

FRENDY/NJOYの入力について

入力比較

- 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はNJOYの入力でも動作可能

【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, pndf(in), pndf(out)
9228 1 / mat, temp no
1.00e-03 -5.0E+2 / err, thnmax
296.0 / temp
0 /
gaspr / command
20 22 23 / endf, pndf(in), pndf(out)
purr / command
20 23 24 / endf, pndf(in), pndf(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 / nendf, 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	必ず1行目に記載 (他のパラメータの順番は自由)
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	nucl_file_name_tslで用意された 温度点のみしか処理できない
ace_file_name	./ace_sab/lwtr.ace	
ace_dir_file_name	./xsd_sab/lwtr.xsdir	
suffix_id	0.50	
thermal_za_id_name	"lwtr"	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_zs_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

NJOYの入力の基本 (1)

- NJOYでは個々の処理ルーチン毎に入力を用意
 - RECONR、BROADR、GASPR、PURR、THERMRなど
- 入力する処理ルーチンの順番で処理の順番が変更になる
 - 処理の順番を間違えると処理結果がおかしくなる
 - 1番目にRECONRを、2番目にBROADRを入れるのが基本
 - PURR、THERMRはBROADRの後に実行しなければならない
- コメント文はスラッシュ(/)以降
 - 入力説明はNJOYのマニュアルやソースファイルに記載
 - 入力説明で.gt.など、Fortranの用語が出てくるので注意
 - $A.gt.B \rightarrow A > B$ 、 $A.ge.B \rightarrow A \geq B$ 、 $A.lt.B \rightarrow A < B$ 、 $A.le.B \rightarrow A \leq B$
- 文字列はシングルクォーテーション(')で囲む
 - 'This PENDF file is U-235 from JENDL-4.0'

NJOYの入力の基本 (2)

- 入力説明中のCard番号が行番号に相当
 - Card 1に記載されている項目は一行目に記入しなければならない
 - /を入れると残りの項目はデフォルト値が入る
 - 例えば5個のデータがある場合、2つ目のデータの後に/を入れると、3つ目以降のデータはデフォルト値となる
- 現行の1核種1ファイルを前提としていない
 - NJOYでは一つのファイルに複数の核種のデータが含まれていることを想定しており、それらを同時に処理することができる設計になっている
 - 入力時に核種を指定するMAT番号が重要に

MODERの使い道と負のtape番号

- NJOYの入力例では、初めにMODERを使っている例がある
 - MODERはファイル名を変換する
 - 負のtape番号とすることで、ENDF/PENDFがバイナリ形式に
 - ファイル容量削減の観点からは負のtape番号の利用は効果的
 - 処理結果には影響しないので、処理後のファイルを確認するためにも慣れるまでは正のtape番号を使うことを推奨
 - FRENDYではバイナリ形式の出力に対応していない
 - 負のtape番号を使ってもテキスト形式で出力

```

moder                               / command
20 -21                             / nin, nout
    
```

元のENDFファイル名 : tape20
 バイナリ変換後のファイル名 : tape21

FRENDYでのNJOY入力の対応状況

- FRENDYでは以下のルーチンに対応
 - RECONR、BROADR、GASPR、PURR、UNRESR、THERMR、ACER、MODER
 - THERMRはNJOY99、NJOY2016のどちらの入力形式にも対応
 - ただしNJOY2016で追加されたnewforオプションは無視する
 - ACERについてはiopt=1~3(fast、thermal、dosimetry)のみ対応
 - UNRESRはPURRとして処理 (詳細は後述)
 - 将来的にGROUPE、MATXS、ERRORRに対応予定
 - GROUPE(多群定数作成)についてはFRENDY/MGを利用
 - FRENDY/MG: ACEファイルから多群定数(MATXS、GENDF)を生成
 - FRENDYではGROUPEの入力を読み込んで実行するものの、実際にはACEファイル生成を経由して多群断面積ライブラリ(多群定数)を作成する予定

