

Actualización del modelo MCNP del contenedor Howitzer de la Universidad Politécnica de Madrid

Roberto García-Baonza¹, Eduardo Gallego¹, Gonzalo F. García-Fernandez¹, Alfredo Lorente¹, Oscar Cabellos¹

¹Departamento de Ingeniería Energética, ETSI Industriales, Universidad Politécnica de Madrid (UPM), C. José Gutiérrez Abascal 2, 28006, Madrid, España

Teléfono: (+34) 910677123

E-mail: roberto.gabaonza@upm.es

Resumen – La actualización y mejora continua en la dosimetría de neutrones y benchmarking es una de las actividades desarrolladas en el Laboratorio de Medidas Neutrónicas de la Universidad Politécnica de Madrid. En este laboratorio se emplea un contenedor Howitzer para alojar las fuentes de neutrones de ²⁴¹Am/⁹Be empleadas en dicho laboratorio para activación de materiales o para verificación y calibración de instrumentación nuclear.

Este trabajo muestra los resultados obtenidos con la actualización realizada del modelo MCNP de dicho contenedor Howitzer, a partir del antiguo input, realizado con el código MCNPX 2.4. Se ha utilizado el código MCNP6.1 comparándose los resultados obtenidos con dos librerías de datos nucleares diferentes, ENDF/B VII.1 y JEFF-3.3. Los resultados obtenidos computacionalmente acerca del flujo térmico en el canal radial del contenedor han sido comparados con resultados experimentales, obtenidos con un detector de BF3 NC201, y con los obtenidos anteriormente con MCNPX 2.4. El nuevo modelo de simulación mediante MCNP6.1 ha permitido reducir el valor de las discrepancias anteriormente existentes entre resultados experimentales y computacionales, reduciendo significativamente el error relativo máximo cometido por el anterior modelo con respecto a los resultados experimentales.

1. INTRODUCCIÓN.

El Laboratorio de Medidas Neutrónicas de la Universidad Politécnica de Madrid (LMN-UPM) cuenta en sus instalaciones con una fuente de neutrones de ²⁴¹Am/⁹Be, empleada tanto para calibración y verificación de instrumentación nuclear (Vega-Carrillo et al., 2014; Guzmán-García et al., 2017; García-Fernández et al., 2019), como para caracterización de materiales de blindaje (Gallego et al., 2010; Gallego et al., 2011) o para activación de materiales mediante flujos neutrónicos térmicos, pudiéndose irradiar los equipos y materiales deseados tanto en la bancada de irradiación del laboratorio (Vega-Carrillo et al., 2012) como en su fuente ampliada de neutrones térmicos (FANT) (Cevallos-Robalino et al., 2020a; Cevallos-Robalino et al., 2020b). Además, mediante el empleo de diferentes cilindros de polietileno, en la bancada de irradiación del laboratorio se pueden obtener diferentes espectros neutrónicos (Cevallos-Robalino et al., 2019).

A fin de asegurarse la protección radiológica de todo aquel personal que entra en este laboratorio, cuando no se están realizando irradiaciones, la fuente de neutrones es alojada en un contenedor tipo *Howitzer*. Aparte de emplearse para el confinamiento de las fuentes de ²⁴¹Am/⁹Be, este contenedor también ha sido empleado para probar monitores de irradiación bajo flujos neutrónicos térmicos (Martin-Martin et al., 2009), o más recientemente para el estudio mediante métodos de Monte Carlo de la dosis de neutrones y gammas mediante el empleo de diferentes maniquíes numéricos (Barros et al., 2020), siendo bien conocido el espectro neutrónico existente alrededor del contenedor (Barros et al., 2013).



En este trabajo se presenta la actualización del modelo MCNP del *Howitzer* del LMN-UPM, empleándose un antiguo modelo, desarrollado para el código MCNPX 2.4 (Herrero Carrascosa, 2007), como base para simularse los nuevos casos en el código MCNP6.1, empleándose para estas simulaciones las librerías de datos nucleares ENDF/B VII.1 y JEFF-3.3. Por tanto, el objetivo del presente trabajo no ha sido solamente el de actualizar los resultados computacionales relacionados con el flujo térmico en el canal radial de irradiación del contenedor, reduciendo el error entre resultados computacionales y experimentales, sino que además también se han comparado dos librerías de datos nucleares de extensa aplicación a fin de determinarse posibles diferencias entre ellas en cuanto a los resultados obtenidos.

