

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951505309\_2022\_27\_1\_176

# Комплекс программ GROUND2 обработки оцененных ядерных данных и расчета систем групповых констант

*Приводится описание комплекса программ GROUND2, предназначенного для обработки оцененных ядерных данных и расчета единых согласованных систем групповых констант взаимодействия нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов. Представлена структура комплекса программ, возможности программной оболочки GDF комплекса, а также технология задания входных данных и проведения расчетов спектральных и групповых характеристик взаимодействия частиц с ядрами. Показаны возможности комплекса в части хранения и визуализации групповых данных.*

**А. В. Алексеев, А. В. Бнятов,  
Н. А. Крутько, С. С. Раткевич**

## *Введение*

В константном обеспечении нейтронно-физических расчетов большой популярностью пользуются пакеты программ обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант NJOY [1], PREPRO [2]. В России наряду с указанными программами получили известность пакеты ГРУКОН (РНЦ «Курчатовский институт») [3, 4], CONSYST (ГНЦ РФ-ФЭИ) [5]. Все они реализуют концепцию последовательной обработки файлов оцененных ядерных данных, как правило, в международном формате ENDF/B [6] и усреднения их в групповые константы взаимодействия частиц с ядрами различных изотопов. Полученные групповые величины в итоге формируют системы групповых констант соответствующего назначения. Архивы групповых констант обычно представляют собой файловые хранилища, реализованные на локальных или сетевых ресурсах общего либо администрируемого доступа.

В 2011 г. в РФЯЦ-ВНИИЭФ была создана первая версия комплекса программ константного обеспечения GROUND [7–9], в которой были реализованы функции информационно-справочной системы (визуализации оцененных и групповых данных) совместно с обработкой оцененных данных, расчетом и тестированием групповых констант в рамках единой интегрированной среды. При этом все данные в комплексе GROUND, в том числе рассчитываемые групповые константы вместе с параметрами расчетов, хранились в единой базе данных (БД). Можно сказать, что в этом программном пакете был достигнут предельный уровень интеграции хранения ядерных данных, технологии расчета и пользовательского интерфейса, что проиллюстрировано на рис. 1.

В процессе эксплуатации стало понятно, что в качестве единого инструмента для анализа ядерных данных и расчета групповых констант комплекс GROUND является довольно «тяжеловесным» продуктом, хотя и покрывающим все потребности в их визуализации и обработке. Причиной послужило хранение всех классов ядерно-физических данных и рассчитанных групповых

констант в единой БД. Кроме того, методика численного моделирования переноса быстрых заряженных частиц и их энергии, остро нуждавшаяся в согласованных системах групповых констант взаимодействия нейтронов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов, получила новое развитие. Эти предпосылки побудили авторов к пересмотру программной структуры комплекса GROUND и явились достаточным основанием для разработки его следующей версии – GROUND2.

