



**POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL**

Le code de sections efficaces NJOY-2012

A. Hébert

2020/06/12

Table des matières

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD
Le système PyNjoy

Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy

Les évaluations nucléaires

Les évaluations nucléaires

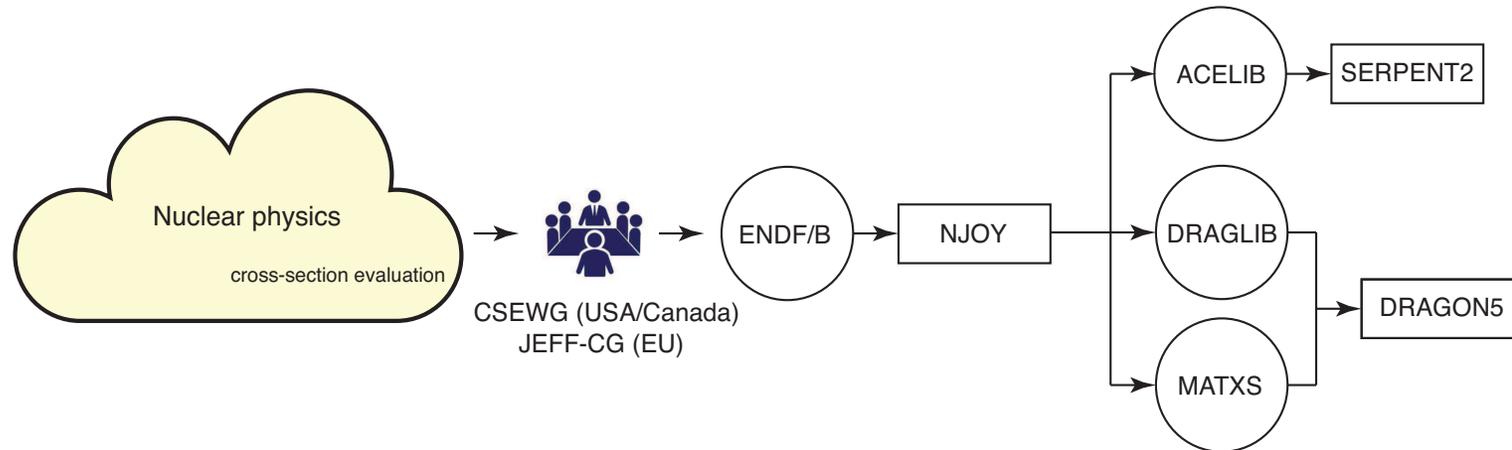
Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

- Les évaluations nucléaires sont assemblées par le comité CSEWG (USA/Canada) ou JEFF-CG (Union Européenne) à partir d'évaluations fournies par des physiciens nucléaires.
- Les évaluations traitées par ces comités sont actuellement en format **ENDF-102**
- Un projet à moyen terme est de remplacer le format ENDF-102 par le format **Generalized Nuclear Data Structure (GNDS)**.
- **Toute donnée nucléaire ou atomiques utilisée par les codes SERPENT2 et DRAGON5 doit avoir été approuvée par un des comités CSEWG ou JEFF-CG**
- Les données relatives aux interactions photon-électrons doivent provenir de la base de données EPICS2017, intégrée à l'évaluation ENDF/B-VIII.



CSEWG : Cross Section Evaluation Working Group

JEFF -CG : Joint Evaluated Fission and Fusion – Coordination Group

Les évaluations nucléaires

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données

EPICS2017

Revision de source

UPD

Le système PyNjoy

Une évaluation au format ENDB-102 possède une organisation hiérarchique:

tape Un **tape** ENDF est un fichier qui contient un ou plusieurs matériaux ENDF. Par exemple, **tape 511** de ENDF/B-V contient les données neutronique pour ^1H , ^3H , ^4He et ^{11}Be . Dans les évaluations modernes, on place un isotope par **tape** (fichier).

