

EXTENSÃO DOS CÓDIGOS DE TRANSPORTE ANISN E DOT 3.5  
PARA CÁLCULO DA GERAÇÃO DE CALOR VIA RADIAÇÃO E  
DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA EM REATORES NUCLEARES

L.M. Torres (IME)  
I.C. Gomes (IME)  
J.R. Maiorino (IPEN/CNEN-SP)

RESUMO

Os códigos ANISN e DOT 3.5 resolvem a equação de transporte através do método das ordenadas discretas, o primeiro em uma dimensão e o segundo em duas dimensões. O objetivo do trabalho foi modificar esses dois códigos, muito utilizados em problemas de blindagem de reatores nucleares, para incluir o cálculo da geração de calor, proveniente da deposição da energia da interação de nêutrons e gamas com a matéria.

Para a determinação da distribuição de temperatura, foi desenvolvido um algoritmo numérico utilizando o método das diferenças finitas na solução da equação de transferência de calor por condução, a uma e duas dimensões, considerando como termo de fonte o aquecimento nuclear provocado por nêutrons e gamas.

ABSTRACT

The ANISN and DOT 3.5 codes solve the transport equation using the discrete ordinate method, in one and two-dimensions, respectively. The objectives of the study were to modify these two codes, frequently used in reactor shielding problems, to include nuclear heating calculations due to the interaction of neutrons and gamma-rays with matter.

In order to determine the temperature distribution, a numerical algorithm was developed using the finite difference method to solve the heat conduction equation, in one and two-dimensions, considering the nuclear heating from neutron and gamma-rays, as the source term.

## INTRODUÇÃO

Verifica-se que o aquecimento nuclear devido à interação da radiação com os materiais pode alcançar valores significativos e deve ser calculado precisamente. Erros na estimativa do aquecimento podem causar excessivos aumentos de temperatura e de tensões térmicas que podem destruir importantes estruturas do reator. Portanto, considerações sobre as consequências desse calor e a prevenção dos possíveis danos causados pela radiação devem fazer parte do projeto de reatores nucleares.

Os códigos ANISN[1] e DOT 3.5[2] solucionam a equação de transporte através do método das ordenadas discretas, o primeiro em uma dimensão e o segundo em duas dimensões, tendo sido desenvolvidos para solucionar problemas de transporte de nêutrons e fótons.

O objetivo do trabalho foi modificar esses dois códigos para incluir o cálculo da geração de calor e distribuição de temperatura devida à deposição da energia da interação de nêutrons e gamas com a matéria.

Foram introduzidos nos códigos novos dados de entrada e sub-rotinas específicas para a determinação do aquecimento por gamas, devido ao efeito fotoelétrico, absorção Compton e produção de pares, e do aquecimento por nêutrons, devido às reações de espalhamento elástico, espalhamento inelástico na região do "continuum", reações  $(n, \alpha)$  e  $(n, p)$ .

Para a determinação da distribuição de temperatura, utilizou-se o método das diferenças finitas para se obter uma solução numérica da equação de transferência de calor por condução a uma dimensão, nas geometrias plana, cilíndrica e esférica, e em duas dimensões, nas geometrias X-Y e R-Z. Com os algoritmos desenvolvidos foram elaboradas sub-rotinas, que acopladas aos códigos ANISN e DOT 3.5, permitiram o cálculo da distribuição de temperatura considerado, como termo de fonte, o aquecimento nuclear provocado por nêutrons e gamas.

Testes e aplicações das modificações implementadas foram realizados em problemas de aquecimento e distribuição de temperatura, devidos à deposição de energia via radiação, em blindagem de reatores nucleares de fissão e fusão.

## GERAÇÃO DE CALOR VIA RADIAÇÃO

### Geração de Calor por Nêutrons

Nêutrons geram calor em materiais não físseis através de quatro interações primárias: espalhamento elástico  $(n, n)$ , reações com emissão de partículas carregadas  $(n, \alpha)$  e  $(n, p)$ , espalhamento inelástico  $(n, n')$  e captura radiativa  $(n, \gamma)$ .