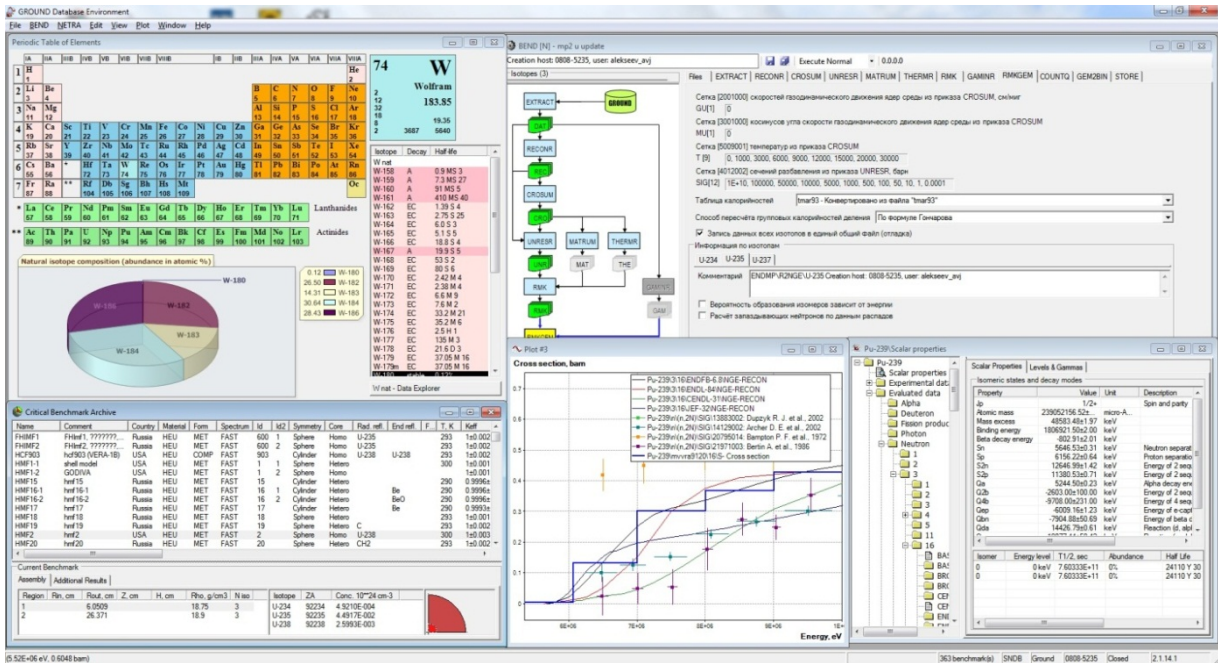


Рис. 1. Главное окно первой версии комплекса GROUND

## Структура комплекса программ константного обеспечения GROUND2

Вторая версия комплекса программ GROUND построена по модульному принципу разделением на информационно-справочную систему ядерно-физических данных NDX2 и программную платформу GDF. Последняя является оболочкой управления расчетом единых согласованных систем групповых констант – объединений для выбранного множества изотопов групповых данных, характеризующих взаимодействия рассматриваемых частиц (нейтронов, гамма-квантов, быстрых заряженных частиц) с ядрами этих изотопов. Групповые данные для каждого типа взаимодействия (пары *налетающая частица – ядро*) согласованы между собой посредством групповых разбиений по энергии как налетающих, так и рождающихся в реакциях частиц рассматриваемых типов.

БД GROUND также была разделена на два логических блока: БД CPND – исходные данные (оцененные, экспериментальные, справочные и т. д.), БД GROUND2 – результирующие групповые константы. Стоит отметить, что вместе с групповыми константами в БД GROUND2 хранится еще и технологическая информация о входных параметрах счетных модулей, задействованных в цепочках подготовки групповых констант. На рис. 2 представлена структура комплекса константного обеспечения GROUND2.

