

ACEファイルの読み方

ACEファイルとは

- MCNPやPHITS、Serpentなどの連続エネルギーモンテカルロ計算コード用の断面積ライブラリ
 - 計算コードが読むことに特化しており、人が読むことは想定外

ACEファイルの概要
(Opening)
mat9228

92235.50c	233.025000	2.5507e-08	20171005						
U-235 from JENDL-4									
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2023448	92235	164057	47	45	45	45	45	45	45
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	820286	820377	820424	820471	820518	82056	82056	82056	82056
1306975	1513550	1513595	1703760	1867817	1867862	1867907	1867907	1867907	1868801
1868846	1868846	1868891	2023403	820675	2023448	1689	1689	1689	1689
1692768	1692834	1692840	0	0	0	0	0	0	0
1.000000000000e-11	1.000001000000e-11	1.000001000000e-11	1.000123000000e-11	1.000123000000e-11	1.000123000000e-11	1.000123000000e-11	1.000123000000e-11	1.000123000000e-11	1.000123000000e-11
1.000367000000e-11	1.000489000000e-11	1.000489000000e-11	1.000611000000e-11	1.000611000000e-11	1.000611000000e-11	1.000611000000e-11	1.000611000000e-11	1.000611000000e-11	1.000611000000e-11
1.000855000000e-11	1.000978000000e-11	1.000978000000e-11	1.001100000000e-11	1.001100000000e-11	1.001100000000e-11	1.001100000000e-11	1.001100000000e-11	1.001100000000e-11	1.001100000000e-11

核種の情報等
(NXS array)

データ位置
(JXS array)

エネルギー点 [MeV]と
全断面積等
(ESZ block)

ACEファイルを読むために

- ACEフォーマットマニュアルが必要
 - 公式のマニュアルは二つ
 - ① MCNPマニュアルのVolume III: Developer's Guide
 - ② A Compact ENDF (ACE) Format Specification, LA-UR-19-29016
 - <https://github.com/NuclearData/ACEFormat>
 - <https://github.com/NuclearData/ACEFormat/blob/master/ACEFormat.pdf>
 - ①は輸出規制の影響により、米国外のユーザーは入手困難
 - ②は中性子入射とTSLのみ整備
 - ②は整備中であり、記載ミスも多いので必ず最新版を利用すること

A Compact ENDF (ACE) Format Specification

Jeremy Lloyd Conlin (editor)

Los Alamos National Laboratory

Contributors:

Jeremy Lloyd Conlin (*Los Alamos National Laboratory*)
Paul Romano (*Argonne National Laboratory*)

LA-UR-19-29016

ACEファイルを読む上で注意する点

- ACEファイルのエネルギーの単位はeVではなく、MeV
- ACEファイルに格納されているデータに切れ目はない
 - 一行に4つの数字が並んでいるだけで評価済み核データのようにMFやMTなどで区切られていない

【ACEファイルのデータの並びの例】

1.000000000000e-11	1.000001000000e-11	1.000123000000e-11	1.000245000000e-11
1.000367000000e-11	1.000489000000e-11	1.000611000000e-11	1.000733000000e-11
1.000855000000e-11	1.000978000000e-11	1.001100000000e-11	1.001222000000e-11