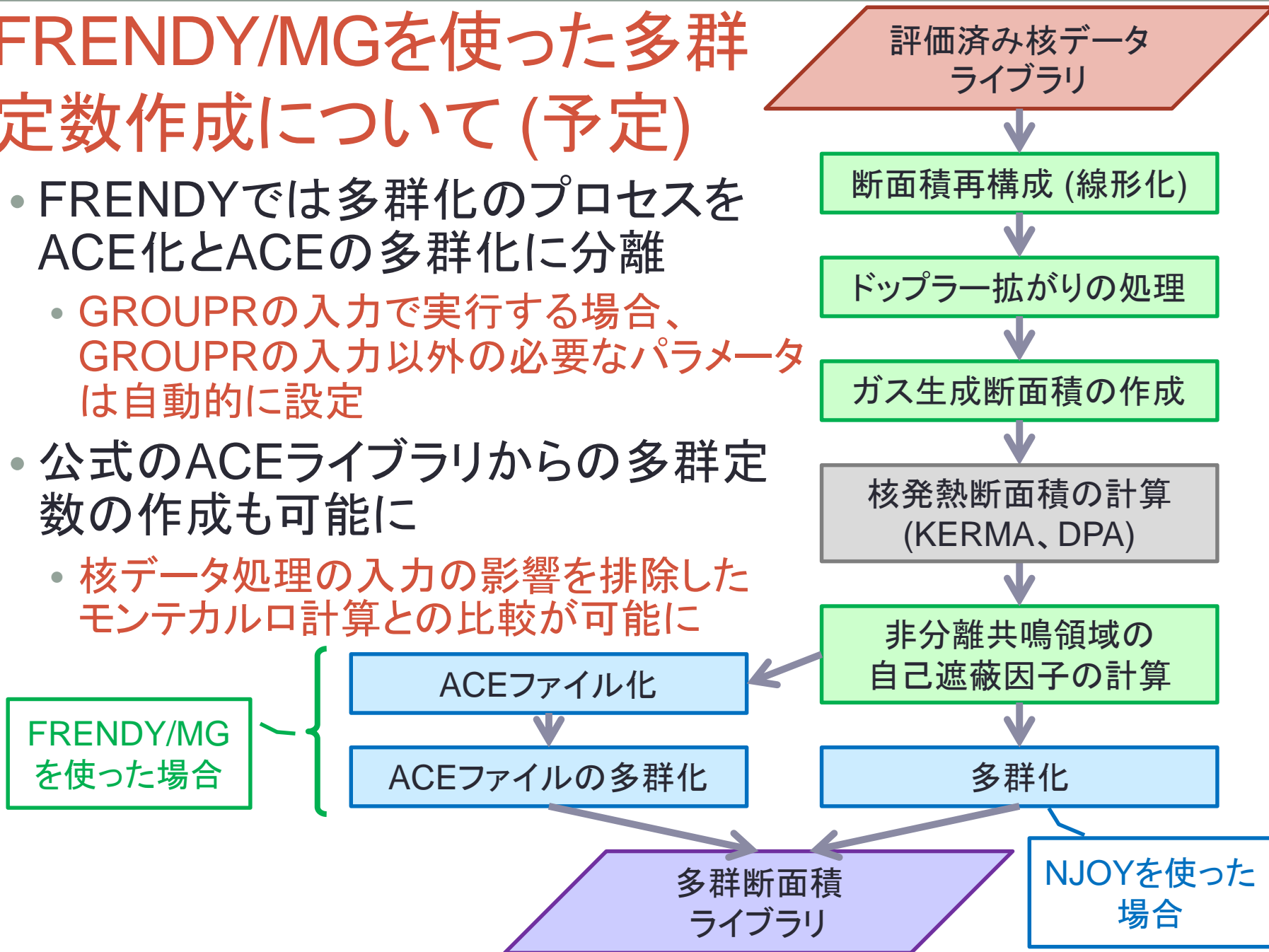
UNRESRとPURR

- どちらも非分離共鳴領域の自己遮蔽効果を取り扱う
 - 連続エネルギーモンテカルロコード用のライブラリを作成する場合、PURRしか選択肢はない
 - 多群ライブラリ作成においてはUNRESRも利用可能
 - 処理時間は圧倒的にUNRESRの方が早いですが、計算精度の観点からはPURRの方がいい
- NJOY開発者がUNRESRの使用を推奨していない
 - 論文*)よりUNRESRについての記述を抜粋
 - For most purposes, UNRESR has been superseded by PURR
 - The PURR results may be more reliable at low σ_0 values than UNRESR results
- FRENDYではUNRESRの入力にも対応しているものの、処理自体はPURRと同じ処理を行う
 - UNRESR機能の実装は行っていない

*) R. E. MacRarlane and A. C. Kahler, "Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY," *Nucl. Data Sheets*, **111**, pp.2739-2890 (2010).

