

ANÁLISE DE CRITICALIDADE UTILIZANDO O CÓDIGO MCNP4A

Alfredo Y. Abe* e Adimir dos Santos**

*Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo, CTMSP
Caixa Postal 68 550
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 - Cidade Universitária
21945-970, São Paulo, Brasil
e-mail: ayabe@net.ipen.br

**Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN/CNEN-SP
Caixa Postal 11049
Travessa R-400, Cidade Universitária
05422-970, São Paulo, Brasil
e-mail: asantos@net.ipen.br

RESUMO

O código MCNP4A foi avaliado para problemas típicos de análise de criticalidade, juntamente com as biblioteca de seções de choque padrão, seções de choque com dados provenientes da biblioteca básica ENDF/B-V e ENDF/B-VI.

I. INTRODUÇÃO

A análise de segurança quanto à criticalidade nuclear é pertinente a todas as atividades do ciclo do combustível nuclear, nas quais são manipuladas suficientes quantidades de materiais físeis (urânio, plutônio). Estas atividades envolvem, por exemplo, as plantas de processamento químico e de enriquecimento de urânio, o transporte e estocagem de materiais contendo nuclídeo físsil, as etapas de fabricação de elementos combustíveis para reatores nucleares e o reprocessamento do combustível nuclear irradiado. As análises em questão sempre foram efetuadas pela Divisão de Física de Reatores do *CTMSP* e *IPEN/CNEN* utilizando-se os códigos *GAMTEC-II* /1/ e *KENO-IV* /2/. O código *GAMTEC-II* é utilizado para o cálculo celular, pesquisa da razão de moderação ótima e preparação das seções de choque no formato Hansen-Roach para posterior utilização pelo código *KENO-IV*. O código *KENO-IV* baseado no método de Monte Carlo é utilizado para a determinação do fator de multiplicação de nêutrons do sistema.

Recentemente o *CTMSP* e *IPEN* adquiriram oficialmente o código *MCNP4A* /3/ junto ao RSIC (Radiation Shielding Information Center). O *MCNP4A* é um código baseado no método de Monte Carlo de propósito geral, atualmente é utilizado em várias aplicações desde a física médica até projeto de reatores nucleares.

O objetivo do trabalho é avaliar o código *MCNP4A* para problemas típicos encontrados em análise de criticalidade tais como: sistema rápidos, moderados,

soluções e misturas aquosas com materiais físeis e arranjos geométricos de recipientes contendo materiais físeis. Além disso, é avaliada a qualidade das bibliotecas de seções de choque disponíveis atualmente para o código.

II. ANÁLISE DE CRITICALIDADE

Análise de segurança quanto à criticalidade nuclear de uma determinada instalação, equipamento ou recipiente na qual são manipulados materiais físeis (U-233, U-235 e Pu-239) consiste num conjunto de avaliações embasados em critérios e normas de segurança /4,5/, bem como em cálculos neutrônicos, visando garantir que a instalação e equipamentos em questão não apresente a possibilidade de sofrer um acidente de criticalidade nuclear, isto é, que a instalação e equipamentos mantenham-se subcríticos em qualquer circunstância de operação normal ou não. A análise basicamente compreende em quantificar o fator de multiplicação de nêutrons de um dado sistema, observando parâmetros como a geometria, composição, arranjo e disposição, bem como a sua interação e o processo.

Normalmente a análise é efetuada com códigos de Monte Carlo como *KENO-IV* onde apresenta uma grande flexibilidade na modelagem geométrica através da utilização de estruturas geométricas pré-definidas como cilindros, sólidos retangulares, esferas, etc. Neste sentido, o código *MCNP4A* apresenta uma grande vantagem na utilização em problemas envolvendo cálculos de criticalidade pois, possui mais de 20 tipos de superfícies geométricas pré-definida,

possibilidade de modelagem de estruturas repetitivas de forma simples e precisa.

III. CÓDIGO MCNP4A

Originalmente o código MCNP foi desenvolvido pelo laboratório de Los Alamos (LANL X-Division) e atualmente conta com inúmeros colaboradores de vários laboratórios de todo o mundo e é distribuído internacionalmente pelo RSIC e NEA-DATA BANK. O MCNP é um código de propósito geral baseado no método de Monte Carlo utilizado para simulação estocástica e transporte de partículas como neutrons, fótons, elétrons, ou para estas partículas de forma acoplada, incluindo a possibilidade de cálculos de auto-valor para sistemas críticos. O código permite modelar de forma geral qualquer sistema geométrico tri-dimensional, possuindo recursos para visualização da modelagem. Em termos de cálculos, o código utiliza uma biblioteca de seções de choque na forma contínua, discreta ou multigrupo, possui inúmeras técnicas de redução de variância e permite a obtenção de vários tipos de resultados através dos estimadores. O código é utilizado em inúmeras aplicações como blindagem, projeto de detectores, aceleradores, radioterapia (BNCT, PET e oncologia), projeto de reatores, análise de criticalidade, etc.