O calor gerado por nêutrons em um ponto qualquer,  $H(r)$ , é dado por [3]:

$$H(r) = C \int_0^{\infty} \phi(r, E) \sum_j \sum_i N_j(r) \sigma_{ij}(E) E_{ij}(E) dE \text{ [W/cm}^3\text{]}, \quad (1)$$

onde

$C$  = fator de conversão =  $1,6 \times 10^{-13}$  [W.seg/Mev],

$\phi(r, E)dE$  = fluxo de nêutrons no ponto  $r$  com energias compreendidas entre  $E$  e  $E + dE$  [nêutrons.cm<sup>-2</sup>.seg<sup>-1</sup>],

$N_j(r)$  = densidade atômica do elemento  $j$  no ponto  $r$  [átomos/cm<sup>3</sup>],

$E_{ij}(E)$  = energia depositada por reação tipo  $i$  dos nêutrons com o elemento  $j$  [Mev],

$\sigma_{ij}(E)$  = seção de choque microscópica para a reação  $i$  com o elemento  $j$ , na energia  $E$  [cm<sup>2</sup>/átomo].

As unidades foram escolhidas entre as usualmente empregadas com os cálculos nucleares.

Definindo o termo  $K_{ij}$  como

$$K_{ij}(E) = \sigma_{ij}(E) \cdot E_{ij}(E), \quad (2)$$

fator de "Kerma" microscópico para a reação  $i$  do elemento  $j$ , através da equação (1) pode-se observar que a geração de calor pode ser calculada para qualquer material, desde que o fluxo de nêutrons e os fatores de "Kermas" sejam conhecidos.

Os códigos nucleares ANISN e DOT 3.5 solucionam a equação do transporte e como resultado fornecem o fluxo de nêutrons. Para o cálculo da geração de calor, foi necessário introduzir nos códigos o cálculo da energia depositada e dos fatores de "Kerma" para as interações primárias de interesse, para cada material constituinte do sistema. As equações usadas para o cálculo da energia depositada podem ser obtidas da conservação de energia para cada tipo de interação considerada: espalhamento elástico, espalhamento inelástico na região do "continuum", reações (n,  $\alpha$ ) e reações (n, p) [3,4,5,6].

### Geração de Calor por Gammas

Neste trabalho, a geração de calor pela radiação gama, em um ponto qualquer ( $r$ ), foi calculada pela seguinte expressão [3]:

$$H_{\gamma}(r) = C \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} N(r) K_{\gamma}(E) \phi(r, E) dE, \quad (3)$$

onde

$K_{\gamma}(E)$  = fator de "Kerma" para gammas [Mev.cm<sup>2</sup>/átomo] e os demais termos tem uma notação semelhante a da Equação (1).

Para a contribuição da deposição da energia por gammas, somente o efeito fotoelétrico, Compton e a produção de pares são considerados; outros processos são considerados desprezíveis.

O cálculo de "Kerma" para gammas é direto e usualmente realizado pelos códigos que geram seções de choque multigrupo para gammas. Neste trabalho, os "Kermas" para gammas foram obtidos do módulo SMUG,

do sistema AMPX[7], e introduzidos como dados de entrada nos programas implementados, para a determinação do aquecimento através da solução da Equação (3).

### DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA

A radiação, ao provocar a geração de calor, dá origem a uma distribuição de temperatura, a qual dependerá das condições de contorno. O calor gerado é removido por convecção, condução e por radiação. Uma vez determinada a geração de calor via radiação, pelos mecanismos discutidos no item anterior, para se determinar a distribuição de temperatura é necessário solucionar a equação de transferência de calor, ou seja:

$$\nabla[K(r) \cdot \nabla T(r)] = -H(r), \quad (4)$$

onde

$T(r)$  = temperatura no ponto  $r$ ,

$K(r)$  = condutibilidade térmica no ponto  $r$ ,

$H(r)$  = termo de fonte, considerando as contribuições dos vários processos para geração de calor via radiação, no ponto  $r$ .

A condição de contorno geral usada para a solução do problema é dada por [8]:

$$K \frac{\partial T}{\partial r} + h T = C, \quad (5)$$

onde

$K$ ,  $h$  e  $C$  são constantes que atendem aos três casos particulares de condições de contorno: temperatura especificada no contorno ( $K=0$ ), fluxo de calor especificado no contorno ( $h=0$ ) e condição de convecção ( $K, h, C \neq 0$ ).