FRENDY/MGを使った多群定数作成について (予定)

- FRENDYでは多群化のプロセスをACE化とACEの多群化に分離
 - GROUPRの入力で実行する場合、GROUPRの入力以外の必要なパラメータは自動的に設定
- 公式のACEライブラリからの多群定数の作成も可能に
 - 核データ処理の入力の影響を排除したモンテカルロ計算との比較が可能に



【参考】FRENDYを使ったNJOYの入力作成

- FRENDYではFRENDY用の入力からNJOYの入力を自動生成するオプションを用意
 - 一行目の処理オプションに”_make_inp”をつけるだけ
 - ace_fast_mode_make_inp、ace_tsl_mode_make_inp、ace_dosi_mode_make_inp
 - “FRENDY用の入力ファイル名.njoy_input.dat”というファイル名でNJOYの入力が生成される
- 生成した入力に間違いがある可能性があるため、きちんと入力を確認してから使うことを強く推奨
 - 主要な核種及び熱中性子散乱則については入力が適切に作成されていることを確認済み
 - マイナーな熱中性子散乱則については間違っている可能性があるため特に注意が必要
 - ライブラリによってTSLのMAT番号が違うものがあり、それらはJENDL-4.0に準拠しているため、他のライブラリではおかしくなる

【参考】FRENDYとNJOYの違い (1/4)

- FRENDYの処理手法は基本的にNJOYと同じ
 - NJOYの処理手法が物理的におかしい場合や核データの指示を無視している場合は手法を改良
 - 詳細はFRENDYマニュアル(JAEA-Data/Code 2018-014)の9.2節をご参照下さい
- FRENDYとNJOYの違い
 - RECONR: 非分離共鳴領域のエネルギー一点
 - NJOYでは非分離共鳴領域の断面積を計算するエネルギー一点が固定されているのに対し、FRENDYでは全エネルギー一点で計算
 - 数百keV～数MeVの非分離共鳴領域が重要な計算では影響があるかもしれない
 - BROADR: ドップラー拡がりの処理に必要な0eVの断面積の計算
 - NJOYは $1/v$ を仮定しているのに対し、FRENDYは線形内挿
 - 1.0×10^{-2} eV以下でしか差異が見られないので、輸送計算に与える影響はほとんどない

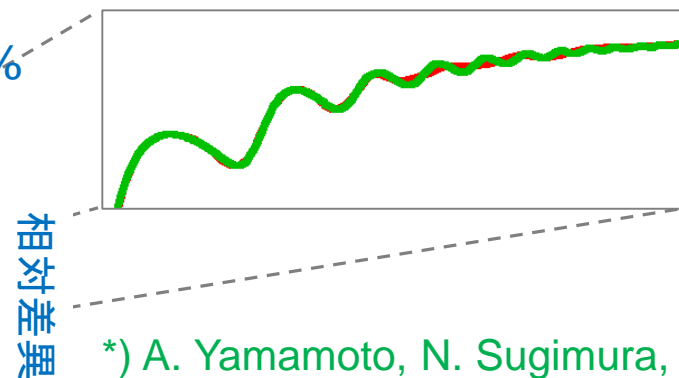
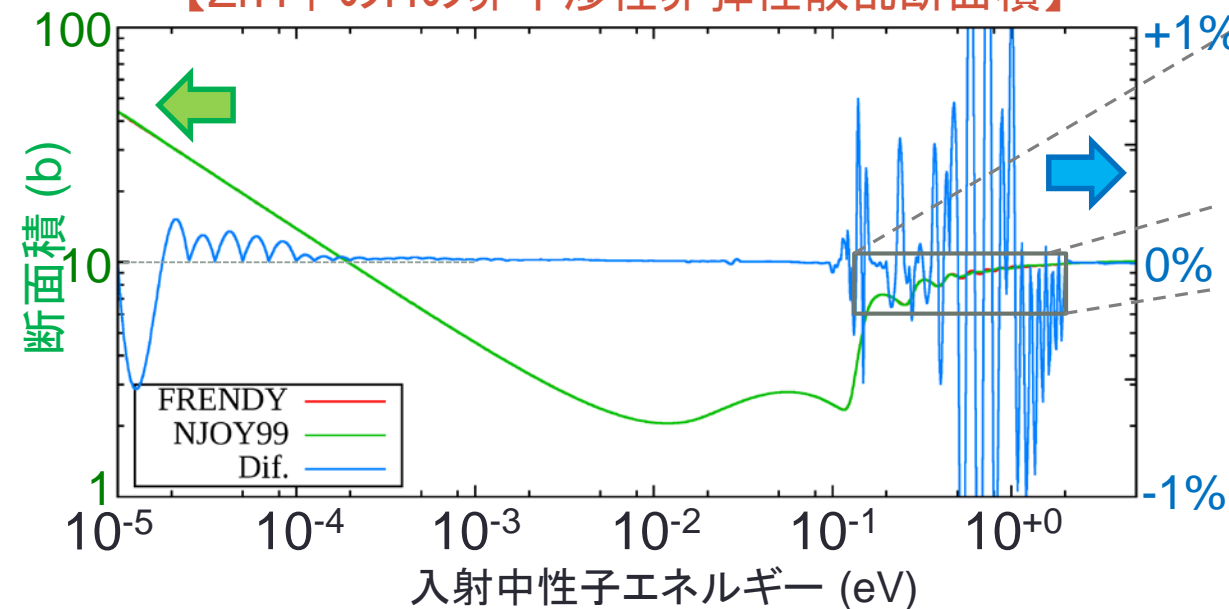
【参考】FRENDYとNJOYの違い (2/4)

