JMCT-FISPACT耦合程序用户手册

一、运行环境

本程序需要在Python环境下运行。Python是当今最流行的程序设计语言, 它是一种解释型、交互式、面向对象、动态数据类型的高级程序设计语言。我们需要配置好合适的Python环境以供本程序正常运行。

1. Python的安装

Python的<u>官方网站</u>给出了Python的详细介绍,并提供了在各个平台下的安装版本和下载渠道。用户可以在自己计算机的终端输入"python"命令查看计算机是否已安装Python,以及安装的版本(进入终端:Windows下,进入"命令提示符";类Unix下,进入"Terminal")。

注意到Python3和Python2是不兼容的,我们建议安装Python3.6及以上版本。

在Linux平台下安装Python:

linux一般会自带一个python3和一个python2,无需额外安装

在终端键入

python3 -V

查看当前默认的python版本,不低于3.6为佳

linux下强烈建议使用python虚拟环境以不影响系统正常功能,创建并使用虚拟环境查看这里

您也可以使用Anaconda虚拟环境,Anaconda教程查看这里

在Windows平台下安装Python:

- 1. 通过浏览器访问 Python 官方网站
- 在下载列表中选择Window平台安装包,包的格式为:python-XYZ.msi 文件 , XYZ 为你要安装的版本号。
- 下载后,运行下载包,进入Python安装向导,按提示操作。

安装非常简单,我们建议勾选上"添加到环境变量"选项,以便从命令提示符进入Python交互式界面。

在MAC Os平台下安装 Python:

较新的Mac Os系统都自带有Python环境;也可以在这里下载最新版本安装。

2. 配置所需要的软件包

运行本软件,需要配置 **pyqt5** 和**JFlink**这两个python的软件包。可以采取pip安装的方式来获取所需要的包。其中,**JFlink**为源代码的一部分,会随软件包提供,也可用以下方式从<u>pypi</u>下载

pip是Python官方推荐的包管理工具。某些编译环境(如Visual Studio)也内置有便捷的包管理工具,从那里安装也可以取得同样的效果。

pip安装:

在python3.6以上的版本里,pip包已包含在其中并被安装好。 在终端中键入"pip"命令,即可查看到pip命令的简要用法。

在正常的情况下,从操作系统进入终端后,键入:

```
pip install somepackage
```

即可安装所需要的包,其中"somepackage"是所需要的包的名称。 在这里,我们需要的包是pyqt5和lxml,所以需要分别键入命令:

windows:

```
pip install jflink
pip install pyqt5
```

linux:

```
sudo apt install pip3
pip3 install JFlink
pip3 install pyqt5
```

这两个包就会自动开始下载并安装完成。

如遇提示称pip版本不够新,需要升级版本,则键入命令:

pip install -U pip

可升级pip版本。

至此,本程序的运行环境配置完成。

二、运行耦合程序

在我们提供的软件包里面,进入JFmiddler-master目录,运行main.py,即可进入程序窗口页面。

1、JMCT-FISP的转换

打开程序后,在"文件转换"选项下选中"JMCTtoFlSPACT",然后进行相关的配置(黑体为必选项,下同):

· JMCT输出文件位置:

这里是JMCT输出文件所在的目录。在系统目录中进入到所需要转换的JMCT输出文件(文件格式为.OUT)所在的目录并选中它即可配置完成。此文件将在接下来的计算中被读取。 设置好的目录应类似于: "C:/JMCT-FISPACT/JFmiddler-master/testcase/input/neutron.OUT"

· GDML文件位置:

这里是GDML模型文件所在的位置,文件格式为.JDML。此文件描述了粒子输运模型的几何信息和材质信息,将在接下来的计算中被读取。设置的方法同上例,设置好的目录应类似于: "C:/JMCT-FISPACT/JFmiddler-master/testcase/input/Model_test.gdml"

• FISPACT工作目录:

这里应设置为FISPACT主程序的可执行文件所在的目录。进入到已安装好的FISPACT软件所在的目录并确认即可。 程序运行时将以此目录为默认工作目录来读写所需要的文件。

• 导入模板文件:

此模式下,点击"导入模板文件",4个FISPACT输入文件模板就被导入并覆盖默认的模板,然后将显示在下方的文本框中前四个标签内,可以方便地编辑和修改。

• 光子单位时间产额:

光子单位时间产额是光子源的固有属性,用于计算光子通量。将已知的光子单位时间产额以科学记数法输入,形如:7.8E+18即可。

完成以上设置后,点击"开始"按钮即可开始进行文件转换,转换进度在下方进度条显示。详细的操作步骤都将在下方的文本框中显示。

2、FISP-JMCT的转换

打开程序后,在"文件转换"选项下选中"FISPtoJMCT",然后进行相关的配置:

• JMCT输出文件位置:

这里的设置与JMCT-FISP完全相同,参见"二、运行耦合程序-JMCTtoFISP-JMCT输出文件位置"。 如在连续的计算中,提前选中了"复用文件同步",则此项会自动设置完成。

• FISPACT工作目录:

这里的设置与JMCT-FISP完全相同,参见"二、运行耦合程序-JMCTtoFISP-FISPACT工作目录。 如在连续的计算中,提前选中了"复用文件同步",则此项会自动设置完成。

• JMCT模板文件位置:

这里需要设置JMCT模板文件的位置,进入其所在的目录并选中JMCT模板文件(文件格式:.in)即可,设置好的目录 形如"C:/JMCT-FISPACT/JFmiddler-master/testcase/input/model.ln"

JMCT模板文件记录了粒子输运模型的几何信息,将在接下来的计算中被读取。

• 光谱无穷大等效值:

光子无穷大等效值用于从fispact到jmct的计算中.fispact输出的光谱最高能量为14—+∝,但是jmct中光谱输入值必须为有限值,所以正无穷必须用某个等效值代替,默认值为20.

• 导入模板文件:

此模式下,点击"导入模板文件",JMCT输入文件模板就被导入,然后将显示在下方的文本框中jmct标签内,可以方便地编辑和修改。

注意,此过程并非必须,如果不需要修改也可跳过此过程直接点击【开始】

完成以上设置后,点击【开始】按钮即可开始进行文件转换,转换进度在下方进度条显示。

3、其他选项

• 复用文件同步:

在连续的计算中,若选中"复用文件同步",则在不同的文件转换中使用到的同一文件、目录将被自动设置好。

• 生成调用语句:

在连续的计算中,若选中"生成调用语句",则在程序调用时,之前使用到的文件的目录将被自动设置好。

• 物质信息存留:

在连续的计算中,若选中"物质信息存留",则在前一步中读取过的文件中的物质信息将被保留在内存中,接下来的 计算中不需要再重新读取文件。此选项将缩短连续计算所需要的时间。

注意:

此选项选中时,程序运行过程中只会计算第一次物质信息,对于多次不同的计算,请勿选中此选项。如果您没有充分理解这一段话的意思,也请勿选中此选项。选中此选项在非连续计算过程中将造成不可预知的计算错误。

• 保留JMCT模板:

若勾选此选项,则完成计算后,原先的JMCT模板将依然被保留,新生成的JMCT输入文件,其文件名将会增加_new后缀。

• 重置:

在左右两页面,各有一个【重置】按钮,用于将当前页面所有信息恢复到初始。

注意:

两个【重置】按钮都会清除所有操作日志。

• 文本框之一:

```
MONITOR 1
COLLAPSE 175
FISPACT|
* {title}
END
* END OF RUN
/*
```

这个文本框负责显示一些预读取的文件信息,其中:collapx.i;arrayx.i;input.i;printlib.i均为FISPACT输出文件的文件模板,jmct中显示的是JMCT的模板文件,后者需点击"导入模板文件"后方可显示。

文本框之二:

位于文本框之一的下方。启动程序后,操作日志将自动在此文本框中被显示。

三、程序调用

在启动程序后,点击"程序调用"栏目。

1、调用FISPACT

点击"CallFISP",并进行相关设置:

• FISPACT执行文件:

这里应设置为FISPACT可执行文件的位置。进入FISPACT程序的工作目录,选中它的可执行文件即可。

• EAF数据库目录:

这里应设置为FISPACT运行所需要的EAF数据库所在的目录,进入目录并选中即可。

• FISPACT工作目录:

这里应设置为FISPACT主程序所在的目录。若在此之前进行过文件转换操作并勾选了"生成调用语句",则此目录将被自动设置好。

• 能群:

这里选择的是不同的能群划分格式,我们可以选取五种低能标准能群:WIMS(69),GAM-II(100),XMAS(172),VITAMIN-J(175),TRIPOLI(315)和两种高能标准能群:VITAMIN-J+(211)和TRIPOLI+(351)。

• 权函数:

权函数和能群一起描述粒子群的性质,有FLA/FLT、FIS、FUS三种权函数供选择。

• 粒子类型:

这里选取的是粒子的类型,有质子(p)、中子(n)和(d)三种粒子选项。

配置完成后,点击"开始"即可调用FISPACT程序。

2、调用JMCT

点击"CallJMCT",并进行相关设置:

• JMCT输入文件:

这里需要设置JMCT的输入文件,文件格式为.in.