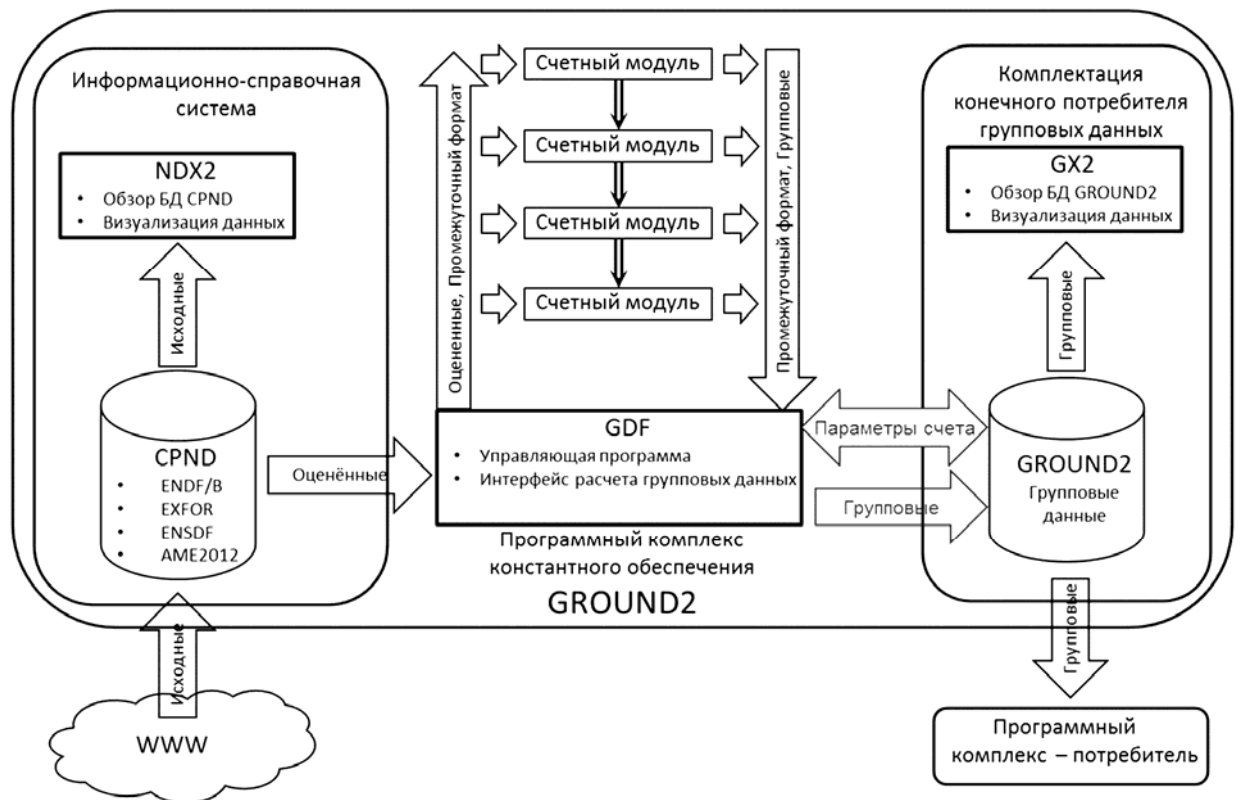


Рис. 2. Структура комплекса константного обеспечения GROUND2

БД CPND (Collection of Preprocessed Nuclear Data) служит источником оцененных данных при подготовке систем групповых констант для задач моделирования переноса частиц, а также содержит полный набор данных для визуализации их в информационно-справочной системе NDX2:

- скалярные интегральные характеристики ядер (массы и энергии реакций);
- данные по уровням возбуждения и переходам ядер ENSDF;
- оцененные данные из библиотек в формате ENDF/B;
- экспериментальные данные EXFOR.

Ввод данных всех классов в БД CPND из источников публикации в сети Интернет осуществляется посредством специализированных утилит – конверторов данных.

База данных GROUND2 предназначена для хранения рассчитанных групповых микроконстант взаимодействия частиц с ядрами изотопов совместно с параметрами их расчетов. Это продиктовано потребностями технологии их подготовки и необходимостью отслеживания и возможного воспроизводства всех этапов обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант. БД GROUND2 является источником групповых данных для программных комплексов – потребителей многогрупповых констант, а также программы GX2 визуализации групповых ядерных данных.

Обработка оцененных ядерных данных и расчет согласованных единых систем групповых констант взаимодействия нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц осуществляется в программной оболочке GDF.

## Программная оболочка GDF подготовки групповых микроконстант

Основное назначение программной оболочки GDF – организация многоэтапного процесса расчета единых согласованных систем групповых констант. При этом решаются задачи организации запуска счетных модулей, хранения и управления потоками промежуточных данных, подготовки и передачи счетным модулям управляющих параметров расчетов. Программа GDF полностью выполняет функции обмена данными с сетевыми БД. При этом достигаются следующие цели:

- исключение необходимости прямого доступа к БД со стороны счетного обрабатывающего кода, реализованного преимущественно на языке Фортран, в котором работа с сетевыми БД является определенной технической проблемой;
- логическая изоляция счетного кода от реальной структуры хранения данных.

## Организация расчетов

Групповые данные в комплексе GROUND2 рассчитываются из исходных оцененных данных в формате ENDF/B в несколько последовательно выполняемых счетными модулями этапов. Счетный модуль оформлен в ОС Windows в виде консольного приложения. Счетный модуль получает входные данные, являющиеся результатами расчетов одного или нескольких модулей-предшественников в общей последовательности расчета, и генерирует свой выходной файл-результат. При запуске счетный модуль получает в отдельном файле управляющие параметры расчета и в процессе работы выводит на экран собственный служебно-диагностический протокол расчета (листинг). Таким образом, программа GDF выступает в качестве единой оболочки – среды проведения расчетов.

С точки зрения пользователя GDF – это инструментарий для поэтапной подготовки единой согласованной системы групповых констант. Рассмотрим эти этапы подробнее.

1. Заготовка основных сеточных величин. На этом и последующих этапах GDF используется для навигации по данным БД GROUND2, логически представленных как единая древовидная структура. На данном этапе осуществляется редактирование базовых объектов параметров расчетов – одно- и двумерных числовых массивов (рис. 3), например, сеток по энергии частиц, сеток по температуре, сечению разбавления и т. п.