- PURR: 確率テーブル作成時の共鳴構造の計算
 - NJOYでは共鳴幅 Γ の取りうる値が20個に限定されているのに対し、FRENDYではそのような制限はない
 - 確率テーブルに差異が見られるものの、輸送計算に影響があるほどの差異は見られない
- PURR: 温度依存断面積の計算
 - Single-Level Breit-Wignerでは温度依存断面積を近似的に計算可能
 - 近似計算に必要な複素誤差関数の計算手法が異なる
 - ただし、確率テーブルには大きな影響はなく、輸送計算に与える影響はない

【参考】FRENDYとNJOYの違い (3/4)

- THERMR: 熱中性子散乱則の入射エネルギー一点
 - NJOYは117点でのみ $S(\alpha, \beta)$ から計算し、それ以外は5次のラグランジュ内挿で計算しているのに対し、FRENDYは全エネルギー一点で $S(\alpha, \beta)$ から計算
 - HinZrHなど、断面積の変化が大きい物質では影響がある
 - HinH2Oでも117点では不十分との報告*)あり

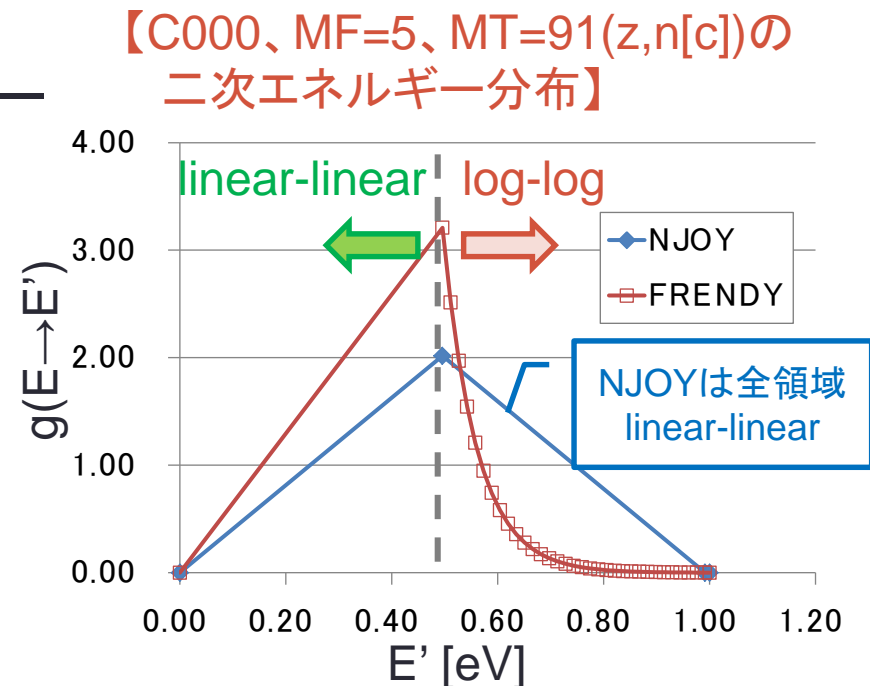
【ZrH中のHの非干渉性非弾性散乱断面積】



*) A. Yamamoto, N. Sugimura, "Improvement on Multi-group Scattering Matrix in Thermal Energy Range Generated by NJOY," *Ann. Nucl. Energy*, **33**, pp.555-559 (2006).

【参考】FRENDYとNJOYの違い (4/4)

- その他：内挿形式の無視
 - 複数の内挿形式が混在した場合、最初の内挿形式しか認識しないことがある
 - 全ての領域を最初の内挿形式とみなす
 - 内挿形式を無視するのは二次角度分布や二次エネルギー分布に多い
 - 二次角度分布や二次エネルギー分布が重要となる計算では差異がみられる可能性がある



まとめ

- FRENDDYの入力について
 - 一行目に何の処理をするかを記載
 - ace_fast_mode、ace_tsl_mode、ace_dosi_mode
 - 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
 - コメント文はC/C++と同じ
- NJOYの入力について
 - NJOYでは個々の処理ルーチン毎に入力を用意
 - RECONR、BROADR、GASPR、PURR、THERMRなど
 - 入力する処理ルーチンの順番で処理の順番が変更になる
 - コメント文はスラッシュ(/)以降
 - /を入れると残りの項目はデフォルト値が入る
 - 入力説明中のCard番号が行番号に相当
 - Card 1に記載されている項目は一行目に記入しなければならない