2. MATERIALES Y MÉTODOS.

El contenedor Howitzer del LMN-UPM es un contenedor cilíndrico de aluminio, con un diámetro de 57 cm y una altura de 86 cm. Este contenedor está interiormente relleno de parafina, material moderador neutrónico del contenedor, y contiene en su interior un canal cilíndrico axial que permite en su interior el desplazamiento de la fuente de radiación desde su posición de reposo/almacenamiento hasta su posición central de irradiación, a través de los dos canales radiales de irradiación del contenedor. Además, la existencia de este canal cilíndrico axial es la que permite la extracción de la fuente de radiación hacia la bancada de irradiación del laboratorio o hacia la fuente ampliada de neutrones térmicos.

Los canales radiales de irradiación del contenedor han sido empleados no solamente para la determinación del flujo neutrónico y la dosis en los mismos, sino también para espectrometría con esferas de Bonner, en la cual una esfera Bonner es alineada frente a uno de estos canales. Aunque en este contenedor solo se encuentren dispuestos dos canales de irradiación, es común encontrar contenedores con 4 canales radiales de irradiación (Ali et al., 2015).

Los resultados experimentales empleados en este trabajo son los obtenidos y mostrados, para 12 distancias diferentes del detector a la pared del tubo del contenedor, en (Herrero Carrascosa, 2007) a través del empleo de un detector miniatura modelo NC201 de BF₃ fabricado por la *Nuclear Chicago Corporation*. Este detector de BF₃, enriquecido al 96% en ¹⁰B y con una presión del gas de 700 mmHg, se empleó a fin de determinar el flujo térmico en el contenedor, sabiéndose que como consecuencia de la evolución de la sección eficaz de la reacción ¹⁰B(n,α)⁶Li la mayor parte del flujo detectado sería flujo térmico. En otros estudios similares se han empleado contadores proporcionales de ³He o láminas de oro para caracterizar flujos neutrónicos en contenedores similares (Osman et al., 2014), técnicas similares y alternativas al empleo de detectores de BF₃.

El código MCNP6.1 (Pelowitz et al., 2014) ha sido empleado para actualizar los resultados computacionales previamente calculados en (Herrero Carrascosa, 2007) mediante MCNPX 2.4. Así pues, el mismo modelo geométrico de cálculo empleado en (Herrero Carrascosa, 2007) ha sido utilizado en este trabajo, si bien en este caso las librerías de datos nucleares para la definición de los materiales no se han dejado las librerías por defecto del código MCNP, sino que se han empleado para todos los materiales las librerías ENDF/B VII.1 (Chadwick et al., 2011) y JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020), comparándose los resultados obtenidos con cada una de estas librerías.

La aplicación de un suficiente número de historias en las simulaciones ha permitido asegurar siempre un valor del error relativo, en todas las simulaciones, menor del 1.6%, asegurándose siempre por tanto que todas las simulaciones pasaban de forma satisfactoria las 10 comprobaciones estadísticas realizadas por el código MCNP (the ten statistical checks for the tallly fluctuation chart bin result).



Los procesos de *scattering* térmico han sido tenidos en cuenta en todos los materiales correspondientes (hierro, aluminio y polímeros), aplicándose las librerías de *scattering* térmico $S(\alpha,\beta)$ (TSLs). En este sentido, es importante destacar que ante la falta de TSLs para los polímeros involucrados en las simulaciones (polimetilmetacrilato y parafina), la TSL del polietileno ha sido empleada para la definición de las matrices de dispersión térmica de estos dos materiales, simplificación que puede tener su efecto en la alteración del flujo térmico en el canal radial (la parafina es el principal material moderador del contenedor). Adicionalmente, y ante la falta de TSLs para el hierro y el aluminio en la JEFF-3.3, las matrices de dispersión térmica de estos materiales solamente han sido tenidas en cuenta en los cálculos con la ENDF/B VII.1, si bien para tenerse en cuenta la posible alteración de la falta de estas TSLs también han sido realizadas simulaciones con la ENDF/B VII.1 sin tenerse en cuenta estas dos TSLs.