Atualmente, o MCNP4A é a mais nova versão do código (liberado em outubro de 1993). A atual versão caracteriza-se pela ênfase na garantia da qualidade e documentação, assim atende os requisitos exigidos da garantia da qualidade (IEE e ISO-9000). O código é disponível em vários tipos de plataforma computacional e diferentes sistemas operacionais tais como: MS-DOS para ambiente PC, UNIX (HP, SUN, IBM-RISC, DEC, etc), VMS (DEC), UNICOS (Cray), etc. Além disso, possui inúmeras melhorias do ponto de vista computacional em relação às versões anteriores tais como: apresentação gráfica da modelagem, suporte para processamento em paralelo através de PVM (Parallel Virtual Machine), alocação dinâmica de memória. Do ponto de vista de cálculo apresenta várias melhorias como a utilização dos dados da biblioteca ENDF/B-VI, testes estatísticos dos estimadores, e inúmeras melhorias nas opções de técnicas de redução de variância.

IV. BIBLIOTECA DE SEÇÕES DE CHOQUE

O código MCNP4A possui uma biblioteca padrão baseada principalmente nos dados básicos originários da biblioteca ENDF/B-IV /6/, apesar do manual do usuário trazer uma extensa lista de núclídeos com dados provenientes da biblioteca básica ENDF/B-V (DLC-105C/MCNPDAT), este deve ser requisitado separadamente do pacote do código, assim como a biblioteca de seções de choque baseado na ENDF/B-VI (DLC-181/MCNPDAT6). Além dos dados baseados na biblioteca ENDF/B-IV, o código possui dados provenientes de várias fontes como: ENDL-79, -80, -85 /7/ (Evaluated Nuclear Data Library), AWRE /8/ (Atomic Weapons Research Establishment) e

casos especiais elaborados pelo LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory).

A biblioteca de seções de choque do código contém dados na forma pontual (energia contínua), discreta (pseudo-multigrupo) e multigrupo. A biblioteca contém dados de mais de 100 núclídeos em várias temperaturas e diferentes tipos de reações, sendo que basicamente os dados são relativos à interação de nêutrons, fótons, elétrons e as leis de espalhamento $S(\alpha, \beta)$ para algumas moléculas ligadas. A versão atual do código permite a utilização dos novos dados de espalhamento (Formalismo Kalbach 87) da biblioteca básica ENDF/B-VI.

O código possui também utilitários para manutenção, elaboração e customização das bibliotecas de seções de choque, conforme a disponibilidade computacional e necessidade do usuário, possibilitando desta forma uma grande flexibilidade. Neste trabalho será inicialmente verificado a qualidade dos dados da biblioteca padrão proveniente junto com o pacote, os dados da biblioteca básica ENDF/B-V e ENDF/B-VI que foram requisitados separadamente.

V. PROBLEMAS PADRÕES

A verificação da aplicabilidade do código MCNP4A, bem como a qualidade dos dados constante nas bibliotecas de seção de choque padrão, ENDF/B-V e ENDF/B-VI, foi efetuada através de problemas padrões típicos encontrados na literatura para cálculo de criticalidade. Desta forma, escolheu-se oito tipos de problemas cobrindo um intervalo bastante típico encontrados nos cálculos de análise de criticalidade.

Segue abaixo uma descrição sucinta dos problemas padrões calculados neste trabalho:

Problema 1 - Jezebel /9/, esfera "nua" de plutônio metálico (95,5% de Pu-239), revestida com uma fina camada de níquel.

TABELA 1. Dados relativos ao *Problema 1*

Parâmetros	Valores
Raio de plutônio	6,38493 cm
Espessura de níquel	0,0127 cm
N-Pu239	3,7047E-02 at./b-cm
N-Pu240	1,7510E-03 at./b-cm
N-Pu241	1,1700E-04 at./b-cm
N-Gálio	1,3750E-02 at./b-cm
N-Níquel	9,1322E-02 at./b-cm

Problema 2 - Cilindro de plutônio (100% de Pu-239) metálico "nu" /10/.

