

# 演習の概要と実行方法について

---

# 説明内容

- 演習(frendy\_exercise)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
- frendy\_exerciseの概要
  - frendy\_exerciseで学べることと、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

frendy\_exercise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

- frendy\_exercise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
    - CentOSの場合は`sudo yum install gnuplot`
- gnuplotがうまく動かない場合
  - gnuplotを動かそうとすると、作図がうまくいかず、以下のメッセージが表示される場合がある
    - 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)

- frendy\_exercise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
    - CentOSの場合、デフォルトのバージョンではNJOY2016のコンパイル条件を満たさないことが多いので、devtoolsetを利用することが望ましい
      - ① `sudo yum install centos-release-scl`
      - ② `sudo yum install devtoolset-9`
      - ③ `scl enable devtoolset-9 bash`
  - 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
      - 場合によってはCMake3を使う場合があり、その場合は以下の通り
        - `sudo apt-get install cmake3`
- 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)

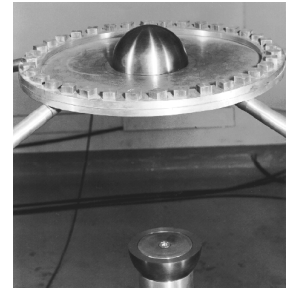
- NJOYのコンパイル方法
  - `cd NJOY2016` (生成したNJOY2016に移動)
  - `mkdir bin` (NJOY2016の直下にbinを作成)
  - `cd bin` (binに移動)
  - `cmake ./` (binディレクトリで実行)
    - Cmakeのバージョンが低いとエラーが出た場合、cmake3とすればうまく行く場合がある
    - デフォルトで、Fortranのコンパイラをf95で行おうとしており、f95がない場合にうまくMakefileが生成されない場合がある
    - この場合は"`ln -s /usr/bin/gfortran /usr/bin/f95`"のようにリンクを作成する必要がある
    - CentOSでdevtoolsetを使う場合は以下の通り(devtoolsetのバージョンは要変更)
      - `ln -s /opt/rh/devtoolset-9/root/usr/bin/gfortran /opt/rh/devtoolset-9/root/usr/bin/f95`
  - `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>

