub> em Pó de UO <sub>2</sub> .....	29
Figura 6 - Produção de Pastilhas de UO <sub>2</sub> .....	29
Figura 7 - Esquema da fabricação de um Elemento Combustível.....	30
Figura 8 - Esquema de funcionamento de geração de energia elétrica termonuclear .....	31
Figura 9 - Esquemático de Ultracentrífuga .....	33
Figura 10 - Esquemático dos Sistemas de UF <sub>6</sub> .....	34
Figura 11– Sistema de Amostragem e Recomposição Isotópica .....	37
Figura 12– Diagrama de fases do UF <sub>6</sub> .....	40
Figura 13– Imagem MEV do material produzido de UF <sub>6</sub> (0,30mmol) hidrolisado sobre 19% (0,24mmol) de umidade em fita de carbono.....	43
Figura 14– Imagem MEV do material produzido de UF <sub>6</sub> (3,8mmol) hidrolisado sobre 19% (0,24mmol) de umidade em fita de carbono.....	43
Figura 15– Diagrama de possíveis vias de liberação de UF <sub>6</sub> .....	50
Figura 16 – Representação das Vias de Liberação de UF <sub>6</sub> .....	51
Figura 17 – Diagrama de blocos simplificado de diferentes procedimentos de segurança e risco .....	52
Figura 18 – Esboço esquemático do modelamento matemático de um processo físico.....	66
Figura 19 – Definição de Termo Fonte (TF).....	70
Figura 20 - Perfil de Velocidade junto a uma superfície sólida .....	76
Figura 21: Relação entre concentrações iniciais de UF <sub>6</sub> e H <sub>2</sub> O .....	94
Figura 22: Gráfico das medidas de aerossóis seguidas de liberação atmosférica de UF <sub>6</sub> .....	98
Figura 23: – Diagrama esquemático dos diferentes estágios de mecanismos de crescimento de partículas de UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> .....	99
Figura 24 – Célula computacional e volume de controle finito para integrações das equações de transporte.....	102
Figura 25: – Domínio Computacional considerado no modelo.....	106
Figura 26: – Concentração de Urânio e HF do Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 16,3 kg/s, t = 1 minuto ) .....	116
Figura 27: – Concentração de Urânio e HF do Caso 2 (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 16,3 kg/s, t = 1 minuto ) .....	116
Figura 28: – Concentração de Urânio e HF do Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 16,3 kg/s, t = 1 minuto ), código MHPMTP.....	117
Figura 29: – Concentração de Urânio e HF do Caso 2 (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 16,3 kg/s, t = 1 minuto ), código MHPMTP.....	118
Figura 30: – Concentração de Urânio e HF do Caso 3, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minuto ) .....	120
Figura 31: – Concentração de Urânio e HF do Caso 4, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minuto ) .....	120
Figura 32: – Concentração de Urânio e HF do Caso 3, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP.....	121

Figura 33: – Concentração de Urânio e HF do Caso 4, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP .....	122
Figura 34: – Concentração de Urânio e HF do Caso 5, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 18,1 kg/s, t = 1 minuto ) .....	123
Figura 35: – Concentração de Urânio e HF do Caso 6, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 18,1 kg/s, t = 1 minuto ) .....	124
Figura 36: – Concentração de Urânio e HF do Caso 5, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 18,1 kg/s, t = 1 minuto ), código MHPMTP.....	125
Figura 37: – Concentração de Urânio e HF do Caso 6, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 18,1 kg/s, t = 1 minuto ), código MHPMTP.....	126
Figura 38: – Concentração de Urânio e HF do Caso 7, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,6 kg/s, t = 5 minutos ).....	127
Figura 39: – Concentração de Urânio e HF do Caso 8, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,6 kg/s, t = 5 minutos ).....	127
Figura 40: – Concentração de Urânio e HF do Caso 7, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,6 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP .....	128
Figura 41: – Concentração de Urânio e HF do Caso 8, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação de UF <sub>6</sub> = 3,6 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP .....	129
Figura 42: – Massa de UF <sub>6</sub> e HF liberada em função de (t = 1 minuto) e (T = 80°C), para tempo total de 10 minutos de liberação.....	130
Figura 43.a: – Massa de UF <sub>6</sub> e HF liberada em função de (t = 5 minutos) e (T = 80°C), para tempo total de 10 minutos de liberação.....	130
Figura 44 – Massa de UF <sub>6</sub> e HF liberada em função de (t = 1 minuto) e (T = 93°C), para tempo total de 10 minutos de liberação.....	131
Figura 45 – Massa de UF <sub>6</sub> e HF liberada em função de (t = 5 minutos) e (T = 93°C), para tempo total de 10 minutos de liberação.....	131
Figura 46 – Urânio Inalado (mg) em função de (t = 1 minuto) e (T = 80°C e 93°C). .....	133
Figura 47 - Carga tóxica de HF no prédio em função de (t = 1 minuto) e (T = 80°C e 93°C). 133	
Figura 48 – Urânio Inalado (mg) em função de (t = 5 minutos) e (T = 80°C e 93°C).....	134
Figura 49 - Carga tóxica de HF no prédio em função de (t = 5 minutos) e (T = 80°C e 93°C).134	
Figura 50 - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo (t = 1s).....	135
Figura 51 - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo (t = 10s).....	135
Figura 52 - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo (t = 30s).....	136
Figura 53 - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo (t = 120s).....	136
Figura 54 - Simulação da velocidade em relação ao tempo (t=1s).....	137
Figura 55 - Simulação da velocidade em relação ao tempo (t=1s).....	137
Figura 56 – Simulação da dispersão de UF <sub>6</sub> em relação a t = 1 s., Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP.....	139
Figura 57 – Simulação da dispersão de UF <sub>6</sub> em relação a t = 10 s., Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP.....	139
Figura 58 – Simulação da dispersão de UF <sub>6</sub> em relação a t = 30 s., Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP.....	140
Figura 59 – Simulação da dispersão de UF <sub>6</sub> em relação a t = 60 s., Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP.....	140
Figura 60 – Simulação da dispersão de UF <sub>6</sub> em relação a t = 1s, Caso 2, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP.....	141
Figura 61 – Simulação da dispersão de UF <sub>6</sub> em relação a t = 10s, Caso 2, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m <sup>3</sup> /s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP.....	142





Figura 110 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 1s$ , Caso 5, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	174
Figura 111 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 10s$ , Caso 5, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	174
Figura 112 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 60s$ , Caso 5, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	175
Figura 113 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 1s$ , Caso 6, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	175
Figura 114 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 10s$ , Caso 6, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	176
Figura 115 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 60s$ , Caso 6, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	176
Figura 116 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 1s$ , Caso 7, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	177
Figura 117 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 10s$ , Caso 7, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	177
Figura 118 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 60s$ , Caso 7, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	178
Figura 119 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 1s$ , Caso 8, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	179
Figura 120 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 10s$ , Caso 8, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	179
Figura 121 - Simulação da dispersão de HF em relação a $t = 60s$ , Caso 8, ( $T = 93^{\circ}C$ , $P = 3,5 \text{ atm}$ , $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.....	179

## LISTA DE ABREVIATURA, SIGLAS E SÍMBOLOS.

<b>AIEA</b>	Agência Internacional de Energia Atômica	
<b>ASTM</b>	American Society for Test and Materials	
<b>CCN</b>	Ciclo do Combustível Nuclear	
<b>CNEN</b>	Comissão Nacional de Energia Nuclear	
<b>HF</b>	Fluoreto de Hidrogênio	
<b>IBAMA</b>	Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis	
<b>INB</b>	Indústrias Nucleares do Brasil	
<b>MEV</b>	Microscopia Eletrônica de Varredura	
<b>PWR</b>	Pressurized Water Reactor	
<b>UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub></b>	Fluoreto de Uranila	
<b>UF<sub>6</sub></b>	Hexafluoreto de Urânio	
<b>VAC</b>	Ventilação e Ar Condicionado	
<i>i e j</i>	Representam as fases a serem consideradas: gás e sólido	
<i>ave</i>	Média	
<i>A</i>	Constante da Lei de Parede	
$\alpha_i$	Fração volumétrica da fase <i>i</i>	
$\beta_k$	Parâmetros cinéticos da fase <i>i</i>	
$C_{p,i}$	Calor Específico da espécie química	[J/kg.K]
$C_i$	Concentração do componente	[mol m <sup>-1</sup> ]
$C_a$	Coefficiente de atrito	[μm <sup>-1,6</sup> h <sup>-1</sup> ]
$C_s$	Concentração de íons sulfato	[ppm]
$D_{ave}$	Diâmetro médio da partícula	[μm]
$D_0$	Diâmetro inicial da partícula	[μm]
$D_k^i$	Coefficiente de difusão da espécie <i>k</i> na fase <i>i</i>	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon$	Dissipação da Energia Turbulenta	[m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup> ]
$\delta_i$	Fração Mássica das espécies químicas	[kg/kg]
$E_{ii}$	Energia específica	[J]
$F_i^j$	Interação de <i>momentum</i> entre as fases <i>i e j</i>	[kg.m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> ]

$F$	Vazão de $\text{UO}_3$ produzido	$[\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}]$
$h$	Coefficiente de transferência de calor	$[\text{J m}^{-2}\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}]$
$k_i$	Constante cinética de reação $i$	$[\text{s}^{-1}]$
$k$	Energia Cinética Turbulenta	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}]$
$\mu$	Viscosidade do gás	$[\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}]$
$\mu_{eff}$	Viscosidade efetiva da fase $i$	$[\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}]$
$\mu_T$	Viscosidade turbulenta da fase $i$	$[\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}]$
$\phi_i$	Espécie química da fase	
$\phi_{i,k}$	fração mássica da espécie $k$ fase $i$	
$P_i$	Pressão da fase $i$	$[\text{Pa}]$
$Pr$	Número de Prandtl	
$Pr_T$	Número de Prandtl Turbulento	
$R_j^i$	Massas geradas devido às reações químicas	$[\text{kg}]$
$Re_i$	Número de Reynolds	
$\rho_i$	Densidade da espécie	$[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$
$Sh_i$	Número de Sherwood	
$t$	Tempo	$[\text{s}]$
$T_i$	Temperatura da espécie ou fase	$[\text{K}]$
$T$	Temperatura de desnitração no interior do leito	$[\text{K}]$
$u_j$	Componentes da velocidade	$[\text{m s}^{-1}]$
$\vec{U}_i$	Vetor velocidade da fase $i$	$[\text{m s}^{-1}]$
$\chi'$	Taxa da reação	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$
$W$	Massa total de $\text{UO}_3$ no leito	$[\text{kg}]$
$\Delta H_i$	Entalpia da reação $i$	$[\text{J kg}^{-1}]$
$\Delta H_f^{298}$	Entalpia de formação	$[\text{J kg}^{-1}]$



## SUMÁRIO

RESUMO .....	vii
ABSTRACT .....	viii
LISTA DE TABELAS.....	ix
LISTA DE FIGURAS.....	x
LISTA DE ABREVIATURA, SIGLAS E SÍMBOLOS.....	xv
<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	20
<b>2. OBJETIVOS</b> .....	23
<b>3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	24
3.1. CICLO DO COMBUSTÍVEL NUCLEAR.....	25
3.1.1. Descrição da FCN-Enriquecimento.....	32
3.1.1.1. Cascatas de Ultracentrífugas .....	32
3.1.1.2. Sistemas de UF <sub>6</sub> .....	33
3.1.1.2.1. Sistema de Amostragem e Recomposição Isotópica.....	36
3.1.1.2.2. Etapa de Homogeneização .....	37
3.1.1.2.3. Etapa de Amostragem Líquida.....	37
3.1.1.2.4. Situações Anormais.....	38
3.1.1.3. Sistemas Auxiliares .....	38
3.1.1.3.1. Sistema de Ventilação e Ar Condicionado (VAC).....	38
3.2. CARACTERÍSTICAS DO UF <sub>6</sub> .....	39
3.2.1. Princípios Físico-químicos.....	39
3.2.2. Reação de Hidrólise do UF <sub>6</sub> .....	41
3.2.3. Princípios Físicos Químicos HF e UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> .....	44
3.3. ANÁLISE DE RISCO E DESENVOLVIMENTO DE CENÁRIOS.....	47
3.3.1. Análise Integrada de Segurança ( <i>Integrated Safety Analysis - ISA</i> ).....	48
3.3.2. Cenários de Liberações de UF <sub>6</sub> .....	49
3.3.3. Determinação de Termo Fonte.....	53
3.3.3.1. Estimativa de Liberações de Material Radioativo.....	53
3.3.3.2. Estimativa de Liberações de Material Químico .....	55
3.3.4. LIBERAÇÕES EM INTERIOR DE INSTALAÇÕES .....	56
3.3.5. Transporte dentro de Instalações com Contenção e Confinamento .....	56
3.3.5.1. Definição de Barreiras na Instalação.....	58
3.3.5.2. Definição de Força Motriz para Transporte .....	58

3.3.5.3.	Cálculo de Taxas de Fluxo .....	59
3.3.5.4.	Atenuação de Materiais Aéreos ao Longo do Caminho de Fluxo .....	61
3.3.5.4.1.	Aerossóis .....	61
3.3.5.4.1.1.	Processos De Deposição De Partículas .....	61
3.3.5.4.1.2.	Métodos de Filtração e Mitigação .....	62
3.3.5.4.2.	Produtos Químicos .....	62
3.3.5.4.2.1.	Transportes de Produtos Químicos em Instalações .....	62
3.3.5.4.2.2.	Transporte de UF <sub>6</sub> nas Instalações .....	63
<b>3.4.</b>	<b>AVALIAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS</b> .....	<b>65</b>
3.4.1.	Considerações Gerais de Modelagem Matemática .....	65
3.4.2.	Aplicação à Análise de Consequências para Segurança Industrial .....	65
3.4.3.	Modelos Matemáticos Simplificados para Termos Fontes .....	67
3.4.4.	Modelos de Turbulência k-Épsilon .....	73
3.4.5.	Lei de Parede .....	74
<b>4.</b>	<b>METODOLOGIA</b> .....	<b>77</b>
4.1.	Modelos utilizados no Estudo .....	77
4.1.1.	Modelamento das Equações de Transporte .....	79
4.1.2.	Modelo de Turbulência .....	82
4.1.3.	Lei de Parede .....	86
4.1.4.	Modelo Cinético .....	90
4.1.5.	Modelo de formação de aerossóis .....	98
4.1.6.	Fases e reações químicas envolvidas no modelo .....	99
4.1.7.	Método de Solução .....	100
4.1.8.	Condições Iniciais e de contorno para Simulação .....	103
4.1.9.	Cenários postulados .....	104
<b>5.</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	<b>106</b>
5.1.	Domínio Computacional .....	106
5.2.	Resultados de Simulação Analítica .....	107
5.2.1.	Cálculo de vazamento durante <i>Flashing</i> .....	107
5.2.2.	Ajustes no modelo .....	114
5.2.3.	Resultados das analíticos .....	114
5.3.	Resultados da Simulação computacional .....	135
5.3.1.	Resultados da Umidade Computacional .....	135
5.3.2.	Resultados de Velocidade da Simulação Computacional .....	136

5.3.3.	Resultados de Dispersão do UF <sub>6</sub> gasoso .....	138
5.3.4.	Resultados de Dispersão do Fluoreto de uranila .....	152
5.3.5.	Resultados de Dispersão do Fluoreto de Hidrogênio .....	167
<b>6.</b>	<b>CONCLUSÕES</b> .....	<b>179</b>
<b>7.</b>	<b>SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</b> .....	<b>181</b>
<b>8.</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>182</b>

## 1. INTRODUÇÃO

O crescimento da população mundial nas últimas décadas fez aumentar a demanda pelo fornecimento de energia, induzindo de forma significativa a criação de novas formas de geração, entre elas foram destacadas as energias eólica e solar, que ainda estão em fase de implantação e desenvolvimento.

Com a retomada das obras da Usina Nuclear de Angra 3, o governo federal visa diminuir a atual dependência brasileira das fontes hídricas que, segundo o Balanço Energético Nacional (EPE, 2017), respondem atualmente por 68% da geração de energia elétrica interna. Impõe-se, por uma questão de lógica e avaliação estratégica, a busca por fontes de energia independentes da estabilidade da natureza. Para isso, é necessário assegurar-se de base térmica adequada e estável ampliando a participação da geração de energia via térmica na matriz energética nacional.

A energia nuclear vem conquistando mais espaço e atenção a cada dia. Isto acontece devido à necessidade de se utilizar fontes de produção de energia que busquem a diminuição de impactos ambientais, independência dos fatores climáticos e confiabilidade na manutenção do fornecimento. Neste âmbito, a produção de energia através de centrais nucleares aparece em destaque como uma fonte limpa de produção de eletricidade. Ela não libera gases do efeito estufa, exige pequena área para construção da usina, gera pequena quantidade de resíduos e possui independência de fatores climáticos, como por exemplo, ventos e chuvas, como no caso das energias eólicas e hidrelétricas, respectivamente (INB, 2014).

Das sete etapas necessárias para a autonomia da produção de energia nuclear, o Brasil realiza cinco. São elas: i) mineração e beneficiamento do urânio; ii) enriquecimento isotópico do urânio; iii) reconversão e produção de pastilhas; iv) montagem do elemento combustível e v) geração de energia elétrica via usinas nucleares (Angra 1 e 2). Com a recente implantação da fase mais sofisticada do ciclo do combustível nuclear (CCN), a do Enriquecimento Isotópico do urânio, as Indústrias Nucleares do Brasil S.A. (INB) insere o Brasil em um seleto grupo de países que dominam esta tecnologia (ABEN - Associação Brasileira de Energia Nuclear, 2013).

O Brasil tem grande potencialidade nuclear, é o país com a sexta maior reserva de urânio no mundo, e um dos poucos capazes de dominar uma tecnologia tão avançada na produção do combustível nuclear. Atualmente, o combustível nuclear produzido pela INB é responsável pela geração de aproximadamente 31% da energia elétrica consumida no Estado do Rio de Janeiro, 9% na região Sudeste e cerca de 3% em todo o Brasil (EPE, 2017).

Atualmente a INB busca implantar a ampliação da Usina de enriquecimento isotópico de urânio e obter total autonomia desta etapa. Neste quadro de ampliação industrial, todas as etapas de licenciamento ambiental e nuclear concedidas pelos órgãos reguladores, respectivamente, IBAMA (Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis) e CNEN (Comissão Nacional de Energia Nuclear) são alvos de avaliação a respeito dos seguintes itens: i) critérios básicos de projeto, existentes para todas as fases da execução do projeto, ii) análise de risco segurança e, iii) em caso de acidentes, das medidas mitigadoras a serem adotadas. Qualquer equívoco na execução do projeto implicará em custo e complicações na produção, assim como na renovação das licenças necessárias à operação (INB, 2019).

Como se trata de tecnologia desenvolvida recentemente pelo Brasil, ainda existem muitos desafios, do ponto de vista técnico, tornando-se valioso o desenvolvimento de modelos matemáticos que possam representar os principais mecanismos de reações e fenômenos físico-químicos envolvidos. Segundo (Rodrigues, et al., 2015) dentre as vantagens da aplicação dos modelos computacionais, em apoio ao desenvolvimento experimental, destaca-se o baixo custo frente ao experimento físico; a rápida velocidade de resposta, fornecendo simulações com diferentes geometrias e dimensões; informação mais completa que outros métodos experimentais e a facilidade de simular condições reais, assim como simular uma variedade de condições de contorno, como foi observado segundo (Hanna S. C., 1993) e (Markiewicz, 2012). No entanto, algumas desvantagens podem ser assumidas, tais como a dificuldade de simular e a própria complexidade do fenômeno pode exigir tantas aproximações que a solução numérica não é confiável.

Os modelos desenvolvidos *in situ* pelas empresas detentoras da tecnologia visam ser mais baratos do que o *software* comercial, porém é necessária à validação destes modelos, o que nem sempre é fácil devido à falta de dados na literatura. Tais modelos são ferramentas úteis nas análises de risco e acidentes, poupando necessidades de teste reais. Especificamente nas indústrias do ciclo do combustível nuclear (CCN) modelos computacionais têm sido utilizados com relativa frequência em estudos de dispersões atmosféricas, avaliação de fluxos gasosos e avaliação de lançamento de material particulado.

A análise de acidentes nos termos abordados nesta pesquisa tem suas origens na indústria nuclear e objetiva, caracteristicamente, nos perigos decorrentes de eventos que possam ser potencialmente catastróficos (CCPS, 2000), sendo possível a liberação de material radioativo e de produtos químicos nos interiores das instalações.

(Ricciardi, 2008) realizou simulações multidimensionais da dispersão de gases pesados (isto é,  $\text{SF}_6$ ) em uma sala ventilada e compararam os resultados do modelo com os dados experimentais. Eles concluíram que quanto maior a vazão do ar, mais satisfatória é a comparação entre os valores previstos e os experimentais. Além deste trabalho, também é relatado a simulação realizada para outro tipo de instalação de enriquecimento de urânio, por difusão gasosa, utilizando a simulação 3D, a fim de modelar o transporte do material aerossol após a liberação de  $\text{UF}_6$  no interior do edifício de processo, conforme (Wendel, Chen, Kim, Taleyarkhan, & Keith, 1996). Em 1997, através da utilização de um software desenvolvido para atender a necessidade de avaliar as liberações de  $\text{UF}_6$  e contemplando as reações químicas envolvidas é feito a avaliação de transporte atmosférico e dispersão de gás denso (considerando  $\text{UF}_6$ ), conforme estudo realizado por (Hanna S. R., 1997), através da utilização de dados dos testes realizados na França em 1991 (Crabøl, 1991).

Nesta circunstância, este trabalho apresenta um modelo matemático que visa representar a simulação de liberação de hexafluoreto de urânio, no interior de prédio de processo, considerando a influência de sistema de insuflamento e de exaustão. Durante a liberação de  $\text{UF}_6$ , ocorre à hidrólise que é uma das reações mais importantes nesta fase do processamento do  $\text{UF}_6$ , tanto por ser indesejável, assim como pelos perigos inerentes dos produtos formados ( $\text{UO}_2\text{F}_2$  e  $\text{HF}$ ). Sendo assim, este estudo busca estabelecer o conhecimento a respeito do comportamento do fluido de processo ( $\text{UF}_6$ ), propiciando o desenvolvimento de uma nova ferramenta na avaliação de riscos e acidentes.

No desenvolvimento do modelo foi utilizado o método de volumes finitos para a discretização das equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia. As equações para representação do modelo de turbulência segundo o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  modificado e leis de parede para solução dos campos de velocidades e temperaturas próximas à parede foram contempladas. Dados próximos aos dados reais de operação foram utilizados para munir o modelo e avaliar os resultados obtidos em simulação.

## 2. OBJETIVOS

Este trabalho tem por objetivo geral desenvolver um modelo matemático baseado no Método de Volumes Finitos capaz de representar o mecanismo de liberação acidental de Hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ) decorrente de acidentes em prédios de processo, sendo capaz de estimar os termos fontes e aplicá-los na avaliação de posterior dispersão atmosférica, contemplando as equações de concentração e buscar a representação dos principais mecanismos físico-químicos considerados na literatura decorrentes da liberação acidental de hexafluoreto de urânio. Desta forma simular usando o Modelo MPHMTTP- $UF_6$ , adaptado para este trabalho.

Para auxílio na avaliação e correlação das taxas de produção, mecanismos reacionais e na avaliação dos resultados gerados pelo modelo, foram utilizados os dados e resultados de outros modelos e trabalhos já realizados, disponíveis na literatura. Propõe-se a elaboração nas seguintes etapas para os objetivos específicos:

- a. Formular as equações que representam os mecanismos de liberação de  $UF_6$ ;
- b. Implementar a adaptação de um modelo computacional existente (MPHMTTP), baseado no método de volumes finitos, visando à previsão do escoamento gasoso de  $UF_6$  no interior da instalação e da modelagem da dispersão atmosférica dos produtos da hidrólise ( $UO_2F_2$  e HF);
- c. Avaliar parâmetros de % volume de  $UF_6$  e de concentração de  $UO_2F_2$  e HF
- d. Estabelecer correlação com os acidentes postulados e seus resultados através do modelo proposto em comparação com outros modelos.

### **3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

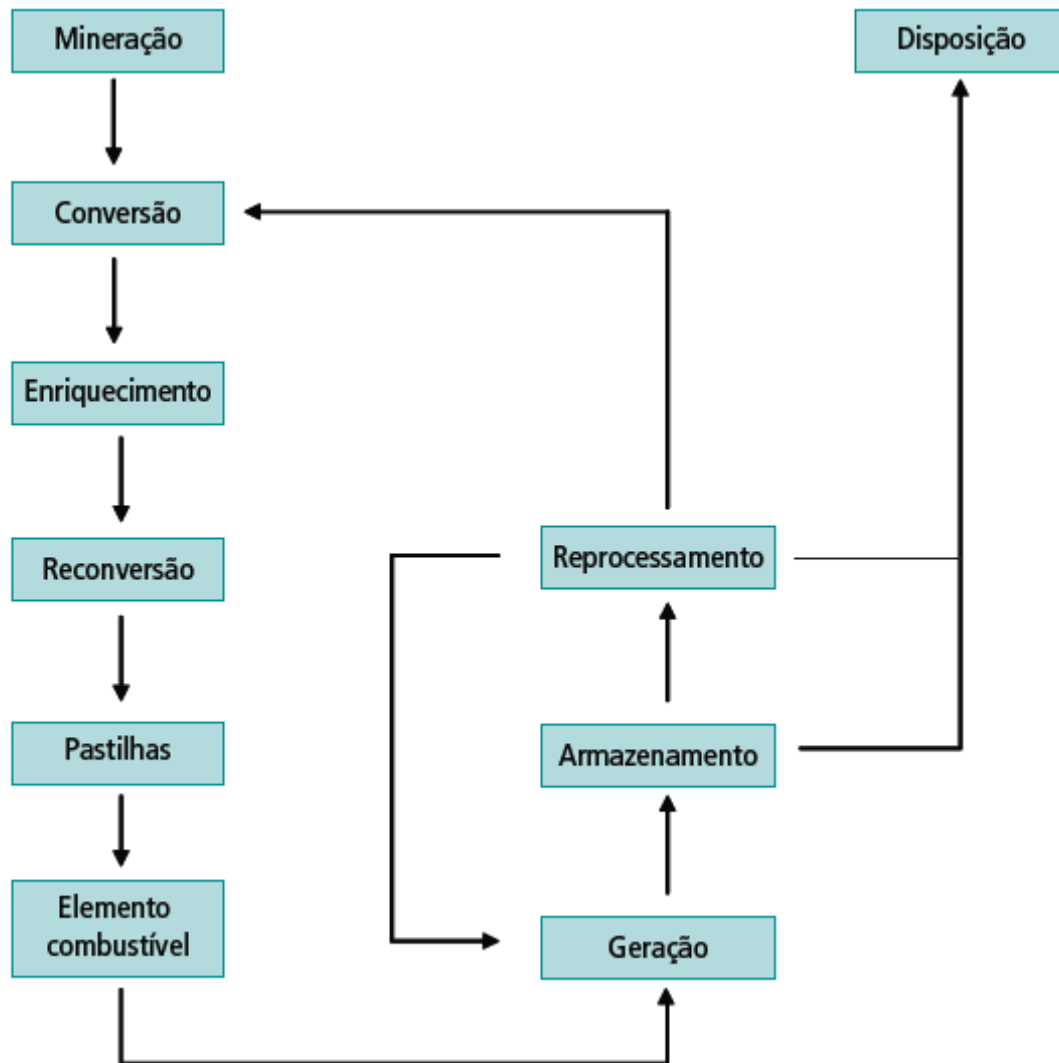
A revisão bibliográfica deste trabalho foi dividida em cinco etapas.

1. Revisão do ciclo do combustível nuclear e a relevância do objetivo deste trabalho no mesmo;
2. Realizada a revisão da teoria do processo de dispersão de compostos químicos densos, uma breve descrição destes processos e suas características;
3. É realizada uma abordagem sobre as principais características físico-químicas do hexafluoreto de urânio e a influência de variáveis operacionais e parâmetros de processo, nestas características;
4. Corresponde a uma revisão sobre os modelos matemáticos, aspectos teóricos a serem considerados inicialmente no modelamento para o processo de dispersão atmosférica em prédios de produção, e apresentam-se as espécies e reações químicas consideradas, com seus respectivos dados termodinâmicos;
5. Descrição dos dados práticos e resultados obtidos em experimentos/simulações e acidentes ocorridos na operação de instalações do ciclo do combustível nuclear (CCN) utilizado como base para desenvolvimento e avaliação do modelo.



### 3.1. CICLO DO COMBUSTÍVEL NUCLEAR

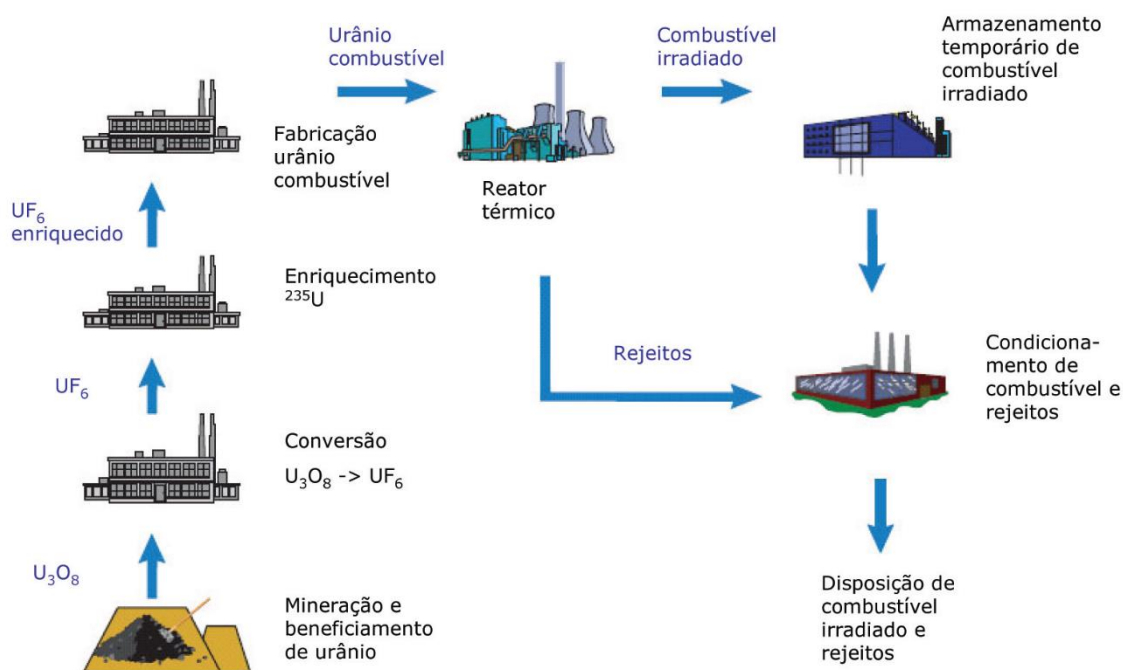
Ciclo do combustível nuclear (CCN) é o nome que se dá ao conjunto de processos industriais que transformam o minério de urânio no combustível que gera energia nos reatores nucleares, passando pelo condicionamento, uso, eventual reprocessamento e disposição. Várias fases podem ser identificadas, como no esquema da Figura 1.



**Figura 1** – Esquema do Ciclo do Combustível Nuclear (CCN)

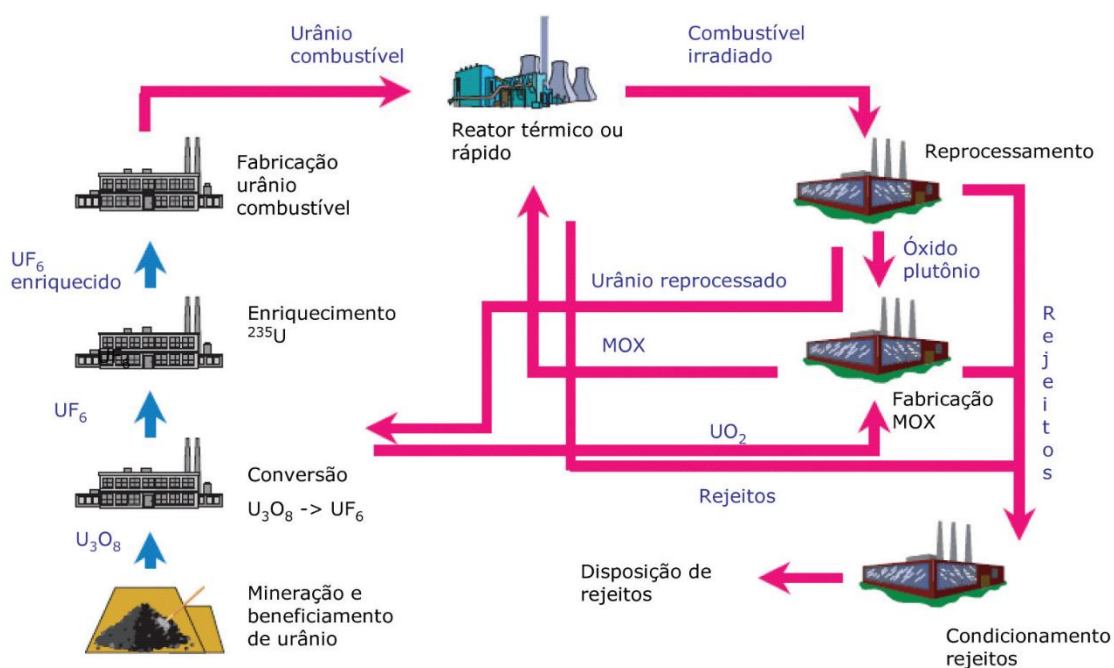
**Fonte:** (MME, 2007)

A Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA) identifica dois principais tipos de ciclos, um aberto, onde o urânio irradiado segue diretamente (após um período de decaimento da sua atividade e condicionamento) para disposição, realizado no Brasil e outro fechado, onde usinas de reprocessamento separam o urânio e o plutônio formado para reaproveitamento. As Figuras 2 e 3 ilustram os dois modelos (MME, 2007).



**Figura 2** – Ciclo Aberto do Combustível Nuclear.

Fonte: (MME, 2007)



**Figura 3** – Ciclo Fechado do Combustível Nuclear

Fonte: (MME, 2007)

O domínio completo do ciclo do combustível nuclear é de vital relevância, uma vez que os elementos combustíveis produzidos, com diferentes características e graus de enriquecimento, são empregados nos reatores de potência, que proporcionam a produção da energia elétrica, e nos reatores de pesquisa, para produção de radiofármacos.

Atualmente, o Brasil possui o domínio tecnológico de todas as etapas do ciclo do combustível nuclear aberto, conforme Figura 4, em escala laboratorial ou em usina de demonstração. Com capacidade plena para atendimento da atual demanda de Angra 1 e 2, em escala industrial, operam unidades das Indústrias Nucleares do Brasil (INB) nas etapas de mineração, pastilhas e de elementos combustíveis, enquanto a Usina de Enriquecimento, em implantação, não atingiu plenitude da capacidade instalada, para atendimento da demanda.

A tecnologia da Conversão no Brasil, cujos processos químicos envolvidos já são de domínio laboratorial e em escala piloto, ainda não faz parte das atividades nucleares em nível industrial. De acordo com o planejamento estratégico da INB, atualmente encontra-se em fase de projeto, aguardando definição da rota tecnológica pelo grupo de trabalho entre INB e o Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo (CTMSP) para uma Planta de 1.500 t UF<sub>6</sub> /ano.



**Figura 4** - Ciclo do Combustível Nuclear no Brasil.

**Fonte:** (INB, 2019).

Os processos, ou etapas, descritas a seguir formam o ciclo do combustível no Brasil:

**Mineração e Beneficiamento:** O Brasil ocupa a quinta posição no ranking mundial de reserva de urânio, com 309 mil toneladas, representado 5,3% do total no planeta (MME, 2007). A etapa de mineração compreende a extração do minério da natureza (incluindo as fases de prospecção e pesquisa) e beneficiamento, transformando-o no diuranato de amônio – DUA ou “*yellowcake*”, composto de  $U_3O_8$ , atualmente realizada na cidade de Caetité/BA, com capacidade anual 400 t de  $U_3O_8$ , suficientes para o pleno atendimento das Usinas Nucleares de Angra 1 e Angra 2, mas insuficiente para atender Angra 3;

**Conversão:** Etapa responsável pela purificação do diuranato de amônio – DUA (“*yellowcake*”) e transformação em hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ). O  $UF_6$  possui como característica principal se tornar gasoso a temperaturas relativamente baixas (56 °C) e isto possibilita a execução da etapa posterior de enriquecimento. Hoje a INB compra os serviços de conversão de fornecedores externos, com dispêndio de divisas da ordem de US\$ 8 milhões/ano;

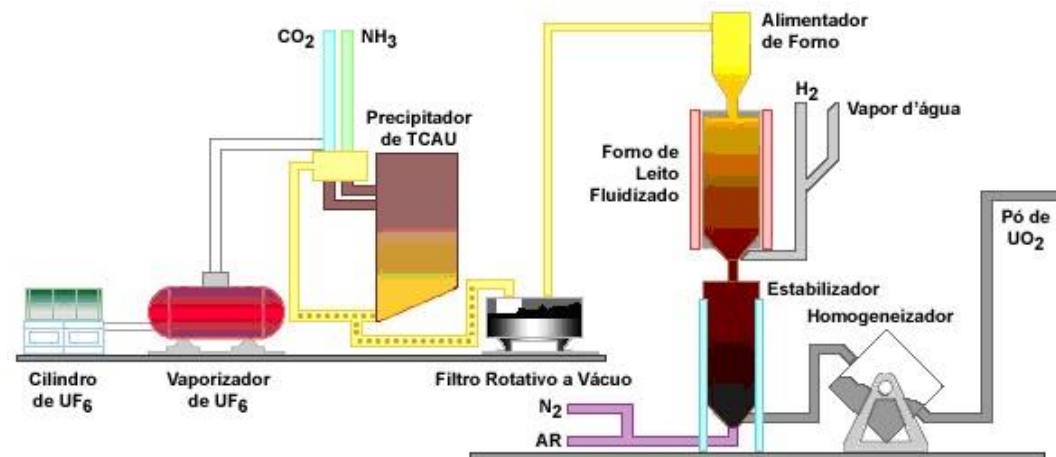
**Enriquecimento:** A etapa de enriquecimento é parcialmente realizada no País, na cidade de Resende - RJ, com capacidade instalada de cerca de 40% das necessidades da Usina de Angra 1 ou de cerca de 9% das necessidades totais de Angra 1 e Angra 2. Atualmente, os serviços de enriquecimento são contratados no exterior para Angra 1 e Angra 2, com gastos da ordem de US\$ 50 milhões/ano. Concluída a primeira etapa do projeto de enriquecimento, estarão atendidas a totalidade da demanda de Angra 1 e 13% da demanda de Angra 2. Portanto, insuficiente para as duas usinas em operação, situação que se agravará com a entrada em operação da Usina de Angra 3.

Somente com a implantação da 2ª etapa da Usina de Enriquecimento, onde estão previstos 12 módulos adicionais contendo 3 cascatas em cada módulo, a INB terá capacidade instalada de enriquecimento de urânio para atender plenamente às recargas de Angra 1, 2 e 3.

Como destaque deste trabalho, esta etapa do ciclo do combustível nuclear, será abordada de forma mais detalhada no item 3.1.1, sendo descrita a FCN- Enriquecimento.

**Reconversão:** A reconversão é o retorno do gás hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ) a dióxido de urânio ( $UO_2$ ), sob a forma de pó. A atividade é desenvolvida na FCN – Reconversão, na unidade da INB em Resende/RJ, conforme demonstrado na Figura 5.

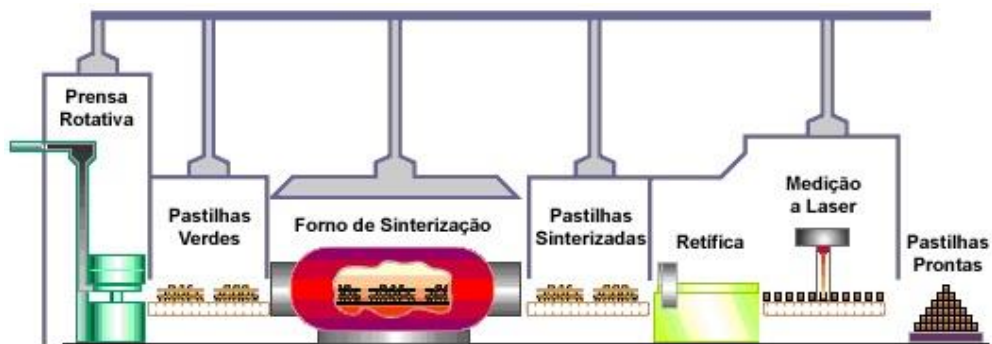
O urânio enriquecido em forma de gás passa por diversos processos para gerar o tricarbonato de amônio e uranila (TCAU), um composto sólido e amarelo, que é aquecido e misturado ao hidrogênio e ao vapor d'água. O resultado é um pó que, após ser estabilizado, é utilizado na etapa seguinte: a produção de pastilhas.



**Figura 5** - Reconversão do  $UF_6$  em Pó de  $UO_2$   
**Fonte:** (INB, 2019)

**Produção de Pastilhas:** Com o urânio enriquecido sob a forma de pó ( $UO_2$ ) são produzidas as pastilhas, que têm a forma de um cilindro de aproximadamente um centímetro de comprimento e de diâmetro.

Esta etapa da produção do combustível nuclear é realizada na FCN – Pastilhas, na unidade da INB em Resende/RJ, conforme demonstrado na Figura 6. Apenas duas destas pastilhas produzem energia suficiente para abastecer uma residência média, com quatro pessoas, durante um mês.

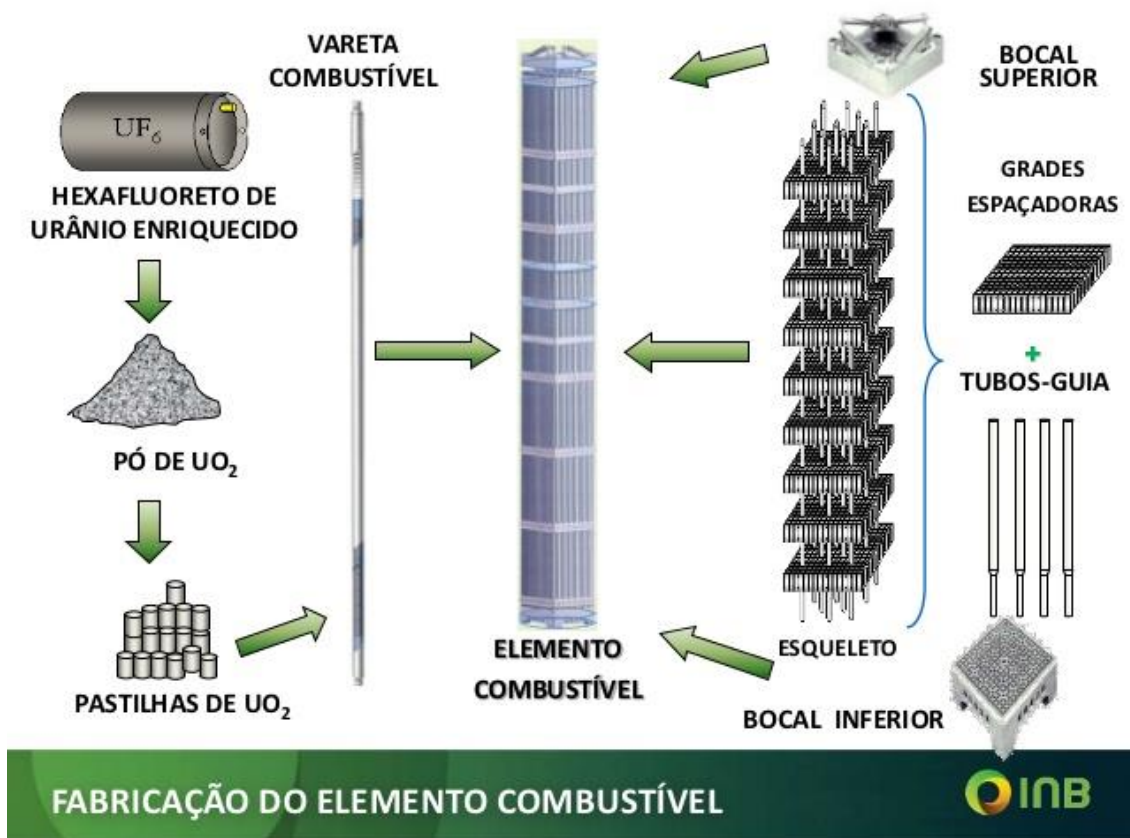


**Figura 6** - Produção de Pastilhas de  $UO_2$   
**Fonte:** (INB, 2019)

**Montagem do Elemento Combustível:** As pastilhas de urânio são posicionadas ordenadamente em varetas de uma liga super-resistente, o zircaloy. Um conjunto destas varetas, mantidas rigidamente por grades espaçadoras, forma o elemento combustível. As usinas Angra 1 e Angra 2 são abastecidas por dois modelos de combustíveis diferentes, cada modelo devido ao projeto estabelecido, ambos fabricados pela INB.

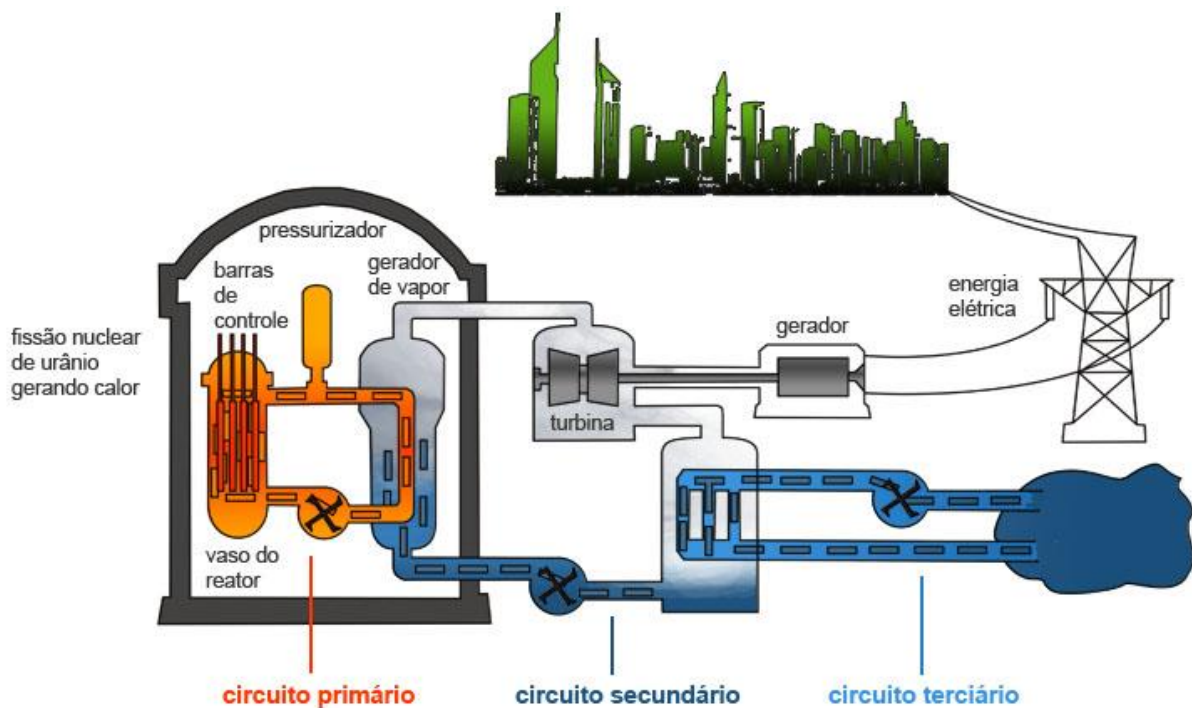
Um elemento combustível permanece no reator durante três ciclos, ou seja, aproximadamente três anos. Após este período eles são armazenados dentro das usinas, nas piscinas de combustíveis usados.

Um esquema simplificado da fabricação dos elementos combustíveis pode ser visualizado a seguir, conforme a Figura 7.



**Figura 7** - Esquema da fabricação de um Elemento Combustível  
**Fonte:** (INB, 2019)

**Geração de Energia Elétrica:** Nos reatores PWR (*Pressurised Water Reactor*), como Angra 1, Angra 2 e Angra 3, os núcleos são compostos de elementos combustíveis dentro de um vaso metálico contendo água de refrigeração sob pressão, que absorve o calor gerado pela reação de fissão. Essa água quente circula por um gerador de vapor, em circuito fechado, chamado de circuito primário. Outra corrente de água (circuito secundário) passa por esse gerador, onde se transforma em vapor ao ser aquecida, o qual aciona uma turbina para a produção de eletricidade no gerador. Os dois circuitos não têm comunicação física entre si, conforme a Figura 8. (ELETRONUCLEAR, 2019)



**Figura 8** - Esquema de funcionamento de geração de energia elétrica termonuclear  
Fonte: (ELETRONUCLEAR, 2019)

### 3.1.1. Descrição da FCN-Enriquecimento

A FCN-Enriquecimento é composta pelo Módulo 1 (Cascatas 1, 2, 3 e 4), Módulo 2 (Cascatas 5 e 6), Módulo 3 (Cascata 7 e 8), sistemas específicos de UF<sub>6</sub> e sistemas auxiliares.

#### 3.1.1.1. Cascatas de Ultracentrífugas

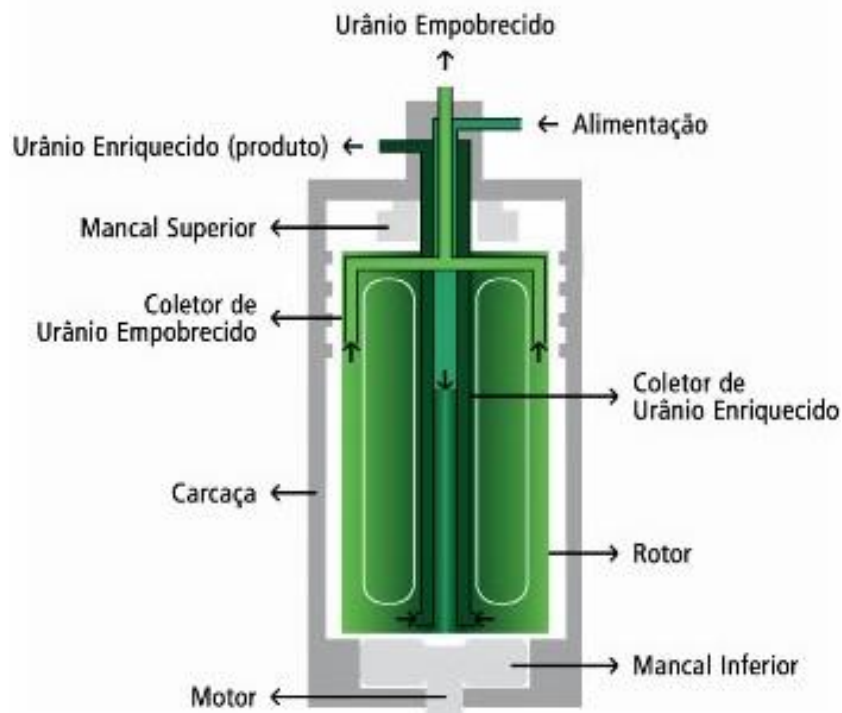
A cascata de ultracentrífuga é constituída de um conjunto de máquinas individuais, denominadas ultracentrífugas (Figura 9), ligadas em paralelo para formar um subconjunto denominado estágio, e cada estágio ligado em série aos estágios adjacentes. Cada máquina e cada estágio contêm três fluxos: fluxo de alimentação; fluxo enriquecido no isótopo <sup>235</sup>U, denominado fração leve; e fluxo empobrecido no isótopo <sup>235</sup>U, denominado fração pesada. Os estágios são conectados de modo que a fração leve do estágio (n-1) se una à fração pesada do estágio (n+1), para formar a alimentação do estágio (n).

A cascata de ultracentrífuga é dividida em duas seções: a seção de enriquecimento, com concentração isotópica de <sup>235</sup>U mais elevada que a natural (0,71%) e a seção de empobrecimento, com concentração isotópica de <sup>235</sup>U inferior a natural.

Existem três correntes externas à cascata de ultracentrífuga: a de alimentação, procedente do sistema de alimentação de UF<sub>6</sub> para dentro da cascata; a de produto, que consta da fração leve do último estágio de enriquecimento; e a de rejeito, que consta da fração pesada do último estágio de empobrecimento.

Cada ultracentrífuga opera com UF<sub>6</sub> puro a uma pressão de ordem subatmosférica. O efeito de separação isotópica é provocado pela ação distinta da força centrífuga sobre os isótopos <sup>235</sup>U e <sup>238</sup>U, força esta criada pela alta rotação das máquinas. Em consequência, o isótopo mais leve <sup>235</sup>U acumula-se junto ao eixo, enquanto o isótopo mais pesado <sup>238</sup>U junto à parede da máquina.





**Figura 9** - Esquemático de Ultracentrífuga  
**Fonte:** (INB, 2019)

#### 3.1.1.2. Sistemas de UF<sub>6</sub>

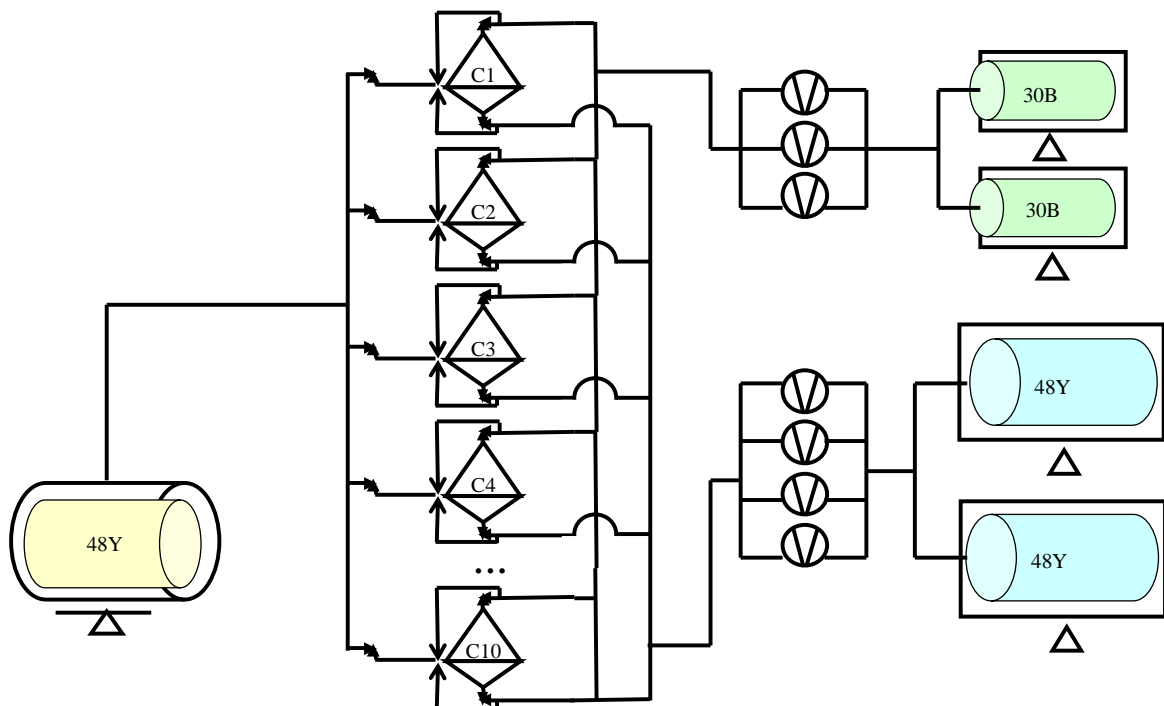
São sistemas que processam o UF<sub>6</sub> em auxílio à operação das cascatas de enriquecimento, compreendendo:

- ✓ Sistema de Alimentação e Purificação de UF<sub>6</sub>;
- ✓ Sistema de Retirada de UF<sub>6</sub> Enriquecido (Produto);
- ✓ Sistema de Retirada de UF<sub>6</sub> Empobrecido (Rejeito).
- ✓ Sistema de Recomposição Isotópica.

O primeiro sistema é responsável pelo suprimento de UF<sub>6</sub> com teor natural de <sup>235</sup>U, em estado gasoso, para as cascatas. Os cilindros 48Y com UF<sub>6</sub>, em estado sólido, são colocados dentro de autoclaves, onde serão mantidos no equilíbrio sólido/gás. A purificação do material de alimentação é realizada por transferência dos gases leves na fase gasosa presente no cilindro 48Y de alimentação.



Após a redução de contaminantes no interior do cilindro 48Y, o material se encontra pronto para alimentar as cascatas de ultracentrífugas. O  $UF_6$  sendo sublimado, a partir do equilíbrio sólido-gás, é conduzido até as ultracentrífugas.

Os dois sistemas seguintes têm respectivamente a finalidade de transportar, com auxílio de compressores, o  $UF_6$  vindo das secções provenientes das linhas de produto e rejeito das cascatas, para armazenagem em cilindros do tipo 30B e 48Y (Tabela 1), mantidos a temperaturas a seguir da temperatura ambiente.



**Figura 10** - Esquemático dos Sistemas de  $UF_6$   
Fonte: (INB, 2019)

**Tabela 1** - Tipos de Cilindros usados no Ciclo do Combustível Nuclear  
**Fonte:** (Hansen & Rogers, 2006)

<b>Cilindro Tipo 48Y</b>	<b>Cilindro Tipo 30B</b>
Usado para urânio natural e empobrecido Possui 12.500 kg de UF <sub>6</sub> (8.450 kg U) Um cilindro 48Y cheio com urânio natural contém 60,1 kg de <sup>235</sup> U.	Usado para urânio enriquecido Possui 2,270 kg de UF <sub>6</sub> (1,540 kg U) Um cilindro 30B cheio com Urânio enriquecido 4% contém 61,6 kg de <sup>235</sup> U.
	

O último deste sistema de UF<sub>6</sub> é o Sistema de Recomposição Isotópica, cuja função é promover a homogeneização e ajustes da composição isotópica do UF<sub>6</sub> enriquecido, para fins de atendimento das especificações do elemento combustível. Neste sistema também é possível coletar amostra líquida de UF<sub>6</sub>.

No processo de amostragem líquida são transferidas pequenas quantidades de UF<sub>6</sub> enriquecido dos cilindros 30B para cilindros de amostragem, do tipo 1S, conectados através de tubulação e válvulas. Para liquefazer e homogeneizar o UF<sub>6</sub>, os cilindros são aquecidos dentro de uma autoclave. A transferência controlada do UF<sub>6</sub> líquido para os cilindros é proporcionada por um mecanismo basculante. Este sistema em específico é o ponto focal deste trabalho, com relação ao modelamento e análise de eventos.

### 3.1.1.2.1. Sistema de Amostragem e Recomposição Isotópica

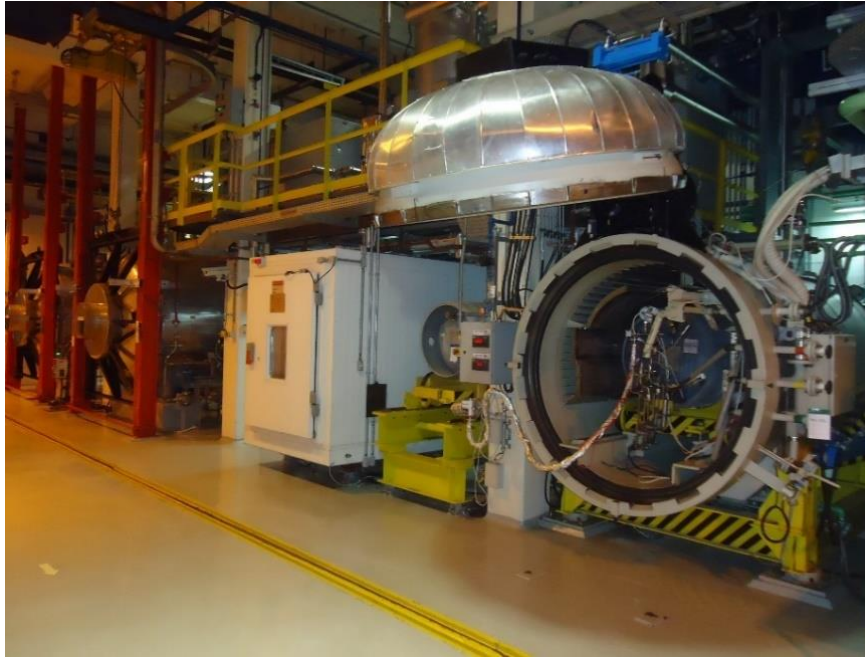
O sistema é constituído de uma autoclave basculante, um sistema de fixação do cilindro 30B doador, uma câmara de dessublimação e tubulações, válvulas e instrumentos de medição (Figura 10) cuja função é impedir a dessublimação do UF<sub>6</sub>. A autoclave tem a função de, além de atuar como vaso de contenção, aquecer o material existente a temperatura de trabalho superior ao ponto triplo, quando nesta fase o UF<sub>6</sub>, no estado líquido, passará pela etapa de homogeneização do material. Os dados de projeto da autoclave adotado pela INB encontram-se resumidos na Tabela 2.

**Tabela 2**– Base de projeto do sistema de amostragem e recomposição  
**Fonte:** (INB, 2019)

<b>Autoclave do Sistema de Amostragem e Recomposição Isotópica</b>	
Diâmetro Interno (mm)	≅1.500
Comprimento (mm)	≅3.900
Pressão Máxima de Projeto (bar)	< 15
Temperatura de Projeto (°C)	>100
Capacidade de aquecimento (kW)	12
Água de Resfriamento da Autoclave (°C)	< 10
Dimensões Relativas à Criticalidade	1.575 mm em diâmetro.
Capacidade do Ventilador (scfm)	>1.500

Uma vez homogeneizado, a etapa seguinte é a de caracterização do UF<sub>6</sub>, na qual a amostragem do material pode ser feita tanto na fase gasosa, quanto na líquida. Na etapa de amostragem líquida, o material é transferido, na própria autoclave, por meio de um dispositivo próprio que permite o recolhimento do material em cilindros do tipo 1S.

Na etapa de recomposição isotópica, isto é, quando o material caracterizado passa por ajuste da concentração isotópica, conforme especificação do cliente, o grau de enriquecimento final é obtido a partir da transferência de material nuclear (UF<sub>6</sub>) do cilindro doador ao cilindro receptor. O cilindro receptor é colocado na câmara de dessublimação, à uma temperatura de aproximadamente 20°C negativos, e o cilindro doador, à temperatura ambiente.



**Figura 11**– Sistema de Amostragem e Recomposição Isotópica  
**Fonte:** (INB, 2019)

#### 3.1.1.2.2. Etapa de Homogeneização

O cilindro é aquecido indiretamente, por meio de resistências elétricas dentro da autoclave, através da utilização de convecção forçada. Um circuito de intertravamento e controle modula a temperatura do ar em seu interior. A temperatura é ajustada de forma que varie entre valores de máximo e mínimo, tal procedimento é realizado através de controladores proporcional integral e derivativo (PID), que atuam no sistema de resistências elétricas.

#### 3.1.1.2.3. Etapa de Amostragem Líquida

Após o período necessário a primeira homogeneização do cilindro e já ajustado isotopicamente conforme requisitos finais do cliente, uma amostra do material é obrigatoriamente recolhida para certificação final.