El flujo térmico calculado mediante MCNP6.1, para su comparación con el flujo medido con el detector de BF₃, ha sido dividido en varios rangos de energía a fin tenerse únicamente en cuenta el flujo con una energía menor de 4 eV. A pesar de que el flujo medido experimentalmente incluye todo el espectro, este flujo medido es mayoritariamente térmico, debido a la evolución de la sección eficaz del ¹⁰B, y por tanto a la sensibilidad de detección de neutrones del detector NC201.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

La evolución del flujo térmico (E<4eV) en el canal radial de irradiación del contenedor *Howitzer* del LMN-UPM ha sido calculado mediante MCNP6.1 con el empleo de dos librerías diferentes de datos nucleares. Los datos obtenidos en el presente trabajo, comparados con los resultados experimentales y computacionales expresados en (Herrero Carrascosa, 2007), son mostrados en la Figura 1. En esta figura, se puede observar cómo, excepto para los dos primeros valores obtenidos en la primera medida experimental, los resultados computacionales obtenidos mediante MCNP6.1, independientemente de la librería empleada, son mucho más precisos que los obtenidos anteriormente a esta actualización mediante MCNPX 2.4.

Adicionalmente, en esta Figura 1 es también posible apreciar como el flujo térmico evoluciona con la distancia a la pared del tubo que contiene la fuente de forma negativa según una ecuación cuadrática, pudiéndose ajustar las curvas obtenidas mediante MCNP6.1 a este tipo de ecuación con un coeficiente de determinación (R²) mayor del 99%. Por lo tanto, el flujo térmico evoluciona en el contenedor de forma negativa según la distancia radial, siendo un orden de magnitud mayor el flujo térmico en la parte interior del contenedor que en la parte exterior de los canales radiales de irradiación.

El cociente entre los resultados computacionales y experimentales, expuestos anteriormente en la Figura 1, es mostrado a continuación en la Figura 2, pudiéndose observar la mejora existente en la actualización de los resultados computacionales que se ha conseguido en el presente trabajo, la cual es significativamente apreciable al compararse resultados computacionales con los obtenidos en las segundas medidas experimentales, a 23 cm de distancia en este caso el cociente toma un valor de 0.8 en lugar de 0.56. En el caso de los resultados experimentales obtenidos en la primera medida se puede observar cómo a 23 cm de distancia los nuevos modelos tienen una evolución más lógica que el anterior, que el intervalo de variación del cociente es un 25% menor, y que para distancias menores a 21 cm las librerías ENDF/B VII.1 y JEFF-3.3 proveen de resultados similares, en términos absolutos, mientras que para distancias mayores de 21 cm el cociente entre flujo simulado y medido decrece de forma más significativa para la librería JEFF-3.3.



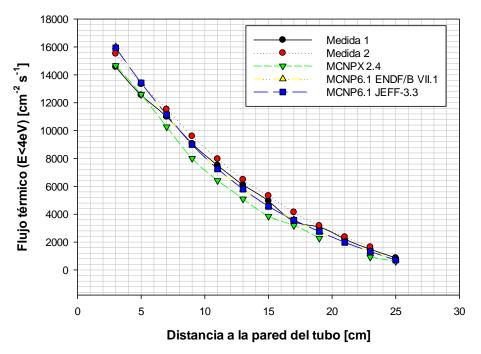


Figura 1. Evolución del flujo térmico en el canal radial, obtenido mediante experimentación y mediante simulación numérica.

Finalmente, es posible concluir que, de forma generalizada, el cociente entre el flujo térmico simulado y el flujo medido experimentalmente en el *Howitzer* disminuye con la distancia a la pared del tubo de la fuente, teniendo esta generalización una excepción muy significativa a una distancia de 17 cm. Esta excepción precisamente coincide de forma aproximada con la zona en la cual el flujo térmico alcanza su máxima contribución al flujo neutrónico total en el canal radial del contenedor (Figura 3), ya que esta contribución evoluciona con la distancia de forma prácticamente parabólica.

En esta Figura 3, se muestra la evolución con respecto de la distancia de la contribución del flujo térmico al flujo total en el canal radial, para 6 casos diferentes calculados mediante MCNP6.1 para las dos librerías de datos nucleares objeto de este estudio. De esta manera, se demuestra que si en estas simulaciones no se tuvieran en cuenta las matrices de dispersión térmica mediante el empleo de TSLs, en los inputs de simulación, se estaría subestimando de forma significativa el flujo térmico en el canal radial, independientemente de la librería empleada. La importancia de estas diferencias es creciente a medida que aumenta la distancia a la pared del tubo, de forma excepcional se produce una alteración de esta tendencia a 25 cm con la JEFF-3.3.

