

<原子力学会賞受賞記念寄稿>

FRENDY で出来ること ※ただし核データ処理を除く

日本原子力研究開発機構 (JAEA)

多田 健一

1. はじめに

『核データ処理がどんなものかご存知ですか?』

おそらく、10 年前にこの質問をしてもほとんどの人は NO と答えたと思います。かく言う私も NJOY を触った経験があるくらいでよく知らないので NO と答えたと思います。

しかし、この 10 年の間に YES と答えてくれる人の割合がかなり増えたのではないのでしょうか?核データ処理の知名度向上に貢献したことが私の小さな自慢です。もちろん、これは私だけの手柄ではなく、共同受賞者の山本先生や千葉先生、JAEA 内でフォロー頂いている今野さんや国枝さん、近藤さん、共同研究を行って下さっている名大の遠藤先生、GNF-J 社の東條さんや小野さんなど、数多くの方々のご協力があって実現したものです。この場を借りて御礼申し上げます。

さて、ここで本寄稿記事を終わらせてしまってもいいんですが、さすがにこれだけだとせっかく機会を与えているのに何を考えているんだと怒られてしまいそうです。しかし、核データ処理について説明しようにも、炉物理の研究 第 71 号^[1]や炉物理夏期セミナー^[2]、FRENDY の HP^[3]、FRENDY のマニュアル^[4, 5]などに詳しい説明を載せていますので、ここで改めて説明するものではありません。そこで今回は、核データ処理以外で FRENDY を使ってできることを紹介したいと思います¹。これらの機能が皆さんの業務や研究で活用されましたら幸いです。

2. 『核データ処理以外で』FRENDY を使ってできること

2.1 NJOY2016 用入力 of 自動生成

マニュアルには記載のない裏オプション的なものですが、FRENDY 形式の入力から NJOY2016 形式の入力を生成する機能を整備しています。使い方は簡単で、一行目の

¹ 現 JAEA の近藤さんが名古屋大学の学生だった頃に開発された ACE ファイル摂動ツールも該当するかと思います。しかし、ACE ファイル摂動ツールは世界的に広く使われていて認知度が高いですし、マニュアル^[5]や論文^[6]でも丁寧に説明していますので、本資料からは省略させていただきます。

processing mode name に”_make_inp”を付けるだけです²。

例えば、U-235 の ACE ファイルの生成用の NJOY 入力を作成する場合は

```
ace_file_generation_fast_mode_make_inp // Processing mode name
nucl_file_name          U235.dat      // Nuclear data file name
```

となります。もちろん、温度や内挿精度の変更など、通常の FRENDDY の処理の際のオプションも有効です。これらを変更することで、NJOY の入力も変更されます。

また、NJOY の入力ファイル名は”FRENDDY の入力名.njoy_input.dat”という名前で出力されます。残念ながら NJOY の入力ファイル名を入力で指定することはできませんが、シェルやバッチファイルで一括処理されている方がほとんどかと思しますので、大きな支障にはならないかと思えます。

本機能は熱中性子散乱則データの処理や、多群ライブラリの作成でも利用可能です。ただし、熱中性子散乱則データの処理については、JEFF の一部の物質で適切な入力が生成できない可能性がありますのでご注意ください³。これは、JEFF の一部の物質で MAT 番号が JENDL や ENDF/B と異なることが原因です。FRENDDY では、MAT 番号からどのような物質かを判定し、その物質に適切なデータを内部で設定しています。JEFF の一部の物質では、ここで誤判定を起こしてしまうため、うまく入力が作成できません⁴。

RECONR を使った線形化処理だけ、とか ACER を使った ACE ファイル生成だけの NJOY の入力を生成したいという要望を持つユーザーの方もおられるかと思えます。FRENDDY ではそのようなユーザーのための入力オプションとして、make_input_module を用意しています。

例えば、RECONR を用いた線形化処理と BROADR を用いたドップラー拡がりの処理だけを行う入力を生成する場合、次のようになります。

² 本機能はこちらでも様々な条件下で検証を行っていますが、どんな状況でも完全に再現するかどうかは保証できません(これがマニュアルに明記していない理由です)。お手数ですが、もし不具合などを発見しましたらご連絡ください。

³ 例えば JEFF-3.3 では、O in Al₂O₃ の MAT=48 を、Silicon の MAT=59 を使っていますが、ENDF/B-VIII.0 や JENDL-5 では MAT=48 は U in UO₂ を、MAT=59 は Ca in CaH₂ を意味しています。FRENDDY 上ではどちらの物質のデータなのか判定することができないため、これらの ENDF/B-VIII.0 や JENDL-5 の MAT 番号と重複する MAT 番号については正しく処理することができません。