MAT Identificateur de matériel formé à partir des valeurs de Z et A de chaque isotope, ainsi que de son niveau d'excitation isomérique. Par exemple, 125 est ^1H , 128 est ^2H , 2625 est ^{54}Fe , 6153 est $^{148}\text{Pm}^m$, et 9237 est ^{238}U . Pour les réactions atomiques, l'identificateur est seulement donné par $100 \times Z$. Par exemple, 9200 est U.

MF Identificateur de type de données

MF code	type
1	descriptive and miscellaneous data
2	resonance parameter data
3	reaction cross sections vs energy
4	contains angular distributions
5	contains energy distributions
6	contains energy-angle distributions
7	contains thermal scattering data
8	contains radioactivity data
9-10	nuclide production data
12-15	photon production data
30-36	covariance data

MT Identificateur de section, permettant d'identifier différentes réactions.

MT code	reaction
1	section efficace totale
2	section efficace de diffusion élastique
16	réaction (n,2n)
18	fission
102	capture radiative

Les évaluations nucléaires

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données

EPICS2017

Revision de source

UPD

Le système PyNjoy

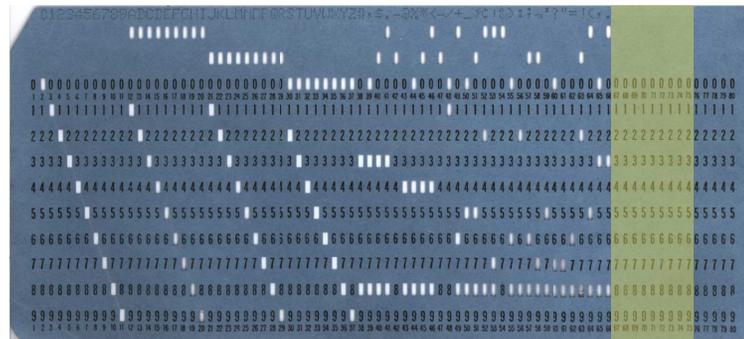
Documentation en ligne du format ENDF-102

Introduction to the ENDF Formats

Historique des sorties d'évaluations ENDF/B

1966 Spécification ENDF-102 (numéro du rapport)

- Spécification compatible avec les cartes perforées de 80 colonnes
- Les identificateurs MAT, MF et MT sont stockés sur les colonnes 67 à 75 de chaque carte (format I4/I2/I3)



