2002 추계학술발표회 논문집
한국원자력학회

비분리공명 영역의 자기 차폐 효과를 고려하기 위한 MCNP4C용 라이브러리의 생산 및 검증

A Library for MCNP4C to Handle Effects of Self-Shielding in Unresolved Resonance Energy Range

김도헌, 길충섭, 김정도, 장종화
한국원자력연구소
대전광역시 유성구 덕진동 150

요 약

MCNP4C 코드는 비분리공명 (unresolved resonance, UR) 단면적 자료를 확률표 (probability table) 형태로 받아들일 수 있도록 개량되었다. 이에 따라, NJOY 코드의 PURR 모듈을 통해 생성된 UR 확률표 자료를 포함하는 MCNP4C용 연속에너지 ACE 포맷 중성자 라이브러리인 KNE68을 최신의 ENDF/B-VI release 8 및 NJOY99.67 코드를 사용하여 생산하였다. 생산된 라이브러리는 Los Alamos National Laboratory (LANL)에서 라이브러리 검증용으로 사용되고 있는 경수로 및 고속로용 임계도 문제에 대한 벤치마크 계산을 통해 해석·검증되었다.

Abstract

A continuous-energy neutron data library, called KNE68, has been generated for MCNP4C. The KNE68 library contains ACE format data processed from ENDF/B-VI release 8 using the latest NJOY99.67 code. The continuous-energy Monte Carlo code MCNP4C supports the use of probability tables for handling the effects of self-shielding in the unresolved resonance energy range. These tables were generated using the PURR module of NJOY and merged into the new library. The validation process for KNE68 has been performed for a suite of criticality benchmarks established for validating nuclear data by Los Alamos National Laboratory.

1. 서 론

MCNP (A General Monte Carlo N-Particle Transport Code)[1] 코드는 원자로심 해석, 각종 차폐 해석, 실험 자료의 검증 등에 널리 사용되고 있는 코드로서 컴퓨터 성능의 발달에 힘입어 사용자의 수가 전 세계적으로 급속히 늘어가고 있다. MCNP 코드용 중성자 라이브러리로는 ENDF/B-VI release 2를 토대로 만들어진 ENDF60 라이브러리[2], ENDF/B-VI release 4를 토대로 만들어졌으며 UR 확률표 (unresolved resonance probability tables)를 포함하고 있는 URES 라이브러리[3], ENDF60

라이브러리에 지발 중성자 자료가 첨가된 ENDF6DN 라이브러리[4] 등이 널리 사용되고 있다. 또한, 국내에서는 1999년 ENDF/B-VI release 5를 토대로 300K, 600K, 900K에서 생산된 ACE (A Compact ENDF) 포맷 라이브러리인 MCLIB-E6[5]가 배포되어 사용되고 있다.

최근 LANL에서는 ENDF66이라 명명된 MCNP4C 코드용 중성자 라이브러리를 생산하여 2002년 중·하반기에 배포할 목적으로 다양한 검증 작업을 수행하고 있다.[6] 이 라이브러리는 ENDF/B-VI release 6에 포함된 173종의 핵종에 대한 ACE 포맷 자료를 포함하고 있으며, 수정된 NJOY99.50[7] (추후 NJOY99.63으로 업그레이드 됨)을 사용하여 처리되었다. 모든 핵종들에 대한 자료는 293.6K에서 처리되었으며, UR 자료를 포함하고 있는 핵종들은 3000K에서도 처리되었다. 또한, 35종의 핵종들은 77K에서 처리된 자료를 포함하고 있다.

현재 LANL에서는 MCNP용 라이브러리들을 broadening/thinning하여 원하는 온도에서의 라이브러리로 재생시켜 주는 기능의 Doppler broadening 코드를 개발하고 있다. 293.6K에서의 기본 라이브러리만을 갖고 있는 대부분의 핵종들은 이 코드를 통해 원하는 온도로 broadening/thinning된 라이브러리를 얻을 수 있게 된다. 하지만, UR 자료를 포함하고 있는 핵종들의 경우 293.6K에서의 기본 라이브러리 뿐만 아니라 broadening될 수 있는 상한 온도에서의 라이브러리 생산도 필수적이기 때문에 3000K에서 처리된 라이브러리가 추가되었다.

본 연구에서는 ENDF66 라이브러리 생산 과정을 참조하여 최신의 ENDF/B-VI release 8 및 NJOY99.67 코드를 사용하여 MCNP4C 코드용 연속에너지 ACE 포맷 중성자 라이브러리인 KNE68 (KAERI NDL ENDF/B-VI Release 8)을 생산하였다. 전체 핵종에 대한 라이브러리 생산에 앞서 LANL의 라이브러리 검증용 임계도 검증 계산[8]에 필요한 53종의 원소에 대한 라이브러리 생산 작업이 선행되었다. 또한, KNE68 라이브러리를 사용한 검증 계산을 수행하여 새롭게 추가된 UR 확률표의 영향 등을 분석하였다.