⁴ この問題は通常の核データ処理でも発生します。熱中性子散乱則データの MAT 番号が統一されない限り、FRENDDY 側でこの問題を根本的に解決することはできません。

```
ace_file_generation_fast_mode_make_inp // Processing mode name
nucl_file_name          U235.dat      // Nuclear data file name
make_input_module      ( reconr  broadr )
```

また、PURR を用いた確率テーブルの作成と、ACER を用いた ACE ファイル生成だけを行う入力を作成する場合は、次のようになります。

```
ace_file_generation_fast_mode_make_inp // Processing mode name
nucl_file_name          U235.dat      // Nuclear data file name
make_input_module      ( purr  acer )
```

このように、入力を作成したい NJOY のモジュール名を `make_input_module` で指定することで、特定のモジュールの入力が生成可能となっています。なお、FRENDY ではモジュールで使う `PENDF` のファイル名は固定しています。そのため、`make_input_module` で一部のモジュールの入力のみを生成させる場合、各モジュール間の `PENDF` ファイル名が繋がっていない可能性がありますのでご注意ください。⁵

また、`make_input_module` で指定できるモジュールは以下の通りです。下記の通り、`HEATR` についても入力を生成することができますが、`FRENDY` では核発熱定数計算には対応していません。`FRENDY` での核発熱定数計算機能については現在開発中ですので、もうしばらくお待ちください。

線形化処理	RECONR
ドップラー拡がりの処理	BROADR
ガス生成断面積の処理	GASPR
確率テーブルの生成	PURR UNRESR
熱中性子散乱則の処理	THERMR
ACE ファイル生成	ACER
GENDF ファイル生成	GROUPR
MATXS ファイル生成	MATXSR
核発熱定数計算	HEATR

⁵ 例えば、`RECONR` と `PURR` の入力を生成させる場合、`RECONR` で出力される `PENDF` ファイルは `tape21` ですが、`PURR` で入力として必要な `PENDF` ファイル名は `tape23` となります。このように `PENDF` ファイルのファイル名の不整合が生じるため、`FRENDY` で生成した入力をそのまま使うと処理の途中でエラーが発生します。

2.2 ENDF 形式データの編集 (特定の MF/MT の削除、入れ替え、追加)

本機能については学会等でも発表していますので、ご存知の方が多いかと思えます。図 1 に示すように、FRENDY では評価済み核データで用いられている ENDF 形式のデータの編集が可能となっています。

例えば、ベースは JENDL-5 として、一部の反応断面積(MF=3)だけを ENDF/B や JEFF などの別の核データライブラリのデータに変更したい、もしくは角度分布やエネルギー分布(MF=4~6)を他のライブラリに変更したいといった場合に本機能が利用できるかと思えます。本機能の利用方法については、FRENDY のマニュアル^[5]の 10.7 節と 10.8 節に説明とサンプル入力がありますので、そちらをご参照下さい。