- Les évaluations devaient être distribuées sur bande magnétique 9 pistes

1968 Sortie de ENDF/B-I

1974 Sortie de ENDF/B-IV (encore utilisée en production)

1978 Sortie de ENDF/B-V

1990 Sortie de ENDF/B-VI

2006 Sortie de ENDF/B-VII

2018 Sortie de ENDF/B-VIII

Les évaluations nucléaires

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données

EPICS2017

Revision de source

UPD

Le système PyNjoy

L'évaluation ENDF/B-VII de ²³⁸U

```

                                1 0 0
9.223800+4 2.360058+2          1          1          0          59237 1451  1
0.000000+0 1.000000+0          0          0          0          69237 1451  2
1.000000+0 3.000000+7          6          0         10          79237 1451  3
0.000000+0 0.000000+0          0          0         675         1179237 1451  4
92-U -238 ORNL,LANL+ EVAL-SEP06 Young,Chadwick,Derrien,Courcelle 9237 1451  5
                                DIST-DEC06 REV2-
                                MATERIAL 9237 REVISION 2          9237 1451  6
----ENDF/B-VII
----INCIDENT NEUTRON DATA          9237 1451  8
-----ENDF-6 FORMAT          9237 1451  9
*****
                                9237 1451 10
                                9237 1451 11
                                9237 1451 12
                                9237 1451 13
P.G.Young, M.B.Chadwick, R.E.MacFarlane, W.B.Wilson, D.G.Madland, 9237 1451 14
                                P.Talou, T. Kawano (LANL)          9237 1451 15
                                and          9237 1451 16
                                H. Derrien, A. Courcelle, L. C. Leal, N. Larson (ORNL) 9237 1451 17
...
0.000000+0 0.000000+0          0          0          0          09237 0 0  0
9.223800+4 2.360058+2          0          0          1          09237 2151  1
9.223800+4 1.000000+0          0          0          2          09237 2151  2
1.000000-5 2.000000+4          1          3          0          09237 2151  3
0.000000+0 9.480000-1          0          0          2          29237 2151  4
2.360060+2 9.480000-1          0          0         5556         9269237 2151  5
-9.330000+1 5.000000-1 7.658435-3 2.300000-2 0.000000+0 0.000000+09237 2151 23
-7.330000+1 5.000000-1 5.086118-3 2.300000-2 0.000000+0 0.000000+09237 2151 24
-5.330000+1 5.000000-1 2.932955-3 2.300000-2 0.000000+0 0.000000+09237 2151 25
-3.330000+1 5.000000-1 1.004548-2 2.300000-2 2.010000-6 0.000000+09237 2151 26
-7.000000+0 5.000000-1 1.685000-4 2.300000-2 0.000000+0 0.000000+09237 2151 27
6.673491+0 5.000000-1 1.475792-3 2.300000-2 0.000000+0 9.990000-99237 2151 28
2.087152+1 5.000000-1 1.009376-2 2.286379-2 5.420000-8 0.000000+09237 2151 29
3.668212+1 5.000000-1 3.354568-2 2.300225-2 0.000000+0 9.770000-99237 2151 30
6.603118+1 5.000000-1 2.417823-2 2.330763-2 5.265000-8 0.000000+09237 2151 31
8.074744+1 5.000000-1 1.873989-3 2.338714-2 0.000000+0 6.049000-89237 2151 32
...

```

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données

EPICS2017

Revision de source

UPD

Le système PyNjoy

Le code NJOY, développé par [Los Alamos National Laboratory](#) (LANL) permet de traiter les évaluations de données nucléaires au format ENDF-102 (et bientôt au format GNDS), et de générer des bibliothèques de sections efficaces

- à énergie continue pour les codes Monte Carlo
- multigroupes pour les solveurs de l'équation de Boltzmann par approche numérique.

Historique des développements NJOY

MINX (1970) Première version, identifiée MINX

NJOY (1975) Première version, identifiée NJOY

NJOY-99 Intégrée à la distribution Version4. Programmée en Fortran-77

NJOY-2012 Associée à la distribution Version5.

- Programmée en Fortran-90
- Utilise le système de revision de source UPD
- Requiert une license LANL
- Maintenu par Jean-Christophe Sublet, IAEA

NJOY-2016 Version Open-Source de NJOY

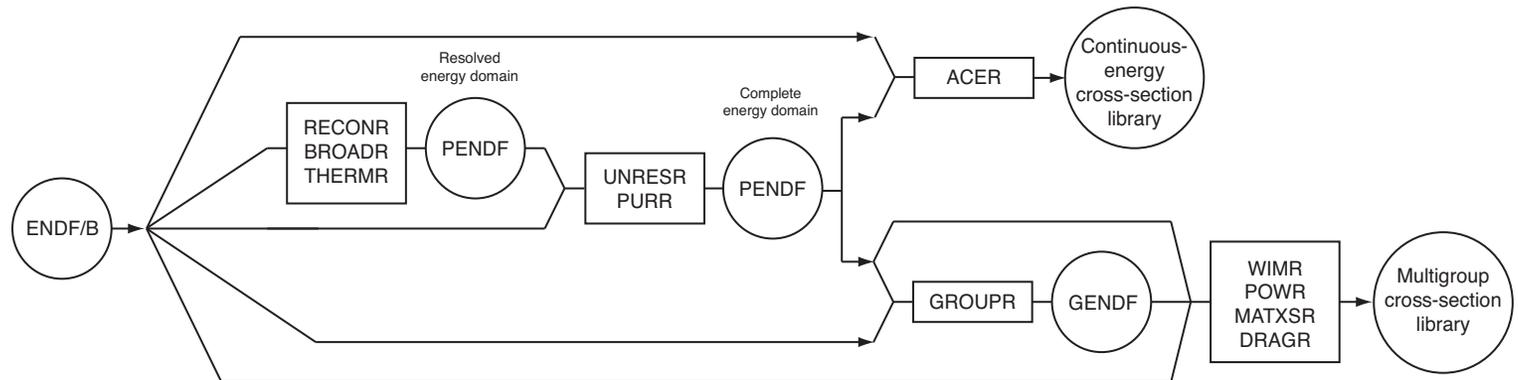
- Programmée en Fortran-90.
- Utilise le système de revision de source GIT sur GitHub
- Les fichiers de données de NJOY-2012 sont compatibles