Por otra parte, en la Figura 3 también es observable como los cálculos ejecutados con la librería JEFF-3.3 proveen, en general, de una menor contribución del flujo térmico al flujo neutrónico total, independientemente de la distancia a la pared del tubo. Este hecho, también ocurre de forma general al compararse los resultados obtenidos con la librería ENDF/B VII.1, incluyendo o no las TSLs del aluminio, el hierro y el polimetilmetacrilato, ya que cuando no se aplican estas TSLs (aluminio, hierro y polimetilmetacrilato) también generalmente se obtiene una menor contribución del flujo térmico al flujo neutrónico total. En este último caso, estas diferencias empiezan a ser más significativas para distancias mayores a 21 cm a la pared del tubo.



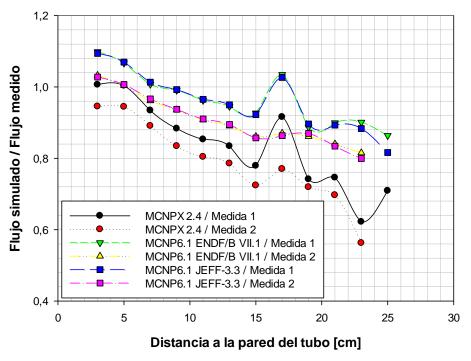


Figura 2. Evolución del cociente entre el flujo simulado y el flujo medido en el canal radial de irradiación del contenedor Howitzer.

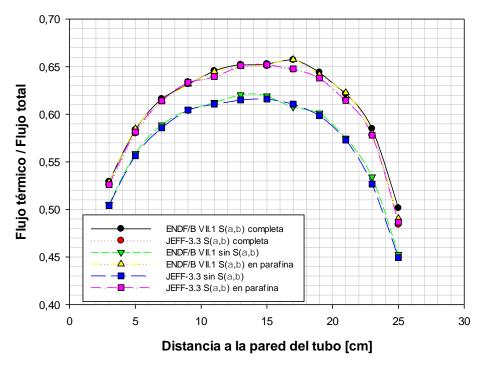


Figura 3. Evolución a lo largo del canal radial de la contribución del flujo térmico al flujo total.



Por tanto, con respecto de la evolución de la contribución del flujo térmico al flujo neutrónico total, es posible concluir que esta alcanza su máximo valor a distancias entre 13 cm y 19 cm, existiendo una contribución al mismo de las matrices de dispersión térmica del hierro, el aluminio y el polimetilmetacrilato. Cuando estas matrices no son tenidas en cuenta en cálculos con la ENDF/B VII.1 o con la JEFF-3.3, por la falta de TSLs para estos materiales (aluminio y hierro) en la JEFF-3.3, se obtienen menores valores de contribución del flujo térmico. Sin embargo, estas diferencias obtenidas son ínfimas, la contribución de estas matrices de dispersión térmica, en este caso, son muy pequeñas en comparación con la contribución de la parafina, la inclusión de la TSL de este material si que es determinante en el cálculo del flujo térmico del canal radial de irradiación.

4. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS.

En el presente proyecto se ha conseguido actualizar el modelo MCNP del contenedor Howitzer de la Universidad Politécnica de Madrid, consiguiéndose unos valores más congruentes que los del anterior modelo respecto de la evolución del flujo térmico en el canal radial de irradiación del contenedor, comparándose resultados computacionales y experimentales.

Las diferencias entre resultados experimentales y computacionales se han reducido enormemente, si bien los esfuerzos de mejora continua del LMN-UPM deben de perdurar a fin de reducir las diferencias todavía existentes, con especial interés en distancias a la pared del tubo mayores de los 19 cm que, por ser las más exteriores, son también las más utlizadas. Adicionalmente, los resultados obtenidos han permitido comparar para este contenedor dos librerías de secciones eficaces de uso extendido (ENDF/B VII.1 y JEFF-3.3), mostrando los resultados cómo la falta de TSLs en la librería JEFF-3.3 parecen ser la mayor causa de que los cálculos con dicha librería muestren una menor contribución del flujo térmico al flujo neutrónico total.