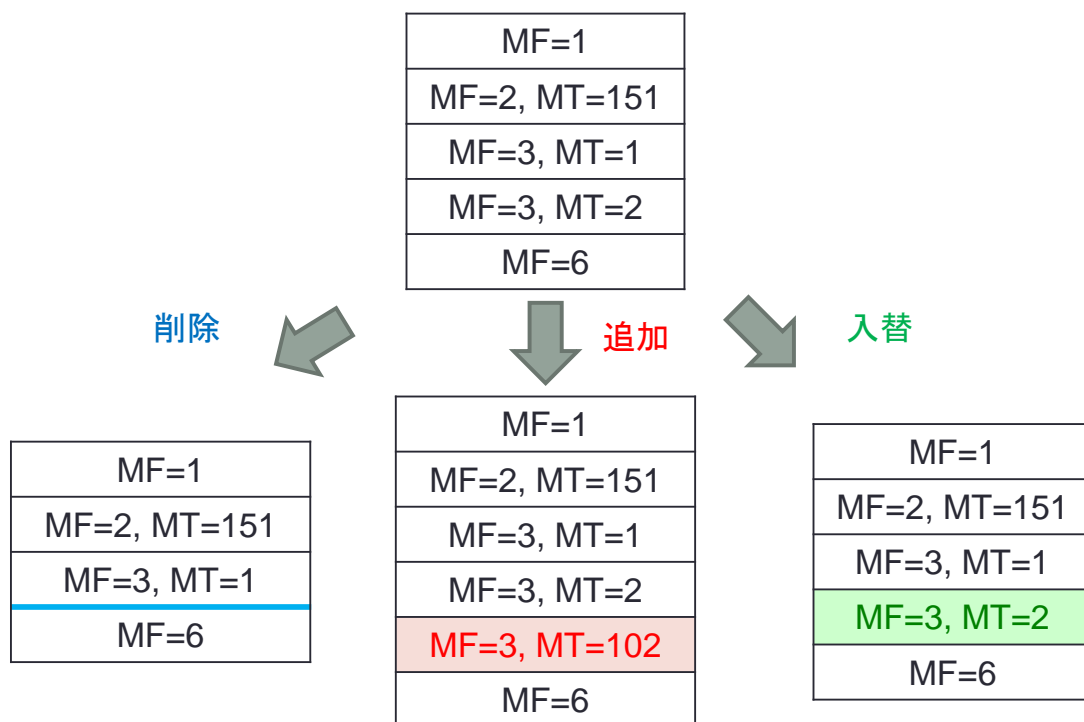


図 1 FRENDY を用いた ENDF 形式データの編集

なお、FRENDY Ver2.01 の入力形式では、特定の MF 番号のデータを丸ごと処理することは出来ませんが、ある MF 番号の中の連続した MT 番号の反応データを削除したいといったことには対応していません。例えば、MT=600~851 のデータを一括して削除する場合は、MT=600 から MT=851 までのデータを順番に削除するような入力を作る必要があります。このような入力を作成するのは大変ですし、一つのデータを削除する度に核データを読み書きする必要があり、計算時間の観点からも非効率的です。そのため、FRENDY Ver. 2.02⁶より、入力形式を一部修正し、負の MT 番号を指定することで連続した MT 番号のデータ

⁶ おそらく本資料が公開される頃には HP から公開になっているはずです。

を一括して変更することが可能になりました⁷。例えば、MT=600~851 のデータを一括して削除する場合には、

```
endf_file_modification_mode // Processing mode name
remove MT (600 -851) U235.dat U235.dat.mod
```

といったように連続する MT 番号の最初の MT 番号を正の値で、そして最後の MT 番号を負の値で入力することで、連続した MT 番号を一括して編集することが可能になります。

2.3 特定の MF/MT の核データの線形化 (TAB1 形式のデータのみ)

こちらは前節で説明した核データの編集機能に FRENDDY Ver. 2.01 から新たに追加になった機能です。本機能は ENDF 形式で次元配列のデータを扱うのに用いる TAB1 形式で収録されているデータを線形化するものとなります。核データ処理を行う前に本機能を使うことで、NJOY の問題点を解決することが可能となります。

NJOY では、ACE ファイルの生成などで、収録されている核データが線形であるとみなして処理を行う、もしくは一個目の内挿形式が全ての内挿で用いられているとみなして処理を行うことがあります。例えば、図 2 の結果は、ENDF/B-VIII.0 の Se-74 の二次エネルギー分布になります^[7]。このデータでは、一個目だけが線形内挿とし、それ以降を log-log 内挿とするようになっていました。しかし、NJOY では一個目の内挿を全ての内挿に用いるため、FRENDDY と NJOY で処理結果に差異が生じてしまいます。

FRENDDY の開発者としては、こういうことがあるので FRENDDY を使ってください、と言いたいところですが、残念ながら FRENDDY で全ての処理を行うことはできません。また、ユーザーの皆さんの中には従来からの継続性を考えて NJOY で処理をしたいという方もおられるかと思えます。

そこで、NJOY を利用したいけどきちんと処理を行いたいというユーザーのニーズにお応えするのが本機能になります。本機能は、指定した MF/MT 番号のデータを読み取り、TAB1 形式で与えられているテーブルデータを全て線形化します。本機能を用いてあらかじめ TAB1 形式のデータを線形化しておけば、図 2 で示したような問題は起こりません。そのため、NJOY を使っても核データ評価者の意図通りの処理が可能となります。NJOY で内挿形式を無視している部分は多いので、二次角度分布やエネルギー分布が実験値と合わないといったお悩みをお持ちの方は一度本機能を試してみてもはいかがでしょうか？

なお、線形化の手法は NJOY の RECONR や BROADR と同じで、指定した誤差以下と

⁷ 本機能を開発した当初は元の入力で問題ないと思っていたのですが、MT=600~851 のデータを一括して削除する必要が出てきて初めて元の入力形式では駄目だと気づかされました。やはり使ってみないと改善点は見つからないですね。