Para solucionar a Equação (4), foi utilizado o método das diferenças finitas a uma dimensão (acoplamento ao código ANISN), com geometrias plana, cilíndrica e esférica, e a duas dimensões (acoplamento ao código DOT 3.5), nas geometrias plana (X-Y) e cilíndrica (R-Z).

O procedimento geral do método das diferenças finitas consiste em reescrever a Equação (4), numa forma de diferenças finitas e, então, solucionar o sistema resultante de equações de diferenças com um programa computacional. Uma descrição detalhada do modelo numérico desenvolvido é apresentada na referência [9].

### APLICAÇÃO DO ESTUDO

#### Problema Teste 1. Geração de Calor e Distribuição de Temperatura na Blindagem Biológica do RPR.

O aquecimento nuclear é calculado e analisado para a blindagem de concreto do reator RPR (Reator Produtor de Radioisótopos). Uma comparação é feita entre os resultados obtidos com o programa im-

plementado, ANISN-HT, e os obtidos com o programa HEAT[10], desenvolvido no IME, para o pré-dimensionamento da blindagem do reator.

O programa HEAT utiliza o método do Núcleo Puntual[6] para o cálculo do transporte da radiação e calcula a deposição de energia devida aos gamas e ao espalhamento elástico de nêutrons. O cálculo da distribuição de temperatura é feito solucionando a equação do calor por diferenças finitas.

O programa ANISN-HT utiliza o método das ordenadas discretas[6] para a solução da equação do transporte, calcula os "Kermas" para a determinação da deposição de energia e soluciona a equação de condução do calor usando o método das diferenças finitas, para a determinação da distribuição de temperatura na blindagem.

Para o cálculo, foram adotados os parâmetros do reator fixados no pré-dimensionamento[10]. As dimensões em centímetros são indicadas na Figura 1.

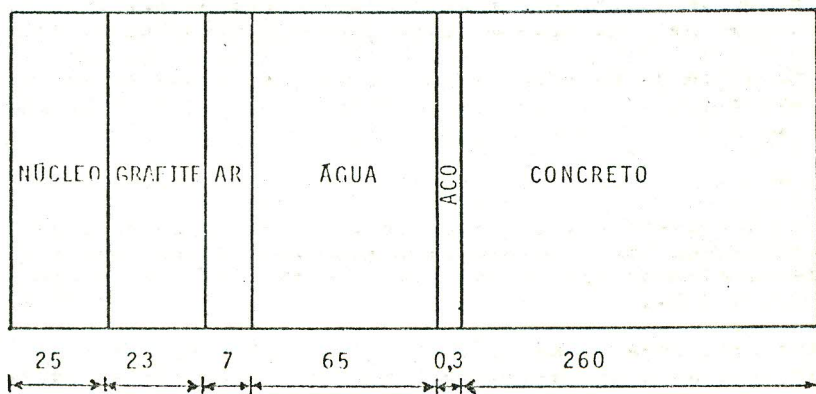


Figura 1. Esquema do Reator RPR

A Figura 2 mostra os resultados obtidos para o aquecimento nuclear devido a nêutrons e gamas na blindagem de concreto do reator. Observa-se que, apesar de ter-se considerado apenas a contribuição do aquecimento por nêutrons devido ao espalhamento elástico no programa HEAT, as curvas apresentaram boa concordância. Isto pode ser compreendido devido ao fato de que o aquecimento na camada de concreto ser fundamentalmente devido aos gamas, pois o fluxo de nêutrons é altamente atenuado nas camadas anteriores de grafite e água e, também, por ser o espalhamento elástico a interação mais importante para a geração de calor por nêutrons.