2. 라이브러리 생산

최신의 ENDF/B-VI release 8 및 NJOY99.67 코드를 사용하여, UR 에너지 영역에서의 자기 차폐 (self shielding) 효과를 고려하기 위하여 UR 확률표를 이용할 수 있도록 개량된 MCNP4C 코드용 라이브러리를 생산하였다. 우선, 라이브러리 검증을 위해 수행될 LANL의 임계도 벤치마크 계산에 필요한 53종의 원소에 대한 자료가 생산되었으며, 이들 53종 원소들의 목록을 표 1에 수록하였다. 2장에서는 라이브러리 생산에 사용된 평가 핵자료집과 NJOY 처리 과정 등이 소개된다.

2.1. ENDF 핵자료집

ENDF/B-VI 중성자 반응 평가 핵자료집은 1-H-1로부터 99-Es-253에 이르는 총 329 핵종에 대한 중성자 반응 자료를 포함하고 있으며, 핵종에 따라 10^{-5} eV부터 20 MeV 또는 150 MeV까지의 에너지 영역에 대한 자료로 구성되어 있다. 본 연구에서는 MCNP4C 코드용 라이브러리 생산을

위해서 2001년에 발표된 최신 버전의 ENDF 평가 핵자료집인 ENDF/B-VI release 8을 사용하였다. 본 release는 ENDF/B-VI 라이브러리의 최종판이며, 2005년에 새로운 평가 핵자료집인 ENDF/B-VII이 발표될 예정이다.

2.2. NJOY 처리

NJOY는 미국의 LANL에서 개발된 핵자료 처리 코드로서, ENDF 포맷의 평가 핵자료로부터 입자 수송 코드 및 원자로 노심계산 코드 등에 필요한 형태의 라이브러리를 생산하는데 사용되고 있다. 본 연구에서는 최신 버전인 NJOY99.67을 통해 77K, 293.6K, 3000K에서 처리된 ACE 포맷 라이브러리를 생산하였으며, PURR 모듈을 거치면서 PENDF 파일에 UR 확률표가 추가되었다. 생산된 라이브러리에는 온도에 따라 서로 다른 ZAID identifier를 부여하였다. 293.6K에서 처리된 자료에는 ".80c", 77K에서 처리된 자료에는 ".81c", 3000K에서 처리된 자료에는 ".82c"를 ZAID identifier로 사용하여 기존의 라이브러리와 구분하였다.

KNE68 라이브러리에는 총 53종의 원소들 중 15종의 원소가 UR 확률표를 포함하고 있다. 각각의 원소들은 표 2에서 보는 바와 같이 서로 다른 UR 에너지 영역을 지니고 있다. 특히, U-238은 10 keV ~ 149.03 keV의 가장 넓은 UR 에너지 영역을 포함하고 있기 때문에, 상대적으로 U-238의 양이 많고 중성자 스펙트럼이 UR 에너지 영역에 속한 노심에서는 확률표의 영향이 클 것으로 여겨진다. U-238 이외에도 W-182, W-184, W-186, U-234, U-236 등이 비교적 큰 UR 에너지 영역을 포함하고 있는 것으로 나타났다. 이들 중 U-234 및 U-236은 대부분의 노심 내에 비교적 적은 양만 함유되어 있기 때문에 확률표의 영향은 그다지 크지 않을 것으로 판단된다. 그러나, 반사체로 사용되고 있는 텅스텐이 다량 포함된 고속로 노심 (Group 9) 계산에서는 확률표의 영향이 클 것으로 예상된다.

3. 벤치마크 계산

새롭게 생산된 KNE68 라이브러리를 검증 (validation)하기 위해서 LANL의 라이브러리 검증용 임계도 벤치마크 문제에 대하여 임계도 계산을 수행하였다. 계산 결과들은 UR 에너지 영역의 자기 차폐 효과를 고려하지 않고 KNE68을 사용하여 계산한 결과 및 기존의 ENDF60을 사용한 계산 결과와 비교되었다.

3.1. 임계도 벤치마크 계산

LANL에서는 생산된 MCNP 코드용 라이브러리의 검증을 위해서 ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project)[9] 및 CSEWG (Cross Section Evaluation Working Group) specifications[10]의 벤치마크 자료와 비교 계산을 수행하고 있다. 비록 이들 벤치마크 문제들이 모든 동위원소와 관심 있는 에너지 영역들을 모두 포괄할 수는 없지만, 가능한 한 넓은 범위의 에너지 영역과 다양한 중요 반사체 (reflector) 물질 등을 테스트할 수 있도록 선택되었다. 본 임계도 벤치마크 문제는 총 91개로 구성되어 있으며, 문제의 성격에 따라 다음과 같이 총

13개의 그룹으로 구분된다.

Group 1: Bare metal assemblies
Group 2: Solution assemblies
Group 3: Water-reflected metal assemblies
Group 4: Polyethylene-reflected assemblies
Group 5: Beryllium- and beryllium oxide-reflected assemblies
Group 6: Graphite-reflected assemblies
Group 7: Aluminum-reflected assemblies
Group 8: Steel- and nickel-reflected assemblies
Group 9: Tungsten-reflected assemblies
Group 10: Thorium-reflected assemblies
Group 11: Normal uranium-reflected assemblies
Group 12: Highly enriched uranium-reflected assemblies
Group 13: Other assemblies

각 그룹에 속한 문제들의 입력문 명칭, 계산 모델, 개요 등은 Ref. 8에 상세히 설명되어 있다.