なるまで中点を追加していく形になります。デフォルト値は NJOY の RECONR などでも採用されている $0.1\%=1.0E-3$ ですが、入力値で変更することも可能です。

本機能の入力方法やサンプル入力についても、FRENDY のマニュアル^[5]の 10.7 節と 10.8 節に記載しておりますので、興味がある方はそちらをご参照下さい。

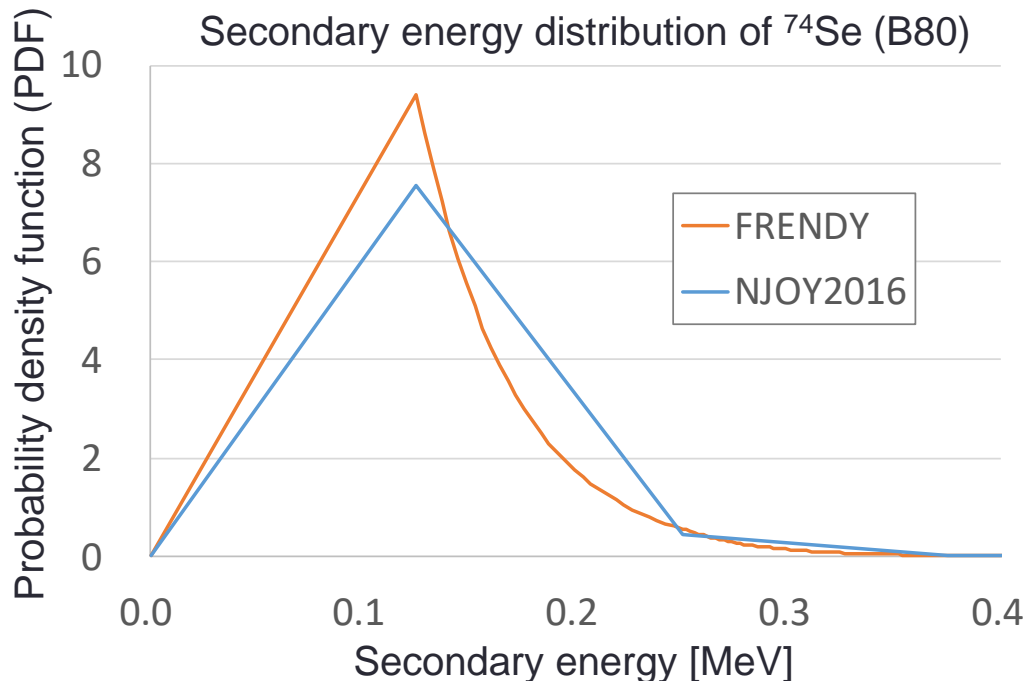


図 2 FRENDY と NJOY での ENDF/B-VIII.0 の Se-74 の二次エネルギー分布の処理結果の違い

2.4 ENDF 形式、ACE 形式のファイルからの断面積のプロット(連続・多群)

FRENDY では NJOY の PLOTR のような描画機能を用意しています。ただし、本機能は断面積の描画にしか対応していません。

本ツールは講習会で用いる演習データの中にあります。FRENDY の HP^[3]の一番下の FRENDY 講習会資料の項目にあります、『講習会用サンプルケース』にサンプル入力などと一緒に格納されています。FRENDY 本体に入れていないので FRENDY の機能かと言われると心苦しいところがありますが…もう少し機能が充実化したら FRENDY の tool の中に入れたいと考えていますのでご容赦頂ければ幸いです。

演習用サンプルケースを解凍すると、その中の write_pendf_xs、write_ace_xs があるかと思いますが、そちらがプロットツールになります。前者が ENDF 形式及び NJOY で処理した中間ファイルである PENDF 形式のファイルから断面積をプロットするツールで、後者が ACE 形式のファイルから断面積をプロットするツールになります。類似のツールとして、

GENDF ファイルのプロットツールも開発しております⁸ので、将来的にはこちらも公開したいと考えております。

本ツールの実行方法は単純で、

```
write_pendf_xs.exe          “ファイル名”
write_ace_xs.exe   “データ形式” “ファイル名”
```

となります。これでプログラムが自動的に格納されている断面積データを読み取り、全ての反応について gnuplot 等で利用可能な一次元形式のデータを出力します。なお、write_ace_xs.exe の 1 番目の引数は ACE ファイルのデータ形式の指定となっており⁹、中性子入射のデータであれば『fast』と、熱中性子散乱則のデータであれば『thermal』もしくは『tsl』とする必要があります。