Para o cálculo da distribuição de temperatura, adotou-se como condições de contorno, nos dois programas, as temperaturas especificadas nas fronteiras, assumindo-se 35°C na parede interna e 20°C

na parede externa de concreto. Deve-se notar que o cálculo das temperaturas com o programa HEAT foi efetuado em geometria plana e com o programa ANISN-HT em geometria cilíndrica. Esse fato faz com que a forma da distribuição de temperatura seja um pouco diferente; ou seja, a temperatura decresce mais rapidamente nos cálculos com o ANISN-HT, como é verificado na Figura 3. Observa-se, também, que na face interna da camada de concreto, onde a geração de calor é mais intensa, o programa ANISN-HT forneceu valores superiores ao HEAT para o aquecimento, o que consequentemente resultou em um gradiente de temperatura maior (aproximadamente  $26^{\circ}\text{C}$ ).

#### Problema Teste 2. Cálculo do Aquecimento Nuclear no Reator EPR a Fusão.

O aquecimento nuclear é calculado e analisado nas várias regiões do reator Tokamak Experimental Power Reactor (EPR), esquematizado na Figura 4. Uma comparação é feita entre os resultados obtidos com os programas implementados, ANISN-HT e DOT 3.5-HT, e os publicados em um trabalho realizado por R.T. Santoro, V.C. Baker e J.M. Barnes [11].

No trabalho publicado, os cálculos neutrônicos foram realizados usando o código unidimensional ANISN, com geometria cilíndrica e aproximação  $S_{12} P_3$ . As seções de choque foram obtidas da biblioteca preparada para os cálculos do reator EPR, compilada a partir dos dados do ENDF-IV, numa estrutura de 121 grupos de energia. O aquecimento nuclear é estimado pelos fatores de "Kermas", para nêutrons, obtidos do programa MACK e MACKLIB [3].

Para o cálculo com o DOT 3.5-HT, foi realizada uma aproximação da modelagem do reator EPR, utilizando geometria cilíndrica com uma altura de 1 cm e condições de contorno de reflexão no topo e na base do cilindro. Com isso, foi simulado um problema unidimensional com o código DOT 3.5-HT, possibilitando uma comparação com o ANISN-HT, para verificar a consistência das aproximações realizadas, através dos resultados obtidos.

O problema no código DOT 3.5-HT foi rodado com aproximação  $S_8 P_3$  e critério de convergência  $10^{-2}$ . Para os cálculos com o ANISN-HT utilizou-se a aproximação  $S_6 P_3$  e critério de convergência  $10^{-4}$ .

Os testes foram realizados com seções de choque nas estruturas de 88 grupos, 13 grupos e 8 grupos de energia. As seções de choque em 13 grupos foram obtidas colapsando a estrutura de 88 grupos com o código ANISN, que faz um colapso espacial e na energia. A estrutura com 8 grupos foi obtida fazendo-se um colapso somente na energia, com o módulo MALOCS do sistema AMPX [7]. Os resultados obtidos são apresentados na Tabela 1, juntamente com os publicados no trabalho de Santoro.

Os resultados obtidos com o DOT 3.5-HT, com seções de choque em 8, 13 e 88 grupos, apresentaram-se próximos aos obtidos com o ANISN-HT, para as respectivas estruturas. Deve-se notar que as mesmas modificações implementadas no código ANISN foram realizadas no código DOT 3.5 e verificadas através da edição dos fatores de "Kermas" que revelaram-se iguais; as diferenças encontradas no aquecimento, portanto, são devidas ao critério de convergência adotado pa