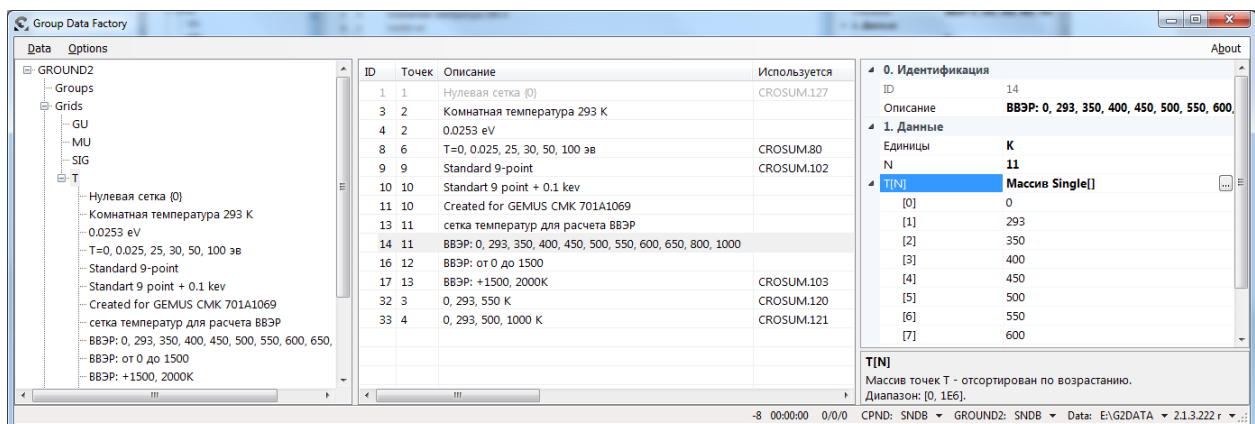


Рис. 3. Навигация по данным и редактирование базовых объектов в программе GDF

2. Формирование последовательностей счетных модулей, используемых для обработки оцененных данных и расчета групповых констант. На этом этапе осуществляется выбор рассматриваемых налетающих частиц и формирование последовательности счетных модулей для каждого из типов взаимодействия (пары *частица – ядро*) (рис. 4).

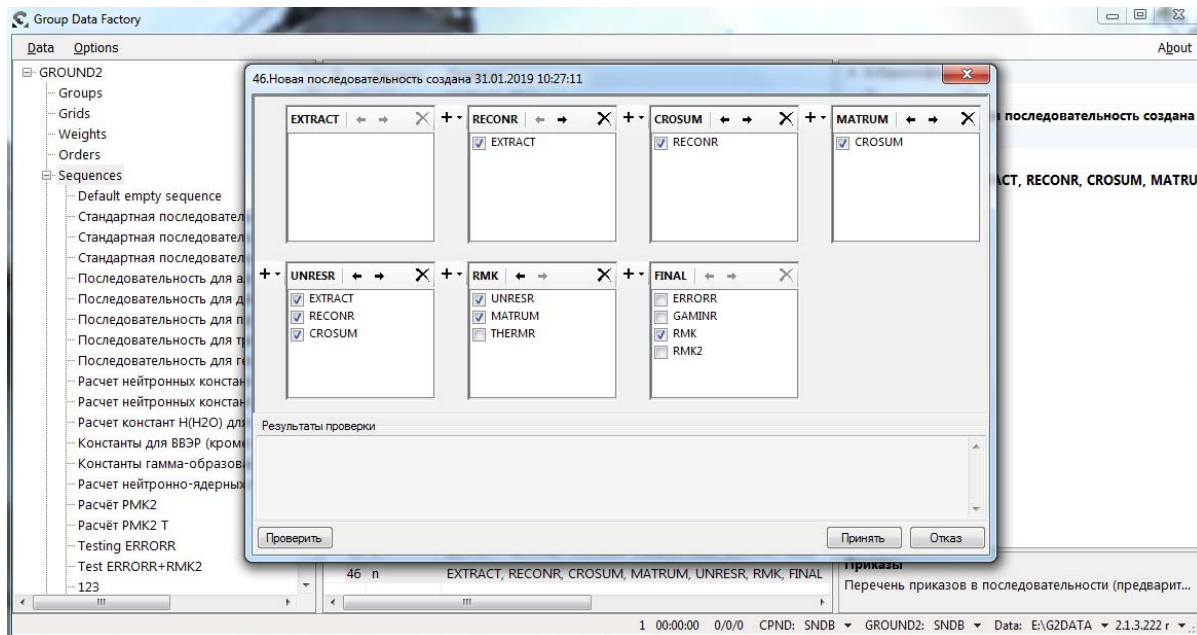


Рис. 4. Формирование последовательностей счетных модулей для обработки оцененных данных и расчета групповых констант

3. Задание наборов входных параметров счетных модулей (рис. 5). Здесь для каждого выбранного счетного модуля формируются один или несколько наборов входных параметров, так как для разных последовательностей, в которые входит счетный модуль, могут использоваться разные наборы его входных параметров.