3.2. 계산 결과

본 계산에서는 k_{eff} 계산 결과에만 초점을 맞추었다. 모든 벤치마크 계산은 HP C-3600 워크스테이션에서 수행되었으며, MCNP version 4C 코드를 사용하였다. 표 3 ~ 14는 계산상 오류가 발생하고 있는 Group 5를 제외한 12개 그룹에 대하여 수행된 벤치마크 계산 결과를 각각 보여주고 있다. 각각의 표에는 ENDF60 및 KNE68을 사용한 계산 결과를 동시에 수록하여 상호간의 비교를 용이하게 하였다. KNE68 라이브러리를 사용한 계산은 두 번 수행되었는데, 이들은 각각 MCNP 계산에 UR 확률표를 포함시켜 UR 영역에서의 자기 차폐 효과를 고려한 경우와 UR 확률표를 무시하여 자기 차폐 효과를 고려하지 않은 경우의 계산 결과이다.

Group 5의 벤치마크 문제에 대한 MCNP 계산 수행시 KNE68 라이브러리 (UR 확률표의 유무에 관계없이)를 사용할 경우 실행 도중 에러가 발생하였다. 이것은 이들 벤치마크 문제에 공통적으로 포함되어 있는 원소인 Be-9 때문에 발생한다. Be-9 원소는 이전에도 NJOY 처리 도중 종종 문제를 일으켰던 원소인데, MCNP용 라이브러리의 생산 과정이나 자체적인 consistency 체크 과정에서는 아무런 오류가 발생하지 않았음에도 불구하고 MCNP 실행 중에 에러를 발생시켰다. 현재 정확한 오류의 원인을 밝히지 못한 상태이며, 이러한 오류를 수정하기 위한 작업을 계속 수행할 예정이다.

UR 에너지 영역에서의 자기 차폐 효과를 고려하지 않았을 경우의 KNE68 라이브러리와 ENDF60 라이브러리를 사용한 계산 결과를 비교하였다. 표에서 보는 바와 같이, Group 11의 bigten2가 0.0029 Äk로 여러 벤치마크 계산 결과들 중 가장 큰 차이를 보이고 있으며, 대부분의 계산 결과 사이에는 큰 차이를 보이지 않았다. 두 라이브러리 간의 차이는 KNE68을 생산하는데

사용된 ENDF 평가 핵자료집과 NJOY 코드의 버전이 ENDF60에서와 다르기 때문에 발생하는 것으로 여겨진다.

다음으로는 UR 에너지 영역에서의 자기 차폐 효과를 고려하기 위해 KNE68에 새롭게 포함된 UR 확률표가 임계도 계산에 미치는 영향을 알아보았다. 텅스텐을 반사체로 사용한 Group 9의 벤치마크 문제들을 제외한 대부분의 벤치마크 문제들은 계산 결과에 있어서 큰 차이를 보이지 않고 있으며, 가장 큰 차이를 보인 Group 8의 경우에도 최고 0.0023 Äk로 사용된 핵자료집과 처리 코드의 변경에 따른 영향에 비해 UR 확률표에 의한 자기 차폐 효과가 크게 나타나지 않음을 알 수 있었다.

반면, 텅스텐을 반사체로 사용한 Group 9에서 umet3h ~ umet3k의 4가지 경우에는 UR 확률표에 의한 UR 에너지 영역의 자기 차폐 효과가 두드러지게 나타나고 있음을 알 수 있다. 이 문제들은 구형의 고농축 우라늄 (HEU) 노심을 WC (Tungsten Carbide) 반사체가 둘러싸고 있는 형태로 되어 있으며, WC의 두께를 1.9"에서 6.5"까지 변화시켜가며 원자로의 임계도를 계산하고 있다. 텅스텐의 두께가 비교적 얇은 umet3h에서는 자기 차폐 효과가 0.0011 Äk로 나타났지만, 텅스텐의 두께가 두꺼워짐에 따라 자기 차폐 효과는 umet3i, umet3j, umet3k에 대하여 각각 0.0093 Äk, 0.0203 Äk, 0.0255 Äk로 점점 커지고 있음을 알 수 있었다. 따라서, 텅스텐과 같이 넓은 UR 에너지 영역을 지닌 원소가 다량 포함된 문제에서는 UR 확률표에 의한 자기 차폐 효과가 크게 나타날 수 있으므로 항상 UR 확률표의 사용에 주의를 기울여야 할 것으로 여겨진다. 또한, 이들 문제에 UR 확률표에 의한 자기 차폐 효과가 적절히 고려되고 있는지의 여부도 함께 검토되어야 할 것으로 여겨진다.