【参考】NJOYの入力説明

入力説明: RECONR編

- Card 1: nendf npend
 - ENDF及びPENDFファイル名(2桁の整数)
- Card 2: tlabel
 - PENDFファイル中に出力される説明文(半角66文字以内)
- Card 3: mat ncards ngrid
 - 処理する核種のMAT番号、PENDFファイルのMF=1/MT=451に出力するコメント文の行数、追加するエネルギー点数、
- Card 4: err tempr errmax errint
 - 線形内挿時の内挿許容誤差、温度点、内挿許容誤差の最大値、積分値の内挿許容誤差
- Card 5: cards
 - MF=1/MT451に出力するコメント文 (ncardsの数だけ必要)
 - ncards=0の場合、不要
- Card 6: enode
 - 追加するエネルギー点 (gridの数だけ必要)
 - grid=0の場合、不要

文字が薄くなっているのは
NJOYのデフォルト値の利用
を強く推奨するもの

入力作成のポイント: RECONR編

- nendf/npendf (card 1)
 - nendf/npendfでは二桁の整数を入れる
 - NJOYはtapeXXというファイル名しか受け付けていない
 - ENDFが大本の核データファイルで、PENDFがNJOYで処理した後の核データファイル
 - nendf=20なら評価済み核データファイルはtape20であると認識
- err/errmax/errint (card 4)
 - 線形内挿時の許容誤差
 - 基本的にerr=1.0E-3(0.1%)とし、errmax、errintはデフォルト値を用いれば良い
- tempr (card 4)
 - 一部の古い核種ではRECONRで温度依存断面積を計算できたため、入力として整備
 - RECONRで計算される温度依存断面積は近似手法を使っているため、0K以外は推奨しない

入力例: RECONR編

```

reconr                / command
 20 21                / input(tape20), output(tape21)
'pendf tape for JENDL-4 U235' / identifier for PENDF
 9228                 / mat
 1.00e-03             / err
 0                    /
    
```

ncards, ngridはデフォルト値の0

最後の項目はmat=0
(2核種目のCard 3)

tempr, errmax, errintはデフォルト値

- NJOYでは一つのファイルに複数の核種のデータが含まれていることを想定
 - Card 3~Card 6を繰り返すことで複数の核種を処理できるようにしている
 - 核種の処理を終えるためにはCard 3のMAT番号に0を入力する必要がある

入力説明: BROADR編

- Card 1: nendf nin nout
 - ENDFファイル名、BROADR前のPENDFファイル名、BROADR後のPENDFファイル名
- Card 2: mat1 ntemp2 istart istrap temp1
 - 処理する核種のMAT番号、計算したい温度点数、noutに初期の温度点のデータを追加するかどうか、全ての温度点を初期の温度点から計算するかどうか、初期の温度点
- Card 3: errthn thnmax errmax errint
 - 線形内挿時の内挿許容誤差、温度依存断面積を計算する上限エネルギー、内挿許容誤差の最大値、積分値の内挿許容誤差
 - RECONRのerr、errmax、errintと同じ
- Card 4: temp2
 - 計算する温度点 (ntemp2の数だけ必要)

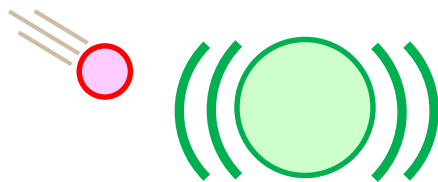
入力作成のポイント: BROADR編

- thnmax (card 3)
 - NJOYでは一般的にthnmaxは入力値、分離共鳴/非分離共鳴の境界、1MeVの中から最も低い値を上限値として設定
 - しかし、閾値反応が含まれる場合、勝手に二つ目の閾値反応の閾値と比較し、閾値の方が低い場合、閾値が上限値となってしまう
 - JENDL-4.0のU-235ではこの仕様のせいでうまく処理できない
 - この問題を回避するためには、負値を入力する必要がある
 - 負値を入力すれば強制的に入力値が上限値として設定
 - NJOY2016の最近のリリースで閾値を判定基準とする仕様が修正
 - FRENDYと同様に入力値、分離共鳴/非分離共鳴の境界、1MeVの中から最も低い値を上限値として設定し、閾値は判定基準に使われない