NJOY-21 Version “moderne” Open-Source de NJOY

- Programmée en C++
- Accepte les évaluations en format ENDF-102 et GNDS
- Utilise le système de revision de source GIT sur GitHub
- Les fichiers de données de NJOY-2012 et NJOY-2016 sont compatibles

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Chaque isotope de l'évaluation est traité par un flot de donnée spécifique du code NJOY, de façon à produire une **bibliothèque de sections efficaces** compatible avec le type de solution de l'équation de transport qui sera utilisée par la suite. Le flot de données NJOY est représenté dans la figure suivante.



- RECONR: resonance reconstruction at 0K
 BROADR: numerical convolution for Doppler effect
 THERMR: $S(\alpha, \beta)$ model, including free gas model
 UNRESR: compute self-shielded cross sections at unresolved energies
 PURR: compute probability tables and self-shielded cross sections at unresolved energies
 GROUPR: multigroup formatting of cross sections
 DRAGR : creation of a multigroup cross section library in Draglib format
 MATXSR : creation of a multigroup cross section library in MATXS format
 ACER : creation of a continuous-energy cross section library in ACELIB format

Le code de sections efficaces NJOY-2012

- Un **calculateur de flux** est disponible dans GROUPE pour prendre en compte la dépression du flux neutronique aux locations des résonances.
- Il s'agit d'une solution de l'équation de transport de Boltzmann (BTE) en milieu infini et homogène.
- Un paramètre de dilution σ_e est utilisé pour déterminer l'influence d'un isotope résonnant sur le flux.
 - ◆ une valeur infinie de σ_e , correspondant à la **dilution infinie**, signifie aucun effet
 - ◆ une petite valeur de σ_e signifie beaucoup d'effet

L'équation du calculateur de flux est

$$[\sigma_e + \sigma^*(u)] \phi(u) = \sigma_e + \frac{1}{N^*} \mathcal{R}^* \{ \phi(u) \}$$

où $\mathcal{R}^* \{ \phi(u) \}$ est l'opérateur de ralentissement élastique sur l'isotope résonnant:

$$\mathcal{R}^* \{ \phi(u) \} = \int_0^u du' \Sigma_{s0}^*(u \leftarrow u') \phi(u') = \frac{1}{1-\alpha} \int_{u-\epsilon}^u du' e^{u'-u} \Sigma_s^*(u') \phi(u')$$

où les paramètres α et ϵ sont définis par

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2 \quad \text{et} \quad \epsilon = \ln \frac{1}{\alpha} .$$

Typiquement, ≈ 20 valeurs de dilutions dans l'intervalle $4 \leq \sigma_e \leq 1.0 \times 10^{10}$ barn sont sélectionnées pour représenter correctement les situations pratiques.

Les données EPICS2017

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

EPICS2017 est la base de données pour les interactions **électro-atomiques** et **photo-atomiques** qui contient les données permettant d'effectuer des calculs de transport couplés électron-photon et de produire des résultats macroscopiques précis, comme le calcul de dépôt d'énergie ou le calcul de dose. Ces données sont valides pour des énergies du photon > 1 keV. Les données de EPICS2017 sont incluses dans l'évaluation ENDF/B-VIII sous la forme de trois bases de données:

1. la base Evaluated Electron Data Library (EEDL) permet de décrire les interactions des électrons avec la matière (**electrons** subdirectory)
2. la base Evaluated Photon Data Library (EPDL) permet de décrire les interactions des photons avec la matière (**photoat** subdirectory)
3. la base Evaluated Atomic Data Library (EADL) permet de décrire les émissions d'électrons et de photons causées par la déséxcitation d'un atome ionisé (**atomic_relax** subdirectory)