주어진 두 데이터 세트 간의 정량적인 차이를 알아보기 위한 통계적인 분석 방법으로는 $\div^2$ 테스트[11]가 주로 사용되고 있다. 표 15는 KNE68 및 ENDF60을 사용한 MCNP 계산 결과와 벤치마크 실험 결과 사이의 정량적인 차이를 보여주고 있다. 표에는 각 그룹에 속한 벤치마크 문제들에 대한 $\div^2$ difference와 전체 벤치마크 문제들에 대한 $\div^2$ difference를 수록하였으며, 이들을 사용된 세 종류의 라이브러리에 대하여 서로 비교해 보았다.

UR 영역에서의 자기 차폐 효과를 고려하지 않은 ENDF60 및 KNE68을 사용한 계산 결과는 각 그룹별 $\div^2$ difference에 있어서 큰 차이를 보이진 않았지만, KNE68이 ENDF60에 비해 작은 $\div^2$ difference를 갖는 것으로 나타났다. 마찬가지로, 전체 벤치마크 문제에 대한 $\div^2$ difference도 KNE68을 사용했을 경우 0.000847로 ENDF60을 사용했을 경우인 0.000893에 비해 좀더 작아졌다. 즉, KNE68을 사용한 MCNP 계산 결과가 벤치마크 실험 결과에 좀더 근접하고 있음을 알 수 있다. 따라서, 본 연구에서 수행된 LANL의 임계도 벤치마크 문제에 대한 두 라이브러리 간의 테스트 결과는 KNE68 라이브러리가 ENDF60 라이브러리에 비해 좀더 향상된 결과를 보이고 있음을 알 수 있다.

표 15에는 KNE68에 포함된 UR 확률표에 의한 자기 차폐 효과를 고려하여 수행된 벤치마크 결과에 대한 $\div^2$ difference도 함께 수록되어 있다. 앞에서 살펴 보았듯이 텅스텐을 반사체로

사용한 Group 9에 대한 결과에는 자기 차폐 효과가 크게 나타났기 때문에 이에 대한 $\div^2$ difference도 커짐을 알 수 있다. 그러나, Group 9의 경우를 제외한 나머지 그룹에 대한 $\div^2$ difference는 KNE68의 자기 차폐 효과를 고려하지 않고 수행된 계산 결과에 비해서도 좀더 개선되고 있음을 알 수 있다. 즉, UR 영역의 자기 차폐 효과가 큰 텅스텐을 반사체로 사용하는 Group 9의 노심과 유사한 경우를 제외한 대부분의 노심에서는 임계도 계산시 자기 차폐 효과를 고려한 KNE68을 MCNP4C용 라이브러리로 사용해도 문제가 없을 것으로 판단되며, ENDF60에 비해 개선된 결과가 도출될 것으로 예상된다.

J.M. Campbell 등은 UR 확률표를 포함하고 있는 MCNP4C용 중성자 라이브러리인 ENDF66을 생산하여 그에 대한 벤치마크 계산을 수행한 바 있다.[6] ENDF66에 대한 벤치마크 계산 결과는 본 연구에서 수행된 계산 결과와 유사한 경향을 보이고 있다. 그러나, Group 9의 WC 반사체를 사용한 umet3h ~ umet3k에 대한 검증 계산에서는 두 라이브러리에 대한 검증 계산 결과 사이에 비교적 큰 차이를 보이고 있다. ENDF66을 사용한 경우, umet3h 계산에서는 –0.0013 Äk의 k_{eff} 감소를 보였고, umet3k에서는 0.0033 Äk의 k_{eff} 증가를 보였다. 또한, umet3k의 계산 결과는 k_{eff} = 1.0119로 계산되었다. 반면, KNE68을 사용한 계산에서는 4가지 경우 모두에 대하여 k_{eff}의 증가 현상이 나타났으며, 그 증가량도 최대 0.0255 Äk로 비교적 크게 계산되었다. umet3k의 계산 결과 역시 k_{eff} = 1.0350으로 ENDF66에 비해 비교적 크게 계산되었다. 즉, UR 확률표에 의한 자기 차폐 효과는 ENDF66에 비해 KNE68을 사용하였을 경우 보다 크게 나타나고 있음을 알 수 있다. 두 라이브러리에 대한 벤치마크 계산 결과들 간의 차이는 중성자 스펙트럼 분석이나 다른 수송 코드를 통한 검증 계산 등을 통해 좀더 분석, 검토되어야 할 것으로 여겨진다.

4. 요약 및 검토

최신의 ENDF/B-VI release 8 및 NJOY99.67 코드를 사용하여 MCNP4C 코드용 연속에너지 ACE 포맷 중성자 라이브러리인 KNE68을 생산하였다. 이 라이브러리에는 UR 에너지 영역에서의 단면적 자료가 확률표 형태로 포함되어 있어, UR 에너지 영역에서의 자기 차폐 효과를 고려할 수 있다. 본 연구에서는 LANL의 라이브러리 검증용 임계도 벤치마크 문제에 사용하기 위해 53종의 원소에 대한 라이브러리를 먼저 생산하였다.