TABELA 2. Dados relativos ao *Problema 2*

Parâmetros	Valores
Raio do cilindro	4,935 cm
Altura do cilindro	17,273 cm
Densidade do plutônio	15,8 g/cm ³

Problema 3 - Cilindro de plutônio (100% de Pu-239) metálico radialmente refletido com urânio natural /10/.

TABELA 3. Dados relativos ao *Problema 3*

Parâmetros	Valores
Raio do cilindro	4,935 cm
Altura do cilindro	6,909 cm
Espessura radial do refletor	5,00 cm
Altura do refletor	6,909 cm
Densidade do plutônio	18,8 g/cm ³

Problema 4 - Cilindro de plutônio (100% de Pu-239) metálico completamente refletido com urânio natural /10/.

TABELA 4. Dados relativos ao *Problema 4*

Parâmetros	Valores
Raio do cilindro	4,935 cm
Altura do cilindro	6,909 cm
Espessura radial do refletor	5,00 cm
Espessura axial do refletor	5,00 cm
Densidade do plutônio	18,8 g/cm ³

Problema 5 - Tanque cilíndrico de alumínio contendo uma solução de U(4,89%)O₂F₂, não refletido /11/.

TABELA 5. Dados relativos ao *Problema 5*

Parâmetros	Valores
Raio da solução	20,12 cm
Altura da solução	100,0 cm
Espessura da parede tanque	0,1587 cm
Raio interno do tanque	20,12 cm
Altura do tanque	110,00 cm
Material do tanque	Alumínio ($\rho=2,70 \text{ g/cm}^3$)
N-U235	1,0889E-04 at./b-cm
N-U238	2,0909E-03 at./b-cm
N-Flúor	4,3996E-03 at./b-cm
N-Oxigênio	5,7058E-02 at./b-cm
N-Hidrogênio	3,2929E-02 at./b-cm

Problema 6 - Arranjo de dois tanques cilíndricos idênticos de alumínio contendo uma solução de U(93,4%)O₂F₂, com distância centro a centro de 17,00 cm, refletido lateralmente por 10,00 cm de água num dos lados e 20,00 cm nos demais lados dos tanques /11/.

TABELA 6. Dados relativos ao *Problema 6*

Parâmetros	Valores
Raio da solução	6,35 cm
Altura da solução	70,20 cm
Espessura da parede tanque	0,150 cm
Raio interno do tanque	6,35 cm
Altura do tanque	80,00 cm
Material do tanque	Alumínio ($\rho=2,70 \text{ g/cm}^3$)
N-U235	1,1760E-03 at./b-cm
N-U238	8,2051E-05 at./b-cm
N-Flúor	2,5161E-03 at./b-cm
N-Oxigênio	3,2621E-02 at./b-cm
N-Hidrogênio	6,2210E-02 at./b-cm

Problema 7 - Arranjo quadrado de 3x2 tanques cilíndricos idênticos de aço inox contendo uma solução de nitrato de plutônio, não refletido /10/.

TABELA 7. Dados relativos ao *Problema 7*

Parâmetros	Valores
Raio da solução	12,49 cm
Altura da solução	39,24 cm
Espessura lateral do tanque	0,30 cm
Espessura do topo do tanque	1,0 cm
Espessura da base do tanque	1,0 cm
Raio interno do tanque	12,49 cm
Altura do tanque	101,70 cm
Distância centro a centro	35,58 cm
Material do tanque	aço-inox
N-Pu239 (solução)	2,7682E-04 at./b-cm
N-Pu240 (solução)	1,2214E-05 at./b-cm
N-Pu241 (solução)	8,3390E-07 at./b-cm
N-Pu242 (solução)	4,5800E-08 at./b-cm
N-Hidrogênio (solução)	6,0070E-02 at./b-cm
N-Oxigênio (solução)	3,6540E-02 at./b-cm
N-Nitrogênio (solução)	2,3699E-02 at./b-cm
N-Ferro (aço inox)	6,3310E-02 at./b-cm
N-Cromo (aço inox)	1,6540E-02 at./b-cm
N-Níquel (aço inox)	6,5100E-02 at./b-cm

Problema 8 - Arranjo quadrado tridimensional de 3x2x2 tanques cilíndricos idênticos de aço inox contendo uma solução de nitrato de plutônio, não refletido /10/. O espaçamento axial entre os cilindros é de 10,00 cm, demais dados do problema são idênticos aos do *Problema 7*.