# frendy\_exerciseの概要

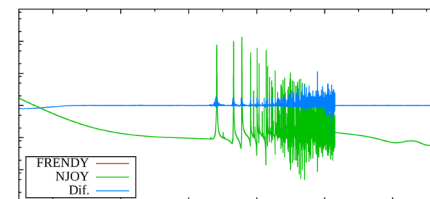
---



# frendy\_exercise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



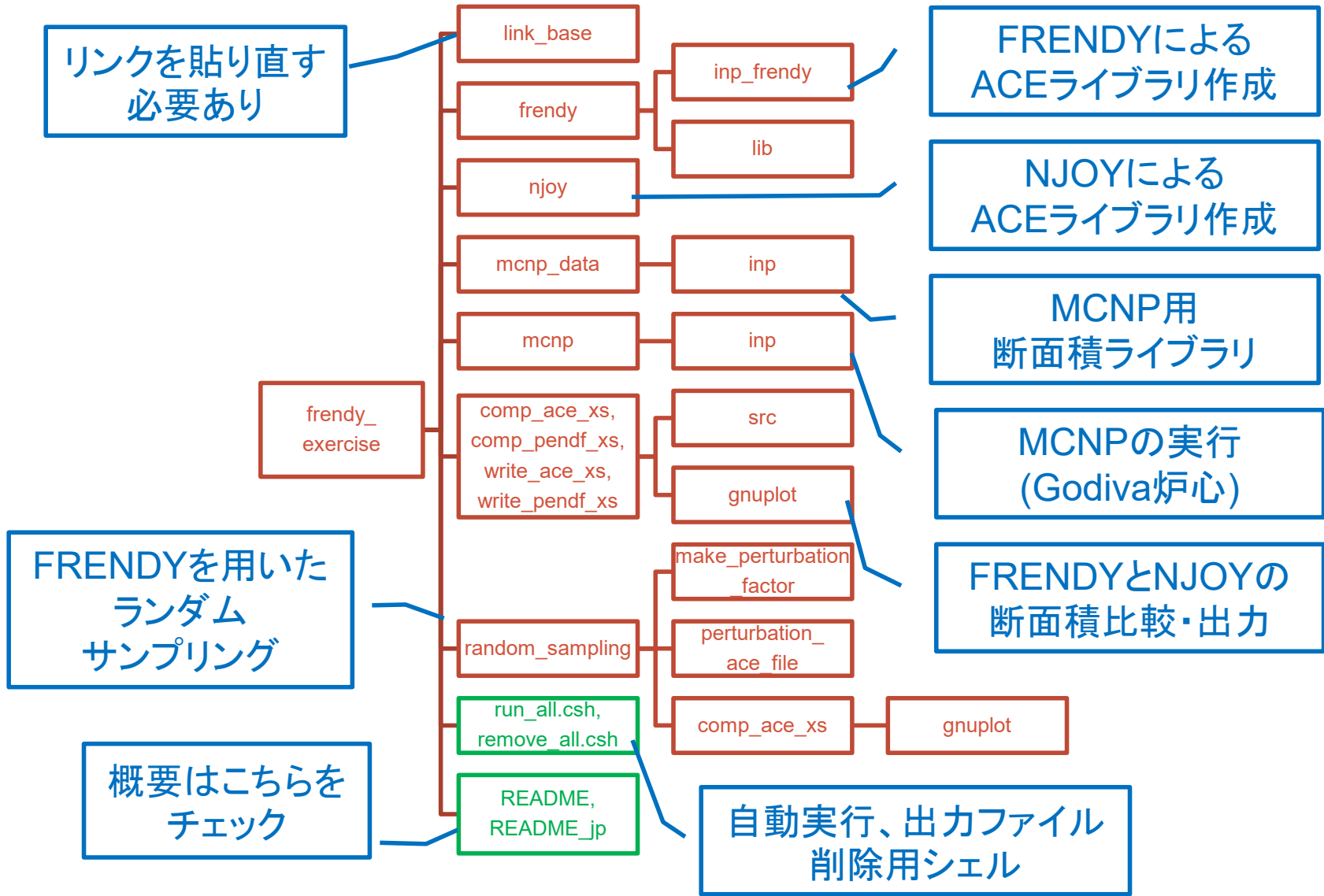
# frendy\_exerciseで学ぶこと

- frendy\_exercise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
  - 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

# frendy\_exercise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
  - frendy\_exercise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`

# frendy\_exerciseのディレクトリ構造



# frendy\_exerciseを実行する前に

- frendy\_exerciseではFRENDYやNJOY、MCNPなどを利用
  - これらを利用するため、『frendy\_exercise/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

- frendy\_exercise/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

- frendy\_exercise/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

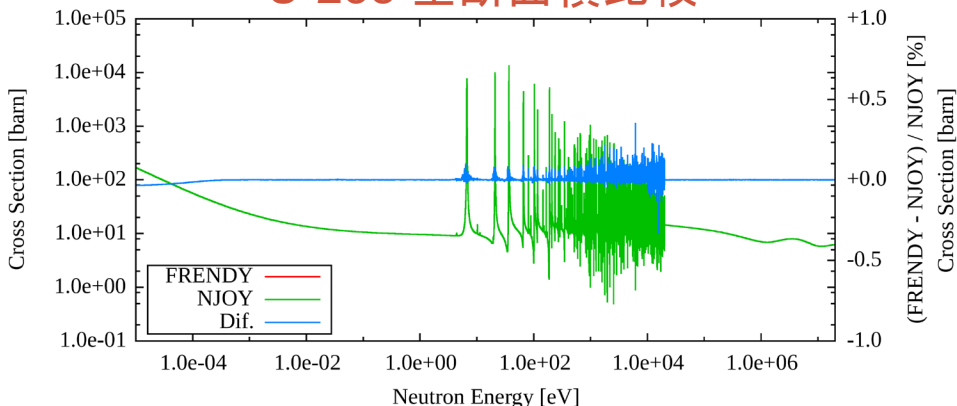
- frendy\_exercise/njoyで実施
  - FRENDYで作成したNJOY入力を利用
    - frendy\_exercise/frendy/inp\_njoy
  - NJOYでのACEファイルの作成: run\_njoy.csh
- 生成されるディレクトリ
  - ace、pendf: FRENDYと同じ
  - out: NJOYの出力ファイルをまとめたディレクトリ
- 処理するファイル
  - FRENDYと同じくHinH2O、N-14、O-16、U-235、U-238
    - 全てを処理するのに50～70分必要



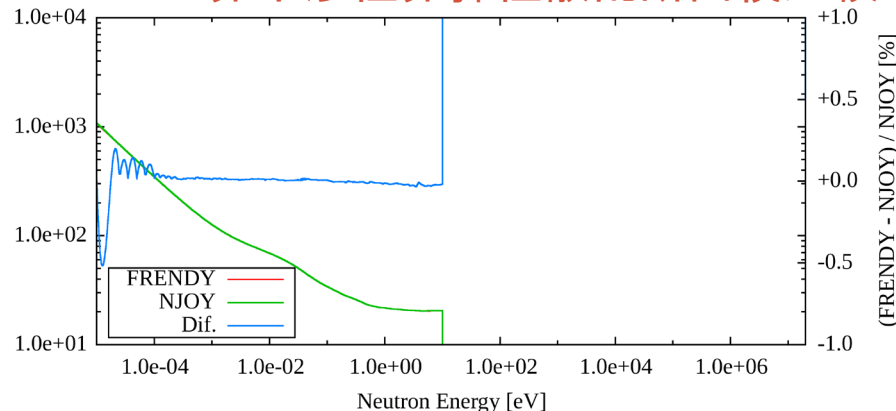
# FRENDYとNJOYの処理結果(断面積)比較

- 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
  - frendy\_exercise/comp\_ace\_xs
    - ACEファイル中の全反応断面積を比較し、gnuplotで作図
  - frendy\_exercise/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
  - frendy\_exercise/comp\_ace\_xs/src, frendy\_exercise/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



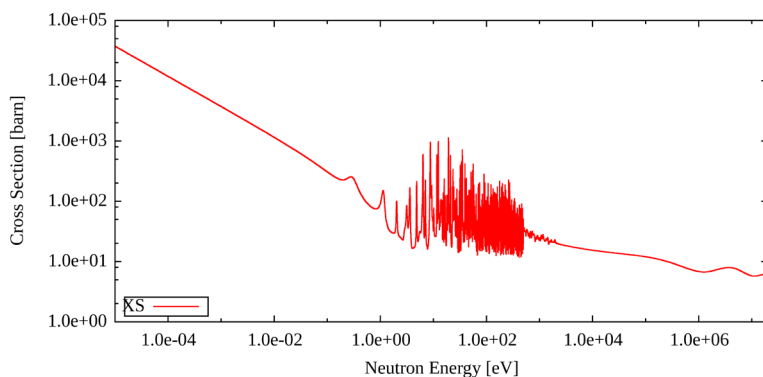
## HinH2O 非干渉性非弾性散乱断面積比較



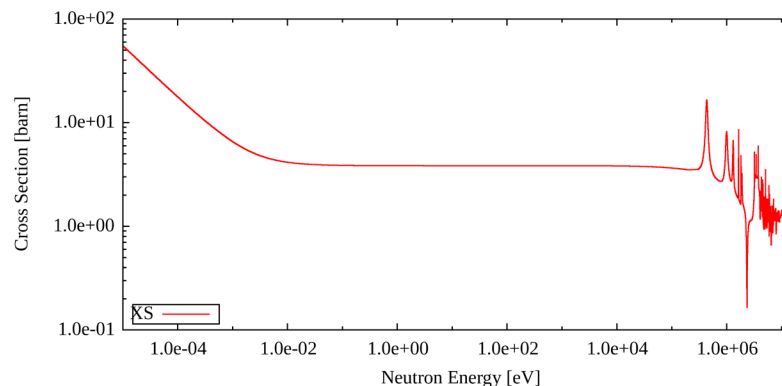
# FRENDYの処理結果(断面積)出力

- 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
  - frendy\_exercise/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
  - frendy\_exercise/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
  - frendy\_exercise/write\_ace\_xs/src, frendy\_exercise/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



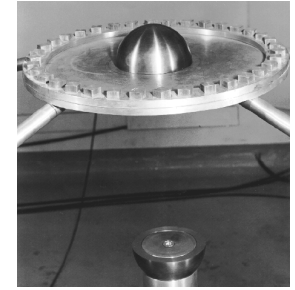
## O-16全断面積



# MCNP用の断面積ライブラリの作成

- frendy\_exercise/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)



- frendy\_exercise/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

- frendy\_exercise/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

- frendy\_exerciseディレクトリ直下のrun\_all.cshシェルを実行すればOK
  - `csh ./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
  - `csh ./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