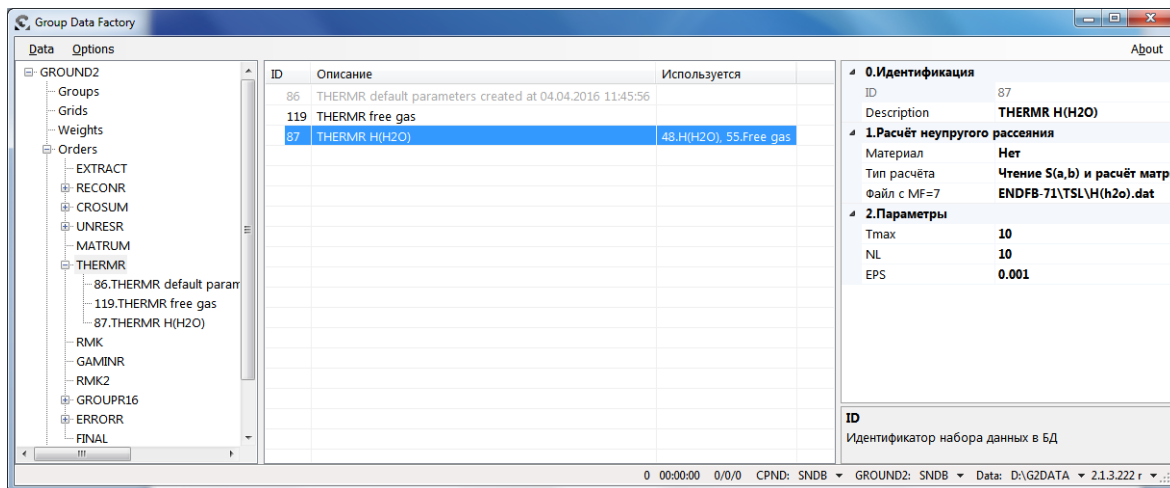


Рис. 5. Редактирование наборов входных параметров счетного модуля RMK в программе GDF

4. Формирование сценариев расчетов. Сценарий – это конкретизированная последовательность счетных модулей, где для каждого из них указан один из заранее заготовленных наборов входных данных (рис. 6). Последовательность счетных модулей может содержать несколько сценариев расчетов.

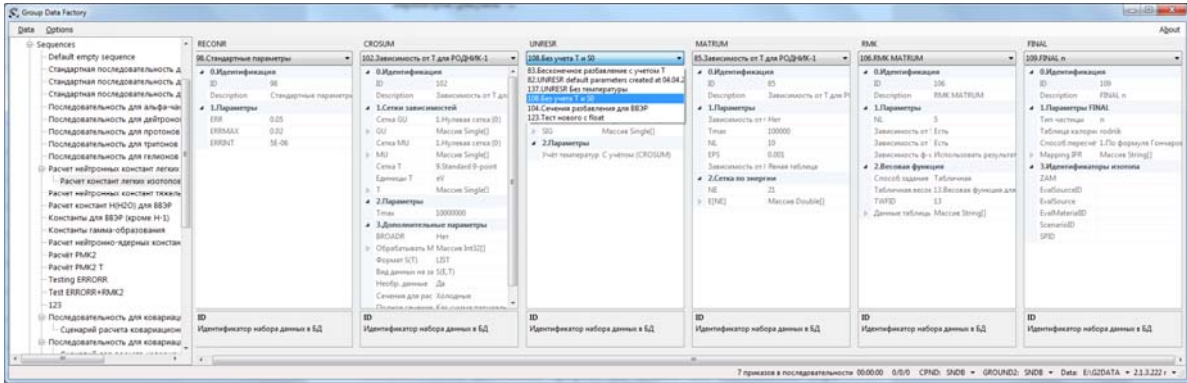


Рис. 6. Формирование сценария расчета групповых констант

5. Создание системы констант. После заготовки необходимых сценариев расчетов можно приступить к созданию новой или изменению существующей системы групповых констант. Все операции над системами констант осуществляются в узле Systems древовидной структуры данных (рис. 7). Здесь следует указывать перечень частиц (нейтрон, гамма-квант, протон, дейтрон, тритон, гелион, альфа), взаимодействие которых с ядрами изотопов будет учтено в данной системе групповых констант. Для каждой частицы следует указать групповое разбиение по ее энергии.