Segundo a norma ASTM Standards C 996-15 (Standard Specification for Uranium Hexafluoride Enriched to Less Than 5%  $^{235}\text{U}$ ), nessa etapa a amostragem deve ser realizada com o  $\text{UF}_6$  na forma líquida, possibilitando a coleta de uma amostra com maior representatividade, pois visa um melhor controle da qualidade total do material.

#### 3.1.1.2.4. Situações Anormais

As possíveis situações anormais de operação que possam surgir durante o processo de amostragem e recomposição isotópica de UF<sub>6</sub> são descritas a seguir. Todas estas falhas são alarmadas e sinalizadas, na FCN-Enriquecimento.

- ✓ Falha no controle de temperatura das hot boxes ou dos traceamentos elétricos;
- ✓ Falha no controle de temperatura da autoclave;
- ✓ Falha nos ventiladores da autoclave;
- ✓ Falha no controle de temperatura das resistências elétricas;
- ✓ Fechamento indevido das válvulas de bloqueio eletropneumática;
- ✓ Perda de vácuo nas tubulações;
- ✓ Falha nos transmissores de pressão;
- ✓ Falha nos sistemas de pesagem do cilindro doador ou receptor;
- ✓ Vazamentos de UF<sub>6</sub> do cilindro 30B;
- ✓ Perda de alimentação elétrica.

#### 3.1.1.3. Sistemas Auxiliares

São sistemas convencionais, responsáveis por fornecer suporte operacional a todos os sistemas da Usina de enriquecimento, seja em condições normais ou anormais de funcionamento. Compreendendo, principalmente:

##### 3.1.1.3.1. Sistema de Ventilação e Ar Condicionado (VAC)

O Sistema de Ventilação e Ar Condicionado dos prédios da FCN-Enriquecimento é composto por diversos subsistemas de exaustão, ventilação e ar condicionado, tendo a função de controlar a temperatura, pressão e umidade do ar ambiente, de forma a oferecer condições ideais de trabalho ao homem e equipamentos, bem como garantir a segurança do público externo.

Os prédios dos sistemas de UF<sub>6</sub> são servidos por subsistemas de ventilação e exaustão, respectivamente compostos por equipamentos que promovem o insuflamento e condicionamento do ar tomado do exterior, e por outros que propiciam a exaustão, filtragem e lavagem do ar retirado dos ambientes para o exterior.

## 3.2. CARACTERÍSTICAS DO UF<sub>6</sub>

O UF<sub>6</sub> pode existir no estado líquido, sólido ou gasoso, dependendo da temperatura e pressão em que se encontra. Na pressão atmosférica, o UF<sub>6</sub> é um sólido cristalino incolor que muda diretamente para o estado gasoso (sublimação) quando aquecido. Este tipo de comportamento de fase facilita o manuseio e o armazenamento seguro do UF<sub>6</sub>, e é explorado ao longo deste trabalho e operação das plantas do ciclo do combustível nuclear (CCN).

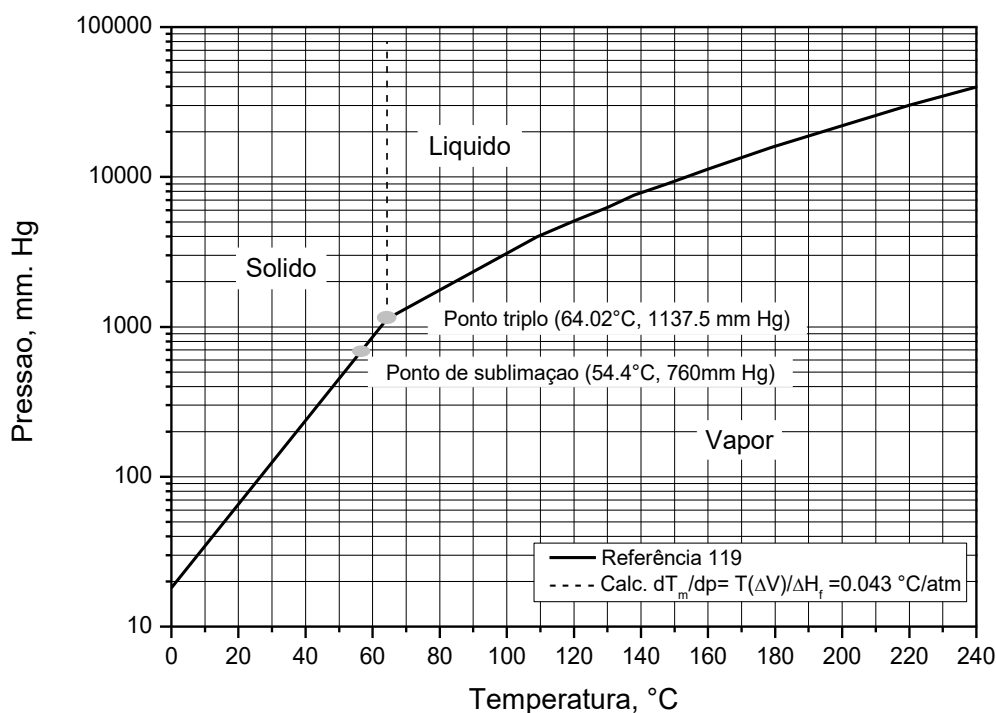
As propriedades físicas e químicas do UF<sub>6</sub> foram resumidos por (Barber, 1998) e são a base para o projeto da FCN Enriquecimento. Elas influenciam os modos de operação, disposição de equipamentos e ambientes, provisões para segurança e a seleção de materiais de construção. Nesta seção são introduzidos os princípios físicos e químicos mais significativos, discutidas suas influências no projeto e operação da planta.

### 3.2.1. Princípios Físico-químicos

Uma substância pura e quimicamente uniforme, podendo existir em três estados físicos diferentes: sólido, líquido ou vapor ou qualquer combinação desses estados dependendo da temperatura e pressão do sistema.

Fases múltiplas coexistem em equilíbrio somente sob determinadas condições de temperatura e pressão. Isto é melhor representando num diagrama de fases. As três fases são identificadas como regiões no diagrama separadas por linhas representando a curva de combinações de equilíbrio de temperatura e pressão. Para substâncias puras, como o UF<sub>6</sub>, esses contornos convergem para um único ponto do diagrama, chamado de ponto triplo, onde todas as três fases coexistem em equilíbrio.

O diagrama de fases do UF<sub>6</sub>, mostrando os limites de temperatura e pressão entre as fases, como uma função da temperatura, são estabelecidos conforme a Figura 12. (DeWitt, 1960).



**Figura 12**– Diagrama de fases do UF<sub>6</sub>

**Fonte:** (DeWitt, 1960)

O calor latente de alteração de fase, ponto de sublimação, densidades de fases, ponto crítico e calor específico são dados na Tabela 3 (ORO-651, 1987).

Observe que a temperatura de sublimação está abaixo do ponto triplo. Isso tem implicações para o processamento porque a pressão deve estar acima de 1,5 atm (1137,5 mm Hg) e a temperatura acima de 64°C (337 K) para UF<sub>6</sub> a ser manuseada como um líquido. Assim, qualquer processo que utilize UF<sub>6</sub> líquido estará sujeito a vazamento do UF<sub>6</sub> na atmosfera através de qualquer orifício. Além disso, como a pressão do UF<sub>6</sub> líquido está sempre acima de 1 atm, o comportamento de um cilindro com vazamento pode ser semelhante ao de um aquecedor de água quente superaquecido, embora um pouco menos violento. (Oliver, Milton, & Grisard, 1953).



**Tabela 3** – Propriedades do UF<sub>6</sub>  
**Fonte:** (ORO-651, 1987)

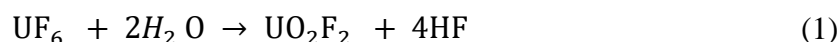
<b>Propriedades</b>	<b>Valores</b>
Ponto de Sublimação (14,7 psia)	133,8 °F (56,3 °C)
Ponto Triplo	22 psia, 147,3 °F (1,5 bar; 64,1 °C)
Densidade	
Sólido a 68 °F (20 °C)	317,8 lb/ft <sup>3</sup>
Líquido a 147,3 °F (64,1 °C)	227,7 lb/ft <sup>3</sup>
Líquido a 200,0 °F (93,3 °C)	215,6 lb/ft <sup>3</sup>
Líquido a 235,0 °F (112,8 °C)	207,1 lb/ft <sup>3</sup>
Líquido a 250,0 °F (121,1 °C)	203,3 lb/ft <sup>3</sup>
Calor de	
Sublimação a 147 °F (63,9 °C)	58,2 Btu/lb
Fusão a 147 °F (63,9 °C)	23,5 Btu/lb
Vaporização a 147 °F (63,9 °C)	35,1 Btu/lb
Calor Específico	
Sólido a 81 °F (27,2 °C)	0,114 Btu/lb
Líquido a 81 °F (27,2 °C)	0,130 Btu/lb
Pressão Crítica	668,8 psia
Temperatura Crítica	446,4 °F (230,2 °C)

### 3.2.2. Reação de Hidrólise do UF<sub>6</sub>

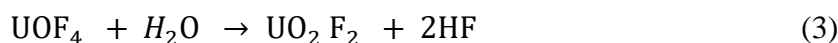
A avaliação da liberação de UF<sub>6</sub> e a subsequente dispersão atmosférica de tais liberações são complicadas pela complexa termodinâmica do sistema de água - UF<sub>6</sub>. Por exemplo, o UF<sub>6</sub> líquido não pode (normalmente) existir a pressão atmosférica normal. Como resultado, pode-se esperar que a liberação de uma grande quantidade de UF<sub>6</sub> líquido se converta rapidamente após a liberação para o UF<sub>6</sub> vapor e o UF<sub>6</sub> sólido. O vapor irá se dispersar como uma nuvem, com um comportamento termodinâmico possivelmente complexo, e uma porção do UF<sub>6</sub> sólido se depositará no chão formando uma fonte secundária de vapor de UF<sub>6</sub> que pode persistir por algum tempo. Alguma parte do UF<sub>6</sub> líquido irá evaporar instantaneamente para o vapor ao liberar-se para a atmosfera.

Uma vez liberado para a atmosfera, o vapor de UF<sub>6</sub> reage com a mistura no ar para produzir uma nuvem branca densa contendo fluoreto de uranila sólido (UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>) e ácido

fluorídrico (HF), um modelo simples sugere que UF<sub>6</sub> reage com a água, conforme a Equação (1) (Bostick, McCulla, & Pickrell, 1985).



Estudos realizados teoricamente demonstram a influência da água na hidrólise do UF<sub>6</sub> na fase gasosa, podendo estabelecer novos produtos a partir deste modelo simples. Muitos estudos sugerem que esta reação ocorre através de um número de intermediários, incluindo UF<sub>5</sub>OH e UOF<sub>4</sub>.



O mecanismo da reação na fase gasosa (Equações 2 e 3) é explorado usando cálculo da Teoria de Funcional de Densidade Relativístico. Inicialmente, H<sub>2</sub>O coordena com UF<sub>6</sub> para forma um complexo 1:1 (UF<sub>6</sub>.H<sub>2</sub>O), em seguida é observado a transferência de um átomo de H proveniente da H<sub>2</sub>O para um ligante próximo F, resultando em UF<sub>5</sub>OH + HF. O HF eliminado ou outra molécula de H<sub>2</sub>O podem formar uma ligação de hidrogênio com o UF<sub>5</sub>OH, desta forma, proveniente do UF<sub>5</sub>OH, o segundo HF eliminado resulta em UOF<sub>4</sub> (Hu S. , Lin, Wang, Chu, & Liu, 2008) (Hu S. , Lin, Wang, Chu, & Liu, 2009).

Conforme evidências teóricas, UF<sub>5</sub>OH é indicado como um intermediário produzido na primeira etapa da hidrólise de UF<sub>6</sub>. Uma vez formado, o UOF<sub>4</sub> que é instável tende a associar com ligantes adicionais e doadores de ligação de hidrogênio. Equação (5).

Desta forma pode-se considerar que a reação na fase gasosa Equação (2) é composta de dois passos:

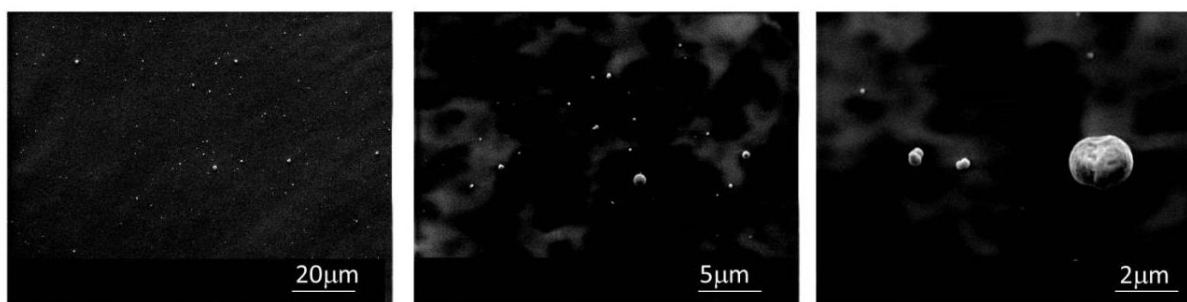


Ambos os passos (Eq. 4 e 5) devem superar uma barreira de energia substancial e são endotérmicas, embora o segundo passo possa ser catalisado por H<sub>2</sub>O ou HF. UOF<sub>4</sub> dificilmente forma uma molécula isolada, devido a sua instabilidade (Hu S. W., Lin, Wang, & Chu, 2014).

Entretanto, outro estudo significativo tem contribuído no entendimento dos produtos de hidrólise de  $UF_6$ , a caracterização morfológica e química destes produtos. Associado aos estudos teóricos e suas previsões com relação aos mecanismos de hidrólise, é fundamental a análise dos produtos formados.

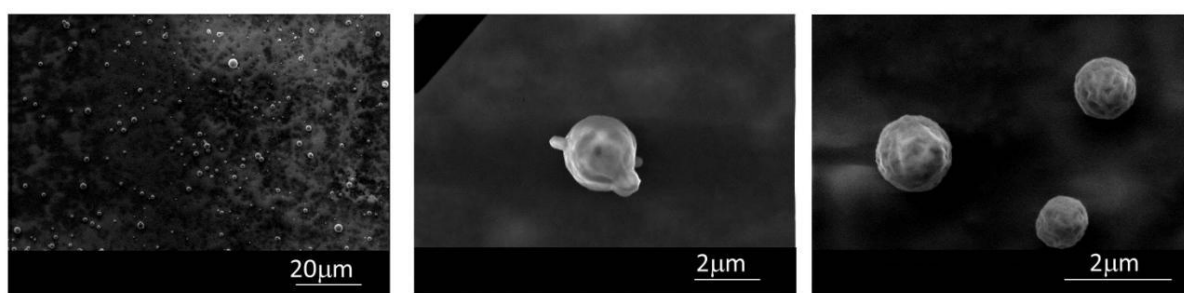
A análise realizada a partir do escape de  $UF_6$  na forma líquida (Wagner, et al., 2015) permitiu observar que a morfologia das partículas agregadas e a distribuição de tamanho dos produtos estabelecidos dependiam da umidade relativa, temperatura de  $UF_6$  e tempo após a liberação, conforme Figuras 13 e 14. Esta consideração foi contemplada neste trabalho, uma vez que o caso de estudo avalia a liberação na condição de  $UF_6$  líquido.

A caracterização da especiação química e a morfologia dos produtos formados pela hidrólise de  $UF_6$  é importante devido a previsão da dispersão e contaminação pelo material liberado no meio ambiente, ou pelas consequências inerentes a saúde devido a inalação de partículas no ar.



**Figura 13**– Imagem MEV do material produzido de  $UF_6$  (0,30mmol) hidrolisado sobre 19% (0,24mmol) de umidade em fita de carbono.

**Fonte:** (Wagner, et al., 2015)



**Figura 14**– Imagem MEV do material produzido de  $UF_6$  (3,8mmol) hidrolisado sobre 19% (0,24mmol) de umidade em fita de carbono.

**Fonte:** (Wagner, et al., 2015)

### 3.2.3. Princípios Físicos Químicos HF e UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>

Embora a separação dos isótopos seja um processo físico predominante na ultracentrifugação, os princípios químicos, bem como a compreensão do comportamento das fases são importantes na execução das demais etapas de processo e foram avaliadas neste trabalho. As eventuais reações químicas incluem a reação indesejável entre o UF<sub>6</sub> e a umidade (H<sub>2</sub>O) presentes no ar, que resulta na formação dos produtos UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> (fluoreto de uranila) e HF (fluoreto de hidrogênio) e além desta reação principal, ocorrem reações secundárias ao longo do ciclo de vida do cilindro, são reações que originam produtos insolúveis e não-voláteis do urânio, como UF<sub>5</sub> (formado da reação entre ferro e UF<sub>6</sub>), UF<sub>4</sub> (formado pela reação  $2UF_5 \rightarrow UF_4 + UF_6$ ), o próprio UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>. Outros resíduos são produtos de reações do ferro, como FeF<sub>2</sub>, FeF<sub>3</sub> e Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (são gerados principalmente no momento de passivação do interior do cilindro) (MILIN, RANNOU, VIAULLE, & CAPLIN, 2015)

Esta reação é minimizada mantendo-se os equipamentos e sistemas que processam o UF<sub>6</sub> em adequadas condições de estanqueidade, a fim de evitar de qualquer forma sua liberação.

Tanto o fluoreto de uranila (UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>) quanto o fluoreto de hidrogênio (HF) são higroscópicos, e têm tendência de serem hidratados. O particulado de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> pode ser visualizado como uma nuvem branca aerossol ou “fumaça” que pode ascender e ser dispersa no ambiente, considerados desta forma prejudiciais à saúde se inalados. O gás de ácido fluorídrico apresenta um risco de natureza química, enquanto o fluoreto de uranila apresenta um risco de ordem química e radiológica. Contudo, para liberações de UF<sub>6</sub> com teor de enriquecimento inferior a 10% em <sup>235</sup>U, a toxicidade química é considerada muito maior do que a toxicidade radiológica (ORO-651, 1987).

O gás de ácido fluorídrico apresenta um perigo de natureza química, tanto para seres humanos quanto para a vegetação e a vida animal. Este gás causa irritação severa nos olhos e no sistema respiratório, e se for inalado quantidade suficiente, pode provocar morte por edema pulmonar. O dano por HF é uma função da concentração do gás inalado e da duração da exposição. As Tabelas 4 e 5 fornecem os valores de HF sobre os efeitos na saúde (San Segundo & Amor, 1982).

Os limites baseados no urânio solúvel são assumidos como aplicáveis ao UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>. A Health Physics Society (HPS) estabelece um valor aceitável para incorporação de urânio de 8 mg. Um caso histórico de uma usina reporta uma inalação de 13mg de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, resultando em diversos dias de internação hospitalar, com efeitos recuperáveis. A Tabela 6 fornece os efeitos

de toxidez do UF<sub>6</sub> (Bouzigues, Mezin, & Mestre, 1978), e a Tabela 7 os supostos efeitos do UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> na saúde (San Segundo & Amor, 1982).

**Tabela 4** - Valores de Referência Relativos aos Efeitos Nocivos do HF  
**Fonte:** (San Segundo & Amor, 1982)

<b>Concentração (g/m<sup>3</sup>)</b>	<b>Efeitos</b>
<b>0,1</b>	Odor perceptível
<b>2,5</b>	Máximo admissível para exposição de 8h/dia
<b>25</b>	Tolerável durante vários minutos (irritação no aparelho respiratório)
<b>40</b>	Possibilidade de ser letal em exposição de uma hora
<b>100</b>	Concentração máxima tolerável para exposição de 1 minuto (irritação grave nos olhos e no aparelho respiratório)

**Tabela 5** - Supostos Efeitos do HF na Saúde  
**Fonte:** (San Segundo & Amor, 1982)

<b>Tempo de Exposição</b>	<b>Concentração (mg/m<sup>3</sup>)</b>	<b>Efeitos</b>
< 20 min	< 2,5	Nenhum
< 20 min	25	Mal-estar respiratório
< 20 min	100	Duas semanas de cuidados médicos
<20 min	400	Supostamente letal
20 min - 4 h	< 2,5	Nenhum
20 min - 4 h	10	Duas semanas de cuidados médicos
20 min - 4 h	40	Supostamente letal

**Tabela 6– Toxicidade do UF<sub>6</sub>**  
**Fonte: (Bouzigues, Mezin, & Mestre, 1978)**

	<b>Concentração (g/m<sup>3</sup>)</b>	<b>Efeitos</b>
<b>Incidente pequeno</b>	0,3	Irritação das membranas mucosas
	0,5	Ataque às vias respiratórias (tecidos destruídos podem ser regenerados)
<b>Incidente grave</b>	1	Para uma exposição de menos de ½ hora é possível a recuperação, mas com efeitos nos ossos e dentes
<b>Dose letal</b>	3	Morte por edema pulmonar agudo após exposição de alguns minutos

**Tabela 7- Supostos Efeitos do UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> na Saúde**  
**Fonte: (Bouzigues, Mezin, & Mestre, 1978)**

<b>Quantidade Inalada (mg)</b>	<b>Efeitos</b>
< 2,5	Nenhum
10	Mínimo
20	Dois semanas de cuidados médicos
100	Supostamente letal

O fluoreto de uranila apresenta tanto o risco químico quanto o radiológico. Os efeitos químicos do UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> envolvem principalmente a toxicidade do urânio. Diferentemente do gás de HF, o maior dano do UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> é causado pelos efeitos do urânio no sistema renal.

Outras reações químicas são controladas pelos sistemas auxiliares na descontaminação de equipamentos e remoção de contaminantes de correntes de efluentes e de óleos lubrificantes. Reações marginais incluem corrosão e deterioração de materiais de construção, que não comprometem suas especificações e/ou a integridade deles.

### 3.3. ANÁLISE DE RISCO E DESENVOLVIMENTO DE CENÁRIOS

A análise de risco é descrita como uma técnica que leva à identificação e compreensão qualitativa de cenários que merecem análises futuras. Embora a aplicação de técnicas formais foi estabelecida há cerca de 60 anos, seu crescimento nos últimos anos foi estimulado por uma série de acidentes químicos sérios que ilustravam a necessidade de garantir um maior nível de segurança (Nair, et al., 1997).

Uma revisão abrangente da história do conceito de avaliação de risco e gerenciamento de risco antes do século 20 foi conduzida por (Covello & Mumpower, 1985). A avaliação probabilística dos riscos, também conhecida como avaliação quantitativa de risco, é a análise quantitativa do risco. A base da avaliação de risco probabilística originou-se na indústria aeroespacial em 1960 e mais tarde, foi amplamente utilizada pela indústria nuclear para estudo de segurança de reator (Khan, Rathnayaka, & Ahmed, 2015).

Neste item foi identificado as cinco etapas básicas na avaliação de risco que são projetadas para responder as seguintes questões:

1. Que materiais perigosos estão presentes no site, em que quantidades e em que condições? (Um perigo é uma característica física ou química de um material, sistema, processo ou instalação que tem potencial para causar danos.) Esta etapa na avaliação de perigo é frequentemente chamada de identificação de perigos.

2. Quais são as formas pelas quais esses materiais podem escapar acidentalmente, levando a incêndios, explosões, nuvens de vapor tóxicas ou radioativas e a efeitos potencialmente prejudiciais para os trabalhadores, o público, o meio ambiente ou outras instalações no mesmo site?

3. Quais são os controles de projeto ou procedimentos que visam prevenir ou mitigar tais lançamentos acidentais, e eles são adequados?

4. Existem recomendações para o projeto ou mudanças processuais?

5. É necessária mais análise? Por exemplo, há um caso a ser feito para uma Análise Quantitativa de Risco completa (AQR)? Existem cenários de acidentes que exigem maior desenvolvimento e análise quantitativa?

A totalidade das Etapas 1 a 5 é chamada de Análise de Perigos do Processo (APP). A análise de perigos do processo (APP) vai além de apenas identificar se existe um risco, envolve a compreensão do impacto negativo do perigo no local de trabalho e como eliminá-lo. (CCPS, 2000)

A ênfase colocada sobre cada um dos elementos de avaliação de risco anteriormente listados depende da finalidade geral do estudo que está sendo conduzido.

### 3.3.1. Análise Integrada de Segurança (*Integrated Safety Analysis* - ISA)

O termo ISA é um esforço sistemático para identificar transtornos ou condições do processo em uma instalação que pode levar a consequências indesejáveis. O relatório NUREG-1513 (Milstein, 2001) indica que "o ISA deverá formar a base de um programa de segurança que exija controles e sistemas adequados para garantir a operação segura da instalação". Além disso, "os resultados de uma ISA consistem na identificação de possíveis acidentes e os controles (ou seja, a estrutura, o sistema, o equipamento, os componentes e o pessoal) basearam-se para evitar que o acidente ocorresse ou para reduzir suas consequências". No contexto do ISA, os modelos aqui descritos fornecem os meios para identificar os cenários de lançamento, prevendo as características do termo fonte, prevendo as concentrações no ar resultantes de uma liberação, avaliando o impacto na saúde humana e avaliando a adequação das medidas de mitigação.

Prevê-se que a pesquisa aqui apresentada será aplicável a três tipos de análise: Análise Integrada de Segurança (AIS), Planejamento de Resposta de Emergência (PRE) e análise pós Acidente (APA). Nair e colaboradores (1997) examinaram alguns modelos que são especificamente voltadas para a modelagem de UF<sub>6</sub>. Eles fazem declarações sobre o propósito desses modelos que, no entanto, são igualmente aplicáveis aos modelos que possuem capacidades mais gerais. Cada uma destas análises requerem o uso de modelos matemáticos, que são desenvolvidos para avaliar o impacto de uma liberação acidental de UF<sub>6</sub> devendo ser capaz de abordar adequadamente tanto o termo fonte como os componentes de dispersão atmosférica. Tanto o termo fonte como as análises de dispersão devem levar em consideração:

1. As propriedades físicas e termodinâmicas de UF<sub>6</sub>;
2. As reações exotérmicas que UF<sub>6</sub> sofre com a umidade atmosférica;
3. As propriedades físico-químicas e de transporte dos produtos de reação e,
4. As interações termodinâmicas da pluma contendo UF<sub>6</sub> e seus produtos de reação com camada limite atmosférica (Nair, et al., 1997)



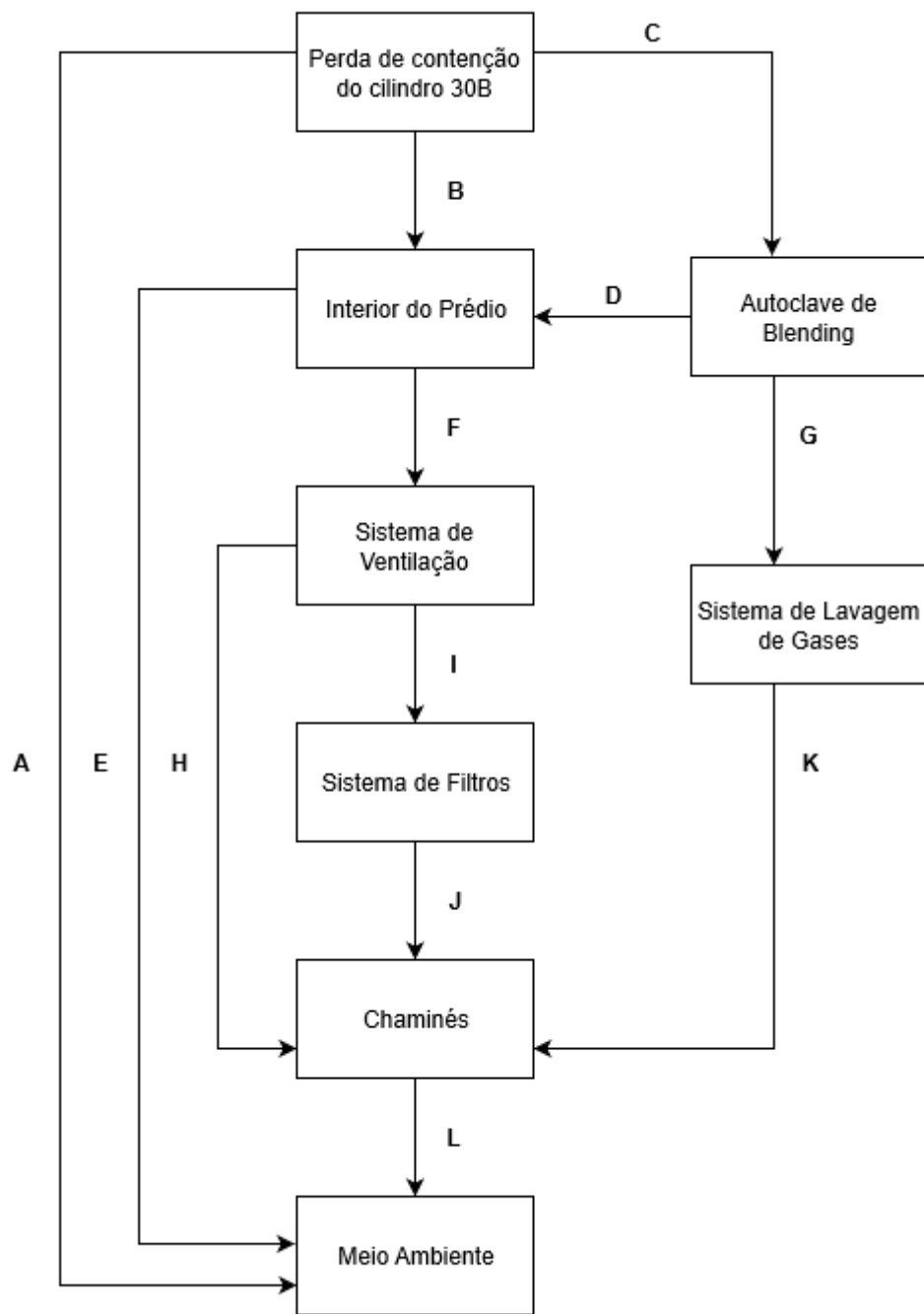
### 3.3.2. Cenários de Liberações de UF<sub>6</sub>

As instalações do ciclo do combustível nuclear podem liberar UF<sub>6</sub> para a atmosfera como resultado de eventos não intencionais. Os acontecimentos mais graves são aqueles em que o líquido UF<sub>6</sub> ou gases de UF<sub>6</sub> pressurizados são liberados de falhas em equipamentos de processo, tubulações ou cilindros de armazenamento. Violações de um recipiente com UF<sub>6</sub> sólido não é considerado um risco grande, uma vez que o UF<sub>6</sub> sólido não é uma forma prontamente dispersiva, ele sofre uma reação sólida lenta com a umidade do ambiente. Normalmente, o produto sólido da reação veda a violação, quando a reação ocorre em condições de temperatura ambiente e pressão atmosférica.

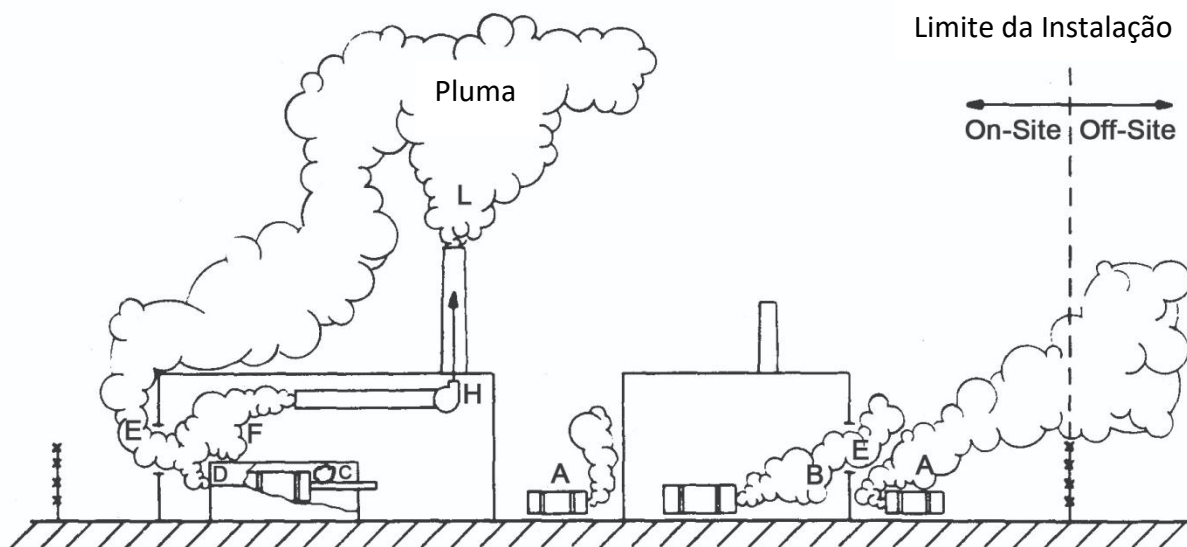
Existem vários cenários potenciais de liberação de UF<sub>6</sub> que podem, eventualmente, ser postulados para uma instalação de ciclo de combustível nuclear. Foram identificados e discutidos vários cenários possíveis de acidentes de UF<sub>6</sub>, com base na revisão de literatura e na experiência das instalações licenciadas pela NRC (Siman-Tov, 1984). Eles estão agrupados em quatro grandes categorias:

- ✓ falhas de cilindros UF<sub>6</sub>;
- ✓ falhas de equipamentos de processo de UF<sub>6</sub>;
- ✓ eventos de criticidade nucleares; e
- ✓ erros do operador.

Um total de 25 cenários foram identificados, variando de eventos de elevada consequência, tais como a ruptura hidráulica de um cilindro cheio, a uma liberação de tamanho pequeno como uma falha de armadilha fria. A maioria desses cenários podem ocorrer no interior de prédios. O termo fonte ambiental é uma função do caminho seguido pelo UF<sub>6</sub> lançado no interior de um prédio tal como mostrado esquematicamente nas Figuras 15 e 16 (Siman-Tov, 1984). Neste estudo foi limitado o possível cenário de liberação inicial em salas de processo e em autoclaves (Vias B, C e D, na Figura 16).



**Figura 15**– Diagrama de possíveis vias de liberação de UF6  
**Fonte:** Adaptado (Siman-Tov, 1984)

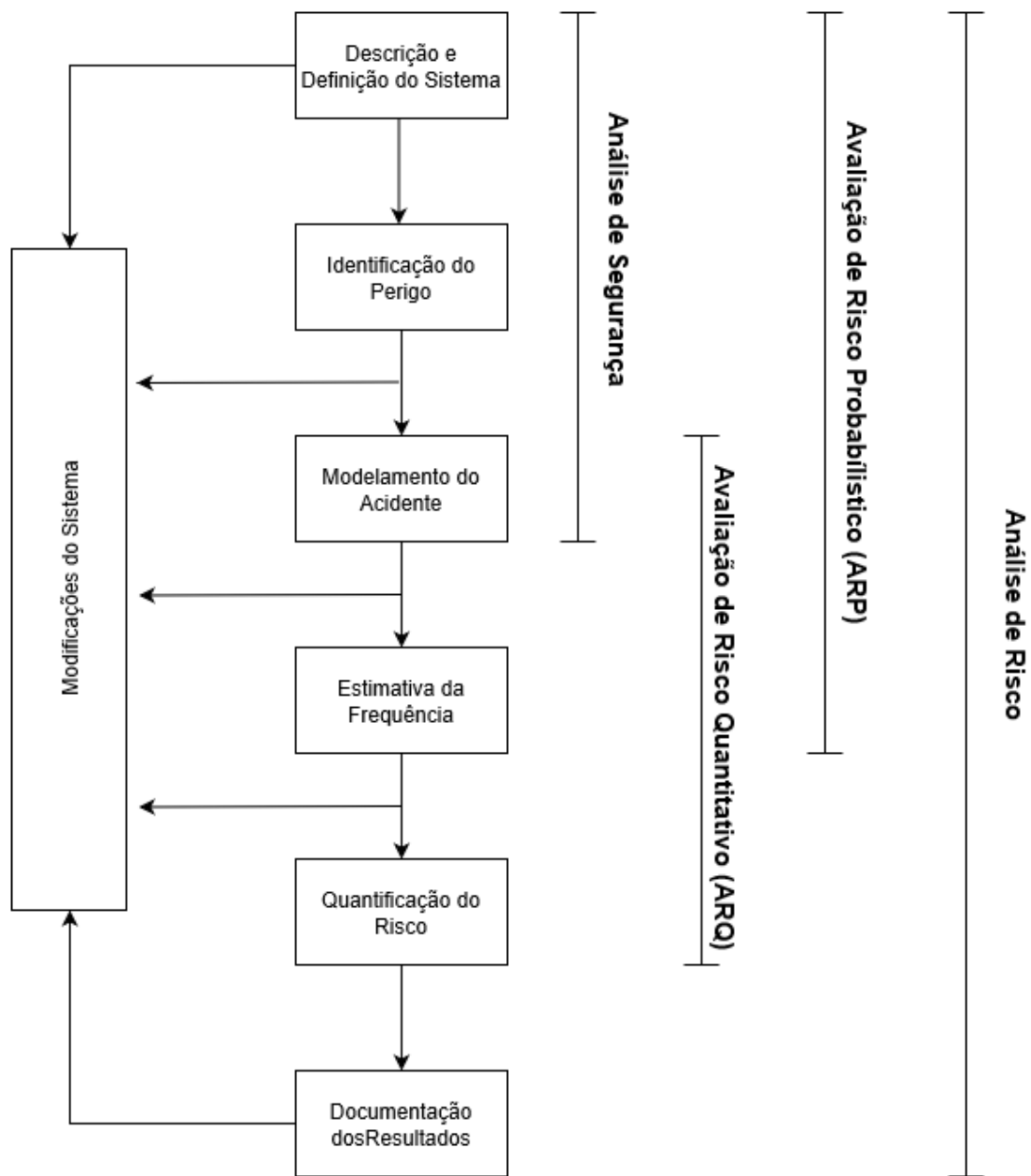


**Figura 16** – Representação das Vias de Liberação de UF<sub>6</sub>  
**Fonte:** Adaptado (Siman-Tov, 1984)

Esta identificação de perigos é feita com base nas propriedades físicas e químicas dos produtos manipulados na instalação e nas condições em que estes são armazenados por meio de procedimentos estruturados como a Hazard and Operability Studies (HAZOP), Failure Mode and Effects Analysis (FMEA), Fault Tree Analysis (FTA) entre outras. (Khan & Abbasi, 1998). Para cumprir o objetivo anterior, é estabelecido um procedimento sistemático junto com várias recomendações. Este procedimento utiliza uma base de conhecimento, que pode ser considerado como registro de fatos ocorridos, regras e informações sobre os componentes em uma planta de processo, como os casos das FCN-Enriquecimento e FCN-Reconversão e Pastilhas, a representação deste tipo de procedimento é mostrada na Figura 17.

Uma etapa seguinte, a segunda a ser considerada, é quando temos a análise das consequências destas hipóteses acidentais através de modelos matemáticos que quantificam os impactos.

A terceira etapa estima as frequências de ocorrência dos cenários acidentais com técnicas como a análise por árvores de falha (AAF), usada para calcular a frequência de ocorrência das hipóteses, e a análise por árvores de evento (AAE), usada na estimativa das frequências dos desdobramentos das hipóteses em função das interferências na evolução do acidente. Finalmente, é feita a estimativa do risco da instalação, que pode ser expresso por meio da expressão de risco



**Figura 17** – Diagrama de blocos simplificado de diferentes procedimentos de segurança e risco  
**Fonte:** Adaptado (Khan & Abbasi, 1998)

### 3.3.3. Determinação de Termo Fonte

Para ser determinado o Termo Fonte é necessário fornecer informações sobre os métodos e valores utilizados para estimar as características da liberação aérea de materiais radioativos e produtos químicos perigosos (por exemplo, massa/atividade, características físicas importantes para perigo de inalação e transporte, taxa de liberação, duração, etc.) necessário para fornecer um termo fonte para uso em avaliação de modelos de transporte.

O termo fonte é a quantidade de material radioativo, em gramas ou Curie, liberada para o ar, sendo considerado como o termo inicial a quantidade de material radioativo conduzido no ar na fonte do acidente. O termo fonte inicial respirável, um subconjunto do termo fonte inicial, é a quantidade de material radioativo conduzido no ar na fonte do acidente que é efetivamente inalável. Menores termos de origem são determinados pela aplicação de fatores de filtração ou deposição no termo fonte inicial (DOE, 1994).

#### 3.3.3.1. Estimativa de Liberações de Material Radioativo

Para estimar os termos fontes, é necessário elaborar um modelo que seja capaz de incorporar todas as variáveis necessárias a interpretação dos fenômenos, durante a liberação. A modelagem do fenômeno é talvez o passo mais crítico na estimativa precisa das concentrações, as imprecisões na estimativa das emissões da fonte podem influenciar nos cálculos subsequentes da dispersão das concentrações resultantes de uma liberação acidental.

A estimativa do termo fonte inclui a consideração do material em risco, que é a quantidade de material disponível para ser atuado por um determinado tipo de estresse físico. Para instalações, processos e atividades, o material em risco é um valor que representa alguma quantidade máxima de radionuclídeo presente ou razoavelmente antecipado para o processo ou estrutura a ser analisada. Diferentes materiais em risco podem ser atribuídos para diferentes acidentes, pois é necessário apenas definir o material em determinados locais físicos discretos que estão expostos a um determinado estresse (DOE, 1994).

O termo fonte no ar de materiais radioativos é tipicamente estimado pela seguinte equação linear de cinco componentes (DOE, 1994).

$$\text{Termo Fonte} = MR \times RD \times FL \times FR \times FF \quad (6)$$

Onde:

MR = Material em risco (Curie ou gramas),

RD = Razão de danos,

FL = Fração de liberação no ar (ou taxa de liberação aérea para lançamento contínuo),

FR = Fração Respirável, e

FF = Fator de fuga.

Em geral, as frações FL/FR dependem de uma série de fatores, incluindo as características do material afetado, o tipo e nível de estresse imposto, como e quando o estresse é imposto e as condições ambientais locais. É interpretado como estresse todos os componentes que afetam o material nuclear dispensando energia e afetando a sua forma de liberação.

A especificação do termo fonte é tão importante quanto o próprio modelo de dispersão em si, sendo fundamental a definição de um modelo apropriado para a estimativa adequada dos dados de entrada no modelo de dispersão atmosférica quando considerado a taxa de vazamento ou quantidade total de material na liberação e do estado físico do produto. Em alguns casos, esses parâmetros de lançamento podem ser inseridos diretamente em um modelo de dispersão; mas em muitos outros casos, o termo fonte terá de ser determinado por cálculo - usando um modelo de termo fonte.

Tais modelos podem ser ferramentas autônomas, parte de um conjunto de modelos de análise de risco, ou mesmo embutido dentro do modelo de dispersão. Seja como for, o modelamento do termo fonte pode ter um impacto significativo no modelamento de dispersão subsequente (Ivings, Lea, Webber, Jagger, & Coldrick, 2013) (Ivings, et al., 2016).

### 3.3.3.2. Estimativa de Liberações de Material Químico

Entretanto, apesar da sua natureza como material radioativo, o hexafluoreto de urânio é classificado na determinação do termo fonte como um produto químico perigoso, assim como o fluoreto de hidrogênio (HF). Desta forma, os cálculos das características das liberações acidentais seguem o mesmo preconizado para outros produtos, como amônia, metanol, GLP e outros produtos químicos encontrados nas instalações do ciclo do combustível nuclear.

As características do termo fonte químico incluem taxa de liberação, temperatura, momento, orientação, altura e conteúdo de aerossol. Essas quantidades também são necessárias para a modelagem da dispersão atmosférica (NRC, 1998).

Mediante esta ampla faixa de características a serem analisadas, devemos envidar esforço na seleção do termo fonte adequado aos cenários de acidente numa instalação como a FCN-Enriquecimento. Portanto, este trabalho priorizou os cenários que possuem maior característica crítica do ponto de vista de segurança da instalação.

Exemplos de termo fonte químico em instalações do ciclo do combustível nuclear (CCN) são apresentados na Tabela 8.

**Tabela 8**– Exemplos de Termo Fonte Químico  
Fonte: (NRC, 1998)

<b>TERMO FONTE</b>	<b>EXEMPLO</b>
<b>Evaporação de piscina</b>	Derrame de ácido fluorídrico líquido Derrame de amônia refrigerada em área com contenção
<b>Jato líquido</b>	Jato de ácido fluorídrico Jato de amônia Liberação de hexafluoreto de urânio em cilindro pressurizado.
<b>Jato de vapor</b>	Liberação de amônia gasosa Liberação de hexafluoreto de urânio na forma gasosa
<b>Puff</b>	Liberação de grandes cilindros de hexafluoreto de urânio (30B e 48Y)

### 3.3.4. LIBERAÇÕES EM INTERIOR DE INSTALAÇÕES

As liberações internas de produtos químicos representam desafios complexos na avaliação de risco. Muitos fenômenos governam a liberação e o transporte de produtos químicos dentro dos prédios, exigindo uma abordagem caso a caso.

Uma vez liberados, os produtos químicos estão sujeitos a diluição nas salas, remoção por deposição superficial, remoção por sedimentação gravitacional e remoção por pulverização líquida (Owczarski, Burk, Ramsdell, & Yasuda, 1991).

As instalações do ciclo do combustível nuclear também apresentam caminhos de fluxo de liberação complexos por meio de dutos de ventilação, salas e filtros. As pressões de fluxo podem ser naturais ou forçadas, dependendo do tipo de construção e do cenário a ser modelado.

Se houver aerossóis presentes na liberação interna, eles podem depositar por vários mecanismos. Estes são a difusão browniana, a sedimentação por gravidade, a eletroforese, a termoforese, a difusióforese, a deposição turbulenta, a impactação inercial e a intercepção (Owczarski, Burk, Ramsdell, & Yasuda, 1991). Sobre determinadas condições, a sedimentação por gravidade pode ser o mecanismo dominante de sedimentação.

### 3.3.5. Transporte dentro de Instalações com Contenção e Confinamento

Uma vez que as liberações de produtos químicos tenham ocorrido, neste caso o hexafluoreto de urânio, procede-se a transmissão (transporte). Os modelos de transporte tentam estimar a intensidade e a duração da exposição, resultante da emissão para o ar, água ou solo, em razão de um certo número de parâmetros da emissão. Estes incluem: taxa e tamanho da exposição; forma da fonte (pontual, linha, área); posição da fonte (para o ar: altura acima do solo); para a emissão de matéria: se gás/vapor ou aerossol (líquido ou sólido), tamanho e densidade das partículas; distância entre a fonte emissora e os alvos; para o ar: condições de clima (velocidade e direção dos ventos, estabilidade atmosférica); condições da topologia (plana montanhosa etc.); para o solo: composição química e reações entre a atmosfera e os poluentes; e outros. (Brilhante & Caldas, 1999)

As descrições a seguir tratam do transporte na instalação e deposição de gases, gases pesados, vapores e partículas, juntamente com parâmetros de controle, física básica de aerossol e reações químicas no ar. O item enfatiza as partículas no ar, porque esses aerossóis parecem predominar em acidentes que podem ocorrer em instalações do ciclo do combustível nuclear.



O valor quantitativo que expressa a fração de material inicialmente transportado pelo ar que escapa com sucesso para a instalação é chamado Fator de fuga (FF). Para as partículas, o FF depende principalmente de três parâmetros: a taxa de fluxo do aerossol através da instalação, o tamanho das partículas e as áreas disponíveis para deposição.

Um dos objetivos deste trabalho foi estabelecer as ferramentas necessárias para definir a fração de material gerado por acidentes que escapa à instalação e, se desejado, as concentrações de material transportado pelo ar que tenha depositado dentro da instalação.

Dando continuidade à análise de risco, o termo fonte é avaliado na sua condução dentro e para fora da instalação. O resultado primário é a fração (para partículas, a fração respirável (FR)) do termo fonte que escapa da instalação, a FF. Os resultados secundários são as concentrações e os valores depositados na instalação dos termos fontes iniciais. Para obter esses resultados, devem ser seguidas as seguintes orientações (NRC, 1998):

- (1) identificar as barreiras da instalação que definem o caminho de fluxo do material no ar;
- (2) quantificar as forças motrizes que movem o material ao longo do percurso do fluxo;
- (3) quantificar as taxas de fluxo ao longo do caminho;
- (4) quantificar os efeitos de quaisquer salvaguardas criadas por mitigação (por exemplo, filtros);
- (5) quantificar os papéis dos processos de deposição ao longo do caminho do fluxo; e
- (6) estimar as concentrações na instalação durante o movimento do termo fonte no ar.

Em trabalhos produzidos com o intuito de realizar esta previsão de condições pertinentes ao termo fonte de liberação, modelos foram desenvolvidos. Bloom e seus colaboradores desenvolveram o modelo PLM89A para aplicação a liberações da UF<sub>6</sub>. Uma revisão do Departamento de Energia dos Estados Unidos (DOE) descobriu que o PLM89A foi satisfatório no tratamento da química e da termodinâmica do UF<sub>6</sub>, mas que foram necessárias melhorias em seu módulo de dispersão de gás denso. Além disso, o PLM89A não foi avaliado de forma abrangente. Por outro lado, o modelo HGSYSTEM (McFarlane, Prothero, Puttock, Roberts, & Witlox, 1990) satisfazia todos os requisitos de modelagem, com a exceção de que não continha tratamento da química e termodinâmica do UF<sub>6</sub>.

Em 1996 e 1997, (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996) realizaram estudos de avaliação do termo fonte em acidentes postulados de liberações de UF<sub>6</sub>, para uma instalação de difusão gasosa, este trabalho utiliza o modelo matemático (MELCOR - *Methods for Estimation of Leakages and Consequences of Releases*) que é capaz de simular o comportamento de

aerossóis e vapores, provenientes destas liberações. Além de ser capaz de prever variações espaciais nos interiores dos prédios, associado ao sistema de ventilação, fato bem pouco usual nos modelos desenvolvidos na época.

Em 2010, Kemp fez um estudo de possíveis termos fontes em instalações do ciclo do combustível (enriquecimento e conversão), através de levantamento histórico de declarações de liberações fornecidas a NRC, tal estudo é meramente ilustrativo, pois não aplica nenhum modelo matemático ou se baseia em conceitos concretos de emissão de termos fontes. Entretanto estabelece os principais termos fontes esperados em instalações do ciclo do combustível nuclear (CCN).

#### 3.3.5.1. Definição de Barreiras na Instalação

A definição do caminho de fluxo é importante porque os processos de mitigação que removem parte do material no ar podem ocorrer ao longo do caminho do fluxo. Esses processos de mitigação afetam o FP e fazem com que ele seja inferior a 1,0. Sob operações normais, o processo de exaustão ou aquecimento, filtros de sistemas de ventilação e ar condicionado (VAC), são considerados como importantes barreiras na instalação e podem reduzir FPs para uma fração muito menor de 1,0.

A estrutura da construção predial é a contenção primária para o acidente-base de projeto. É de suma importância que o caminho de fluxo do material aéreo seja cuidadosamente especificado para os cálculos de transporte. Cada parede, piso e teto ao longo do caminho do fluxo é uma possível superfície de deposição para partículas e vapores. Em muitas análises de acidente-base de projeto, o sistema de exaustão do prédio é a parte final do caminho do fluxo e ele desempenha um papel importante nos cálculos.

#### 3.3.5.2. Definição de Força Motriz para Transporte

As forças que podem mover materiais aéreos através e fora de uma instalação incluem sistemas de ventilação, incêndios e outras reações químicas, explosões e pressões externas do vento. Menos provável, mas ainda possível, é um colapso do prédio. O colapso do prédio não é discutido neste trabalho.

Por exemplo, ao ser levado em conta o sistema de ventilação, é assumido dentro do contexto do acidente-base de projeto que este sistema é responsável primário na movimentação

de material no ar. Além de estar estabelecido a partir das especificações de projeto as definições para os cálculos das taxas de fluxo de acidentes e os caminhos de fluxo.

Devido a necessidade de realizar os cálculos relativos as taxas de fluxo, foram estabelecidos métodos para cada tipo de força motriz apresentada. Métodos simplificados para o cálculo das taxas de fluxo incluem o uso de fluxos de projeto, cálculos de fluxo de gás estável, como os tirados do Crane Manual 410M (Crane Co., 1977), equações de fluxo de orifício e canal e curvas de fluxo geradas por código de computador.

É necessário considerar que as taxas de fluxo do sistema de ventilação atuando normalmente são especificadas no projeto dos sistemas. Para acidentes como quedas ou derrames que não afetem a temperatura ou a pressão do compartimento do acidente, o fluxo normal do sistema de ventilação estabelecido pelo projeto pode ser usado na análise de acidentes. Se a ocorrência do acidente mudar as forças de condução do sistema de ventilação em mais de alguns por cento, o uso das técnicas de análise mais complexas pode ser necessário. Se a perda de energia ocorre e os ventiladores param de funcionar, mas os dumpers permanecem abertos, métodos simplificados podem permanecer aplicáveis. Neste caso, os filtros normalmente se tornarão a resistência de fluxo dominante no sistema de ventilação. (Gregory, 1982)

#### 3.3.5.3. Cálculo de Taxas de Fluxo

Os métodos para estimar as taxas de fluxo do sistema citados na Seção 3.3.5.2 (anterior) são aplicáveis a redes de fluxo de série e paralelo relativamente simples, com interconectividade e recirculação limitadas. A limitação às condições de estado estável exige que a ocorrência do acidente não perturbe os fluxos preexistentes. Esta restrição pode ser encontrada em derramamentos de pó ou líquidos não voláteis, mas a liberação de grandes quantidades de gases em eventos de ruptura ou volatilização do tanque ou ocorrência de tornados, incêndios e explosões não seria bem representada pelo método de análise simplificado, conforme foi relatado por (Gregory, Martin, Smith, & Fenton, 1982), durante seus testes com filtros HEPA (*High efficiency particulate air*) para simular condições de acidentes em instalações do ciclo do combustível nuclear.

A simulação de sistemas de fluxo complexos ou de condições transitórias exige a solução de muitas equações algébricas ou diferenciais simultâneas sujeitas a restrições impostas por pressões externas e a dos componentes do sistema. Nesse caso, soluções computacionais

que utilizam abordagens de modelagem de parâmetros distribuídos ou agrupados são as ferramentas analíticas mais efetivas. As diferenças entre os modelos são listadas a seguir, na Tabela 9.

**Tabela 9**– Definição de modelos de parâmetros

**Fonte:** (NRC, 1998)

Modelos de Parâmetros Distribuídos	Modelos de Parâmetros Agrupados
Representam a distribuição tridimensional da geometria do sistema e das resistências de fluxo para prever a temperatura, pressão e taxas de fluxo em todos os pontos do sistema em função do tempo. Embora esses modelos sejam úteis em elementos específicos da análise de acidentes, eles não são suficientemente amplos para aplicação à variedade de condições de acidente.	Agregam capacidades de massa, impulso e energia e transferem resistências em volumes discretos, reduzindo assim a complexidade das equações governantes e permitindo a simulação de sistemas complexos com um nível de detalhe gerenciável.

Uma série de códigos de computador utilizando o modelo de parâmetros agrupados, conforme citado anteriormente na tabela (9), foram desenvolvidos por vários laboratórios de pesquisas, entre eles pode-se citar a seguir: Laboratório Nacional de Los Alamos, com os códigos EVENT (Gregory, 1983), TORAC (Andrae, 1985) e FIRAC (Nichols & Gregory, 1986), e o código MELCOR (Summers, 1991) desenvolvido no Sandia National Laboratories para a Nuclear Regulatory Commission (NRC) e o código próprio da NRC, utilizado pelo centro de operações de emergências, RASCAL (NRC, 2007), como uma ferramenta de avaliação de risco de plantas de segunda geração. Todos estes códigos foram úteis para representação de condições de acidentes em sistemas de ventilação de instalações do ciclo do combustível.

Este último código, MELCOR, foi o sucessor do “*Source Term Code Package*” (STCP) um conjunto integrado de códigos para a análise não determinística de acidentes severos e que representavam um grande avanço comparativamente as análises realizadas por intermédio do WASH-1400, elaborado em 1975. Todos estes códigos foram estabelecidos para atenderem as necessidades de análise de acidente em Reatores nucleares.

Deve reconhecer-se que os códigos deste tipo, embora de ampla aplicabilidade, não são úteis em todos os casos e exigem comprometimento do tempo no desenvolvimento da familiaridade com o uso e as limitações dos códigos, haja visto a evolução destes e em outros

códigos desenvolvidos nestes últimos 30 anos. Além disso, os códigos discutidos aqui não são os únicos códigos disponíveis para este tipo de análise, mas são representativos da abordagem analítica apropriada para a análise de acidentes.

#### 3.3.5.4. Atenuação de Materiais Aéreos ao Longo do Caminho de Fluxo

##### 3.3.5.4.1. Aerossóis

Esta seção aborda a importância do tamanho das partículas, juntamente com a física do aerossol, incluindo o papel da aglomeração, condensação, evaporação e dinâmica do gás.

##### 3.3.5.4.1.1. Processos De Deposição De Partículas

Todos os aerossóis tendem a ser instáveis. Essa instabilidade é causada pelas muitas forças que atuam sobre as partículas. Estes incluem a gravidade, os campos elétricos, a inércia, as colisões moleculares, a temperatura e os campos do peso molecular do gás, e as forças de van der Waals. Essas forças podem mover partículas dentro do gás. Qualquer superfície em contato com o aerossol pode servir como superfícies de deposição para partículas em movimento. Quando as partículas atingem uma superfície, elas podem aderir devido às forças atrativas de van der Waals. Os mecanismos mais importantes para depositar partículas nas superfícies de contato são (NRC, 1998):

Regulação da gravidade - A gravidade atua sobre todas as partículas, porém é mais importante em partículas maiores do que em partículas da ordem do micrão;

Difusão browniana - As partículas podem se mover na direção de um gradiente de concentração devido a colisões aleatórias com as moléculas de gás em aerossol;

Difusão turbulenta - Este processo lança partículas fora de redemoinhos turbulentos e é importante para partículas maiores que viajam em um gás de alta velocidade;

Termoforese. - As partículas são forçadas a descer um gradiente de temperatura;

Difusioforese. - Este mecanismo funciona se houver um gradiente de peso molecular no gás portador de aerossol e

Forças elétricas. - As próprias partículas podem ter cargas elétricas. Essas cargas podem causar aglomeração (atração de Coulomb de cargas opostas) e deposição em superfícies neutras induzindo cargas opostas na superfície;

Forças Inerciais. - As forças inerciais desempenham um papel importante na deposição, além da deposição turbulenta mencionada anteriormente. Quando um fluxo de aerossol de movimento rápido muda rapidamente de direção, as partículas maiores podem se mover facilmente da corrente e impactar a superfície causando a mudança de direção. Quantificar o crédito para esta deposição é muito difícil nesses caminhos de fluxo, a menos que as geometrias do caminho sejam bem compreendidas, o que é altamente improvável;

Interceptação. - Este mecanismo é importante na filtração onde as fibras do filtro interceptam diretamente as partículas na corrente de gás. A eficiência deste mecanismo parece aumentar à medida que a proporção do diâmetro da partícula/diâmetro da fibra aumenta. Este mecanismo é inerente à eficiência do leito de filtro.

#### 3.3.5.4.1.2. Métodos de Filtração e Mitigação

Em geral, a indústria nuclear utiliza os mesmos tipos de dispositivos de controle usados pelo setor comercial para controlar os materiais em partículas transportados pelo ar no processo e nas emissões nos gases de escape da instalação. Estes dispositivos variam de dispositivos mecânicos (como um ciclone) a vários dispositivos que resultam em contato entre a corrente de transporte de partículas e soluções aquosas (por exemplo, scrubbers, purificadores de Venturi), dispositivos eletromecânicos (precipitadores eletrostáticos), a muitas formas de filtração (p. ex., camas compactadas, filtros de saco, filtros de cartucho, filtros fibrosos com várias fibras, como celulose, amianto, outros materiais cerâmicos).

Muitos dos dispositivos utilizados são cobertos por (Moore, et al., 1984). Devido à necessidade de uma remoção muito eficiente de materiais particulados com diâmetros muito pequenos (partículas inferiores a 10  $\mu\text{m}$  (0,0004 in) Diâmetro Equivalente Aerodinâmico), a filtração é a técnica dominante empregada.

#### 3.3.5.4.2. Produtos Químicos

##### 3.3.5.4.2.1. Transportes de Produtos Químicos em Instalações

As instalações do ciclo do combustível nuclear constantes nas Indústrias Nucleares do Brasil (FCN- Reconversão/ Pastilhas e FCN-Enriquecimento) contêm produtos químicos como: amônia ( $\text{NH}_3$ ), HF e  $\text{UF}_6$ . O transporte de  $\text{UF}_6$ , que reage prontamente com a umidade no ar, também é discutido.

$\text{NH}_3$  e HF são gasosos em condições ambientais e são susceptíveis de representar um perigo para o transporte na instalação. Esses produtos químicos podem produzir uma variedade de termos de origem, tais como jatos de vapor, piscinas líquidas de evaporação lenta, jatos de líquido e liberação de nuvem. O transporte na instalação será muito afetado pelo modo de liberação e pela presença de gotas de líquido (se houver). As gotas de líquido melhoram a deposição e podem ser geradas durante as liberações instantâneas de  $\text{NH}_3$  e HF. (First, 1995)

#### 3.3.5.4.2.2. Transporte de $\text{UF}_6$ nas Instalações

Os lançamentos  $\text{UF}_6$  são possíveis em plantas de conversão, instalações de Enriquecimento de urânio e instalações de fabricação de combustível. Quando  $\text{UF}_6$  entra em contato com a umidade no ar, ele reage exotermicamente para formar um precipitado sólido,  $\text{UO}_2\text{F}_2$  e HF. Este comportamento exclusivo afeta o transporte de  $\text{UF}_6$  e seus produtos de reação dentro de uma instalação. As partículas  $\text{UO}_2\text{F}_2$  podem depositar dentro de uma instalação, HF é um agente oxidante forte e um material muito corrosivo. O vapor  $\text{UF}_6$  que não reagiu pode dessublimar e formar um sólido.

Uma melhor compreensão do transporte na unidade de  $\text{UF}_6$  pode ser obtida postulando um cenário de acidente em uma planta de difusão gasosa (PDG). Uma PDG contém muitos compressores que transportam por bombeamento  $\text{UF}_6$  gasoso através de vasos de aço cilíndricos grandes, conhecidos como conversores. Um compressor, um conversor e uma tubulação de interligação compõem um estágio. Grupos de oito estágios geralmente são chamados de célula. Grupos de dez células conectadas compõem uma unidade. Existem tipicamente seis a oito unidades na construção principal do processo de uma PDG, ou um total de 480 a 640 estágios. (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996)

Numa eventual ruptura proveniente de sobrepressão nas linhas, tem-se a liberação de material no interior das células, a taxa de liberação pode ser superior a 60kg/s por um período de 10 a 30 minutos (o equivalente a 36t ou 108t). A reação de  $\text{UF}_6$  com vapor de água pode ou não ocorrer, dependendo da umidade interior. É possível a deposição de aerossóis ( $\text{UF}_6$  sólido não reagido, precipitado  $\text{UO}_2\text{F}_2$  ou solução HF-água), conforme (Hu S. W., Lin, Wang, & Chu, 2014).