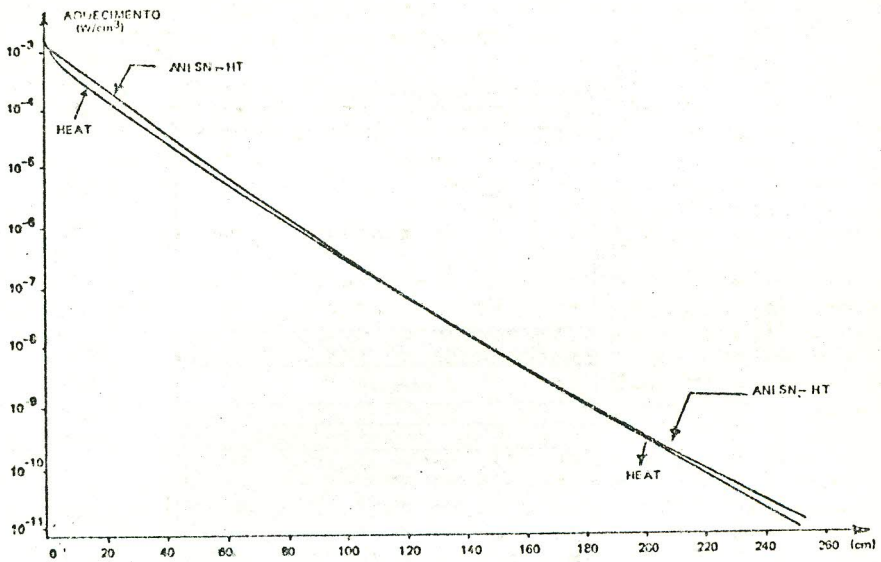


Figura 2. Aquecimento devido a Nêutrons e Gammas na Blindagem de Concreto do Reator RPR