閾値反応とドップラー拡がりの処理

- ドップラー効果は原子核の熱運動により、中性子と原子核の相対速度に分布ができることが要因
 - 0Kでは運動しないので中性子の速度＝相対速度
- 閾値反応では、閾値が低エネルギー側に移動
 - 核データ処理コードではこの効果を取り入れられない
 - これがNJOYで閾値でドップラー拡がりの処理を止めた要因か？

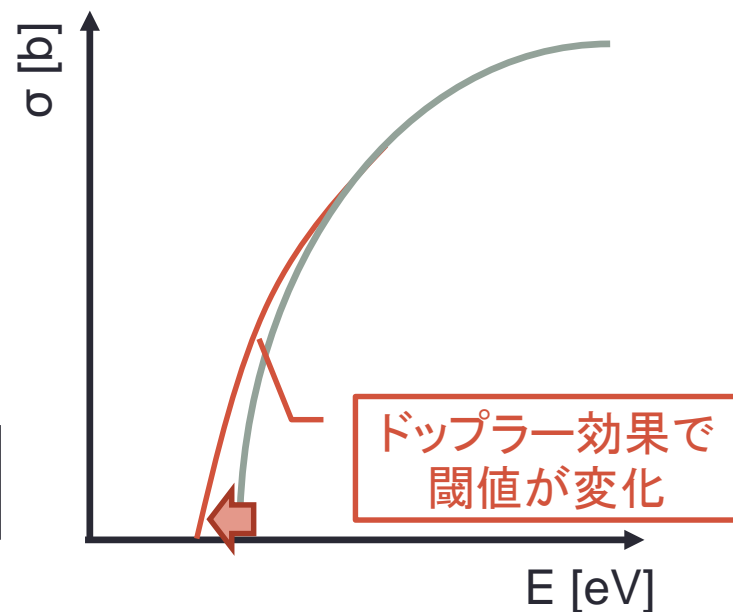
【中性子と原子核の反応】



【ドップラー拡がりの計算式】

$$\sigma(v, T) = \frac{1}{v^2} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_0^\infty dv_r v_r^2 \sigma(v_r) \left[\begin{array}{c} e^{-\beta(v-v_r)^2} \\ -e^{-\beta(v+v_r)^2} \end{array} \right]$$

T : 温度、 v : 中性子の速度、 v_r : 相対速度



入力例: BROADR編

```

broadr          / command
20 21 22       / endf, pendf(in), pendf(out)
9228 1         / mat, temp no
1.00e-03 -5.0E+2 / err, thnmax
296.0         / temp
0            /FD
    
```

-5.0E+2

負値は強制

istart, istrap, temp1
はデフォルト値

最後の項目はmat=0
(2核種目のCard 2)

errmax, errintは
デフォルト値

入力説明: GASPR編

- Card 1: nendf nin nout
 - ENDFファイル名、GASPR前のPENDFファイル名、GASPR後のPENDFファイル名

- GASPRについてはファイル名のみなので特に注意する点はない
 - ガス生成断面積(MT=203~207)を利用しないのであればこの処理は不要

gaspr

20 22 23

/ command

/ endf, pendf(in), pendf(out)

入力説明: PURR編

- Card 1: nendf nin nout
 - ENDFファイル名、PURR前のPENDFファイル名、PURR後のPENDFファイル名
- Card 2: matd ntemp nsigz nbin nladr iprint nunx
 - 処理する核種のMAT番号、計算したい温度点数、背景断面積の数、確率ビン数、ラダー数、出力オプション、必要なエネルギー点数(0:全部)
- Card 3: temp
 - 計算する温度点 (ntempの数だけ必要)
- Card 4: sigz
 - 背景断面積 (nsigzの数だけ必要)

入力作成のポイント: PURR編

- nbin/nladr (card 2)
 - 確率ビン数は15以上でなければならない
 - ラダー数は100以上を推奨
- iprint (card 2)
 - PENDFではなく、出力ファイルに書き出されるので、処理上は0=minでも1=maxでも構わない
- nunx (card 2)
 - 全エネルギー一点を計算しても計算時間はそれほど長くないので、わざわざエネルギー一点を減らす必要はない
- sigz (card 4)
 - 背景断面積は必ず降順とし、最初の値は1.0E+10など、極めて大きい値にする必要がある
 - 最初のsigzの値を無限大の背景断面積とみなすため
 - sigzは多群断面積の生成に必要
 - ACEファイル生成においてはsigzの値の違いは影響を与えない

入力例: PURR編

```

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            /
    
```