- ファイル中の移動はデータ位置/データ数を利用
 - 最初、もしくはある位置からどこまでスキップしたら目的のデータがあるかがわかる

【データ数を指定した例】

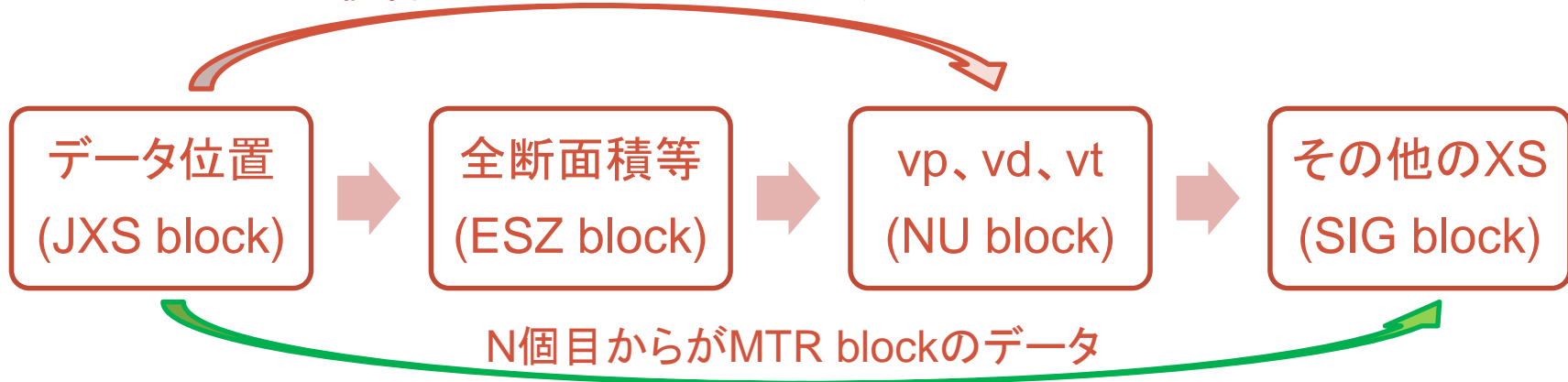
-1	-1	-1	0
0	1	76	111
164170	164179	237838	238294
238687	239073	239424	239763
240088	240405	240716	241026

この例だと、1つ目のデータは1~75個目までの75個、2つ目のデータは76個目~110個目までの35個、3つ目のデータは111個目~164,169個目までの164,059個となる

MCNPでの断面積データの取り扱い

- 全てのデータを一次元配列に保存
 - NJOY上ではXSS[]で与えられている
 - 断面積データ、二次エネルギー分布、角度分布など、データ毎に分けられていない
- 一次配列中に各データの位置を記載することで高速に必要とするデータにアクセス可能
 - 最初からX個目、もしくはこの位置からY個目といった形

M個目からがNU blockのデータ



ACEファイルを読もう (Header編)

- ACEファイルを読む上で重要な情報は7行目からのNXS arrayに記述
 - NXs arrayから入っているデータがある程度分かる
 - NXs arrayやJXS array中のデータが何を示すかについては、マニュアル中に記載
 - ACEファイルを読むためには、マニュアルが必須

92235.50c 233.025000 2.5507e-08 20171005
 U-235 from JENDL-4 mat9228

0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0
データ総数		エネルギー点数			核種の情報等 (NXS array)			
2023448	92235	164057	47	45	45	0	6	6
0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	820286	820377	820424	820471	820518	820565	1306929	1306929
陽子数+質量数		反応タイプ数			データ位置 (JXS array)			

【参考】Header形式の変更 (2.0.X)

- 新しいHeader形式が導入
 - 最近のLANL配布のACEライブラリは新形式を採用
 - コメント行が複数行入れられるように
 - 記載の順序などは異なるものの、元々のHeaderと内容はほぼ同じ

```

2.0.0          92235.710nc          ENDFB-VII.1
233.024800 2.5301E-08  12/19/12   3
The next two lines are the first two lines of 'old-style' ACE.
92235.80c 233.024800 2.5301E-08  12/19/12
U235 ENDF71x (jlconlin) Ref. see jlconlin (ref 09/10/2012 10:00:53) mat9228
    
```

ACE形式のバージョン

コメント行の行数

元々のHeader形式 (参考のためコメント文として記載)

コメント行

ACEファイルを読もう (ESZ block編)

- 最初のESZ Blockに入っているのは以下の5つ
 - S_{ESZ} 入射エネルギー点 [MeV]
 - S_{ESZ+N_E} 全断面積 (MT=1)
 - S_{ESZ+2N_E} 全中性子消滅断面積 (MT=101)
 - S_{ESZ+3N_E} 弾性散乱断面積 (MT=2)
 - S_{ESZ+4N_E} 核発熱計算用のheating number
- NXS Arrayに記載されたエネルギー一点数(N_E)ずつ各データが順番に入っている

MT=102-117,
155, 182, 191-
193, 197の和



Table 5: ESZ Block.