벤치마크 계산 결과, UR 에너지 범위가 넓은 원소인 텅스텐을 반사체로 사용하고 있는 문제에서 UR 확률표에 의한 자기 차폐 효과가 매우 크게 나타났는데, 이는 중성자 스펙트럼이 UR 에너지 영역에서 민감한 노심의 경우 라이브러리에 새롭게 포함된 UR 확률표가 MCNP 계산 결과에 큰 영향을 미칠 수 있음을 보여준다. KNE68 및 ENDF60을 사용한 MCNP 계산 결과와 벤치마크 실험 결과 사이의 정량적인 차이를 살펴보기 위하여 $\div^2$ difference를 계산하였고, 각각의 라이브러리들 간에 서로 비교해 보았다. $\div^2$ difference의 비교를 통해, Group 9을 제외한 대부분의 벤치마크 문제에서 KNE68 라이브러리를 사용한 MCNP 계산 결과는 ENDF60 라이브러리를 사용한 경우에 비해 좀더 개선되었음을 알 수 있었다.

LANL의 임계도 벤치마크 문제들 중 Group 5의 Be-9 원소를 포함한 문제에서는 MCNP 코드

실행 도중 에러가 발생하였는데, 이 에러의 정확한 원인을 찾기 위한 연구가 앞으로 계속 수행되어야 할 것으로 여겨진다. 또한, 우선적으로 생산된 53종 이외의 모든 원소들에 대한 라이브러리 생산 작업도 계속 수행될 예정이다.

본 연구는 과학기술부의 원자력연구개발 중·장기계획사업 중 "원자력 연구개발용 핵자료 구축·평가" 과제의 일환으로 수행되었음.

참고문헌

1. J.F. Briesmeister, "MCNP–A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C," LA-13709-M, Los Alamos National Laboratory (2000).
2. J.S. Hendricks, S.C. Frankle, and J.D. Court, "ENDF/B-VI Data for MCNP," LA-12891, Los Alamos National Laboratory (1994).
3. R.C. Little and R.E. MacFarlane, "ENDF/B-VI Neutron Library for MCNP with Probability Tables," LA-UR-98-5718, Los Alamos National Laboratory (1998).
4. C.J. Werner, "New Data Library for MCNP Delayed Neutron Capability," XCI:CJW-99-25(U), Los Alamos memorandum, Los Alamos National Laboratory (1999).
5. **서보균**, "MCNP**용 라이브러리 생산 및 단면적 그래프 작성**," NDL-19/99, **핵자료평가랩**, **한국원자력연구소** (1999).
6. J.M. Campbell, S.C. Frankle, and R.C. Little, "ENDF66: A Continuous-Energy Neutron Data Library for MCNP4C," 12th Biennial RPSD Topical Meeting, Santa Fe, NM (2002).
7. R.E. MacFarlane and D.W. Muir, "The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91," LA-12740-M, Los Alamos National Laboratory (1994).
8. S.C. Frankle, "A Suite of Criticality Benchmarks for Validating Nuclear Data," LA-13594, Los Alamos National Laboratory (1999).
9. "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments," NEA Nuclear Science Committee, NEA/NSC/DOC(95)03 (2001).
10. "Cross Section Evaluation Working Group Benchmark Specifications," ENDF-202, BNL19302, Brookhaven National Laboratory (1991).
11. W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing - Second Edition*, Cambridge University Press, New York, 1992.

Table 1. List of Nuclides for Criticality Benchmarks of LANL

No.	Element	Z	A	MAT
1	H	1	001	125
2			002	128
3	Be	4	009	425
4	B	5	010	525
5			011	528
6	C	6	000	600
7	N	7	014	725
8	O	8	016	825
9	Na	11	023	1125
10	Mg	12	000	1200
11	Al	13	027	1325
12	Si	14	000	1400
13	P	15	031	1525
14	S	16	032	1625
15	Ca	20	000	2000
16	Ti	22	000	2200
17	V	23	000	2300
18	Cr	24	050	2425
19			052	2431
20			053	2434
21			054	2437
22	Mn	25	055	2525
23	Fe	26	054	2625
24			056	2631
25			057	2634
26			058	2637
27	Ni	28	058	2825
28			060	2831
29			061	2834
30			062	2837
31			064	2843

No.	Element	Z	A	MAT
32	Cu	29	063	2925
33			065	2931
34	Ga	31	000	3100
35	Zr	40	000	4000
36	Mo	42	000	4200
37	Cd	48	000	4800
38	W	74	182	7431
39			183	7434
40			184	7437
41			186	7443
42	Th	90	232	9040
43	U	92	233	9222
44			234	9225
45			235	9228
46			236	9231
47			238	9237
48	Np	93	237	9346
49	Pu	94	239	9437
50			240	9440
51			241	9443
52			242	9446
53	Am	95	241	9543