もし特定の MT 番号だけを出力させたい場合は、

```
write_pendf_xs.exe          “ファイル名”   “MT ファイルリスト名”
write_ace_xs.exe   “データ形式” “ファイル名”   “MT ファイルリスト名”
```

とし、write_pendf_xs.exe だと 2 番目の、write_ace_xs.exe だと 3 番目の引数として入力した MT ファイルリストに以下のように MT 番号を入力しておけば、指定した MT 番号の断面積データのみを出力します。

```
1 2 18 102
```

また、本ツールは多群形式で出力することも出来ます。例えば、JENDL-4.0 から JENDL-5 への変更で断面積がどの程度変化したかを示そうとする場合に、図 3 に示すように連続エネルギー形式で出力しても、共鳴領域が細かすぎてよく分からないといったことがあります。そのような場合に対応するため、多群形式でプロットする機能を実装しました。図 4 に示すように、多群形式でプロットすることで、共鳴領域もどの程度変更されたかがよく分かるようになります。

⁸ しかもこちらは二次エネルギー分布などまでプロットできる優れたものです。

⁹ PENDF ファイルでは中性子入射でも熱中性子散乱則データでもデータ形式は変わらないため、データ形式の指定は必要ありません。また、write_ace_xs.exe でデータ形式を指定しない場合は中性子入射のデータとみなして断面積データを読み取ります。

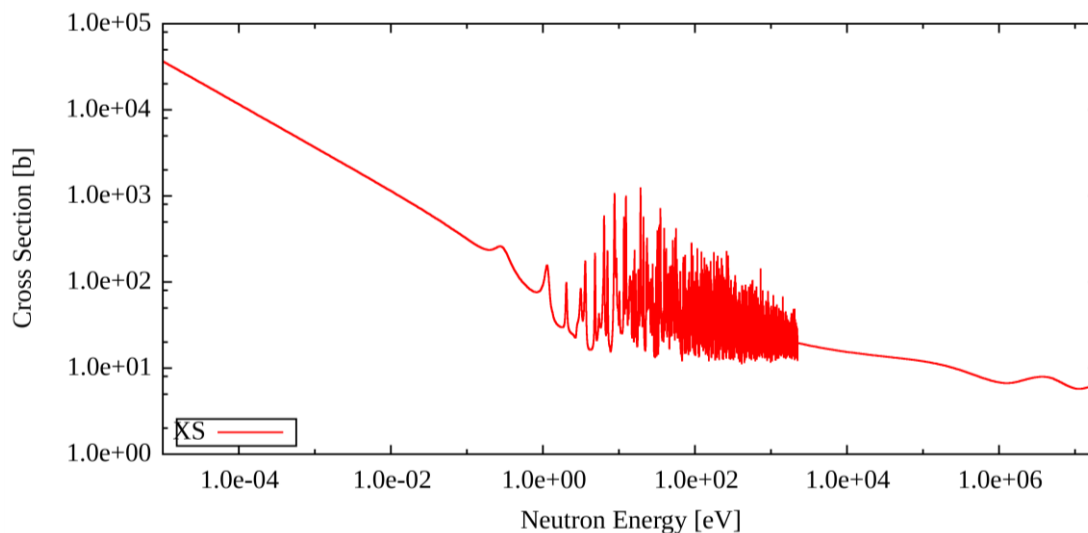


図 3 本ツールを用いた断面積の描画例
(JENDL-5 の 300K の U-235 の全断面積を本ツールで抜き出し、gnuplot で描画)

多群形式でプロットする場合には、

`write_pendf_xs.exe` “ファイル名” “MT ファイルリスト名” “群構造ファイル名” “重みオプション”
`write_ace_xs.exe` “データ形式” “ファイル名” “MT ファイルリスト名” “群構造ファイル名” “重みオプション”

と群構造ファイル名と群縮約に用いる中性子束重みを追加で指定する必要があります。なお、群構造ファイルは MT ファイルリストと同様に下記のように数値のみを入れます。また、エネルギーの並び順については昇順でも降順でもバラバラでも構いません¹⁰。

2.0E7
 0.625
 1.0E-5

重みオプションについては、『const』と『1/e』が選択可能です。また、ファイル名を指定することも可能です。ファイル名を指定した場合には下記のようにエネルギーとそのエネルギーでの重みを指定する必要があります。

¹⁰ 仮にエネルギー点が重複していても重複したエネルギー点を削除するので問題ありません。

2.0E7 0.1
 0.625 0.5
 1.0E-5

なお、全ての反応の多群断面積をプロットしたい場合は、MT ファイルリスト名を『none』、『off』、もしくは『skip』と入力することで MT ファイルリストを読み込むことなく、全ての MT 番号の多群断面積データを出力することができます。