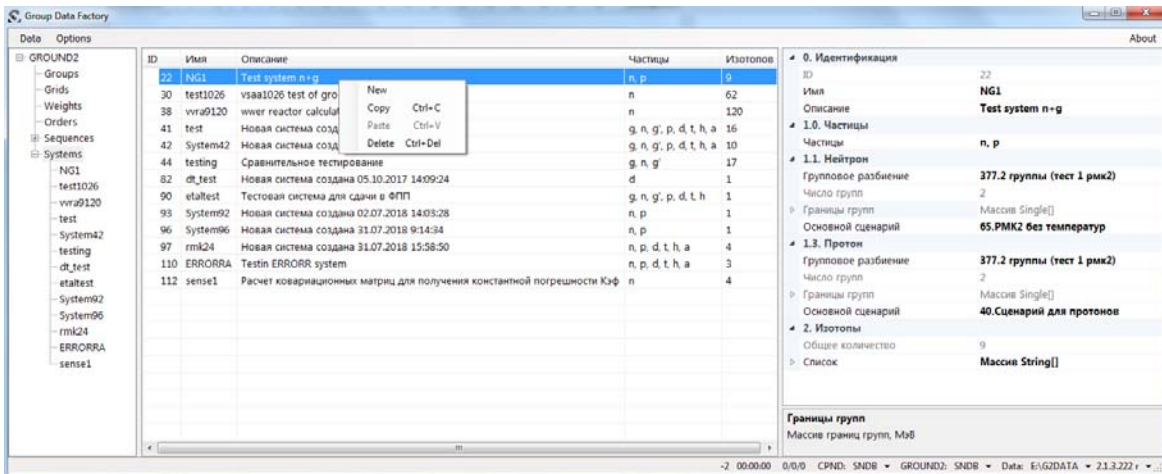


Рис. 7. Информация о системах групповых констант

6. Включение изотопов в систему констант и привязка их к сценариям расчетов. Данная операция выполняется в рамках выбранной системы групповых констант из узла Systems. Для каждого включенного изотопа следует указать источник его оцененных данных и сценарий расчета. Привязку изотопов к библиотекам оцененных данных и сценариям расчетов можно выполнять как групповую операцию (рис. 8). Здесь же при необходимости выполняется удаление изотопов из рассчитываемой системы групповых констант.

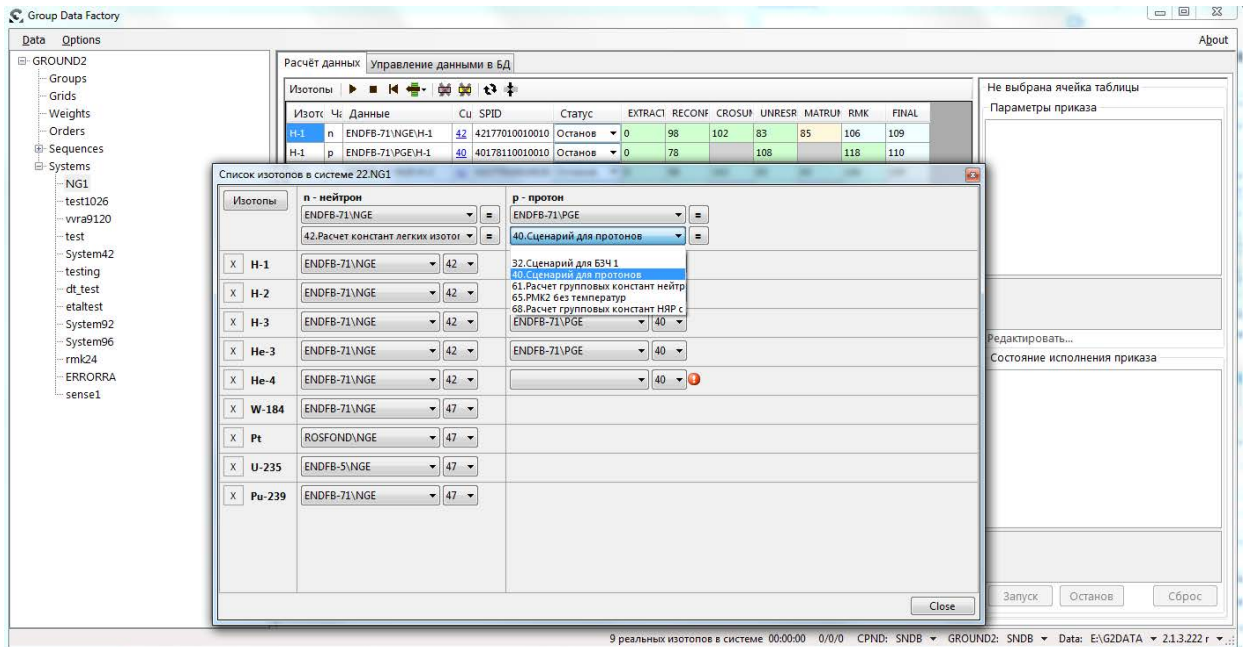


Рис. 8. Выбор изотопов и их привязка к библиотекам оцененных данных и сценариям расчетов