Os modelos de deposição de aerossóis são incorporados em modelos de transporte disponíveis nas instalações da NRC, como MELCOR (Summers, 1991) e CSCDSM (Williams, 1986). No entanto, esses modelos não levam em consideração o detalhado comportamento

termodinâmico do  $\text{UF}_6$  e seus produtos de reação. Assim, pressupostos simplificações são muitas vezes feitos. Estes podem assumir que a reação do  $\text{UF}_6$  é completa e / ou negligência a formação de uma solução aquosa não ideal de HF. Esses pressupostos podem levar à análise conservadora. Por exemplo, se a formação de solução aquosa de HF for ignorada, a quantidade de deposição de HF depositada pode ser subestimada e levar a maiores concentrações internas e externas. Da mesma forma, negligenciar a alta reatividade do HF com metal, vidro e mesmo concreto pode levar a uma superestimação das concentrações de HF no ar.



### 3.4. AVALIAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS

#### 3.4.1. Considerações Gerais de Modelagem Matemática

A modelagem matemática de um processo físico envolve esquematicamente os passos resumidos na Figura 18.

Este é um resumo muito geral do que está no centro do método científico. É uma receita para obter uma melhor compreensão dos processos físicos em questão.

Algumas coisas são geralmente consideradas tão óbvias (para os teóricos acadêmicos, entre outros) que não precisam ser ditas. Esses incluem:

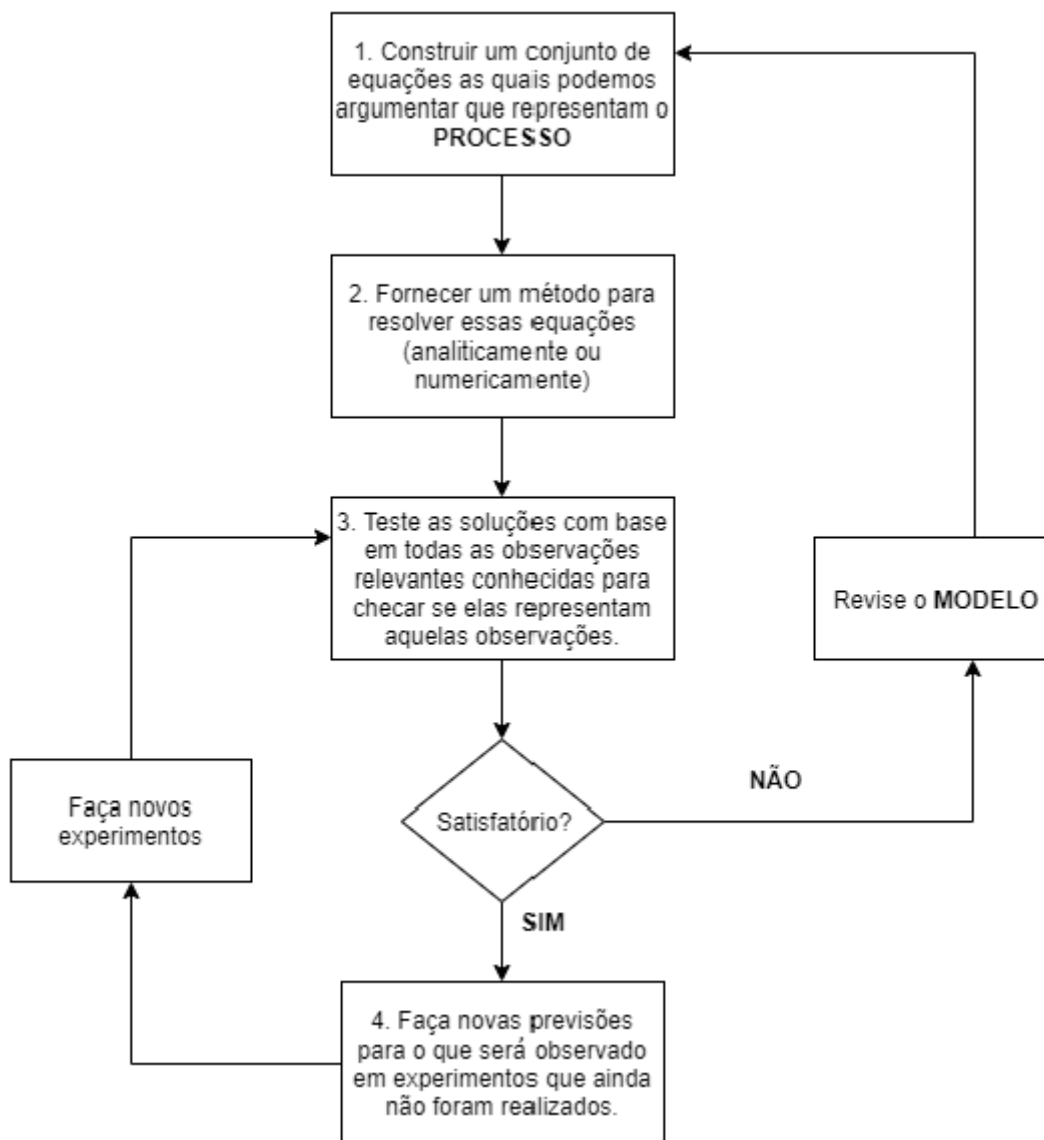
(i) Implícito no passo 1 é a ideia de que o modelo deve ser consistente com o que se sabe sobre fenômenos relacionados: o modelo deve ter uma base científica sólida. Sem isso, o procedimento é inútil;

(ii) Implícito no passo 2 é a ideia de que o procedimento da solução é preciso e, de fato, fornece uma solução das equações;

(iii) Implícita em tudo isso é o conceito de uma adequação à finalidade. Há alguma finalidade para a qual está a estudar o processo; o modelo deve satisfazer esse objetivo e as soluções devem ser suficientemente precisas para esse propósito

#### 3.4.2. Aplicação à Análise de Consequências para Segurança Industrial

Este processo está subjacente à modelagem de consequências na análise de risco industrial, onde é necessária uma compreensão do que pode acontecer em um acidente. As previsões são necessárias para as consequências de um acidente que talvez nunca aconteça, e pode ser tão grave que uma simulação experimental em escala total é impossível de realizar. Portanto, o processo chegaria ao passo 4 no diagrama de fluxo, com previsões para o acidente, mas sem nenhum meio de testar dados experimentais. Tal passo é o ponto limitante deste trabalho em relação a limitação da realização de experimentos, devido a legislação atribuída pelos órgãos reguladores nacionais, em especial a CNEN. Seria necessário estabelecer uma estrutura complexa, conforme relatado por (Hou, et al., 2007).



**Figura 18** – Esboço esquemático do modelamento matemático de um processo físico

**Fonte:** Adaptado (Ivings, et al., 2016)

Na Comunidade Europeia a filosofia de segurança levou a criação de grupos específicos para avaliação de modelos, que contemplam melhorar a cultura em que os modelos são desenvolvidos e utilizados e, assim, garantir que os modelos técnicos utilizados em todos os aspectos da avaliação de riscos estejam atualizados com os desenvolvimentos técnicos. Estes grupos enfatizam três aspectos importantes do procedimento, a seguir:

- ✓ A base científica: o modelo deve ser crível e adequado, (ver i)
- ✓ Verificação: deve-se mostrar que o procedimento de solução (geralmente um programa de computador) produz soluções das equações do modelo para uma precisão satisfatória (ver ii)
- ✓ Validação: o modelo deve demonstrar concordar com as observações experimentais relevantes com uma precisão satisfatória (ver iii)

O conceito de "validação" requer alguma consideração: a comparação com um experimento quase nunca pode mostrar que um modelo é "válido". O melhor que pode fazer é deixar de mostrar que o modelo é "inválido". Um modelo validado é, portanto, um onde os testes foram realizados, o que poderia ter mostrado que ele era inválido, mas que não conseguiu fazê-lo. (Ivings, et al., 2016)

A validação é um processo aberto (correspondente ao não encerramento do método científico descrito anteriormente), mas, na prática, ele termina quando alguém tem confiança suficiente no modelo.

### 3.4.3. Modelos Matemáticos Simplificados para Termos Fontes

Modelos computacionais foram desenvolvidos para simular o comportamento transitório de aerossóis e vapores como resultado de um acidente postulado que envolve a liberação de hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ) em prédios de processo de uma planta de difusão gasosa (Williams, 1986) e (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996). Como parte de uma avaliação de segurança em toda a instalação, este estudo avaliou os termos fontes que consistem em  $UO_2F_2$ , bem como HF durante uma liberação em um acidente postulado de  $UF_6$ , no prédio de processo.

Para o transporte de aerossóis, Williams (1986) especifica a sedimentação gravitacional a uma velocidade de deposição constante de 1cm/s. Este modelo (CSCDSM- Cascade Summer) considera apenas a deposição de aerossóis por sedimentação gravitacional e omite outros mecanismos. Também assumindo uma geometria simples para toda a construção do processo,

os efeitos espaciais da distribuição de aerossóis e possíveis equipamentos adicionais e superfícies de tubulação para a deposição de aerossóis também são negligenciados. A motivação do uso deste modelo neste trabalho foi a verificação do grau de conservadorismo em relação a outro modelo simplista e ao modelo computacional proposto neste trabalho.

Duas formas de deposição de aerossóis (sedimentação) são assumidas no CSCDSM. Um modo é totalmente arbitrário e o outro é físico. O modo arbitrário de sedimentação de aerossóis é aplicado apenas aos aerossóis do UF<sub>6</sub>. Quando é assumido o modelo isentrópico intermitente para condensação/vaporização do UF<sub>6</sub>, presume-se que quaisquer partículas de aerossol do UF<sub>6</sub> sejam depositadas no chão instantaneamente após a formação. Para a sedimentação gravitacional, uma velocidade constante de partícula de 1 cm/s para a sedimentação é considerada no código CSCDSM. A quantidade de aerossóis ( $\Delta m_d$ ) estabelecidos durante  $\Delta t$  é calculada como segue:

$$\Delta m_d = \frac{m_c}{V} v A \Delta t \quad (8)$$

Onde:

$m_c$  = massa do aerossol no tempo  $t$ , e esse valor continua mudando a cada passo, uma vez que é suposto que os aerossóis sejam misturados uniformemente na atmosfera de todo o volume de controle a cada passo;

$V$  = volume total do prédio,

$v$  = velocidade de deposição do aerossol, 1 cm/s;

$A$  = Área do piso.

A Equação (8) pode ser reescrita na forma diferencial como:

$$\frac{dm_d}{dt} = \frac{m_c(t)}{V} v A \quad (9)$$

Onde  $m_c(t)/V$  é a concentração do aerossol. A massa de aerossol no tempo  $t$ , pode ser expressa em termos da massa inicial no tempo  $t_0$ ,  $m_0$ , e massa depositada,  $m_d$ , como:

$$m_c(t) = m_0 - m_d(t) \quad (10)$$

A Equação (9) pode ser integrada para fornecer uma expressão analítica para a massa de aerossol depositado como uma função do tempo, Equação (11):

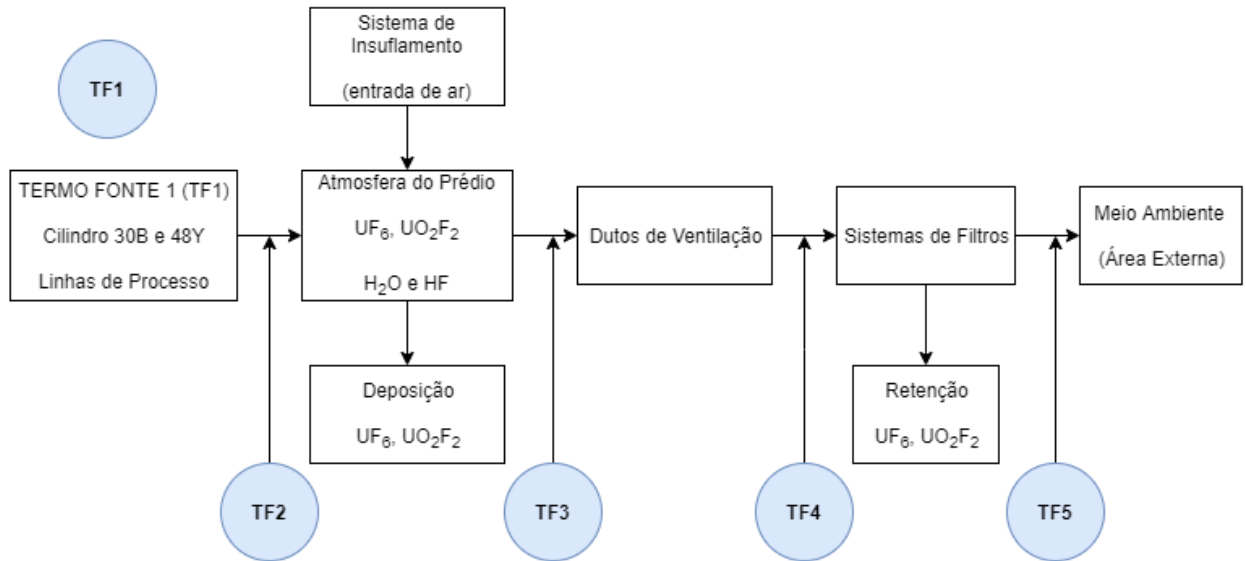
$$m_d(t) = m_0 \left( 1 - e^{-\frac{vA}{V}t} \right) \quad (11)$$

Com relação às equações descritas é possível prever a massa a ser depositada em função do tempo, no decorrer de uma eventual liberação de UF<sub>6</sub>. Tal quantidade de UF<sub>6</sub> é vislumbrada como potencial Termo Fonte de entrada para modelos de dispersão atmosférica.

Com base nas premissas apresentadas por (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009), o presente trabalho contempla algumas destas questões com relação a determinação de Termos Fontes (TF), seguindo uma abordagem mostrada esquematicamente na Figura 19. Termos fonte são definidos para cada passo da análise.

O primeiro termo fonte (TF1) corresponde ao material contido em cilindros, vasos de processo ou tubulação (material em risco). Este passo define a quantidade de material disponível para condições de liberação e de processo ou de armazenamento. Apenas uma parte da TF1 pode ser liberado para o edifício uma vez que algum UF<sub>6</sub> pode ser retido no interior dos equipamentos.

No presente trabalho foi assumida a quantidade (TF2) de UF<sub>6</sub> efetivamente liberado para a atmosfera do edifício para formar uma mistura homogênea ao longo de todo o edifício. Esta mistura reage com o ar úmido produzindo UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> e HF. Parte do UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> formado é depositado no chão e na superfície dos equipamentos. O material presente no ar é esgotado do edifício através dos ventiladores do sistema de ventilação (TF3). Os dutos de ventilação podem ainda manter algum UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> de tal modo que o material que chegar ao sistema de filtro é definido como TF4. O material (TF5) que deixar o sistema de filtro é o termo fonte atmosférico.



**Figura 19** – Definição de Termo Fonte (TF)  
**Fonte:** Adaptado (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009)

O termo fonte TF1 pode ser facilmente estimado considerando a quantidade do UF<sub>6</sub> contidos em cilindros, ou tubulação de processo; o processo ou condições de armazenagem; e o modo de falha potencial para serem considerados na análise. A avaliação dos termos fonte TF2 e TF3 exigem modelos específicos para simular as condições dependentes do tempo dentro de equipamentos e edifícios. (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009)

Oliveira Neto e colaboradores (2009) apresentaram em seu trabalho, relações inerentes aos termos fontes, culminando num modelo simples derivado para uma taxa de liberação constante de UF<sub>6</sub> no interior do edifício.

A concentração dependente do tempo pode ser contemplada usando a Equação (12):

$$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{Q_{UF6}}{V} - \frac{Q \cdot C(t)}{V} \quad (12)$$

Onde:

$Q_{UF6}$  = taxa de liberação UF<sub>6</sub> constante (kg / s);

$V$  = volume livre do compartimento (m<sup>3</sup>);

$Q$  = taxa de ventilação do compartimento (m<sup>3</sup> / s);

$C(t)$  = concentração dependente do tempo (kg/m<sup>3</sup>).

Assumindo, adicionalmente, que todo o UF<sub>6</sub> irá reagir com a umidade disponível no compartimento e que a velocidade de deposição UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> é constante, as seguintes equações podem ser escritas para t < T (em que T é o tempo de duração da liberação).

✓ Concentração de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>(C<sub>UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>)</sub>

$$\frac{dC_{UO_2F_2}(t)}{dt} = \frac{0,88 \cdot Q_{UF_6}}{V} - \frac{Q \cdot C_{UO_2F_2}(t)}{V} - \frac{C_{UO_2F_2}(t) \cdot v \cdot A}{V} \quad (13)$$

Onde:

v = taxa de deposição constante (kg/s);

A = Área de Deposição (m<sup>2</sup>).

✓ Massa de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> depositada (M<sub>UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>)</sub>

$$\frac{dM_{UO_2F_2}(t)}{dt} = C_{UO_2F_2}(t) \cdot v \cdot A \quad (14)$$

✓ Concentração de HF (C<sub>HF</sub>)

$$\frac{dC_{HF}(t)}{dt} = \frac{0,23 \cdot Q_{UF_6}}{V} - \frac{Q \cdot C_{HF}(t)}{V} \quad (15)$$

As resoluções das Equações (13), (14) e (15) resultam em:

$$C_{UO_2F_2}(t) = \frac{0,88 \cdot Q_{UF_6}}{V} \left( 1 - e^{-\frac{(A \cdot v + Q)}{V} \cdot t} \right) \quad (16)$$

$$M_{UO_2F_2}(t) = \frac{0,88 \cdot A \cdot v \cdot Q_{UF_6}}{(A \cdot v + V)^2} \left[ A \cdot v \cdot t + Q \cdot t + \left( -1 + e^{-\frac{(A \cdot v + Q)}{V} \cdot t} \right) \cdot V \right] \quad (17)$$

$$C_{HF}(t) = \frac{0,23 \cdot Q_{UF6}}{Q} \left(1 - e^{-\frac{Q}{V} \cdot t}\right) \quad (18)$$

Para  $t > T$ , as concentrações são dadas pelas seguintes expressões:

✓ Concentração de  $UO_2F_2$  ( $C_{UO_2F_2}$ )

$$C_{UO_2F_2}(t) = C_{UO_2F_2}(T) \cdot e^{-\frac{(A \cdot v + Q)}{V} \cdot (t-T)} \quad (19)$$

✓ Massa de  $UO_2F_2$  depositada ( $M_{UO_2F_2}$ )

$$M_{UO_2F_2}(t) = \frac{M_{UO_2F_2}(T) Q + A \cdot v \cdot V \left[ M_{UO_2F_2}(T) + C_{UO_2F_2}(T) \cdot \left(1 - e^{-\frac{(A \cdot v + Q)}{V} \cdot (t-T)}\right) \right]}{(A \cdot v + Q)} \quad (20)$$

✓ Concentração de HF ( $C_{HF}$ )

$$C_{HF}(t) = C_{HF}(T) \cdot e^{-\frac{Q}{V} \cdot (t-T)} \quad (21)$$

O método descrito anteriormente é aplicável a taxa de liberação constante (TF2) e assume que todo  $UF_6$  irá reagir com a umidade para produzir  $UO_2F_2$  e HF. Em situações mais gerais e realistas, no entanto, o termo fonte  $UF_6$  (TF2) será dependente do tempo. Para estes casos, outros métodos devem ser utilizados para descrever as condições transientes no interior de equipamentos contendo  $UF_6$  e prédios de processo.

O termo fonte TF3 para  $UO_2F_2$  e HF pode então ser avaliado pela expressão:

$$TF3(t) = Q \cdot C(t) \quad (22)$$

E a massa total liberada para o prédio é dada por:

$$M = \int_0^t V \cdot C(t) \cdot dt \quad (23)$$



A estimativa de TF2 e TF3 dependentes do tempo deverá ser regida pelo uso de métodos computacionais, levando em conta que as concentrações devem ser avaliadas utilizando modelos de ventilação do interior dos prédios de processo, fato este que geralmente não tem sido contemplado nas avaliações de risco nas instalações do ciclo do combustível. Um modelo com este intuito é muito útil nas previsões pertinentes aos interiores dos prédios de processo.

#### 3.4.4. Modelos de Turbulência k-Épsilon

O modelo matemático para simulação do escoamento consiste em sistemas de equações de continuidade de Navier-Stokes, de conservação de energia e equações de modelo de turbulência. No modelo de turbulência k- $\epsilon$  (k-épsilon), k representa a energia cinética de turbulência e  $\epsilon$  a dissipação do redemoinho de turbulência (taxa na qual as flutuações de velocidade se dissipam). O modelo k-épsilon enquadra-se na classe dos chamados modelos de duas equações. É também o mais largamente utilizado, pois oferece boa representação de uma ampla gama de fenômenos a baixo custo computacional. O nome das duas equações vem do fato das escalas de velocidade e de comprimento assumirem uma equação de transporte cada.

Segundo Liu (2017), o estudo da turbulência continua sendo um problema científico multidisciplinar não completamente resolvido. Como um dos exemplos mais conhecidos em fluxos turbulentos, o conhecimento do perfil de velocidade média logarítmica (MVP), a chamada *log law* da parede, desempenha um papel importante em todos os lugares em que a turbulência se encontra com a parede sólida, como fluidos de quaisquer tipos de canais. No entanto, o mecanismo de como esse MVP de registro é formado sob a natureza multi-escalar de cisalhamento turbulento continua sendo um dos maiores interesses dos quebra-cabeças de turbulência.

No caso do modelo k-épsilon, são duas as variáveis empregadas: a energia cinética turbulenta (k), que representa a variância das autuações na velocidade, e a dissipação da energia cinética turbulenta ( $\epsilon$ ), que quantifica a taxa à qual se dá a dissipação das autuações de velocidade. Este modelo faz uso da hipótese da viscosidade turbulenta, que considera que a turbulência pode ser modelada como sendo um aumento na difusividade. Assim, a viscosidade é dividida em duas contribuições, uma laminar e a outra turbulenta.

Para Dutta e colaboradores (2016), a escolha certa de um modelo de turbulência é fundamental quando um problema de escoamento turbulento industrial é enfrentado,

especialmente quando este problema envolve fenômenos de escoamento tridimensional, que necessita de uma modelagem precisa.

O modelo de simulações de escoamento  $k - \epsilon$  padrão é o modelo mais usado atualmente em simuladores de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) e não requer condição de contorno não homogênea, como no caso dos modelos que usam a taxa de dissipação específica de energia cinética turbulenta (Miranda, Nascimento Jr., & Rezende, 2013). No modelo  $k - \epsilon$  padrão, a energia cinética turbulenta,  $k$ , é derivada de sua equação exata, enquanto a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta,  $\epsilon$ , é obtida através da intuição física sobre os fenômenos.

O modelo  $k - \epsilon$  RNG é derivado de técnicas estatísticas da teoria de grupo de renormalização (RNG, do inglês Re-Normalization Group) e tem um termo extra na taxa de dissipação que melhora a precisão dos resultados para fluidos submetidos à tensão (Lima & Caetano, 2015). Muitos autores recomendam o uso de modelos de turbulência (RSM, do inglês Reynolds Stress Models), mas este modelo requer um alto tempo de computação. Portanto, a fim de melhorar o custo computacional, o modelo  $k$ -épsilon RNG modificado é largamente utilizado para escoamento turbulento (Luna & Cerón, 2017).

#### 3.4.5. Lei de Parede

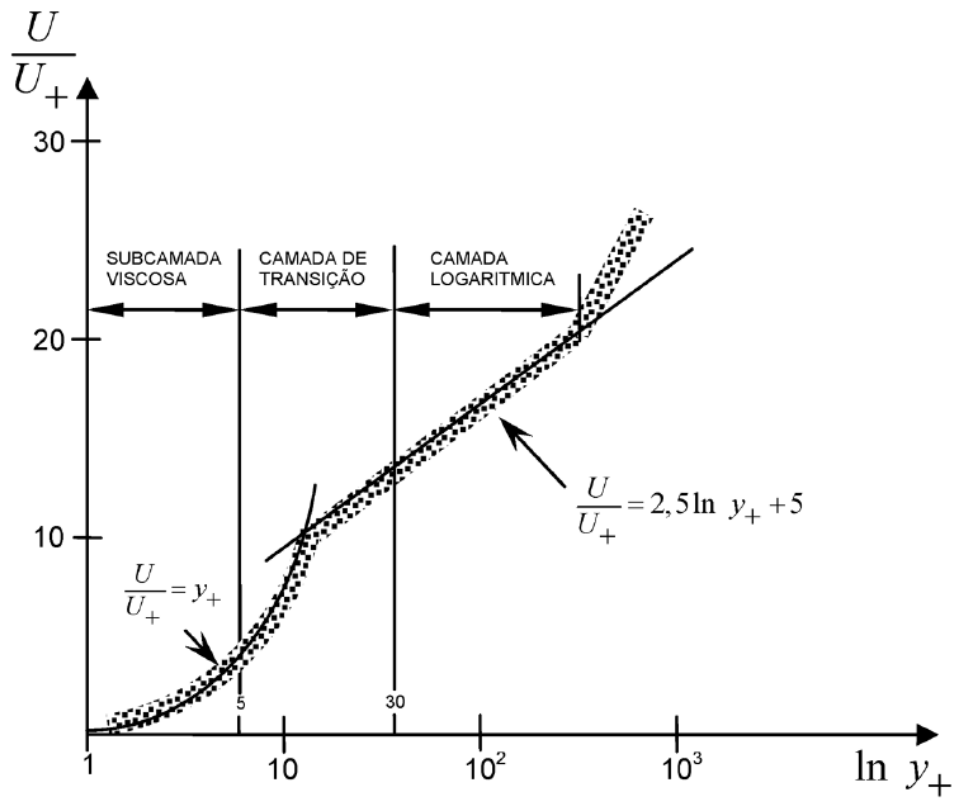
Os escoamentos turbulentos são afetados pela condição física de não deslizamento sobre as paredes. Os efeitos viscosos amortecem as componentes tangenciais de velocidade, enquanto os efeitos cinéticos do escoamento nas vizinhanças amortecem as flutuações normais à parede. Em direção ao núcleo turbulento, os altos gradientes de velocidade geram energia cinética turbulenta,  $k$  (Neto & Soares, 2014).

A maioria dos modelos de turbulência são deduzidos para escoamentos afastados das paredes - núcleos turbulentos. Considerações são necessárias a fim de tornar estes modelos utilizáveis para escoamentos limitados por paredes. Em consequência, modelos acurados para esta região de escoamentos são de extrema importância para a precisão do restante dos resultados. Estes modelos que avaliam o comportamento dos escoamentos próximos à parede são derivados das chamadas Leis de Parede.

Leis de parede é uma ferramenta muito popular para escoamentos a altos números de Reynolds, pois permite economizar tempo computacional, e por serem robustas, relativamente precisas e populares para escoamentos industriais.

Experimentos evidenciam que a região próxima à parede, designada aqui como camada limite turbulenta de um escoamento turbulento, pode ser subdividida em três regiões Figura (20), segundo a direção normal da mesma (Neto & Soares, 2014) (Souza, Oliveira, Azevedo, Soares, & Mata, 2011).

- *Subcamada viscosa (camada linear)*: Onde os efeitos da viscosidade e as difusões moleculares são predominantes e o escoamento é praticamente laminar;
- *Camada de Transição*: Região intermediária entre a subcamada viscosa e a região de turbulência da camada limite turbulenta. Região chamada de camada amortecida (*buffer layer*), onde os efeitos da viscosidade molecular e da turbulência são similares; e
- *Região de Turbulência (Camada Logarítmica)*: Nesta região o escoamento é plenamente turbulento, dominando o processo de agitação.



**Figura 20** - Perfil de Velocidade junto a uma superfície sólida  
**Fonte:** (Souza, Oliveira, Azevedo, Soares, & Mata, 2011)

No entanto, a lei de parede não é recomendada para escoamentos a baixos números de Reynolds, além de escoamentos com presença de regiões de recirculação e com descolamento de camada limite. Nestes casos, recomenda-se modelos adaptados a escoamentos para baixos números de Reynolds integráveis até a parede.

## 4. METODOLOGIA

### 4.1. Modelos utilizados no Estudo

O conceito principal usado durante toda a formulação de volumes finitos é o princípio de conservação de uma determinada quantidade física expressa pelas equações governantes sobre qualquer volume finito, também denominado volume de controle. O domínio é discretizado num conjunto de volumes de controle não sobrepostos, que podem ser irregulares no tamanho e na forma. Os valores de uma variável são armazenados no centroide dos volumes de controle, ou seja, nos vértices dos triângulos da malha. As equações discretizadas da variável dependente são obtidas integrando a equação governante sobre cada um dos volumes de controle no domínio (Gonçalves, 2007).

As equações que governam o escoamento de fluidos são as equações na forma geral de conservação da massa, quantidade de movimento e de energia (Versteeg & Malalasekera, 2007). Para definir a dedução das equações do movimento, é preciso determinar o somatório das forças por unidade de volume:

$$\frac{\Sigma F}{dV} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_R \phi) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_R \phi) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho w_R \phi) \quad (24)$$

$$\frac{\Sigma F_x}{dV} = \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yx}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zx}) + B_x \quad (25)$$

$$\frac{\Sigma F_y}{dV} = \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yy}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zy}) + B_y \quad (26)$$

$$\frac{\Sigma F_z}{dV} = \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xz}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zz}) + B_z \quad (27)$$

Realizando os balanços de forças para as três direções coordenadas Equações (25), (26) e (27) e inserindo na Equação (24), obtêm-se as equações do movimento para as três direções, como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_R \cdot u) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_R \cdot u) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho w_R \cdot u) \\ = \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yx}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zx}) + B_x \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_R \cdot v) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_R \cdot v) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho w_R \cdot v) \\ = \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yx}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zx}) + B_x \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho w) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_R \cdot w) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_R \cdot w) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho w_R \cdot w) \\ = \frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yx}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zx}) + B_x \end{aligned} \quad (30)$$

A especificação das equações constitutivas, que fazem a relação entre o tensor tensão ( $\tau_{ij}$ ) e a taxa de deformação ( $\delta_{ij}$ ), cria as equações especializadas para cada fluido ou classe de fluidos. Para fluidos newtonianos o tensor tensão é dado pela Equação (31) (Maliska, 2004):

$$\tau_{ij} = -P\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \text{div} V \quad (31)$$

A forma final das equações de Navier-Stokes para fluidos newtonianos está representada pelas equações a seguir. Na Equação (34) a componente  $S^T$  representa o calor referente a reação de hidrólise e trocas térmicas do ar com o UF<sub>6</sub> no interior do prédio, além da conservação de espécies químicas, escritas no sistema cartesiano de coordenadas.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + S^{\mu_i} \quad (33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho T C_p) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j T C_p) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{k}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S^T \quad (34)$$

Onde  $u_i$  representa a componente do vetor velocidade no sistema cartesiano  $x_j$ ,  $\rho$  é a massa específica do fluido. O termo  $S^T$ , designado por fonte, engloba todos os outros termos que podem ser convectivos ou difusivos. O termo  $k$  é a condutibilidade térmica e  $C_p$  o calor específico.

#### 4.1.1. Modelamento das Equações de Transporte

Para modelar o processo de liberação acidental de hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ), foi proposto um modelo matemático bifásico (sólido-gás) com multicomponentes tridimensionais. O modelo consiste na interação de duas fases, onde a espécie química de cada fase é calculada baseada na equação de conservação para cada espécie química. A modelagem matemática segue a hipótese de meio contínuo e, como tal pode ser expresso por equações de transporte de massa, quantidade de movimento e energia.

As equações utilizadas no modelo representam os princípios de conservação de quantidade de movimento (momentum), energia e massa, também conhecida como equação da continuidade. Em um escoamento multifásico, como os componentes encontram-se misturados, pode-se caracterizar a presença de cada componente por sua fração molar ou por sua fração mássica.

As equações foram resolvidas em um complexo código computacional utilizando software Fortran 90/95 e o modelamento utilizado para o trabalho foi desenvolvido com base no modelo MPHMTTP (Multi Phase Heat and Multi Transfer Program) de (Castro, 2000).

O modelo MPHMTTP foi utilizado por se tratar de um modelo já testado e conhecido, em várias simulações nas áreas de engenharia metalúrgica e de materiais. No entanto foram necessárias alterações e complementações para contemplar a fenomenologia característica dos termos fontes na liberação de  $UF_6$ . As mudanças realizadas dizem respeito às equações que representam a turbulência e as equações de fechamento para velocidade e temperatura na camada limite turbulenta próxima as paredes do interior do prédio.

As equações de momentum, energia, continuidade e espécies químicas, contempladas no modelo de (Castro, 2000), são apresentadas a seguir:

Equação de Momentum

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i u_j) + \text{div}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i u_j) = \text{div}(\alpha_i \mu_{eff} \text{grad}(u_j)) - \text{grad}(P_i) + F_i^j \quad (35)$$

Equação de Energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i E_i) + \text{div}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i E_i) = \text{div}\left(\frac{\lambda_{eff}}{C_{p,i}} \text{grad}(E_i)\right) + \sum_{i=1}^{n \text{ reagentes}} R_i \Delta h_i + E_i^j \quad (36)$$

Equação de Massa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \text{div}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i) = \sum_{i=1}^{n \text{ reagentes}} R_i \quad (37)$$

Equação das Espécies Químicas

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \phi_{i,k}) + \text{div}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i \phi_{i,k}) = \text{div}\left(\alpha_i \frac{D_k^i}{\alpha_i \rho_i} \text{grad}(\phi_{i,k})\right) + \sum_{i=1}^{n \text{ reagentes}} R_i \beta_k \quad (38)$$

Onde:

$i$  e  $j$  representam as fases a serem consideradas: gás, sólido ou líquido.

$\rho_i$  representa a densidade da fase  $i$  [kg/m<sup>3</sup>]

$\alpha_i$  representa a fração volumétrica da fase  $i$

$u_j$  representa os componentes da velocidade

$\mu_{eff}$  representa a viscosidade efetiva da fase  $i$  [kg/m. s]

$\vec{U}_i$  representa o vetor velocidade da fase  $i$

$P_i$  representa a pressão da fase  $i$  [Pa]

$F_i^j$  representa a interação de momentum entre as fases  $i$  e  $j$

$F_i^i$  representa a interação de momentum na fase  $i$

$E_i$  representa a energia específica [J]

$\lambda_{eff}$  representa a condutividade térmica efetiva [W/m. K]

$C_{p,i}$  representa o calor específico da fase  $i$  [J/mol. K]

$\Delta h_i$  representa a variação da entalpia [J]

$E_i^j$  representa a energia da fase  $i$  [J]



$\sum_{i=1}^{n_{reagentes}} R_i^j$  representa o somatório das massas geradas devido às reações químicas [kg]

$\phi_{i,k}$  representa a fração mássica da fase  $i$

$D_k^i$  representa o coeficiente de difusão da espécie  $k$  na fase  $i$  [m<sup>2</sup>/s]

$\beta_k$  representa os parâmetros cinéticos da fase  $i$

Os termos das equações de momentum e energia para o coeficiente efetivo de difusão que dependem da variável de estado a ser resolvida, viscosidade ( $\mu$ ) e condutividade térmica ( $\lambda$ ) respectivamente, devem considerar o incremento da parcela da turbulência nestas variáveis.

Assim, considerou-se para a equação de momentum a viscosidade efetiva,  $\mu_{eff}$ , onde  $\mu_{eff}$  é a soma da viscosidade dinâmica da fase  $i$  ( $\mu_i$ ), somando-se a viscosidade de turbulência, ( $\mu_T$ ).  $\mu_T$  é escrita como função da energia cinética turbulenta, conforme Equação (40), para altos números de Reynolds (Hodapp, 2012):

$$\mu_{eff} = \mu_i + \mu_T \quad (39)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (40)$$

Sendo  $k$  e  $\varepsilon$  obtidos das equações de transporte modificadas para o modelo de turbulência (item 4.1.2),  $C_\mu$  é constante do modelo e  $\rho$  massa específica da fase.

A Equação de energia (36) considera o termo da condutividade térmica efetiva  $\lambda_{eff}$ , que é calculada pela soma da condutividade do material ( $\lambda_i$ ), mais a condutividade térmica turbulenta ( $\lambda_T$ ), onde  $\lambda_T$  é escrita como função da difusividade térmica turbulenta, conforme Equação (42) (Bird, Stewart, & Lightfoot, 2004):

$$\lambda_{eff} = \lambda_i + \lambda_T \quad (41)$$

$$\lambda_T = \varphi_T \rho C_p \text{ ou } \lambda_T = \frac{\mu_T C_p}{Pr_T} \quad (42) \quad (43)$$

Sendo  $\varphi_T$  a difusividade térmica turbulenta,  $\rho$  a massa específica da fase,  $C_p$  o calor específico e  $Pr_T$  o número de Prandtl turbulento.

#### 4.1.2. Modelo de Turbulência

A turbulência é um fenômeno presente inclusive nas liberações acidentais de UF<sub>6</sub>, no qual as partículas do fluido se misturam de forma não linear, e é representada através de diversos modelos de turbulência. Conforme mencionado anteriormente, neste trabalho em específico, foi proposto o modelo  $k$ - $\varepsilon$  (Epsilon) para representar esta fenomenologia. O modelo  $k$ - $\varepsilon$  apresenta vantagens por ser um modelo simples, necessitando somente de condições iniciais e de contorno para sua aplicação. Possui um ótimo desempenho para a maioria dos escoamentos relevantes da indústria, além de ser o modelo mais validado com dados experimentais (Sant`Anna, Sarmento, Silva, Medronho, & Lucena, 2015).

No modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$ ,  $k$  é a energia de turbulência e é definida como a variação das flutuações de velocidade e  $\varepsilon$  é a dissipação de energia turbulenta (a taxa na qual as flutuações de velocidade se dissipam e é definido pela seguinte equação:

$$v_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (44)$$

Onde os valores de  $k$ - $\varepsilon$  são calculados pelas seguintes equações de transporte, de forma geral:

Para energia cinética turbulenta  $k$ :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho U_j k - \frac{v_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) = P_k - \rho \varepsilon \quad (45)$$

Para dissipação  $\varepsilon$ :

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho U_j \varepsilon - \frac{\nu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (46)$$

onde  $C_\mu$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$  são constantes retiradas de (Launder & Spalding, 1974) e  $P_k$  é a produção de turbulência devido a forças viscosas.

Para o fechamento das equações de transporte do modelo contínuo dependentes de  $k$  e  $\varepsilon$ , estes serão obtidos pela solução das equações de transporte para estas variáveis. Neste trabalho serão utilizadas as equações para  $k$ - $\varepsilon$  modificadas com o termo adicional, que inclui a transferência de momento turbulento entre as fases (Hodapp, 2012) (Farias, 2010):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i k_i) + \text{div}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i k_i) = \text{div} \left[ \alpha_i \left( \mu_i + \frac{\mu_{T,i}}{\sigma_k} \right) \text{grad}(k_i) \right] + \alpha_i (G_{k,i} - \rho_i \varepsilon_i + \rho_i \Pi_{k,i}) \quad (47)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \text{div}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i \varepsilon_i) = \text{div} \left[ \alpha_i \left( \mu_i + \frac{\mu_{T,i}}{\sigma_\varepsilon} \right) \text{grad}(\varepsilon_i) \right] + \alpha_i \frac{\varepsilon_i}{k_i} (C_{1\varepsilon} G_{k,i} - C_{2\varepsilon} \rho_i \varepsilon_i) + \alpha_i \rho_i \Pi_{\varepsilon,i} \quad (48)$$

As equações dos parâmetros utilizados no modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$  estão descritas na Tabela (10) e as constantes foram descritas na Tabela (11) (Hodapp, 2012).

**Tabela 10:** Equações do Modelo de Turbulência  
**Fonte:** Adaptado (Hodapp, 2012)

Equações dos parâmetros	Equação
-------------------------	---------

Viscosidade Turbulenta	$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$	(49)
Produção de energia cinética na fase $i$	$G_{k,i} = -\rho u_i u_j' \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$	(50)
Influência da fase $i$ na fase $j$	$\Pi_{k,i} = \frac{\beta}{\alpha_i \rho_i} (k_{i,j} - 2k_j + \vec{u}_{i,j} \vec{u}_{dr})$	(51)
	$\Pi_{\varepsilon,i} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_i}{k_i} \Pi_{k,i}$	(52)
Covariância entre as velocidades das fases $i$ e $j$	$k_{i,j} = 2k_j \left( \frac{b + \eta_{i,j}}{1 + \eta_{i,j}} \right)$	(53)
Velocidade de Arraste	$\vec{u}_{dr} = - \left( \frac{D_i}{\sigma_{i,j} \alpha_i} \nabla \alpha_i - \frac{D_j}{\sigma_{i,j} \alpha_j} \nabla \alpha_j \right)$	(54)
Razão de tempo característico	$\eta_{i,j} = \frac{\tau_{ti,j}}{\tau_{Fi,j}}$	(55)
Tempo de relaxamento das partículas	$\tau_{Fi,j} = \frac{\alpha_j \rho_j}{\beta} \left( \frac{\rho_i}{\rho_j} + C_U \right)$	(56)
Tempo integral Lagrangeano	$\tau_{ti,j} = \frac{\tau_{tj}}{\sqrt{1 + C_\beta \xi^2}} \quad \xi = \frac{ \vec{u}_{i,j}  \tau_{t,j}}{L_{i,j}}$	(57)
	$C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \varpi$	(58)
	$C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \varpi$	(59)
Tempo característico da fase contínua	$\tau_{t,j} = \frac{3}{2} C_\mu \frac{k_j}{\varepsilon_j}$	(60)
Comprimento de escala dos turbilhões da fase contínua	$L_{i,j} = \sqrt{\frac{3}{2}} C_\mu \frac{k_j^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon_j}$	(61)
Difusividade de cada fase	$D_i = D_{ti,j} + \left( \frac{2}{3} k_i - b \frac{1}{3} k_{i,j} \right) \tau_{Fi,j}$	(62)
	$D_{ti,j} = \frac{1}{3} k_{i,j} \tau_{ti,j}$	(63)
Turbulência para a fase dispersa	$k_i = k_j \left( \frac{b^2 + \eta_{i,j}}{1 + \eta_{i,j}} \right) \quad b = 1 + C_U \left( \frac{\rho_i}{\rho_j} + C_U \right)^{-1}$	(64)
		(65)

**Tabela 11:** Constantes do modelo  $k-\varepsilon$

Fonte: Adaptado (Hodapp, 2012)

Parâmetros	Símbolo	Valor
------------	---------	-------

Constante do Modelo k-ε	$C_\mu$	0,0845
Constante do Modelo k-ε	$C_{1\varepsilon}$	1,44
Constante do Modelo k-ε	$C_{2\varepsilon}$	1,92
Constante do Modelo k-ε	$C_{3\varepsilon}$	1,20
Número efetivo de Prandtl	$\sigma_k = \sigma_\varepsilon$	1,00
Número de Prandtl Turbulento	$\sigma_{i,j} = Pr_T$	0,75
Coefficiente de adição de massa	$C_U$	0,50

Para o desenvolvimento deste trabalho, foram previstos os seguintes procedimentos:

O código foi escrito em linguagem FORTRAN 90/95, utilizando a teoria básica do autômato celular. O programa foi escrito estruturadamente e dividido em rotinas como demonstrado a seguir:

- ✓ Módulo: contém a definição de todas variáveis globais utilizadas pelo código.
- ✓ Principal (Main): essa sub-rotina é dividida em três sub-rotinas: pré-processamento, processamento e pós-processamento.
- ✓ Pré-processamento: nessa sub-rotina as condições iniciais (entrada de dados) são introduzidas no sistema. A partir da leitura dos dados iniciais a malha é gerada e são definidos todos os vizinhos de cada célula.
- ✓ Processamento: essa sub-rotina é responsável pela formação do UF<sub>6</sub> gasoso e pela nucleação e crescimento das partículas sólidas, na qual todos os dados são gerados.
- ✓ Pós-processamento: a partir dos dados gerados na sub-rotina de processamento, todos os arquivos gráficos de saída de dados são gerados para posterior interpretação.

#### 4.1.3. Lei de Parede

Lei de parede, são relações empíricas que são utilizadas para ligar a região viscosa com o núcleo turbulento. Uma das maiores vantagens desse método é a possibilidade de se modelar altos gradientes de camadas cisalhantes próximos à parede com malhas relativamente grosseiras, gerando uma economia substancial de tempo e armazenamento de CPU. Assume-se que o perfil logarítmico é uma aproximação razoável da distribuição de velocidade próxima à parede, promovendo uma forma de calcular numericamente a tensão de cisalhamento como função da velocidade, numa dada distância da parede (Neto & Soares, 2014).

Souza e seus colaboradores (2011), realizaram em seu trabalho o desenvolvimento para as equações das leis de parede demonstrando as correlações para velocidade e todo seu desenvolvimento para a camada limite turbulenta. Partiu-se da condição de nenhum deslizamento, ou seja, o fluido é estacionário junto à parede sólida. De acordo com a lei da viscosidade de Newton, a tensão de cisalhamento na superfície  $\tau_w$  é expressa pela equação:

$$\tau_w = \rho \nu_T \frac{du}{dy} \quad (66)$$

Sendo a subcamada viscosa muito fina, supõe-se que a tensão de cisalhamento permanece constante ao longo de toda a sua espessura. Assim, integrando-se a Eq. (66) ao longo desta espessura têm-se como resultado uma equação que governa o perfil da velocidade  $u_p$  na subcamada viscosa, dada por:

$$u_p = \frac{\tau_w}{\rho \nu_T} y \quad (67)$$

Na obtenção desta equação linear foi considerado que a velocidade  $u_p$  é nula quando  $y=0$  (condição de nenhum deslizamento – condição de contorno). Por isso, algumas vezes, a região viscosa é também chamada de subcamada linear.

Uma importante relação no estudo da camada limite é a chamada velocidade de atrito,  $u_\tau$ :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (68)$$

E pode ser expressa em função da constante  $C_\mu$  e da energia cinética turbulenta  $k$ , dada por:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} = C_\mu^{1/4} \sqrt{k} \quad (69)$$

Dividindo-se a Equação (67) por  $u_\tau$ , obtém-se uma relação adimensional para a velocidade e para a distância normal à parede, da seguinte forma:

$$\frac{u_p}{u_\tau} = \frac{\sqrt{\tau_w / \rho}}{v_T} y \quad (70)$$

Analogamente,

$$\frac{u_p}{u_\tau} \equiv u^+ \text{ e } \frac{\sqrt{\tau_w / \rho}}{v_T} y \equiv y^+ . \quad (71) (72)$$

onde  $u^+$  e  $y^+$  definem, respectivamente, a velocidade e a distância em termos adimensionais. A subcamada viscosa é muito fina e se estende da superfície até  $y^+ = 5$  Figura (20) e da Equação (70), conclui-se que nessa região  $u^+ = y^+$ , mostrando a relação linear que existe entre os adimensionais.

Definido os parâmetros para a subcamada viscosa  $y^+ \leq 5$ , define-se agora para a região de turbulência na camada limite. Para  $y^+ > 30$  (Kundu & Cohen, 2002) existe uma região onde os efeitos de inércia dominam e o escoamento é turbulento. Nesta região, a tensão de cisalhamento  $\tau_w$  varia suavemente com a distância à parede, fazendo com que a forma do perfil de velocidade mude em relação ao da subcamada viscosa. Após manipulação algébrica, obtém-se o perfil de velocidade para a subcamada turbulenta, o qual se configura na Equação (73) (Souza, Oliveira, Azevedo, Soares, & Mata, 2011):

$$\frac{u_p}{u_\tau} = u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + A \quad (73)$$

onde  $\kappa$  é a constante de Von Kármán e  $A$  é uma constante de integração (constante de log-law), (Ma, et al., 2017), cujo valor é obtido experimentalmente.

Sendo  $y^+ = \frac{yu_\tau \rho}{\mu_T} = \frac{yu_\tau}{\nu_T}$ , tem-se:

$$\frac{u_p}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{yu_\tau}{\nu_T}\right) + A \quad (74)$$

Sendo  $\kappa = 0,4$  e  $A = 5,0$  (Santos – 2011), tem-se:

$$\frac{u_p}{u_\tau} = 2,5 \ln\left(\frac{yu_\tau}{\nu_T}\right) + 5,0 \quad (75)$$

As Equações (70) e (75), as quais descrevem os dois perfis de velocidade nas regiões viscosa e turbulenta, respectivamente, estão representados na Figura 20.

Estas condições de contorno são aplicáveis apenas quando o primeiro ponto adjacente à parede estiver dentro da região logarítmica, ou seja,  $y^+ > 30$ . Tais condições não são aplicáveis para regiões de deslocamento. No entanto, na prática, este fato é ignorado e se aplica mesmo nestas regiões, na ausência de melhores modelos. Contudo, se tais zonas forem extensas, os erros podem ser relevantes. Outro problema ocorre ao usar malhas muito finas. Neste caso o primeiro ponto fica aquém desta cota e os resultados certamente se deterioram.

Para a determinação da temperatura  $t^+$  na camada limite turbulenta, parte-se da equação para o fluxo térmico turbulento  $q_T''$ :

$$q_T'' = \rho C_p \overline{uT} \quad (76)$$

Para uma temperatura de cisalhamento  $t_\tau$  próximo a parede, temos:

$$t_\tau = \frac{q_W''}{\rho C_p u_\tau} \quad (77)$$

onde  $q_W''$  é o fluxo de calor na parede.



A temperatura adimensional  $t^+$  em termos das variáveis internas passa a ser:

$$t^+ = \frac{(T - T_w)}{t_\tau} \quad (78)$$

Na subcamada viscosa a turbulência é amortecida e o escoamento é dominado pela difusão molecular ( $\mu$  e  $\lambda$ ). Isto vale para  $y^+ < 5$ . O fluxo de calor constante é devido somente à condução molecular,  $\lambda$ . Assim o para o fluxo de calor na parede tem-se:

$$q_w'' = \lambda \frac{(T - T_w)}{y} \quad (79)$$

Substituindo a Equação (79) em (77), tem-se:

$$t_\tau = \frac{\lambda(T - T_w)}{\rho C_p u_\tau y} \quad (80)$$

Rearranjando:

$$\frac{(T - T_w)}{t_\tau} = \frac{\rho C_p u_\tau y}{\lambda} \quad (81)$$

Sendo a difusividade térmica  $\varphi = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ , tem-se a Equação (81) da seguinte

forma:

$$t^+ = \frac{u_\tau y}{\varphi} \quad (82)$$

O número de Prandtl é  $Pr = \frac{\nu}{\varphi}$ , onde  $\nu$  é a viscosidade cinemática. Substituindo

na Equação (82) a difusividade térmica em função de Pr e  $\nu$ , tem-se:

$$t^+ = \frac{Pr u_\tau y}{\nu} \quad (83)$$

Chegando-se à relação:

$$t^+ = Pr y^+ \quad (84)$$

Analogamente:

$$t^+ = \frac{1}{\kappa_T} \ln(y^+ Pr) + B \quad (85)$$

onde  $\kappa_T$  é uma constante determinada por  $\kappa_T = \frac{\kappa}{Pr_T}$ , e B é uma constante calculada em função de Pr (Medeiros, 1990).

Assim, pode-se considerar para o modelamento da temperatura na região logarítmica da camada limite turbulenta:

$$t^+ = \frac{Pr_T}{\kappa} \ln(y^+ Pr) + B(Pr) \quad (86)$$

Tais relações também foram observadas por (Kader, 1981) para aplicação de funções de parede em relação a temperatura, desta forma são adotadas relações empíricas para ligar as temperaturas nas vizinhanças de paredes de fluxo de calor.

$$\theta^+ = Pr y^+ e^{-r} + [2,12 \ln(1 + y^+) + \beta(P_r)] e^{-\frac{1}{R}} = 0 \quad (87)$$

Neste trabalho foi considerado que as paredes do prédio não possuem interferência pelo fluxo de calor externo, então temos  $t^+ = \theta^+ = 0$

#### 4.1.4. Modelo Cinético

A cinética química busca analisar e caracterizar os fatores que influenciam a velocidade de uma dada reação química e identificar os mecanismos com que ela se processa. Embora muito estudadas, a cinética das reações apresenta ainda diversas discussões sobre a validade dos vários modelos desenvolvidos para representação do processo físico-químico.

Os mecanismos cinéticos e físico-químicos da hidrólise do hexafluoreto de urânio foram pesquisados e alguns trabalhos foram publicados. Porém dada a relevância da hidrólise do UF<sub>6</sub>, o número limitado de estudos publicados focando os detalhes desta reação é bastante surpreendente.

Em 1954, (Brooks, Garner, & Whitehead, 1956) finalmente estudaram a reação UF<sub>6</sub> + H<sub>2</sub>O e descobriram que um produto de decomposição empírica UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>.H<sub>2</sub>O, que é uma mistura equimolecular de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> anidro e UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> \* 2H<sub>2</sub>O, é formado. A reação é: UF<sub>6</sub> + 3 H<sub>2</sub>O - UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>.H<sub>2</sub>O + 4 HF

Em 1967, (Otey & LeDoux, 1967) analisaram a formação de um novo composto (U<sub>3</sub>O<sub>5</sub>F<sub>8</sub>) a partir da reação de grande excesso de UF<sub>6</sub> com pequenas quantidades de água e obtiveram material termicamente estável a 408°C, mas reagindo rapidamente com a água

formando  $UO_2F_2$ . Neste mesmo ano, (Kessie, 1967) investiga a taxa de hidrólise do  $UF_6$  gasoso em reator de leito fixo, em temperaturas de 134 a 212°C e foi demonstrado, através do ajuste de dados experimentais, que a taxa de reação geral poderia ser descrita pela seguinte equação :

$$R = \frac{K P_{UF_6} P_{H_2O}}{1 + K_1 P_{UF_6} + K_2 P_{HF}} \quad (88)$$

Onde:

R = taxa da reação, [mg U/ (h.cm<sup>2</sup>)]

K = constante da taxa;

P = pressão parcial do componente subscrito na superfície, [mm Hg];

K<sub>1</sub> e K<sub>2</sub> = constantes de adsorção.

Nos artigos publicados por (Pickrell, 1980) e (Pickrell, 1982), foram estudadas as liberações controladas de  $UF_6$  e a caracterização dos produtos formados. Desta forma, foi elaborada uma câmara específica para dispersar de forma controlada através de uma bomba com quantidades e fluxos determinados de  $UF_6$ .

Ao iniciar a reação com a liberação do  $UF_6$ , ocorre rápida formação de uma “fumaça branca” (aerossol) do  $UO_2F_2$  que se dispersa por toda a câmara de liberação. A dispersão pode ser rápida, mas geralmente requer alguns minutos para equilibrar toda a câmara. Estes estudos, relacionaram a morfologia dos produtos e indicaram que tanto a morfologia das partículas agregadas e as distribuições de tamanhos são dependentes da umidade relativa do ar, temperatura do  $UF_6$  e tempo após a liberação.

Em 1984, (Pickrell, 1984), analisou que condições dinâmicas são cenário nos quais o fluxo de vento está entre 0,6 e 1,2 m/s e que condições catastróficas são aquelas nas quais as liberações são rápidas e ocorre a evaporação do  $UF_{6(l)}$ . Estas considerações são importantes devido a relação estabelecida entre o modo de liberação afetar a distribuição do tamanho da partícula, uma vez que é consequência da taxa inicial de dispersão e o efeito subsequente da aglomeração de partícula.

Em 1989, (Reiner, 1989) avaliou a hidrólise em excesso de  $UF_6$  e neste trabalho foi realizado medições cinéticas da hidrólise e estequiometria, através de análises de FTIR (Fourier Transform Infrared Spectroscopy) a fim de estabelecer que o mecanismo estudado é mais complexo que a simples reação em fase gasosa, pela observação que o consumo inicial de  $UF_6$

é significativamente maior do que o previsto sugerindo a existência de um produto metaestável ou de outro mecanismo.

Neste estudo, Reiner conclui que embora a reação elementar indique uma reação de terceira ordem, sendo de primeira ordem em concentração de  $UF_6$  e segunda ordem em concentração de  $H_2O$ . E que em excesso de  $UF_6$ , a concentração de  $UF_6$  não é alterada durante a hidrólise e pode ser constante, que deve haver outro tipo de relação na qual justifique os resultados obtidos. No caso da Equação (1), descrever a hidrólise do  $UF_6$  na fase gasosa, a taxa de formação de  $UO_2F_2$  pode ser descrita como segue a seguir:

$$\frac{d}{dt} [UO_2F_2] = K [UF_6][H_2O]^2 \quad (89)$$

Onde:

$[UO_2F_2]$  = Concentração de  $UO_2F_2$ , mol/L

$[UF_6]$  = Concentração de  $UF_6$ , mol/L

$[H_2O]$  = Concentração de  $H_2O$ , mol/L

Infelizmente, devido ao mecanismo mais complexo que o previsto, temos que o consumo de água e produção de HF são essencialmente completos de forma instantâneo (< 0,1 min), mas as mudanças na concentração de  $UF_6$  podem continuar por minutos.

A estequiometria da reação fornece evidências que a reação elementar não descreve o mecanismo de hidrólise em excesso de  $UF_6$ , pois cada mole de  $H_2O$  deve consumir 0,5 mole de  $UF_6$  e produzir 2 moles de HF (Reiner, 1989). Na Tabela 12 encontra-se um resumo das relações específicas para as razões de reação obtidas neste trabalho, considerando que os valores obtidos para as pressões iniciais de  $UF_6$ ,  $H_2O$  foram descritas como  $[UF_6]_i$  e  $[H_2O]_i$  e pressões de  $UF_6$  consumido em  $t = 0$  e pressões de HF formado em  $t = 0$  foram descritas como  $\Delta[UF_6]_0$  e  $\Delta[HF]_0$ .

**Tabela 12:** Resumo da estequiometria da hidrólise de UF<sub>6</sub>

Fonte: Adaptado (Reiner, 1989)

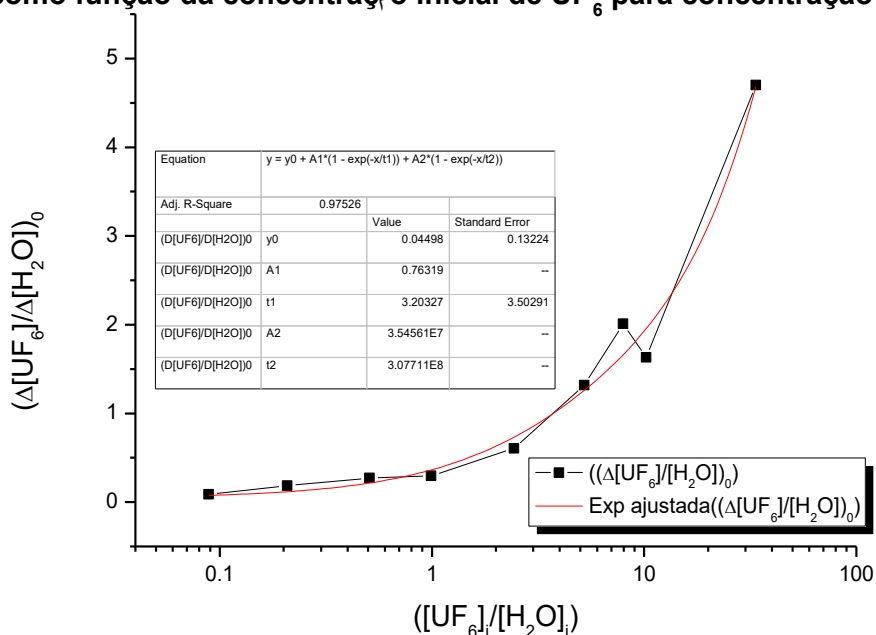
[UF <sub>6</sub> ] <sub>i</sub> (Torr)	[H <sub>2</sub> O] <sub>i</sub> (Torr)	([UF <sub>6</sub> ] <sub>i</sub> /[H <sub>2</sub> O] <sub>i</sub> )	Δ[UF <sub>6</sub> ] <sub>0</sub> (Torr)	(Δ[UF <sub>6</sub> ]/Δ[H <sub>2</sub> O]) <sub>0</sub>	Δ[HF] <sub>0</sub> (Torr)	(Δ[HF]/Δ[H <sub>2</sub> O]) <sub>0</sub>
0	11,1	0,00	0,00	0,00	2,5	0,23
0,95	10,7	0,09	0,95	0,09	2,2	0,21
2,14	10,3	0,21	1,92	0,19	4,0	0,39
4,97	9,8	0,51	2,66	0,27	4,9	0,50
10,1	10,2	0,99	3,02	0,30	5,8	0,57
25,3	10,4	2,43	6,30	0,61	6,3	0,61
52,8	10,1	5,23	13,30	1,32	7,0	0,69
90,7	11,4	7,96	22,90	2,01	7,9	0,69
97	9,5	10,21	15,50	1,63	7,0	0,74
100,9	3	33,63	14,10	4,70	4,8	1,60

A partir destes dados experimentais, os quais demonstram que as razões entre estequiometria e cinética desta reação não são condizentes, sugeriu-se uma possível relação alternativa, na qual foi considerado uma estequiometria com seus coeficientes variantes, de forma a obter a constante cinética possível para a relação entre UF<sub>6</sub> e H<sub>2</sub>O.

Com base na cinética da reação experimental apresentada, não foi proposto um modelo cinético, mas realizado uma formalização através de regressão dos valores obtidos experimentalmente Tabela (12). Com os resultados obtidos foi possível obter uma relação na qual a constante cinética é calculada.

Na Tabela (12), podemos verificar que existe uma zona inicial considerada como subestequiometria, que é desconsiderada na análise cinética inicial, células nas quais a relação entre UF<sub>6</sub> e H<sub>2</sub>O são menores que 0,5, relação mínima estabelecida pela reação elementar, Equação (1). Mesmo mantendo [H<sub>2</sub>O]<sub>i</sub> em valores praticamente constantes, não é obtido variação na relação entre Δ[HF]/Δ[H<sub>2</sub>O], que deveria ser igual a 2. A partir do gráfico da relação entre Δ[HF]/Δ[H<sub>2</sub>O] x [UF<sub>6</sub>]/[H<sub>2</sub>O]<sub>i</sub> Figura (21) foi possível observar a zona de inflexão que denota a área onde temos consumo de UF<sub>6</sub> e H<sub>2</sub>O e sua relação com a concentração inicial destes reagentes da hidrólise.

**Consumo de UF<sub>6</sub> por mol de H<sub>2</sub>O,  
como função da concentração inicial de UF<sub>6</sub> para concentração de H<sub>2</sub>O**



**Figura 21:** Relação entre concentrações iniciais de UF<sub>6</sub> e H<sub>2</sub>O

A partir dos dados da Tabela (12), foi calculado os moles de cada reagente e seu produto, assim como o número total de moles para cada experimento realizado. Na Tabela (13) a seguir é observado que a [UF<sub>6</sub>]<sub>i</sub> ao ser duplicada e a [H<sub>2</sub>O]<sub>i</sub> mantida em valores praticamente constantes, é obtida uma relação entre [UF<sub>6</sub>]<sub>i</sub> e [UF<sub>6</sub>]<sub>0</sub> que está entre 50% e chega ao máximo de 25% de consumo de UF<sub>6</sub>, indicando que mesmo após o completo consumo de H<sub>2</sub>O e formação de HF, ainda existe [UF<sub>6</sub>] no sistema, que não obedece a estequiometria da reação elementar. Neste caso é necessário propor uma nova estequiometria e considerar sua cinética.