La référence de ces données est

D. E. Cullen, "A Survey of Photon Cross Section Data for use in EPICS2017," Report IAEA-NDS-225, rev. 1, 2018.

Les données EPICS2017

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

- Il y a **un** fichier EEDL, **un** fichier EPDL et **un** fichier EADL pour chaque valeur du nombre atomique $1 \leq Z \leq 100$.
- Ces données sont écrites en format ENDF-102.
- Les données d'interactions photo-atomiques du fichier EPDL sont disponibles pour
 - ◆ MF = 23 pour les sections tabulées avec variation lente en énergie. Ce fichier est utilisé pour les réactions photoélectriques, et de production de paire électron-positron.
 - ◆ MF = 27 pour les sections avec une formule analytique de variation en énergie. Ce fichier est utilisé pour les réactions de diffusion Rayleigh et Compton.
- Les données de transition radiative de la bibliothèque de relaxation EADL sont disponibles avec MF = 28 et MT = 533.
- Les identificateurs MT de la bibliothèque photoatomique EPDL suivants sont disponibles:

MT code	reaction
501	total
502	Rayleigh scattering
504	Compton scattering
516	pair production
522	photoelectric effect

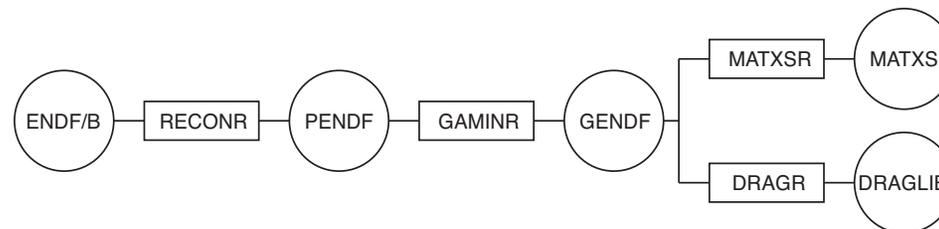
- Les données photonucléaires (émission de photoneutron) et les données de relaxation du noyau composé ne sont pas incluses.

Les données EPICS2017

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD
Le système PyNjoy

- Les données photoatomiques de EPDL peuvent être traitées par les modules **RECONR** et **GAMINR** de NJOY. Notez que les formules de Klein-Nishina utilisées par la diffusion Compton sont implémentées directement dans le module **GAMINR**.
 - ◆ Le traitement des **photons secondaires** de relaxation, bremsstrahlung et annihilation electron-positron ne sont actuellement **pas implémentés** dans le module **GAMINR**.
 - ◆ Actuellement, seuls les codes de Monte Carlo MCNP6, SERPENT2 et GEANT4 peuvent traiter les données de photons secondaires.
 - ◆ Dans le contexte de ses travaux de R&D, Polytechnique Montréal propose de compléter l'implémentation du traitement des photons secondaires dans le module **GAMINR**.

- Une bibliothèque multigroupe de sections efficaces sera produite dans NJOY en traitant le fichier **GENDF** produit par **GAMINR** à l'aide du module **MATXSR** ou **DRAGR**.



- La bibliothèque produite est une **bibliothèque atomique**, pas une bibliothèque isotopique.
- La bibliothèque **MATXS** est un fichier `ascii` générique, indépendant de DRAGON5.