点击"开始"即可调用JMCT。

四、相关文件说明

1、JMCT模板文件

本模板文件用于生成JMCT输入文件,建议后缀名为.in,模板文件应与最终生成的输入文件保持完全一致,除非必要的地方使用关键字代替。

可用关键字:

关键字	描述
{source}	应位于Source代码块中,程序将用计算出的粒子源信息替代此处

2、FISPACT模板文件

本模板文件用于生成FISPACT输入文件,建议后缀名为.i,模板文件应与最终生成的输入文件保持完全一致,除非必要的地方使用关键字代替。

可用关键字:

关键字	可用模板文件	描述
{title}	all	默认标题,一般为【 Irradiation of】
{mass}	input.i	计算出的物质质量,一般不使用或用于MASS标签
{density}	input.i	计算出的物质密度,一般用于DENSITY标签
{flux}	input.i	计算出的中字通量,一般用于输运过程的FLUX标签
{elements}	input.i	计算出的元素信息,一般用于MASS标签,在{mass} 之后

3、ini文件

wiz.ini为程序记录的某些可能需要多次使用的信息,所在位置应为"./tmp/wiz.ini",在程序启动时读取,程序关闭时储存,一个典型的wiz.ini文件如下所示:

```
[turn]
jpathu =
gpathu =
fpathu =
genrate =
fpathd =
jpathd =
jmodel =

[call]
fispact =
eaf =
case =
jpath =
```

关键字	自动生成	描述
jpathu	是	储存【JMCT-FISP的转换】中的 <u>【IMCT输出文件位置】</u>
gpathu	是	储存【JMCT-FISP的转换】中的 <u>【GDML文件位置】</u>
fpathu	是	储存【JMCT-FISP的转换】中的 <u>【FISPACT工作目录】</u>
generate	是	储存【JMCT-FISP的转换】中的 <u>【光子单位时间产额</u> 】
fpathd	是	储存【FISP-JMCT的转换】中的 <u>【FISPACT工作目录】</u>
jpathd	是	储存【FISP-JMCT的转换】中的 <u>【JMCT输出文件位置】</u>
jmodel	是	储存【FISP-JMCT的转换】中的 <u>【JMCT模板文件位置】</u>
fispact	是	储存【调用FISPACT】中的 <u>【FISPACT执行文件】</u>
eaf	是	储存【调用FISPACT】中的 <u>【EAF数据库目录】</u>
case	是	储存【调用FISPACT】中的 <u>【FISPACT工作目录】</u>
jpath	是	储存【调用JMCT】中的 <u>【JMCT输入文件】</u>
logs	否	用户指定的最大日志储存数量,若超出此值,最旧的日志文件将会被新日志替代

4、log文件

日志文件位于"./tmp/*.log",*部分一般含有保存日志的时间,日志内保存全部当次运行的操作日志。

注意:使用【重置】清除掉的操作日志不会被保存。

六、开发手册

如果您只是需要使用软件,可以跳过此部分

此部分对于软件包的二次开发有一定帮助

整个耦合软件由后端逻辑软件包JFlink与前端GUI工具JFwizard构成

1、软件架构

后端软件包JFlink

```
--- call.py
+-- model.py
+-- read.py
+-- write.py
+-- setup.py
```

模块	描述	接口
call	用于调用JMCT和FISPACT的工具集	jmct/fisp
model	用于记录转换过程中的类和必要的常量	无
read	用于读取JMCT和FISPACT输出文件的工具集	readf/readg/readf
write	用于生成JMCT和FISPACT输入文件的工具集	writej/writef
setup	用于生成软件包的工具	无

前端界面JFwizard

```
.
+-- tmp
| +-- wiz.ini
| +-- log-2018-03-04-11-03-23-857.log
+-- testcase
+-- ICON.ico
+-- main.py
+-- static.py
+-- window.py
+-- worker.py
```

文件/文件夹	文件夹	必需	描述
tmp	是	否	程序运行过程生成的临时文件放置位置
wiz.ini	否	否	程序记录的某些可能需要多次使用的信息
log-2018-03-04-11-03-23-857.log	否	否	程序生成的日志文件,可能不止一个
testcase	是	否	测试文件放置位置
ICON.ico	否	是	软件的图标文件
main.py	否	是	软件的入口文件
static.py	否	是	软件的静态界面文件
window.py	否	是	软件的动态界面文件
worker.py	否	是	软件定义的多线程任务

2、JFlink软件包接口详解

call.jmct(info, jinput, gpath='')