最後の項目はmat=0
(2核種目のCard 2)

nunxはデフォルト値

入力説明: THERMR編

- Card 1: `nendf nin nout`
 - TSLのENDFファイル名、THERMR前の対象核種のPENDFファイル名、THERMR後のPENDFファイル名
- Card 2: `matde matdp nbin ntemp iin icoh iform natom mtref iprint`
 - TSLのMAT番号、対象核種のMAT番号、角度ビン数、温度点数、非弾性散乱の設定、弾性散乱の設定、出力形式の設定、principal atom数、非弾性散乱のMT番号(221-225のみ)、出力オプション
- Card 3: `temp`
 - 温度点 (ntempの数だけ必要)
- Card 4: `tol emax`
 - 二次エネルギー・角度分布の線形内挿許容誤差、TSLを考慮する最大のエネルギー点
 - tolはRECONRのerrと同じ

TSLの核データを読めないと
入力できないパラメータ

入力作成のポイント: THERMR編 (1)

- nendf/nin (card 1) & matde/matdp (card 2)
 - nendf、matdeはTSLの核データファイル、MAT番号
 - 例えばHinH2Oの核データとMAT番号
 - TSLデータを用いず、Freegasとして計算するのであれば0とする
 - nin、matdpはドップラー拡がりの処理後の核種のPENDFファイル、MAT番号
 - 例えばH-001
- iform (card 2)
 - NJOY2012以降で実装されたオプション
 - NJOY99とNJOY2012/2016は同じ入力が使えない
 - NJOY99とNJOY2012/2016を併用する場合、iformの有無に注意しないとnatom以降の入力がずれることになるため、意図した処理にならない
- mtref (card 2)
 - 弾性散乱のMT番号はmtref+1が自動的に与えられる

入力作成のポイント: THERMR編 (2)

- natom (card 2)
 - 分子中の対象核種の数
 - HinH2OならHが2個なので、natom=2、OinH2OならOが1個なのでnatom=1
- temp (card 3)
 - TSLの核データファイルで定義されている温度点以外は処理できない
 - 対象核種のPENDFファイルにその温度点が無い場合も処理できない
- emax (card 4)
 - LANLの公式のACEではTSLの核データファイルで与えられている上限となっている
 - 核データファイルの上限か、それよりも高い値(10e程度V)とすることが望ましい
 - 核データファイルで与えられている上限以上についてはShort Collision Time (SCT)近似で計算
 - エネルギー遷移幅大きい(散乱前後のエネルギー変化が大きい)場合、自由ガスモデル(Free gas)に比べてSCT近似とした方が熱中性子散乱の効果を考慮できる
 - エネルギー遷移幅が小さい場合はFree gasとほぼ同じ

入力作成のポイント: THERMR編 (3)

- iin (card 2)
 - オプションの番号がNJOY99とNJOY2012/2016で異なる
 - TSLの核データから非弾性散乱のデータ(MF=7/MT=4)があるかどうかを調べる必要がある
- icof (card 2)
 - TSLの核データから非弾性散乱のデータ(MF=7/MT=2)があるかどうかを調べる必要がある
 - NJOY2016マニュアルのTHERMRのTable 3, 4やACEファイルの説明資料(LA-UR-08-3628、LA-UR-12-00800)も参考になる
 - MF=7/MT=2のデータを使うという選択肢と、処理コード内の情報を使って黒鉛の弾性散乱断面積を計算するというオプションが同じ
 - 入力を間違えると水なのに結晶構造に起因した弾性散乱を持つといったことも。。
- iform (card 2)
 - NJOY2012以降で有効になったオプション
 - NJOY99とNJOY2012を併用する場合、iformの有無に注意しないとnatom以降の入力がずれることになるため、正しい処理にならない

【参考】NJOY99/2016のiin/icofの違い

NJOY99

iiinc inelastic options

- 0 none
- 1 compute as free gas
- 2 reserved
- 3 reserved
- 4 read s(a,b) and compute matrix

icoh elastic options

- 0 none
- 1 compute using ENDF6 input tape data
- or for pre-ENDF6 input set icoh =
- 1 graphite
- 2 beryllium
- 3 beryllium oxide
- 11 polyethylene
- 12 h(zrh)
- 13 zr(zrh)

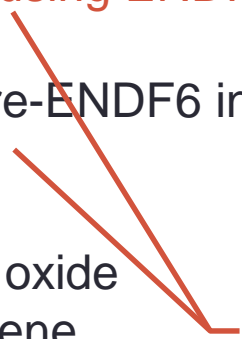
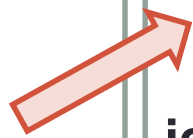
NJOY2016

iin inelastic options

- 0 none
- 1 compute as free gas
- 2 read s(a,b) and compute matrix

icoh elastic options

- 0 none
- 1 compute using ENDF6 format data
- or for earlier formats
- 1 graphite
- 2 beryllium
- 3 beryllium oxide
- 11 polyethylene
- 12 h(zrh)
- 13 zr(zrh)



番号が同じ!!