7. Проведение полного цикла расчета групповых констант со сквозным контролем процесса (рис. 9). После наполнения системы групповых констант данными по изотопам можно приступить к расчету групповых констант по каждому сценарию каждой используемой для этого последовательности счетных модулей. Карта рассчитываемой системы групповых констант в программной оболочке GDF представляется графически (см. рис. 9).

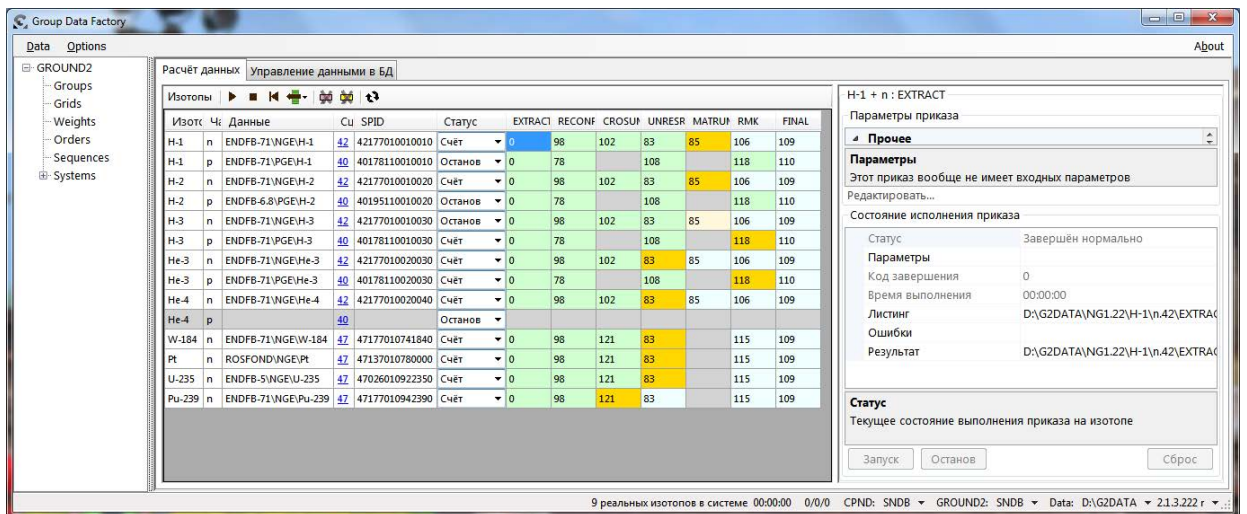


Рис. 9. Программная оболочка GDF в режиме управления расчетом групповых констант

Особое внимание в программной оболочке GDF уделено контролю процесса расчета на всех этапах. Программа обеспечивает:

- визуальный интерфейс контроля состояния расчета и различные режимы его проведения (ручной и автоматический);

- параллельный запуск логически независимых счетных модулей (используется многопоточность, свойственная современному аппаратно-программному окружению ПЭВМ);

- хранение промежуточных результатов расчетов в локальном файловом хранилище с закрытой внутренней структурой, что означает логическую изоляцию счетных программ от реальной структуры хранилища;

- перенаправление экранного консольного вывода счетных программ в оболочку с сохранением протокола в локальном хранилище для последующего анализа и диагностики результатов.

Таким образом, принципиальным новшеством комплекса GROUND2 является гибкое задание последовательности выполняемых программ для каждого типа взаимодействия (пары *частица – изотоп*), включенного в систему групповых констант, а также входных параметров расчета для каждого счетного модуля этой последовательности. С практической точки зрения это позволяет, например, в рамках одной системы групповых констант рассчитывать и хранить групповые характеристики нейтронно-ядерных реакций для разных сеток по температуре или сечениям, с учетом или без учета зависимости функции рассеяния от теплового движения ядер и т. п. За интерпретацию и редактирование входных данных каждой счетной программы отвечает его собственный автономный программный модуль-адаптер данных. Программа GDF при этом реализована по технологии плагинов (подключаемых программных модулей, расширяющих функциональные возможности программы): ядро – ведущий исполняемый файл GDF.EXE, осуществляющий навигацию по данным, статическое редактирование списочных и табличных объектов данных, управление расчетом, и набор плагинов-адаптеров для задания входных параметров счетных программ. Плагины-адаптеры оформлены в виде динамических библиотек DLL. Их интеграция с головным модулем GDF.EXE осуществляется по стандартизованному программному интерфейсу (API) и соглашению о размещении файлов. Эти модули-плагины не зависят непосредственно от GDF.EXE, а опираются на общую с ним программную инфраструктуру и могут разрабатываться как отдельные проекты.