**Tabela 13:** Resumo da estequiometria da hidrólise de UF<sub>6</sub>  
**Fonte:** Autor

[UF <sub>6</sub> ] <sub>i</sub> mol	[H <sub>2</sub> O] mol	n total	[UF <sub>6</sub> ] <sub>o</sub> mol	[HF] <sub>o</sub> mol
0,00E+00	5,22E-04	5,22E-04	0,00E+00	1,18E-04
4,47E-05	5,03E-04	5,48E-04	4,47E-05	1,03E-04
1,01E-04	4,84E-04	5,85E-04	9,02E-05	1,88E-04
2,34E-04	4,61E-04	6,94E-04	1,25E-04	2,30E-04
4,75E-04	4,79E-04	9,54E-04	1,42E-04	2,73E-04
1,19E-03	4,89E-04	1,68E-03	2,96E-04	2,96E-04
2,48E-03	4,75E-04	2,96E-03	6,25E-04	3,29E-04
4,26E-03	5,36E-04	4,80E-03	1,08E-03	3,71E-04
4,56E-03	4,47E-04	5,01E-03	7,29E-04	3,29E-04
4,74E-03	1,41E-04	4,88E-03	6,63E-04	2,26E-04

Com base nas concentrações iniciais e do produto formado e considerando que no caso da Equação (1), descrever a hidrólise do UF<sub>6</sub> na fase gasosa, a taxa de formação de HF pode ser descrita de forma generalizada como segue a seguir:



$$\frac{d}{dt} [\text{HF}]^y = K [\text{UF}_6]^n [\text{H}_2\text{O}]^m \quad (91)$$

Onde:

[HF] = Concentração de HF, mol/L;

[UF<sub>6</sub>] = Concentração de UF<sub>6</sub>, mol/L;

[H<sub>2</sub>O] = Concentração de H<sub>2</sub>O, mol/L;

n, m, x e y = coeficientes cinéticos/ estequiométricos.

Porém como já descrito, não existe uma correlação entre a estequiometria através da Equação (90) que indique obedecer às regras de reações de terceira ordem, da Equação (1). Entretanto, ao avaliar os coeficientes (n e m), surge uma possibilidade que foi considerada neste trabalho, a de coeficientes variantes.

De forma a estabelecer uma relação entre os resultados obtidos experimentalmente para a concentração de HF, conforme a Tabela (13), foi realizado uma formalização dos coeficientes através da Equação (91), considerando, inclusive, os coeficientes fracionários. Os resultados são resumidos nas Tabelas 14 e 15.

**Tabela 14:** Formalização dos coeficientes cinéticos

Fonte: Autor

relação cinética/ relação estequiométrica (1) e (0,5)	relação cinética/ relação estequiométrica (0,5) e (0,5)	relação cinética/ relação estequiométrica (0,5) e (1)	relação cinética/ relação estequiométrica (1) e (1)	relação cinética/ relação estequiométrica (1) e (2)	relação cinética/ relação estequiométrica (1) e (3)
[UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]	[UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]	[UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]	[UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]	[UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]	[UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]
3,89E-03	2,21E-04	4,86E-06	4,87E-08	2,36E-11	1,14E-14
7,64E-03	3,28E-04	7,04E-06	1,08E-07	4,96E-11	2,28E-14
1,24E-02	4,77E-04	1,04E-05	2,28E-07	1,09E-10	5,23E-14
2,09E-02	7,62E-04	1,69E-05	5,81E-07	2,84E-10	1,39E-13
3,45E-02	1,09E-03	2,36E-05	1,18E-06	5,59E-10	2,65E-13
4,52E-02	1,51E-03	3,50E-05	2,28E-06	1,22E-09	6,56E-13
4,98E-02	1,43E-03	3,01E-05	2,04E-06	9,09E-10	4,06E-13

**Tabela 15:** Formalização constante cinética da hidrólise de UF<sub>6</sub>

Fonte: Autor

relação cinética/ relação estequiométrica (0,5) e (0,5) [UF <sub>6</sub> ].[H <sub>2</sub> O]	k' (min <sup>-1</sup> )	[HF] mol
2,21E-04	8,33E-01	1,84E-04
3,28E-04	7,14E-01	2,34E-04
4,77E-04	5,71E-01	2,73E-04
7,62E-04	3,85E-01	2,93E-04
1,09E-03	3,03E-01	3,29E-04
1,51E-03	2,44E-01	3,69E-04
1,43E-03	2,33E-01	3,32E-04

Entre estes resultados, os valores obtidos para os coeficientes estequiométricos  $n = 0,5$  e  $m = 0,5$  demonstraram uma reação de cinética de primeira ordem, assim como estabelecido também por (Kessie, 1967), apresentando similaridade entre os dados para a concentração de HF. Foi estabelecida variação dos coeficientes, conforme a Tabela 14, entretanto não foi possível obter os mesmos resultados. A partir da formalização encontrada, foi calculada a constante cinética  $K'$  (Tabela 15), que é utilizada na simulação da hidrólise do UF<sub>6</sub>.

A composição do aerossol e a taxa de amostragem foram investigadas usando amostradores estacionários, segundo dados experimentais de (Bostick, McCulla, & Pickrell, 1985), para a coleta seletiva de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> e HF e via sensoriamento remoto espectroscópico a laser (espectroscopia de infravermelho e dispersão de Mie). Aparentemente, uma redução exponencial é observada na concentração de massa (ou molar) de ambos os componentes U (VI) e HF hidratado da fase gasosa em função do tempo. Este tipo de comportamento é



frequentemente observado em aerossóis, e é atribuído à coagulação e sedimentação de partículas. Empiricamente, os dados podem ser descritos por uma expressão de forma:

$$C/C_o = \exp(-K.t) \quad (92)$$

Onde:

C = Concentração mássica instantânea do aerossol, mol/L;

C<sub>o</sub> = Concentração mássica no instante inicial, mol/L;

t = Tempo decorrido da liberação, min;

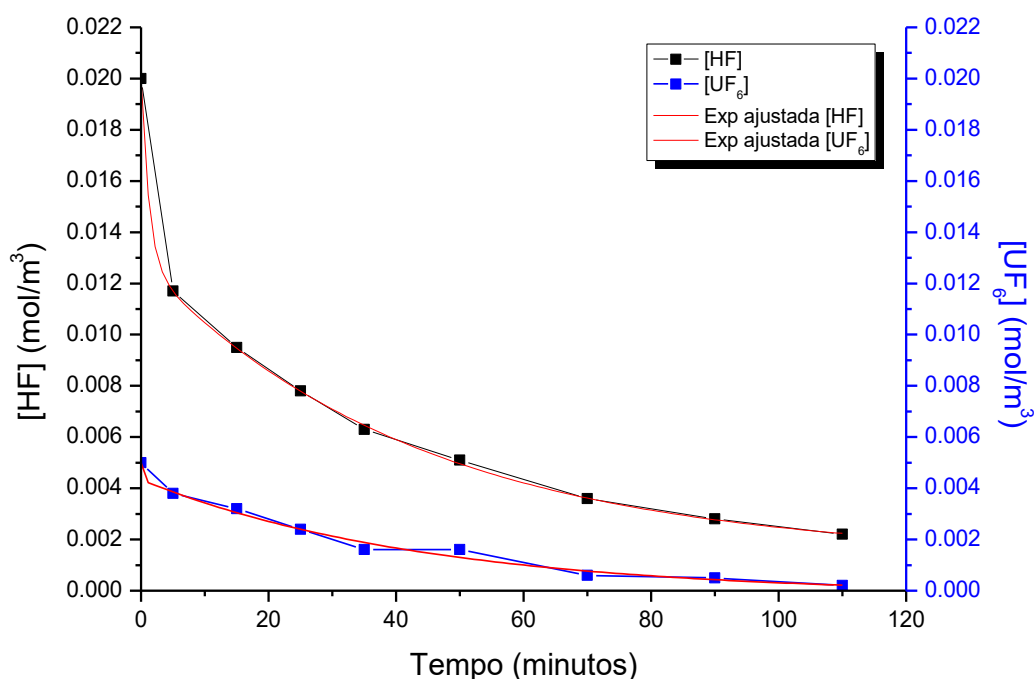
K = Constante de perda de massa, min<sup>-1</sup>.

Para os dados obtidos, K é estimado como 0,0162 min<sup>-1</sup> para HF e 0,0283 min<sup>-1</sup> para U (VI) (i.e., o componente U (VI) assenta quase duas vezes mais rapidamente). No experimento, a "meia-vida" para o material transportado pelo ar é 43 min para HF e 25 min para U (VI). Para experimentos realizados dentro de um volume fechado, a magnitude de uma constante de perda de massa de aerossol é relatada para aumentar com um aumento no movimento do ar (turbulência). Estes dados também serão constituintes como parâmetros da simulação da liberação e hidrólise do UF<sub>6</sub> (Tabela 16 e Figura 22).

**Tabela 16:** Concentração de aerossóis medidos após liberação de UF<sub>6</sub>

**Fonte:** Adaptado (Bostick, McCulla, & Pickrell, 1985)

tempo (minutos)	Concentração [mol/m <sup>3</sup> ]	
	HF	U(VI)
0	2.00E-02	5.00E-03
5	1.17E-02	3.80E-03
15	9.50E-03	3.20E-03
25	7.80E-03	2.40E-03
35	6.30E-03	1.60E-03
50	5.10E-03	1.60E-03
70	3.60E-03	6.00E-04
90	2.80E-03	5.00E-04
110	2.20E-03	2.00E-04
0	2.00E-02	5.00E-03



**Figura 22:** Gráfico das medidas de aerossóis seguidas de liberação atmosférica de UF<sub>6</sub>

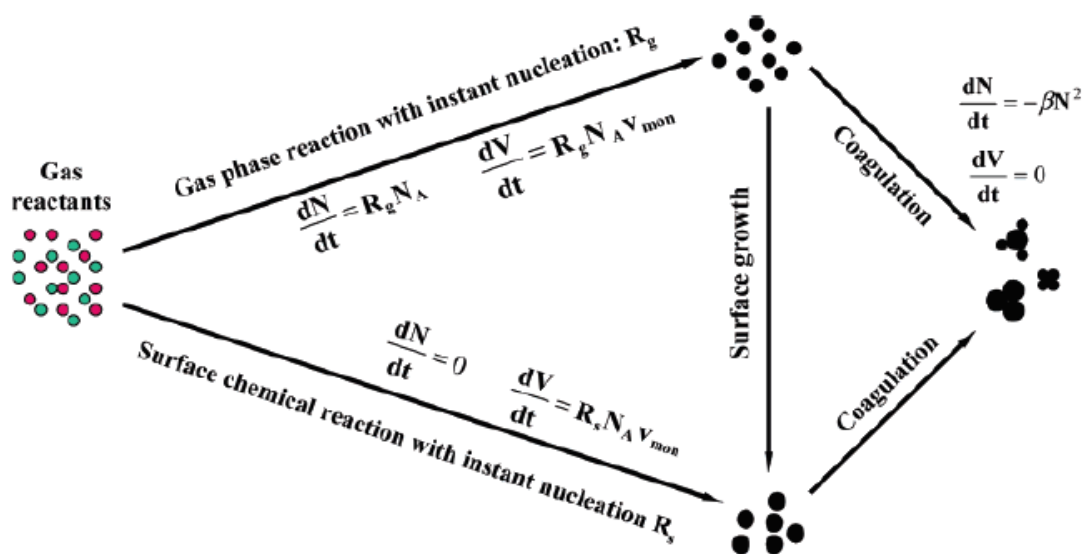
#### 4.1.5. Modelo de formação de aerossóis

É geralmente aceito que o crescimento inicial das partículas de aerossol começa com a formação de monômeros, como resultado de reações químicas de reagentes gasosos ou precursores que crescem por adição de monômeros em grupos de tamanho mínimo estável. O crescimento adicional de partículas pode ocorrer através de dois processos diferentes: o processo de formação acionado por nucleação, no qual as partículas crescem por meio de reação e coagulação da superfície, ou o processo acionado por coagulação, no qual o crescimento de partículas é governado principalmente por colisões Brownianas inter-partículas.

Com base na teoria de crescimento de partículas em aerossol, (Friedlander, 1977) e (Pratsinis, 1998) a evolução inicial de partículas em nosso sistema caracterizaria a formação de monômeros UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> via hidrólise em fase gasosa do vapor de UF<sub>6</sub> e a formação de aglomerados de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, com crescimento ocorrendo por adições de monômeros subsequentes. Nesta fase, o crescimento de partículas é considerado principalmente governado pela reação superficial dos gases adsorvidos. Isso se refletiu nas observações experimentais feitas por (Hou, et al., 2007), que revelaram a presença dominante de partículas primárias monodispersas,

independentemente do processo, isso é uma indicação de que a reação da superfície foi um mecanismo importante para o crescimento de partículas no primeiro segundo do tempo de permanência.

À medida que a reação química se desenvolve, os reagentes esgotam através da formação de monômeros e pela superfície de reação química. Conseqüentemente, a coagulação, devida as colisões entre partículas, se torna o mecanismo dominante de crescimento de partículas. Levando a formação de aglomerados ao longo dos percursos de liberação de UF<sub>6</sub>, conforme a Figura (23) (Hou, et al., 2007)



**Figura 23:** – Diagrama esquemático dos diferentes estágios de mecanismos de crescimento de partículas de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>

**Fonte:** (Hou, et al., 2007)

#### 4.1.6. Fases e reações químicas envolvidas no modelo

As fases consideradas no modelo serão gás e sólido. As fases e os componentes estão listados na Tabela 17 a seguir:

**Tabela 17:** Fases e espécies químicas consideradas no modelo

Fases	Espécies Químicas (i)
Gasosa (g)	NO, O <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, N <sub>2</sub> O, UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> , UF <sub>6</sub> , HF
Sólida (s)	UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> , UF <sub>6</sub> , HF

As principais reações químicas existentes para o processo de hidrólise, proveniente de liberações acidentais de UF<sub>6</sub> para o ambiente, são apresentadas na Tabela 18. As reações foram obtidas conforme revisão bibliográfica, em reatores de leito fixo ou sistemas isolados e confinados. Entretanto, o que de fato determina a ocorrência de uma reação a dada temperatura, são os valores das variáveis termodinâmicas calculadas a partir das entalpias padrões de formação  $H_f^{298}$  para cada reação. Os dados de  $H_f^{298}$  são obtidos da literatura e listados na Tabela 19.

**Tabela 18:** Reações Químicas Consideradas no Modelo

<b>Reações químicas</b>	
$UF_{6(s)} + 2 H_2O_{(v)} \rightarrow UO_2F_{2(s)} + 4 HF_{(v)} + \Delta H$	(93)
$UF_{6(s)} + H_2O_{(v)} \rightarrow UOF_{4(s)} + 2 HF_{(v)}$	(94)
$UOF_{4(s)} + H_2O_{(v)} \rightarrow UO_2F_{2(s)} + 2 HF_{(v)}$	(95)
$UF_{6(s)} + H_2O_{(v)} \rightarrow UF_5OH_{(s)} + HF_{(v)}$	(96)
$UF_5OH_{(s)} \rightarrow UOF_4 \cdot HF_{(v)}$	(97)

A reação da Equação (93) representa o mecanismo global de reação de hidrólise, sendo a reação considerada no modelo MHTMTP.

**Tabela 19:** Entalpia Padrão de Formação  
**Fonte:** (National Institute of Standards and Technology, 2019)

<b>Composto</b>	$H_f^{298}$ (KJ.mol <sup>-1</sup> )	<b>Composto</b>	$H_f^{298}$ (KJ.mol <sup>-1</sup> )
$UO_2F_{2(s)}$	- 259,00	$NO_{2(g)}$	33,10
$UOF_{4(s)}$	- 293,00	$NO_{(g)}$	90,29
$HF_{(v)}$	- 272,55	$O_{2(g)}, N_{2(g)}$	0

#### 4.1.7. Método de Solução

Uma definição simplificada para o Métodos de Volumes Finitos é “um método de solução de equações diferenciais parciais na forma de equações algébricas” (Leveque, 2002). Derivado do Método dos Elementos Finitos (MEF), também faz uso de pequenos elementos, os quais menores possíveis, resultando em melhores aproximações dos resultados quando

comparados aos valores obtidos por uma solução exata das equações de governo do fenômeno físico investigado. Neste sentido, o Método de Volumes Finitos consiste em uma integração das equações governantes do escoamento de fluido sobre todos os volumes de controle finitos que compõem o domínio de interesse (Patankar & Spalding, 1972). O Método de Volumes Finitos pode ser aplicado a qualquer tipo de malha, por isso adapta-se a geometrias complexas (Barbosa, 2013).

O procedimento comumente aplicado no Método de Volumes Finitos pode ser descrito pelas etapas de identificação do domínio ou volumes de controle do fenômeno investigado, a divisão deste domínio em pequenas partes ou volumes, localizando no centro de cada volume a variável calculada, integrar a equação diferencial em cada volume de controle e aplicação do método numérico.

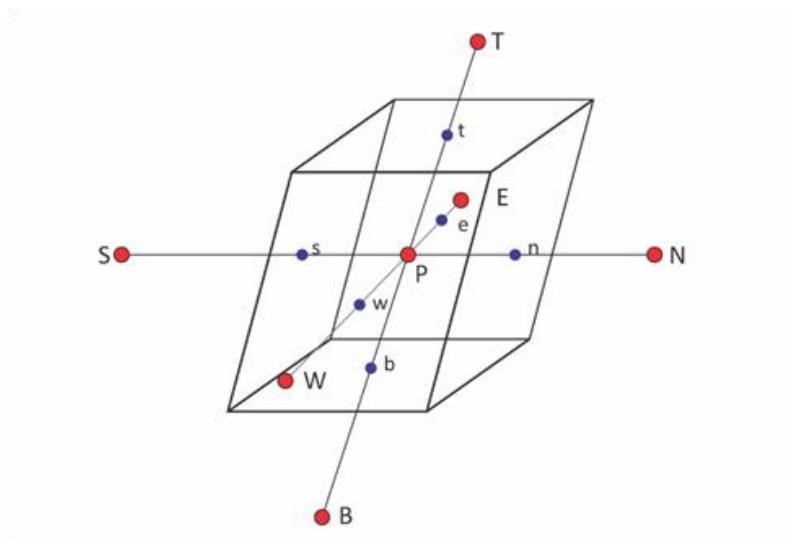
Os modelos matemáticos aplicados com mais frequência no controle e diagnóstico ambiental são os de dispersão, tanto atmosférica como em meio aquoso. Tais modelos avaliam condições ambientais através de dados de contorno. No caso de modelos de dispersão atmosférica, dados de emissão da fonte, condições meteorológicas, como temperatura, umidade, velocidade e direção do vento são de fundamental importância, além de outros fatores como a própria característica do poluente em análise. Tais informações, através de rearranjo matemático, apresentam uma equação gaussiana. Estes modelos de dispersão são dependentes de um elevado número de dados para avaliação dos mecanismos de transporte, além dos parâmetros meteorológicos para avaliação de condições ambientais.

(Moreira & Tirabassi, 2004) citam que, por motivos econômicos e administrativos, o número de pontos de monitoramento atmosférico é limitado e sua disposição espacial geralmente não é estudada cuidadosamente, podendo estar posicionados em um local pouco representativo. Dentro deste contexto, a utilização de modelos matemáticos que simulam o transporte e a difusão dos poluentes na atmosfera constitui uma importante ferramenta para auxiliar no conhecimento e previsão das concentrações de poluentes atmosféricos.

No Método de Volumes Finitos as equações de conservação são integradas em cada malha e estas equações são válidas para o total da área de cálculo. Esta característica é válida para qualquer número de malhas, mesmo quando o número de malhas é baixo (Alipour, et al., 2017).

A solução das equações propostas no presente trabalho foi obtida por meio do método numérico dos Volumes Finitos. As propriedades massa, a fração mássica das espécies e quantidade de movimento são conservadas, tendo em vista que as equações diferenciais são obtidas por meio de balanços integrais sobre volumes de controle.

Com base nesse conceito a conservação estará garantida para todo tipo de malha. Uma abordagem conveniente para a solução das equações diferenciais citadas, consiste em formular por volumes finitos em coordenadas generalizadas, onde a mesma é integrada em um volume de controle arbitrário, conforme ilustrado na Figura 24. A discretização temporal utiliza o método implícito enquanto a discretização espacial utiliza o esquema “Power Law”, conforme (Patankar, 1985; Melaaen, 1982)



**Figura 24** – Célula computacional e volume de controle finito para integrações das equações de transporte.

**Fonte:** (Castro, 2000)

O presente trabalho utilizou o algoritmo SIMPLE para solução acoplada dos campos de temperatura, velocidade e pressão, no caso da solução da equação de transporte de espécies por volume finito é usado a solução do sistema utilizando Thomas com varredura linha por linha, maiores detalhes em (Patankar, 1985).

#### 4.1.8. Condições Iniciais e de contorno para Simulação

Como limites de fronteiras, as dimensões do prédio de processo no qual consta instalada a autoclave de *blending*, referenciando altura, largura, profundidade e a localização da própria autoclave, foram utilizadas para alimentar o volume de contorno do volume computacional. Estas variáveis limitaram as coordenadas espaciais do modelo proposto, onde tais valores são descritos na Tabela 20. Os dados iniciais estão descritos na Tabela 21.

**Tabela 20**– Dados do prédio de processo  
**Fonte:** (INB, 2014)

<b>Dados do Prédio de Processo</b>	
Largura do prédio	19,5 m
Comprimento do prédio	20,8 m
Altura do prédio	6,8 m
Volume livre do prédio	2760 m <sup>3</sup>
Localização da autoclave (plano XY)	10,8 x 14 m
Ponto de Liberação (Eixo Z)	1,4 m

**Tabela 21**– Condições de contorno e dados iniciais para simulação  
**Fonte:** (INB, 2014)

<b>Dados do Prédio de Processo</b>	
Temperatura ambiente	15 - 25°C
Pressão Ambiente	101,4 KPa
Umidade relativa	50-80%
Taxa Exaustão	5,57/ 2,875 m <sup>3</sup> /s
Densidade do UF <sub>6</sub> (80/93°C)	3532/ 3470 kg/ m <sup>3</sup>
Densidade do UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	3000 kg/m <sup>3</sup>
Pressão de trabalho (80/ 93°C)	2,5/ 3,5 atm
Taxa de liberação inicial (80/ 93°C)	16,3/18,1 kg/s
Tempo de Liberação	1/ 5 minutos

#### 4.1.9. Cenários postulados

Os cenários analisados neste trabalho podem ser postulados para qualquer instalação do ciclo do combustível nuclear - conversão, enriquecimento, ou fabricação de combustível. As diferenças entre as consequências para cada planta seriam relacionadas principalmente ao inventário disponível para a liberação, as características de construção da planta, as dimensões e layout físico do prédio de processo e do tipo de sistemas de ventilação e filtragem

(Siman-Tov, 1984) identifica e discute vários cenários possíveis de acidentes de UF<sub>6</sub>, alguns deles estão agrupados na Tabela 22. Eles estão arranjados em quatro grandes categorias: falhas de cilindros UF<sub>6</sub>; falhas de equipamentos de processo de UF<sub>6</sub>; eventos de criticidade nucleares; e erros do operador. Um total de 25 cenários foram identificados, variando de eventos de elevada consequência, tais como a ruptura hidráulica de um cilindro cheio, a uma liberação de tamanho pequeno como uma falha de armadilha fria. A maioria desses cenários ocorrem no interior de prédios.

**Tabela 22-** Cenários de Eventos Postulados para o Ciclo do combustível nuclear (CCN)  
**Fonte:** (Siman-Tov, 1984)

<b>Evento Postulado</b>	<b>Classificação</b>
Falha da Ultra centrífuga	Evento Anormal
Falha na Tubulação com Pressão de UF <sub>6</sub> acima da Atmosférica dentro da Autoclave	
Abertura Errônea de Autoclave Contaminada	
Pressurização Acidental do Cilindro devido à Reação do UF <sub>6</sub>	
Pressurização Acidental da Tubulação de Baixa Pressão de UF <sub>6</sub>	
Fenômenos Naturais: Terremoto, Tornado, Furacão, Inundação	Acidentes Base de Projeto
Criticalidade Nuclear (Sistema de homogeneização – 30B)	
Ruptura Hidrostática de Cilindro 30B com sobre enchimento de UF <sub>6</sub> durante o aquecimento na autoclave	
Ruptura de cilindro 30B devido ao superaquecimento com vazamento de UF <sub>6</sub> no interior da autoclave	Acidente
Ruptura Hidrostática de um Cilindro de UF <sub>6</sub> exposto à Incêndio Externo	
Acidente envolvendo Transporte Interno	



Uma das principais dificuldades no modelamento de um escape de UF<sub>6</sub> dentro de um prédio de processo é definir qual o volume do compartimento que deve ser considerado para análise. Uma instalação real é dividida em várias unidades de processamento cada uma das quais está localizada em regiões separadas, mas não fisicamente isoladas umas das outras. Assim, uma liberação de UF<sub>6</sub> pode ocorrer em uma unidade, e vir a se espalhar a outras unidades, fazendo o modelamento ficar mais complicado. Efeitos espaciais podem tornar-se evidentes e eles devem ser levados em consideração em uma análise.

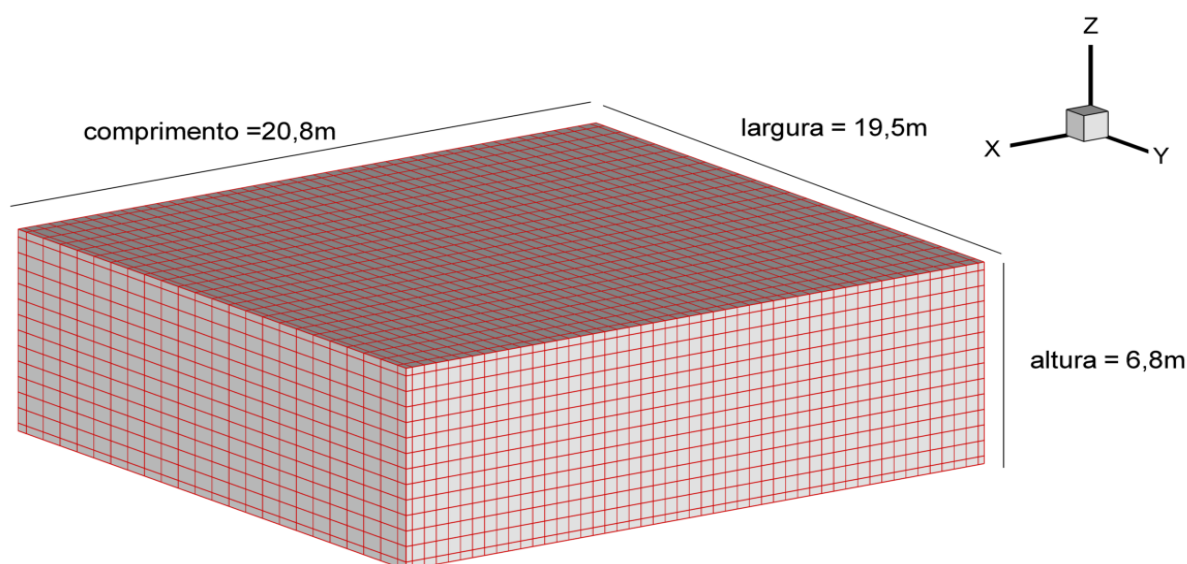
O cenário contemplado neste trabalho foi de **Ruptura Catastrófica de Cilindro 30B e da Autoclave**. Assumiu-se que um cilindro 30B a ser aquecido no interior de uma autoclave é sobrepressurizado e em falha. A autoclave, em seguida, falhou liberando UF<sub>6</sub> para o edifício de processo. Este acidente poderia ser causado pelo sobreaquecimento um cilindro cheio em a sua capacidade máxima ou por aquecimento de um cilindro sobreenchido.

## 5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Esta seção apresenta os resultados obtidos nas simulações dos modelos analíticos e do modelo computacional MHTMTP para avaliação da previsão do cálculo da concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  e HF dispersos no ambiente.

### 5.1. Domínio Computacional

Para o desenvolvimento do volume de controle adotado neste estudo foram utilizados os dados dimensionais médios do prédio de processo, já apresentados na Tabela 20. Tais informações geraram os limites das reações termo físicas e termodinâmicas do processo em estudo. A Figura 25 ilustra o volume de controle aplicado na simulação desenvolvida, foi obtido através de uma grade não uniforme constituída de 50 células (direção X), 25 células (direção Y) e 15 células (direção Z).



**Figura 25:** – Domínio Computacional considerado no modelo

**Fonte:**Autor

A escolha deste volume para representação computacional se deve ao fato de entre todos os cenários de acidentes postulados de liberação de  $\text{UF}_6$ , há situações que são consideradas ocorrendo nesta região interna dos prédios de processos, assim a avaliação destas liberações atuam como termo fonte para outros modelos de liberação seja na parte interna inclusive ou nos modelos de dispersão atmosférica no exterior da instalação.

A divisão da malha de cálculo gerou 18750 volumes de controles para discretização e cálculos dos campos de velocidade, temperatura e pressão, buscando representar as características do ambiente interno destes prédios. Este número representa uma quantidade de volumes suficientes para representação da acurácia dos fenômenos e comportamentos característicos da liberação e hidrólise do UF<sub>6</sub>.

O código computacional escrito em linguagem Fortran 90/95 e os resultados das simulações são plotados através do software Tecplot 360, possibilitando a análise de dados visuais integrados 1D, 2D e 3D.

## 5.2. Resultados de Simulação Analítica

Para que seja possível neste trabalho ocorrer um comparativo entre os resultados obtidos pelo modelo MHTMTP, também foram resolvidas as equações numéricas que denotam um modelo a respeito da liberação de UF<sub>6</sub>, conforme visto no item 3.4.3.

Para estimar de forma adequada as concentrações e quantidades liberadas é fundamental modelar com precisão o termo fonte, nos cenários postulados neste trabalho foram considerados os termos fontes (TF1) as próprias quantidades envolvidas no inventário da instalação e (TF2) considerando a taxa de liberação constante e assumiu que todo UF<sub>6</sub> reagiu com o ar úmido para produzir UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> e HF. Em situações mais gerais, no entanto, o termo fonte (TF2) para UF<sub>6</sub> será dependente do tempo. Para estes casos, outros métodos devem ser utilizados para descrever as condições transitórias no interior dos cilindros e tubulações de UF<sub>6</sub> e edifícios de processo.

### 5.2.1. Cálculo de vazamento durante *Flashing*

#### **Ruptura Catastrófica de Cilindro (CENÁRIO BASE):**

Uma liberação de *Puff* (bufada) corresponde à falha catastrófica de um recipiente sob pressão. A sequência de eventos para uma liberação é que primeiro ocorre uma grande ruptura de um vaso ou cilindro, liberando todo o conteúdo quase imediatamente. A ruptura espontânea de tal cilindro é muito improvável; geralmente corresponde ao pior cenário.

Considerou-se a ruptura catastrófica de um cilindro de 2000 kg de UF<sub>6</sub>. Este tipo de acidente pode ocorrer se o cilindro estiver cheio demais e subsequentemente aquecido. Por exemplo, a grande liberação de UF<sub>6</sub> em Gore, Oklahoma (NRC, 1986), ocorreu por este motivo. Após a ruptura, a despressurização causou um vigoroso *flash* do líquido em vapor e sólido.

Desta forma é necessário calcular alguns parâmetros importantes ao desenvolvimento das simulações de material liberado após a ruptura. Como segue, uma vez que todo o material é liberado instantaneamente e forma um Puff:

✓ PARAMETROS:

- MASSA DE UF<sub>6</sub> NO CILINDRO = 2000 kg

Para facilitar a análise, presumiu-se que o conteúdo do cilindro se rompa a uma temperatura e pressão superiores às do ponto triplo do UF<sub>6</sub> (151 KPa ou 1,5 bar e 337,1 K ou 64,1°C), conforme (DeWitt, 1960).

Presumiu-se que a temperatura do cilindro era de 353,15 K (80°C), na FCN-Enriquecimento e 366,15K (93°C), na FCN - Reconversão. Esta é uma suposição arbitrária para propósitos puramente ilustrativos. A temperatura exata na qual o cilindro se romperá depende de quanto ele está sobreenchido.

Quando o cilindro se rompe, o conteúdo inicialmente se equilibra no ponto de sublimação do UF<sub>6</sub> à pressão atmosférica. Parte do UF<sub>6</sub> imediatamente se transforma em vapor e outra em partículas sólidas.

Todas as partículas sólidas de UF<sub>6</sub> permanecem suspensas no ar (Nota - esta suposição é conservadora porque a deposição de partículas sólidas de UF<sub>6</sub> perto da fonte é uma possibilidade. Entretanto, a estimativa da quantidade que pode depositar é incerta e depende de vários fatores como características de dano do cilindro, distribuição de tamanho de partícula e direção de fluxo do material liberado e a presença ou ausência de obstáculos).

O fenômeno de *flashing* resulta na mistura quase instantânea com aproximadamente dez vezes a massa de ar nas seguintes condições, sendo uma suposição razoável, segundo (NUREG, 6410):

**Tabela 23-** condições de operação no interior do prédio de processo.

	Verão	Inverno
<b>Temperatura (°C)</b>	25	15
<b>Umidade Relativa (%)</b>	80	50
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	1,184	1,225
<b>Pressão atmosférica (Pa)</b>	9,5x10 <sup>-4</sup>	9,0x10 <sup>-4</sup>

- TERMOS FONTES

Assumindo que o UF<sub>6(l)</sub> sobre pressão no cilindro na T<sub>i</sub> e que o T<sub>i</sub>>T<sub>t</sub>, então o balanço de calor, a fração mássica de UF<sub>6</sub> que está na forma de vapor é dada por:

$$f = \frac{m_l^i [\lambda_f + C_{ps}(T_t - T_s) + C_{pl}(T_i - T_t)] + m_v^i [\lambda_s + C_{ps}(T_t - T_s) + C_{pv}(T_i - T_t)]}{(m_l^i + m_v^i) [\lambda_f + C_{ps}(T_t - T_s) + C_{pv}(T_s - T_t)]} \quad (98)$$

Onde:

*f* = fração mássica que é transformada em vapor após resfriamento (T<sub>s</sub>);

*C<sub>pl</sub>* = Calor específico a P cte para UF<sub>6(l)</sub>, 563,3 J/kg. K;

*C<sub>ps</sub>* = Calor específico a P cte para UF<sub>6(s)</sub>, 518,14 J/kg. K;

*C<sub>pv</sub>* = Calor específico a P cte para UF<sub>6(v)</sub>, 369,35 J/kg. K;

*T<sub>i</sub>* = Temperatura inicial do UF<sub>6</sub> (temperatura no cilindro), 80°C (353,15K) ou 93°C (366,15K);

*T<sub>t</sub>* = Temperatura do Ponto triplo do UF<sub>6</sub>, 64,1° ou 337,1K;

*T<sub>s</sub>* = Temperatura de Sublimação do UF<sub>6</sub>, 56,25°C ou 329,4K;

*λ<sub>f</sub>* = Calor de fusão para transição sol-liq, 5,458x10<sup>4</sup> J/kg;

*λ<sub>s</sub>* = Calor de sublimação, 1,369x10<sup>5</sup> J/kg;

*m<sub>l</sub><sup>i</sup>* = Massa inicial do UF<sub>6(l)</sub>, 2000kg;

*m<sub>v</sub><sup>i</sup>* = Massa inicial de UF<sub>6(v)</sub>, mesmo existindo algum vapor, será ignorado neste caso.

As várias fontes de calor liberadas são:

- Calor sensível de resfriamento de líquido da temperatura inicial para o ponto triplo;
- Calor latente de fusão para conversão de líquido em sólido no ponto triplo; e
- Calor sensível de resfriamento de sólido e vapor do ponto triplo ao ponto de sublimação.

A Tabela 24 mostra os dados calculados. Para temperaturas entre os valores exibidos, a interpolação linear da fração do flash é aceitável.

Da Equação (98), o valor de *f* obtido é 0,490. Assim, do original 2000 kg de UF<sub>6</sub>, 49 por cento em massa (980 kg) de UF<sub>6</sub> inicialmente é transformado em vapor, e 51 por cento em massa (1020 kg) são sublimados para sólidos.

**Tabela 24** - Dependência da Fração, *f*, na Temperatura Inicial de Armazenamento.

<b>Temperatura Inicial (Ti)</b>	65	70	75	80	85	90	93	95	100	121
<b>Fração Mássica (f)</b>	0,43	0,45	0,47	0,49	0,51	0,53	0,54	0,55	0,58	0,66

A temperatura do UF<sub>6</sub> imediatamente após o *flash*, mas antes da mistura com o ar, é igual à temperatura de sublimação de UF<sub>6</sub> à pressão atmosférica de 56,25°C (329,4K). Assumindo que o UF<sub>6</sub> sólido seja transmitido pelo ar, a densidade do UF<sub>6</sub> puro (sólido e vapor),  $\rho'$ , é dada pela Equação (99):

$$\rho' = \frac{\text{Massa Total de UF}_6}{\frac{\text{Fração vapor de UF}_6}{\rho_{\text{UF}_6}^v} + \frac{\text{Fração sólida de UF}_6}{\rho_{\text{UF}_6}^l}} \quad (99)$$

Onde:

$\rho'$  = densidade do UF<sub>6</sub> puro a 56,25°C;

$\rho_{\text{UF}_6}^v$  = densidade do UF<sub>6</sub> vapor a 56,25°C;

$\rho_{\text{UF}_6}^l$  = densidade do UF<sub>6</sub> líquido a 56,25°C.

Substituindo as densidades de vapor e sólido na Equação (99), a densidade de nuvem inicial resultante é de 26,42 kg/m<sup>3</sup>. Para cenários em que nenhuma mistura inicial de ar na fonte é postulada, essa densidade pode ser usada para modelagem de dispersão atmosférica.

No entanto, assumiu-se um cenário onde ocorre uma mistura de duas vezes em massa de ar (4000kg) contida a 298,15 K (25°C) e 80% de umidade relativa ambiente (UR) inicialmente na fonte. O UF<sub>6</sub> reage com o a umidade contida no ambiente conforme a Equação (1), porém devido à complexidade da termodinâmica desta reação, visto os fenômenos que devem ser levados em questão, ocorre uma necessidade de ter parâmetros conservadores:

- O calor liberado pela reação exotérmica do UF<sub>6</sub> com água;
- UF<sub>6</sub>, água e HF podem mudar de fase de condensado para vapor;
- HF e água formam uma solução não ideal acompanhada de liberação de calor.

Mediante o cenário e a falta de condições de obter de forma realista os valores de UF<sub>6</sub> que são dispersos no ambiente e a fração que é depositada no chão, foi considerado neste trabalho de forma conservadora que todo o UF<sub>6</sub> estará disperso no ambiente conforme os

valores obtidos na Tabela 24. As características do termo fonte descritos na Tabela 25 formam a entrada para um modelo de dispersão atmosférica. A densidade da mistura resultante é maior que a densidade do ar ambiente.

**Tabela 25** - Características de termos fontes seguidos de liberação de UF<sub>6</sub>

<b>Característica do Termo Fonte (Puff)</b>	
<b>Massa total de UF<sub>6</sub> (kg)</b>	2000
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	1,2965
<b>Temperatura (°C)</b>	25
<b>Volume Total (m<sup>3</sup>) (incluindo o ar)</b>	4627
<b>Massa Total (kg) (incluindo o ar)</b>	6000
<b>Momento Horizontal (kg.m/s)<sup>1</sup></b>	8000

As várias fontes de calor liberadas são:

- Calor sensível de resfriamento de líquido da temperatura inicial para o ponto triplo;
- Calor latente de fusão para conversão de líquido em sólido no ponto triplo; e
- Calor sensível de resfriamento de sólido e vapor do ponto triplo ao ponto de sublimação.

Considerando os modelos apresentados no item 3.4.3, pode-se estimar facilmente o Termo Fonte TF1, considerando a quantidade de material (UF<sub>6</sub>) nos cilindros e tubulações, e o tipo de falha ocorrido ou potencialmente previsto na análise de segurança. A avaliação dos Termos TF2 e TF3, conforme o esquema estabelecido na Figura 19, necessita de um conjunto de equações capazes de simular as condições dependentes do tempo no interior dos cilindros e dos próprios prédios de processo. Desta forma é usado o conjunto de Equações (8 – 23) a fim de estabelecer os termos fontes, com base nas avaliações realizadas a partir das seguintes premissas:

- Ocorre liberação instantânea de UF<sub>6(l)</sub> de um cilindro 30B;
- Após liberação de UF<sub>6(l)</sub> ocorre *flash* seguido de transformação da fase líquida em vapor;
- A fração inicial de vapor pode ser estimada por balanço de entalpia ou de calor;

<sup>1</sup> Assumindo uma velocidade do vento de 2 m/s. Como o UF<sub>6</sub> não tem momento inicial, o ar dá um impulso (8000 kg.m/s) igual à massa de ar (4000 kg) vezes a velocidade do vento (2 m/s).

- Assumir que todo o vapor reagirá com o ar úmido do ambiente produzindo HF e  $UO_2F_2$ ;
- E neste trabalho foi suposto que a liberação dos produtos da hidrólise do  $UF_6$  ocorreu no ambiente interno dos prédios e depois conduzidos pelo sistema de ventilação, por filtros e lavadores de gases antes de serem liberados na atmosfera.

Foram propostos 8 casos de liberação de  $UF_6$ , supondo que um acidente ocorra e tenha um tempo total de liberação de 10 minutos, este tempo foi considerado neste trabalho como o tempo máximo de resposta para uma eventual resposta de emergência. Porquanto, levando em conta o critério sugerido pela (NRC, 1991) que usa uma relação baseada no IDLH/ IPVS (Immediately Dangerous to Life or Health Air Concentration/ Imediatamente Perigoso à Vida e Saúde), que representa a máxima concentração no ar que um colaborador pode ficar exposto por 30 minutos e ainda ser capaz de escapar sem perda da vida e sintomas prejudiciais ou efeitos irreversíveis à saúde.

Desta forma tem-se:



**Tabela 26:** Casos Simulados e parâmetros operacionais

<b>Casos</b>	<b>D<sub>0</sub> (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Formação de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> (%)</b>	<b>Temperatura Aquecimento (°C)</b>	<b>Pressão do gás (atm)</b>	<b>Taxa de liberação do UF<sub>6</sub> (kg/s)</b>	<b>Vazão de exaustão (m<sup>3</sup>/s)</b>	<b>Tempo de liberação (minutos)</b>
<b>Caso 1</b>	1	100	80	2,5	16,3	2,9	1
<b>Caso 2</b>	1	100	80	2,5	16,3	5,7	
<b>Caso 3</b>	1	100	80	2,5	3,3	2,9	
<b>Caso 4</b>	1	100	80	2,5	3,3	5,7	
<b>Caso 5</b>	1	100	93	3,5	18,1	2,9	5
<b>Caso 6</b>	1	100	93	3,5	18,1	5,7	
<b>Caso 7</b>	1	100	93	3,5	3,6	2,9	
<b>Caso 8</b>	1	100	93	3,5	3,6	5,7	

### 5.2.2. Ajustes no modelo

A fim de conferir maior representatividade dos resultados, em relação as unidades de concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  ( $C_{\text{UO}_2\text{F}_2}$ ) e de HF ( $C_{\text{HF}}$ ) e da %volume do  $\text{UF}_6$ , foi necessário a realização de alguns ajustes no modelo proposto neste trabalho. Inicialmente, foram obtidos resultados que não eram característicos em relação aos resultados obtidos com os modelos analíticos. Entretanto após ajustes realizados em parâmetros como o número de interações, fatores de relaxação e de tempo computacional foi possível obter valores que indicavam convergência dentro do esperado e relatado na literatura para liberações de  $\text{UF}_6$ .

### 5.2.3. Resultados das analíticos

Os resultados obtidos de forma analítica para o cenário base são mostrados para os casos que envolvem uma variação na vazão de exaustão, situação factível nos casos específicos de emergência, no qual ocorre comutação do sistema de ventilação. Além da vazão de exaustão é simulado a variação dos parâmetros (temperatura, pressão, taxa de liberação e tempo de liberação).

As Figuras (26 a 40) foram divididas em dois grupos, conforme mostrado na Tabela (26), grupo realce azul (temperatura = 80°C) e grupo realce marrom (temperatura = 93°C) que mostram a relação de dependência do tempo e as concentrações de urânio e HF. Como resultado de termo fonte TF2, obtemos valores relativamente elevados para concentrações de urânio e de HF, atingindo o valor máximo para o modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009) em tempos próximos ao ponto final de liberação (1 e 5 minutos) e no modelo MPHMTTP em valores de tempo anterior ao ponto final de liberação.

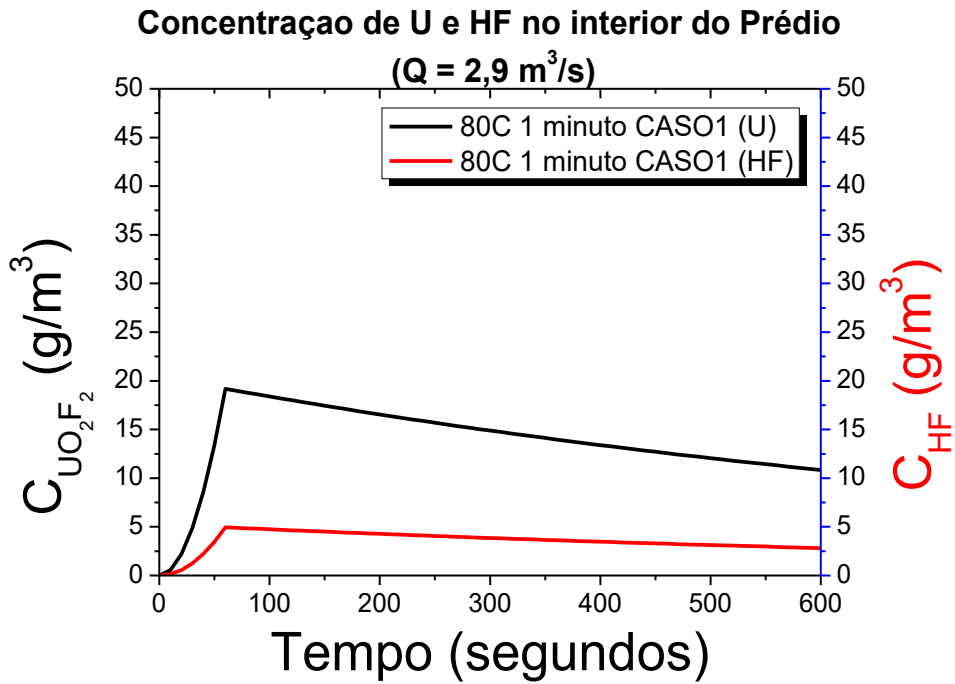
As Figuras 26 e 27 apresentam os resultados analíticos das simulações dos casos 1 e 2 para o modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009).

Observa-se que nas Figuras 26 e 27, os Casos 1 e 2 apresentam resultados que são considerados divergentes do esperado para o aumento da exaustão. Pois neste tipo de situação, ao aumentar a vazão de exaustão é observado a retirada de material, como materiais particulados e em suspensão de ambientes fechados.

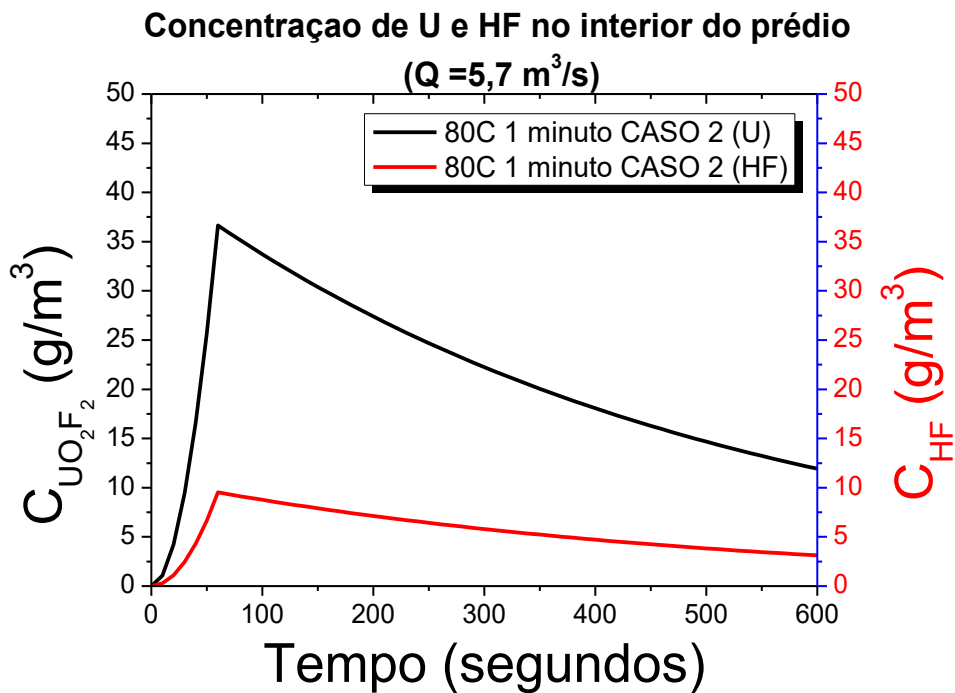
Ao considerar que uma vez que os demais parâmetros foram mantidos constantes, é esperado que nesta situação, deveria ocorrer a diminuição da concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  e HF no ambiente, a partir do momento do término da liberação, haja visto a ocorrência da deposição do particulado pelo fenômeno de deposição gravitacional e pelo gás a ser exaurido do ambiente, ao duplicar a vazão de exaustão. Entretanto, é visto um aumento da concentração dos produtos da hidrólise de  $\text{UF}_6$  entre os Casos 1 e 2 da seguinte forma,  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 19\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 5\text{ g/m}^3$  (caso 1) para  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 35\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 8\text{ g/m}^3$  (caso 2).

Outro parâmetro analisado nestes resultados é a taxa e liberação de  $\text{UF}_6$ , que indica a liberação no tempo máximo estipulado em 1 minuto nestes dois casos, entretanto o fato desta liberação ser considerada catastrófica, é tido a consideração de liberação da maior massa possível no menor tempo. Ou seja, toda quantidade de 980kg deve ser liberada no tempo de 1 minuto. Porém os resultados observados nas Figuras 25 e 27, baseado no estudo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009) não representa o que o modelo indica. Na verdade, o modelo estipula uma taxa de liberação constante, contudo não é aceitável que numa ruptura catastrófica tenhamos uma taxa de liberação constante, neste caso 16,3kg/s.

A ruptura catastrófica preconiza que ocorra uma taxa de liberação de  $\text{UF}_6$  em uma ordem de grandeza de dezenas de kg/s nos primeiros segundos e que tenha um decaimento deste valor ao ocorrer a reação de hidrólise ao longo da liberação.



**Figura 26:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 1, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ,  $t = 1 \text{ minuto}$  )

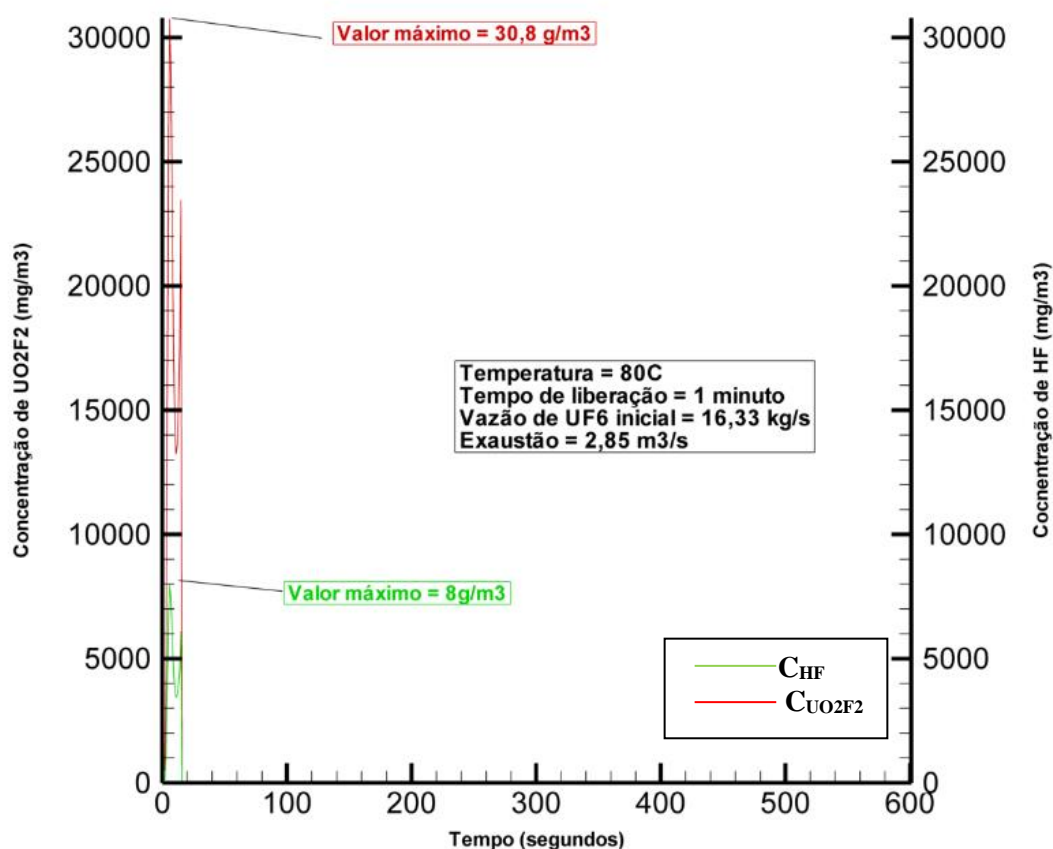


**Figura 27:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 2 ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ,  $t = 1 \text{ minuto}$  )

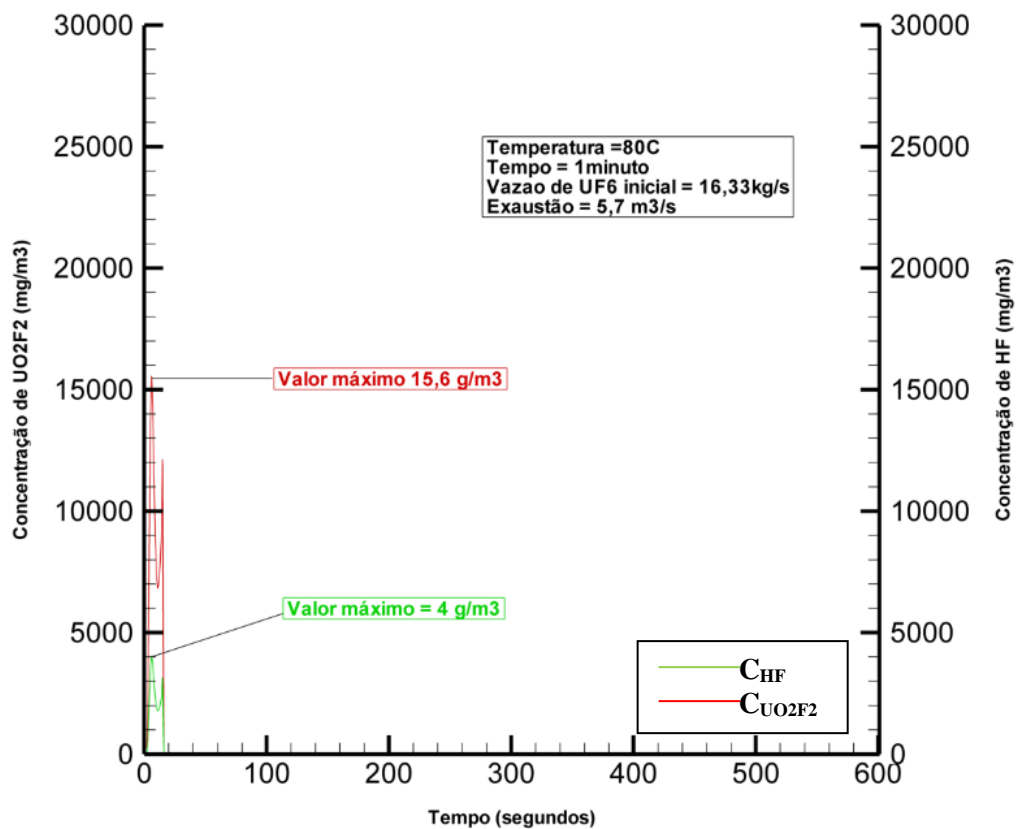
As Figuras 28 e 29 apresentam os resultados das simulações dos Casos (1 e 2) para o modelo MPHMTTP.

As Figuras 28 e 29 que cobrem os mesmos parâmetros dos Casos (1 e 2) para o modelo MPHMTTP, apresentaram valores de concentração próximos aos obtidos no modelo analítico, contudo ao avaliar o tempo de liberação entre os dois modelos que estão sendo apresentados neste trabalho foi observado a diferença na ordem de 6 vezes. No modelo MPHMTTP a liberação total ocorre em aproximadamente 20 segundos, considerando o input de liberação sendo os mesmos nos dois modelos usados nesta primeira parte da avaliação, indicando uma liberação de  $UF_6$  em um tempo extremamente curto.

O modelo MPHMTTP considera as contribuições das equações de turbulência e dos dados de insuflamento e exaustão do prédio, o que confere mediante a simulação, mostrando uma previsão dos valores satisfatórios e coerentes com o fenômeno físico, isto implica na observação a respeito da duplicação da vazão de exaustão, resultar na redução da taxa de liberação de  $UF_6$ .



**Figura 28:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de  $UF_6$  = 16,3 kg/s, t = 1 minuto ), código MHPMTTP



**Figura 29:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 2 ( $T = 80^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ,  $t = 1 \text{ minuto}$ ), código MHPMTP

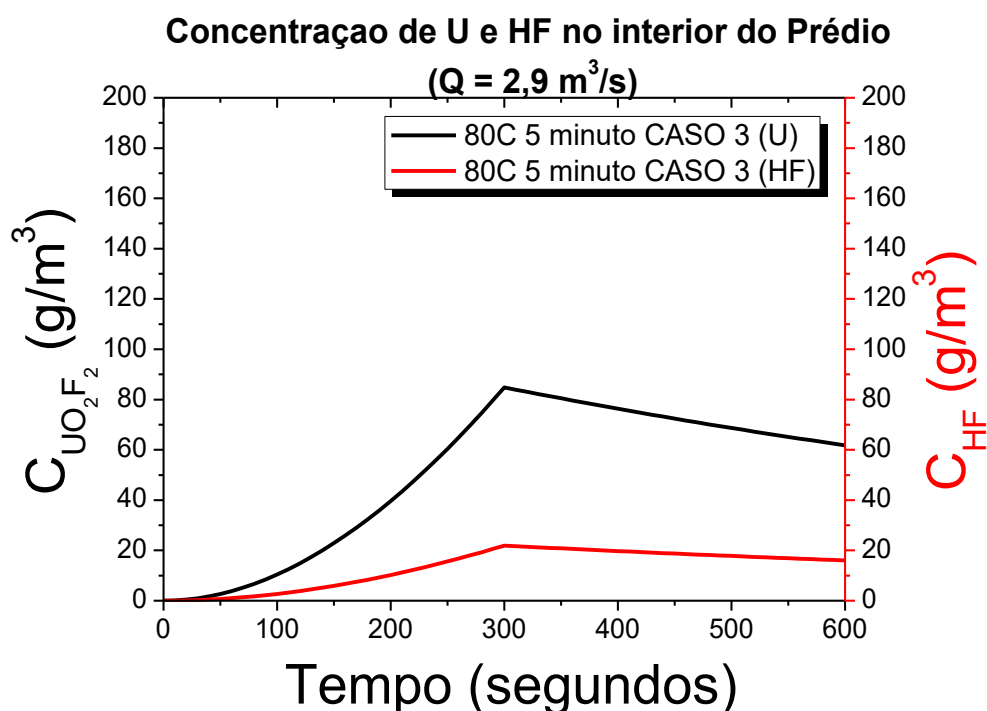
As Figuras 30 e 31 apresentam os resultados das simulações dos casos 3 e 4 para o modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009).

Observa-se que nas Figuras 30 e 31, os Casos 3 e 4 apresentam resultados que são considerados divergentes do esperado para o aumento da exaustão. Como ocorrido na avaliação feita nos Casos 1 e 2, onde este comportamento é observado pela primeira vez neste trabalho. Pois neste tipo de situação, ao aumentar a vazão de exaustão é observado a retirada de material, como materiais particulados e em suspensão de ambientes fechados.

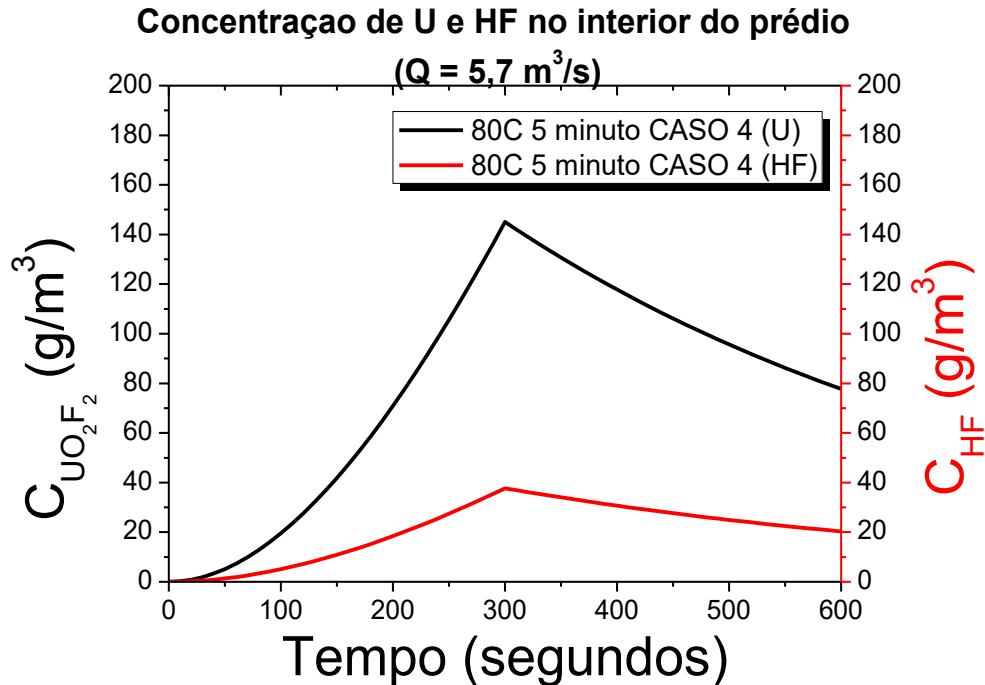
Também foram mantidos parâmetros constantes e esperado de ocorrer a diminuição da concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  e HF no ambiente, a partir do momento do término da liberação, haja visto a ocorrência da deposição do particulado pelo fenômeno de deposição gravitacional e pelo gás a ser exaurido do ambiente, ao duplicar a vazão de exaustão. Entretanto, é visto um aumento da concentração dos produtos da hidrólise de  $\text{UF}_6$  entre os Casos 3 e 4 da seguinte forma,  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 80\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 20\text{ g/m}^3$  (caso 3) para  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 150\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 30\text{ g/m}^3$  (caso 4).

Como pode ser observado na Tabela 26, apenas foi alterado a vazão de exaustão, sendo duplicada. Mas a taxa de liberação de  $\text{UF}_6$  é mantida a mesma e considerada constante (3,3 kg/s), este fato não explica como pode uma liberação mesmo que constante ter um aumento nos valores das concentrações dos produtos formados. Mas este modelo não é o cerne deste trabalho, mas uma forma de avaliar os resultados obtidos através de nosso modelo.