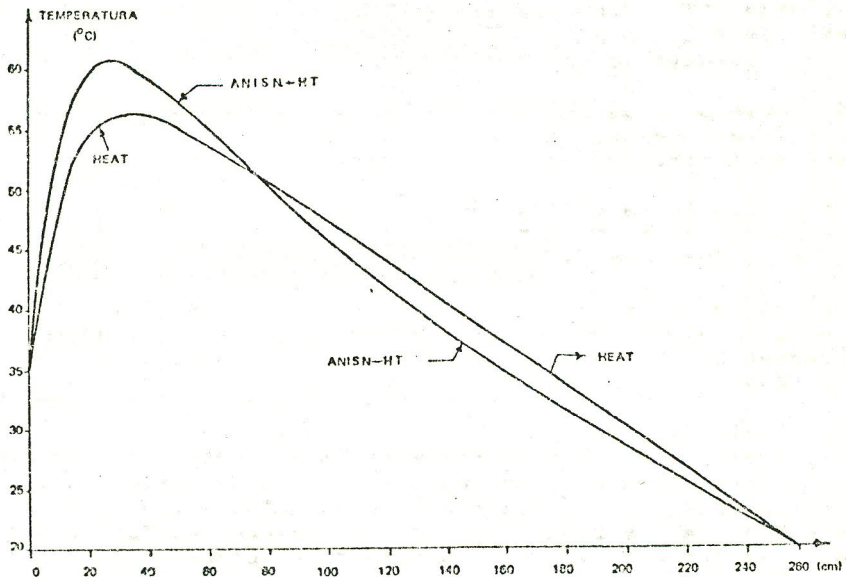


Figura 3. Distribuição de Temperatura na Blindagem de Concreto do Reator RPR

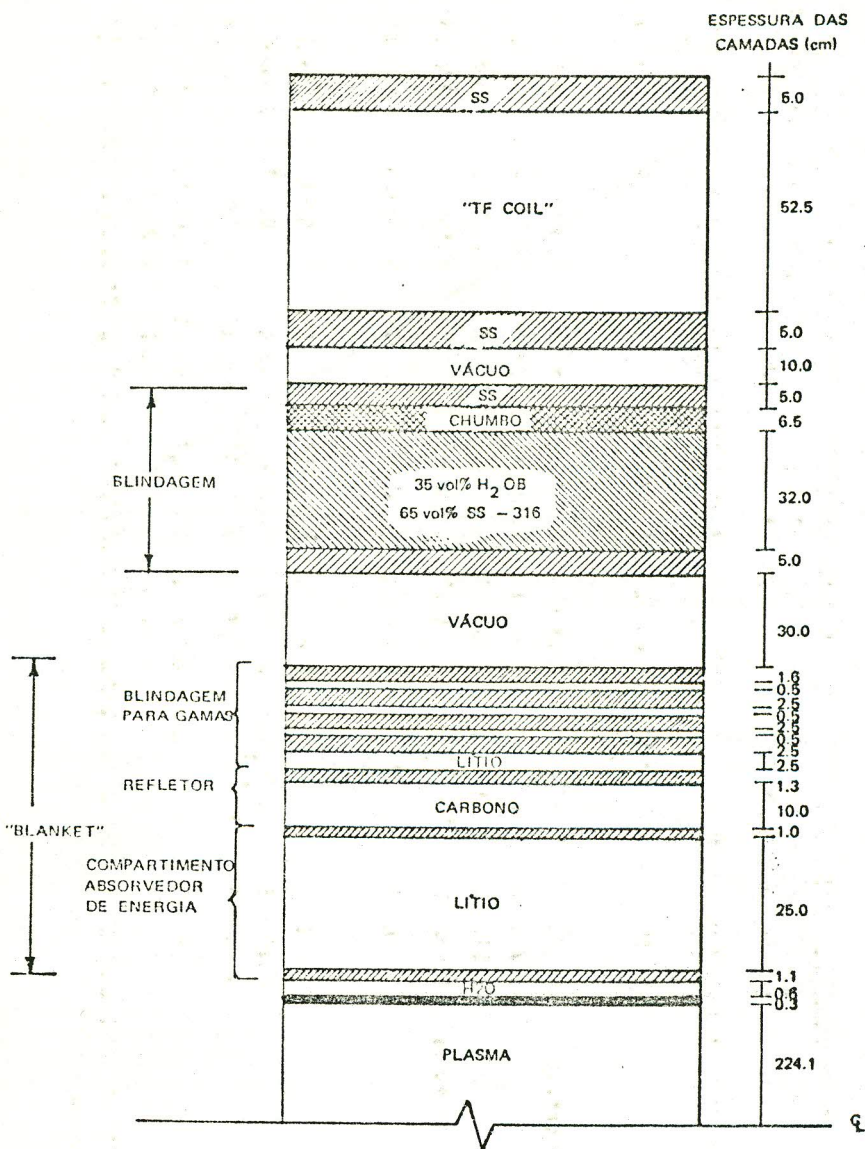


Figura 4. Esquema do Reator EPR

Tabela 1. Aquecimento por Nêutrons (em Watts/nêutrons da fonte) por Zona para o Reator Esquematizado na Figura 4.

Componentes do Reator	Resultados Publicados	ANISN-HT 88G	ANISN-HT 13G	ANISN-HT 8G	DOT 3.5-HT 88G	DOT 3.5-HT 13G	DOT 3.5-HT 8G
Grafite	1.41E-14*	2.54E-14	2.70E-14	2.46E-14	2.11E-14	2.11E-14	2.03E-14
Água	1.40E-13	1.30E-13 (7%)	1.48E-13	1.40E-14	8.74E-14	9.21E-14	1.07E-13
"Blanket"							
Aço Inox 1 <sup>a</sup> parede	9.49E-14	8.64E-14 (9%)	8.88E-14	9.11E-14	7.05E-14	7.03E-14	7.32E-14
Absorvedor	1.24E-12	1.33E-12 (7%)	1.41E-12	1.58E-12	9.30E-13	1.01E-14	1.39E-12
Refletor	1.92E-13	1.84E-13 (4%)	2.04E-13	2.85E-13	1.90E-13	1.81E-13	2.64E-13
Blindagem para gamas	1.23E-13	1.45E-13 (18%)	1.51E-13	2.03E-13	1.15E-13	8.55E-14	1.87E-13
Blindagem	3.64E-14	5.26E-14 (44%)	5.65E-14	9.74E-14	4.81E-14	4.43E-14	8.85E-14
"TF coil"							
SS-316	8.43E-18	7.31E-18 (13%)	9.41E-18	5.09E-17	1.37E-17	1.20E-17	3.9E-17
Condutor	1.20E-17	1.48E-17 (23%)	1.89E-17	8.25E-17	2.74E-17	1.29E-17	6.35E-17
SS-316	1.99E-20	1.01E-19 (2%)	2.22E-19	7.15E-19	1.68E-19	4.03E-20	6.62E-19
TOTAL	1.86E-12	1.95E-12 (5%)	2.09E-12 (12.4%)	2.42E-12 (30%)	1.46E-12 (21.5%)	1.50E-12 (19.4%)	2.13E-12 (14.5%)

\* Leia-se como  $1.41 \times 10^{-14}$

ra o cálculo dos fluxos, que foi menos rigoroso nos testes realizados com o DOT 3.5-HT, devido ao elevado tempo computacional requerido.