En todo caso, ha quedado demostrado que la aplicación de la matriz de dispersión térmica de la parafina es la parte esencial en cuanto a TSLs para la determinación del flujo térmico en este contenedor, el cual disminuye de forma cuadrática al aumentarse la distancia a la pared del tubo, mientras que su contribución al flujo total evoluciona de manera cuasi-parabólica.

En un futuro, se pretenden emplear los canales radiales de irradiación del contenedor *Howitzer* para probar nuevos detectores de neutrones, así como para una posible prueba de las nuevas esferas Bonner de rango extendido del LMN-UPM (García-Baonza et al., 2020).

AGRADECIMIENTOS.

Este trabajo ha sido desarrollado bajo el Programa de Investigación de Doctorado Industrial de la Comunidad de Madrid, de acuerdo con el convenio IND2017/AMB-7797.

REFERENCIAS.

- Ali, S., Laherty, M., Laprade, J.W., Cala, P.M., Lipschultz, F.P., Neuhauser, B., 2015. A portable shield for a neutron howitzer used for instructional and research purposes. Appl. Radiat. Isot. 103, 37–42. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2015.05.011
- Barros, S., Gallego, E., Lorente, A., Gonçalves, I.F., Vaz, P., Vega-Carrillo, H.R., 2013. Dosimetric assessment and characterisation of the neutron field around a howitzer container using a bonner sphere spectrometer, Monte Carlo simulations and the NSDANN and NSDUAZ unfolding codes. Radiat. Prot. Dosimetry 154, 346–355. https://doi.org/10.1093/rpd/ncs246



- Barros, S., Gallego, E., Lorente, A., Kim, G., 2020. Comparison of neutron and secondary gamma dose assessment using polygon mesh and voxel computational phantoms. J. Radiol. Prot. 40, 583. https://doi.org/10.1088/1361-6498/ab7d8d
- Cevallos-Robalino, L.E., García-Fernández, G.F., Lorente, A., Gallego, E., Ibañez-Fernández, S., Vega-Carrillo, H.R., Guzmán-Garcia, K.A., 2020a. Monte Carlo design and experimental characterization of a moderator device to produce a thermal neutron source from a 241Am/9Be source. Radiat. Phys. Chem. 168, 108599. https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.108599
- Cevallos-Robalino, L.E., García-Fernández, G.F., Lorente, A., Gallego, E., Vega-Carrillo, H.R., Guzmán-Garcia, K.A., 2019. Analysis by Monte Carlo of thermal neutron flux from a 241Am/9Be source for a system of trace analysis in materials. Appl. Radiat. Isot. 151, 19–24. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.04.041
- Cevallos-Robalino, L.E., García-Fernández, G.F., Lorente, A., Gallego, E., Vega-Carrillo, H.R., Ibañez, S., Guzmán-García, K.A., 2020b. Experimental characterization of FANT, a new thermal neutron source. Appl. Radiat. Isot. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109437
- Chadwick, M.B., Herman, M., Obložinský, P., Dunn, M.E., Danon, Y., Kahler, A.C., Smith, D.L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D.A., Capote, R., Carlson, A.D., Cho, Y.S., Derrien, H., Guber, K., Hale, G.M., Hoblit, S., Holloway, S., Johnson, T.D., Kawano, T., Kiedrowski, B.C., Kim, H., Kunieda, S., Larson, N.M., Leal, L., Lestone, J.P., Little, R.C., McCutchan, E.A., MacFarlane, R.E., MacInnes, M., Mattoon, C.M., McKnight, R.D., Mughabghab, S.F., Nobre, G.P.A., Palmiotti, G., Palumbo, A., Pigni, M.T., Pronyaev, V.G., Sayer, R.O., Sonzogni, A.A., Summers, N.C., Talou, P., Thompson, I.J., Trkov, A., Vogt, R.L., van der Marck, S.C., Wallner, A., White, M.C., Wiarda, D., Young, P.G., 2011. ENDF/B-VII.1 nuclear data for science and technology: Cross sections, covariances, fission product yields and decay data. Nucl. Data Sheets 112, 2887–2996. https://doi.org/10.1016/j.nds.2011.11.002
- Gallego, E., Guerrero Araque, J.E., Lorente, A., Vega-Carrillo, H.R., 2011. Estudio de las propiedades de blindaje frente a fuentes de neutrones del hormigón de colemanita. LMN-02/11. ETSII-UPM
- Gallego, E., Lorente, A., Vega-Carrillo, H.R., 2010. Estudio de las propiedades de blindaje de la masa de hormigón de alta densidad Hormirad frente a fuentes de neutrones. LMN-01/10. ETSII-UPM.
- García-Baonza, R., García-Fernández, G.F., Cevallos-Robalino, L.E., Gallego, E., 2020. Analysis by Monte Carlo methods of the response of an extended-range Bonner Sphere Spectrometer. Appl. Radiat. Isot. 163, 1–8. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109196
- García-Fernández, G.F., Cevallos-Robalino, L.E., García-Baonza, R., Gallego, E., Vega-Carrillo, H.R., Guzman-García, K.A., Lorente, A., Ibáñez, S., 2019. Monte Carlo characterization and benchmarking of extended range REM meters for its application in shielding and radiation area monitoring in Compact Proton Therapy Centers (CPTC). Appl. Radiat. Isot. 152, 115–126. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.07.001
- Guzmán-García, K.A., Vega-Carrillo, H.R., Gallego, E., González, J.A., Méndez Villafañe, R., Lorente, A., Ibañez-Fernández, S., 2017. Performance of 10B+ZnS(Ag) neutron detectors in RPM for the detection of special nuclear materials. Radiat. Meas. 107, 58–66. https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2017.11.001