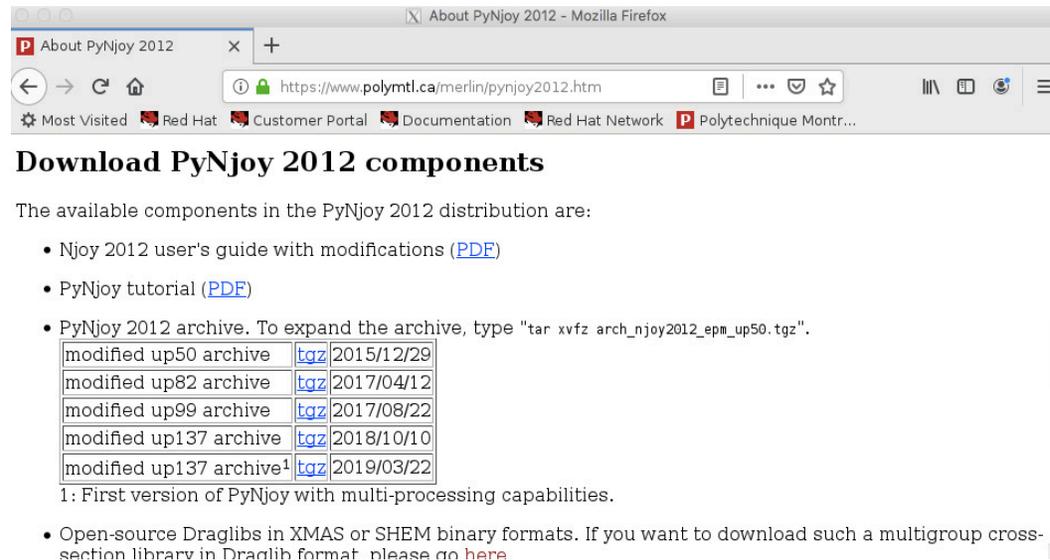
Revision de source UPD

NJOY-2012 utilise le système de revision de source UPD, un émulateur du système UPDATE, développé par Control Data Corporation dans les années 1970:

Control Data Corporation, "UPDATE, Version 1, Reference Manual," Report CDC 60449900, 1975.

■ Récupération du fichier archive:

Activer firefox. Cliquer sur le lien [tgz](#) de la version up137 dans firefox. Le fichier arch_njoy2012_epm_mp_up137.tgz sera téléchargé dans le répertoire Downloads.



Download PyNjoy 2012 components

The available components in the PyNjoy 2012 distribution are:

- Njoy 2012 user's guide with modifications ([PDF](#))
- PyNjoy tutorial ([PDF](#))
- PyNjoy 2012 archive. To expand the archive, type "tar xvfz arch_njoy2012_epm_up50.tgz".

modified up50 archive	tgz	2015/12/29
modified up82 archive	tgz	2017/04/12
modified up99 archive	tgz	2017/08/22
modified up137 archive	tgz	2018/10/10
modified up137 archive ¹	tgz	2019/03/22

1: First version of PyNjoy with multi-processing capabilities.

- Open-source Draglibs in XMAS or SHEM binary formats. If you want to download such a multigroup cross-section library in Draclib format, please go [here](#).

■ Décompression du code:

```
-bash-4.1$ cd ~
-bash-4.1$ mv Downloads/arch_njoy2012_epm_mp_up137.tgz .
-bash-4.1$ tar xvfzp arch_njoy2012_epm_mp_up137.tgz
```

Revision de source UPD

- L'archive ne contient pas le code source de Njoy-2012 pour des raisons de license. Celui-ci doit être récupéré du compte `~develop`. Njoy-2012 peut ensuite être compilé.

```
-bash-4.1$ cd Njoy2012_EPM
-bash-4.1$ cp ~develop/Njoy2012_EPM/src_2012p0 .
-bash-4.1$ ./install
```

- Njoy a besoin d'accéder les évaluations en format ENDF/B. Celles ci sont disponibles sur le compte `~develop`. Vu leurs dimensions, il est préférable de créer un lien symbolique pour les accéder.

```
-bash-4.1$ cd ~
-bash-4.1$ ln -s ~develop/evaluations/ .
```

