

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

92235.50c	233.025000	2.5507e-08	20171005					ACEファイルの概要 (Opening)	
U-235 from JENDL-4								mat9228	
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	0	0	0	0	0	0	
2023448	92235	164057	47	45	45	45	45	45	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	
1	820286	820377	820424	820471	820518	82056	82056	82056	
1306975	1513550	1513595	1703760	1867817	1867862	1867907	1868801	1868801	
1868846	1868846	1868891	2023403	820675	2023448	1689	1689	1689	
1692768	1692834	1692840	0	0	0	0	0	0	
1.000000000000e-11	1.000001000000e-11	1.000123000000e-11	1.000367000000e-11	1.000489000000e-11	1.000611000000e-11	1.000855000000e-11	1.000978000000e-11	1.001100000000e-11	
1.000367000000e-11	1.000489000000e-11	1.000611000000e-11	1.000855000000e-11	1.000978000000e-11	1.001100000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-11	
1.000855000000e-11	1.000978000000e-11	1.001100000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-11	1.001222000000e-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】

1.00000000000e-11	1.00000100000e-11	1.00012300000e-11	1.00024500000e-11
1.00036700000e-11	1.00048900000e-11	1.00061100000e-11	1.00073300000e-11
1.00085500000e-11	1.00097800000e-11	1.00110000000e-11	1.00122200000e-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】

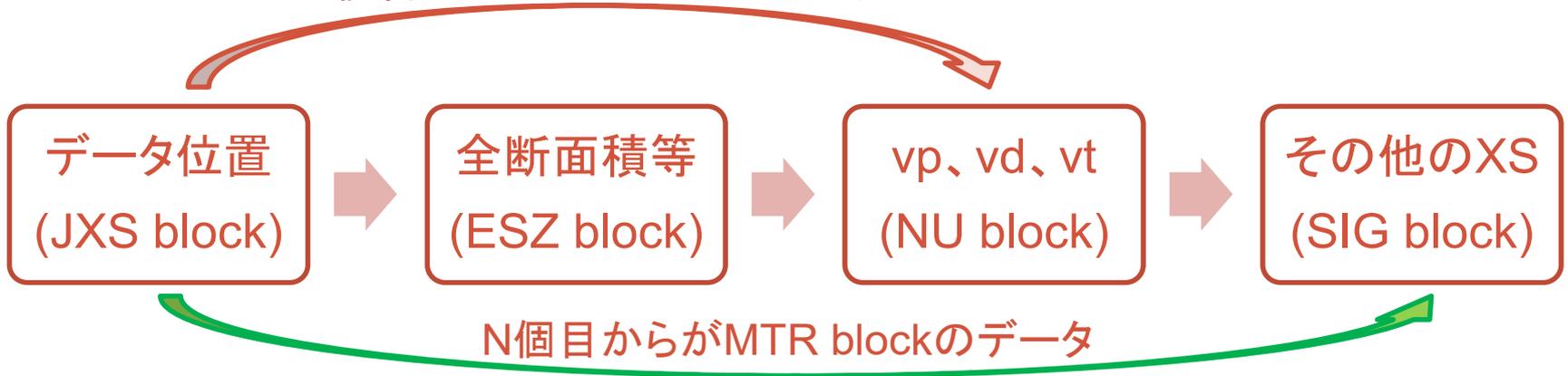
-1	-1	-1	0
0	1	76	111
164170	164179	237838	238294
238687	239073	239424	239763
240088	240405	240716	241026

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

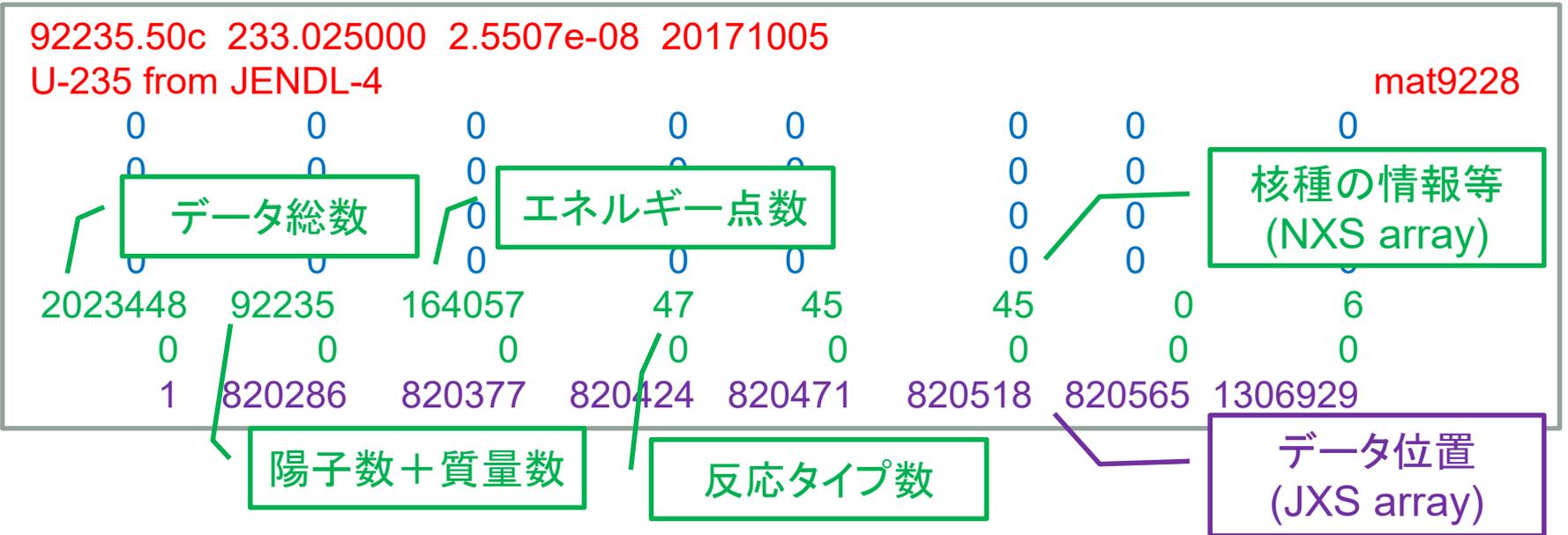
- 全てのデータを一次元配列に保存
 - NJOY上ではXSS[]で与えられている
 - 断面積データ、二次エネルギー分布、角度分布など、データ毎に分けられていない
- 一次配列中に各データの位置を記載することで高速に必要とするデータにアクセス可能
 - 最初からX個目、もしくはこの位置からY個目といった形

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



【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