

XSDIRの読み方と修正方法

XSDIRとは？

- ACEファイルの位置とACEファイル中の情報をまとめたリスト
- MCNPやPHITSの入力では断面積ライブラリを核種ID、物質IDで指定
 - 1001.50c、92235.10c、lwtr.10tなど
- XSDIRでMCNP/PHITSで指定した核種ID、物質IDのACEファイルがどこにあるかを指定
 - ちなみにMVPではneutron.art.indexがXSDIRに該当
 - MVPのneutron.art.indexでは核種ID、物質IDとファイル名のみなのに対し、XSDIRは物性値やデータ数などが必要

XSDIRの例

原子核の質量/中性子の質量
(核データのAWR=原子核の質量/中性子の質量に相当)

atomic weight ratios

0001	1.000000	0001	1.000000		
1000	0.99931697	1001	0.99916733	1002	1.99679968
2000	3.96821760	2003	2.99012018	2004	3.96821897
3000	6.88131188	3004	3.99259010	3005	4.96947769
		3006	5.96345000	3007	6.95573370

19/10/2016

directory

ここ以降がACEファイルの場所の指定

1001.80c	0.999167	j40/H001.ace	0	1	4	17969	0	0	2.5301E-8
2003.80c	2.989032	j40/He003.ace	0	1	4	10004	0	0	2.5301E-8
92235.80c	233.0248	j40/U235.ace	0	1	4	837481	0	0	2.5301E-8 ptable
92235.70c	233.0248	j40f01j	0	1	1238702	832644	0	0	2.5301E-08 ptable
92235.71c	233.0248	j40f01j	0	1	1446875	689688	0	0	5.1704E-08 ptable
lwtr.20t	0.999167	j40tsl/lwtr.20t	0	1	1	1228849	0	0	2.530E-08
lwtr.21t	0.999167	j40tsl/lwtr.21t	0	1	1	1201502	0	0	3.016E-08
lwtr.22t	0.999167	j40tsl/lwtr.22t	0	1	1	1165553	0	0	3.447E-08



核種/物質ID.suffix番号データ種別 AWR ファイル名 0 1 データ位置(始点/総データ数) 0 0 温度[MeV] 確率テーブルの有無

XSDIRの特徴

- 複数の温度点や複数のライブラリを一つのXSDIRに入れることが可能
 - suffix番号を変えることでMCNP上では異なる核種と認識
 - .00～.99まで100種類の同一核種/物質IDを一つのXSDIRに
 - 同一核種/物質ID、同一suffix番号のデータが複数あるとMCNP上では区別できにくいので注意
 - どのsuffix番号がどの温度点・ライブラリに相当するかは作成者によって異なるので、ACEライブラリのマニュアルを読んで確認すること
 - 核種/物質名の最後の一文字(データ種別)はどのようなデータなのかを示す
 - c: 中性子入射、t: 熱中性子散乱則、y: dosimetryなど

HinH2O U-235

```

92235.80c 233.0248 j40/U235.ace 0 1 1 837481 0 0 2.5301E-8 ptable
92235.70c 233.0248 j40f01j 0 1 1238702 832644 0 0 2.5301E-08 ptable
92235.71c 233.0248 j40f01j 0 1 1446875 689688 0 0 5.1704E-08 ptable
lwtr.20t 0.999167 j40tsl/lwtr.20t 0 1 1 1228849 0 0 2.530E-08
lwtr.21t 0.999167 j40tsl/lwtr.21t 0 1 1 1201502 0 0 3.016E-08
lwtr.22t 0.999167 j40tsl/lwtr.22t 0 1 1 1165553 0 0 3.447E-08
    
```

MCNPでの核種/物質名の扱い

- 92235.80cとsuffix番号まで書く場合と、92235と核種/物質IDしか書かない場合がある
 - suffix番号まで書く場合、指定したsuffix番号のデータを読む
 - 核種/物質IDのみの場合、suffix番号に関わらず、最初に見つけた核種/物質IDのデータを読む
 - suffix番号を省略する場合、意図した温度点・ライブラリを読んでいるかをきちんと確認することが重要