Desta forma a taxa de liberação de  $\text{UF}_6$  é analisado nestes resultados, que indica a liberação no tempo máximo estipulado em 5 minutos nestes dois casos, entretanto o fato desta liberação ser considerada catastrófica, é tido a consideração de liberação da maior massa possível no menor tempo. Ou seja, toda quantidade de 980kg deve ser liberada no tempo de 5 minutos. Porém os resultados observados nas Figuras 30 e 31, baseado no estudo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009) não representa o que o modelo indica. Na verdade, o modelo estipula uma taxa de liberação constante, contudo não é aceitável que numa ruptura catastrófica tenhamos uma taxa de liberação constante, neste caso 3,3kg/s, um valor muito menor que o sugerido nos Casos 1 e 2.



**Figura 30:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 3, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minuto )



**Figura 31:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 4, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minuto )

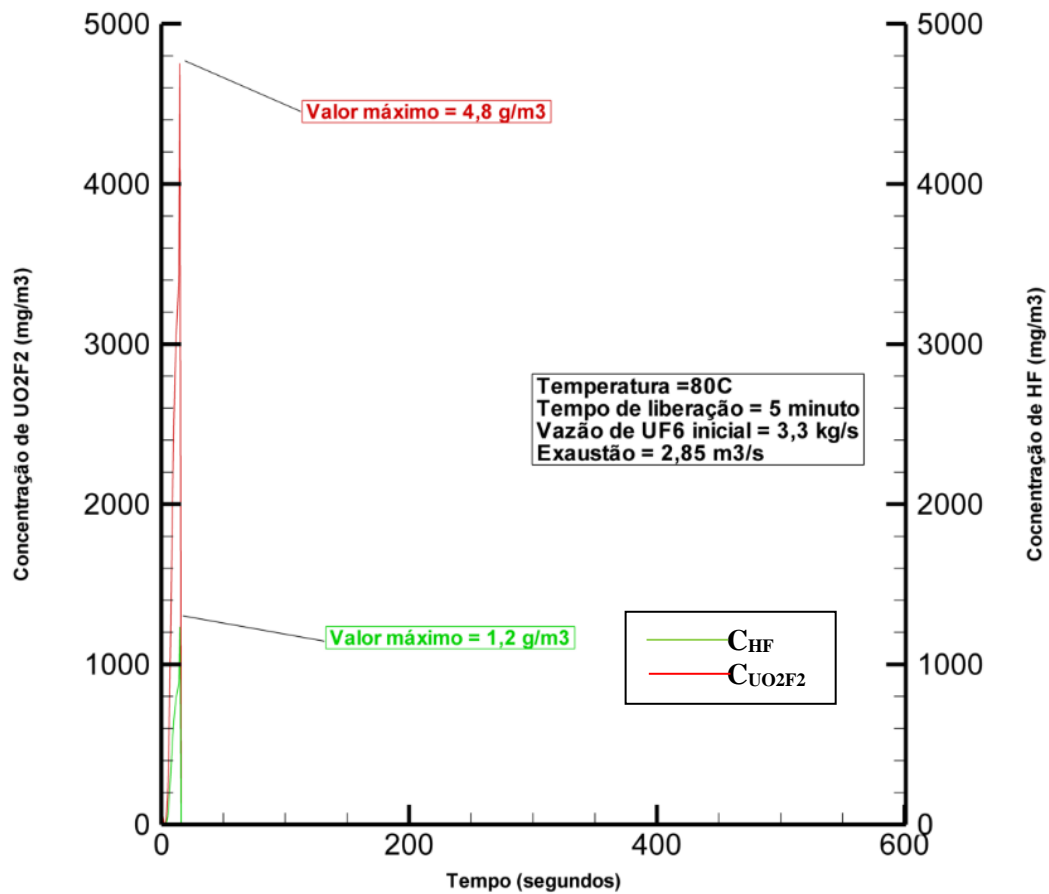
As Figuras 32 e 33 apresentam os resultados das simulações dos Casos (3 e 4) para o modelo MPHMTF.

Ao considerar o aumento no tempo de liberação, não é esperado um decréscimo na concentração do material, pois ao se tratar de simulação com liberação catastrófica, é previsto a expansão violenta do líquido e da maior parte do material para o ambiente, dispersando todo este material pelo volume do espaço confinado relacionado neste trabalho.

A Figura 32 mostra um gráfico com valores de C<sub>UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub></sub> = 4,8 g/m<sup>3</sup> e C<sub>HF</sub> = 1,2 g/m<sup>3</sup> (caso 3), sendo alcançados em tempo menor que 1 minuto, para uma vazão de exaustão de 2,85m<sup>3</sup>/s. Este gráfico não representa qualquer expectativa a respeito das alterações propostas neste trabalho com relação a modificação na vazão de exaustão e tempo de liberação. Pois não temos evidências de ter ocorrido a liberação até o tempo total de 5 minutos, pelo contrário, numa situação como a preconizada neste trabalho, o mais provável é que ocorra a liberação num curto

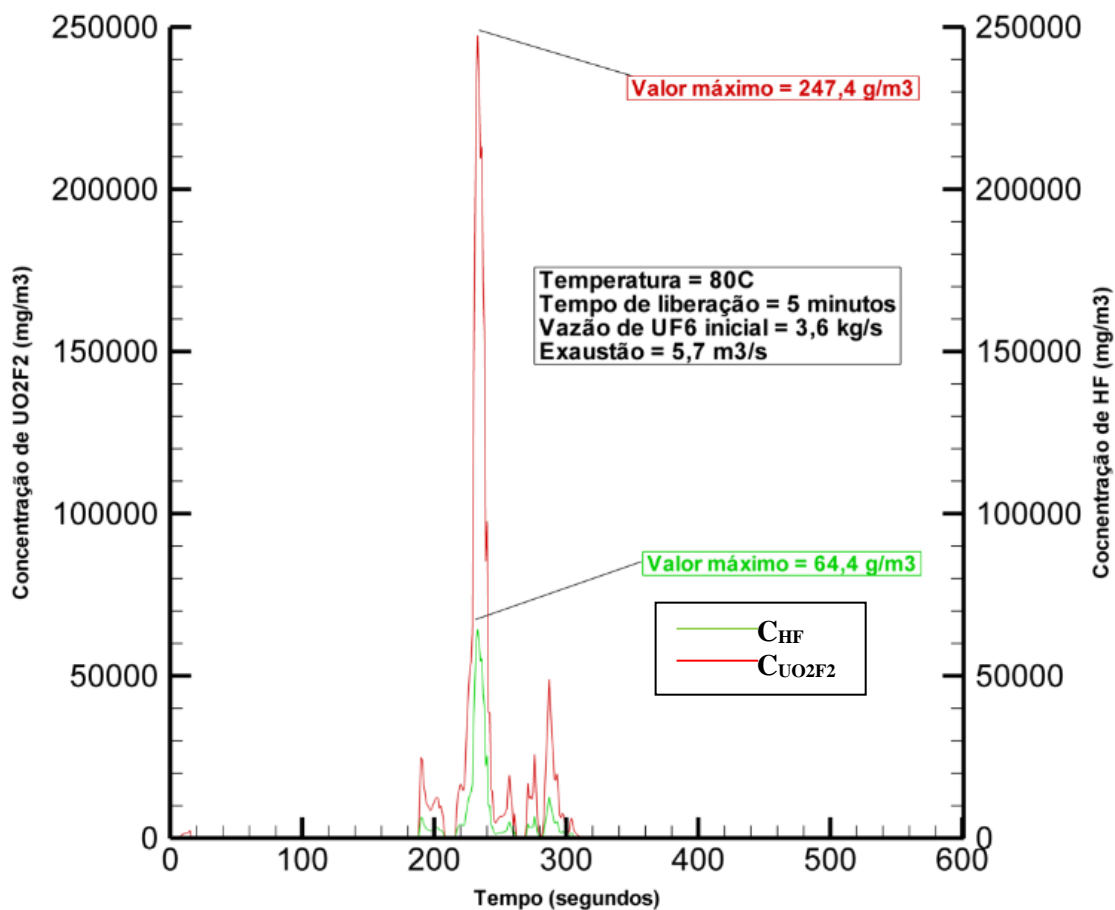


espaço de tempo. Mesmo assim, os resultados obtidos a partir desta simulação não tem explicação com base na avaliação entre as Figuras 32 e 33.



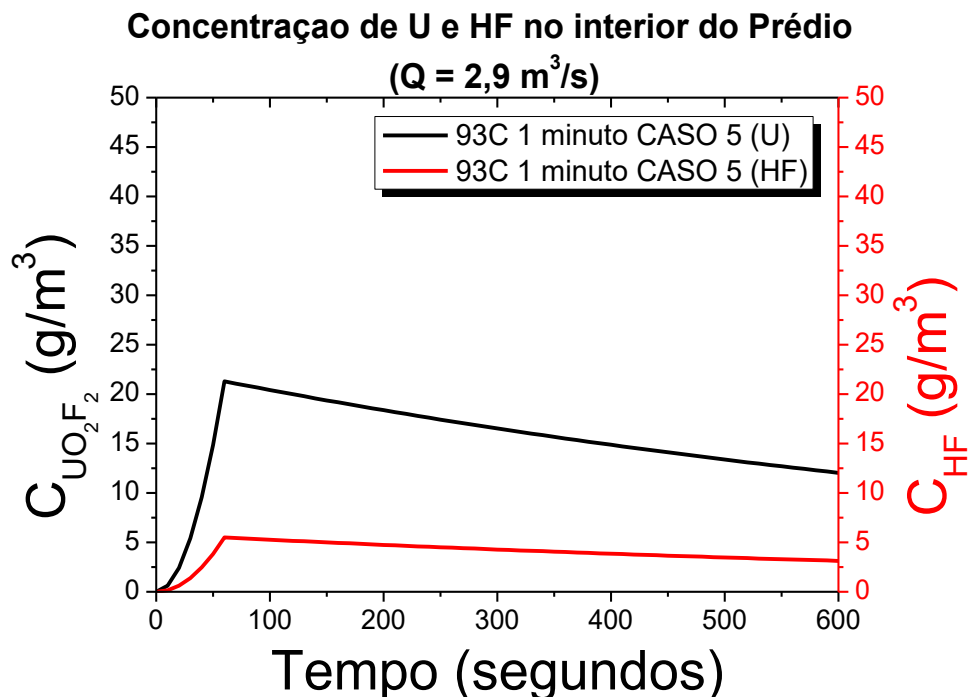
**Figura 32:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 3, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q = 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP

Ao contrário do observado anteriormente, na Figura 33 ocorre um aumento nos valores das concentrações  $C_{UO_2F_2} = 247,4 \text{ g/m}^3$  e  $C_{HF} = 64,4 \text{ g/m}^3$  (caso 4) e não é considerado efetividade do sistema de exaustão neste evento. Este perfil observado é coerente com taxas de liberação de UF<sub>6</sub> oriundos de válvulas ou pequenos orifícios, onde temos pequenas valores constantes de taxas de liberação e por um tempo relativamente grande, não sendo o caso abordado neste trabalho. Mas o gráfico gerado pelo modelo MHPMTP, neste tipo de situação remete justamente a esta situação, deixando uma lacuna a ser preenchida com relação aos tempos utilizados e as taxas de liberação. Pois tais valores podem não ser o mais bem preconizado por Oliveira e seus colaboradores, 2009.

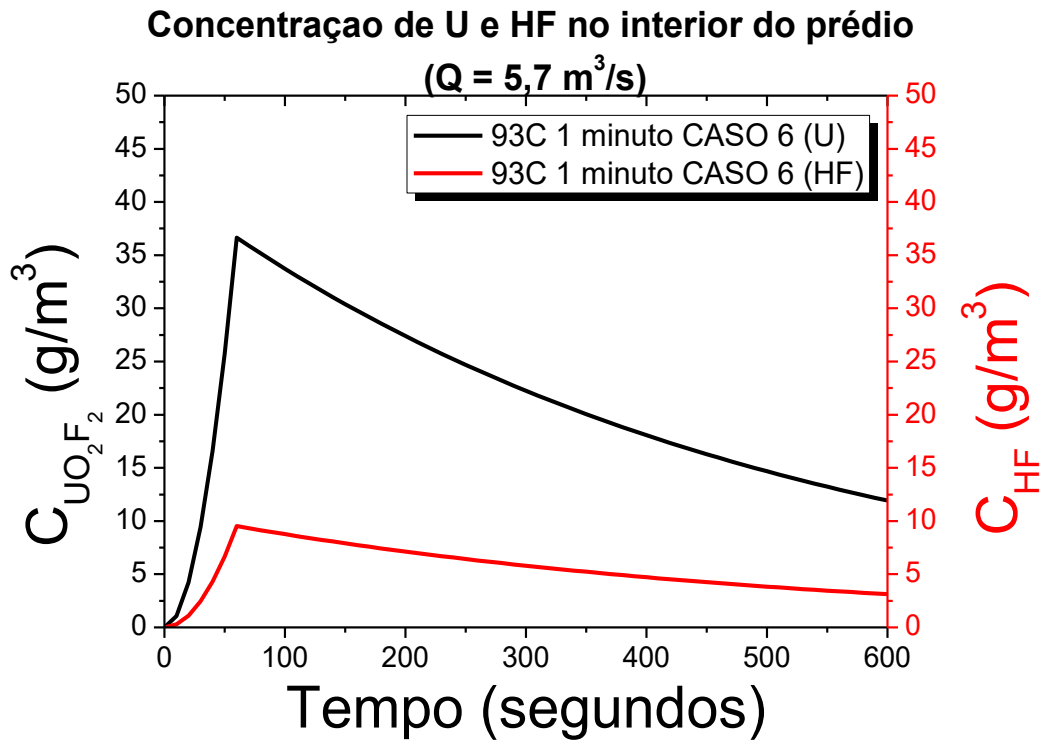


**Figura 33:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 4, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q = 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP

As Figuras 34 e 35 apresentam os resultados das simulações dos casos 5 e 6 para o modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009), tais figuras incluem resultados do modelo simplificado, neste caso é apresentado comportamento igual aos dos Casos 1 e 2, isto implica na observação que devido ao aumento da temperatura de 80°C ( $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 19\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 5\text{ g/m}^3$  (caso 1) para  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 35\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 8\text{ g/m}^3$  (caso 2)). para 93°C ( $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 21\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 5,5\text{ g/m}^3$  (caso 5) para  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 37,5\text{g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 9\text{ g/m}^3$  (caso 6)) e considerando um mesmo tempo de liberação ( $t = 1$  minuto) não temos uma relativa diferença entre os valores da concentração, indicando que existe relação direta entre o aumento de temperatura e o material dispersado no ambiente. Porém o perfil relativo a aumento de concentração em relação ao aumento da temperatura não é visto de forma tão direta neste caso, sendo muito discreta esta relação a partir dos resultados obtidos pelo modelo simplificado de Oliveira e seus colaboradores, 2009. O perfil da concentração deveria apresentar perfil de decaimento nos seus valores em relação com o acréscimo da taxa de exaustão que também é mantida ( $Q = 2,9\text{ m}^3/\text{s}$  e  $5,7\text{ m}^3/\text{s}$ ). Entretanto, não temos uma correlação estabelecida entre estes dois parâmetros a partir do modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009).



**Figura 34:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 5, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5\text{ atm}$ ,  $Q = 2,9\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1\text{ kg/s}$ ,  $t = 1$  minuto )

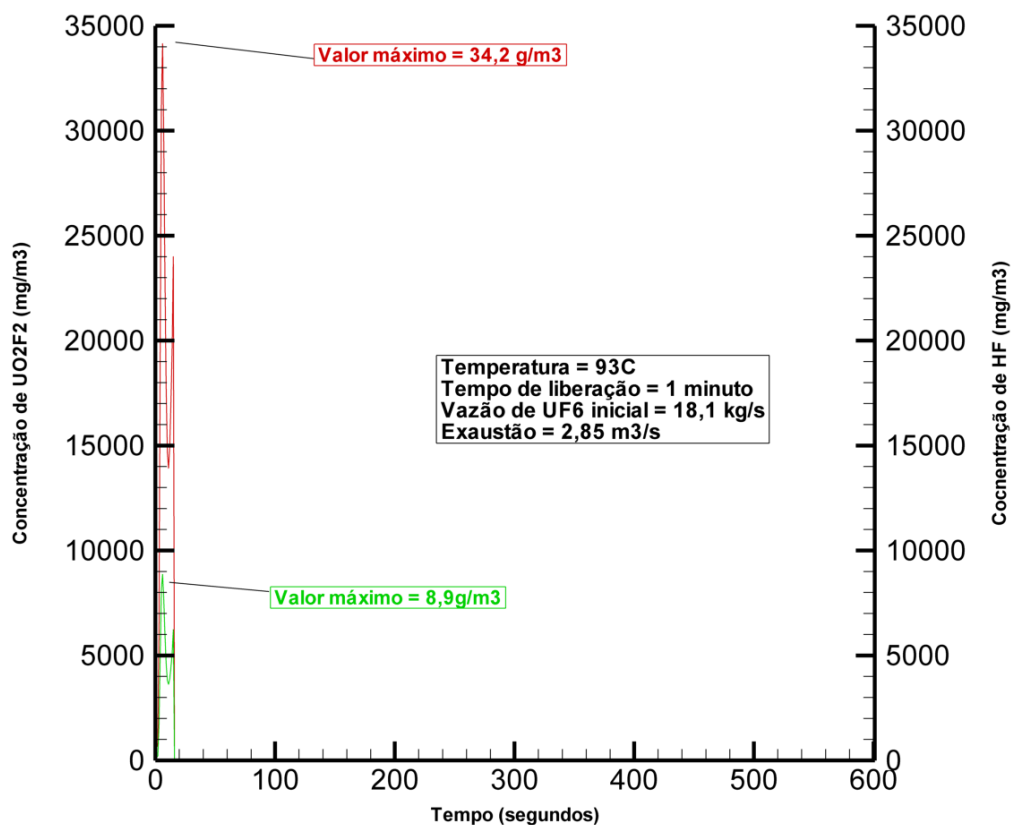


**Figura 35:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 6, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ,  $t = 1 \text{ minuto}$ )

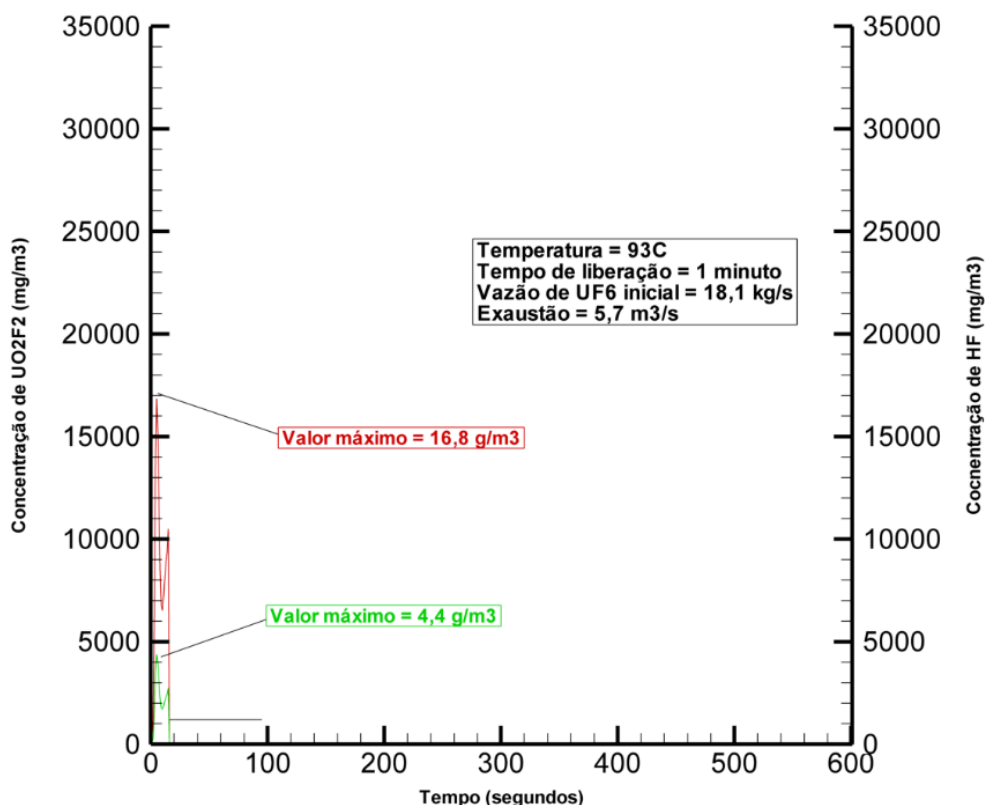
As Figuras 36 e 37 que cobrem os mesmos parâmetros dos Casos (5 e 6) para o modelo MPHMTTP, apresentaram valores de concentração próximos aos obtidos no modelo analítico, contudo ao avaliar o tempo de liberação entre os dois modelos que estão sendo apresentados neste trabalho foi observado a diferença na ordem de 6 vezes. No modelo MPHMTTP a liberação total ocorre em aproximadamente 20 segundos, considerando o input de liberação sendo os mesmos nos dois modelos usados nesta primeira parte da avaliação, indicando uma liberação de  $\text{UF}_6$  em um tempo extremamente curto.

O modelo MPHMTTP considera as contribuições das equações de turbulência e dos dados de insuflamento e exaustão do prédio, o que confere mediante a simulação, mostrando uma previsão dos valores satisfatórios e coerentes com o fenômeno físico, isto implica na observação a respeito da duplicação da vazão de exaustão, resultar na redução da taxa de liberação de  $\text{UF}_6$ . Outrossim, deve-se considerar que tal observação seja fruto do funcionamento previsto em projeto para eventual cenário de liberação acidental.

Em relação ao aumento de temperatura, podemos observar o acréscimo nos valores das concentrações, como segue: devido ao aumento da temperatura de 80°C ( $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 30,8 \text{ g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 8 \text{ g/m}^3$  (caso 1) e  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 15,6 \text{ g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 4 \text{ g/m}^3$  (caso 2)), para 93°C ( $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 34,2 \text{ g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 8,9 \text{ g/m}^3$  (caso 5) e  $C_{\text{UO}_2\text{F}_2} = 16,8 \text{ g/m}^3$  e  $C_{\text{HF}} = 8,9 \text{ g/m}^3$  (caso 6)) e considerando um mesmo tempo de liberação ( $t = 1$  minuto) temos uma relativa diferença entre os valores da concentração, indicando que existe relação direta entre o aumento de temperatura e o material dispersado no ambiente.

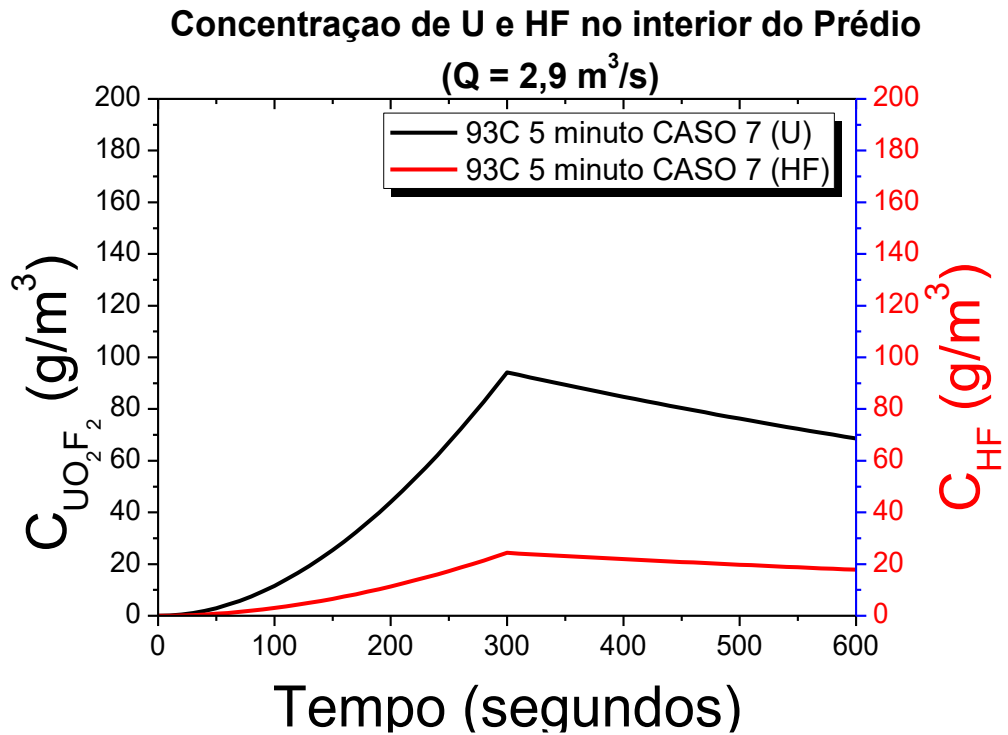


**Figura 36:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 5, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ,  $t = 1$  minuto), código MHPMTP

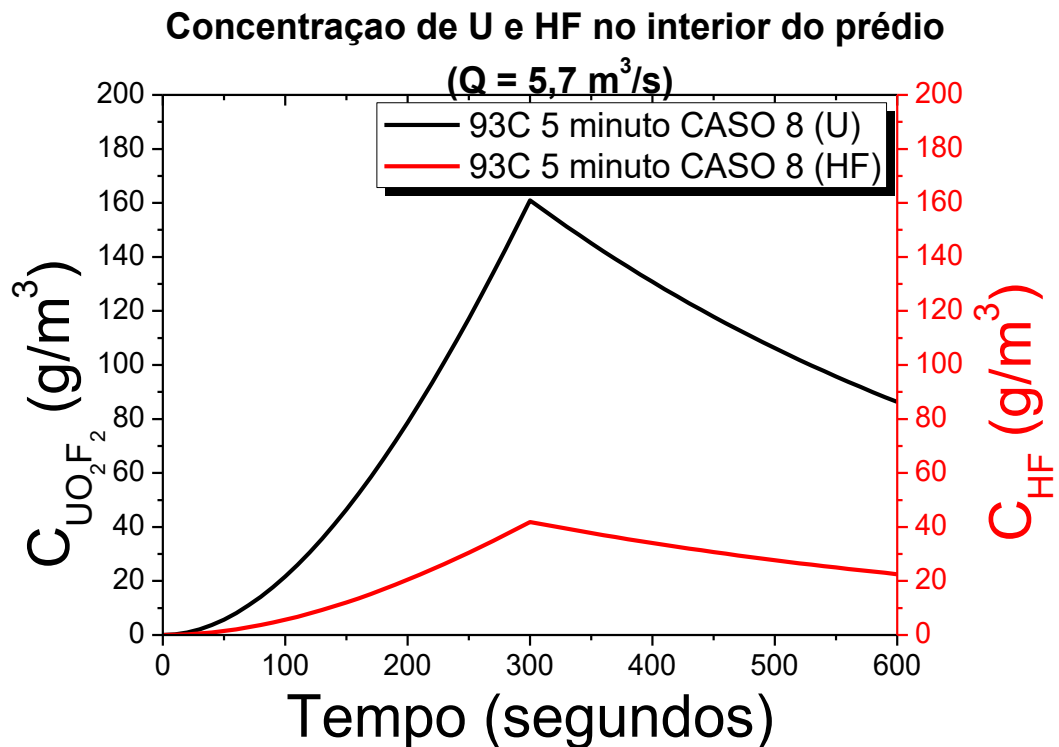


**Figura 37:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 6, ( $T = 93^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ,  $t = 1 \text{ minuto}$ ), código MHPMTP

As Figuras 38 e 39 apresentam os resultados das simulações dos casos 7 e 8 para o modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009). Neste trabalho é observado um aumento nos valores das concentrações, bem superior aos observados para os tempos de liberação de 5 minutos, nos Casos (3 e 4), embora a taxa de liberação de  $\text{UF}_6$  seja inferior para estes Casos (7 e 8),  $Q = 3,6 \text{ kg/s}$ . Entretanto, como a temperatura influencia na quantidade de material a ser disperso no ambiente, tais valores são frutos, da fração de líquido que se transforma ao ser liberado para o ambiente externo. Este perfil continua a denotar a observação relativa a vazamentos oriundos de válvulas ou pequenos orifícios, não sendo o caso abordado neste trabalho. É considerado que o modelo simplificado, apresenta condições conservadoras que não se ajustam ao fenômeno físico, uma vez que a temperatura apenas explica o acréscimo dos valores encontrados entre os Casos (3 e 4) e Casos (7 e 8), ao passo que os demais parâmetros permanecem constantes.



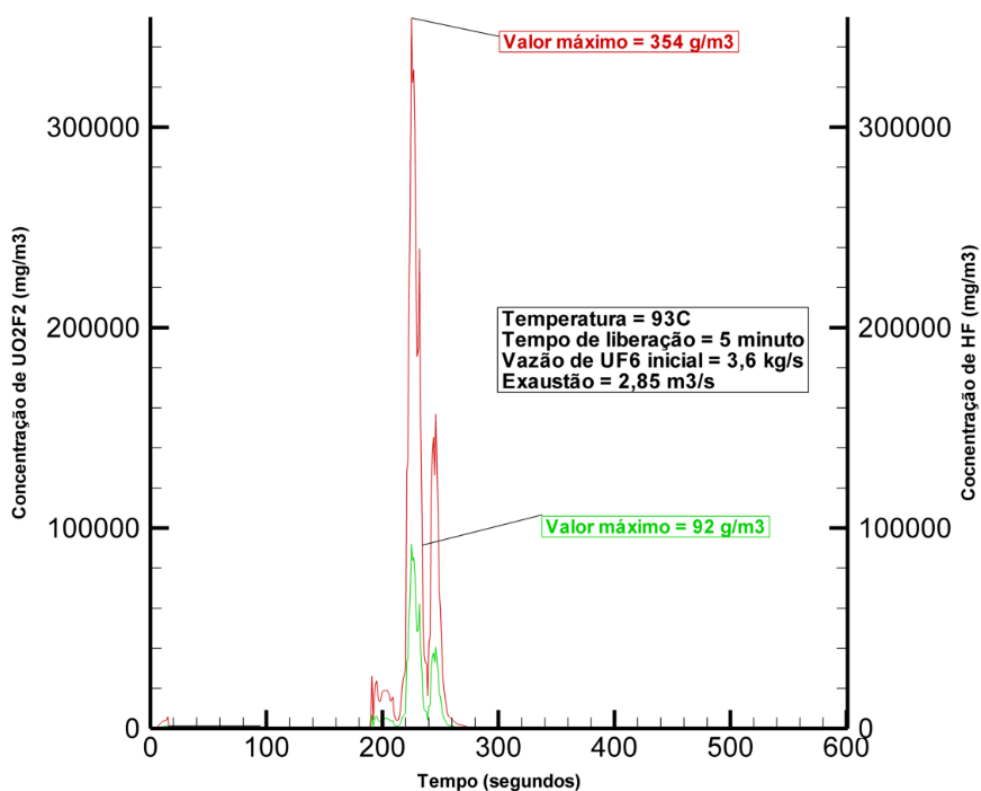
**Figura 38:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 7, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ,  $t = 5 \text{ minutos}$  )



**Figura 39:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 8, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ,  $t = 5 \text{ minutos}$  )

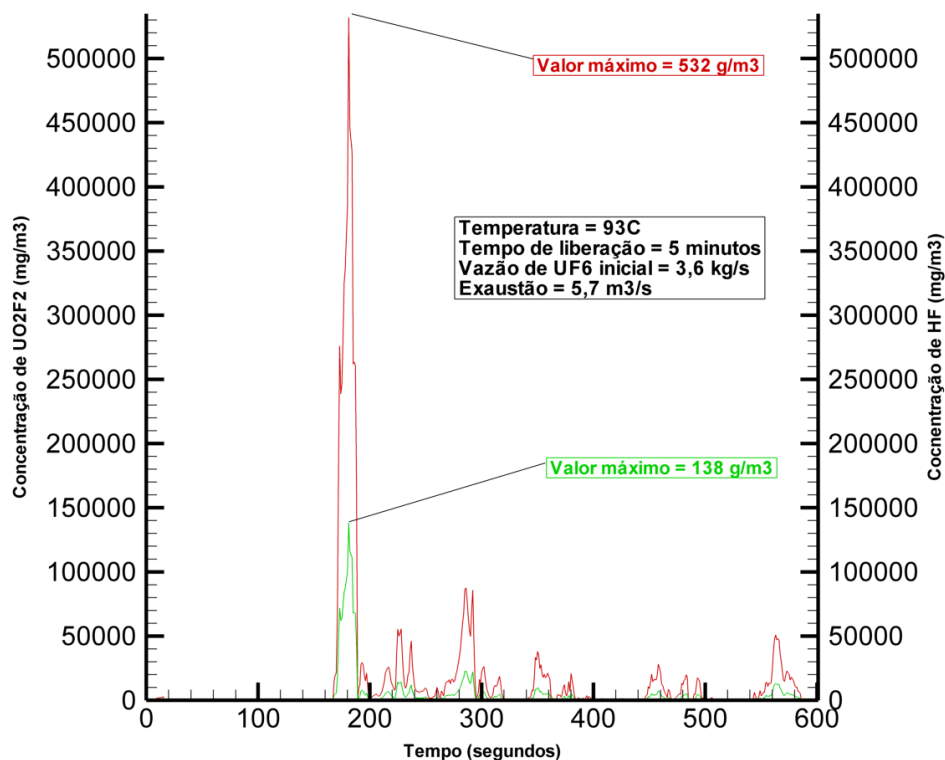
Enquanto as Figuras 40 e 41 apresentam os resultados das simulações dos Casos (7 e 8) para o modelo MPHMTTP, com as observações realizadas a respeito da comparação dos modelos (simplificado e MPHMTTP). Apesar de apresentar valores superiores, na ordem de 3 vezes, em relação ao modelo simplificado, o perfil de decréscimo nas concentrações de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  e HF não são observadas. Estas observações levam a uma consideração crítica dos modelos propostos para o caso das simulações de liberações provenientes de rupturas catastróficas.

Com base nestes resultados é aconselhável que os tempos a serem utilizados nestes modelos devem ser considerados na ordem de segundos, no máximo chegando ao limite de dezenas de segundos de liberação total, para ser contemplado como evento catastrófico.



**Figura 40:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 7, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ,  $t = 5 \text{ minutos}$ ), código MPHMTTP

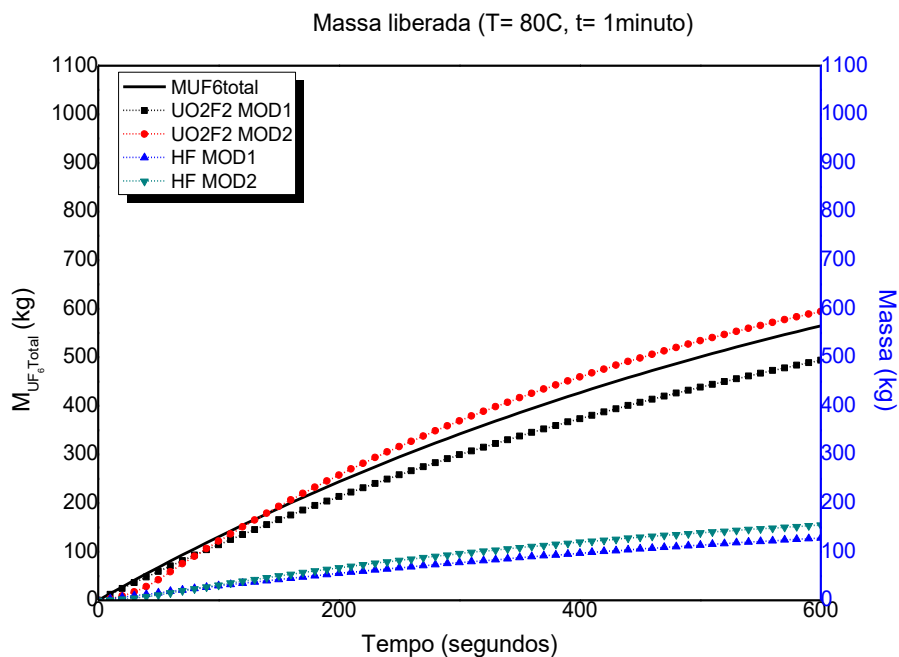




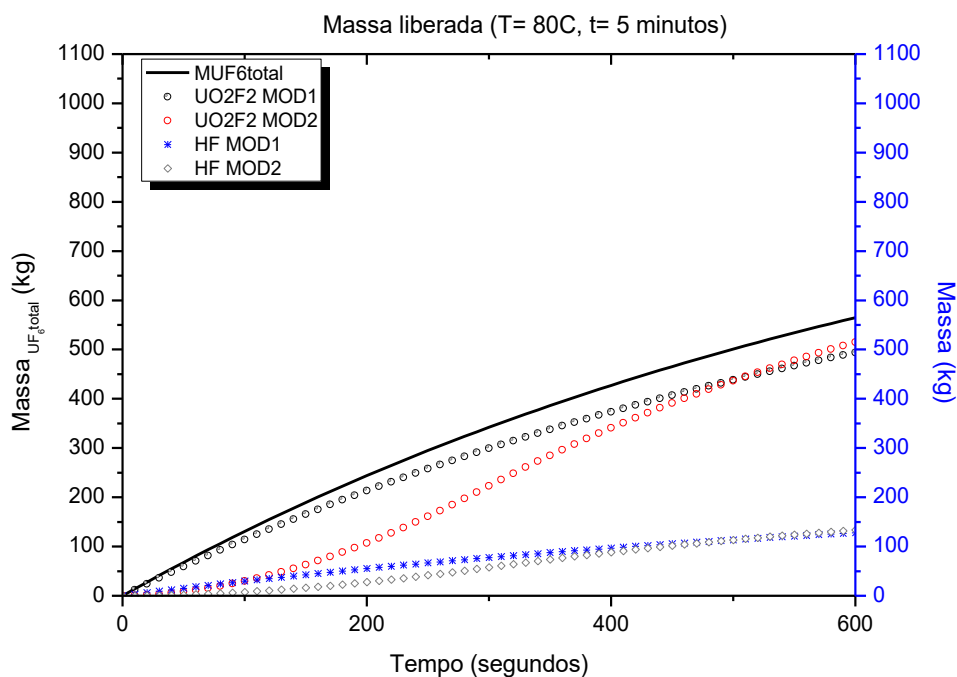
**Figura 41:** – Concentração de Urânio e HF do Caso 8, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q = 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,6 kg/s, t = 5 minutos ), código MHPMTP

Além das simulações realizadas a fim de comparação dos resultados de concentração, para o modelo simplificado de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009) e o modelo MPHMTTP, para basear parâmetros e respostas, também foi utilizado o modelo simplificado de (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996), em especial para averiguar os dados do modelo de Oliveira Neto e colaboradores. Este modelo, assim como o anterior citado servem de base para o cálculo imediato de eventuais cenários de liberações, onde seja necessário quantificar de forma não precisa os valores lançados no ambiente interno.

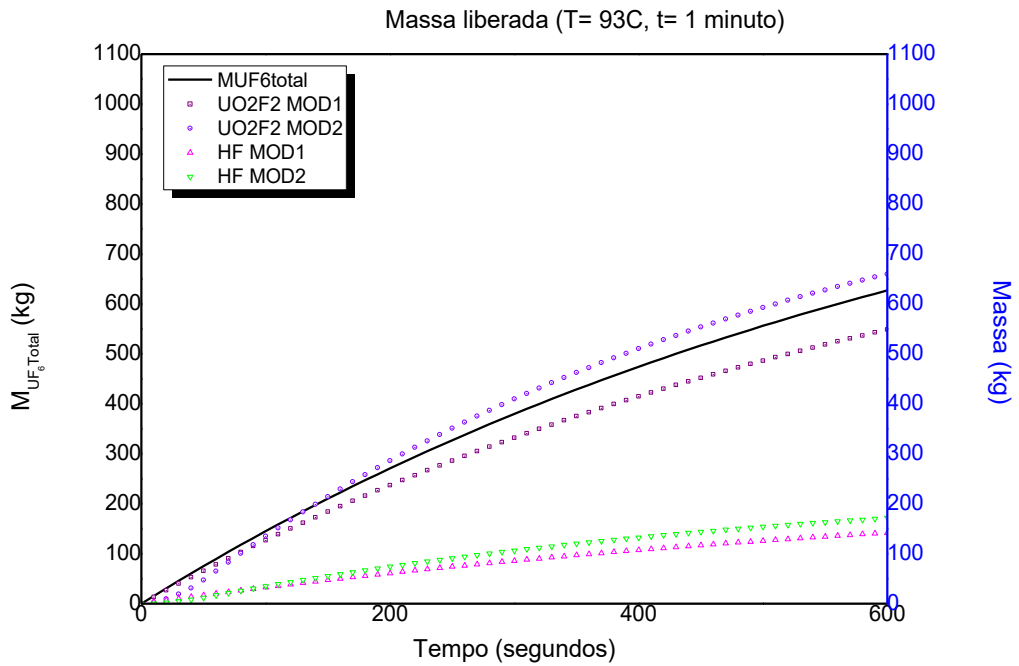
Os resultados são mostrados nas Figuras 42 e 43, onde MOD1 refere-se aos resultados obtidos pelo modelo de (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996) e MOD2 refere-se aos resultados obtidos pelo modelo de (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009), assumindo um acidente absoluto, durante 10 minutos. Não foi considerado a taxa de exaustão nestes modelos.



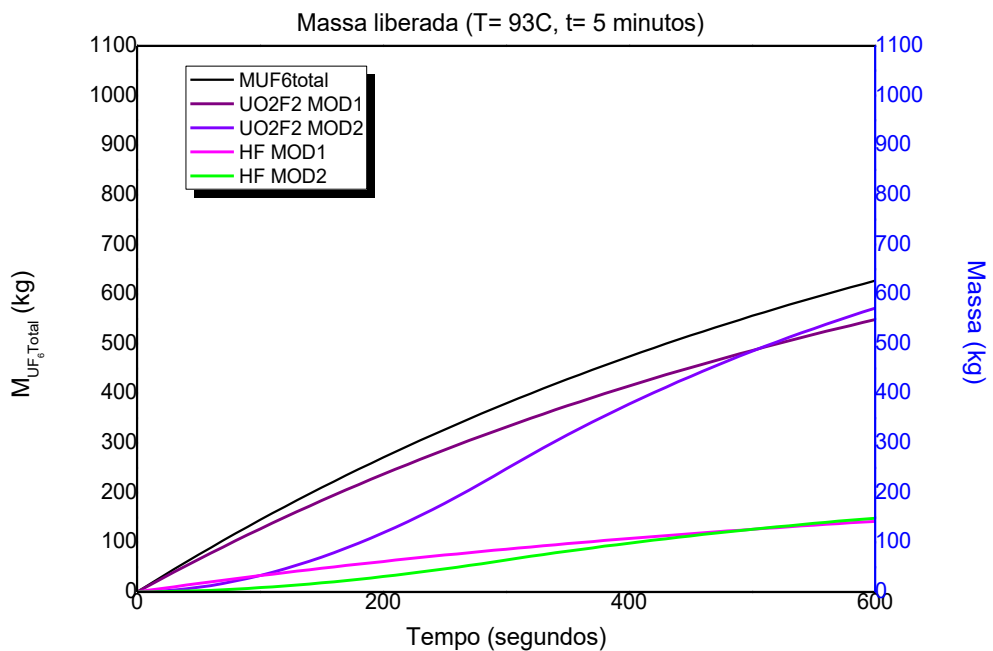
**Figura 42:** – Massa de  $UF_6$  e HF liberada em função de ( $t = 1$  minuto) e ( $T = 80^\circ C$ ), para tempo total de 10 minutos de liberação.



**Figura 43.a:** – Massa de  $UF_6$  e HF liberada em função de ( $t = 5$  minutos) e ( $T = 80^\circ C$ ), para tempo total de 10 minutos de liberação.



**Figura 44** – Massa de UF<sub>6</sub> e HF liberada em função de (t =1 minuto) e ( T = 93°C), para tempo total de 10 minutos de liberação.



**Figura 45** – Massa de UF<sub>6</sub> e HF liberada em função de (t = 5 minutos) e ( T = 93°C), para tempo total de 10 minutos de liberação.

Observa-se a existência de uma relação de dependência entre as concentrações de UF<sub>6</sub> e HF, tempo e temperatura. Como resultado, observou-se elevadas concentrações de urânio e de HF em todos os casos simulados (1 a 8). O termo fonte TF2, apresentou relativa elevação dos valores de concentração no máximo dos tempos de liberação 1 e 5 minutos (84g/m<sup>3</sup> para U e 22 g/m<sup>3</sup> para HF – 1 minuto e 94g/m<sup>3</sup> para U e 24g/m<sup>3</sup> para HF – 5 minutos), As concentrações médias de urânio e HF são listadas a seguir na Tabela27.

**Tabela 27:** Casos Simulados e concentrações de U e HF

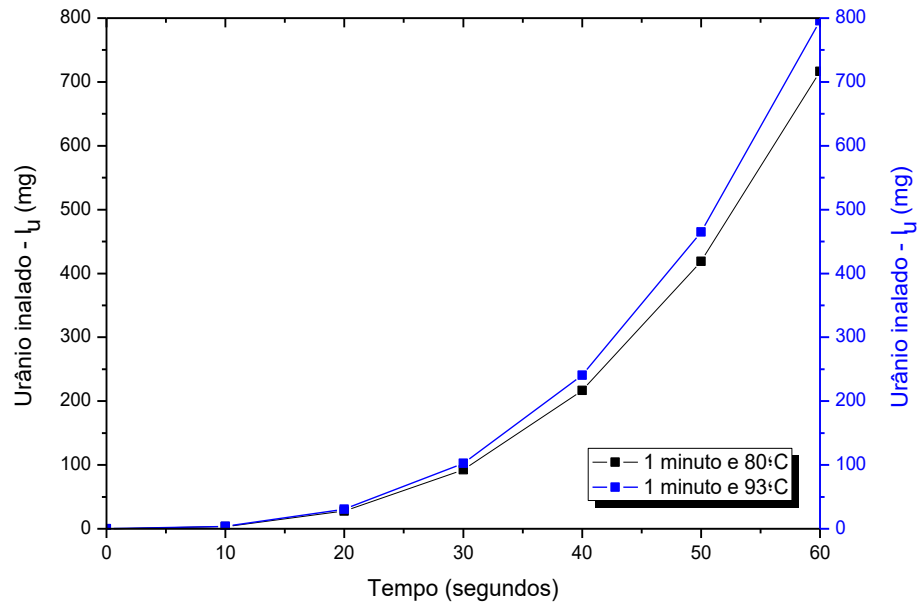
Concentrações médias de urânio e HF				
Exaustão	T= 80°C, t= 1 min		T = 93°C, t= 1 min	
	UF <sub>6</sub> (g/m <sup>3</sup> )	HF (g/m <sup>3</sup> )	UF <sub>6</sub> (g/m <sup>3</sup> )	HF (g/m <sup>3</sup> )
2,9m <sup>3</sup> /s	13,6	3,5	15,2	3,9
5,7 m <sup>3</sup> /s	20,8	5,4	23,1	6,2
Exaustão	T= 80°C, t= 5 min		T = 93°C, t= 5 min	
	UF <sub>6</sub> (g/m <sup>3</sup> )	HF (g/m <sup>3</sup> )	UF <sub>6</sub> (g/m <sup>3</sup> )	HF (g/m <sup>3</sup> )
2,9m <sup>3</sup> /s	50,7	13,1	56	14,6
5,7 m <sup>3</sup> /s	79,3	20,6	58,5	22,9

Considerando as concentrações estabelecidas, foi avaliado as quantidades que podem ser ingeridas ou inaladas pelo operador no momento da liberação de UF<sub>6</sub>. Para os casos em questão nos quais os tempos de liberação são limitados a 1 e 5 minutos e temperatura de 80°C e 93°C, temos seus resultados demonstrados nas Figuras 44 a 47.

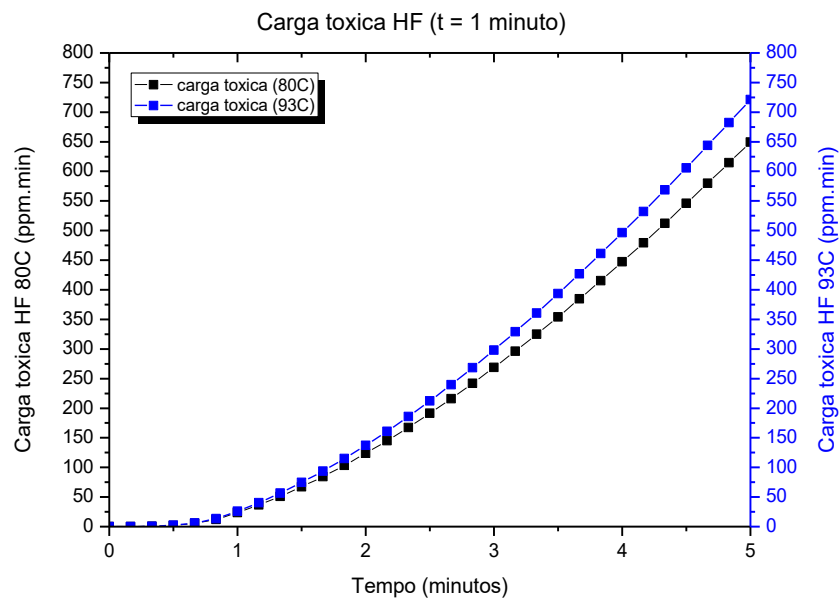
As concentrações médias de urânio e HF nas condições do Caso 1, são de 13,6g/m<sup>3</sup> e 3,5g/m<sup>3</sup>, respectivamente. Uma concentração média de 13,6g/m<sup>3</sup> resulta em uma inalação de urânio de 270 mg em menos de um minuto. Os gráficos foram construídos com base nas concentrações a cada  $\Delta t = 10$  segundos, conforme o próprio modelo simplificado. A Figura 44, mostra a ingestão de urânio no primeiro minuto da liberação de UF<sub>6</sub>, alcançando valor máximo de 700 e 800 mg (80°C e 93°C), respectivamente, em menos de um minuto.

A concentração de HF de 4g/m<sup>3</sup>, é bem acima da IDHL e ERPG-3, orientações usadas são IDHL = 25mg/m<sup>3</sup> e ERPG = 25ppm. A Figura 45 mostra a carga tóxica HF para os primeiros 5 minutos de liberação, que podem ser confrontados com os dados de mortalidade (%) por carga tóxica (ppm.min).

Estes resultados demonstram que pode ocorrer exposição por urânio a um operador nas proximidades do ponto de liberação, desde que esteja totalmente desprotegido e tal exposição pode ser letal para níveis de HF.



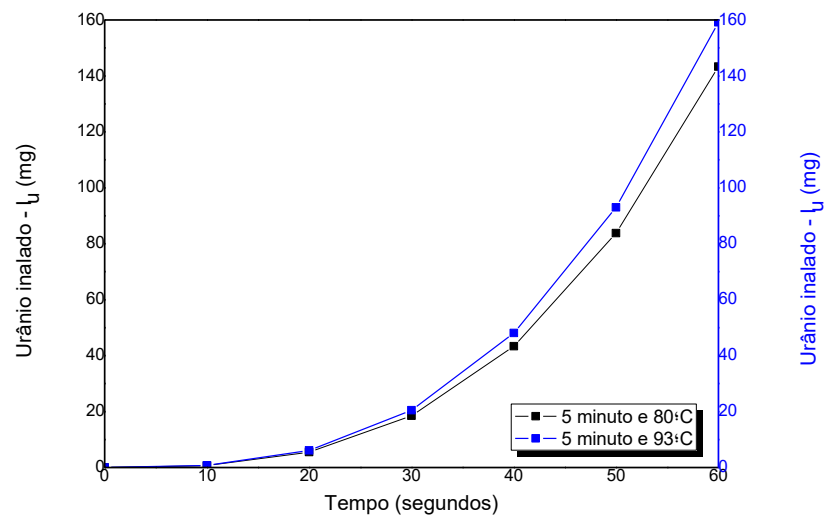
**Figura 46** – Urânio Inalado (mg) em função de (t = 1 minuto) e (T = 80°C e 93°C).



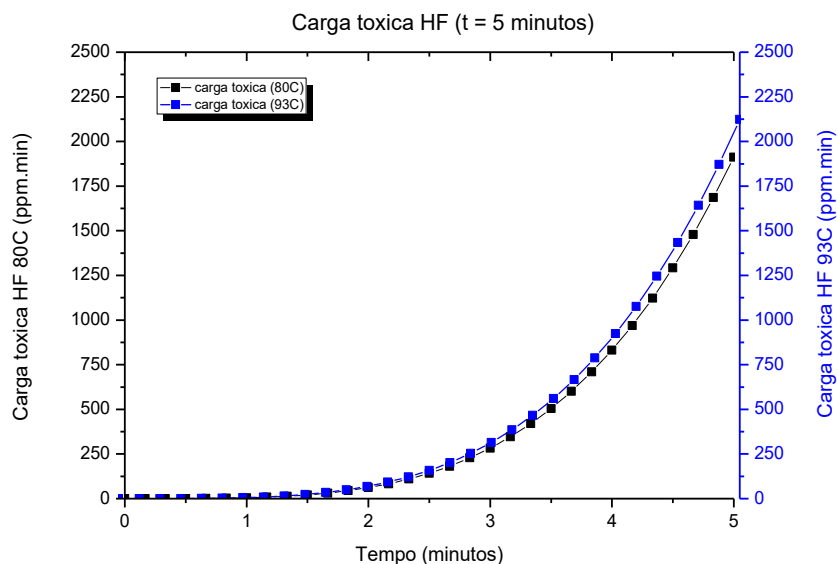
**Figura 47** - Carga tóxica de HF no prédio em função de (t = 1 minuto) e (T = 80°C e 93°C).

As mesmas avaliações ocorrem para as liberações no tempo de 5 minutos, sendo registradas através das Figuras 46 e 47. Entretanto, é observado um decréscimo no valor de urânio inalado, corroborando o resultado esperado, uma vez que uma liberação catastrófica em uma avaliação num período maior, leva a diluição dos produtos da hidrólise no volume do interior do prédio, ou seja, uma taxa média de liberação menor.

Mesmo com essa menor taxa média de liberação, a quantidade de HF presente no ambiente, representada na Figura 47, indica um aumento no valor da carga tóxica de HF, conforme a premissa de liberação de Oliveira e seus colaboradores (2009).



**Figura 48** – Urânio Inalado (mg) em função de ( $t = 5$  minutos) e ( $T = 80^\circ\text{C}$  e  $93^\circ\text{C}$ ).



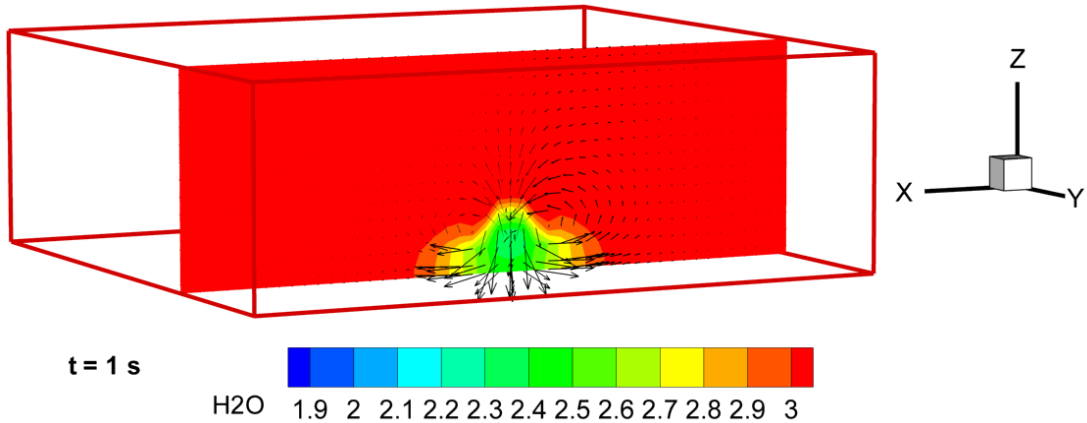
**Figura 49** - Carga tóxica de HF no prédio em função de ( $t = 5$  minutos) e ( $T = 80^\circ\text{C}$  e  $93^\circ\text{C}$ ).

### 5.3. Resultados da Simulação computacional

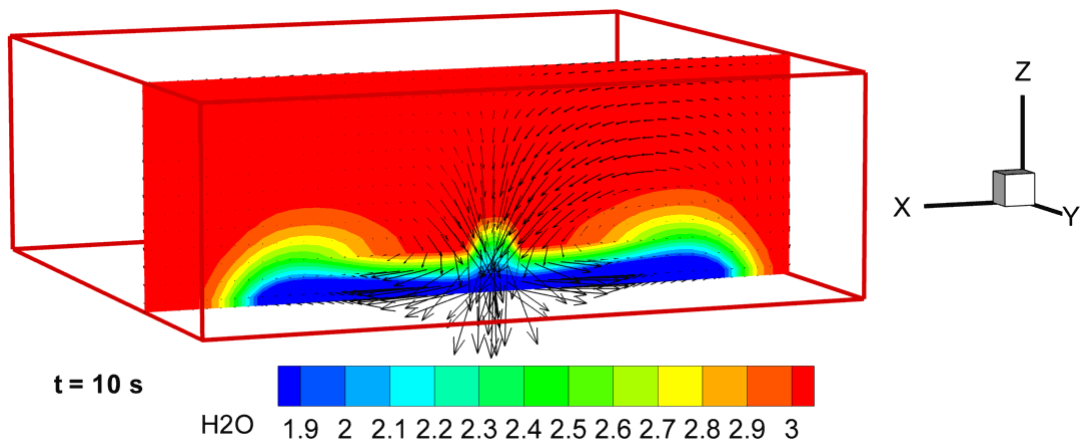
#### 5.3.1. Resultados da Umidade Computacional

O modelo proposto para a simulação computacional desenvolvida sugeriu o comportamento da distribuição transversal da umidade no escoamento gasoso, proveniente da liberação de  $UF_6$  (Figura 50), apontando para valores máximos de % de vapor de água no alto da sala e ao redor do ponto de liberação na ordem de 3% em  $t=1s$  e o decaimento da concentração após este período, atingindo a estabilidade de 1,9% em  $t=120s$ , para os casos onde o tempo de liberação é  $t_{liberação} = 5$  minutos.

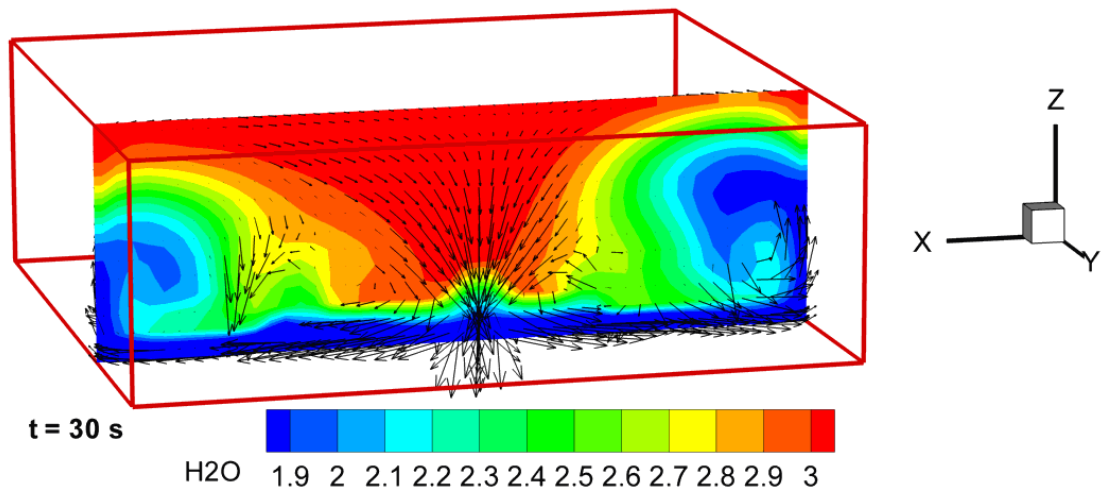
A Figura 53 apresenta o comportamento da percentagem de vapor d'água em relação ao eixo tempo de 120 segundos, pois nos casos de  $t_{liberação} = 1$  minuto, não ocorre uma estabilidade propriamente dita, mas um arranjo na distribuição desta percentagem de vapor d'água.



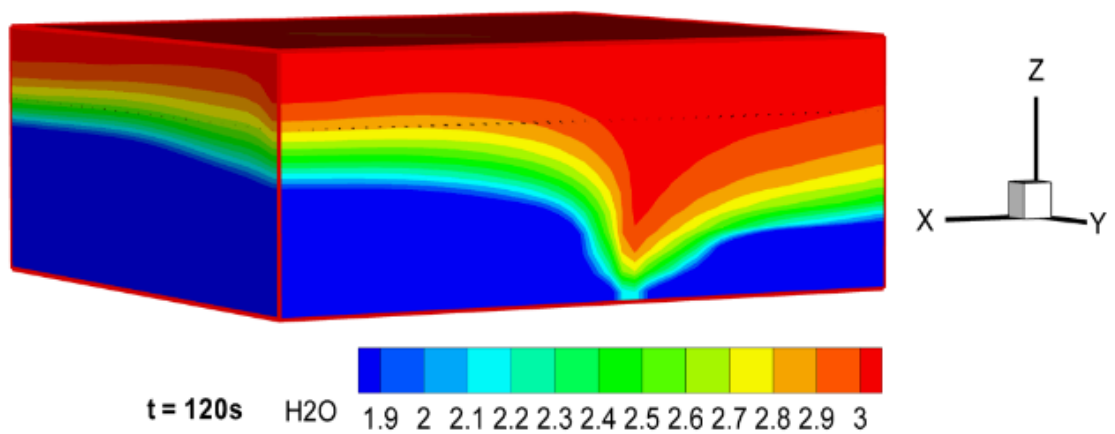
**Figura 50** - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo ( $t = 1s$ ).