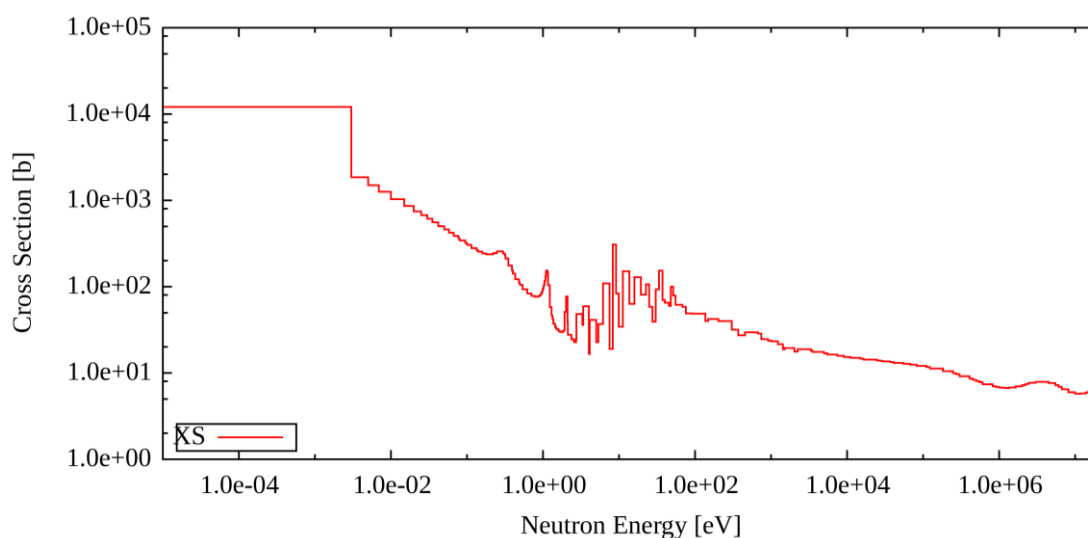


図 4 本ツールを用いた断面積の多群構造の描画例

(JENDL-5 の 300K の U-235 の全断面積を 1/e 重みで 172 群の XMAS 群構造に縮約し、gnuplot でプロット)

本ツールで出力する多群データは、エクセルファイルの散布図で簡単に多群構造を描画できるように、図 5 に示すように、各群の最小エネルギー点と最大エネルギー点の二つのエネルギー点で断面積を出力するようにしています。そのため、ヒストグラムなどでプロットすると非常におかしな図になってしまいますので、ご注意ください。もしヒストグラムなどで多群構造を描画したい場合は、ソースファイルを修正する必要があります。もしソースファイルの修正方法が分からないといったことがありましたらご連絡ください。

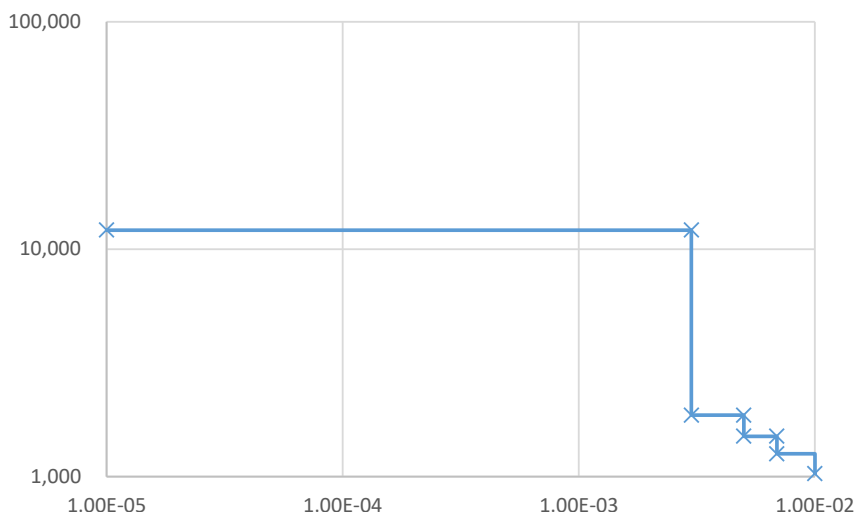


図 5 本ツールを用いた断面積の多群構造の描画例
(エネルギー点を点としてプロットした場合、JENDL-5 の 300K の U-235 の全断面積)

