

# 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

```
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 1446675 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

④ 一行80文字を越えたら『+』を追加した上で改行

③ 『route』を0に



# 【参考】ACEファイルをまとめる場合

- 複数の核種を一つのACEファイルにまとめることも可能
  - 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
    - sample/tool/ace\_data\_collector.exe
    - 利用方法はsample/run/run\_ace\_data\_collector.csh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

中性子入射の例

TSLの例

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

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

# 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