VI. RESULTADOS OBTIDOS

Antes da execução dos problemas, elaborou-se duas bibliotecas de seções de choque customizada através das bibliotecas MCNPDAT (ENDF/B-V) e MCNPDAT6 (ENDF/B-VI), contendo apenas dados relativos aos nuclídeos presentes nos problemas, e a biblioteca padrão foi utilizada na sua forma integral.

Os problemas apresentados (Tab. 1-7) na seção anterior foram avaliados da seguinte forma:

- inicialmente utilizando a biblioteca de seção de choque padrão pertencente ao pacote do MCNP4A,
- utilizando a biblioteca ENDF/B-V com os dados recomendados como sendo o melhor disponível, conforme o manual do código e;
- finalmente utilizando os dados da biblioteca ENDF/B-VI.

Cabe ressaltar para os casos envolvendo a biblioteca padrão utilizou-se os dados na forma discreta para os seguintes nuclídeos: U-238, U-235, Pu-239, devido à ausência de dados destes na forma contínua. Além disso, para os resultados dos problemas 7 e 8 com a biblioteca padrão não foi considerado o isótopo 242 do plutônio, devido à ausência de dados deste isótopo. Nos problemas refletidos e moderados com água considerou-se o tratamento $S(\alpha, \beta)$ para a molécula de água.

Os dados dos nuclídeos da biblioteca ENDF/B-VI são todos da versão 2 (release 2.), com exceção dos nuclídeos da liga de aço-inox (release 1.).

Em termos de cálculos para obtenção dos autovalores, foi utilizada a opção de cálculo de criticalidade (KCODE) com 1000 nêutrons para 115 ciclos, perfazendo num total de 115000 histórias.

Todos os problemas foram executados numa estação de trabalho SUN-SPARC modelo 10.

As Tabelas (8-13) ilustram os valores dos fatores de multiplicação efetiva obtidos utilizando as bibliotecas padrão, ENDF/B-V e ENDF/B-VI.

TABELA 8. Resultados para o *Problema 1*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	1,00294 \pm 0,00092
ENDF/B-V	0,99921 \pm 0,00091
ENDF/B-VI	0,99910 \pm 0,00096

TABELA 9. Resultados para o *Problema 2*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	1,01743 \pm 0,00104
ENDF/B-V	1,01479 \pm 0,00095
ENDF/B-VI	1,01412 \pm 0,00105

TABELA 10. Resultados para o *Problema 3*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	0,88341 \pm 0,00093
ENDF/B-V	0,88650 \pm 0,00087
ENDF/B-VI	0,88516 \pm 0,00095

TABELA 9. Resultados para o *Problema 4*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	1,024020 \pm 0,00109
ENDF/B-V	1,027710 \pm 0,00105
ENDF/B-VI	1,027190 \pm 0,00104

TABELA 10. Resultados para o *Problema 5*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	0,82912 \pm 0,00126
ENDF/B-V	1,00551 \pm 0,00122
ENDF/B-VI	0,99402 \pm 0,00118

TABELA 11. Resultados para o *Problema 6*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	1,00790 \pm 0,00265
ENDF/B-V	1,01167 \pm 0,00291
ENDF/B-VI	1,01068 \pm 0,00327

TABELA 12. Resultados para o *Problema 7*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	0,95184 \pm 0,00297
ENDF/B-V	0,99086 \pm 0,00287
ENDF/B-VI	0,98303 \pm 0,00299

TABELA 13. Resultados para o *Problema 8*.

Biblioteca	Fator de multiplicação de nêutrons $K_{eff} \pm \sigma$
Padrão	0,95748 \pm 0,00268
ENDF/B-V	1,00040 \pm 0,00334
ENDF/B-VI	0,99394 \pm 0,00285

Com relação os resultados obtidos para os sistemas rápidos, *Problema 1* (Jezebel) e *Problema-2*, observa-se uma boa concordância nos valores obtidos para as bibliotecas ENDF/B-V e ENDF/VI, os resultados da biblioteca padrão tendem a superestimar (aproximadamente 0.4%), o autovalor porém, os dados do nuclídeo Pu-239 da biblioteca padrão mostra-se adequado.

Os resultados para sistemas refletidos com urânio natural, *Problema 3* e *Problema 4*, com as bibliotecas

ENDF/B-V e ENDF/B-VI concordam melhor entre si do que os resultados obtidos via biblioteca padrão. Observando-se igual tendência nos resultados dos autovalores em relação ao *Problema 1*.