2.5 ENDF 形式、ACE 形式のファイルの断面積比較

ライブラリ間の断面積を比較したい、また FRENDDY と NJOY の処理結果を比較したいといった際には、演習用サンプルケースの中の comp_pendf_xs、comp_ace_xs にある comp_pendf_xs.exe、comp_ace_xs.exe をご利用下さい。

これらのツールは 2.4 節で説明した断面積データの描画ツールとほぼ同じ機能となっています。違いは二つの断面積データを比較し、差分をプロットすることができる点にあります。入力については comp_pendf_xs.exe と comp_ace_xs.exe で異なっており¹¹、

comp_pendf_xs.exe “入力ファイル名”

comp_ace_xs.exe “データ形式” “ファイル名 1” “ファイル名 2” “出力ファイル名”

となります。なお、入力ファイル中には

“ファイル名 1” “ファイル名 2” “出力ファイル名”

を入れる必要があります。また、図 6 に示すように、本ツールでも多群構造での描画が可能

¹¹ このように入力形式や引数が統一できていないことも FRENDDY のツールとして入れていない理由になります。これらの入力の統一などを行った上で、FRENDDY のパッケージに格納する予定です。

となっており、多群構造で描画する場合には

`write PENDF XS EXE` “入力ファイル名” “MT ファイルリスト名” “群構造ファイル名” “重みオプション”

`write ACE XS EXE` “データ形式” “ファイル名 1” “ファイル名 2” “出力ファイル名” “MT ファイルリスト名” “群構造ファイル名” “重みオプション”

となります。

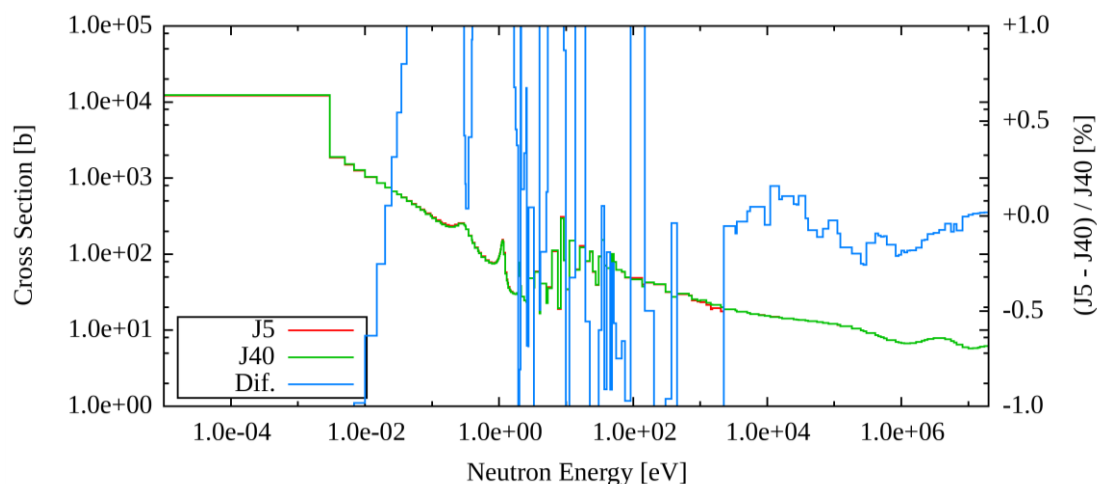


図 6 本ツールを用いた断面積の比較例

(JENDL-4、JENDL-5 の 300K の U-235 の全断面積を 1/e 重みで XMAS172 群に縮約し、比較)

2.6 まとまった ACE ファイルと XSDIR の作成

NJOY や FRENDDY で ACE ファイルを生成すると、個々の核種に対する ACE ファイルと、その XSDIR ファイル¹²が出力されます。MCNP で利用する場合は、この XSDIR をまとめるとともに、原子核の重さを中性子の重さで割った Atomic Weight Ratio のリストを用意する必要があります。

FRENDDY では、特定のディレクトリに保存されている ACE ファイルを読み、XSDIR をまとめるツールが”tools/make_xmdir_list”に用意されています。このツールを用いることで、ACE ファイルや XSDIR に対する知識の無い方でも簡単に MCNP で利用できる形式に変換

¹² XSDIR ファイルは、MCNP で核データライブラリを読み取るときに使うデータリストです。MCNP では XSDIR に記載されたディレクトリの ACE ファイルを読んでいます。XSDIR の詳細は MCNP のマニュアルや、[参考文献 3](#) の FRENDDY 講習会資料の欄にある『A1.XSDIR ファイルの読み方について』をご参照下さい。