**Figura 51** - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo ( $t = 10s$ ).



**Figura 52** - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo (t = 30s).

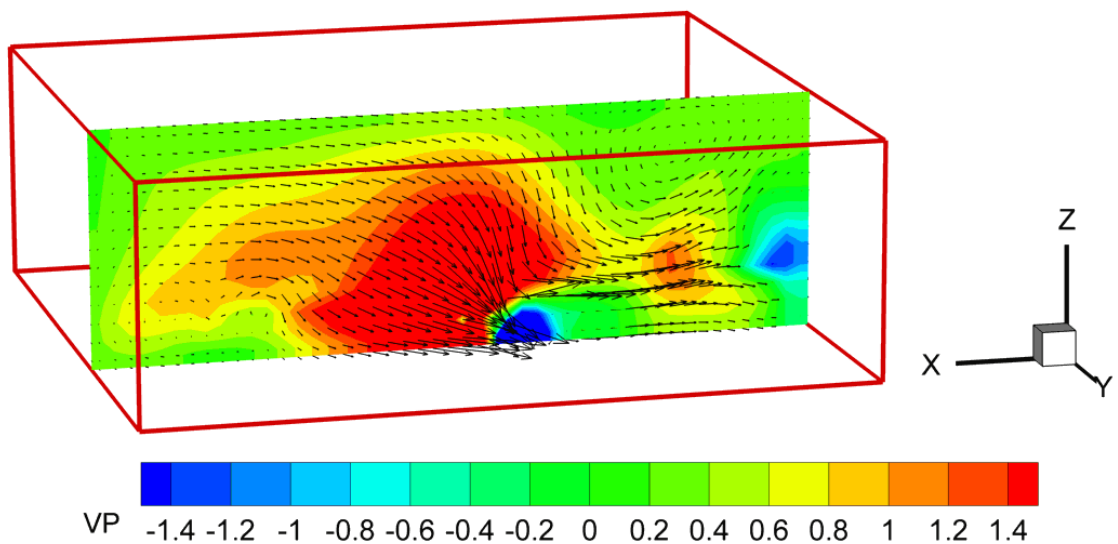


**Figura 53** - Simulação da % de vapor d'água em relação ao tempo (t = 120s).

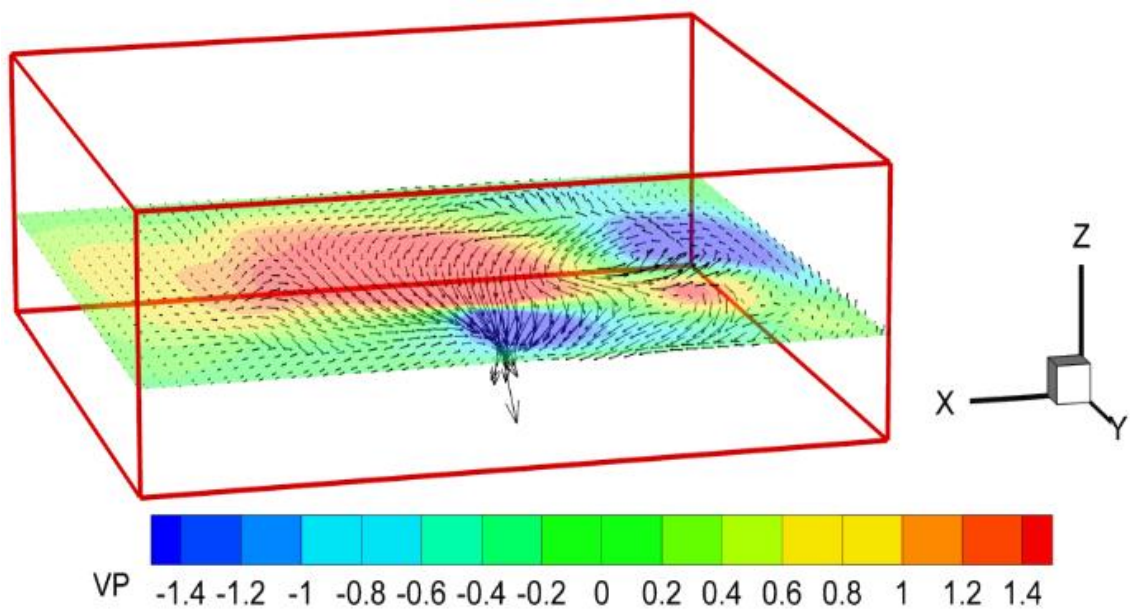
### 5.3.2. Resultados de Velocidade da Simulação Computacional

As Figuras apresentam as velocidades instantâneas no eixo horizontal (Fig.54) e vertical (Fig. 55) respectivamente e retratam o comportamento da velocidade do escoamento gasoso (m/s) em t=1s.





**Figura 54** - Simulação da velocidade em relação ao tempo ( $t=1s$ )



**Figura 55** - Simulação da velocidade em relação ao tempo ( $t=1s$ )

É importante citar que a velocidade simulada no eixo horizontal (Fig. 54) apresentou resultado próximo de zero nas regiões afastadas no ponto de liberação e próximas as paredes, o que comprova que o escoamento gasoso possui comportamento de perfil vertical. A simulação também demonstrou o comportamento distribuído da velocidade da pluma ao longo do eixo vertical do prédio de processo em direção aos dutos de exaustão, onde em  $t=1s$  o escoamento gasoso apresentou velocidade vertical modular de 0,6 a 1,4 m/s.

### 5.3.3. Resultados de Dispersão do UF<sub>6</sub> gasoso

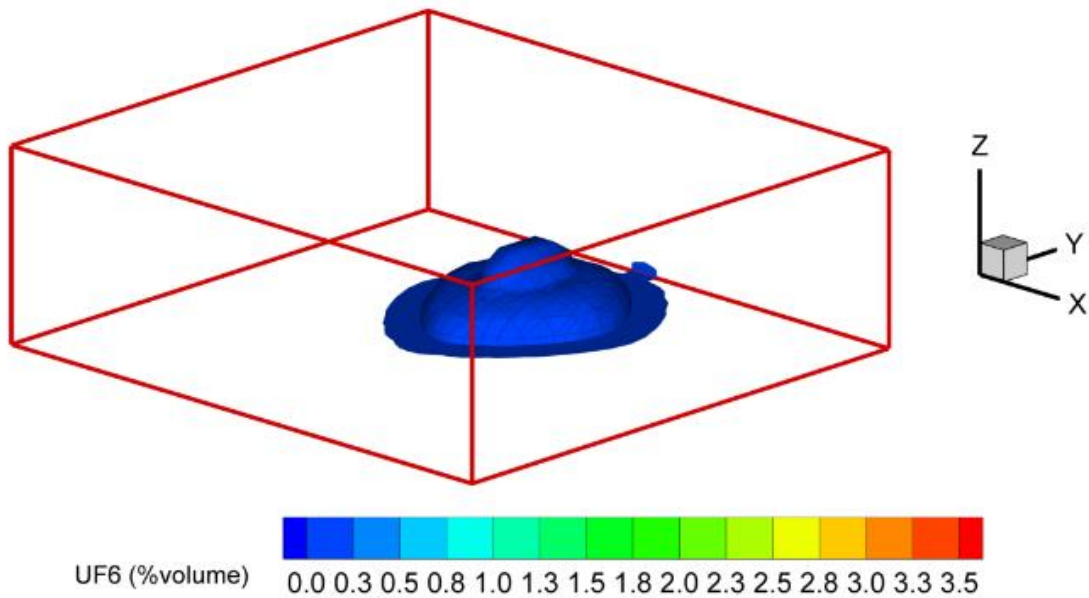
#### CASO 1

As Figuras 56 a 59 apresentam as visualizações em 3D dos cenários encontrados na simulação do caso 1, onde é considerada a temperatura de aquecimento de 80°C, a pressão do gás no interior do cilindro 2,5bar e a vazão de exaustão de 2,9m<sup>3</sup>/s e a taxa de liberação de UF<sub>6</sub> de 16,3 kg/s, respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 1 minuto e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos t=1s, 10s, 30s e 60s.

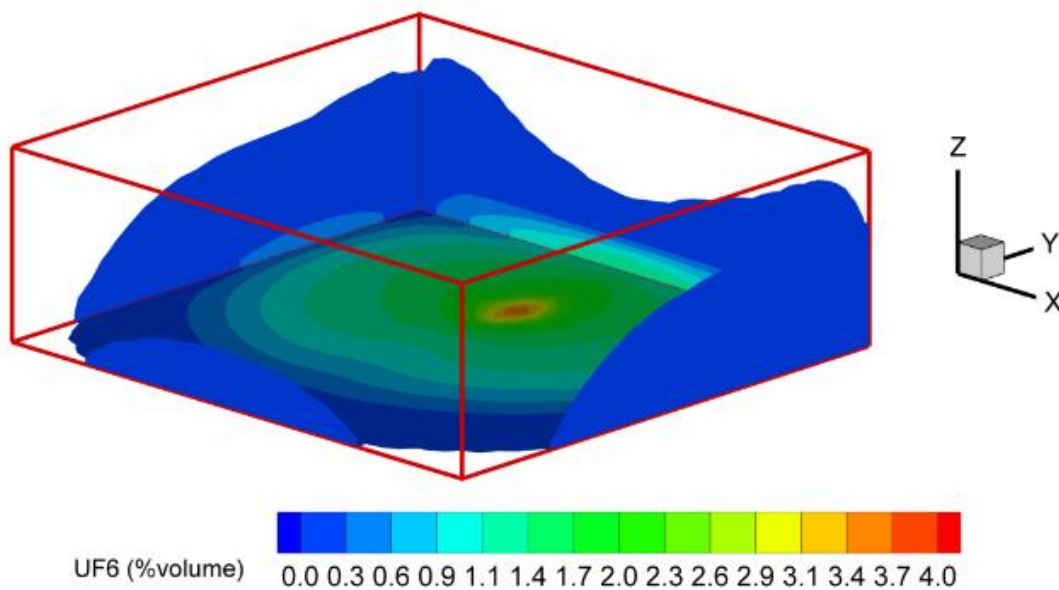
É observada uma dispersão do gás próximo ao seu ponto de liberação, em t=1s (Fig. 56), que é condizente com os resultados observados por (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996). À medida que o tempo passa, t=10s (Fig. 57), temos um espalhamento da pluma do UF<sub>6</sub>, que é um gás denso, através do ambiente alcançando em poucos segundos uma área considerável do prédio. Nesta figura é observado o efeito do escoamento nas paredes. No ponto de liberação, a respeito do comportamento da % volume de UF<sub>6</sub>, o modelo computacional indica o valor máximo de 1,2% e um decréscimo de forma radial ao longo do ponto de liberação. Desta forma, a imagem isocinética (Fig. 58) corrobora para este resultado, demonstrando a dispersão ao redor do ponto de liberação, em t=30s. Na última imagem (Fig. 59) pode-se observar que, em t=60s, existe um decréscimo na % volume do UF<sub>6</sub>, na ordem de 10 vezes, ao término do tempo de liberação.

Tais cenários desta simulação computacional, indicam fortemente os cenários já previstos por (Siman-Tov, 1984) nos casos de liberações de UF<sub>6</sub>, entretanto a modelagem que possibilite a visualização deste cenários é algo que ainda não havia sido proposto em trabalhos anteriores.

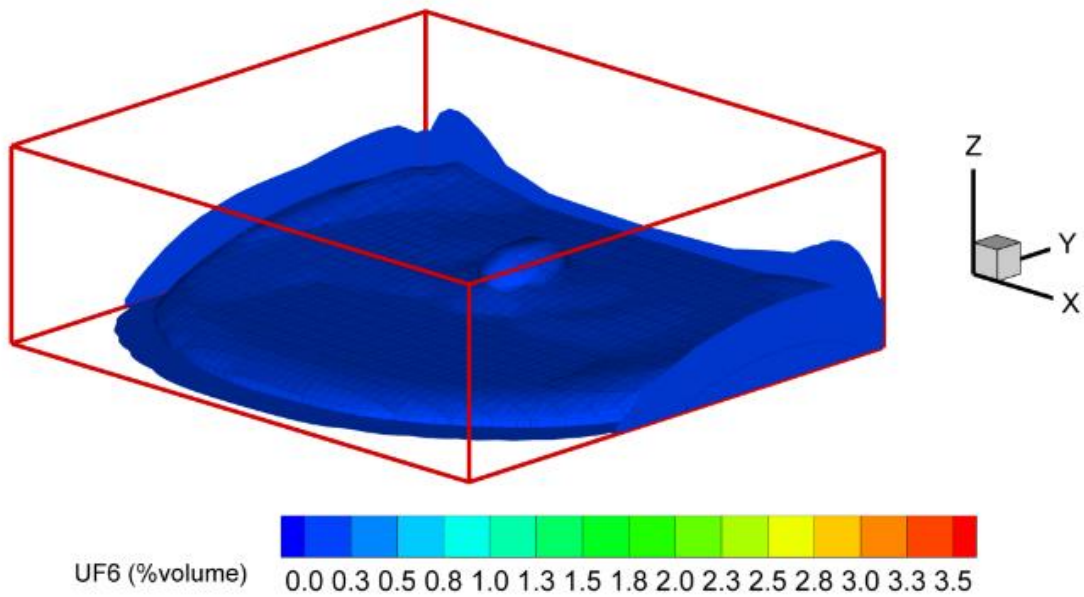
Apesar desta simulação, neste primeiro caso, não possibilitar a avaliação setorial pelo método experimental, o resultado foi bastante satisfatório uma vez que foi possível obter uma primeira versão deste código e aplicar nos demais casos, de forma a dar continuidade ao estudo, visando avaliar a influência de temperatura e das vazões de exaustão no prédio de processo.



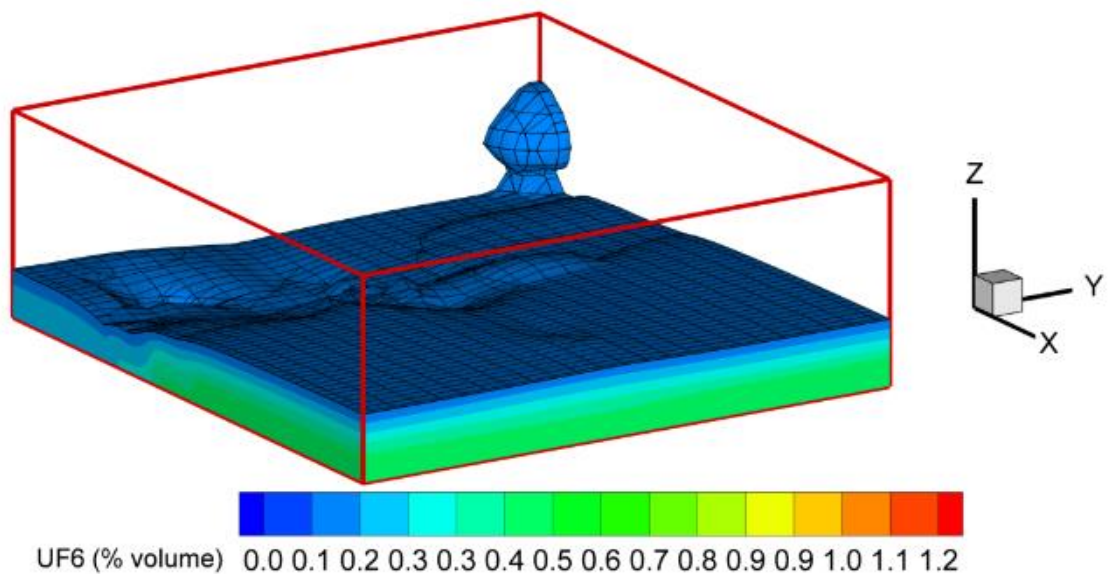
**Figura 56** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t = 1 s.,  
 Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP



**Figura 57** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t = 10 s.,  
 Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP



**Figura 58** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t = 30 s.,  
 Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP

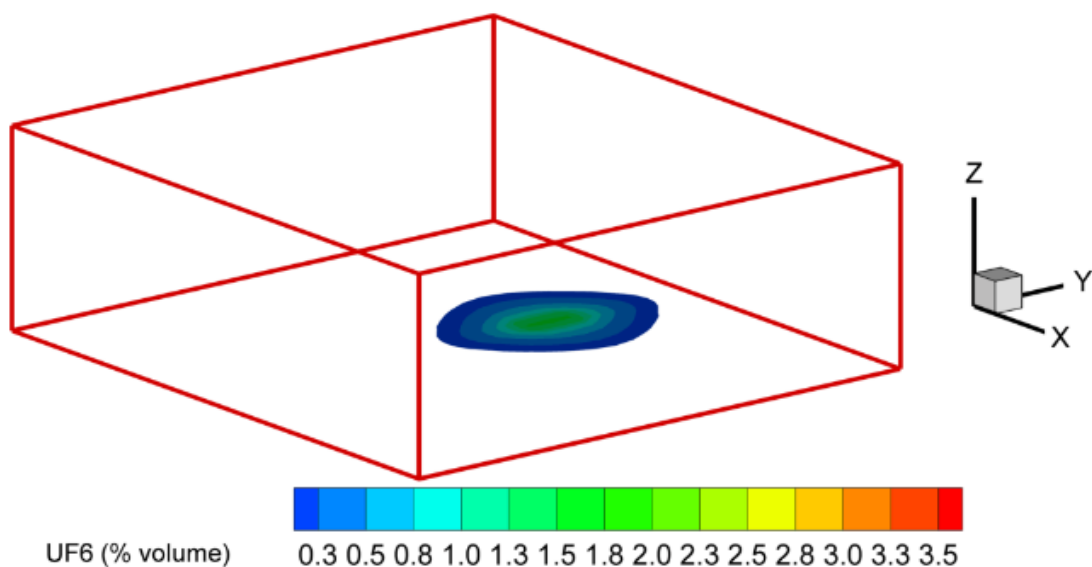


**Figura 59** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t = 60 s.,  
 Caso 1, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP

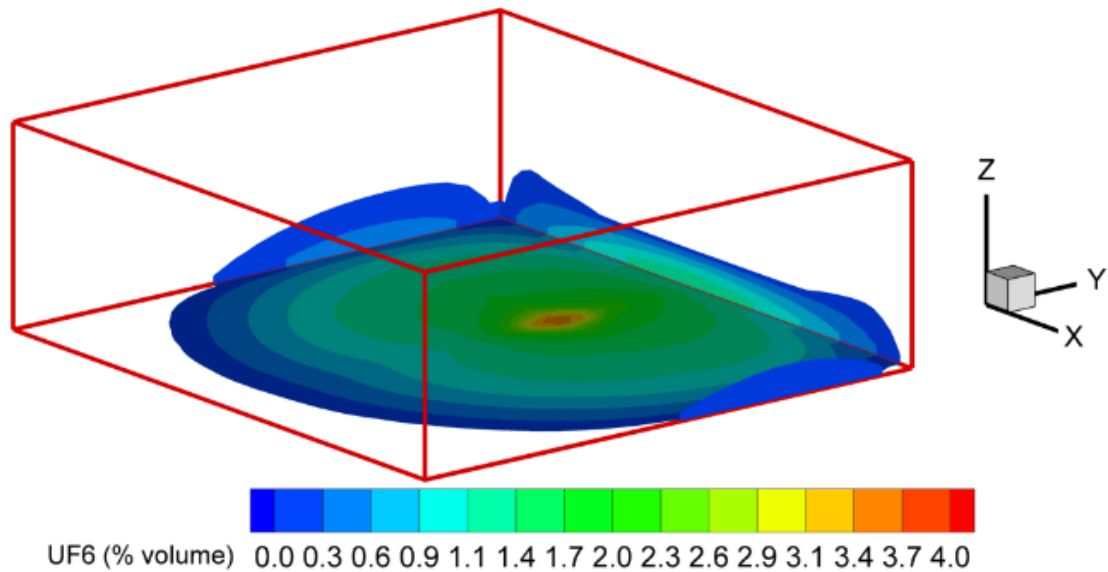
## CASO 2

As Figuras 60 e 61, assim como as Figuras do Caso 1, apresenta uma visualização em 3D especificamente a dois cenários encontrados na simulação do Caso 2, onde é considerada a temperatura de aquecimento de 80°C, a pressão do gás no interior do cilindro de 2,5bar e a vazão de exaustão e taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 5,7m<sup>3</sup>/s e 16,3 kg/s, respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 1 minuto e o tempo total do evento são 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos t=1s e 10s e que serão adotados nos demais casos, a fim de realizarmos comparações entre os resultados obtidos pelo modelo computacional MPHMTTP.

É observado que a dispersão do gás próximo ao seu ponto de liberação, em t=1s (Fig. 60), é mantida e que à medida que o tempo passa, t=10s (Fig. 61), também é observado o espalhamento da pluma de UF<sub>6</sub>. Entretanto, a imagem no qual t=10s (Fig. 61), tem-se um decréscimo neste espalhamento, nas proximidades das paredes. Porém os valores médios (%volume de UF<sub>6</sub> = 3,7 – 4,0), próximo ao ponto de liberação permanecem os mesmos. O decréscimo em t=60s para os valores de %volume de UF<sub>6</sub> neste caso é o mesmo observado no Caso 1.



**Figura 60** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=1s, Caso 2, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MPHMTTP



**Figura 61** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t = 10s, Caso 2, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q = 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação = 16,3 kg/s), código MHPMTP

Tal observação é corroborada pelo aumento da vazão de exaustão, que neste caso é referida como exaustão de emergência (5,7 m<sup>3</sup>/s), sendo prontamente comutada nos casos de liberações. Este mecanismo é previsto para dirimir e mitigar eventuais dispersões acidentais nos ambientes confinados dos prédios de processo de instalações do ciclo do combustível nuclear.

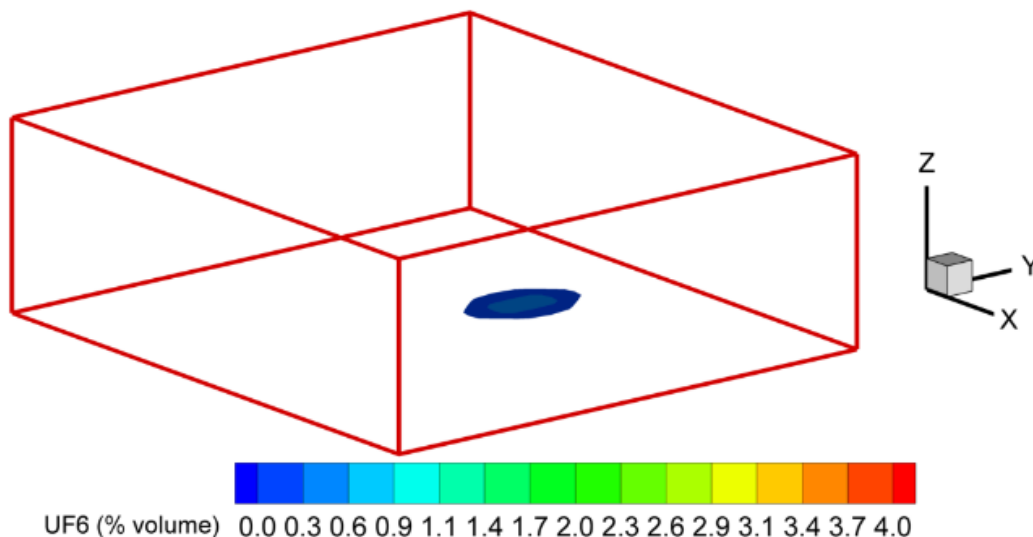
Logo, pode-se afirmar que a exaustão é um fator importante para estes dois casos (Casos 1 e 2) simulados, os quais tiveram apenas a variação da vazão de exaustão, mostrando inicialmente ser ponto significativo para a evolução da dispersão do UF<sub>6</sub> gasoso no ambiente e o decréscimo da concentração, ao levar em conta a taxa de renovação inserida pelo sistema de ventilação destes tipos de instalações.

### CASO 3

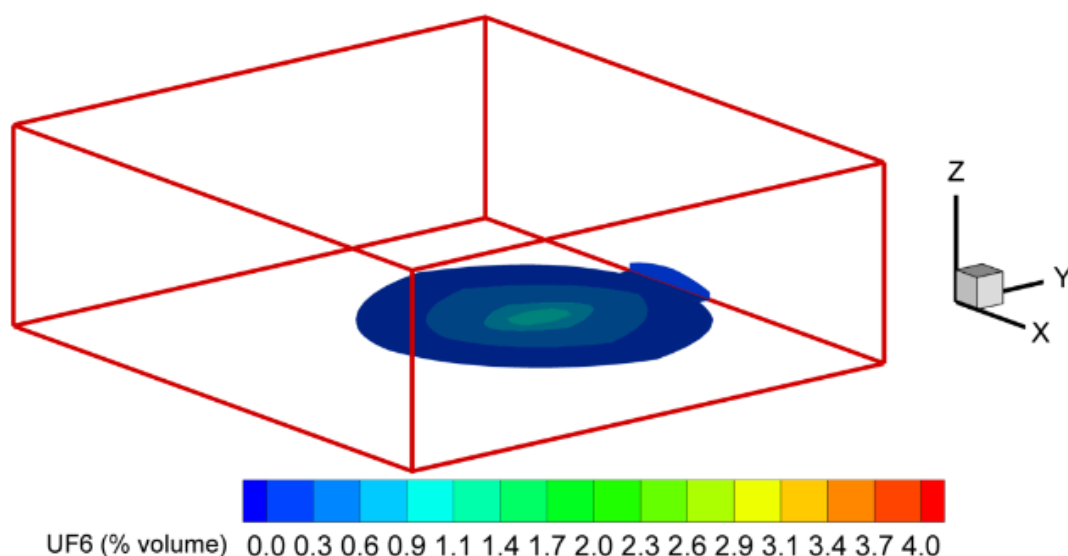
A Figura 53, apresenta os dois cenários encontrados na simulação do Caso 3, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $80^{\circ}\text{C}$ ), sendo a pressão do gás no interior do cilindro ( $2,5\text{bar}$ ) e a vazão de exaustão  $2,9\text{m}^3/\text{s}$  e taxa de liberação de  $\text{UF}_6$   $3,3\text{ kg/s}$ , respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos  $t=1\text{s}$  e  $10\text{s}$ . Este caso visa avaliar a influência que ocorre numa eventual expansão em um maior período, que implica numa menor taxa de liberação de material.

Mediante a observação dos resultados em  $t=1\text{s}$  (Fig. 62) e  $t=10\text{s}$  (Fig. 63), temos uma menor liberação radial e espalhamento da pluma de  $\text{UF}_6$ , a partir do ponto de liberação de  $\text{UF}_6$ , quando comparado com o Caso 1. Isto é condizente com a proposta da avaliação, pois ao reduzir a taxa de liberação teremos menor quantidade de  $\text{UF}_6$  liberado para o ambiente. Este desempenho corrobora a correlação proposta inicialmente o que demonstra uma resposta satisfatória para o modelo.

É observado que a dispersão do gás próximo ao seu ponto de liberação, em  $t=1\text{s}$  (Fig. 62), é mantida e que à medida que o tempo passa  $t=10\text{s}$  (Fig. 63), também é observado o espalhamento da pluma de  $\text{UF}_6$ , porém os valores médios de  $\text{UF}_6$  (% volume) são diferentes dos casos anteriores, onde as taxa de liberação são superiores em até 6 ordens de grandeza. No ponto de liberação, a respeito do comportamento da % volume de  $\text{UF}_6$ , o modelo computacional indica o valor máximo de  $0,4\%$  e um decréscimo de forma radial ao longo do ponto de liberação.



**Figura 62** – Simulação da dispersão de  $\text{UF}_6$  em relação a  $t=1\text{s}$ , Caso 3, ( $T = 80^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 2,5\text{ atm}$ ,  $Q = 2,9\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3\text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 63** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=10s, Caso 3, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s), código MHPMTP

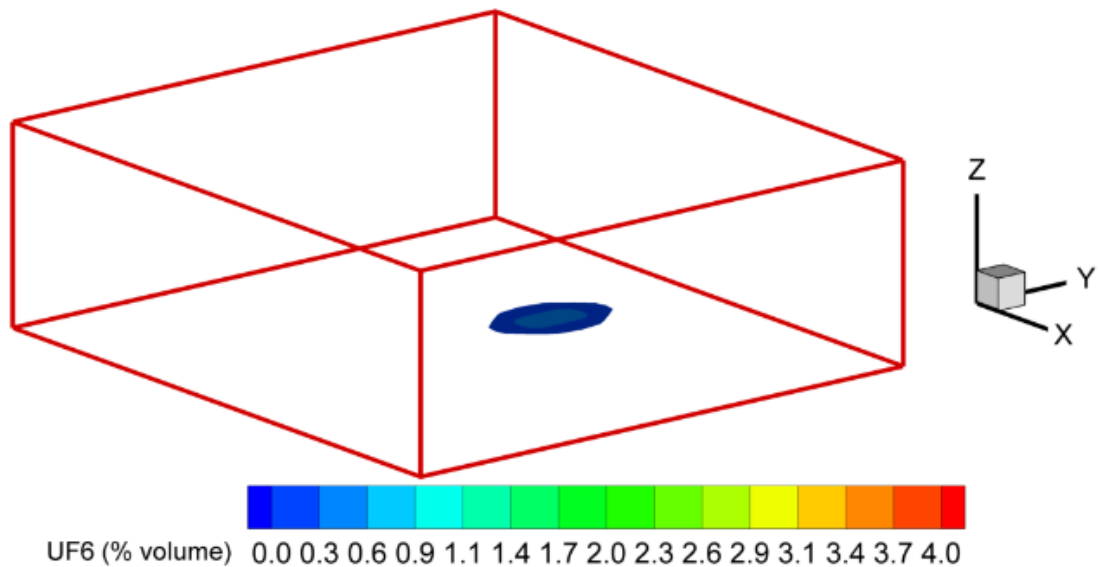
#### CASO 4

As Figuras 64 e 65 apresentam os dois cenários considerados na simulação do caso 4, onde é mantida a temperatura de aquecimento (80°C), sendo a pressão do gás no interior do cilindro (2,5bar) e a vazão de exaustão e a taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 5,7m<sup>3</sup>/s e 3,3 kg/s, respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos t=1s (Fig. 64) e 10s (Fig. 65).

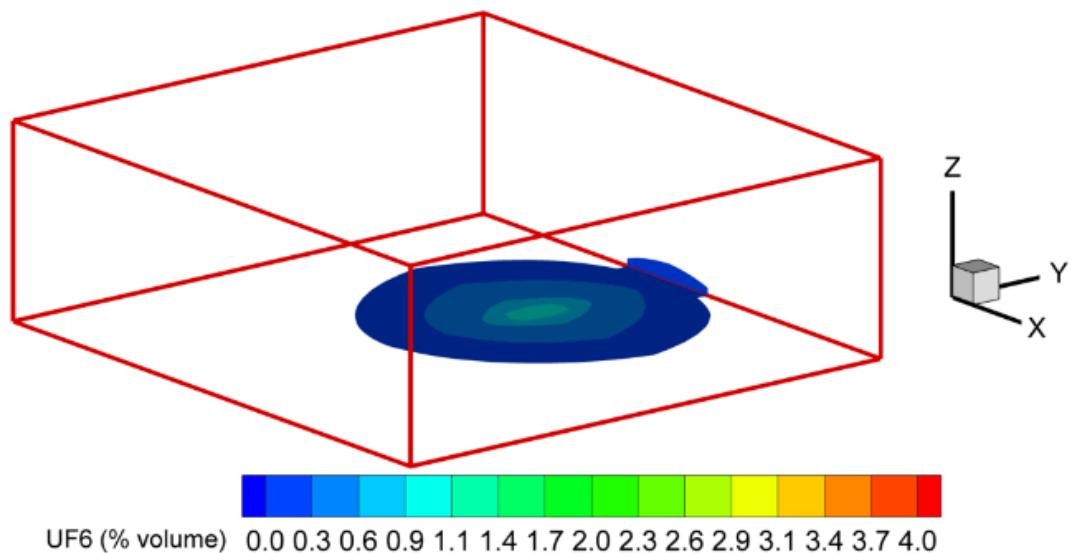
Não existe uma mudança substancial nos parâmetros deste caso, com exceção da vazão de exaustão, que passa a ser o dobro. Mesmo assim em relação ao caso anterior, não é constatada uma maior dispersão do material ou mudança na % em volume de UF<sub>6</sub> no ambiente em detrimento deste aumento da vazão. Uma das hipóteses levantadas durante este trabalho é que devido as condições estabelecidas neste caso, o valor muito baixo de taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, considerando o cenário de liberação catastrófica, não é suficiente para ser percebida ou que até mesmo todo o material é exaurido.



Em relação a este primeiro grupo de casos (Casos 1, 2, 3 e 4), que leva em conta a temperatura (80°C) e pressão (2,5 atm) constantes, provenientes da simulação computacional do modelo MPHMTTP e variando-se as taxas de liberação, vazão de exaustão e tempo de liberação, é dito que os valores e comportamentos observados são condizentes com os disponíveis na literatura.



**Figura 64** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=1s, Caso 4, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s), código MHPMTP



**Figura 65** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=10s, Caso 4, (T = 80°C, P = 2,5 atm, Q= 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s), código MHPMTP

Com os valores do parâmetro de saída (% volume de UF<sub>6</sub>), foi obtida boa relação, que reforçou a expectativa em relação ao aumento da vazão de exaustão, contribuindo para diminuir a participação do UF<sub>6</sub> na reação de hidrólise (Casos 1 e 2). Nestes casos, ocorre a maior taxa de liberação (16,3 kg/s) em 80°C e sendo possível observar a redução da dispersão do UF<sub>6</sub> no ambiente.

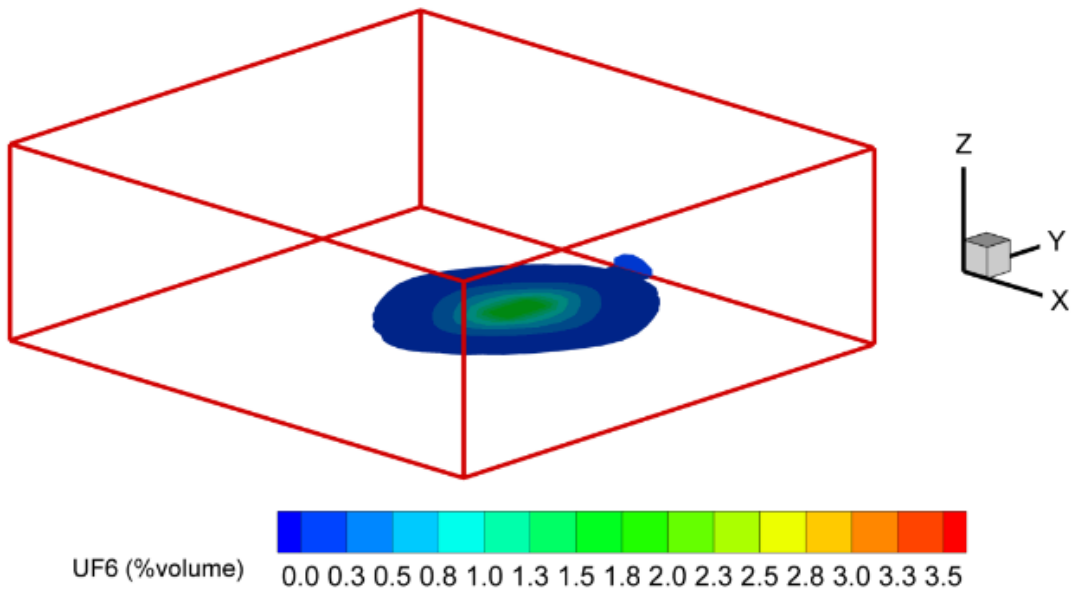
Também era esperada uma menor dispersão de UF<sub>6</sub>, nos casos em que a taxa de liberação fosse menor, isto devido ao maior tempo de liberação (5 minutos), entretanto esta situação é observada em liberações que tem suas taxas de liberação constantes, diferente do proposto neste trabalho. Desta forma, foi evidenciada uma pequena dispersão radial no resultado dos Casos 3 e 4, (taxa de liberação = 3,3 kg/s e Vazão de exaustão = 2,9 e 5,7 m<sup>3</sup>/s, respectivamente) em curto período de simulação, coerente com o cenário proposto. Porém tal resultado é mais proveniente da taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, do que da vazão de exaustão.

#### CASO 5

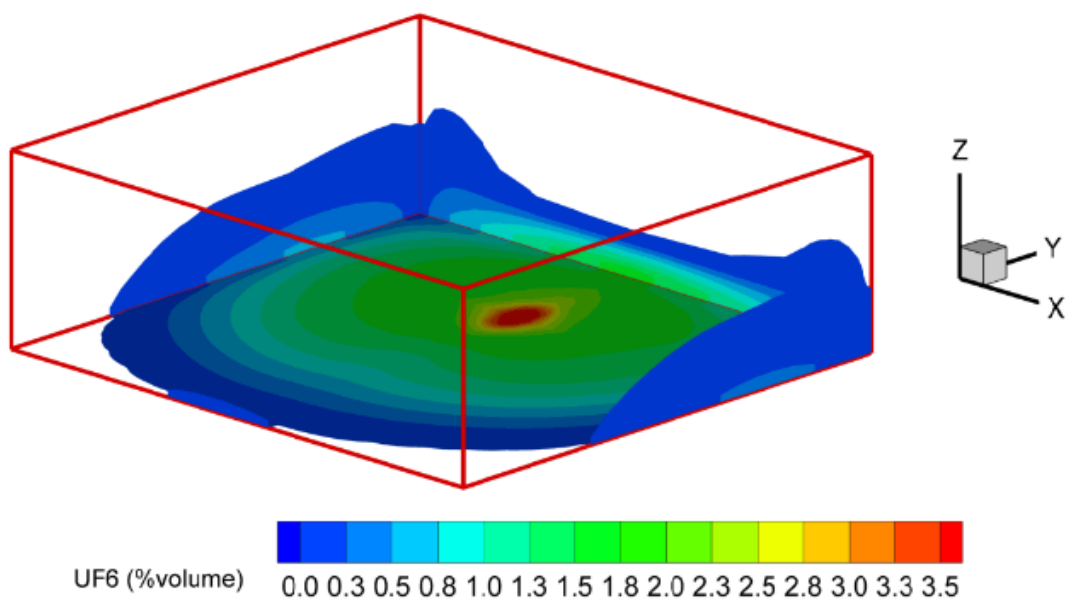
A Figura 55 apresenta os dois cenários escolhidos na simulação do Caso 5, onde é alterada a temperatura de aquecimento (93°C), assim como a pressão do gás no interior do cilindro (3,5bar) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 2,9m<sup>3</sup>/s e 18,1 kg/s, respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 1 minuto e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos t=1s (Fig. 55.a) e 10s (Fig. 55.b).

Embora a temperatura seja o parâmetro principal a ser mudado no conjunto de dados de simulações dos Casos 5 a 8, não foi observado uma variação significativa das análises anteriores e muito menos em relação ao esperado na literatura. Os resultados, mostraram-se coerentes e de acordo com resultados previamente verificados na literatura e nos casos anteriores.

Observa-se que no ponto central da liberação, o valor nominal para % volume de UF<sub>6</sub> de (1,8) para t=1s e (3,5) para t=10s, respectivamente, e a região de dispersão da pluma foi maior do que o observado na temperatura de 80°C. Fato este proveniente da maior fração de UF<sub>6</sub> liberada no momento da expansão para o ambiente, que através dos cálculos de modelo simplificado, (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996) e (Oliveira Neto, Nunes, & Dias, 2009), são na ordem de 100 kg.



**Figura 66** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=1s, Caso 5, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 18,1 kg/s), código MHPMTP.



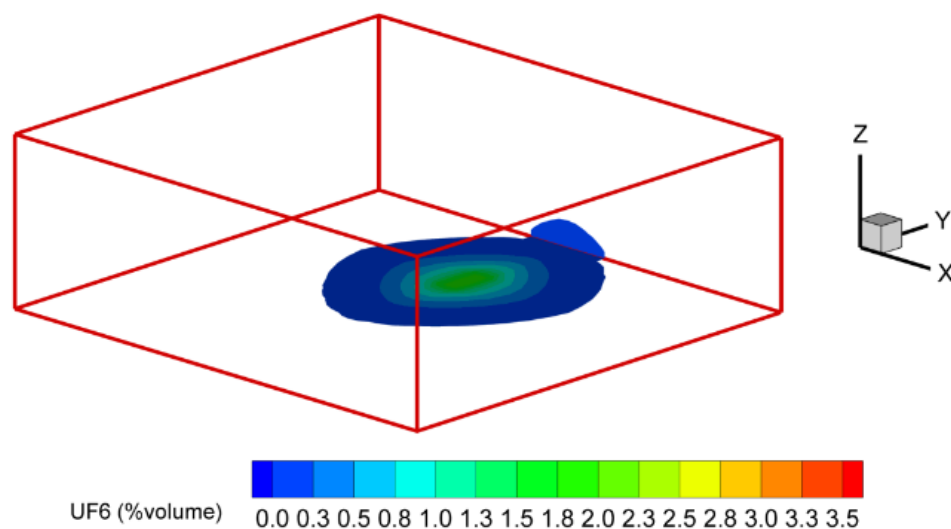
**Figura 67** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=10s, Caso 5, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 18,1 kg/s), código MHPMTP

### CASO 6

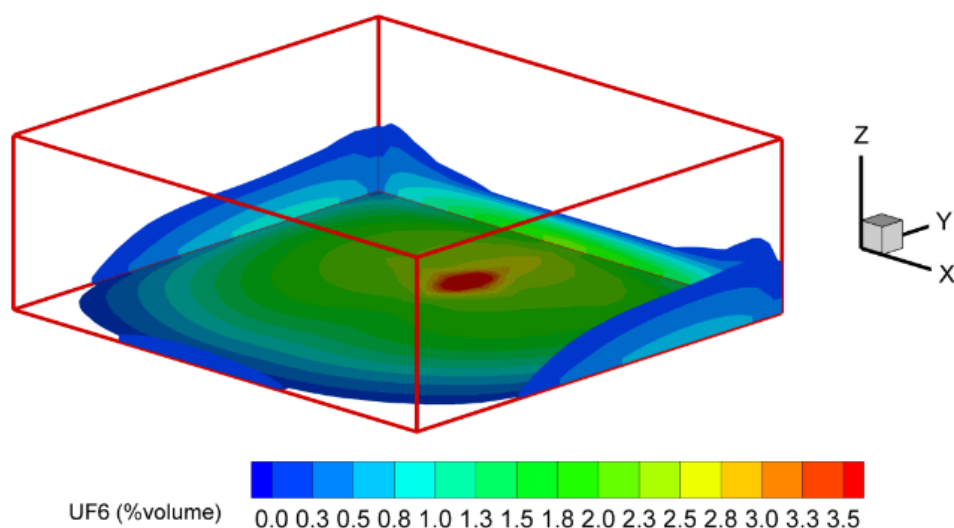
As Figuras 68 e 69 apresentam os dois cenários na simulação do caso 6, onde é mantida a temperatura de aquecimento (93°C), assim como a pressão do gás no interior do cilindro (3,5bar) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 5,7m<sup>3</sup>/s e 18,1 kg/s, respectivamente.

O tempo de liberação na simulação considerado é 1 minuto e o tempo total do evento são 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos  $t=1s$  (Fig. 68) e  $10s$  (Fig. 69).

O aumento da exaustão neste caso acompanha o previsto no Caso 2, mantendo a coerência das previsões para esta simulação. O que reforça a expectativa dos resultados nos próximos casos a serem analisados, sendo considerado que a variação de taxa de exaustão, mostra-se um ponto significativo para dirimir e mitigar a evolução da dispersão de  $UF_6$  gasoso no ambiente. Porém não podemos descartar a influência da taxa de liberação de  $UF_6$ .



**Figura 68** – Simulação da dispersão de  $UF_6$  em relação a  $t=1s$ , Caso 6, ( $T = 93^\circ C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP

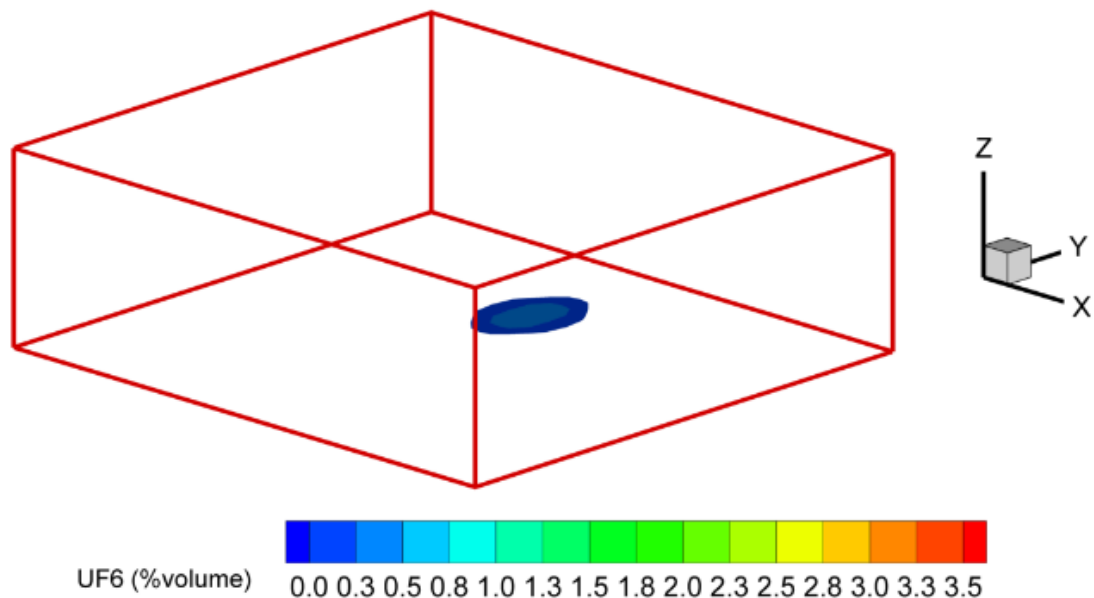


**Figura 69** – Simulação da dispersão de  $UF_6$  em relação a  $t=10s$ , Caso 6, ( $T = 93^\circ C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP

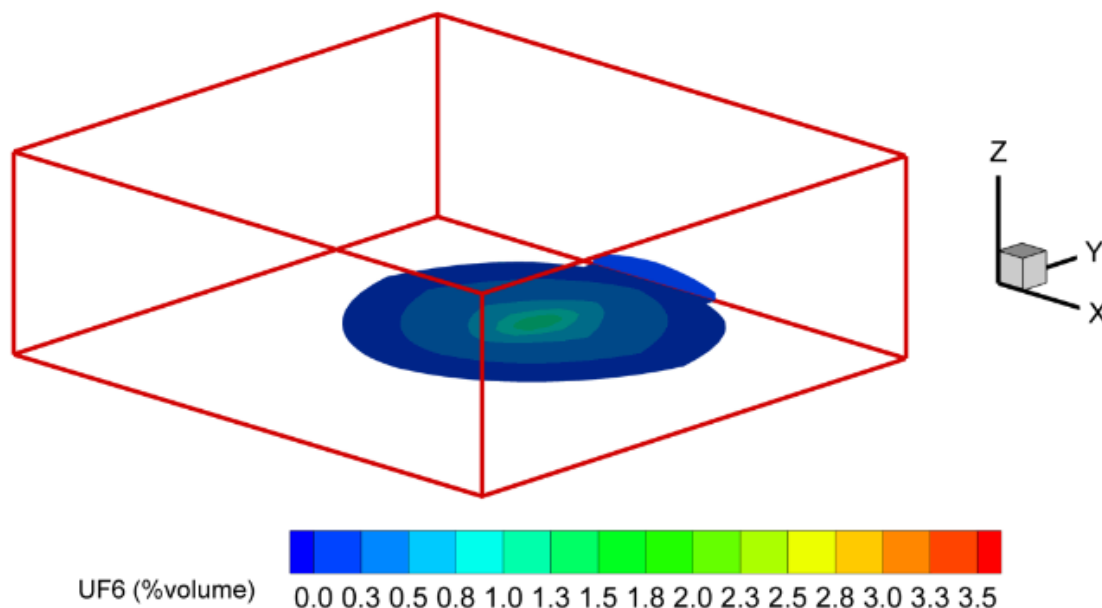
### CASO 7

A Figura 57 apresenta os cenários referentes ao caso 7, onde é mantida a temperatura de aquecimento (93°C), assim como a pressão do gás no interior do cilindro (3,5bar) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 2,9 m<sup>3</sup>/s e 3,6 kg/s, respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência existe a liberação nos tempos t=1s (Fig. 70) e 10s (Fig. 71).

Neste cenário há um maior tempo de liberação, e as imagens em t=1s (Fig. 70) e t= 10s (Fig. 71), corroboram para a avaliação na qual tem-se uma menor liberação radial e espalhamento da pluma de UF<sub>6</sub>, a partir do ponto de liberação de UF<sub>6</sub>, quando comparado com o Caso 5. Entretanto tal resultado é proveniente da diferença existente entre as taxas de liberação de liberação Caso 5 (18,1 kg/s) e Caso 7 (3,6 kg/s), podendo o tempo de liberação não ser o parâmetro limitante neste Caso.



**Figura 70** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=1s, Caso 7, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,6 kg/s), código MHPMTP



**Figura 71** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=10s, Caso 7, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,6 kg/s), código MHPMTP.

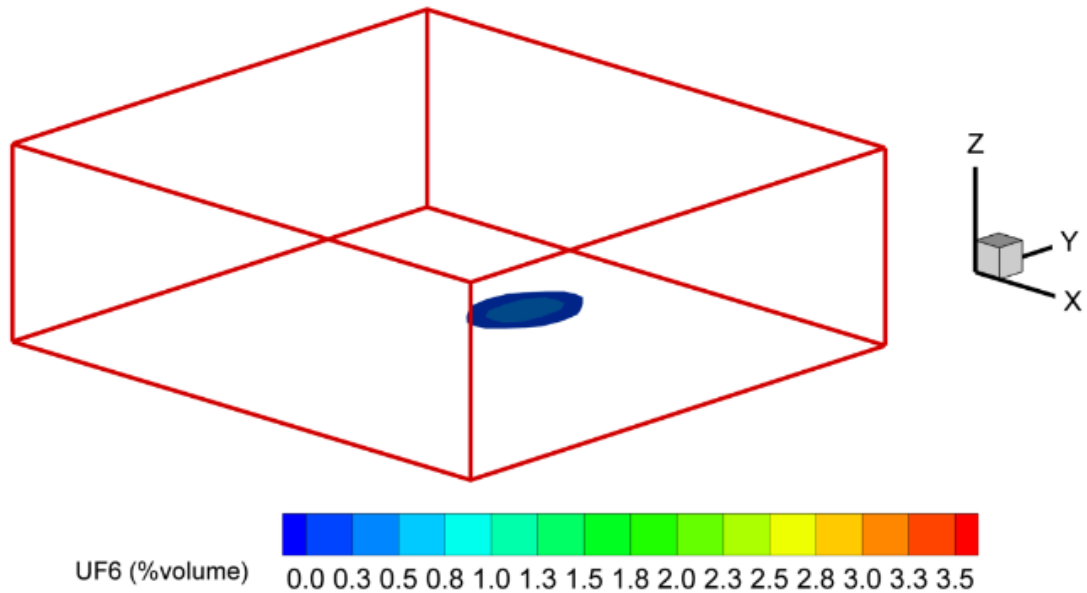
### CASO 8

As Figuras 72 e 73 apresentam os dois cenários apresentadas na simulação do caso 8, onde é mantida a temperatura de aquecimento (93°C), assim como a pressão do gás no interior do cilindro (3,5bar) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 5,7 m<sup>3</sup>/s e 3,6 kg/s, respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos t=1s (Fig. 72) e 10s (Fig. 73).

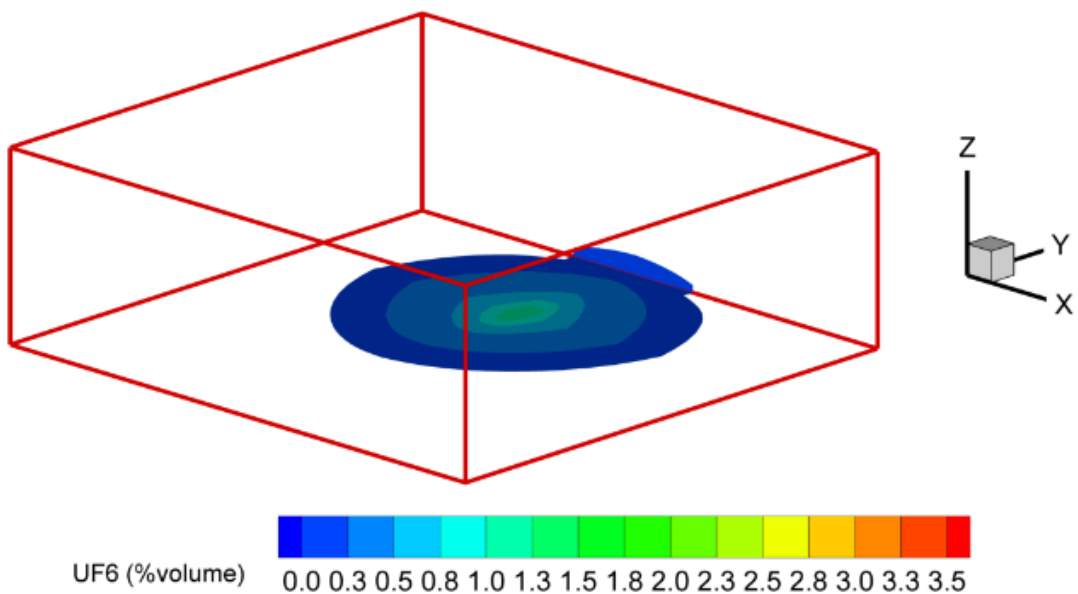
Não existe uma mudança substancial nos parâmetros deste caso, com exceção da taxa de exaustão, que passa a ser o dobro. Mesmo assim em relação ao caso anterior, não é constatada uma maior dispersão do material ou mudança na % em volume de UF<sub>6</sub> no ambiente.

Em relação a este segundo conjunto de casos (Casos 5, 6, 7 e 8) que leva em conta a temperatura (93°C) e pressão (3,5 atm) constantes provenientes da simulação computacional do modelo MPHMTTP e variaram-se as taxas de liberação, vazão de exaustão e tempo de liberação, é dito que os valores e comportamentos observados são condizentes com os disponíveis na literatura. Isto posto, vislumbrando uma implementação em menor escala, o mesmo poderia ser testado respeitando os valores e parâmetros aqui apresentados a fim de realizar teste de validação.

Porém o empecilho burocrático imposto à pesquisa com liberações de material nuclear, como o hexafluoreto de urânio, é algo ainda não permitido pelas autoridades nacionais. Além de não possuímos instalações adequadas para tais experimentos.



**Figura 72** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=1s, Caso 8, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,6 kg/s), código MHPMTP.



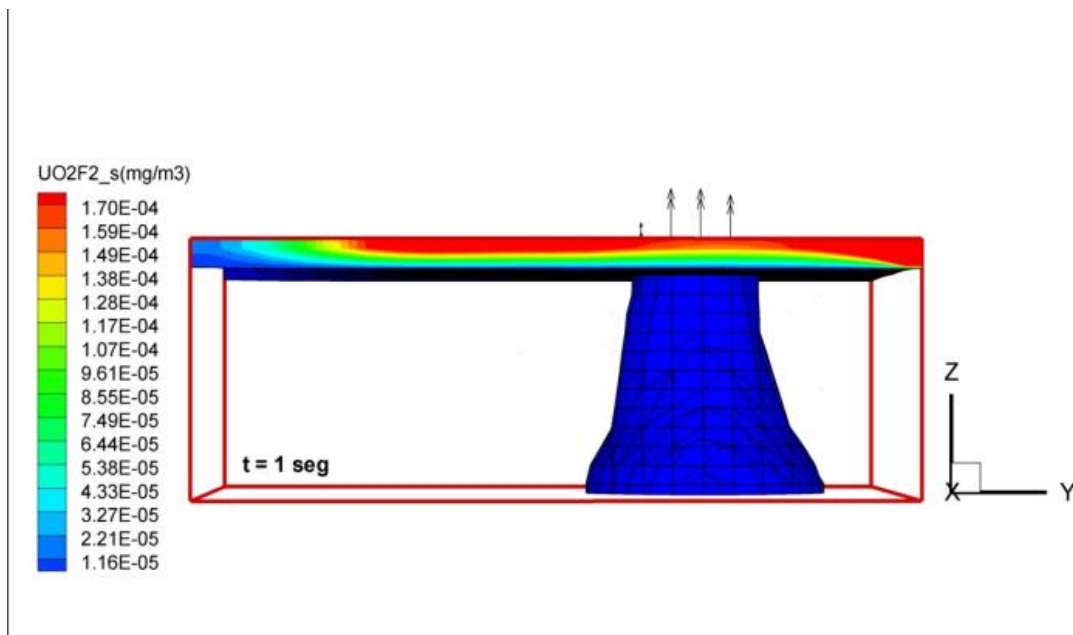
**Figura 73** – Simulação da dispersão de UF<sub>6</sub> em relação a t=10s, Caso 8, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 5,7m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,6 kg/s), código MHPMTP.

### 5.3.4. Resultados de Dispersão do Fluoreto de uranila

#### CASO 1

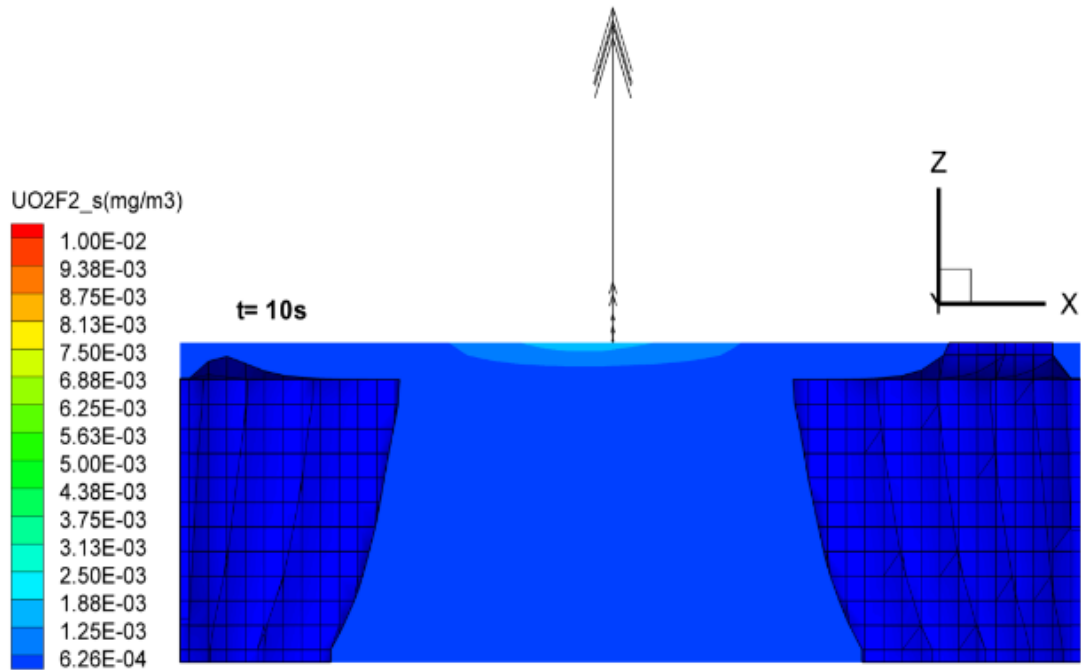
As Figuras 74 a 76 apresentam uma visualização em 3D dos dados de saída, em relação aos cenários escolhidos na simulação do caso 1. Estes dados, são os valores da concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  ( $\text{mg}/\text{m}^3$ ). Os tempos de avaliação são os mesmos utilizados na avaliação de liberação de  $\text{UF}_6$  na simulação. Na sequência temos a liberação nos tempos  $t=1\text{s}$  (Fig. 74),  $10\text{s}$  (Fig. 75) e  $60\text{s}$  (Fig. 76).

Como observado para o  $\text{UF}_6$ , temos uma dispersão do gás próximo ao seu ponto de liberação, isto reflete, através da Equação (1), na hidrólise e formação do aerossol ( $\text{UO}_2\text{F}_2$ ) em  $t=1\text{s}$  (Fig. 74), que é condizente com os resultados observados por (Kim, Taleyarkhan, Keith, & Schmidt, 1996). À medida que o tempo passa  $t=10\text{s}$  (Fig. 75), tem-se um espalhamento da pluma do  $\text{UF}_6$ , que é um gás denso, através do ambiente alcançando em poucos segundos uma área considerável do prédio, nesta figura é observado o efeito do escoamento nas paredes. Desta forma como o  $\text{UO}_2\text{F}_2$  necessita de gotículas de  $\text{H}_2\text{O}$  para se mover, ele é transportado, de forma ascendente no interior do prédio nos primeiros segundos, conforme indicação dos vetores velocidades das Figuras 59.a e 59.b. Com a sequência de formação de monômeros tem-se um aumento da densidade e, através da suposição de depleção gravitacional, tem-se a deposição do material particulado, conforme observado em  $t=60\text{s}$  (Fig. 76), alcançando o valor de  $62,5 \text{ mg}/\text{m}^3$ .

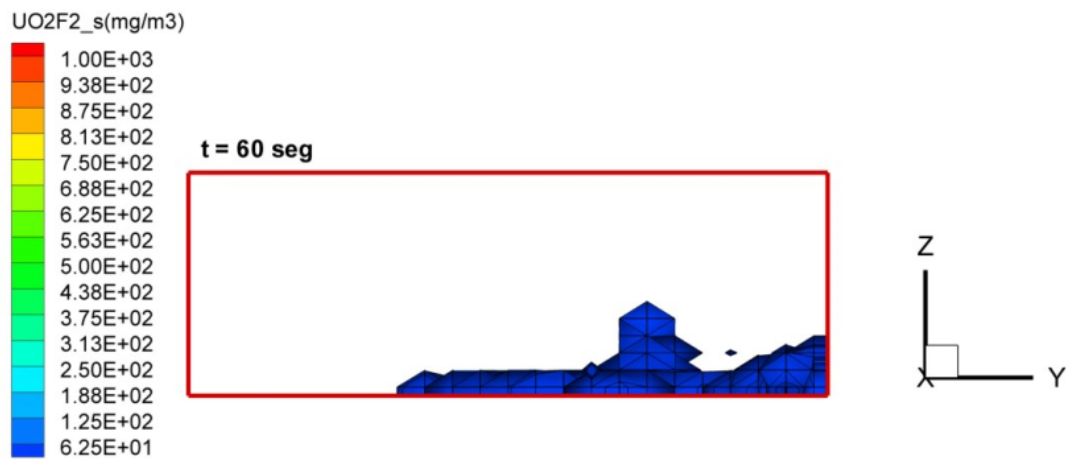


**Figura 74** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=1\text{s}$ , Caso 1, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg}/\text{s}$ ), código MHPMTP





**Figura 75** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=10\text{s}$ , Caso 1, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP



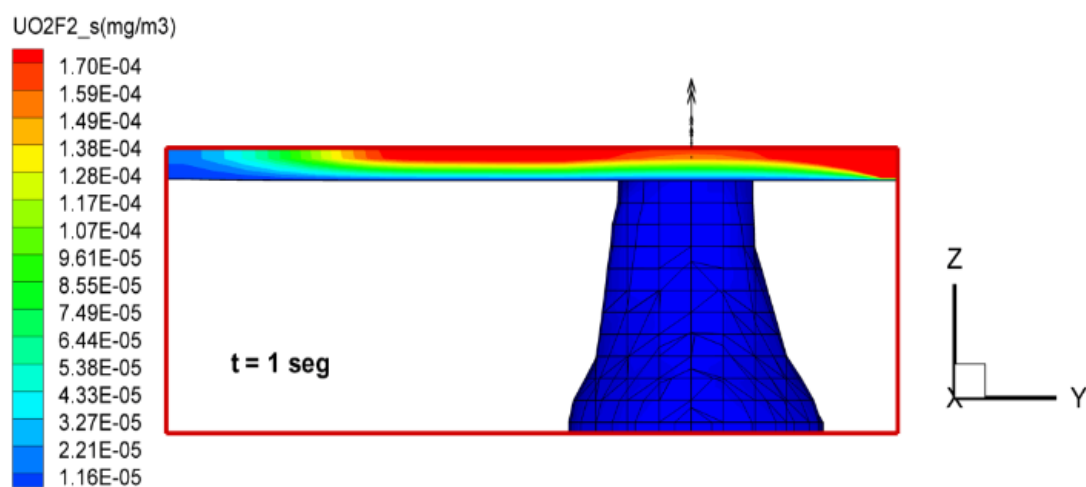
**Figura 76** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t= 60\text{s}$ , Caso 1, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP

## CASO 2

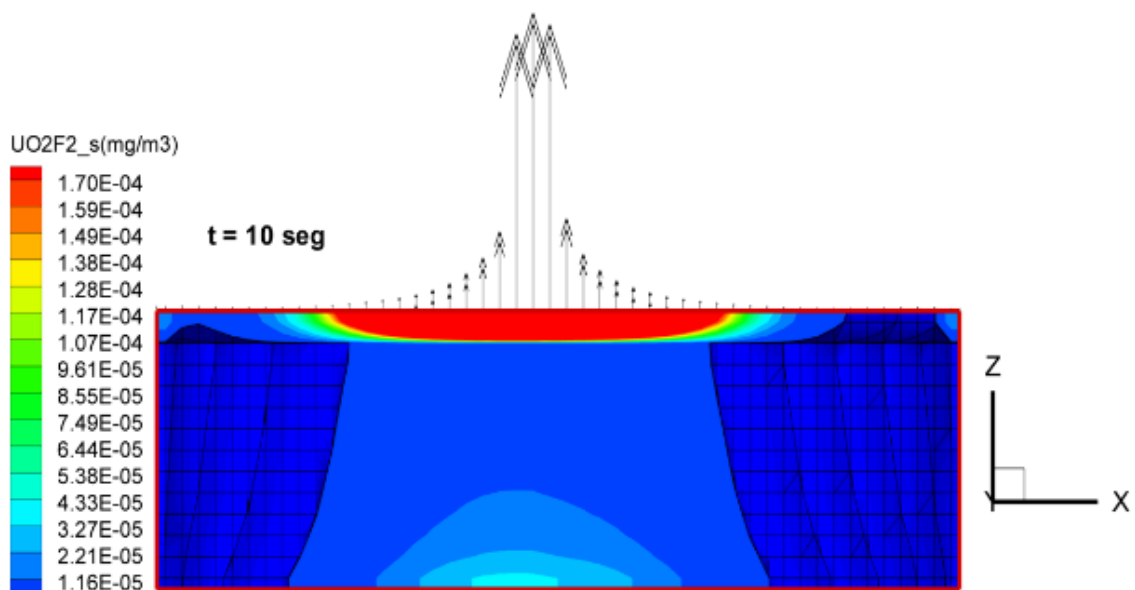
As Figuras 77 a 79 apresentam uma visualização em 3D dos dados de saída, em relação aos cenários escolhidos na simulação do caso 2. Estes dados, são os valores da concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  ( $\text{mg}/\text{m}^3$ ). Os tempos de avaliação são os mesmos utilizados na simulação de liberação de  $\text{UF}_6$ . Na sequência tem-se a liberação nos tempos  $t=1\text{s}$  (Fig. 77),  $10\text{s}$  (Fig. 78) e  $60\text{s}$  (Fig. 79).