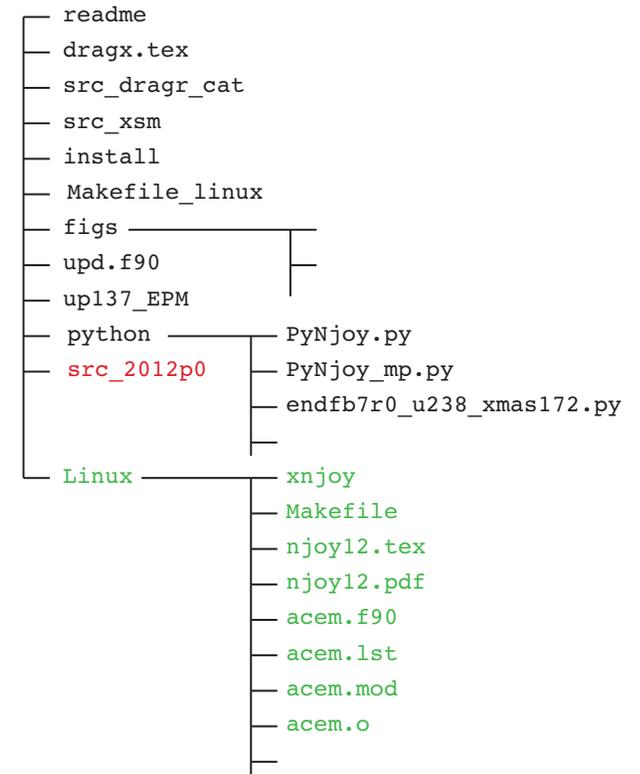
Revision de source UPD

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

`readme` fichier d'information général
`dragx.tex` fichier \LaTeX de documentation du
module `dragr`
`src_dragr_cat` source Fortran du module `dragr`
`src_xsm` source Fortran des utilitaires `xsm` et `kdi`
`install` script d'installation
`Makefile_linux` makefile d'installation
`figs` directory contenant les figures de la
documentation
`upd.f90` source Fortran de l'émulateur `upd`
`upd_137_EPM` update officiel fourni par Jean-
Cristophe Sublet avec additions EPM
`python` directory contenant PyNjoy et les fichiers
de données
`src_2012p0` source Fortran de NJOY-2012 up0 (non
inclus dans la distribution EPM)
`Linux` directory créé par le script `install`
`xnjoy` exécutable du code NJOY
`acem.lst` fichier ASCII contenant les numéros de
lignes utilisés par `upd` pour effectuer les
updates du module `acer`



Revision de source UPD

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD
Le système PyNjoy

Exemple d'addition d'un nouveau module

- On observe les numéros de ligne du fichier `njoy.lst`:

```

njoy.5   : !      NJOY Nuclear Data Processing System      njoy
njoy.6   : !      Version 2012                             njoy
njoy.7   : !
...
njoy.76  : !
njoy.77  : ! leapr...generate S(alpha,beta) for thermal moderators. njoy
njoy.78  : !
njoy.79  : ! gaspr...add gas production (MT203-207) to PENDF tape. njoy
njoy.80  : !
...
njoy.139 :      use purm      ! provides purr              njoy
njoy.140 :      use leapm     ! provides leapr             njoy
njoy.141 :      use gaspm     ! provides gaspr             njoy
njoy.142 :
...
njoy.263 :          case('gaspr') ! add gas production (mt203-207) to pendf njoy
njoy.264 :          call gaspr
njoy.265 :
njoy.266 :          case ('--')  ! comment card; nothing to do njoy
njoy.267 :