入力例: THERMR編

thermr	<i>/command</i>
26 23 27	<i>/nendf nin nout</i>
1 125 60 1 2 0 0 2 221	<i>/matde matdp nbin ntemp iin icoh</i>
<i>iform natom mtref</i>	
293.6	<i>/temp</i>
1.0e-03 1.00001e+01	<i>/tol emax</i>

HinH2OにはMF=7/MT=2が無い
のでicoh=0

iformがあるので
NJOY2012/2016用の入力

入力説明: ACER編 (共通)

- Card 1: nendf npend ngend nace ndir
 - ENDFファイル名、ACER前のPENDFファイル名、多群光子ファイル名、ACEFファイル名、XSDIRファイル名
- Card 2: iopt iprint itype suff nxtra
 - 処理する核データの種類、出力オプション、ACEファイルの形式 (1=テキスト/2=バイナリ)、suffix番号、別のIZ/AWデータ
 - FRENDYではitype=2(バイナリ形式)は非対応
 - iopt=1: 中性子/陽子入射、iopt=2: 熱中性子散乱則、iopt=3: dosimetry、iopt=4: photo-atomic、iopt=5: photo-nuclear
- Card 3: hk
 - ACEファイルの一行目の説明文 (最大半角70文字)
- Card 4: iz, aw
 - IZ/AWデータ (nxtraの数だけ必要)

入力説明: ACER編 (iopt=1)

- Card 5: matd tempd
 - 核種のMAT番号、温度点
- Card 6: newfor iopp
 - 新しい角度分布形式(LAW=61)を使うかどうか、詳細な光子データを出力するかどうか
 - MCNP4C以降はLAW=61に対応しているので、newfor=1(yes)とすることが望ましい
 - ファイル容量の問題なので、iopp=1(yes)が望ましい
- Card 7: thin(1) thin(2) thin(3)
 - データ圧縮オプション
 - ファイル容量の圧縮を行う必要がないため、設定すべきではない
 - /でこの行を全てコメントアウトすることを推奨

入力説明: ACER編 (iopt=2)

- Card 8: matd tempd tname
 - 核種のMAT番号、温度点、ACEファイル & XSDIRに書き出す物質名(最大半角6文字)
- Card 8a: iza01 iza02 iza03
 - 対象核種のZA番号
- Card 9: mti nbint mte ielas nmix emax iwt
 - 非弾性散乱のMT番号、二次エネルギービン数、弾性散乱のMT番号、干渉性/非干渉性の選択、混合物質かどうかの選択、上限エネルギー、重みオプション
 - mtiはTHERMRのmtref、mteはTHERMRのmtref+1
 - emaxはTHERMRのemaxと同じ

入力作成のポイント: ACER編 (iopt=2)

- tname (card 8)
 - ここで指定した物質名をMCNPの入力でも利用される
- iza01 iza02 iza03 (card 8a)
 - 通常はiza01のみだが、ZrinZrHのようにZrに複数の対象核種がある場合、iza02、iza03にZA番号を入れる必要がある
- ielas (card 9)
 - TSLの核データ中のMF=7/MT=2を読んで干渉性弾性散乱断面積と非干渉性弾性散乱断面積のどちらが入っているかを確認する必要がある
 - NJOY2016マニュアルのTHERMRのTable 3, 4やACEファイルの説明資料(LA-UR-08-3628、LA-UR-12-00800)も参考になる
- nmix (card 9)
 - 主にベンゼン、BeO、SiO₂でnmix=2、それ以外はnmix=1
 - BeOはJENDL-4.0ではnmix=2だが、ENDF/B-VIII.0ではnmix=1であり、核データライブラリによっても異なるので要注意
- iwt (card 9)
 - MCNP6.1以降を用いる場合はIWT=2を、それ以前のMCNPやPHITSを用いる場合はIWT=0とすることを推奨

入力例: ACER編 (iopt=1)

多群の光子ファイルを使わない
場合、ngend=0に

```

acer          / command
20 24 0 30 31 / nendf, 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        /
    
```

thin(1)~thin(3)は未入力のため、
空白に

入力例: ACER編 (iopt=2)

```
acer /command
26 27 0 30 31 /nendf npend ngend nace ndir
2 1 1 0.0 0 /iopt iprint itype suff nextra
'ACE file for HinH2O from JENDL-4.0' /hk
125 2.93600e+02 'lwtr' /matd tempd tname
1001 /iza
221 60 0 0 1 1.00001e+01 0 /mti nbint mte ielas nmix emax iwt
```

HinH2Oをlwtrとすると『宣言』
※MCNPの入力でもlwtrとすることがある