无返回值

参数	类型	描述	默认值
info	function	回调函数,用于输出提示信息	无
jinput	string	JMCT输入文件.in位置	无
gpath	string	GDML结构文件.gdml位置	1111

call.fisp(self, info, env, group, indir: Path, _outdir=None)

无返回值

参数	类型	描述	默认值
self	class	传入一个类用于临时储存信息	无
info	function	回调函数,用于输出提示信息	无
env	2-elements-list	[fpath, epath]储存可执行文件的二元列表	无
group	3-elements-list	[p, g, w]储存粒子信息的三元列表	无
indir	string	【调用FISPACT】中的 <u>【FISPACT工作目录】</u>	无
_outdir	string	FISPACT中定义的work directory	None

read.readj(path, funcTime=None, funcOne=None, interval=100)

返回值neutron附在表格最后

参数	类型	描述	默认值
path	string	.in文件的路径	无
funTime	function	回调函数,用于通知上层函数总共需处理的条目数	None
funcOne	function	回调函数,用于通知上层函数目前处理的条目数	None
interval	int	调用funcOne的次数	100
neutron	model.Data	从.in文件中提取出的物质信息	无

read.readg(path, funcTime=None, funcOne=None, interval=100)

返回值allStructure附在表格最后

参数	类型	描述	默认值
path	string	.gdml文件的路径	无
funTime	function	回调函数,用于通知上层函数总共需处理的条目数	None
funcOne	function	回调函数,用于通知上层函数目前处理的条目数	None
interval	int	调用funcOne的次数	100
allStructure	dict	从.gdml文件中提取出的空间信息	无

read.readf(path, maxFlag=20., funcTime=None, funcOne=None, interval=100)

返回值allDistributions附在表格最后

参数	类型	描述	默认值
path	string	FISPACT工作目录路径	无
funTime	function	回调函数,用于通知上层函数总共需处理的条目数	None
funcOne	function	回调函数,用于通知上层函数目前处理的条目数	None
interval	int	调用funcOne的次数	100
allDistributions	dict	从FISPACT输出文件.o中提取出的光谱信息	无

 $write.writej(path,\ text,\ neutron,\ all Distributions,\ split,\ funcTime=None,\ funcOne=None,\ interval=100)$

无返回值

参数	类型	描述	默认值
path	string	生成的JMCT输入文件.in路径	无
text	string	JMCT模板文件内容	无
neutron	model.Data	物质信息,来自之前的JMCT输入文件.in	无
allDistributions		光谱信息,来自FISPACT输出文件.o	无
split	string	缩进使用内容	无
funTime	function	回调函数,用于通知上层函数总共需处理的条目数	None
funcOne	function	回调函数,用于通知上层函数目前处理的条目数	None
interval	int	调用funcOne的次数	100

write.writef(path, genRate, neutron, allStructure, _inputText = defaultInput,
_collapxText = defaultCollapx, _arrayxText = defaultArrayx, _printlibText =
defaultPrintlib, funcTime=None, funcOne=None, interval=100)

无返回值

参数	类型	描述	默认值
path	string	FISPACT工作目录路径	无
genRate	float/int	光子产生速度	无
neutron	model.Data	物质信息,来自之前的JMCT输入文 件.in	无
allStructure	dict	从.gdml文件中提取出的空间信息	无
_inputText	string	input.i模板文件内容	model.defaultInput
_collapxText	string	collapx.i模板文件内容	model.defaultInput
_arrayxText	string	arrayx.i模板文件内容	model.defaultArrayx
_printlibText	string	printlib.i模板文件内容	model.defaultPrintlib
funTime	function	回调函数,用于通知上层函数总共需处 理的条目数	None
funcOne	function	回调函数,用于通知上层函数目前处理 的条目数	None
interval	int	调用funcOne的次数	100

七、Q&A:

Q:如何在启动时不显示cmd终端?

A:将程序运行方式由python修改为pythonw。

Q:FISPACT工作目录指的是哪一级?

指最顶层包含所有材料的一级目录。

如以下结构中,FISPACT工作目录指的是fisp。

```
.
+-- fisp
| +-- AL6061
| +-- arrayx.i
| +-- collapx.i
| +-- input.i
| +-- printlib.i
| +-- fluxes
| +-- CU
| +-- arrayx.i
```

```
| +-- collapx.i
| +-- input.i
| +-- printlib.i
| +-- fluxes
| +-- SS316
| +-- arrayx.i
| +-- collapx.i
| +-- input.i
| +-- printlib.i
| +-- fluxes
```

Q:源代码丢失了怎么办?

JFwizard和JFlink均为开源软件,可以从<u>github</u>或pypi获取

JFwizard主页 JFlink主页

JFlink可以<u>如此</u>从pypi获取