Verifica-se que os resultados para o problema rodado em 88 grupos e em 13 grupos apresentaram boa concordância em relação ao trabalho publicado, que utilizou 121 grupos. O mesmo não ocorreu com o problema rodado em 8 grupos, com as seções de choque colapsadas somente na energia, que apresentou maiores discrepâncias, principalmente nas regiões mais afastadas da fonte.

Outras diferenças, além da estrutura de grupos de energia, que influenciam os cálculos e que podem justificar as discrepâncias encontradas, estão nos dados nucleares usados no cálculo dos "Kermas", discretização espacial do reator e densidades atômicas dos materiais considerados.

### CONCLUSÃO

A vantagem das modificações incluídas nos códigos ANISN e DOT 3.5 foi automatizar os cálculos do aquecimento nuclear e distribuição de temperatura nas diversas estruturas de reatores nucleares. Esses cálculos são normalmente realizados em várias etapas e necessitam de bibliotecas especiais ou cálculos manuais complementares.

As modificações introduzidas no ANISN e no DOT 3.5 foram realizadas respeitando-se a estrutura de programação desses códigos, bem como os formatos de entrada de dados e saída de resultados, não tendo afetado nenhuma de suas respostas originais.

Em virtude da análise dos resultados implicar na avaliação de todo um sistema de cálculo, que inclui a variação de dados nucleares e dos critérios utilizados para o cálculo do transporte da radiação, ficam dúvidas quanto a real falha nos cálculos introduzidos. Deve-se notar que diferenças no cálculo do fluxo de nêutrons e gamas afetam, significativamente, os resultados do aquecimento nuclear.

Os testes realizados nas modificações implementadas apresentam resultados coerentes em relação aos publicados na literatura, porém são ainda necessários mais resultados para obter-se uma maior confiabilidade nos programas.

### REFERÊNCIAS

- [ 1 ] W.W. ENGLE, Jr, "A Users Manual For ANISN: A One Dimensional Discrete Ordinates Transport Code With Anisotropic Scattering", RSIC-CCC-82, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, 1967.
- [ 2 ] W.A. RHODES, F.R. MYNATT, "The DOT 3.5 Two-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code", RSIC-CCC-276, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, 1975.
- [ 3 ] M.A. ABDU e C.W. MAYNARD, "Calculational Methods for Nuclear

Heating-Part I: Theoretical and Computational Algorithms", Nucl. Sci. Eng., 56, 360-380, 1975.

- [4] J.J. RITTS, M. SOLOMITO, D. STEINER, "Kerma Factors and Secondary Gamma-Ray Sources for Some Elements of Interest in Thermonuclear Blanket Assemblies", ORNL-TM-2564, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, 1970.
- [5] P.N. STEVENS, M. SOLOMITO, J.J. RITTS, "Calculation of Neutron Fluence-to-Kerma Factors for the Human Body", Nucl. Appl. Technol., 7, 89-99, 1967.
- [6] R.G. JAEGER (Ed. in Chief), Engineering Compendium on Radiation Shielding, Vol I, Springer-Verlag, Berlin, 1968.
- [7] N.M. GREENE, W.E. FORD, et al., "AMPX II: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron-Gamma-Ray Cross Section Libraries from Data in ENDF Format", ORNL-TM-3706, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, 1976.
- [8] M.N. ÖZISIK, Boundary Value Problems of Heat Conduction, International Textbook Company, Scranton, Pennsylvania, 1968.
- [9] L.M. TORRES, I.C. GOMES, J.R. MAIORINO, "Distribuição de Temperatura Devida à Geração de Calor em Blindagem de Reatores Nucleares", Dissertação de Mestrado, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 1985.
- [10] I.C. GOMES, G. PAGANO, "Pré-Dimensionamento da Blindagem do Reator Produtor de Radioisótopos", Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 1983.
- [11] R.T. SANTORO, V.C. BAKER, J.M. BARNES, "Neutronics and Photonics Calculations for the Tokamak Experimental Power Reactor", ORNL-TM-5466, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, 1977.