É observado que a dispersão do aerossol próximo ao seu ponto de liberação, em  $t=1\text{s}$  (Fig. 77), é mantida e que à medida que o tempo transcorre,  $t=10\text{s}$  (Fig. 78), também é observado o espalhamento deste aerossol. Entretanto, em  $t=10\text{s}$  (Fig. 78) tem-se um acréscimo neste espalhamento, nas proximidades das paredes e ocorre um acúmulo próximo aos dutos de exaustão, considerando valores de concentração na ordem de  $0,00017\text{ mg}/\text{m}^3$ . Porém os valores médios, próximo ao ponto de liberação permanecem os mesmos ( $0,000016\text{ mg}/\text{m}^3$ ). Ao longo do tempo reacional da hidrólise, ocorre o consumo de  $\text{UF}_6$  e a formação dos produtos ( $\text{UO}_2\text{F}_2$  e  $\text{HF}$ ), contudo devido a quantidade limitada de material, ocorre um decréscimo de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  observado em  $t=60\text{s}$  (Fig. 79), conforme também observado no Caso 1. Tal fenômeno se deve a depleção gravitacional, conforme relatado na literatura, o material particulado é depositado próximo a fonte de liberação, fato este contemplado de forma satisfatória, alcançando o valor de  $62,5\text{ mg}/\text{m}^3$ .

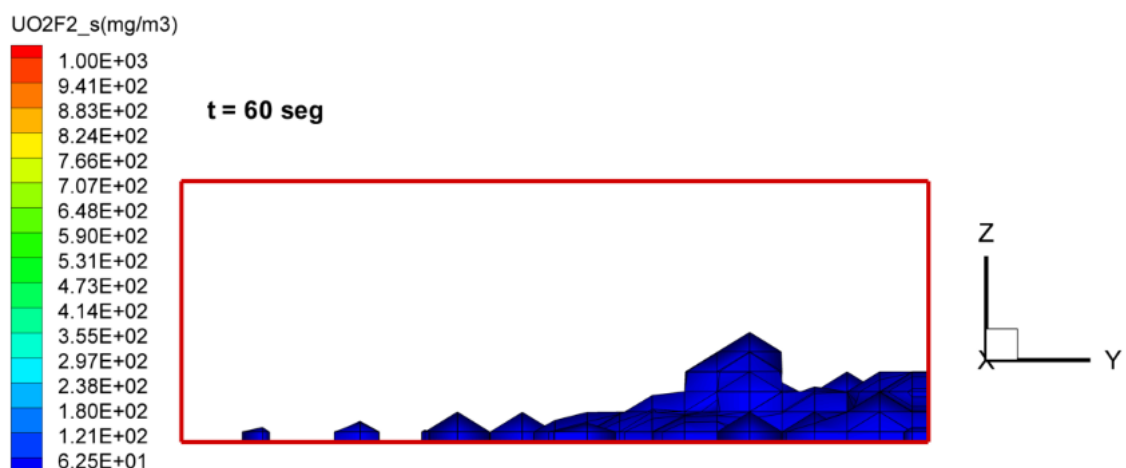
Neste caso é considerado o efeito de turbulência que é registrado nas imagens (Fig. 77) e (Fig. 78), nas quais a diferença de concentração é registrado, assim como, o campo de velocidade no ponto de liberação que tem orientação vertical. Sendo condizente com a disposição física dos exaustores que foram incluídos neste estudo.



**Figura 77**– Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t= 1\text{s}$ , Caso 2, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5\text{ atm}$ ,  $Q= 5,7\text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3\text{ kg}/\text{s}$ ), código MHPMTP



**Figura 78** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=10\text{s}$ , Caso 2, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q= 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP



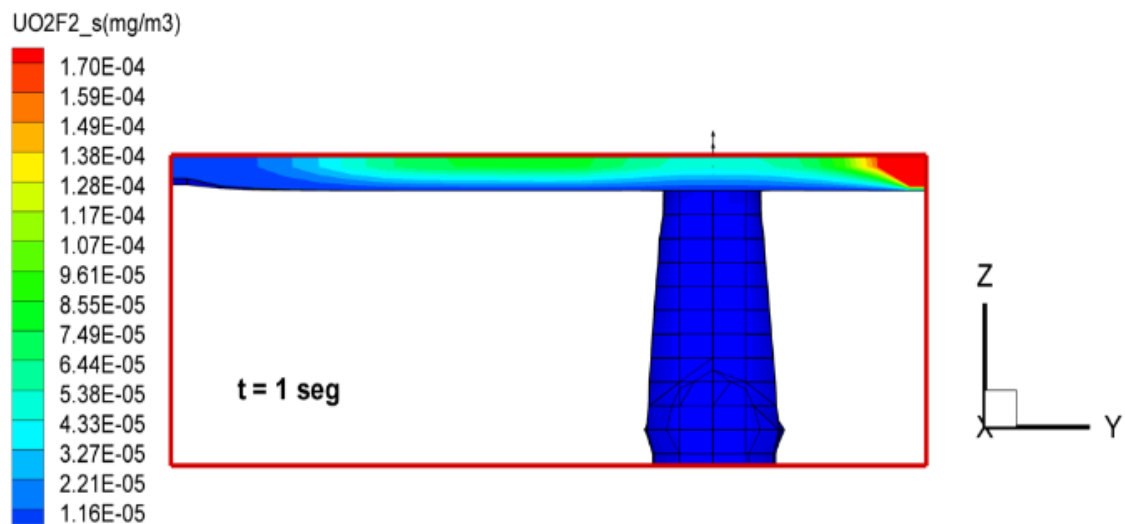
**Figura 79**– Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t= 60\text{s}$ , Caso 2, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q= 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP

### CASO 3

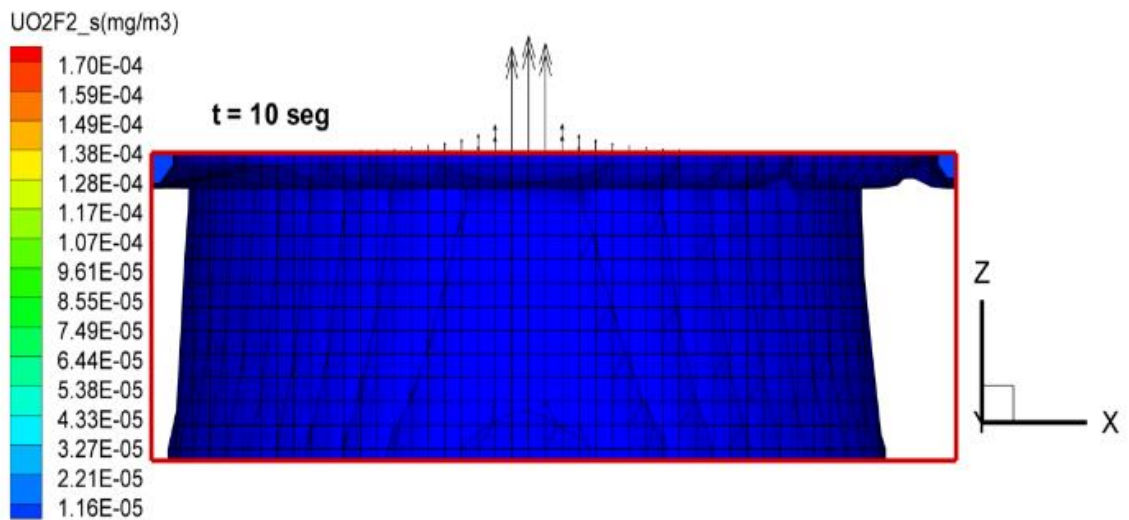
As Figuras 80 a 82 apresentam os três cenários encontrados na simulação do Caso 3, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $80^\circ\text{C}$ ). O tempo de liberação na simulação considerado é alterado para 5 minutos. Na sequência temos a simulação nos tempos  $t=1\text{s}$ ,  $10\text{s}$  e  $60\text{s}$ . Este caso visa avaliar a influência que ocorre numa eventual expansão e um maior período, que implica numa menor taxa de liberação de material.

Mediante a observação dos resultados nas Figuras em  $t=1s$  (Fig. 80) e  $t=10s$  (Fig. 81), tem-se uma menor liberação radial e formação de aerossol ( $UO_2F_2$ ), quando comparado ao Caso 1. Tal resultado pode ser justificado pela redução da taxa de liberação, resultando em uma menor quantidade de  $UF_6$  liberado para o ambiente. Este desempenho corrobora com a correlação proposta inicialmente, o que demonstra uma resposta satisfatória para o modelo.

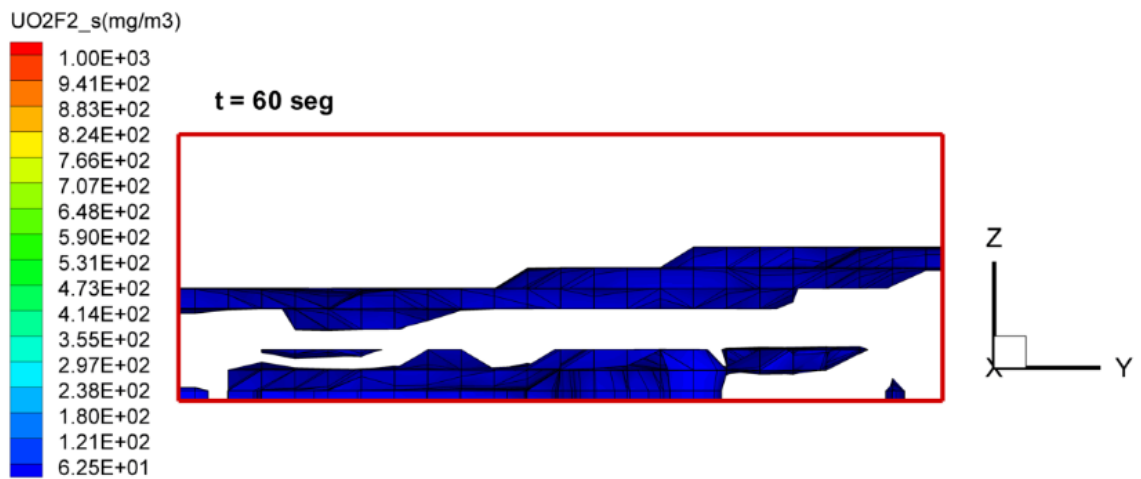
Corroborando com os dados observados nas figuras (Fig. 80) e (Fig. 81), a dispersão do particulado em  $t=60s$  (Fig. 82) é muito menor do que observado nos Casos 1 e 2. Isto é atribuído ao tempo de liberação para este caso, que é igual a 5 minutos, pois em 1 minuto (Fig. 82) não se obtêm a totalidade da depleção gravitacional do particulado e aliado a uma menor taxa de liberação de  $UF_6$ . Sendo assim, a dispersão obtida pela simulação computacional é condizente com o esperado pela própria previsão deste estudo, sendo menos dispersa pelo ambiente, embora apresente a mesma ordem de concentração que nos casos anteriores para  $t=60s$  (Fig. 82).



**Figura 80** – Simulação da dispersão de  $UO_2F_2$  em relação a  $t= 1s$ , Caso 3, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5 atm$ ,  $Q = 2,9 m^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 3,3 kg/s$ ), código MHPMTP



**Figura 81** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=10\text{s}$ , Caso 3, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP



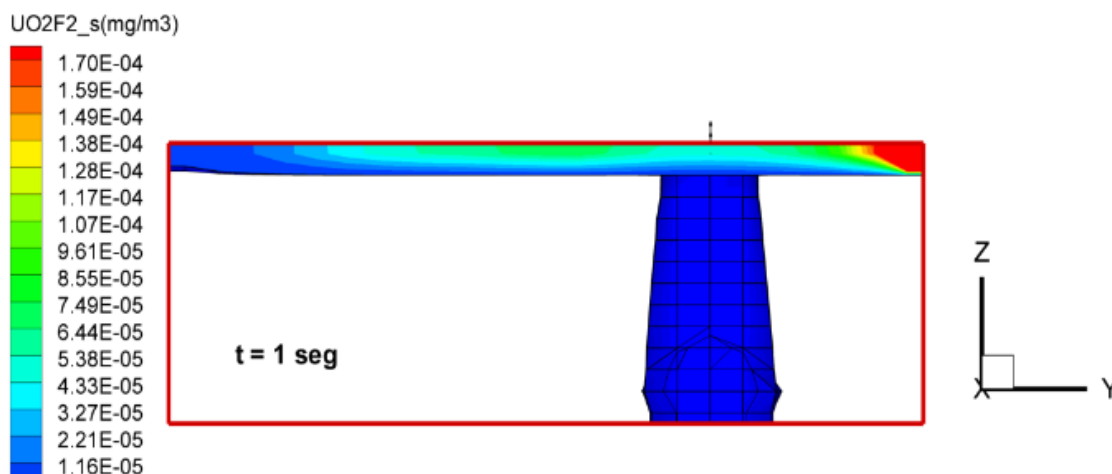
**Figura 82** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=60\text{s}$ , Caso 3, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP

#### CASO 4

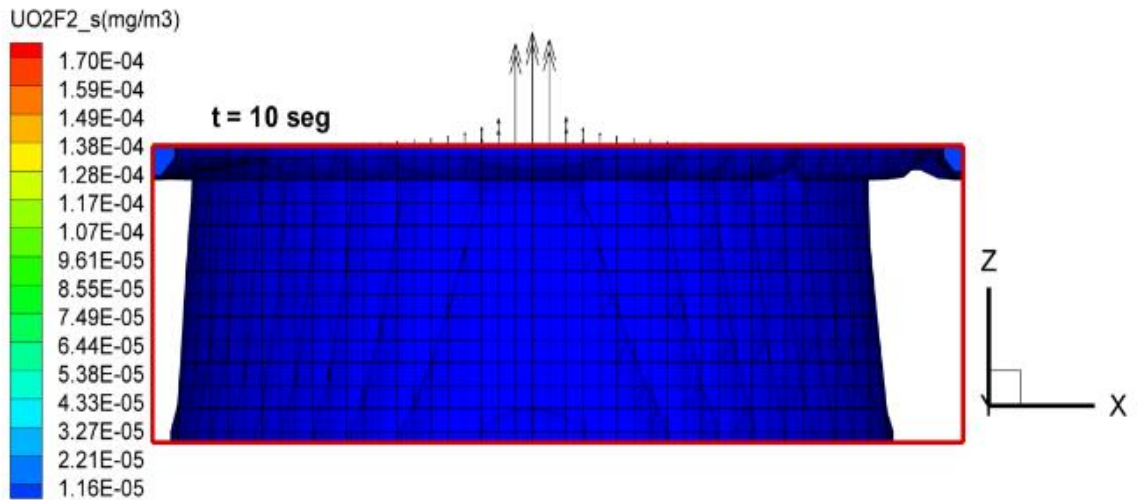
As Figuras 83 a 85 apresentam os três cenários escolhidos na simulação do caso 4, onde é mantida a temperatura de aquecimento (80°C). Não existe uma mudança substancial nos parâmetros deste caso, com exceção da vazão de exaustão, que passa a ser o dobro ( $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ ). Mesmo assim em relação ao caso anterior, não é constatada uma maior dispersão do material ou mudança nas concentrações de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  no ambiente, conforme observado em  $t=1\text{s}$  (Fig. 83) e  $t=10\text{s}$  (Fig. 84) em relação aos dados obtidos nos Casos 1 e 2.

Em relação a este primeiro conjunto de dados (Casos 1, 2, 3 e 4) provenientes da simulação computacional onde a temperatura é mantida constante ( $T = 80^\circ\text{C}$ ) e variamos as taxas de liberação, vazão de exaustão e tempo de liberação, pode-se afirmar que os valores e comportamento observados são condizentes com os previstos neste trabalho.

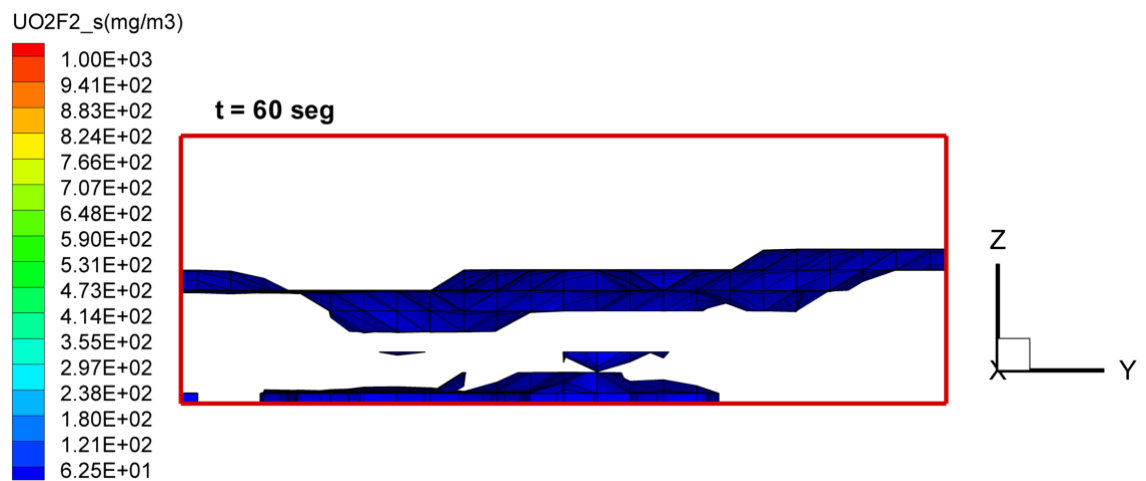
Com relação aos valores do parâmetro de saída da concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  ( $\text{mg}/\text{m}^3$ ), foi obtida boa relação, que reforçou a expectativa em relação ao escoamento do material particulado, com aumento da dispersão em relação a velocidade de exaustão, contribuindo para entender a dinâmica das partículas, Casos 1 e 2. Também era esperada uma menor dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$ , nos casos em que a taxa de liberação fosse menor, embora em um tempo maior. Isto foi evidenciado com uma pequena dispersão radial no resultado dos Casos 3 e 4 em curto período de simulação.



**Figura 83** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t= 1\text{s}$ , Caso 4, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q= 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP



**Figura 84** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=10\text{s}$ , Caso 4, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 85** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t=60\text{s}$ , Caso 4, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

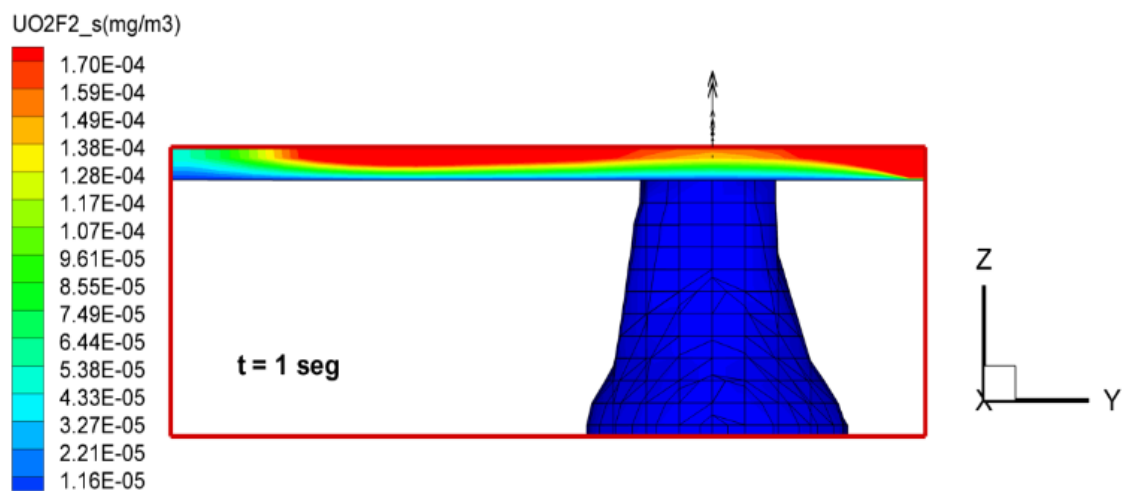
## CASO 5

As Figuras 86 a 88 apresentam os cenários escolhidos na simulação do caso 5, onde é alterada a temperatura de aquecimento (93°C), assim como a pressão do gás no interior do cilindro (3,5bar) e a vazão de exaustão e a taxa de liberação de UF<sub>6</sub>, 2,9 m<sup>3</sup>/s e 18,1 kg/s, respectivamente.

Como a temperatura é o parâmetro principal a ser mudado no conjunto de dados de simulações dos Casos 5 a 8, foi observada uma variação significativa das análises anteriores e em relação ao observado na análise de UF<sub>6</sub>. Os resultados mostraram-se coerentes e de acordo com resultados previamente verificados na literatura, considerando o tempo de liberação de 1 minuto.

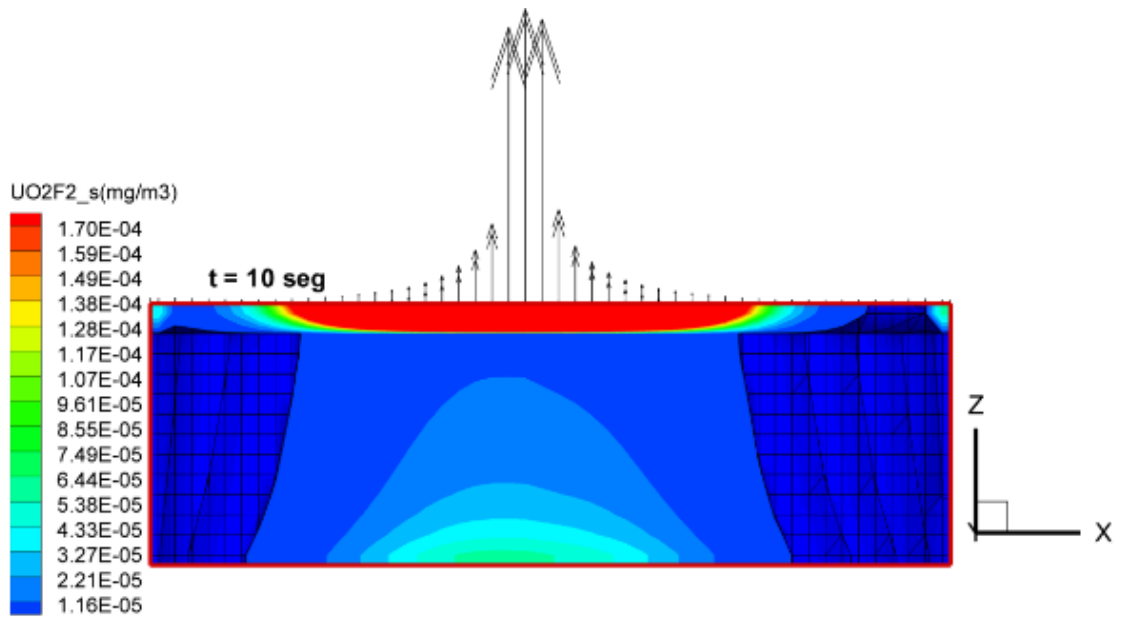
Em relação ao Caso 1, é observada uma dispersão do material particulado com maiores valores nominais de concentração de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> próximo ao eixo do ponto de liberação e sendo disperso na parte superior no prédio no tempo t=1s (Fig. 86). Tal fato corrobora com o previsto, já que temos um acréscimo na taxa de liberação de UF<sub>6</sub> em 11%.

Corroborando com os dados observados nas Figuras anteriores, em t=60s (Fig. 88) é observado a depleção gravitacional das partículas de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, depositando próximo ao ponto de liberação e tem-se valores de concentração da ordem 62,5 mg/m<sup>3</sup>.

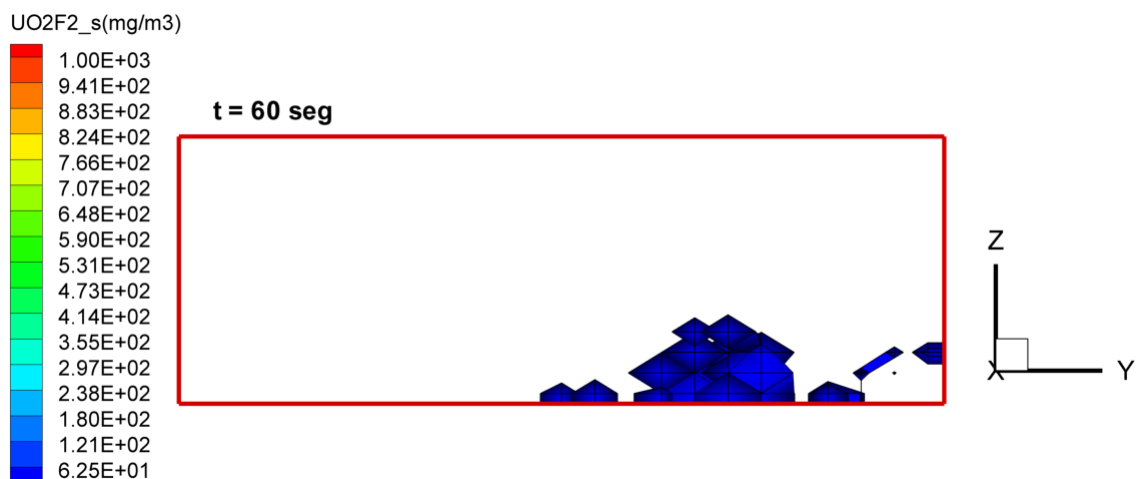


**Figura 86** – Simulação da dispersão de UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> em relação a t= 1s, Caso 5, (T = 93°C, P = 3,5 atm, Q= 2,9 m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 18,1 kg/s), código MHPMTP.





**Figura 87** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 10\text{s}$ , Caso 5, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5\text{ atm}$ ,  $Q = 2,9\text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1\text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 88** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 60\text{s}$ , Caso 5, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5\text{ atm}$ ,  $Q = 2,9\text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1\text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

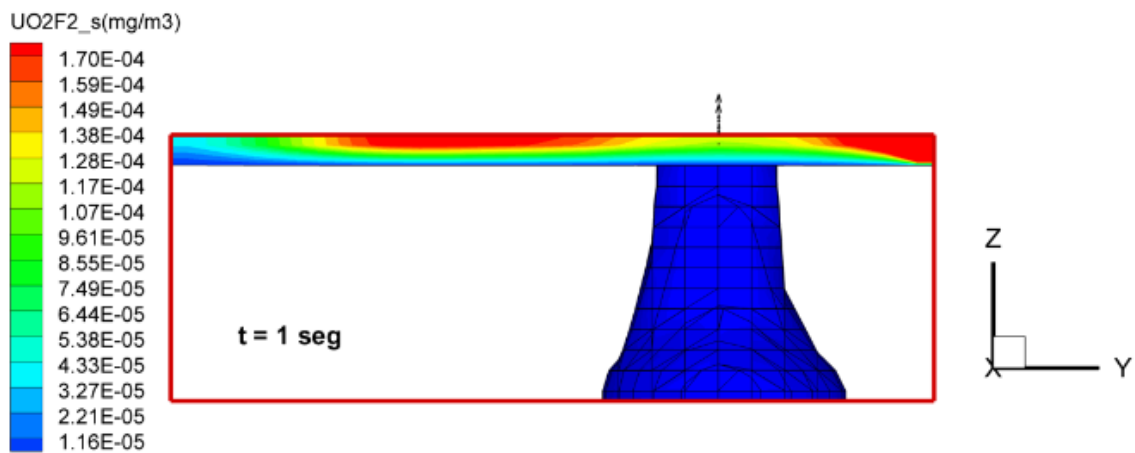
### CASO 6

As Figuras 89 a 91 apresentam os cenários da simulação do caso 6, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $93^\circ\text{C}$ ), assim como a pressão do gás no interior do cilindro ( $3,5\text{bar}$ ) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de  $\text{UF}_6$ ,  $5,7\text{ m}^3/\text{s}$  e  $18,1\text{ kg/s}$ , respectivamente.

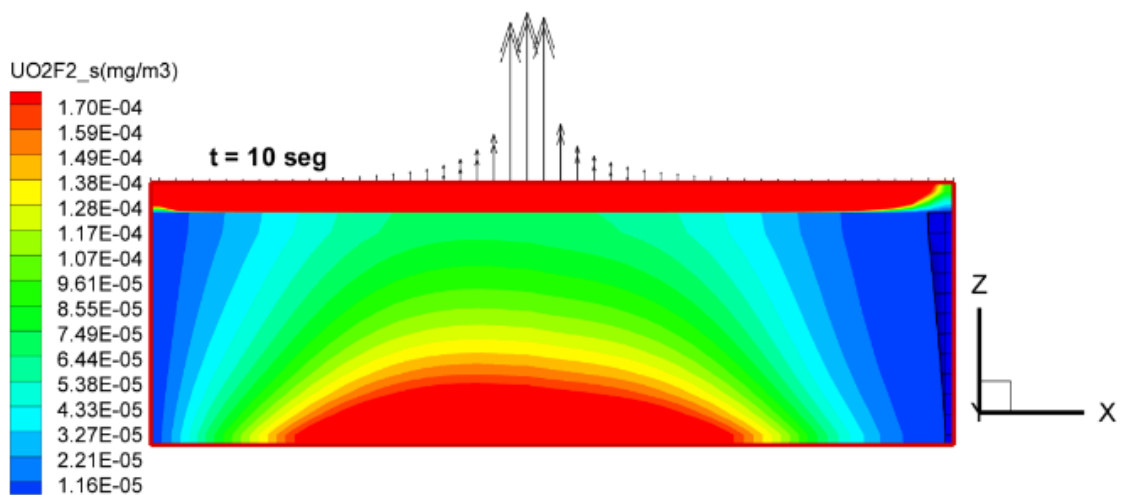
O aumento da exaustão neste caso acompanha o previsto no Caso 2, mantendo a coerência das previsões para esta simulação. O que reforça a expectativa dos resultados nos

próximos casos a serem analisados, haja visto que o aumento da vazão de exaustão proporciona o deslocamento do material particulado no ambiente e aumenta a sua distribuição no sentido vertical, conforme observado em  $t=1s$  (Fig. 89) e  $t=10s$  (Fig. 90).

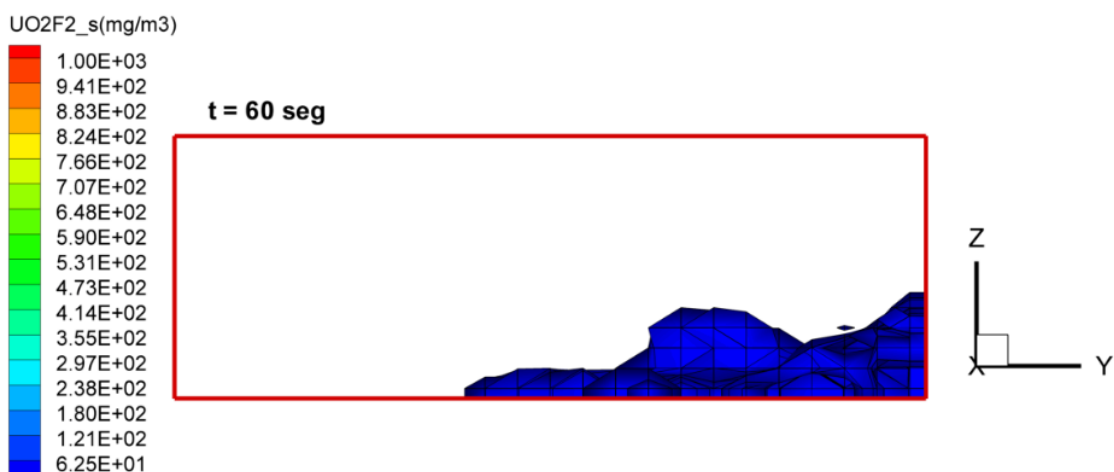
Em  $t=60s$  (Fig. 91), o material particulado apresenta maior deposição ao longo do eixo horizontal, proveniente da dispersão ocasionada no escoamento turbulento e desta forma tem-se uma maior camada formada e distribuída ao longo do ponto de liberação de  $UF_6$ .



**Figura 89** – Simulação da dispersão de  $UO_2F_2$  em relação a  $t = 1s$ , Caso 6, ( $T = 93^\circ C$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 5,7$   $m^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1$   $kg/s$ ), código MHPMTP.



**Figura 90** – Simulação da dispersão de  $UO_2F_2$  em relação a  $t = 10s$ , Caso 6, ( $T = 93^\circ C$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 5,7$   $m^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1$   $kg/s$ ), código MHPMTP.



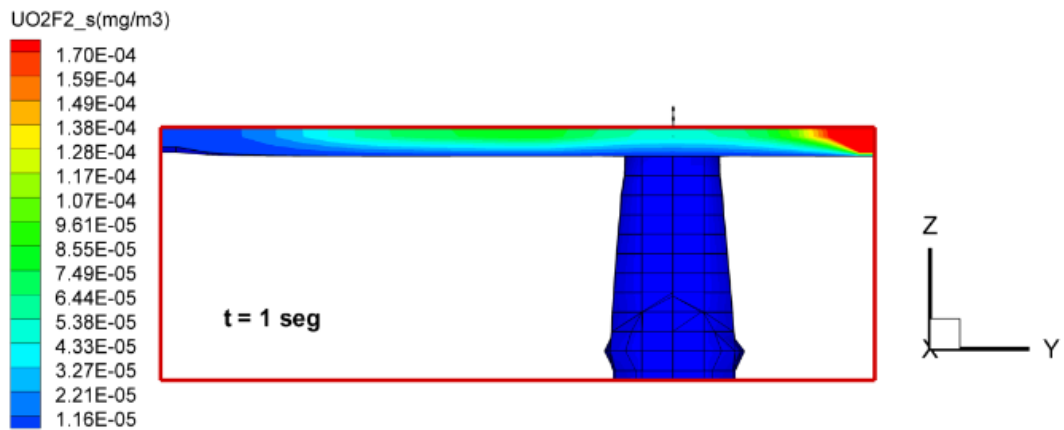
**Figura 91** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 60\text{s}$ , Caso 6, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

### CASO 7

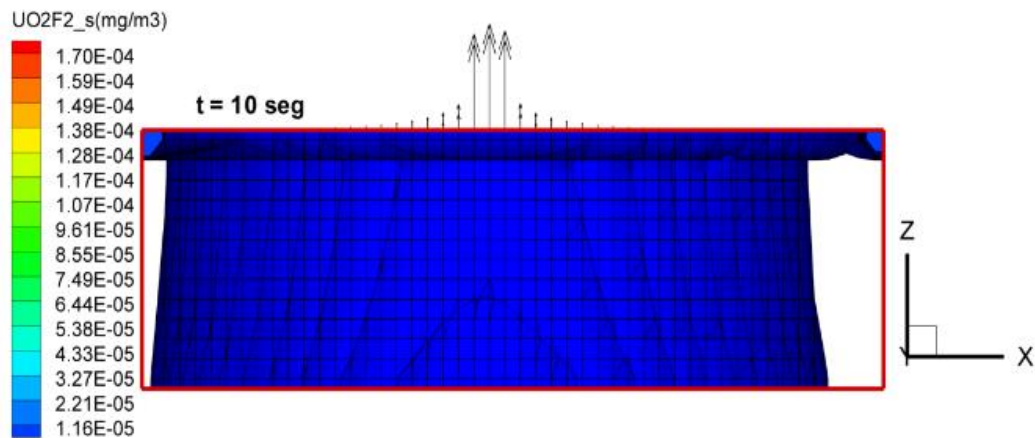
As Figuras 92 a 94 apresentam os cenários referentes ao caso 7, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $93^\circ\text{C}$ ), assim como a pressão do gás no interior do cilindro ( $3,5\text{bar}$ ) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de  $\text{UF}_6$ ,  $2,9\text{m}^3/\text{s}$  e  $3,6\text{m}^3/\text{s}$ , respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos  $t=1\text{s}$  (Fig. 92),  $10\text{s}$  (Fig. 93) e  $60\text{s}$  (Fig. 94).

Neste cenário onde é observado um maior tempo de liberação, e as imagens em  $t=1\text{s}$  (Fig. 92) e  $t = 10\text{s}$  (Fig. 93), corroboram para a avaliação na qual se tem uma menor liberação radial e formação do aerossol a partir do ponto de liberação de  $\text{UF}_6$ , quando comparado com o Caso 3. Tal fato proveniente da menor taxa de liberação, neste caso ( $3,6 \text{ kg/s}$ ).

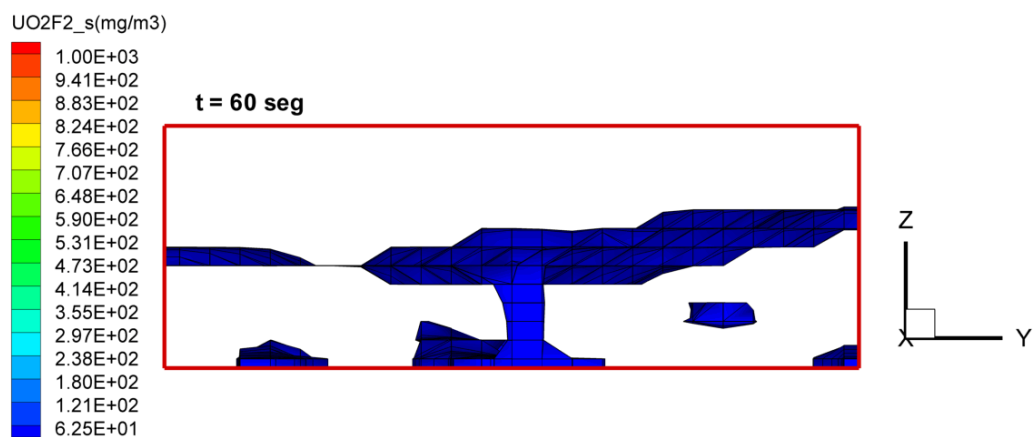
Corroborando com os dados observados nas figuras (Fig. 92) e (Fig. 92), a dispersão do particulado em  $t=60\text{s}$  (Fig. 94) é muito menor do que observado nos Casos 5 e 6. Isto é atribuído ao tempo de liberação para este caso, que é igual a 5 minutos, pois em 1 minuto (Fig. 94) não se obtêm a totalidade da depleção gravitacional do particulado e aliado a uma menor taxa de liberação de  $\text{UF}_6$ . Sendo assim, a dispersão obtida pela simulação computacional é condizente com o esperado pela própria previsão deste estudo, sendo menos dispersa pelo ambiente, embora apresente a mesma ordem de concentração que nos casos anteriores para  $t=60\text{s}$  (Fig. 94).



**Figura 92** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 1$  s, Caso 7, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 2,9$   $\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6$  kg/s), código MHPMTP.



**Figura 93** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 10$  s, Caso 7, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 2,9$   $\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6$  kg/s), código MHPMTP.



**Figura 94** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 60$  s, Caso 7, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 2,9$   $\text{m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6$  kg/s), código MHPMTP.

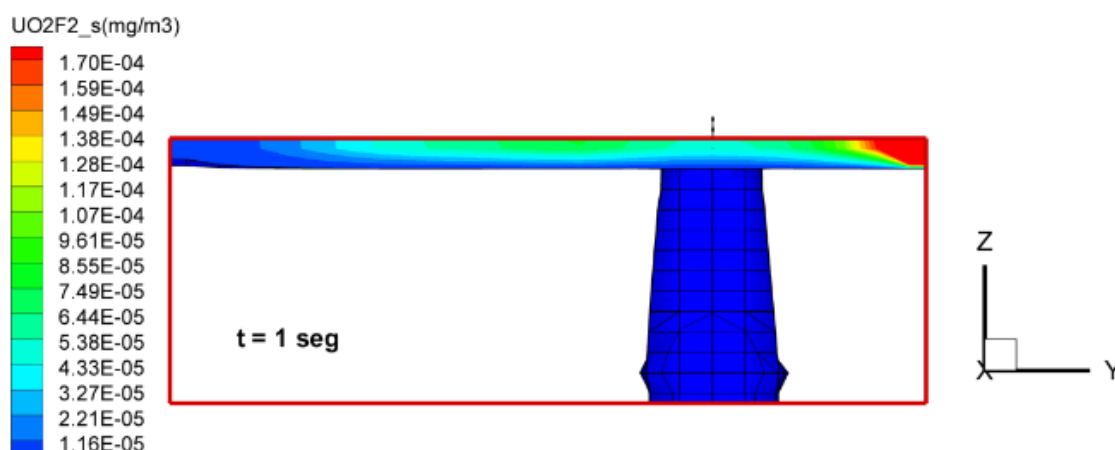
## CASO 8

A Figura 95 a 97 apresenta os cenários apresentados na simulação do caso 8. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento é 10 minutos. Na sequência temos a liberação nos tempos  $t=1s$  (Fig. 95),  $10s$  (Fig. 96) e  $60s$  (Fig. 97).

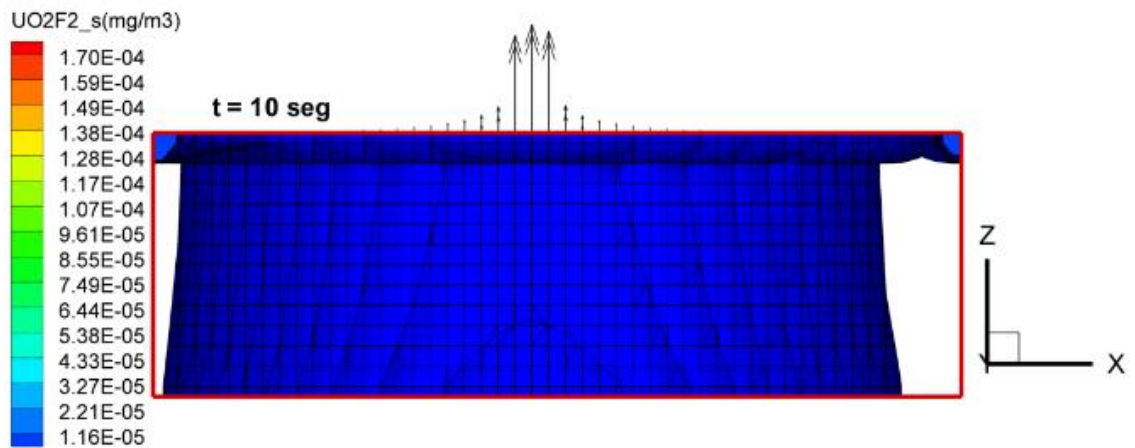
Não existe uma mudança substancial nos parâmetros deste caso, com exceção da vazão de exaustão, que passa a ser o dobro ( $5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ ). Mesmo assim em relação ao caso anterior, não é constatado uma maior dispersão do material ou mudança na concentração de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  no ambiente.

Nos casos onde ocorre a liberação com taxas de liberação baixas, como observados nos casos 7 e 8, não foram observadas variações significativas nas concentrações. Mas a variação de exaustão apresenta valores significativos e representativos dentro do esperado para esta situação, sendo condizente com a literatura, para modelos de escoamento turbulento.

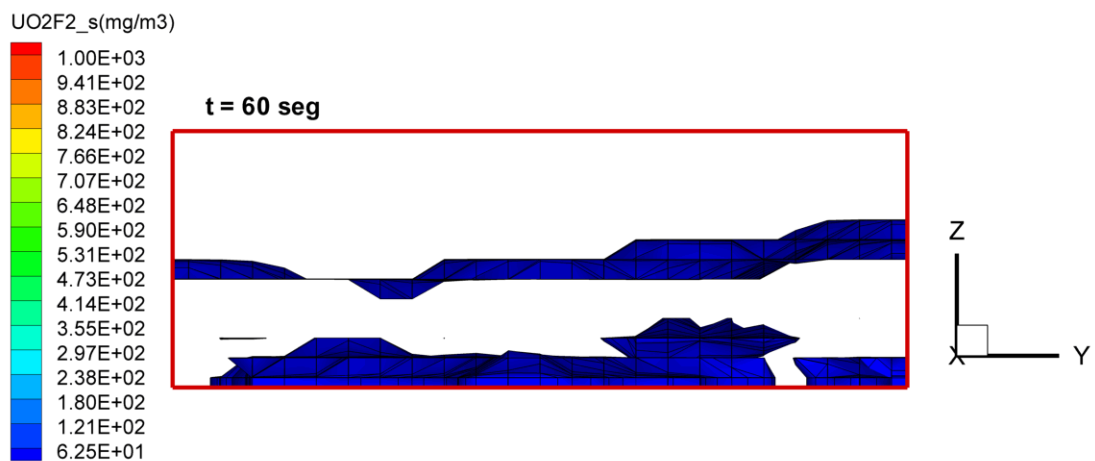
Em relação a este segundo conjunto de dados (Casos 5, 6, 7 e 8) provenientes da simulação computacional onde a temperatura é mantida constante e variamos as taxas de liberação, vazão de exaustão e tempo de liberação, pode-se dizer que os valores e comportamento observados são condizentes com os previstos neste trabalho.



**Figura 95** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t= 1s$ , Caso 8, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 96** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 10\text{s}$ , Caso 8, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5\text{ atm}$ ,  $Q = 5,7\text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6\text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 97** – Simulação da dispersão de  $\text{UO}_2\text{F}_2$  em relação a  $t = 60\text{s}$ , Caso 8, ( $T = 93^\circ\text{C}$ ,  $P = 3,5\text{ atm}$ ,  $Q = 5,7\text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,6\text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

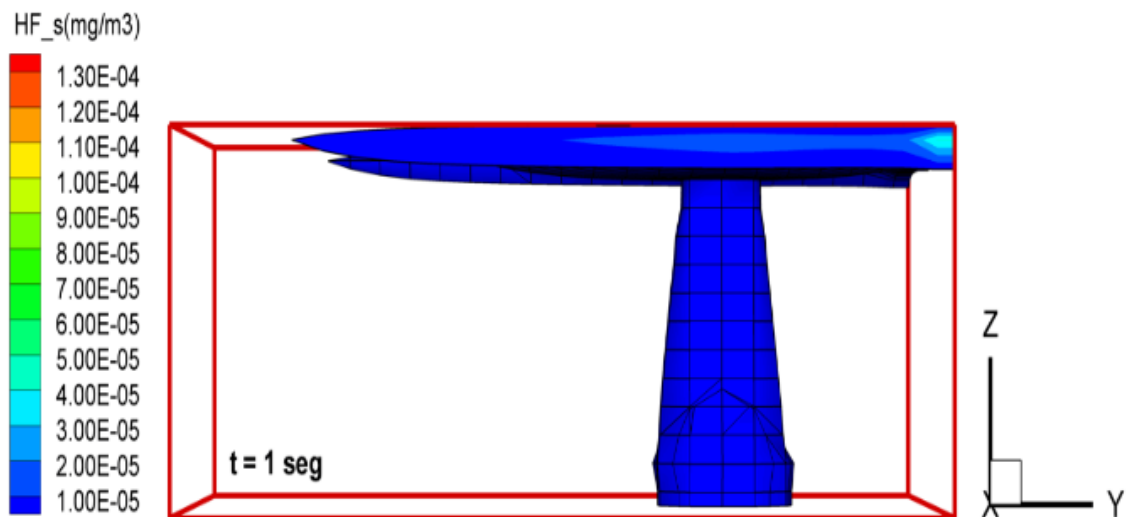
### 5.3.5. Resultados de Dispersão do Fluoreto de Hidrogênio

#### CASO 1

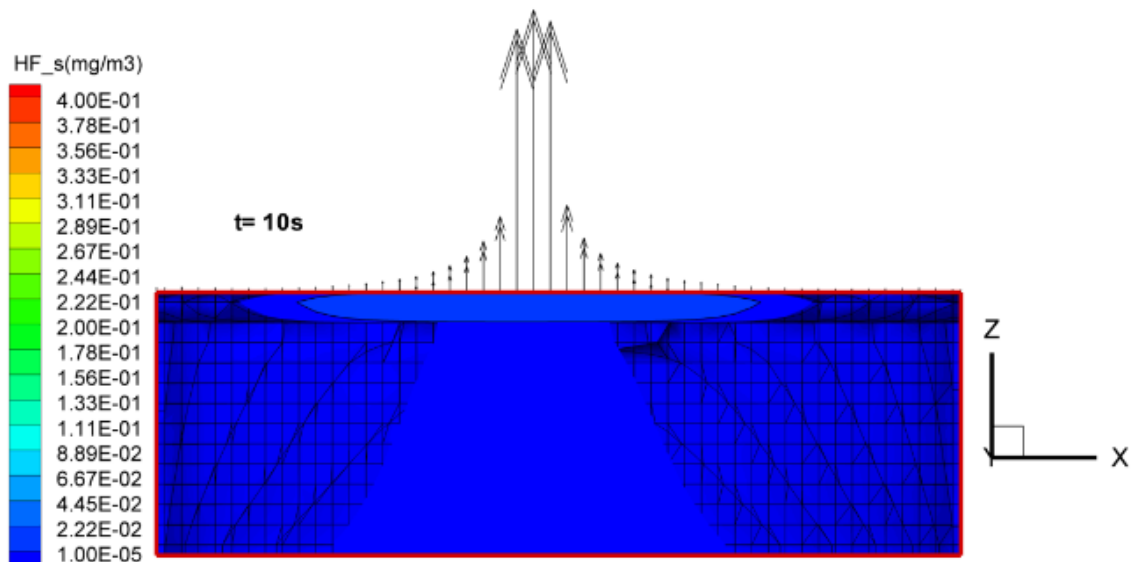
As Figuras 98 a 100 apresentam uma visualização em 3D dos dados de saída, em relação aos cenários escolhidos na simulação do caso 1. Estes dados são os valores da concentração de HF ( $\text{mg}/\text{m}^3$ ). Os tempos de avaliação são os mesmos utilizados na avaliação de liberação de  $\text{UF}_6$  na simulação. Na sequência temos a liberação nos tempos  $t=1\text{s}$  (Fig. 98),  $10\text{s}$  (Fig. 99) e  $60\text{s}$  (Fig. 100).

Como observado para o  $\text{UF}_6$ , tem-se uma dispersão do gás próximo ao seu ponto de liberação, isto reflete, através da Equação (1), na hidrólise e formação do HF em  $t=1\text{s}$  (Fig. 98), que é condizente com os resultados observados. À medida que o tempo passa,  $t=10\text{s}$  (Fig. 99), tem-se um espalhamento da pluma do HF, que ao contrário do  $\text{UF}_6$ , é um gás leve, sendo liberado através do ambiente e alcançando em poucos segundos uma área considerável do prédio. Nesta figura é observado o efeito do escoamento nas paredes.

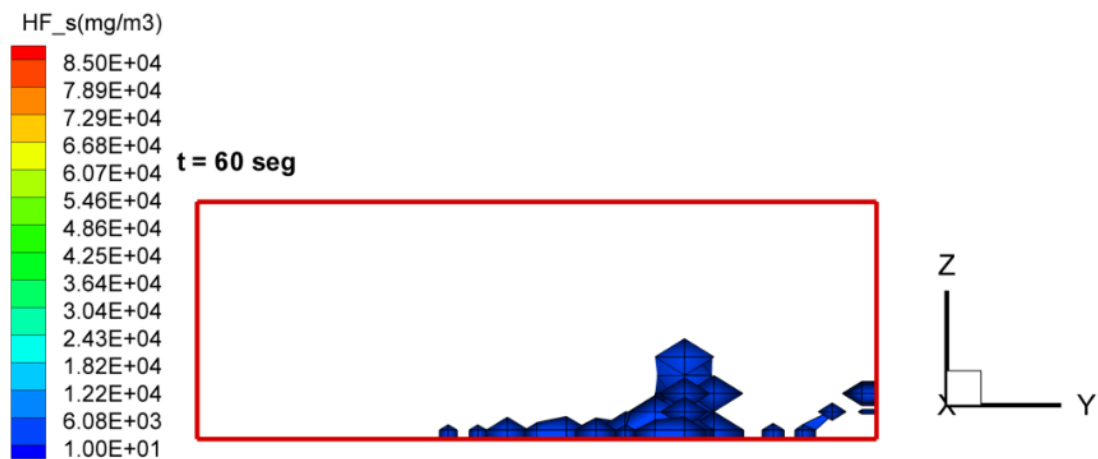
Em  $t=60\text{s}$  (Fig. 99) é considerado a ocorrência de deposição de parte do HF liberado, isto é indicativo que talvez nem todo o HF seja absorvido pelo sistema de ventilação e ainda ocorra a formação de monômeros de HF, ocasionando a deposição gravitacional.



**Figura 98** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t=1\text{s}$ , Caso 1, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5\text{ atm}$ ,  $Q = 2,9\text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3\text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 99** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t=10s$ , Caso 1, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 100** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t=60s$ , Caso 1, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

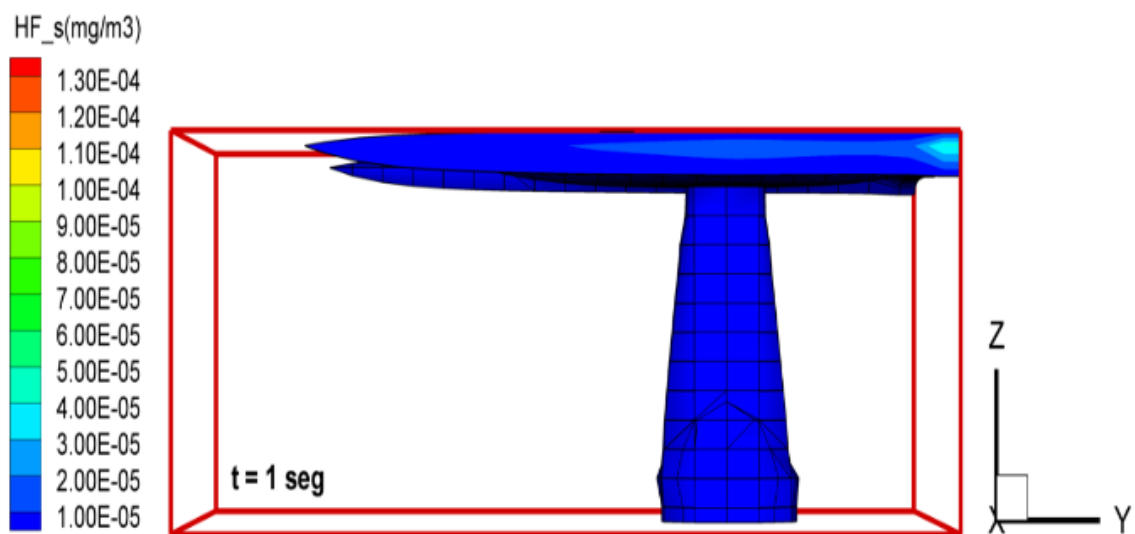
## CASO 2

As Figuras 101 a 103 apresentam os dados de saída, em relação aos cenários escolhidos na simulação do caso 2. Estes dados, são os valores da concentração de HF ( $\text{mg}/\text{m}^3$ ). Os tempos de avaliação são os mesmos utilizados na simulação de liberação de  $UF_6$ . Na sequência tem-se a liberação nos tempos  $t=1s$  (Fig. 101),  $10s$  (Fig. 102) e  $60s$  (Fig. 103).

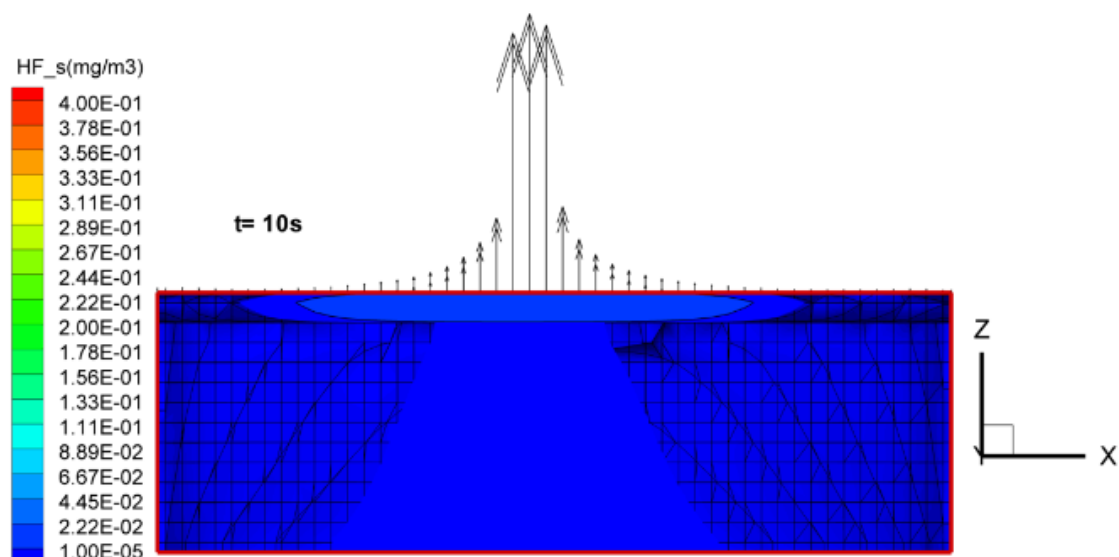


Não é observada uma variação na concentração e dispersão de HF, através dos tempos em  $t=1s$  (Fig. 101) e  $t=10s$  (Fig. 102). Somente, em  $t=60s$  (Fig. 103) é obtido uma representação de deposição de HF próximo ao solo, que pode ser atribuído ao efeito de acréscimo da taxa de exaustão.

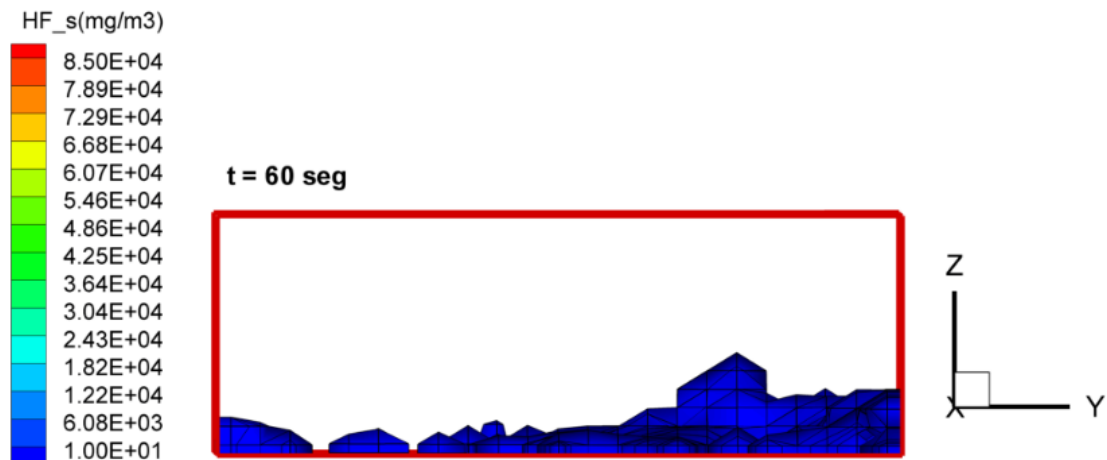
Deve-se considerar a possibilidade que tal deposição se dê ao fato de que ao ser extinto a maior parte do HF pelo sistema de HF, tem-se apenas HF residual no ambiente em concentrações extremamente baixas ( $10 \text{ mg/m}^3$ ) até o limite superior de  $6\text{g/m}^3$ . Mas em conformidade com Tabela 5, seria suficiente para exposição de até 20 minutos, ocasionar um suposto mal estar respiratório.