することができます。

本ツールの入力は下記の通りです。なお、入力説明や入力例は FRENDY パッケージの中の”tools/README_tools_jp”にも記載があります。

- (1) ACE ファイルの形式 (1:Fast, 2:TSL, 3:Dosimetry),
- (2) 修正後の ACE ファイル名
- (3) XSDIR のファイル名
- (4) ACE ファイルの保存元ディレクトリ
- (5) ACE ファイルの Suffix ID
- (6) 処理モード (individual, collect)

(1)はまとめたい ACE ファイルの形式の選択になります。本ツールで対応している ACE ファイルの形式は中性子入射 (fast)、熱中性子散乱データ (TSL)、ドジメトリー (Dosimetry)の 3 種類となっています。(1)では、まとめる ACE ファイルがどの形式かを選択する必要があります。なお、中性子入射と熱中性子散乱データがまとまった XSDIR ファイルを生成する場合は、本ツールを用いて中性子入射と熱中性子散乱データを個別にまとめた上で、手作業で組み合わせる必要があります。

(2)、(3)は本ツールで修正した後の ACE ファイル名および XSDIR ファイル名となっています。なお、(2)の ACE ファイル名については(6)の処理モードが collect の場合でのみ有効で、individual を選択した場合は無視されます。(6)で collect を選択した場合、複数の ACE ファイルを一つのファイルにまとめる必要があります。(2)で指定した ACE ファイル名はそのまとめたファイルの名前になります。

(4)はまとめる ACE ファイルのディレクトリになっています。本ツールでは複数の階層に分かれたデータをまとめることはできず、一つのディレクトリの直下に全ての ACE ファイルを置いておく必要があります。

(5)は本ツールで修正した後の Suffix ID になります。本ツールでは、修正前の Suffix ID の番号に関わらず、(5)で指定した Suffix ID に上書きします。

(6)は修正後の ACE ファイルを一つのファイルにまとめるのか、個々の ACE ファイルとするのかの選択になります。前述した通り、collect を選択すると、複数の ACE ファイルを(2)で指定した ACE ファイル名にまとめます。Individual を選択すると、全ての ACE ファイル名を ACE ファイル”ZA 番号”.”Suffix ID”というファイル名で出力します。例えば、Suffix ID が 60c の場合、H-001 のファイル名は 01001.60c に、U-235 のファイル名は 92235.60c になります。

3. 終わりに

いかがだったでしょうか？皆さんの業務や研究で利用できそうな機能はありましたでしょうか？

もしこんな機能が欲しいといったご要望や、こんなことが出来ないかといったご相談がありましたら筆者の方までご連絡ください。皆さんのご要望やお悩みが FRENDY の改良に繋がりますので、是非ご意見をお寄せ下さい。

また、FRENDY は 2 条項 BSD ライセンス準拠のオープンソースコードです。そのため、皆さんが FRENDY のクラスを利用して自由に機能を追加することも可能です。皆さんが開発された機能を FRENDY へ取り込み、FRENDY をより発展させていきたいと考えておりますので、ご自身が開発された機能を FRENDY に入れてもいいよという方がいらっしゃいましたら是非ご連絡ください。

一緒に FRENDY の開発を盛り上げていきましょう！

参考文献

- [1] 多田 健一、「純国産次世代核データ処理コード FRENDY の開発」、炉物理の研究 第 71 号 (2019).
https://rpg.jaea.go.jp/else/rpd/annual_report/pdf71/No71-05-02.pdf
- [2] 多田 健一、「評価済み核データライブラリの処理」、第 49 回炉物理夏期セミナー (2017).
https://rpg.jaea.go.jp/download/text/rpd-seminar-2017_tada.pdf
- [3] https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program_frendy/
- [4] K. Tada, S. Kunieda, Y. Nagaya, "Nuclear data processing code FRENDY Version 1," JAEA-Data/Code 2018-014, JAEA (2019).
- [5] K. Tada, A. Yamamoto, S. Kunieda, Y. Nagaya, "Nuclear data processing code FRENDY Version 2," JAEA-Data/Code 2022-009, JAEA (2023).
- [6] K. Tada, R. Kondo, T. Endo, A. Yamamoto, "Development of ACE file perturbation tool using FRENDY," *J. Nucl. Sci. Technol.*, (2022).
<https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2130463>
- [7] K. Tada, "Comparison of processing results of ENDF/B-VIII.0 and JEFF-3.3 between FRENDY and NJOY2016," Technical Meeting on Nuclear Data Processing, IAEA (2019).
<https://www-nds.iaea.org/index-meeting-crp/TM-Nuclear%20Data%20Processing/>