- Herrero Carrascosa, J.J., 2007. Cálculo de flujos neutrónicos y tasas de dosis para el howitzer. ETSII-UPM.
- Martin-Martin, A., Iñiguez, M., Luke, P., Barquero, R., Lorente, A., Morchón, J., Gallego, E., Quincoces, G., Martí-Climent, J., 2009. Evaluation of CdZnTe as neutron detector around medical accelerators. Radiat. Prot. Dosimetry 133, 193–199.
- Osman, A.M., Abdel-Monem, A.M., Ali, A.M., 2014. Optimization of thermal neutron flux in an irradiator assembly with different isotopic sources. Ann. Nucl. Energy 68, 10–14. https://doi.org/10.1016/j.anucene.2013.12.016
- Pelowitz, D., Fallgren, A., McMath, G., 2014. MCNP6TM User's Manual Code Version 6.1.1 Beta. Los Alamos National Laboratory, USA (2014). Report LA-CP-14-0.
- Plompen, A.J.M., Cabellos, O., Jean, C.D. Saint, Fleming, M., Algora, A., Angelone, M., Archier, P., Bauge, E., Bersillon, O., Blokhin, A., Cantargi, F., Chebboubi, A., Diez, C., Duarte, H., Dupont, E., Dyrda, J., Erasmus, B., Fiorito, L., Fischer, U., Flammini, D., Foligno, D., Gilbert, M.R., Granada, J.R., Haeck, W., Hambsch, F., Helgesson, P., Hilaire, S., Hill, I., Hursin, M., Ichou, R., Jacqmin, R., Jansky, B., Jouanne, C., Kellett, M.A., Kim, D.H., Kim, H.I., Kodeli, I., Koning, A.J., Konobeyev, A.Y., Kopecky, S., Kos, B., Krása, A., Leal, L.C., Leclaire, N., Leconte, P., Lee, Y.O., Leeb, H., Litaize, O., Majerle, M., Damián, J.I.M., Mills, R.W., Morillon, B., Noguère, G., Pecchia, M., Pelloni, S., Pereslavtsev, P., Perry, R.J., Rochman, D., Röhrmoser, A., Romain, P., Romojaro, P., Roubtsov, D., Sauvan, P., Schillebeeckx, P., Schmidt, K.H., Serot, O., Simakov, S., Sirakov, I., Sjöstrand, H., Stankovskiy, A., Sublet, J.C., Tamagno, P., Trkov, A., Marck, S. Van Der, Velarde, F., Villari, R., Ware, T.C., Yokoyama, K., Žerovnik, G., 2020. The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3, The European Physical Journal A. Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00141-9
- Vega-Carrillo, H.R., Gallego, E., Lorente, A., Rubio, I.P., Méndez, R., 2012. Neutron features at the UPM neutronics hall. Appl. Radiat. Isot. 70, 1603–1607. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2012.05.003
- Vega-Carrillo, H.R., Guzman-Garcia, K.A., Gallego, E., Lorente, A., 2014. Passive neutron area monitor with pairs of TLDs as neutron detector. Radiat. Meas. 69, 30–34. https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2014.08.006