Para o sistema contendo a solução de UO_2F_2 com baixo enriquecimento, *Problema 5*, observa-se uma discrepância maior entre os resultados, a maior diferença é observada para resultado da biblioteca padrão, e a diferença entre as bibliotecas ENDF/B-V e ENDF/B-VI é de aproximadamente 1,1%. No caso da solução de UO_2F_2 com enriquecimento maior, *Problema 6*, a diferença entre os resultados com a biblioteca padrão e as demais (ENDF/B-V e ENDF/B-VI) tendem a diminuir, evidenciando que a diferença entre eles reside no enriquecimento, conseqüentemente na autoblindagem dos núclídeos actíneos. Com relação os resultados entre as bibliotecas ENDF/B-V e ENDF/B-VI observa-se que para o sistema com maior enriquecimento o nível de concordância é maior, observando-se uma tendência sistemática.

Para os sistemas contendo solução de nitrato de plutônio, *Problema 7* e *Problema 8*, observa-se uma discrepância significativa (em média 3,5%) nos resultados obtidos com a biblioteca padrão em relação a demais bibliotecas. Além disso, a tendência nos resultados entre as bibliotecas ENDF/B-V e ENDF/B-VI é mantida.

Concluindo, de forma geral o código MCNP4A, mostrou-se bastante flexível e adequado para resolução de problemas típicos de criticalidade, principalmente para sistema complexos ou arranjos repetitivos. Além disso, os tempos computacionais foram aceitáveis, nos casos maiores exigiu-se aproximadamente 20 minutos de tempo computacional.

Quanto as bibliotecas de seções de choque, observa-se que a biblioteca padrão é aceitável para a utilização em problemas de análise de criticalidade, com ressalva nos casos onde as autoblindagens devem ser consideradas, uma vez que os dados disponíveis dos principais núclídeos actíneos encontram-se apenas na forma discreta (pseudo-multigrupo). As bibliotecas ENDF/B-V e ENDF/B-VI apresentaram uma grande concordância e coerência nos resultados entre eles. Desta forma, a fim de avaliar e quantificar mais profundamente as diferenças entre as bibliotecas (ENDF/B-V e ENDF/B-VI) sugere-se como trabalhos futuros avaliar outros tipos de problemas padrões mais elaborados, principalmente em problemas envolvendo taxa de reações de núclídeos específicos e outros tipos de "benchmarks" relacionados à blindagem, etc.

REFERÊNCIAS

- [1] Carter, L. L., at alli; "GAMTEC-II: A Code for Generating Consistent Multigroup Constants Utilized in Diffusion and Transport Theory Calculations", Pacific Northwest Laboratory report BNWL-35, March 1965.
- [2] Petrie, L. M.; "KENO-IV: An Improved Monte Carlo Program", Oak Ridge National Laboratory report ORNL-4938, 1975.
- [3] Briesmeister, J.F., "MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4A", Los Alamos National Report LA-12625, 1993.
- [4] Handbook on Criticality (Vols. I, II e III); Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS) MBH, Forschungsgelände, 8046 Garching 1980.
- [5] Norma Técnica CNEN-5.1, Transporte de Materiais Radiativos.
- [6] Garber, D., "ENDF/B-IV", National Nuclear Data Center Report BNL-17541 (ENDF-201), Brookhaven National Laboratory, Upton, N.Y, October 1975.
- [7] Howerton, R. J., Cullen, D. E., Haight, R.C., MacGregor, M.H., Perkins, S.T., and Plechaty, E.F., "The LLL Evaluated Nuclear Data Library (ENDL): Evaluation Techniques, Reaction Index, and Descriptions of Individual Reactions", Lawrence Livermore National Laboratory report UCRL-50400, Vol. 15, Part A, September 1975.
- [8] Parker, K., "The Format and Conventions of the U.K.A.E.A. Nuclear Data Library", Atomic Weapons Research Establishment report AWRE 0-70/63, 1963.
- [9] Paxton, H.C., "Los Alamos Critical Data", Los Alamos National Laboratory report LA-3067-MS, Rev., 1975.
- [10] Briesmeister, J. F., Forster, A. R., "Criticality Calculations with MCNP - A Primer", Los Alamos National Laboratory report LA-12827-M, 1994.
- [11] Fox, J.K., Gilley, L.W., and Rohrer, E. R., "Critical Mass Studies, Part VIII. Aqueous Solutions of U233", Oak Ridge National Laboratory report ORNL-2413, 1959.

ABSTRACT

The performance of MCNP4A Monte Carlo code has been evaluated with typical criticality benchmarks, in addition the quality of cross sections of the standard cross sections library, cross sections library based on ENDF/B-V data and most recent ENDF/B-VI nuclear data file has been accessed and compared.