Table 2. Unresolved Resonance Energy Range in KNE68 Library

Element	Lower Bound (MeV)	Upper Bound (MeV)	Energy Span (MeV)
W-182	4.5000E-03	1.0000E-01	9.5500E-02
W-183	7.6500E-04	4.5000E-02	4.4235E-02
W-184	2.6500E-03	1.0000E-01	9.7350E-02
W-186	3.2000E-03	1.0000E-01	9.6800E-02
Th-232	4.0000E-03	5.0000E-02	4.6000E-02
U-233	6.0000E-05	1.0000E-02	9.9400E-03
U-234	1.5000E-03	1.0000E-01	9.8500E-02
U-235	2.2500E-03	2.5000E-02	2.2750E-02
U-236	1.5000E-03	1.0000E-01	9.8500E-02
U-238	1.0000E-02	1.4903E-01	1.3903E-01
Pu-239	2.5000E-03	3.0000E-02	2.7500E-02
Pu-240	5.7000E-03	4.0000E-02	3.4300E-02
Pu-241	3.0000E-04	4.0200E-02	3.9900E-02
Pu-242	9.8600E-04	1.0000E-02	9.0140E-03
Am-241	1.5000E-04	3.0000E-02	2.9850E-02

Table 3. Criticality Benchmark Results for Bare Metal Assemblies (Group 1)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	23umt1	1.0000	±0.0010	0.9929	±0.0006	0.9930	±0.0006	0.9921	±0.0006	0.0008
2	ieumt3	1.0000	±0.0017	1.0001	±0.0006	0.9982	±0.0006	0.9988	±0.0006	-0.0006
3	umet1ss	1.0000	±0.0010	0.9962	±0.0006	0.9964	±0.0006	0.9962	±0.0006	0.0002
4	umet1ns	1.0000	±0.0010	0.9968	±0.0006	0.9956	±0.0006	0.9967	±0.0006	-0.0010
5	umet8	0.9989	±0.0016	0.9922	±0.0006	0.9925	±0.0006	0.9916	±0.0006	0.0009
6	umet15	0.9996	±0.0017	0.9916	±0.0006	0.9911	±0.0007	0.9915	±0.0006	-0.0004
7	umet18	1.0000	±0.0016	0.9964	±0.0006	0.9963	±0.0006	0.9970	±0.0006	-0.0007
8	pumet1	1.0000	±0.0020	0.9977	±0.0006	0.9992	±0.0006	0.9974	±0.0006	0.0018
9	pumet2	1.0000	±0.0020	0.9981	±0.0005	0.9981	±0.0006	0.9986	±0.0006	-0.0005
10	pumet22	1.0000	±0.0021	0.9973	±0.0006	0.9967	±0.0005	0.9955	±0.0005	0.0012

Table 4. Criticality Benchmark Results for Solution Assemblies (Group 2)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	23usl1a	1.0000	±0.0031	0.9967	±0.0004	0.9973	±0.0004	0.9989	±0.0004	-0.0015
2	23usl1b	1.0005	±0.0033	0.9966	±0.0004	0.9978	±0.0004	0.9984	±0.0004	-0.0007
3	23usl1c	1.0006	±0.0033	0.9969	±0.0004	0.9973	±0.0004	0.9975	±0.0004	-0.0003
4	23usl1d	0.9998	±0.0033	0.9962	±0.0004	0.9981	±0.0004	0.9980	±0.0004	0.0001
5	23usl1e	0.9999	±0.0033	0.9956	±0.0004	0.9971	±0.0004	0.9965	±0.0004	0.0006
6	23usl8	1.0006	±0.0029	0.9954	±0.0003	0.9968	±0.0003	0.9966	±0.0003	0.0002
7	usol13a	1.0012	±0.0026	0.9975	±0.0004	0.9990	±0.0004	0.9982	±0.0004	0.0008
8	usol13b	1.0007	±0.0036	0.9964	±0.0004	0.9976	±0.0004	0.9982	±0.0004	-0.0006
9	usol13c	1.0009	±0.0036	0.9929	±0.0004	0.9934	±0.0004	0.9940	±0.0004	-0.0006
10	usol13d	1.0003	±0.0036	0.9957	±0.0004	0.9946	±0.0004	0.9952	±0.0004	-0.0005
11	usol32	1.0015	±0.0026	0.9966	±0.0002	0.9988	±0.0003	0.9987	±0.0003	0.0001
12	pnl1	1.0000		1.0062	±0.0006	1.0059	±0.0006	1.0076	±0.0006	-0.0017
13	pnl6	1.0000		1.0020	±0.0007	1.0014	±0.0007	0.9997	±0.0007	0.0017
14	pusl11a	1.0000	±0.0052	0.9948	±0.0005	0.9945	±0.0005	0.9952	±0.0005	-0.0007
15	pusl11b	1.0000	±0.0052	1.0008	±0.0006	1.0008	±0.0006	1.0012	±0.0005	-0.0004
16	pusl11c	1.0000	±0.0052	1.0045	±0.0006	1.0049	±0.0006	1.0053	±0.0006	-0.0003
17	pusl11d	1.0000	±0.0052	1.0085	±0.0006	1.0087	±0.0006	1.0080	±0.0006	0.0008

Table 5. Criticality Benchmark Results for Water-Reflected Metal Assemblies (Group 3)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	umet4a	1.0020		1.0006	±0.0008	0.9997	±0.0007	1.0006	±0.0007	-0.0009
2	umet4b	1.0003	±0.0005	0.9972	±0.0007	0.9949	±0.0008	0.9959	±0.0007	-0.0010
3	pumet11	1.0000	±0.0010	0.9977	±0.0007	0.9975	±0.0007	0.9964	±0.0008	0.0011

Table 6. Criticality Benchmark Results for Polyethylene-Reflected Assemblies (Group 4)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	umet11	1.0000	±0.0010	0.9973	±0.0008	0.9956	±0.0007	0.9946	±0.0007	0.0010
2	umet20	1.0000	±0.0030	0.9973	±0.0006	0.9975	±0.0006	0.9982	±0.0007	-0.0007
3	pumet24	1.0000	±0.0020	0.9994	±0.0007	0.9995	±0.0007	1.0015	±0.0007	-0.0020

Table 7. Criticality Benchmark Results for Graphite-Reflected Assemblies (Group 6)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	ieumt4	1.0000	±0.0030	1.0051	±0.0006	1.0028	±0.0006	1.0037	±0.0006	-0.0009
2	umet19	1.0000	±0.0030	1.0024	±0.0006	1.0035	±0.0006	1.0032	±0.0006	0.0003
3	pumet23	1.0000	±0.0020	0.9983	±0.0006	0.9990	±0.0006	0.9992	±0.0006	-0.0002

Table 8. Criticality Benchmark Results for Aluminum-Reflected Assemblies (Group 7)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	ieumt6	1.0000	±0.0023	0.9918	±0.0006	0.9908	±0.0006	0.9911	±0.0006	-0.0003
2	umet12	0.9992	±0.0018	0.9935	±0.0006	0.9946	±0.0006	0.9933	±0.0006	0.0013
3	umet22	1.0000	±0.0021	0.9916	±0.0006	0.9923	±0.0006	0.9934	±0.0006	-0.0011
4	pumet9	1.0000	±0.0027	1.0020	±0.0006	1.0022	±0.0006	1.0023	±0.0006	-0.0001

Table 9. Criticality Benchmark Results for Steel- and Nickel-Reflected Assemblies (Group 8)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	ieumt5	1.0000	±0.0021	0.9995	±0.0006	0.9985	±0.0006	0.9980	±0.0006	0.0005
2	umet13	0.9990	±0.0015	0.9950	±0.0006	0.9940	±0.0005	0.9943	±0.0006	-0.0003
3	umet21	1.0000	±0.0026	0.9946	±0.0006	0.9943	±0.0006	0.9944	±0.0006	-0.0002
4	pumet25	1.0000	±0.0020	0.9965	±0.0006	0.9974	±0.0006	0.9951	±0.0006	0.0023
5	pumet26	1.0000	±0.0024	0.9978	±0.0006	0.9971	±0.0006	0.9973	±0.0006	-0.0002
6	umet3l	1.0000	±0.0030	1.0044	±0.0006	1.0058	±0.0006	1.0035	±0.0007	0.0023

Table 10. Criticality Benchmark Results for Tungsten-Reflected Assemblies (Group 9)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	23umt4a	1.0000	±0.0007	1.0030	±0.0006	1.0030	±0.0006	1.0024	±0.0006	0.0006
2	23umt4b	1.0000	±0.0008	1.0056	±0.0006	1.0070	±0.0007	1.0047	±0.0006	0.0023
3	umet3h	1.0000	±0.0050	1.0061	±0.0006	1.0081	±0.0006	1.0070	±0.0006	0.0011
4	umet3i	1.0000	±0.0050	1.0069	±0.0006	1.0155	±0.0006	1.0062	±0.0006	0.0093
5	umet3j	1.0000	±0.0050	1.0069	±0.0006	1.0276	±0.0006	1.0073	±0.0007	0.0203
6	umet3k	1.0000	±0.0050	1.0088	±0.0006	1.0350	±0.0006	1.0095	±0.0006	0.0255
7	pumet5	1.0000	±0.0013	1.0094	±0.0006	1.0101	±0.0006	1.0086	±0.0006	0.0015

Table 11. Criticality Benchmark Results for Thorium-Reflected Assemblies (Group 10)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	pumet8a	1.0000	±0.0030	1.0061	±0.0006	1.0055	±0.0006	1.0058	±0.0006	-0.0003
2	pumet8b	1.0000	±0.0006	1.0058	±0.0006	1.0069	±0.0006	1.0057	±0.0006	0.0013

Table 12. Criticality Benchmark Results for Normal Uranium-Reflected Assemblies (Group 11)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	23umt3a	1.0000	±0.0010	0.9969	±0.0006	0.9969	±0.0006	0.9969	±0.0006	0.0000
2	23umt3b	1.0000	±0.0010	0.9984	±0.0006	0.9986	±0.0007	0.9972	±0.0006	0.0014
3	23umt6	1.0000	±0.0014	1.0001	±0.0007	1.0000	±0.0007	0.9996	±0.0007	0.0004
4	flat23	1.0000	±0.0010	1.0018	±0.0007	1.0015	±0.0007	1.0023	±0.0006	-0.0008
5	ieumt2	1.0000	±0.0030	1.0038	±0.0006	1.0015	±0.0005	1.0020	±0.0006	-0.0005
6	umet3a	1.0000	±0.0050	0.9927	±0.0006	0.9928	±0.0006	0.9918	±0.0006	0.0011
7	umet3b	1.0000	±0.0050	0.9926	±0.0006	0.9926	±0.0006	0.9915	±0.0006	0.0011
8	umet3c	1.0000	±0.0050	0.9986	±0.0006	0.9969	±0.0006	0.9985	±0.0006	-0.0016
9	umet3d	1.0000	±0.0030	0.9973	±0.0007	0.9962	±0.0007	0.9961	±0.0006	0.0001
10	umet3e	1.0000	±0.0030	1.0015	±0.0006	1.0000	±0.0006	0.9999	±0.0006	0.0001
11	umet3f	1.0000	±0.0030	1.0020	±0.0006	1.0000	±0.0006	1.0014	±0.0006	-0.0014
12	umet3g	1.0000	±0.0030	1.0030	±0.0006	1.0010	±0.0006	1.0021	±0.0007	-0.0010
13	umet14	0.9989	±0.0017	0.9958	±0.0006	0.9946	±0.0006	0.9958	±0.0006	-0.0012
14	umet28	1.0000	±0.0030	1.0024	±0.0006	1.0004	±0.0006	1.0013	±0.0006	-0.0009
15	bigten1	0.9960	±0.0030	1.0069	±0.0005	1.0043	±0.0005	1.0048	±0.0005	-0.0005
16	bigten2	0.9960	±0.0030	1.0049	±0.0005	1.0019	±0.0005	1.0020	±0.0005	-0.0001
17	pumet6	1.0000	±0.0030	1.0043	±0.0007	1.0031	±0.0007	1.0029	±0.0007	0.0001
18	pumet10	1.0000	±0.0018	1.0003	±0.0006	0.9994	±0.0007	0.9993	±0.0006	0.0000
19	pumet20	0.9993	±0.0017	0.9996	±0.0007	0.9974	±0.0007	0.9995	±0.0007	-0.0022

Table 13. Criticality Benchmark Results for Highly Enriched Uranium-Reflected Assemblies (Group 12)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	23umt2a	1.0000	±0.0010	0.9967	±0.0006	0.9959	±0.0006	0.9958	±0.0006	0.0001
2	23umt2b	1.0000	±0.0011	0.9978	±0.0006	0.9987	±0.0006	0.9969	±0.0006	0.0018
3	mixmet1	1.0000	±0.0016	0.9967	±0.0006	0.9963	±0.0006	0.9969	±0.0006	-0.0007
4	mixmet3	0.9993	±0.0016	0.9992	±0.0007	0.9987	±0.0006	0.9979	±0.0006	0.0008

Table 14. Criticality Benchmark Results for Other Assemblies (Group 13)

No.	Filename	Benchmark k_{eff} (A)	STD	ENDF60 (B)	STD	KNE68 with PT (C)	STD	KNE68 w/o PT (D)	STD	Äk (C-D)
1	ieumt1a	0.9989		0.9970	±0.0006	0.9966	±0.0006	0.9968	±0.0006	-0.0002
2	ieumt1b	0.9997		0.9963	±0.0006	0.9977	±0.0006	0.9983	±0.0006	-0.0006
3	ieumt1c	0.9993		0.9991	±0.0006	0.9979	±0.0006	0.9985	±0.0006	-0.0006
4	ieumt1d	1.0002		1.0005	±0.0006	0.9994	±0.0006	0.9981	±0.0006	0.0013
5	mixmet8	0.9920	±0.0063	0.9916	±0.0005	0.9928	±0.0005	0.9934	±0.0005	-0.0007

Table 15. $\div^2$ Difference Between MCNP4C and Benchmark k_{eff}

Benchmark Group	$\div^2$ Difference* (ENDF60)	$\div^2$ Difference (KNE68 with PT)	$\div^2$ Difference (KNE68 w/o PT)
1	1.0686E-04	1.1357E-04	1.2319E-04
2	2.0130E-04	1.6452E-04	1.5776E-04
3	8.2122E-06	2.0389E-05	1.7212E-05
4	7.5198E-06	1.2931E-05	1.7296E-05
5	-	-	-
6	1.7506E-05	1.0466E-05	1.2032E-05
7	8.7389E-05	8.5616E-05	8.1678E-05
8	4.1407E-05	5.4779E-05	5.0209E-05
9	1.6847E-04	1.2094E-03	1.6564E-04
10	3.5323E-05	3.9068E-05	3.2973E-05
11	1.9762E-04	1.4251E-04	1.6252E-04
12	1.3359E-05	1.6552E-05	1.9428E-05
13	7.7763E-06	6.2799E-06	6.8247E-06
Total (w/o Group 9)**	8.9273E-04 (7.2427E-04)	1.8761E-03 (6.6668E-04)	8.4677E-04 (6.8112E-04)

* The $\div^2$ difference between MCNP and the experimental data can be defined as:

$$c^2 = \sum_i \frac{[MCNP(i) - Data(i)]^2}{MCNP(i) + Data(i)}$$

** The values in parentheses are the sum of $\div^2$ differences for all benchmarks except Group 9.