MCNPで92235とした場合、92235.80cを読む

```

92235.80c 233.0248 j40/U235.ace 0 1 1 837481 0 0 2.5301E-8 ptable
92235.70c 233.0248 j40f01j 0 1 1238702 832644 0 0 2.5301E-08 ptable
92235.71c 233.0248 j40f01j 0 1 1446875 689688 0 0 5.1704E-08 ptable
    
```

suffix番号が全て.80の場合、MCNPでは区別できない (最初のデータを読み込む)

```

92235.80c 233.0248 j40/U235.ace 0 1 1 837481 0 0 2.5301E-8 ptable
92235.80c 233.0248 j40f01j 0 1 1238702 832644 0 0 2.5301E-08 ptable
92235.80c 233.0248 j40f01j 0 1 1446875 689688 0 0 5.1704E-08 ptable
    
```

suffix番号や物質名の変え方

- suffix番号や物質名を変えたいというニーズは多い
 - suffix番号が重複する、物質名がMCNPの入力と違うなど
- xsdirとACEファイルの一行目の最初のデータを修正
 - それ以外のデータを書き換えなければMCNPやPHITSへの影響はない
 - 物質名を書き換える場合、文字の位置に注意!!
 - 文字数が変わる場合、二つ目のデータのスタート位置が変わらないようにスペースで調整すること

```
92235.71c 233.0248 j40f01j 0 1 1446875 689688 0 0 5.1704E-08 ptable  
lwtr.20t 0.999167 j40tsl/lwtr.20t 0 1 1 1228849 0 0 2.530E-08
```

```
92235.71c 233.024800 5.1704e-08 20171005  
U235 from JENDL-4 mat9228  
0 0 0 0 0 0 0 0
```

```
lwtr.20t 0.999167 2.5300e-08 20161017  
01_h_in_h2o from JENDL-4 mat 125  
1001 0 0 0 0 0 0 0
```

ACEファイル
の1~3行目

【参考】データ種別一覧

- 核種/物質名の最後の一字 (ZAID suffix) のリストは次の通り

ZAID suffix	格納されているデータ種別
c	中性子入射(連続エネルギー)
t	熱中性子散乱則
y	dosimetry
p	photoatomic
u	photonuclear
r	電子入射
h	陽子入射
o	重水素入射
r	三重水素入射
s	He-3入射
a	α粒子入射
d	中性子入射(離散エネルギー)
m	多群中性子-光子結合ライブラリ(中性子)
g	多群中性子-光子結合ライブラリ(光子)

参考文献
 “MCNP USER’S MANUAL
 Code Version 6.2,”
 LA-UR-17-29981

XSDIRに記載されている情報

- XSDIRはatomic weight ratiosとdirectoryの二つの領域に分けられる
- atomic weight ratios
 - 各核種の原子核の質量/中性子の質量を記載したリスト
 - 配布されているライブラリ中のデータや、下記のWebサイトのものを利用することを推奨
 - <https://nucleardata.lanl.gov/ACE/install.html#AWR>
 - 評価済み核データ中のAWRに相当するが、これらのデータの方がAWRに比べて有効桁数が多い
- directory
 - それぞれの核種/物質IDのACEファイルがどこにあるかを示す

92235.70c 233.0248 j40f01j 0 1 1238702 832644 0 0 2.5301E-08 ptable
 核種/物質ID.suffix番号データ種別 AWR ファイル名 0 1 データ位置(始点/総データ数) 0 0 温度[MeV] 確率テーブルの有無

directoryに記載されている情報

- ACEファイルのディレクトリ情報は11個の情報で構成
 - ① 核種/物質名 (10文字以内)
 - ② Atomic weight ratio (AWR)
 - ③ ファイル名 (60文字以内)
 - ④ ディレクトリパス (70文字以内)
 - ⑤ ACEファイルの形式 (1:テキスト/2:バイナリ)
 - ⑥ ACEファイルの開始行
 - ⑦ ACEファイルの総データ数
 - ⑧、⑨ バイナリデータのみで使用
 - ⑩ 温度 [MeV]
 - ⑪ 確率テーブルの有無

92235.70c 233.0248 j40f01j 0 1 1238702 832644 0 0 2.5301E-08 ptable

- これらの内、①、②、⑤～⑪はACEファイル作成時に生成されるXSDIRに記載
 - ユーザーが修正するのは主に③と④
 - あとは①の物質IDとsuffix番号くらい

XSDIRを編集する際の注意点

- 一行当たりの文字数の最大は80文字
 - 80文字を超える場合は、末尾に『+』を入れ、次の行に記載する必要がある

```
92235.80c 233.0248 j40/rev1/U235.ace 0 1 1 837481 0 0 2.5301E-8 +  
ptable
```

- ACEファイルのxsdirからの相対パスは以下のようになる
 - ディレクトリパス/ファイル名
- ディレクトリパスを書かず、ファイル名のみとすることが多い
 - その場合、ディレクトリパスは『0』とする

生成したACEファイルのXSDIRへの追加

- XSDIRはACEファイル生成時に同時に自動作成
 - ファイル名はFRENDYのace_dif_file_name(デフォルトは～.ace.dir)、NJOYのndif(ACERのcard 1)で指定
- 自動作成されたXSDIRをMCNPで使うにはXSDIRにコピーする必要がある
 - suffix番号(～.80cなど)が競合しないこと、物質番号(lwtrなど)がMCNPの入力で使われているものと一致することを確認
 - 自動作成されたXSDIRのfilenameとrouteを書き換える
 - 基本的にはfilenameに相対パスのACEファイル名を、routeに0を入れる
 - XSDIRの修正後、一行当たりの文字数が80文字以下であることを確認

【FRENDY/NJOYで自動作成されたXSDIRの例】

```
92235.80c 233.048 filename route 1 1 837481 0 0 2.585E-8 ptable
lwtr.20t 0.999167 filename route 1 1 2431237 0 0 2.585E-8
```

生成したACEファイルのXSDIRへの追加例

【FRENDY/NJOYで自動作成されるXSDIRの例】

```
92235.80c 233.048 filename route 1 1 837481 0 0 2.585E-8 ptable
lwtr.20t 0.999167 filename route 1 1 2431237 0 0 2.585E-8
```



【XSDIRに追加した例】

```
92235.80c 233.048 filename route 1 1 837481 0 0 2.5301E-8 ptable
92235.70c 233.048 filename route 1 1 837481 0 0 2.5301E-08 ptable
92235.71c 233.0248 j40tsl/lwtr.21t 0 1 1440075 009000 0 0 5.1704E-08 ptable
92235.60c 233.048 mod/u235.ace 0 1 1 837481 0 0 2.585E-8 +
ptable
lwtr.20t 0.999167 j40tsl/lwtr.20t 0 1 1 1201502 0 0 3.016E-08
lwtr.21t 0.999167 j40tsl/lwtr.21t 0 1 1 1201502 0 0 3.016E-08
lwtr.22t 0.999167 j40tsl/lwtr.22t 0 1 1 1165553 0 0 3.447E-08
lwtr.60t 0.999167 mod/hinh2o.ace 0 1 1 2431237 0 0 2.585E-8
```

① suffix番号が重複したら修正 (ACEファイルも要修正)

② 『filename』をACEファイル名に

③ 『route』を0に

④ 一行80文字を越えたら『+』を追加した上で改行



XSDIR自動生成機能

- FRENDYではXSDIRの自動生成機能を整備
 - 手作業でまとめると、ACEファイルの開始行の修正が困難
 - FRENDYでは自動的に一つのファイルにまとめるツールを用意
 - tools/make_xmdir_list
 - 利用方法はtools/README_tools_jpをご参照下さい

【一つのファイルにまとめた例】



s001.50c	0.999167	j40/j40f00fa	0	1	1	9751	0	0	2.551e-08
2004.50c	3.968200	j40/j40f00fa	0	1	76161	25308	0	0	2.551e-08
3007.50c	6.955730	j40/j40f00fa	0	1	89852	29277	0	0	2.551e-08

- 入力は以下の5行
 - データ種別 (1:中性子入射、2:TSL、3:dosimetry)
 - まとめたACEファイル名
 - まとめたXSDIRファイル名
 - 個別のACEファイルを格納したディレクトリ名
 - suffix番号
 - 処理モード (オプション)

中性子入射の例

```
1
./j40f00f
./j40f00f.xsdir
./ace/j40
50c
```

TSLの例

```
2
./j40f00t
./j40f00t.xsdir
./ace/j40/sab
20t
```

XSDIR自動生成機能の改良

- FRENDY第1版で複数のACEファイルをまとめる便利ツールとして、XSDIR自動生成機能を整備
 - sample/tool/ace_data_collector.exe
 - 本機能を使うと、簡単に複数のACEファイルをまとめることが可能に
 - Suffix番号(~.50cなど)も編集可能
- **FRENDY第2版ではtoolの一つとして登録**
 - tools/ make_xmdir_list
 - 利用方法もtools/REDME_tools_jpに記載

【まとめたXSDIRの例】

J5r1f00fccにPu241以降の
複数のACEファイルが
含まれている

```

93235.54c 233.025000 j5r1f00fcb 0 1 6435192 404551 0 0 2.530e-08
93236.54c 234.019000 j5r1f00fcb 0 1 6536342 424289 0 0 2.530e-08 ptable
93237.54c 235.012000 j5r1f00fcb 0 1 6642427 2905366 0 0 2.530e-08 ptable
93238.54c 236.006000 j5r1f00fcb 0 1 7368781 618924 0 0 2.530e-08 ptable
93239.54c 236.999000 j5r1f00fcb 0 1 7523524 467635 0 0 2.530e-08
94236.54c 234.018000 j5r1f00fcb 0 1 7640445 312598 0 0 2.530e-08 ptable
94237.54c 235.012000 j5r1f00fcb 0 1 7718607 461379 0 0 2.530e-08
94238.54c 236.005000 j5r1f00fcb 0 1 7833964 1968755 0 0 2.530e-08 ptable
94239.54c 236.999000 j5r1f00fcb 0 1 8326165 3271302 0 0 2.530e-08 ptable
94240.54c 237.992000 j5r1f00fcb 0 1 9144003 2575179 0 0 2.530e-08 ptable
94241.54c 238.986000 j5r1f00fcc 0 1 1 2096884 0 0 2.530e-08 ptable
94242.54c 239.979000 j5r1f00fcc 0 1 524234 2033244 0 0 2.530e-08 ptable
94244.54c 241.967000 j5r1f00fcc 0 1 1032557 355532 0 0 2.530e-08 ptable
94246.54c 243.956000 j5r1f00fcc 0 1 1121452 305188 0 0 2.530e-08
94247.54c 244.951700 j5r1f00fcc 0 1 1197761 4955626 0 0 2.530e-08
    
```

現行のXS DIR自動生成機能の課題

- 複数のACEファイルを強制的にまとめてしまう
 - ユーザーがH001やU235など、個々の核種を選択して使うことができない
 - JENDL-5のようにデータ容量が膨大なACEファイル(1温度点で20GB超)の場合はユーザー側に必要な核種を選択できるようにした方が利便性が高い
- atomic weight ratiosを手入力する必要がある
 - ENDF/B-VIII.0のデータをコピーするなどしていたが、JENDL-5RC1では795核種とENDF/B-VIII.0(557核種)に比べて核種数が大幅に増加
 - ENDF/B-VIII.0に収録されていない核種のatomic weight ratiosは手作業で入力しなければならない

【atomic weight ratioの例】

atomic weight ratios					
0001	1.00000000	0001	1.00000000		
1000	0.99928126	1001	0.99916728	1002	1.99679958
2000	3.96821753	2003	2.99012003	2004	3.96821877
3000	6.88137314	3006	5.96344980	3007	6.95573224
4000	8.93476259	4009	8.93476363		
5000	10.71812779	5010	9.92692056	5011	10.91472965
6000	11.90752173	6012	11.89691365	6013	12.89165000
7000	13.88637504	7014	13.88278019	7015	14.87125003
8000	15.86195669	8016	15.85750984		
9000	18.83519687	9019	18.83519688		
10000	20.00634570				
11000	22.79227500	11023	22.79227500		

XSDIR自動生成機能の改良 (1/2)

- 核種毎にファイルを分割するモードを実装
 - ファイル数は増えるものの、ユーザーが必要なファイルを自由に選択可能に
 - ユーザーの利便性が向上
 - ファイル名は核種IDと同じになっている
 - どのファイルがどのデータなのかが分かりやすくなっている

核種IDと同じ名前に

93235.54c	233.025000	93235.54c	0 1	1	404551	0 0	2.530e-08	
93236.54c	234.019000	93236.54c	0 1	1	424289	0 0	2.530e-08	ptable
93237.54c	235.012000	93237.54c	0 1	1	2905366	0 0	2.530e-08	ptable
93238.54c	236.006000	93238.54c	0 1	1	618924	0 0	2.530e-08	ptable
93239.54c	236.999000	93239.54c	0 1	1	467635	0 0	2.530e-08	
94236.54c	234.018000	94236.54c	0 1	1	312598	0 0	2.530e-08	ptable
94237.54c	235.012000	94237.54c	0 1	1	461379	0 0	2.530e-08	
94238.54c	236.005000	94238.54c	0 1	1	1968755	0 0	2.530e-08	ptable
94239.54c	236.999000	94239.54c	0 1	1	3271302	0 0	2.530e-08	ptable
94240.54c	237.992000	94240.54c	0 1	1	2575179	0 0	2.530e-08	ptable
94241.54c	238.986000	94241.54c	0 1	1	2096884	0 0	2.530e-08	ptable
94242.54c	239.979000	94242.54c	0 1	1	2033244	0 0	2.530e-08	ptable
94244.54c	241.967000	94244.54c	0 1	1	355532	0 0	2.530e-08	ptable
94246.54c	243.956000	94246.54c	0 1	1	305188	0 0	2.530e-08	
94247.54c	244.951700	94247.54c	0 1	1	4955626	0 0	2.530e-08	

XSDIR自動生成機能の改良 (2/2)

- atomic weight ratios(AWR)の自動生成
 - 1000や2000など、天然組成のAWRはENDF/B-VIII.0と同じ値を使用
 - 1001など、個々の核種のAWRはACEファイルの値をコピー
 - ENDF/B-VIII.0のAWRに比べて有効桁数が少ない
 - 核種数が多い場合の自動改行にも対応

ACEファイル中のAWR

4つ目以降は次の行へ

日付も自動で出力
(自動生成機能を実行した日)

```

atomic weight ratios
0001 1.00000000 0001 1.00000000
1000 0.99928126 1001 0.99916700 1002 1.99700000 1003 2.98959600
2000 3.96821753 2003 2.99012000 2004 3.96820000
3000 6.88137314 3006 5.96345000 3007 6.95573000
4000 8.93476259 4007 6.95665000 4009 8.93476000 4010 9.92751400
5000 10.71812779 5010 9.92692000 5011 10.91470000
6000 11.90752173 6011 10.91684000 6012 11.89691000 6013 12.89165000
6014 13.88295000

100252 249.91700000 100253 250.91110000 100255 252.89900000 100257 254.88650000
06/Dec/2021
directory
1001.54c 0.999167 1001.54c 0 1 1 17714 0 0 2.530e-08
  
```

まとめ

- XSDIRとは
 - ACEファイルの位置とACEファイル中の情報をまとめたリスト
 - suffix番号を変えれば複数の温度点や複数のライブラリを一つのXSDIRに入れることが可能
- suffix番号や物質名の変え方
 - xsdirとACEファイルの一行目の最初のデータを修正
- FRENDY/NJOYで作成したXSDIRの追加方法
 - ① suffix番号の修正、② filenameの修正、③ routeの修正、④ 一行当たりの文字数のチェックの4ステップ
- FRENDYの便利機能
 - FRENDYに付属のツールを用いることで複数の核種を一つのACEファイルにまとめることも可能