Location in XSS	Parameter	Description
S_{ESZ}	$E(l), l = 1, \dots, N_E$	Energies
$S_{ESZ} + N_E$	$\sigma_t(l), l = 1, \dots, N_E$	Total cross section
$S_{ESZ} + 2N_E$	$\sigma_a(l), l = 1, \dots, N_E$	Total neutron disappearance cross section [†]
$S_{ESZ} + 3N_E$	$\sigma_{el}(l), l = 1, \dots, N_E$	Elastic cross section
$S_{ESZ} + 4N_E$	$H_{ave}(l), l = 1, \dots, N_E$	Average Heating numbers

[†] The disappearance cross section is defined in [2, Appendix B] as MT101

ACEファイルを読もう (SIG block編①)

- SIG blockでは各反応の断面積を保存
 - 全断面積、放射捕獲断面積、弾性散乱断面積以外
- 表中のLXSはHeaderのJXS Arrayの6番目のデータ
 - マニュアル中にLXS=JXS(6)と記載
- $LOCA_1 \sim LOCA_{NMT}$ はLSIG blockに記載
 - LOCAはSIG blockのスタート位置から何個目のデータが各MTのスタート位置かを示す

Table 14: SIG Block.

Location in XSS	Description
LXS+LOCA ₁ -1	Cross section array for reaction MT ₁
LXS+LOCA ₂ -1	Cross section array for reaction MT ₂
...	
LXS+LOCA _{NMT} -1	Cross section array for reaction MT _{NMT}

ACEファイルを読もう (SIG block編②)

- 各MTの中は三つのデータで構成
 - IE_i : 断面積データが含まれる最初の入射エネルギー点
 - $N_{E,i}$: 断面積データ点数
 - $\sigma_i[E(l)]$: 断面積
- ACEファイルでは全ての反応について、共通の入射エネルギー点を利用
 - 閾値反応のように、高エネルギーの一部しか無いデータを効率的に格納するため、 IE_i や $N_{E,i}$ が必要

Table 15: Cross section array for the i -th reaction..

Location in XSS	Parameter	Description
LXS + LOCA _{i} -1	IE_i	Energy grid index for reaction MT _{i}
LXS + LOCA _{i}	$N_{E,i}$	Number of consecutive entries for MT _{i}
LXS + LOCA _{i} +1	$\sigma_i[E(l)]$ for $l = IE_i, \dots, IE_i + N_{E,i} - 1$	Cross section for reaction MT _{i}

ACEファイルを簡単に編集するために

- FRENDYではACEファイルの読み書き用クラスを整備
 - frendy/ContinuousEnergyXSUtils/AceDataParser
 - frendy/ContinuousEnergyXSUtils/AceDataWriter
 - データ位置やデータ数はAceDataWriterが自動で修正
 - これらのクラスを用いることでデータ位置やデータ数を気にする必要なく、ACEファイルを書き換え可能に
- FRENDY上ではACEファイルの各データをAceDataObjectで管理
 - frendy/ContinuousEnergyXSUtils/AceDataObject
 - AceDataObjectはデータ毎に分割されており、ユーザーがどのデータがどの位置にあるかを考える必要がない
 - マニュアルに記載されている個々のデータとの対比にはAceDataParserクラス中の読み取り部分をお読みください

FRENDYを使ったACEファイルの編集

- FRENDYのACEファイル編集ツールが参考に
 - tools/perturbation_ace_file/PerturbMain.cpp
 - frendy/ContinuousEnergyXSUtils/PerturbUtils
- 基本的には以下の流れとなる
 - AceDataParserを使ったACEファイルの読み取り
 - AceDataObject中のデータの修正
 - AceDataWriterを使って新しいACEファイルへ出力

まとめ

- ACEファイルとは
 - MCNPやPHITS、Serpentなどの連続エネルギーモンテカルロ計算コード用の断面積ライブラリ
 - human readableではなく、machine readableなフォーマット
- ACEファイルを読むにはACEフォーマットマニュアルが必須
 - MCNPマニュアルのVolume III: Developer's Guide
 - A Compact ENDF (ACE) Format Specification, LA-UR-19-29016
- ACEファイルを読む上で注意する点
 - ACEファイルのエネルギーの単位はeVではなく、MeV
 - ACEファイルに格納されているデータに切れ目はない
 - ファイル中の移動はデータ位置/データ数を利用
- FRENDYを用いたACEファイルの編集
 - FRENDYではACEファイルの読み書き用クラスを整備
 - これらのクラスを用いることでデータ位置やデータ数を気にする必要なく、ACEファイルを書き換え可能に