```

- On introduit les lignes suivantes dans le fichier `upd_137_EPM`:

```

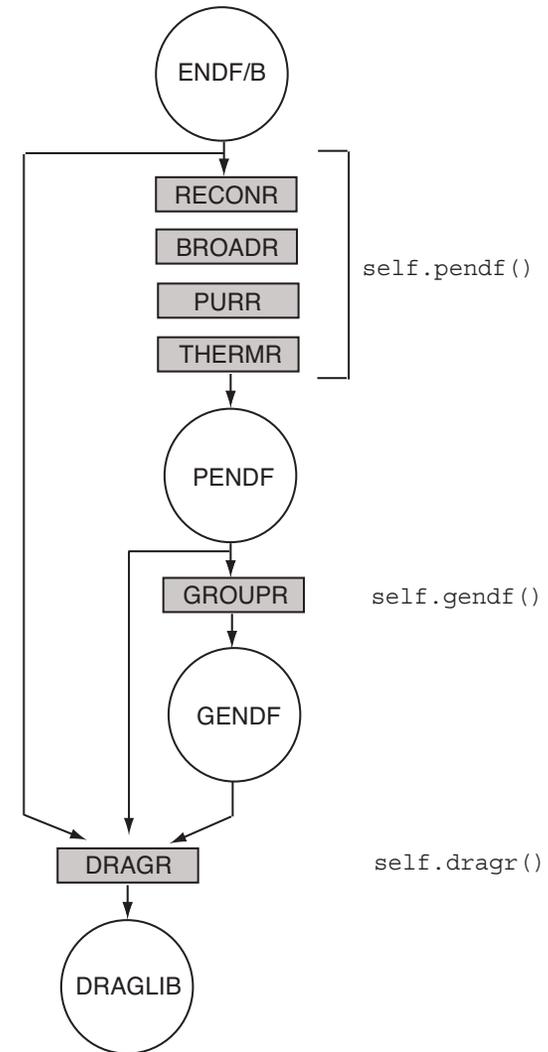
*ident updr
*/ dragr -- 30jan2016
*i njoy.77
!
! dragr...convert multigroup data into libraries for the lattice
!          code Dragon.
*i njoy.141
  use dragm      ! provides dragr
*i njoy.264
          case('dragr') ! produce libraries for Dragon
          call dragr
*ident newv
*/ 13sep2018
*d njoy.6
!      Version 2012.137

```

Disponible sur la page [PyNjoy-2012](#).

Le système comporte 3 composantes:

- module (Fortran 90) de post-traitement dragm
- script (Python) PyNjoy.py pour encapsuler les appels aux modules NJOY
- un fichier de données par évaluation/bibliothèque



Le système PyNjoy

Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

1. Instanciation d'un objet:

```
from PyNjoy import *  
jef2p2 = PyNjoy()
```

2. Définition des variables d'instance:

```
jef2p2.evaluationName = "Jef2.2"  
jef2p2.nstr = 22  
jef2p2.iwt = 4  
jef2p2.legendre = 1  
jef2p2.hmat = "U238"  
jef2p2.mat = 9237  
jef2p2.evaluationFile = "$HOME/evaluations/Jef2.2/tape7"  
jef2p2.fission = 2 # fission with delayed neutrons  
jef2p2.ss = (2.76792, 1.22773e5)  
jef2p2.potential = 11.1710  
jef2p2.dilutions = ( 1.e10, 94.5, 56.3, 33.6, 20.0, 11.9, \  
                    7.1, 4.2 )  
jef2p2.temperatures = ( 293., 550., 900., 1200. )
```

3. Activation de la méthode:

```
jef2p2.pendf()
```

Jeu de données complet

```
#!/usr/local/bin/python
from PyNjoy import *
from os import uname
endfb = PyNjoy()
endfb.evaluationName = "/tmp/xmas172_u238_endfb7r0 "
endfb.execDir = "../" + uname()[0]
endfb.nstr = 22
endfb.iwt = 4
endfb.Espectra = None
endfb.autolib = (2.76792, 677.2873, 0.00125)

endfb.scatteringLaw = None
endfb.temperatures = ( 293., )
endfb.fission = None
endfb.dilutions = None

endfb.hmat = "U238"
endfb.mat = 9237
endfb.evaluationFile = "$HOME/evaluations/ENDFB7r0/n-ENDF-VII0.endf/n-092_U_238.endf"
endfb.fission = 2 # fission with delayed neutrons
endfb.ss = (2.76792, 1.22773e5)
endfb.potential = 11.17103
endfb.dilutions = ( 1.e10, 94.5317612 )
endfb.pendf()
endfb.gendf()
endfb.draglib()
```

Exécution d'un cas test

Le fichier draglib produit se retrouve dans l'arborescence
/tmp/xmas172_u238_endfb7r0.

```
-bash-4.1$ cd Njoy2012_EPM/python
-bash-4.1$ python endfb7r0_u238_xmas172.py
-bash-4.1$ ll -t | head
```