**Figura 101** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t=60s$ , Caso 2, ( $T = 80^\circ\text{C}$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 102** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t=10s$ , Caso 2, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q= 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



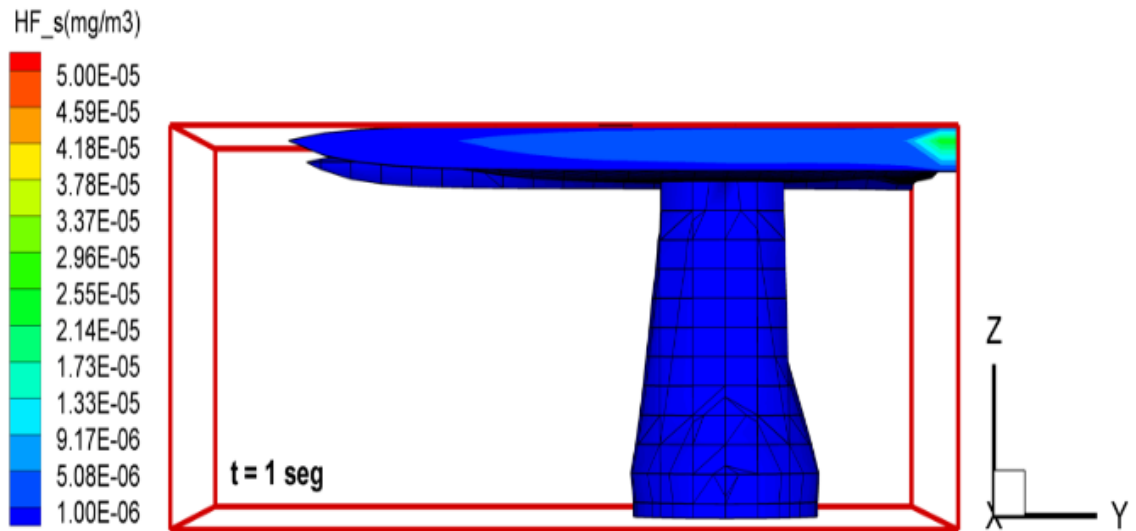
**Figura 103** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t=60s$ , Caso 2, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q= 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 16,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

### CASO 3

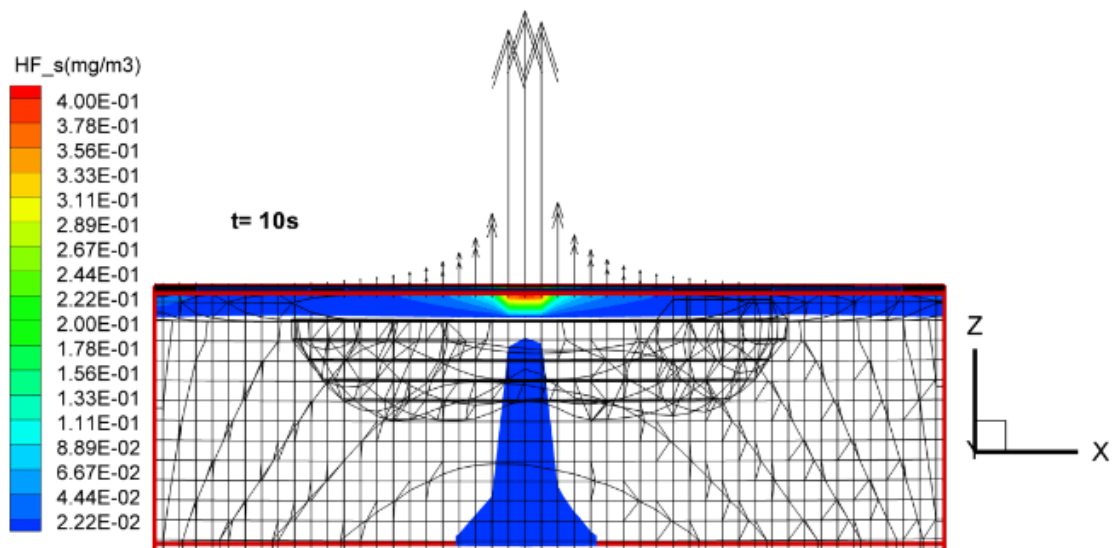
As Figuras 104 a 106 apresentam os três cenários encontrados na simulação do Caso 3, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $80^{\circ}C$ ). O tempo de liberação na simulação considerado é alterado para 5 minutos. Na sequência é observada a simulação nos tempos  $t=1s$ ,  $10s$  e  $60s$ . Este caso visa avaliar a influência que ocorre numa eventual expansão e um maior período, que implica numa menor taxa de liberação de material.

Mediante a observação do resultado na figura em  $t=1s$  (Fig. 104), têm-se aparentemente o mesmo perfil de liberação para HF neste período quando comparado aos Casos 1 e 2, porém em  $t=10s$  (Fig. 105), tem-se uma menor liberação radial e formação de HF, quando comparado com o Caso 2. Isto é condizente com a proposta da avaliação, pois ao reduzir a taxa de liberação é previsto menor quantidade de  $UF_6$  liberado para o ambiente. Este desempenho, de praticamente exaurir a totalidade o HF presente, concorda com a correlação proposta inicialmente, o que demonstra uma resposta satisfatória para o modelo.

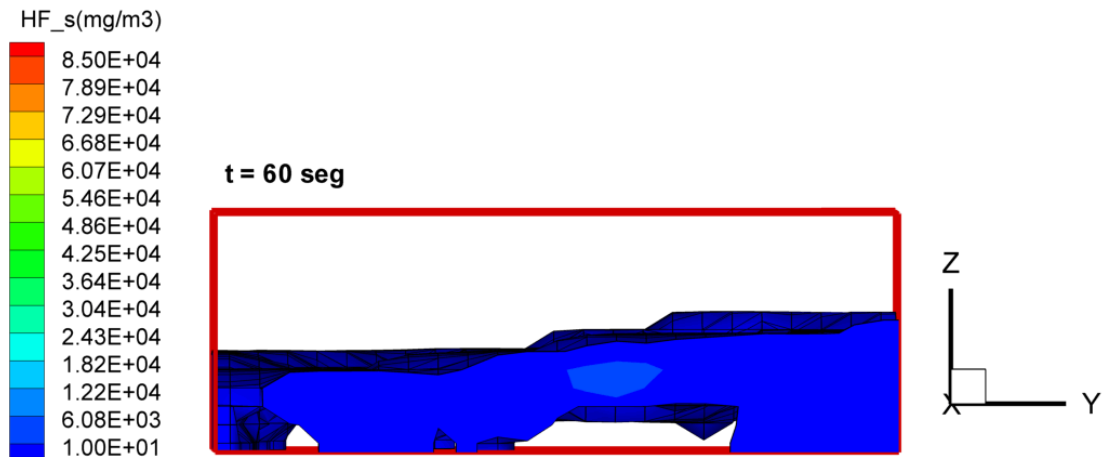
Corroborando com os dados observados nas Figuras (104) e (105), a dispersão do particulado em  $t=60s$  (Fig. 106) é muito menor do que observado nos Casos 1 e 2. Isto é atribuído ao tempo de liberação para este caso que é igual a 5 minutos. Sendo assim, a dispersão obtida pela simulação computacional, em 1 minuto, é condizente com o esperado com os dados da própria previsão para este trabalho.



**Figura 104** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t= 1s$ , Caso 3, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s), código MHPMTP.



**Figura 105** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t= 10s$ , Caso 3, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de UF<sub>6</sub> = 3,3 kg/s), código MHPMTP.



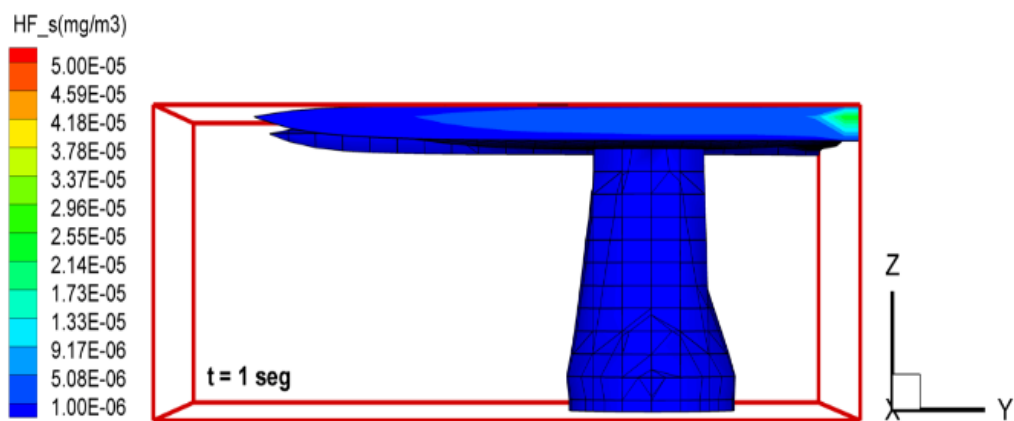
**Figura 106** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 60s$ , Caso 3, ( $T = 80^{\circ}C$ ,  $P = 2,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 3,3 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

#### CASO 4

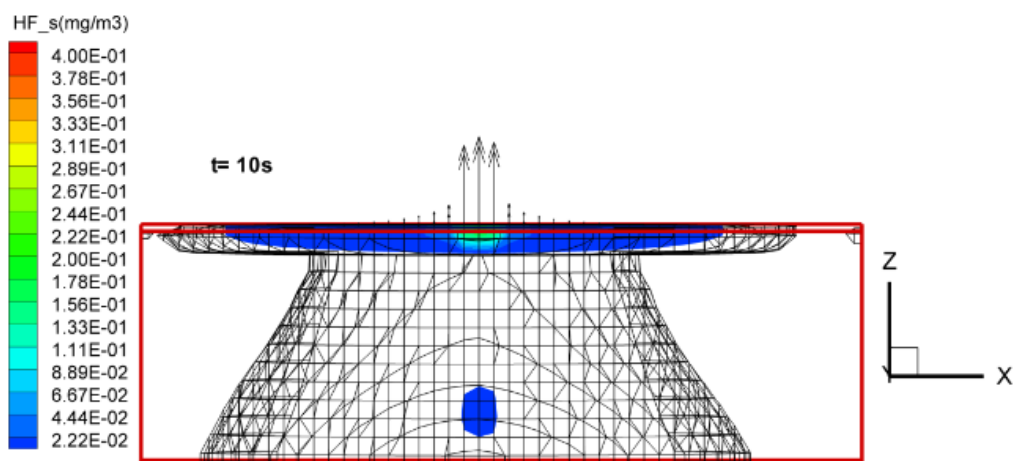
As Figuras 107 a 108 apresentam os três cenários escolhidos na simulação do caso 4, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $80^{\circ}C$ ). Não existe uma mudança substancial nos parâmetros deste caso, com exceção da vazão de exaustão, que passa a ser o dobro ( $5,7 \text{ m}^3/s$ ).

Em relação a este primeiro conjunto de dados (Casos 1, 2, 3 e 4) provenientes da simulação computacional onde a temperatura é mantida constante e variaram-se as taxas de liberação, vazão de exaustão e tempo de liberação, pode-se dizer que os valores e comportamento observados são condizentes com os disponíveis na literatura.

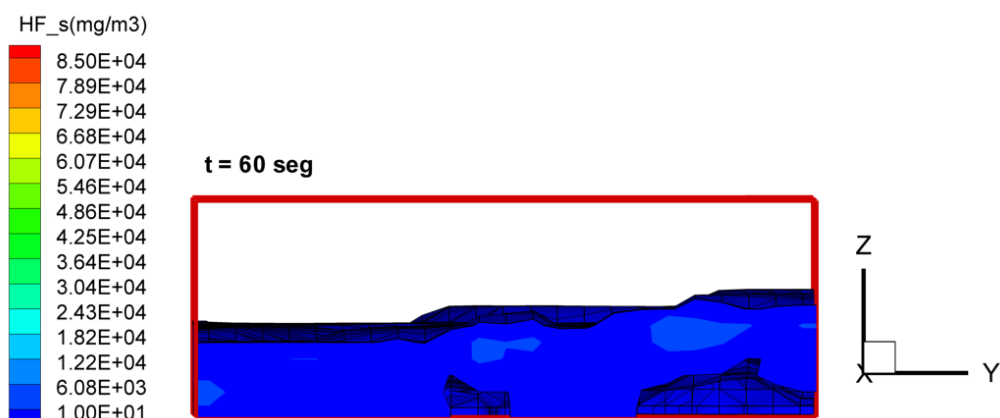
Com os valores do parâmetro de saída da concentração de HF ( $\text{mg/m}^3$ ), foi obtida boa relação, que reforçou a expectativa em relação ao esgotamento do gás, com diminuição da dispersão em relação ao acréscimo da velocidade de exaustão, contribuindo para entender a dinâmica da dispersão.



**Figura 107** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 1$  s, Caso 4, ( $T = 80^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 2,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3$  kg/s), código MHPMTP.



**Figura 108** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 10$  s, Caso 4, ( $T = 80^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 2,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3$  kg/s), código MHPMTP.

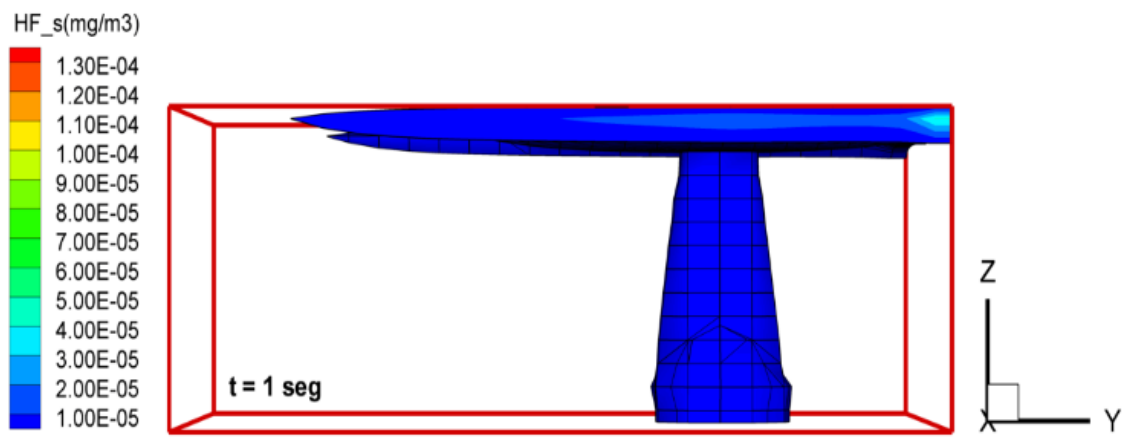


**Figura 109** – Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 60$  s, Caso 4, ( $T = 80^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 2,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 3,3$  kg/s), código MHPMTP.

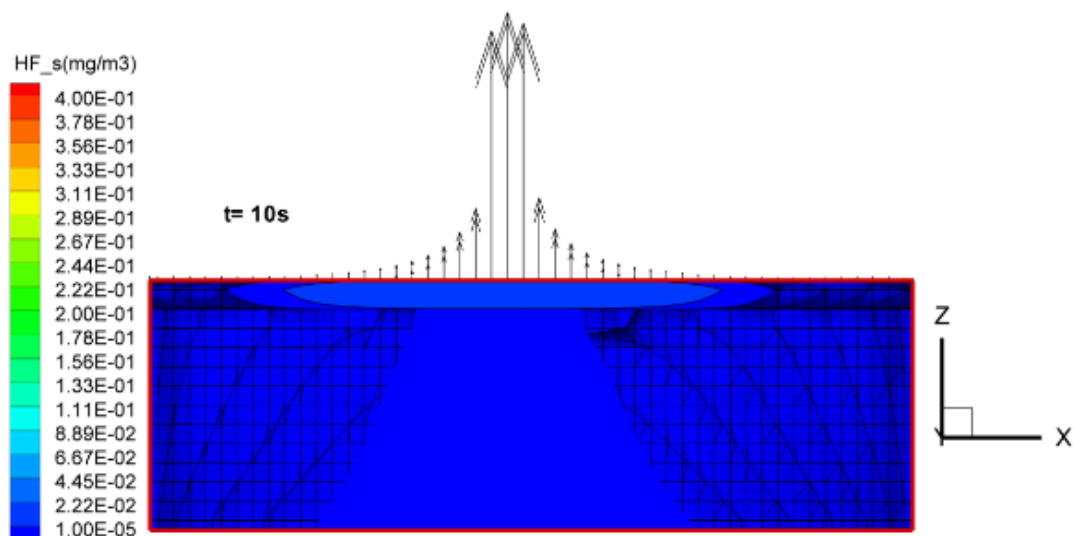
## CASO 5

As Figuras 110 a 11271 apresenta os cenários escolhidos na simulação do caso 5, onde é alterada a temperatura de aquecimento ( $93^{\circ}\text{C}$ ), assim como a pressão do gás no interior do cilindro (3,5bar) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de  $\text{UF}_6$ ,  $2,9\text{m}^3/\text{s}$  e  $18,1\text{kg}/\text{s}$ , respectivamente.

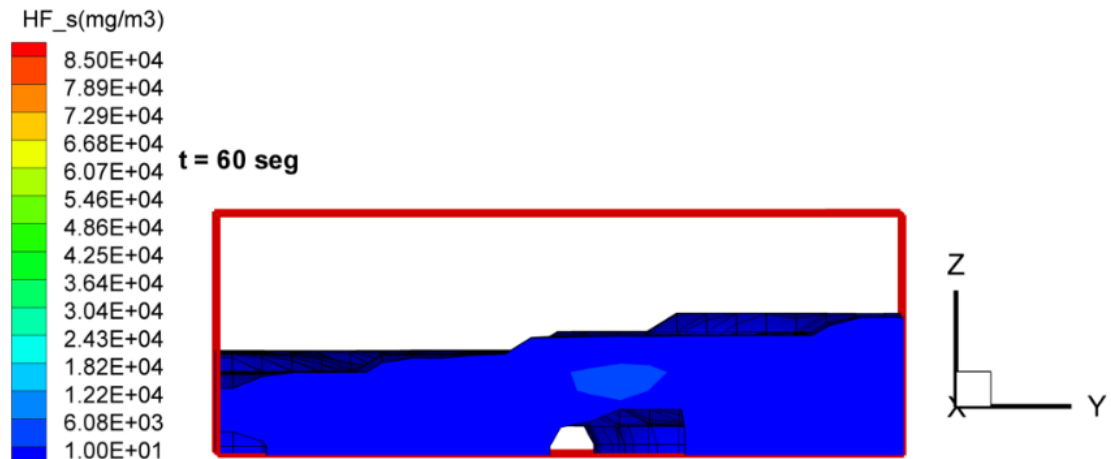
Como a temperatura é o parâmetro principal a ser mudado no conjunto de dados de simulações dos Casos 5 a 8, foi observada uma variação significativa das análises anteriores e em relação ao observado na análise de  $\text{UF}_6$ . Os resultados mostraram-se coerentes e de acordo com resultados previamente verificados na literatura.



**Figura 110** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 1\text{s}$ , Caso 5, ( $T = 93^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1 \text{ kg}/\text{s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 111** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 10\text{s}$ , Caso 5, ( $T = 93^{\circ}\text{C}$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/\text{s}$ , taxa de liberação de  $\text{UF}_6 = 18,1 \text{ kg}/\text{s}$ ), código MHPMTP.

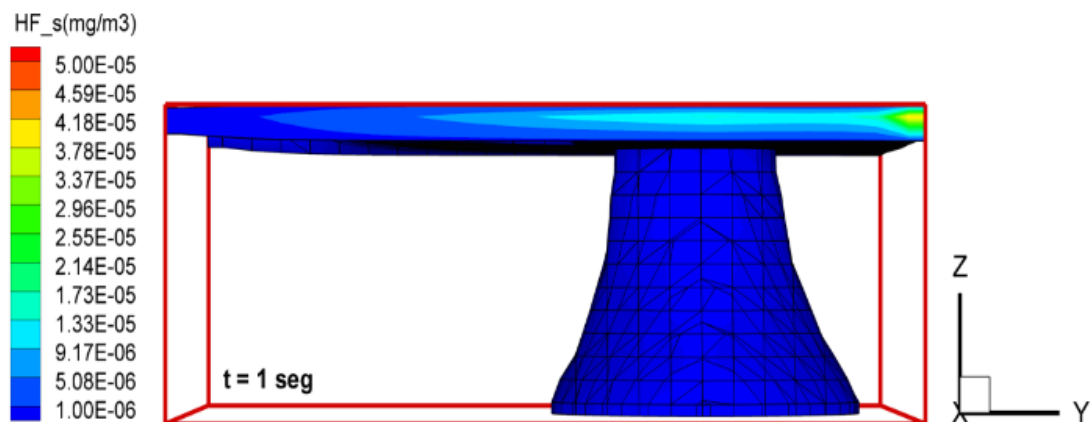


**Figura 112** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 60s$ , Caso 5, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

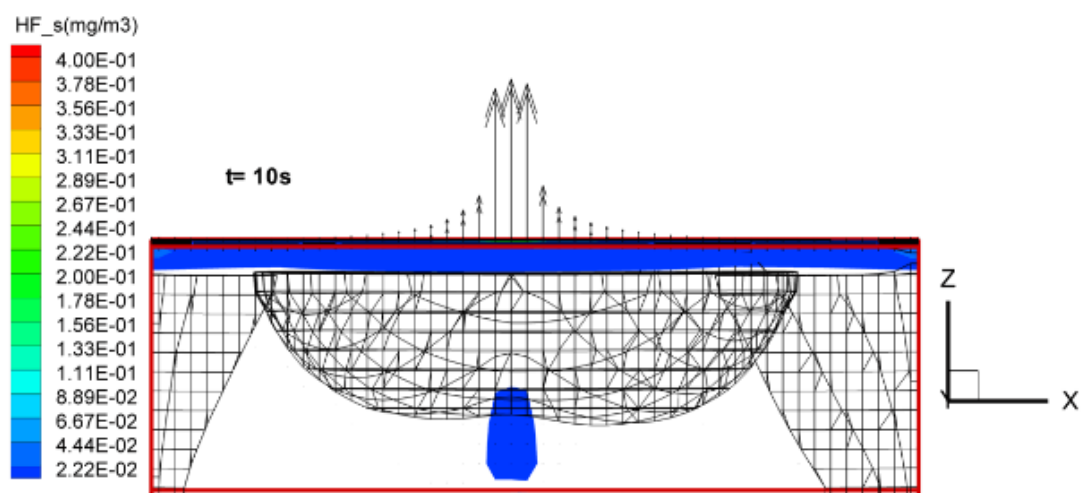
### CASO 6

As Figuras 113 a 115 apresentam os cenários da simulação do caso 6, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $93^{\circ}C$ ), assim como a pressão do gás no interior do cilindro ( $3,5\text{bar}$ ) e a vazão de exaustão e liberação de  $UF_6$ ,  $5,7\text{m}^3/s$  e  $18,1\text{m}^3/s$ , respectivamente.

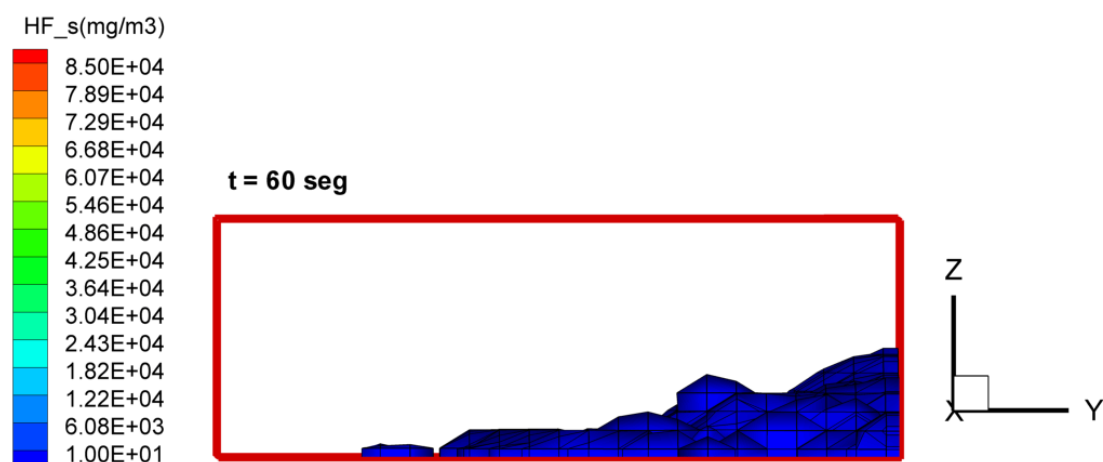
O aumento da exaustão neste caso, acompanha o previsto no Caso 2, mantendo a coerência das previsões para esta simulação, haja visto que o aumento da taxa de exaustão proporciona o deslocamento do gás no ambiente e aumenta a sua distribuição, conforme observado em  $t=1s$  (Fig. 113),  $t=10s$  (Fig. 114) e  $t= 60s$  (Fig. 115). Neste caso é pronunciada a formação de HF no primeiro segundo, entretanto a exaustão ocasiona praticamente a extinção total do gás nos primeiros 10 segundos. O residual é menos acentuado em relação ao observado nos casos anteriores, possivelmente em consequência da taxa de exaustão.



**Figura 113** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 1s$ , Caso 6, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 114** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 10s$ , Caso 6, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 115** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 60s$ , Caso 6, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 18,1 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

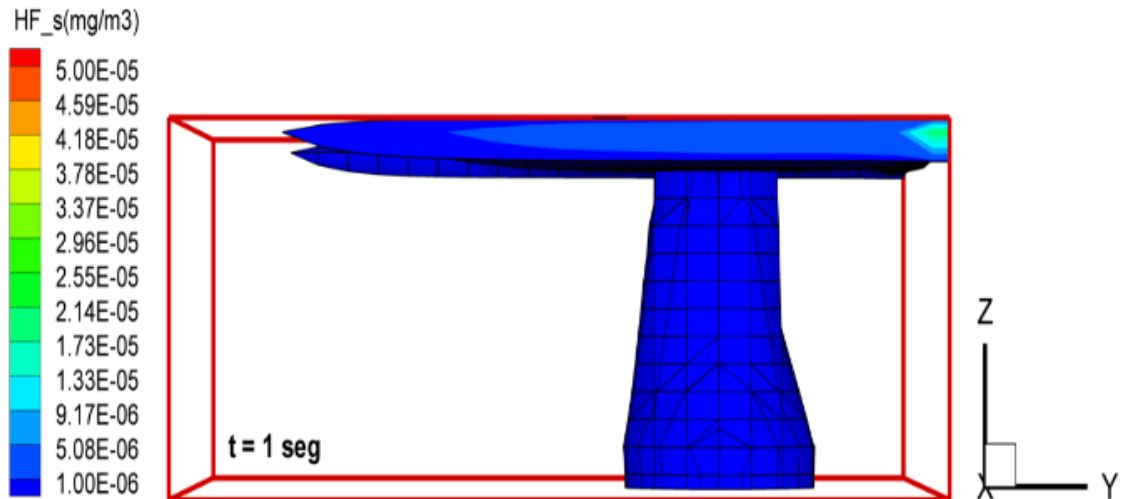
### CASO 7

As Figuras 116 a 118 apresentam os cenários referentes ao caso 7, onde é mantida a temperatura de aquecimento ( $93^{\circ}C$ ), assim como a pressão do gás no interior do cilindro ( $3,5\text{bar}$ ) e a vazão de exaustão e taxa de liberação de  $UF_6$ ,  $2,9\text{m}^3/s$  e  $3,6\text{m}^3/s$ , respectivamente. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento são 10 minutos. Na sequência tem-se a liberação nos tempos  $t=1s$  (Fig. 116) , $10s$  (Fig. 117) e  $t= 60s$  (Fig.118).

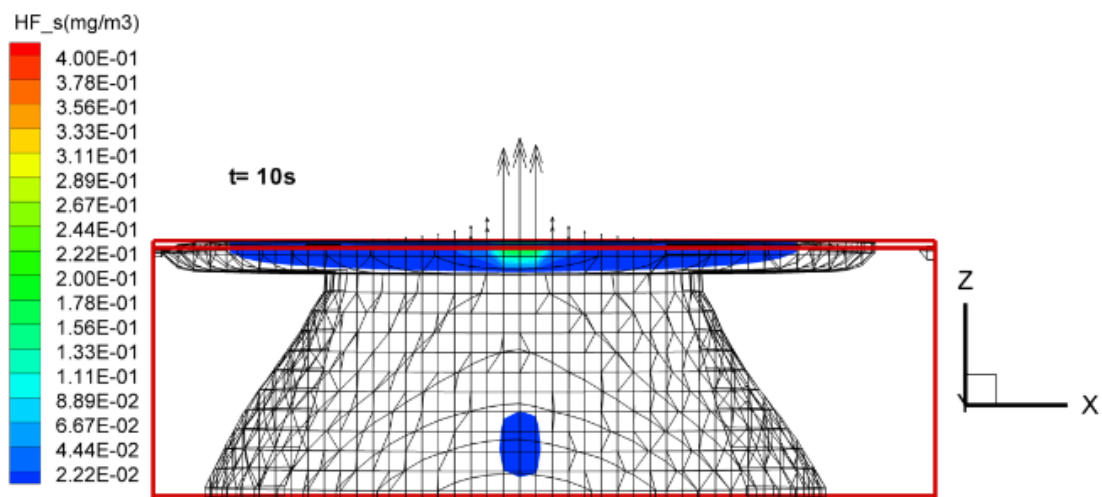


Neste cenário tem-se um maior tempo de liberação, e as imagens em  $t=1s$  (Fig. 116) e 10s (Fig. 117), corroboram para a avaliação na qual observa-se uma menor liberação radial e formação do HF, a partir do ponto de liberação de  $UF_6$ , quando comparado com o Caso 3

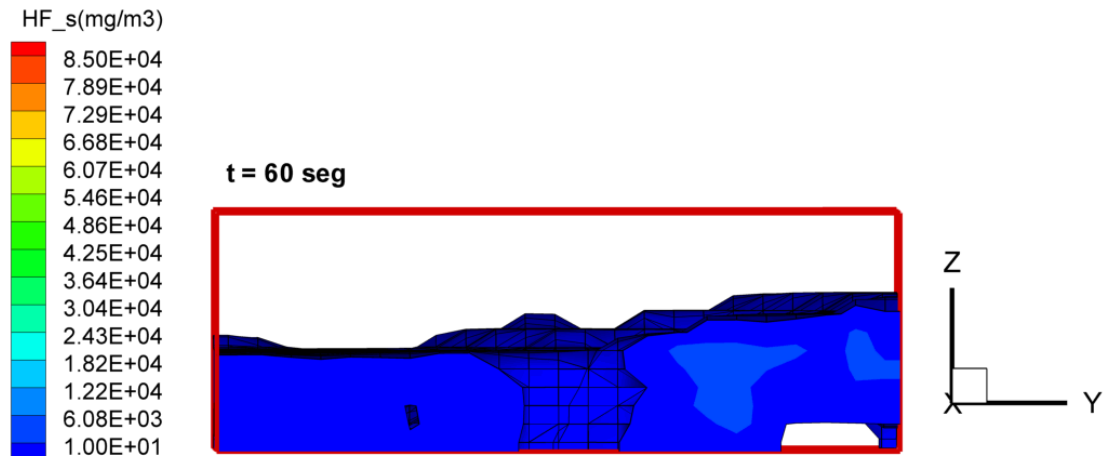
É verificado que a menor taxa de liberação para o caso do HF gasoso tem um maior impacto na sua retirada do ambiente, nestes Casos 7 e 8.



**Figura 116** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 1s$ , Caso 7, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de  $UF_6 = 3,6$  kg/s), código MHPMTP.



**Figura 117** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 10s$ , Caso 7, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5$  atm,  $Q = 2,9$  m<sup>3</sup>/s, taxa de liberação de  $UF_6 = 3,6$  kg/s), código MHPMTP.



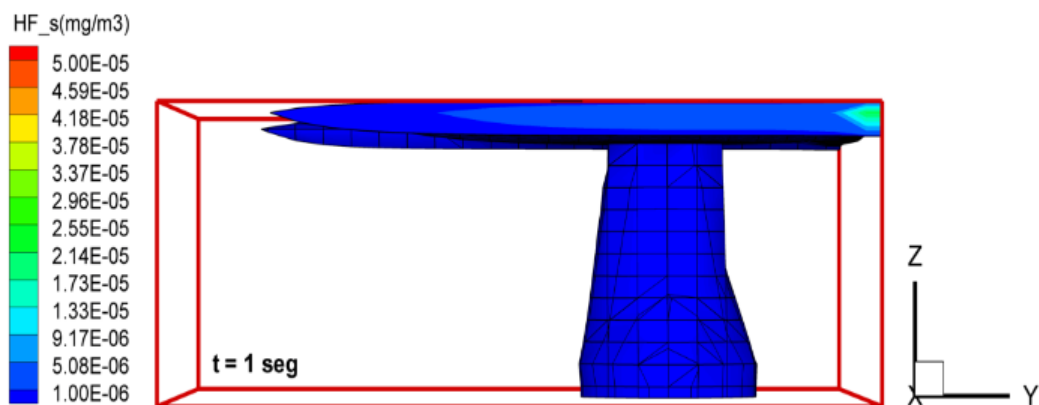
**Figura 118** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 60s$ , Caso 7, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 2,9 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

### CASO 8

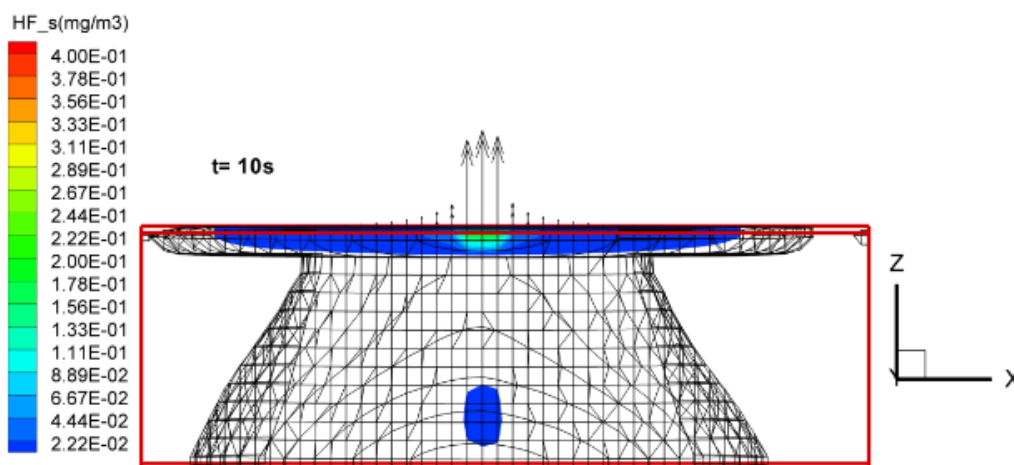
As Figuras 119 a 121 apresentam os cenários apresentados na simulação do caso 8. O tempo de liberação na simulação considerado é 5 minutos e o tempo total do evento são 10 minutos. Na sequência tem-se a liberação nos tempos  $t=1s$  (Fig. 119),  $10s$  (Fig. 120) e  $60s$  (Fig. 121).

Não existe uma mudança substancial nos parâmetros deste caso, com exceção da taxa de exaustão, que passa a ser o dobro. Mesmo assim em relação ao caso anterior, não é constatada uma maior dispersão do material ou mudança na concentração de  $UO_2F_2$  no ambiente.

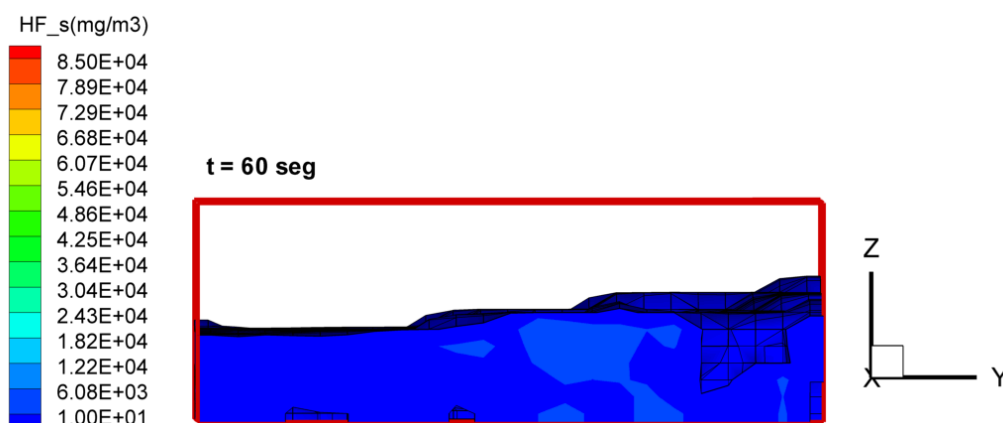
Nos casos onde ocorre a liberação com taxas de liberação baixas, como observados nos casos 7 e 8, não é observado variações significativas nas concentrações. Mas a variação de exaustão apresenta, valores significativos e representativos, dentro do esperado para esta situação, sendo condizente com a literatura, para modelos de escoamento turbulento.



**Figura 119** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 1s$ , Caso 8, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 120** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 10s$ , Caso 8, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.



**Figura 121** - Simulação da dispersão de HF em relação a  $t = 60s$ , Caso 8, ( $T = 93^{\circ}C$ ,  $P = 3,5 \text{ atm}$ ,  $Q = 5,7 \text{ m}^3/s$ , taxa de liberação de  $UF_6 = 3,6 \text{ kg/s}$ ), código MHPMTP.

## 6. CONCLUSÕES

Com base nos resultados de simulação da liberação de hexafluoreto de urânio ( $UF_6$ ) seguida da reação de hidrólise nos casos propostos neste trabalho, pode-se concluir que o modelo computacional desenvolvido por adaptação de modelo existente MPHMTTP representou de forma satisfatória os principais fenômenos, inclusive os efeitos de turbulência inerentes a

inclusão da participação dos sistemas de ventilação e exaustão, que podem ocorrer no interior de prédios de processos durante as liberações acidentais catastróficas.

O cenário proposto tratou da pior situação postulada já ocorrida em instalações no ciclo do combustível nuclear ao redor do mundo, rompimento de cilindro em temperaturas nas quais o  $UF_6$  encontra-se no seu estado líquido e a avaliação deste cenário através do modelo MPHMTTP, no qual foi avaliado a influência do acréscimo da temperatura do material, que indica uma correlação direta com a pressão e taxa de liberação de  $UF_6$ , sendo explícita em relação a maior quantidade de material disperso no ambiente. Em contra partida, ao avaliar a influência do aumento na vazão do sistema de exaustão e sua relação com o tempo de liberação demonstrou comportamentos distintos do escoamento gasoso e do material particulado.

Neste sentido, o modelo computacional apresentou confiabilidade frente aos perfis esperados para vetor velocidade e % de umidade e adicionalmente demonstrou o comportamento detalhado numa visualização 3D destes parâmetros no interior dos prédios, informação até então não disponibilizada pelos métodos analíticos.

Especificamente sobre a dispersão do material particulado para o cenário de ruptura catastrófica, o modelo apresentou a tendência de emissões instantâneas e deposição em locais o mais próximo possível da fonte de liberação, fato este já relatado em literaturas da área nuclear. Tal identificação é perceptível através das simulações em condições distintas de aumento da temperatura, associados a taxa de liberação e das características no aumento da vazão de exaustão e do tempo de liberação de  $UF_6$ .

O modelo MPHMTTP permitiu o esclarecimento do comportamento do escoamento gasoso tanto do próprio UF<sub>6</sub>, assim como do HF e considerou o escoamento turbulento através das equações modificadas para a elucidação desta contribuição num cenário de expansão. Desta forma, sendo melhor adaptado para situação de ruptura catastrófica e deposição nas proximidades da fonte, em relação aos modelos analíticos que não fazem qualquer tipo de previsão de dispersão no espaço (3D).

Apresentou relativa significância para simulações em análise de segurança e avaliação de risco, no qual podemos a partir dos dados de % volume de UF<sub>6</sub> e das concentrações de HF e UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> estabelecer perímetros e zonas de segurança no interior dos prédios de processo, além de demonstrar superioridade frente aos modelos analíticos, com a possibilidade da modificação das diversas condições iniciais e de contorno.

## **7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS**

A partir do modelo MPHMTTP proposto no presente trabalho e com vistas ao aprimoramento deste com relação a criação de oportunidades para atender a outros tipos de cenários postulados do ciclo do combustível nuclear, podem-se delinear as seguintes possibilidades para a continuidade das pesquisas a cerca deste tema:

- Estudo de novos parâmetros operacionais, como inclusão de taxas de vazamento variável, condições termodinâmicas e novos compostos;
- Cálculo de material depositado (UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> e HF);
- Cálculo de dose, contribuindo de maneira significativa para a avaliação de riscos em instalações do ciclo do combustível nuclear.

## 8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABEN - Associação Brasileira de Energia Nuclear. (2013). *Brasil Nuclear*, 40(19), 16-18.
- Alipour, H., Karimipourb, A., Sfaeic, M. R., Semiromid, D. T., Omid, A., & Akbariainfluence, O. A. (2017). Influence of T-semi Attached Rib on Turbulent Flow and Heat Transfer Parameters of a Silver-Water Nanofluid With Different Volume Fractions in a Three-Dimensional Trapezoidal Microchannel. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, volume 88, p. 60-76.
- Andrae, R. (1985). *NUREG/CR-4260 - TORAC User's Manual - Computer Code for Analyzing Tornado-Induced Flow and Material Transport in Nuclear Facilities*. Los Alamos, New Mexico: Los Alamos National Laboratory.
- Baltazar, A. W. (2008). Modelamento Matemático e Simulação Computacional da Combustão de Carvão e Biomassa em Reator de leito Fluidizado Borbulhante para Uso em Centrais Termoelétricas. *Tese de Doutorado*, 109p. Universidade Federal Fluminense - PPGEM.
- Barber, E. J. (1998). DOE Conference – Uranium Hexafluoride – Safe Handling, Processing, and Transporting. *The Physical and Chemical Properties of Uranium Hexafluoride*, (pp. 1-6). Oak Ridge, Tennessee.
- Barbosa, F. P. (2013). Estruturas de dados topológicas aplicadas em simulações de dados de escoamentos compressíveis utilizando volumes finitos e métodos de alta ordem. 2013. 212p. Tese (Mestrado em Engenharia de Materiais) – Universidade São Paulo. São Carlos, São Paulo.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2004). *Fenômenos de Transporte* (2ª ed.). LTC Editora .
- Bloom, S. G., Just, R. A., & Williams, W. R. (1989). *K/D-5694 - A computer program for simulating the atmospheric dispersions of UF6 and other reactive gases having positive, neutral, or negative buoyancy*. Oak Ridge, Tennessee: Martin Marietta Energy Systems, Inc., Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant.
- Bostick, W. D., McCulla, W. H., & Pickrell, P. W. (1985). Sampling, characterization, and remote sensing of aerosols formed in the atmospheric hydrolysis of uranium hexafluoride. *Journal of Environmental Science and Health, Part A - Environmental Science and Engineering*, vol.20, Issue 3, 369-393.
- Bouzigues, H., Mezin, M., & Mestre, E. (1978). Fundamentals of UF6 Accidental Release. "Fundamentals of UF6 Accidental Release", *CSNI Specialists Meeting on the Safety Problems Associated with the Handling and Storage of UF6*. Boekelo, Netherlands: CSNI.
- Brilhante, O., & Caldas, L. (1999). *Gestão e avaliação de risco em saúde ambiental*. Rio de Janeiro: Ed. FIOCRUZ.
- Brooks, L. H., Garner, E. V., & Whitehead, E. (1956). *Chemical and X-ray crystallographic studies on uranyl*. United Kingdom Atomic Energy Authority.

- Castro, J. A. (2000). A multi-dimensional transient mathematical model of blast-furnace based on mult-fluid model. *Phd. Thesis*. Institute for Advanced Material Processing - Tohoku University - Japan.
- CCPS. (2000). *Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers. Guidelines for chemical process quantitative risk analysis*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Cooper, A. R., & Lloyd, J. E. (1960). K1. Gas-Solid Reactions: Applications in Uranium Processing. *U.K.A.E.A. - United Kingdom Atomic Energy Authority*, 353 - 365.
- Covello, V., & Mumpower, J. (1985). Risk analysis and risk management: an historical perspective. *Risk Analysis*, 5(2), 103-120.
- Crabot, B. G.-C. (1991). Presentation and interpretation of field Atmosphere. *Proc. OECD/NEA/CSNI/Specialist Meeting on Safety and Risk Assessment in Fuel Cycle Facilities*, (pp. 320-350). Tokyo, Japan,.
- Crane Co. (1977). *Flow of Fluids Through Valves, Fittings, and Pipes. Metric Edition - SI Units*. Crane Co.
- DeWitt, R. (1960). *Uranium Hexafluoride: A Survey of the Physico-Chemical Properties, GAT-280*. Portsmouth, Ohio: Goodyear atomic Corporation.
- Dias, P. E., Batochio, E., Calvelo, J. G., & Zorzetto, M. A. (2011). *Consultoria Técnica para Implantação da Nova Usina de Hexafluoreto de Urânio - INB*. São Paulo: EMGEPRON.
- DOE. (1994). *DOE HANDBOOK - Airborne Release Fractions/Rates and Respirable Fractions for Nonreactor Nuclear Facilities, Vol 1, Analysis of Experimental Data*. Washington, D.C.: U.S. Department of Energy.
- Dutta, P., Saha, S. K., Nandi, N., & Pal, N. (2016). Numerical Study on Flow Separation in 90° Pipe Bend Under High Reynolds Number by k-ε Modelling. *Engineering Science and Technology, an International Journal*, Volume 19, Issue 2, p. 904-910.
- ELETRONUCLEAR. (outubro de 2019). [www.eletronuclear.gov.br](http://www.eletronuclear.gov.br). Acesso em outubro de 2019, disponível em [www.eletronuclear.gov.br](http://www.eletronuclear.gov.br).
- EPE. (2017). *Balanço Energético Nacional*. Rio de Janeiro: EPE.
- Fane, A. G., Charlton, B. G., & Alfredson, P. G. (1974). *The Thermal Denitration of Uranyl Nitrate in a Fluidized Bed Reactor*. AAEC - Australian Atomic Energy Commission, Australia.
- Farias, A. S. (2010). Modelagem Numérica do Escoamento Turbulento em Superfícies Rugosas. *Dissertação de Mestrado em Ciências Mecânicas*, 108 p. Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília.
- First, M. (1995). *NUREG/CP-0141 - A Brief History of the Air Cleaning Conferences, Proceedings of the 23rd DOE/NRC Nuclear Air Cleaning Conference*. Boston, Massachusetts: M.W. First, Ed.

- Friedlander, S. K. (1977). *Smoke, Dust and Haze, Fundamentals of Aerosol Behaviour*. New York, 1977: Wiley.
- Gonçalves, N. D. (2007). Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas. 2007. *Dissertação (Mestrado em Engenharia Matemática) –Faculdade de Ciências da Universidade do Porto*. Portugal, 2007.
- Gonzalez, V., & Otero, A. R. (1973). Formation of UO<sub>3</sub> Particules in a Fluidized Bed. *Powder Technology*, 137 - 143.
- Gregory, W. (1983). *LA-9624-M - EVENT User's Manual: A Computer Code for Analyzing Explosion-Induced Gas- Dynamic Transients in Flow Networks*. Los Alamos, New Mexico: Los Alamos National Laboratory.
- Gregory, W., Martin, R., Smith, P., & Fenton, D. (1982). Response of HEPA Filters to Simulated Accident Conditions. *17th DOE Nuclear Air Cleaning Conference*. Denver.
- Haas, P. A., Arthur, R. D., & Stines, W. B. (1981). *Development of Thermal Denitration to Prepare Uranium Oxide and Mixed Oxides for Nuclear Fuel Fabrication*. UNION CARBIDE CORPORATION, ORNL - OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY, Tennessee.
- Hanna, S. C. (1993). Hazardous gas model evaluation with field observations. *Atmos. Environ. Part A. General Top.*, 27 (15) , 2265-2285.
- Hanna, S. R. (1997). Modeling accidental releases to the atmosphere of a dense reactive chemical (Uranium hexafluoride). *Atmospheric Environment*, 31(6), 901-908.
- Hansen, S. J., & Rogers, M. D. (2006). *The UF<sub>6</sub> Manual Good Handling Practices for Uranium Hexafluoride*. USEC-651, Revision 9.
- Harrington, C. D., & Ruehle, A. E. (1959). *Uranium Production Technology*. Princeton, New Jersey: D. Van Nostrand, Inc.
- Hodapp, M. J. (2012). Simulação trifásica por técnicas de CFD da combustão de carvão mineral em leito fluidizado. *Tese de Doutorado*, 172 p. Unicamp - SP.
- Hou, R., Mahmud, T., Prodromidis, N., Roberts, K. J., Williams, R. A., Goddard, D. T., & Semeraz, T. (2007). Synthesis of UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> Nanoparticles in a Tubular Aerosol Reactor: Reactor Design and Experimental Investigations. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 46, 2020-2033.
- Hu, S. W., Lin, H., Wang, X. Y., & Chu, T. W. (2014). Effect of H<sub>2</sub>O on the hydrolysis of UF<sub>6</sub> in the gas phase. *Journal of Molecular Structure, Volume 1062*, 24, 29-34.
- Hu, S., Lin, H., Wang, X., Chu, T. W., & Liu, X. (2008). Theoretical Mechanism Study of UF<sub>6</sub> Hydrolysis in the Gas Phase. *J. Phys. Chem. A*, 112(37), 8877-8883.
- Hu, S., Lin, H., Wang, X., Chu, T. W., & Liu, X. (2009). Theoretical Mechanism Study of UF<sub>6</sub> Hydrolysis in the Gas Phase (II). *J. Phys. Chem. A*, 113(32), 9243–9248.
- I.A.E.A. (2015). *Nuclear Technology Review*. Relatório da Agência Internacional de Energia Atômica.



- INB. (2014). *Descritivo de Processo*. Gerência de Implantação e Processos de Conversão UF6. Resende - RJ: Indústrias Nucleares do Brasil.
- INB. (2019). *www.inb.gov.br*. Acesso em outubro de 2019, disponível em *www.inb.gov.br*: *www.inb.gov.br*
- Ivings, M., Gant, S., Jagger, S., Lea, C., Stewart, J., & Webber, D. (2016). *Final Report Evaluating vapor dispersion models for safety analysis of LNG facilities*. Health & Safety Laboratory Buxton, Derbyshire, UK.
- Ivings, M., Lea, C., Webber, D., Jagger, S., & Coldrick, S. (2013). Protocol for the Evaluation of LNG vapour dispersion models. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, V.26, n. 1.
- Jonke, A. A., Levitz, N. M., Petkus, E. J., & Taecker, R. G. (1954). *Fluidized-Bed Process for The Production of Uranium Tetrafluoride (Green Salt) from Uranyl Nitrate*. Argonne National Laboratory. Lemont, Illinois: AEC - RESEARCH AND DEVELOPMENT REPORT.
- Kader, B. (1981). Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer, Elsevier*, v. 24, n. 9,, p. 1541–1544, 1981.
- Kemp, R. S. (2010). Source Terms for Routine UF6 Emissions. *Science & Global Security*, 18.
- Kessie, R. W. (1967). Plutonium and uranium hexafluoride hydrolysis kinetics. *Ind. Eng. Chem. Process Des. DeV.*, 1967, 6 (1), 105- 111.
- Khan, F. I., & Abbasi, S. (1998). Techniques and methodologies for risk analysis in chemical process industries. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Volume 11, Issue 4, 1998, Pages 261-277.
- Khan, F. I., Rathnayaka, S., & Ahmed, S. (2015). Methods and models in process safety and risk management: Past, present and future. *Process Safety and Environmental Protection*, Volume 98, pp. 116-147.
- Kim, S. H., Taleyarkhan, R. P., Keith, K. D., & Schmidt, R. W. (1996). Modeling and Analyses of Postulated UF6 Release Accidents in Gaseous Diffusion Plant. *Fourth International Conference on Nuclear Engineering*,. New Orleans, Louisiana.
- Kundu, P. K., & Cohen, I. M. (2002). *Fluid Mechanics - Fourth Edition*. Burlington, MA, USA: Academic Press Inc.
- Lainetti, P. E. (1991). Desenvolvimento do Processo de Produção de Pós de UO2 a partir de Nitrato de Urânio, via Atomização. *Dissertação de Mestrado*. São Paulo.
- Lainetti, P. E. (1991). Desenvolvimento do Processo de Produção de Pós de UO2 a partir de Nitrato de Urânio, via Atomização. São Paulo.
- Lauder, B., & Spalding, D. (1974). The Numerical Computation of Turbulent Flow Computer Methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 3(2):, 269-289.
- Leveque, R. (2002). *Finite volume methods for hyperbolic problem*. CUP.
- Lima, L., & Caetano, N. (2015). Simulação computacional de um escoamento turbulento de um fluido incompressível em um venturi. *Linkania*, v. 5, n. 1, p.91-109.

- Liu, C. (outubro de 2017). *Generating the Log Law of the Wall with Superposition of Standing Waves*. Fonte: arxiv.org: arXiv:1708.05816 [physics.flu-dyn]
- Luna, M., & Cerón, L. (2017). NGL supersonic separator: modeling, improvement, and validation and adjustment of k-epsilon RNG modified for swirl flow turbulence model. *Revista Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia*, No. 82, p. 82-93.
- Ma, P., Ewan, T., Jainski, C., Lu, L., Dreizler, A., Sick, V., & Ihme, M. (2017). Development and Analysis of Wall Models for Internal Combustion Engine Simulations Using High-speed Micro-PIV Measurements. *Flow Turbulence Combust.*, pp. 283–309, 2017.
- Maliska, C. (2004). *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, 2ª edição, Revisada e ampliada. LTC, 2004.
- Markiewicz, M. (2012). A review of mathematical models for the atmospheric dispersion of heavy gases. *Part I. A Classif. Models. Ecol. Chem. Eng.*, S 19 (3) , 297-314.
- McFarlane, K., Prothero, A., Puttock, J. S., Roberts, P. T., & Witlox, H. W. (1990). *HGSYSTEM technical reference manual, report TNER.90.015*. Chester, UK: Shell Research Ltd, Thornton Research Centre.
- MCTI. (2015). Acesso em 19 de Outubro de 2015, disponível em Site do Ministério da Ciência Tecnologia e Inovação - MCTI: [http://www.mct.gov.br/index.php/content/view/336736/Acoes\\_e\\_Programas.html](http://www.mct.gov.br/index.php/content/view/336736/Acoes_e_Programas.html)
- Medeiros, M. A. (1990). A Camada Limite Térmica Turbulenta com Transpiração. *Dissertação de Mestrado*, 73 p. Universidade Federal do Rio de Janeiro - COPPE.
- MILIN, M., RANNOU, J., VIAULLE, L., & CAPLIN, G. (2015). HYDRATION OF URANIUM RESIDUES CONTAINED IN ENRICHED UF6. *HYDRATION OF URANIUM RESIDUES CONTAINED IN ENRICHED UF6* (pp. 736-745). Charlotte, NC: American Nuclear Society.
- Milstein, R. I. (2001). *NUREG-1513 - Integrated Safety Analysis - Guidance Document*. Washington, D.C.: Division of Fuel Cycle Safety and Safeguards.
- Miranda, W. R., Nascimento Jr., E. D., & Rezende, A. L. (2013). Simulação Numérica de uma Bolha de Separação em Bordo Arredondado Utilizando Equações Médias de Reynolds. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics*, Vol. 1, N. 1, p. 6,.
- MME. (2007). *Plano Nacional de Energia 2030*. Brasília: EPE.
- Moore, E., Aaberg, R., Bryan, G., Berger, L., Counts, C., Dingee, D., . . . Smith, R. (1984). *PNL-4621 - Control Technology for Radioactive Emissions to the Atmosphere at U.S. Department of Energy Facilities*. Richland, Washington: Pacific Northwest Laboratory.
- Moreira, D., & Tirabassi, T. (2004). Modelo Matemático de Dispersão de Poluentes na Atmosfera: Um Instrumento Técnico para a Gestão Ambiental. *Ambiente & Sociedade*, vol.7, no.2, p.159-172, Campinas, 2004.
- Morrow, S. A., Graves, S., & Tomlinson, L. (1961). Hydrogen Reduction of Low-Surface Area Uranium Trioxide. *U.K.A.E.A. - United Kingdom Atomic Energy Authority*, 1400 - 1409.

- MP. (2015). *Plano Plurianual 2016-2019 - Desenvolvimento, Produtividade e Inclusão social*. Brasília.
- Nair, S., Chambers, D., Park, S., Radonjic, Z., Coultis, P., Lewis, C., . . . Hoffman, F. (1997). Review of Models Used for Determining Consequences of UF<sub>6</sub> Release. NUREG/CR-6481, Volume 2,. Washington, D.C., EUA: U.S. Nuclear Regulatory Commission.
- Nair, S., Chambers, D., Radonjic, Z., & Park, S. (1998). Transport, chemistry, and thermodynamics of uranium hexafluoride in the atmosphere evaluation of models using field data. *Atmospheric Environment*, vol. 32, N° 10.
- National Institute of Standards and Technology. (outubro de 2019). NIST. Fonte: <https://www.nist.gov/>: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
- Neto, A. S., & Soares, R. F. (2014). Apostila: Turbulência dos Fluidos. *Capítulo 7: Leis de Parede*. FEMEC - Universidade Federal de Uberlândia.
- Nichols, B., & Gregory, W. (1986). *NUREG/CR-5531 - FIRAC User's Manual: A Computer Code to Simulate Fire Accidents in Nuclear Facilities*. Los Alamos, New Mexico: Los Alamos National Laboratory.
- NRC. (1986). *NUREG1189-Vol.1 - Assessment of the Public Health Impact From the Accidental Release of UFs at the Sequoyah Fuels Corporation Facility at Gore, Oklahoma*. Washington, D.C.: U.S. Nuclear Regulatory Commission.
- NRC. (1991). *NUREG-1391 - Chemical Toxicity of Uranium Hexafluoride Compared to Acute Effects of Radiation*. Washington, D.C.: U.S. Nuclear Regulatory Commission.
- NRC. (1998). *NUREG/CR-6410 - Nuclear Fuel Cycle Facility Accident Analysis Handbook*. Washington, D.C.: Applications International Corp.
- NRC. (outubro de 2007). *RASCAL 3.0.5: Description of Models and Methods (NUREG-1887)*. Fonte: nrc.gov: <https://www.nrc.gov/reading-rm/doc-collections/nuregs/staff/sr1887/#intro>
- Oliveira Neto, J. M., Nunes, B. G., & Dias, C. (2009). Analyses of Postulated Accidental Releases of UF<sub>6</sub> Inside Process Buildings. *International Nuclear Atlantic Conference*. Rio de Janeiro: INAC.
- Oliver, G. D., Milton, H., & Grisard, J. (1953). The vapor Pressure and Critical Constants of UF<sub>6</sub>. *J. Am. Chem. Soc* 75(12), 2827-2829.
- Ondrejcin, R. S. (1966). Thermal Denitration of Uranyl Nitrate Hexahydrate. *Journal of Chemical and Engineering*, vol. 11, 130 - 133.
- Ondrejcin, R. S., & Garret, T. P. (1961). The Thermal Decomposition of Anhydrous Uranyl Nitrate and Uranyl Nitrate Dihydrate. *Journal Physic Chemical*, Vol. 65, 470-473.
- ORO-651. (1987). *Uranium Hexafluoride: Handling Procedures and Container Descriptions*. Oak ridge, Rev. 5.
- Otey, M., & LeDoux, R. (1967). U<sub>3</sub>O<sub>5</sub>F<sub>8</sub> - A NEW COMPOUND IN THE U-O-F SYSTEM. *J. inorg, nucl. Chem.*, 1967, Vol. 29,, pp. 2249 - 2256.

- Owczarski, P. C., Burk, K. W., Ramsdell, J. V., & Yasuda, D. D. (1991). *NUREG/CR-5658 - FFP\_2: A Code for Following Airborne Fission Products in Generic Nuclear Power Plant Flow Paths*. BATTELLE PACIFIC NORTHWEST LAB.
- Patankar, S., & Spalding, D. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 15, n. 10, p. 1787–1806.
- Philoon, W. C., Sanders, E. F., & Trask, W. T. (1960). *The Use of a Fluidized Bed Reactor for the Continuous Production of Uranium Trioxide*. Ibid.
- Pickrell, P. (1980). *Characterization of the solid product(s) formed when UF<sub>6</sub> is released into ambient air in a contained volume (U) - K/ET-503*. Oak Ridge, Tennessee: U.S. Department of Energy.
- Pickrell, P. (1982). *Characterization of the solid, airborne materials created by the interaction of UF<sub>6</sub> with atmospheric moisture in a contained volume - K/PS-144*. Oak Ridge, Tennessee: U.S. Department of Energy.
- Pickrell, P. (1984). *Characterization of the solid, airborne materials moisture in a contained volume created by the interaction of UF<sub>6</sub> with atmospheric - K/PS-145*. Oak Ridge, Tennessee: U.S. Department of Energy.
- Pratsinis, S. E. (1998). Flame aerosol synthesis of ceramic powders. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 24, 197-219.
- Rand, M. H., & Kubaschewski, O. (1963). *The Thermochemical Properties of Uranium Compounds*. New York: John Wiley & Sons Inc.
- Reiner, R. H. (1989). *Moist Air reaction with excess UF<sub>6</sub> - K/TCD-122*. Oak Ridge, Tennessee: Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant.
- Ribas, A. G. (1973). *Tecnologia de Preparação de UO<sub>2</sub> Apropriado para Conversão a UF<sub>4</sub>. Dissertação de Mestrado*, 107 p. São Paulo: Escola Politécnica da USP - SP.
- Ricciardi, L. P.-C. (2008). Experimental and numerical study of heavy gas dispersion in a ventilated room. *J. Hazard. Mater.*, 152 (2) , 493-505.
- Rodrigues, M. K., Souza, J. A., Vaz, J., Junior, I. C., Rocha, L. A., Brum, R. S., . . . Isoldi, L. A. (2015). Numerical study of the influence of boundary conditions on the computational modeling of earth-air heat exchanger. *Scientia Plena*, 11.
- Sampling, characterization, and remote sensing of aerosols formed in the atmospheric hydrolysis of uranium hexafluoride. (s.d.).
- San Segundo, T. S., & Amor, I. (1982). Aspectos de Seguridad en El Almacenamiento de Hexafluoruro de Uranio. *Energia Nuclear*, 26, 135.
- Sant`Anna, M. S., Sarmiento, S. M., Silva, G. F., Medronho, R. A., & Lucena, S. (2015). Escolha do Modelo de Turbulência para um Leito Fluidizado. *Scientia Plena*, vol. 11.

- Sant'Anna, M. S., Sarmiento, S. M., Silva, G. F., Medronho, R. A., & Lucena, S. (2015). Escolha do modelo de turbulência para um leito fluidizado. *Scientia Plena*, Vol. 11, Num. 10.
- Santos, F. C. (2014). Elaboração de um Conjunto de Funções Críticas de Segurança para uma Unidade de Conversão de Hexafluoreto de Urânio. *Dissertação de Mestrado*, 70 p. Rio de Janeiro: COPPE - UFRJ.
- Santos, W. R., & Costa, P. A. (1990). Obtenção de UO<sub>3</sub>, por desnitração do nitrato de urânio, em leito fluidizado. *3º Congresso Geral de Energia Nuclear*, pp. 109-118.
- Schaal, G., & Faron, R. (1997). *Velizy-Villacoublay, França Patente Nº 5628048 - Process for obtaining Uranium Trioxide by Direct Thermal Denitration of Uranyl Nitrate*.
- Siman-Tov, M. (1984). *NUREG/CR-3119 - Scenarios and Analytical Methods for UF<sub>6</sub> Releases at NRCLicensed Fuel Cycle Facilities*. Washington, D.C.: U. S. Nuclear Regulatory Commission.
- Souza, J. A., Oliveira, L. R., Azevedo, J. L., Soares, I. D., & Mata, M. M. (2011). Uma revisão da turbulência e sua modelagem. *Revista Brasileira de Geofísica*, Vol 29, pp. 21-41.
- Summers, R. M. (1991). *NUREG/CR-5531 - MELCOR 1.8.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Severe Accident Source Term and Risk Assessment Analyses*. U.S. Nuclear Regulatory Commission.
- Versteeg, H., & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method, second edition, 2007*. Essex, England: Pearson.
- Wagner, G. L., Kinkead, S. A., Paffett, M. T., Rector, K. D., Scott, B. L., Tamasi, A. L., & Wilkerson, M. P. (2015). Morphologic and Chemical Characterization of Products. *Journal of Fluorine Chemistry*, 107-114. Fonte: <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2015.07.004>
- Wendel, M., Chen, N., Kim, S., Taleyarkhan, R., & Keith, K. &. (1996). *Computational fluid dynamics tracking of UF<sub>6</sub> reaction products release into a gaseous diffusion plant cell housing*. Tennessee: Oak Ridge National Lab., TN (United States).
- Wildhagen, G. R. (1993). Estudo da Decomposição Térmica do Nitrato de Urânio e Hidróxido de Cério em Secador Spray. Rio de Janeiro.
- Williams, W. R. (1986). *K/D-5695 - Computer Programs for Developing Source Terms for a UF<sub>6</sub> Dispersion Model to Simulate Postulated UF<sub>6</sub> Release from Buildings*. Oak Ridge, Tennessee: Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant.