

サンプル計算の概要と実行方法 について

説明内容

- サンプル計算(sample)を実行する上で追加でインストールが必要なもの
 - gnuplot
 - cmake
 - NJOY2016
- sampleの概要
 - sampleでできることと、各ディレクトリの説明
- FRENDYの入力説明
 - 中性子入射のACEファイル生成
 - 熱中性子散乱則(TSL)のACEファイル生成

sampleを実行する上で追加で
インストールするもの

注意条項

- 今回説明する環境
 - Ubuntu (Ubuntu 20.04.1 LTS)
 - Windows subsystem for Linuxを用いて、WindowsにUbuntuをインストールしたものを利用
- コマンドは**緑文字**で記載
- **サーバー管理者がいる場合、以降の操作は必ずサーバー管理者に確認し、サーバー管理者の監督の下で行って下さい**
- FedraやCentOSなど、他のLinuxをご利用の方はapt-getをyumなどに適宜読み替えて下さい

Gnuplotのインストール

- Sample中に断面積を比較するデモがあり、比較結果を作図するのにgnuplotを使用
- Gnuplotのインストール方法
 - `sudo apt-get install gnuplot`
 - インストールの有無を聞かれるので、『Y』を入力
 - インストールが完了するまで数分～十数分必要
- Gnuplotがうまく動かない場合
 - Gnuplotを動かそうとすると、以下のコマンドが出る場合がある
 - `gnuplot: error while loading shared libraries: libQt5Core.so.5: cannot open shared object file: No such file or directory`
 - その際場合は下記のコマンドを入力すれば解決することがある
 - `sudo strip --remove-section=.note.ABI-tag /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libQt5Core.so.5`

NJOY2016のインストール (1/2)

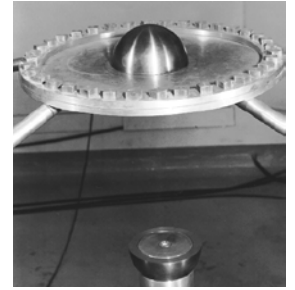
- SampleではFRENDYと合わせてNJOYも実行
- NJOY2016のインストールにはcmakeが必要
 - 他にgcc7、gfortran、pythonが必要
 - Cmakeのインストールコマンドは次の通り
 - `sudo apt-get install cmake`
 - インストールの有無を聞かれるので、『Y』を入力
- NJOY2016の入手方法
 - `git clone https://github.com/njoy/NJOY2016.git`
 - このコマンドを打ったディレクトリに『NJOY2016』が生成
 - Gitコマンドが有効でない場合は事前にGitをインストール
 - `sudo apt-get install git`

NJOY2016のインストール (2/2)

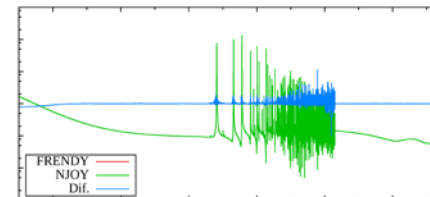
- NJOYのコンパイル方法
 - `cd NJOY2016` (生成したNJOY2016に移動)
 - `mkdir bin` (NJOY2016の直下にbinを作成)
 - `cd bin` (binに移動)
 - `cmake ../` (binディレクトリで実行)
 - `make` (binディレクトリで実行)
 - binディレクトリ中に**njoy**という実行ファイルが生成
- 参考HP
 - <https://github.com/njoy/NJOY2016>
 - <http://www.njoy21.io/Build/index.html>

sampleの概要

sampleで実施すること



- MCNPを用いたGodiva (HMF-001)の解析
 - JENDL-4.0からGodivaの解析に必要なU-235、U-238、O-16、N-14を処理し、ACEファイルを生成
 - 参考として、熱中性子散乱則の処理の例として、HinH2Oも処理
 - FRENDYだけでなく、NJOYでも処理を実施
 - 作成したACEファイルを用いてMCNP用の断面積ライブラリを生成
 - 作成したACEファイル、XS DIRファイルをまとめ、MCNP用の断面積ライブラリを作成
- FRENDYの応用例の紹介
 - FRENDYのクラスを用いたACE、PENDF中の断面積の比較
 - FRENDYとNJOYの処理結果を比較し、gnuplotで作図
 - ACEファイルの編集ツールの利用



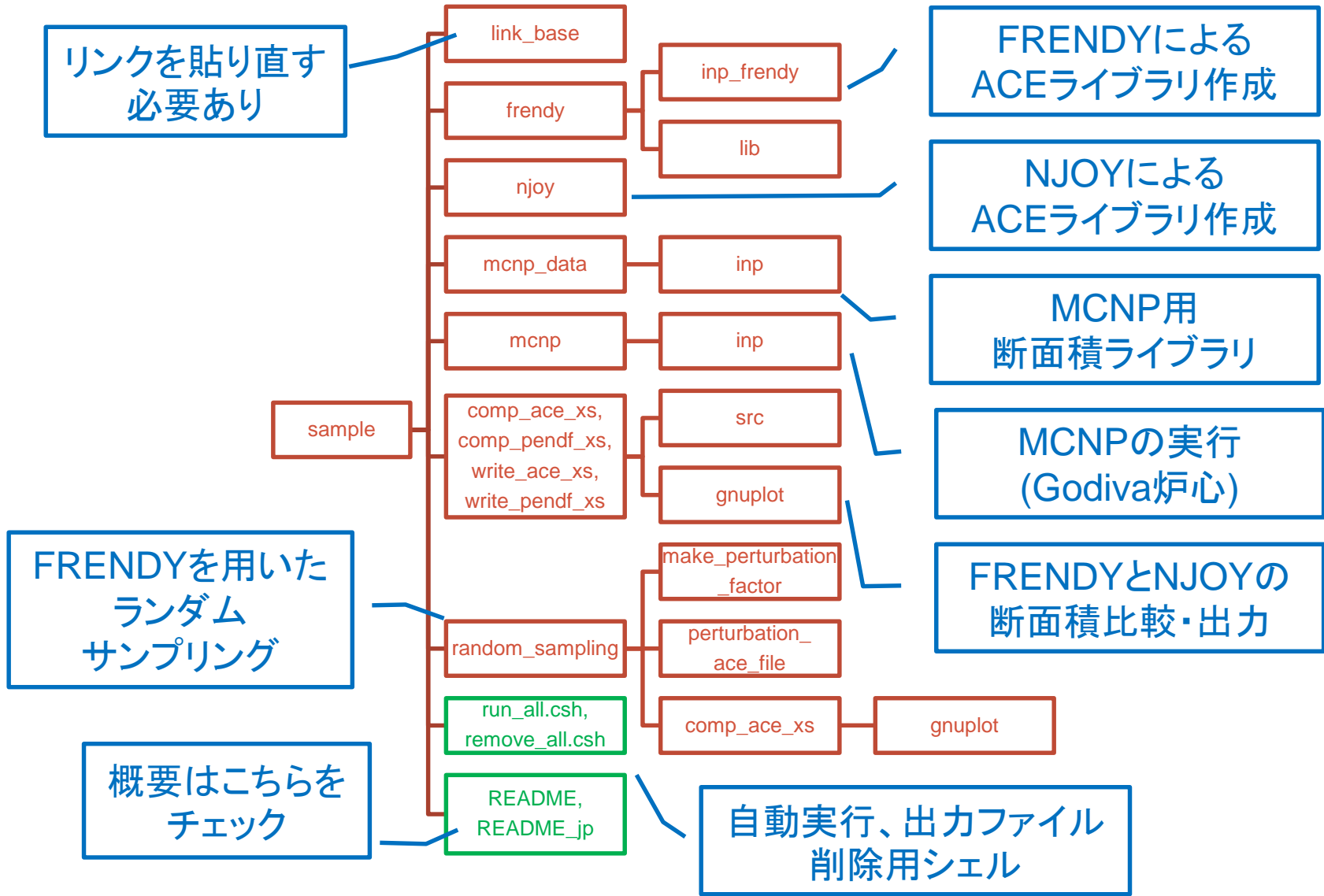
sampleで出来ること

- sampleでは以下の処理を通じ、核データ処理から放射線輸送計算に至る流れを学ぶことができる
 - FRENDYを用いたACEファイルの作成とNJOY用入力の作成
 - NJOYを用いたACEファイルの作成
 - FRENDYとNJOYの処理結果(断面積)の比較および出力
 - ACEファイルでの比較及びPENDFファイルでの比較
 - 各核種のACEファイルをまとめたMCNP用の断面積ライブラリの作成
 - MCNPの実行 (Godiva炉心)
 - FRENDYを用いたランダムサンプリング
 - ACEファイルの修正
- 全部の処理を実行すると、1.5～2時間程度必要

sampleを実行する上での注意点

- 事前にFRENDYをコンパイルする必要がある
 - sampleでは以下の実行ファイルが必要
 - コンパイル用のコマンドも併記
 - frendy/main/frendy.exe
 - `cd frendy/main`
 - `make`
 - sample/sample/ace_data_collector.exe
 - `cd sample/tool`
 - `csh ./compile_all.csh`
 - tools/make_perturbation_factor/make_perturbation_factor.exe
 - `cd tools/make_perturbation_factor`
 - `make`
 - tools/perturbation_ace_file/perturbation_ace_file.exe
 - `cd tools/perturbation_ace_file`
 - `make`

sampleのディレクトリ構造



sampleを実行する前に

- sampleではFRENDYやNJOY、MCNPなどを利用
 - これらを利用するため、『**sample/link_base**』にリンクを貼る必要がある
- リンクが必要なディレクトリ、プログラム
 - frendy_dir
 - FRENDYのトップディレクトリ(frendy_yyyymmdd)
 - yyyymmddは日付
 - njoy
 - NJOYの実行ファイル
 - mcnp6
 - MCNPの実行ファイル

FRENDYを用いたACEファイルの作成

- sample/frendyで実施
 - FRENDYの入力: inp_frendy
 - ~.datがFRENDYの入力、~.nはNJOY入力作成用(次ページ参照)
 - 入力の説明は[FRENDYの入力説明](#)で詳しく解説
 - NJOYの処理と合わせるため、ENDFをtape20、PENDFをtape24 & tape27、ACEをtape30としている
 - 評価済み核データファイル: lib
 - FRENDYでのACEファイルの作成: run_frendy.csh
- 生成されるディレクトリ
 - ace: ACEファイルをまとめたディレクトリ
 - pendf: PENDFファイルをまとめたディレクトリ
- 処理するファイル
 - U-235、U-238、N-14、O-16、HinH2O
 - 全てを処理するのに20~30分必要
 - 以降のMCNPの解析ではN-14、O-16、U-235、U-238を使用

FRENDYを用いたNJOY用入力の作成

- sample/frendyで実施
 - FRENDYの入力: inp_frendy
 - ~.nがNJOY入力作成用
 - 評価済み核データファイル: lib
 - FRENDYでのNJOY入力の作成: make_njoy_input.csh
- 生成されるディレクトリ
 - inp_njoy
 - NJOYの入力をまとめたディレクトリ

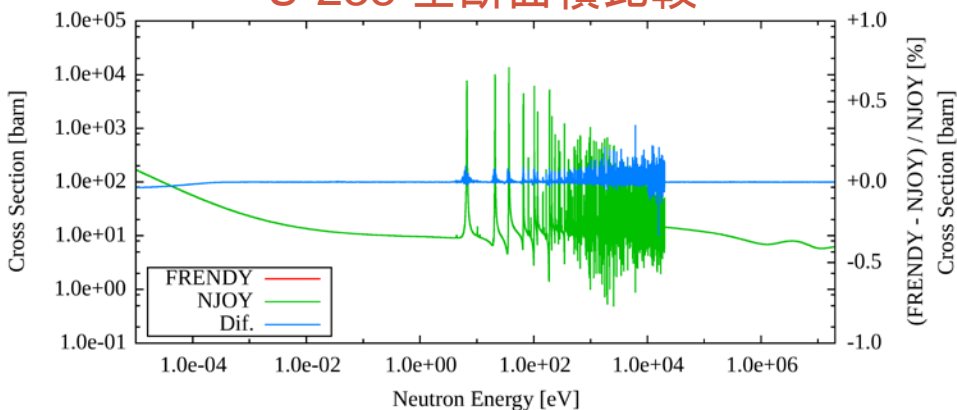
NJOYを用いたACEファイルの作成

- sample/njoyで実施
 - FRENDYで作成したNJOY入力を利用
 - sample/frendy/inp_njoy
 - NJOYでのACEファイルの作成 : run_njoy.csh
- 生成されるディレクトリ
 - ace、pendf : FRENDYと同じ
 - out : NJOYの出力ファイルをまとめたディレクトリ
- 処理するファイル
 - FRENDYと同じくHinH2O、N-14、O-16、U-235、U-238
 - 全てを処理するのに50～70分必要

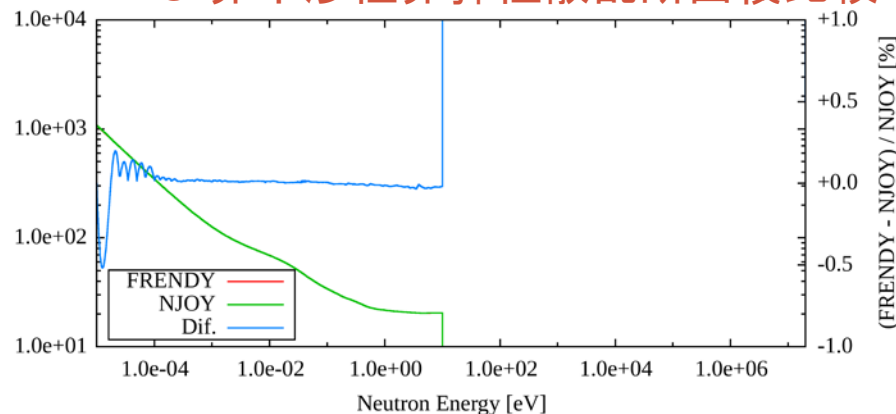
FRENDYとNJOYの処理結果(断面積)比較

- FRENDYでのENDF、ACEの編集のサンプルとして、断面積を比較するプログラムを用意
 - sample/comp_ace_xs
 - ACEファイル中の全反応断面積を比較し、gnuplotで作図
 - sample/comp_pendf_xs
 - PENDFファイル中の全反応断面積を比較し、gnuplotで作図
- ソースファイルはsrcディレクトリに保存
 - sample/comp_ace_xs/src, sample/comp_pendf_xs/src
- 実行方法は実行シェルをご確認下さい
 - run_comp_ace.csh、run_comp_pendf.csh

U-238 全断面積比較



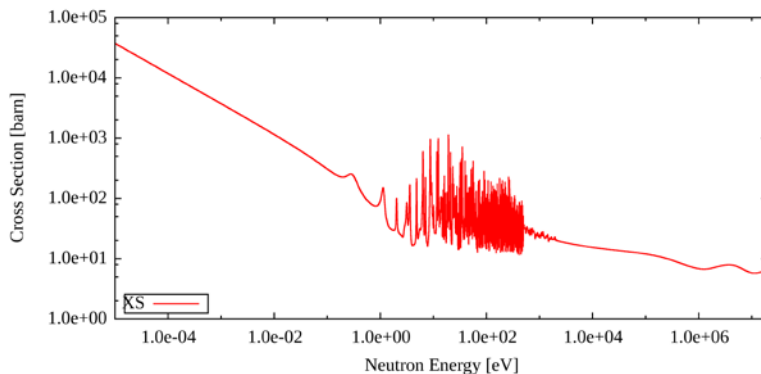
HinH2O 非干渉性非弾性散乱断面積比較



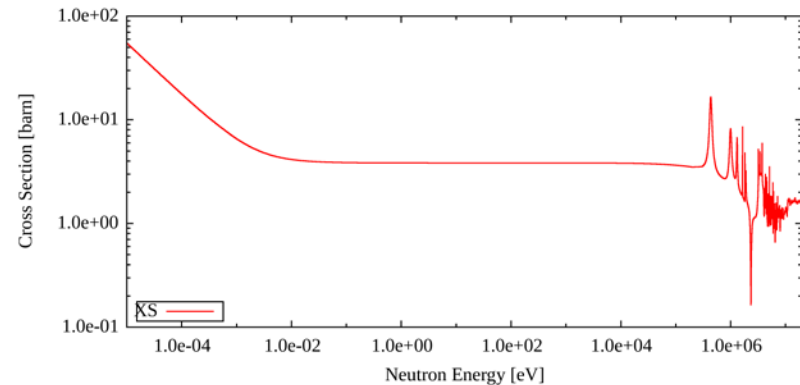
FRENDYの処理結果(断面積)出力

- FRENDYでのENDFの編集のサンプルとして、断面積を出力するプログラムを用意
 - sample/write_ace_xs
 - ACEファイル中の全反応断面積を抜き出し、gnuplotで作図
 - sample/write_pendf_xs
 - PENDFファイル中の全反応断面積を抜き出し、gnuplotで作図
- ソースファイルはsrcディレクトリに保存
 - Sample/write_ace_xs/src, sample/write_pendf_xs/src
- 実行方法は実行シェルをご確認下さい
 - run_write_ace_xs.csh、run_write_pendf_xs.csh

U-235全断面積



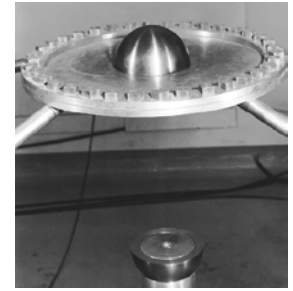
O-16全断面積



MCNP用の断面積ライブラリの作成

- sample/mcnp_dataで実施
 - FRENDY及びNJOYで作成したACEファイルをまとめ、MCNP用の断面積ライブラリを作成
 - 個々のACEファイルを一つにまとめたACEファイル
 - 断面積ライブラリに必要なatomic weight ratioを追加したXS DIRファイル
 - 入力ファイル: inp/~.inp
 - 実行シェル: run_ace_data_collector.csh
- 生成されるファイル・ディレクトリ
 - ace_f/j40a00fa : FRENDY用ACEファイル
 - xsdir.j40a00f.mod : FRENDY用XS DIRファイル
 - ace_n/j40a00na : NJOY用ACEファイル
 - xsdir.j40a00n.mod: NJOY用XS DIRファイル

MCNPの実行 (Godiva炉心)



- sample/mcnpで実施
 - mcnp_dataで作成した断面積ライブラリを使用
 - 入力ファイル: inp/hmf001.i、inp/hmf001_no_ptable.i
 - 非分離共鳴領域の自己遮蔽を考慮するのに用いる確率テーブルを適用した場合と適用していない場合の2ケースの入力を用意
 - 簡易化のため、U-234は削除
 - 実行シェル: run_all.csh
 - MCNPの実行し、keffをresult_keff.logへ出力
- 生成されるディレクトリ
 - out: 各計算結果をまとめたディレクトリ
 - ~_f~.outがFRENDYで作成した断面積ライブラリを用いた結果
 - ~_n~.outがNJOYで作成した断面積ライブラリを用いた結果

FRENDYを用いたランダムサンプリング

- sample/random_samplingで実施
 - make_perturbation_factorにおいて共分散データ (1001_MT_102_2.csv)からACEファイル中の断面積の変動量を決定
 - perturbation_ace_fileにおいてmake_perturbation_factorで設定した断面積の変動量を使ってACEファイルを修正
 - comp_ace_xsで元のACEファイルと修正したACEファイルを比較し、gnuplotで作図
- make_perturbation_factorとperturbation_ace_fileについてはFRENDYのtool中のサンプルと同じ

全計算を自動で実行したい場合

- sampleディレクトリ直下のrun_all.cshシェルを実行すればOK
 - `csch ./run_all.csh`
- 処理の過程で生成されたファイル、ディレクトリを削除する場合はディレクトリ直下のremove_all.cshを実行すればOK
 - `csch ./remove_all.csh`
 - run_all.cshを実行すると、最初にremove_all.cshを実行し、以前のファイル・ディレクトリを削除する

FRENDYの入力説明

[FRENDYを用いたACEファイルの作成に戻る](#)

FRENDY/NJOYの 入力について

- FRENDYは『パラメータ名』と『パラメータ』で構成
 - 一目で各入力値の意味が分かる
 - コメント文はC/C++と同じ
 - //以降もしくは /* ~ */
- NJOYは数値データのみ
 - コメントを入れないと何のデータか分からない
 - “/” 以降がコメント
 - MAT番号など、現在の核データファイルでは不要な入力データがある
- FRENDYは入力の簡易化により、ユーザーの利便性向上に貢献

【FRENDYの入力例】

```
ace_fast_mode // Processing mode
nucl_file_name U235.dat
ace_file_name U235.ace
temp          296.0
```

【NJOYの入力例】

```
reconr / command
20 21 / input(tape20), output(tape21)
'pendf tape for JENDL-4 U235' / identifier for PENDF
9228 / mat
1.00e-03 0.00 / err, temp
0 /
broadr / command
20 21 22 / endf, pendl(in), pendl(out)
9228 1 / mat, temp no
1.00e-03 -5.0E+2 / err, thnmax
296.0 / temp
0 /
gaspr / command
20 22 23 / endf, pendl(in), pendl(out)
purr / command
20 23 24 / endf, pendl(in), pendl(out)
9228 1 10 20 100 0 / mat, temp no, sig no, bin no, lad no
296.0 / temp
1E10 1E4 1E3 300 100 30 10 1 0.1 1.0E-5 / sig zero
0 /
acer / command
20 24 0 30 31 / nendl, npend, ngend, nace, ndir
1 1 1 0.00 / iopt(fast), iprint(max), itype, suffix
'ACE file for JENDL-4 U235' / descriptive character
9228 296.0 / mat, temp
1 / newfor(yes)
/ thin(1), thin(2), thin(3)
/
stop /
```


FRENDYの入力の基本

- 一行目に何の処理をするかを記載
 - ace_fast_mode: 中性子入射のACEファイル生成
 - ace_tsl_mode : 熱中性子散乱則(TSL)のACEファイル生成
 - ace_dosi_mode: 放射化(Dosimetry)のACEファイル生成
- 二行目以降は『パラメータ名』と『パラメータ』を記載
 - 順番は自由
 - 複数のデータ(配列)を入れる場合は括弧を使う
 - (1.0 2.0 3.0)と一行で書いてもいいし、複数行に渡ってもOK
- コメント文はC/C++と同じ
 - //以降か、/*と*/で囲まれた領域

FRENDYの基本的な入力パラメータ

- 必須のパラメータ
 - `nucl_file_name` : 評価済み核データファイル名
 - `nucl_file_name_tsl`: 評価済み核データファイル名 (TSLのみ)
- 入力を推奨するパラメータ
 - `temp` : 温度(K)、デフォルトは293.6K
 - `ace_file_name` : ACEファイル名
 - `ace_dir_file_name`: XSDIRファイル名
 - `suffix_id` : ACEファイルのsuffix番号
 - `ace_label_data` : ACEファイルの一行目に出力される説明文
 - `thermal_za_id_name`: MCNPの入力で指定する物質名 (TSLのみ)
- 必要に応じて追加するパラメータ
 - `write_pendf_probability_table`: PURR後のPENDFファイルの出力
 - `write_pendf_tsl`: THERMR後のPENDFファイルの出力 (TSLのみ)
 - NJOYとの比較用として活用可能

FRENDYの入力例 (中性子入射)

```

ace_fast_mode // Calculation mode
nucl_file_name    ../lib/U235.dat
temp /* [K] */    300.0
ace_file_name     ./ace/U235.ace
ace_dir_file_name ./xsd/U235.xsdir
ace_label_data    "U-235 from JENDL-4.0"
suffix_id        0.50
    
```

必ず1行目に記載
(他のパラメータの順番は自由)

ファイル名は相対パスでも
絶対パスでもOK

● 処理する核種・条件一覧

- 評価済み核データ名: ../lib/U235.dat
- 温度: 300.0 [K]
- ACEファイル名: ./ace/U235.ace
- XSDIRファイル名: ./xsd/U235.xsdir
- ACEファイル中の説明文: U-235 from JENDL-4.0
- Suffix番号: 0.50

FRENDYの入力変更例① (中性子入射)

- 以下のように処理条件を変えると入力はどうなるか？
 - 評価済み核データ名: `./j40/lib/Fe056.dat`
 - 温度: `550.0 [K]`
 - ACEファイル名: `./j40/ace/Fe056.ace`
 - XSDIRファイル名: `./j40/xsd/Fe056.xsdir`
 - ACEファイル中の説明文: `Fe-056 from JENDL-4.0`
 - Suffix番号: `0.10`
 - PENDFファイルの出力 有 (`./j40/pendf/Fe056.pendf`)

入力例は次のスライドに

FRENDYの入力変更例② (中性子入射)

処理条件の変更に伴い、
入力を修正

```

ace_fast_mode // Calculation mode
nucl_file_name      ./j40/lib/Fe056.dat
temp /* [K] */      550.0
ace_file_name       ./j40/ace/Fe056.ace
ace_dir_file_name   ./j40/xsd/Fe056.xsdir
ace_label_data      'Fe-056 from JENDL-4.0'
suffix_id           0.10
write PENDF_probability_table ./j40/PENDF/Fe056.PENDF
    
```

文字列は
"～"でも
'～'でもOK

PENDFファイルの出力を追加

FRENDYの入力例 (熱中性子散乱則)

```

ace_tsl_mode // Calculation mode
nucl_file_name      ../lib/H001.dat
nucl_file_name_tsl  ../lib_sab/01_h_in_h2o.txt
ace_label_data      "HinH2O from JENDL-4.0"
temp                296.0
ace_file_name       ./ace_sab/lwtr.ace
ace_dir_file_name   ./xsd_sab/lwtr.xsdir
suffix_id           0.50
thermal_za_id_name  "lwtr"
    
```

必ず1行目に記載
(他のパラメータの順番は自由)

nucl_file_name_tslで用意された
温度点のみしか処理できない

MCNPの入力で指定する物質名
(6文字以内)

- 処理する核種・条件一覧 (※前頁で説明したのは除外)
 - 評価済み核データ名(TSL): ../lib_sab/01_h_in_h2o.txt
 - MCNPの入力で指定する物質名: lwtr
 - lwtr: light water
 - 物質名ライブラリ作成者によって異なり、hinh2oとする場合も

FRENDYの入力変更例① (TSL)

- 以下のように処理条件を変えると入力はどうなるか？
 - 評価済み核データ名: `./j40/lib/C000.dat`
 - 評価済み核データ名(TSL): `./j40/lib/31_graphite.tx`
 - 温度: `500.0 [K]`
 - ACEファイル名: `./j40/ace/graphite.ace`
 - XSDIRファイル名: `./j40/xsd/graphite.xsdir`
 - ACEファイル中の説明文: `Graphite from JENDL-4.0`
 - Suffix番号: `0.10`
 - MCNPの入力で指定する物質名: `grph`
 - PENDFファイルの出力 有 (`./j40/pendf/graphite.pendf`)

入力例は次のスライドに

FRENDYの入力変更例② (TSL)

処理条件の変更に伴い、
入力を修正

```
ace_tsl_mode // Calculation mode
nucl_file_name      ./j40/lib/C000.dat
nucl_file_name_tsl  ../lib_sab/31_graphite.txt
temp /* [K] */      500.0
ace_file_name       ./j40/ace/graphite.ace
ace_dir_file_name   ./j40/xsd/graphite.xsdir
ace_label_data      'Graphite from JENDL-4.0'
suffix_id           0.10
thermal_za_id_name  'grph'
write_pendf_tsl     ./j40/pendf/graphite.pendf
```

文字列は
"~"でも
'~'でもOK

PENDFファイルの出力を追加