Исходя из вышесказанного, программу GDF можно классифицировать как клиентское приложение БД CPND оцененных ядерных данных и БД GROUND2 групповых констант и параметров их расчета, которое одновременно является управляющей оболочкой для внешних счетных программ, обладающей модульной архитектурой для формирования входных данных и передачи их счетным программам комплекса.

### ***Программы обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант***

Программная платформа GDF изначально проектировалась как программная оболочка управления расчетами конвейерного типа, когда результаты расчетов одной счетной программы являются входными данными для следующей счетной программы. К таким расчетам относятся последовательная обработка оцененных ядерных данных и расчет групповых констант различных типов ядерного взаимодействия. В таблице представлен список счетных программ, входящих в состав комплекса константного обеспечения GROUND2. Дерево этих счетных модулей в комплексе GROUND2 представлено на рис. 10.



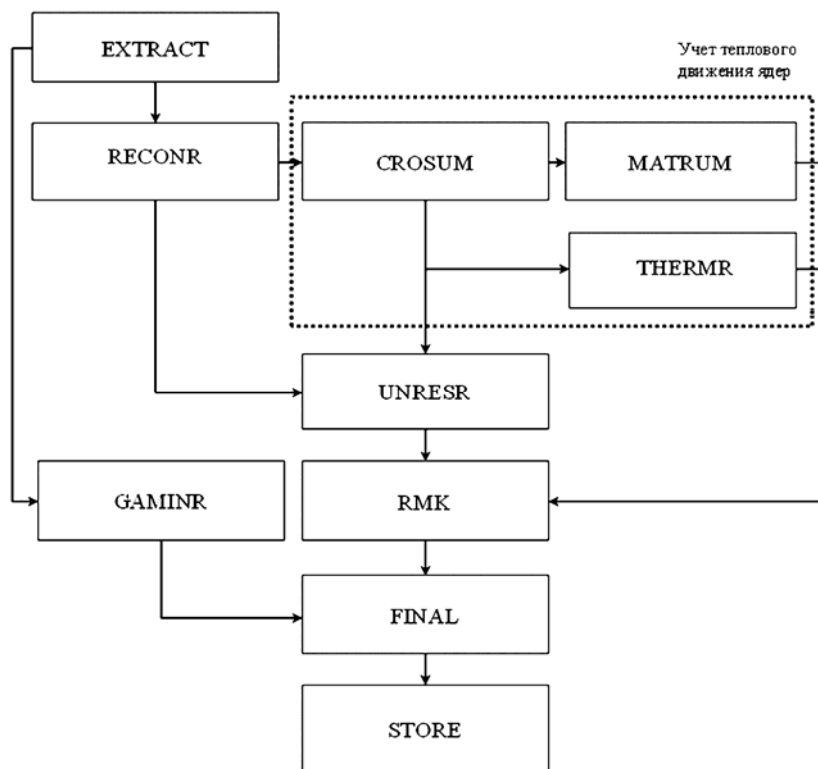


Рис. 10. Дерево счетных модулей для обработки оцененных ядерных данных и расчетов групповых констант

Список программ обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант комплекса GROUND2

Модуль	Назначение, класс решаемых задач
EXTRACT	Получение оцененных данных изотопа из БД CPND, формирование файла исходных спектральных ядерных данных в формате ENDF/B
RECONR	Восстановление сечений из резонансных параметров в области разрешенных резонансов [1]
CROSUM	Расчет сечений нейтронно-ядерных реакций от теплового и газодинамического движения ядра [10]
MATRUM	Расчет энергоугловых распределений упругорассеянных нейтронов от теплового и газодинамического движения ядра [10]
THERMR	Расчет энергоугловых распределений упругорассеянных нейтронов от теплового движения ядра с учетом химических связей атомов [1]
UNRESR	Расчет эффективных самоблокированных сечений нейтронно-ядерных реакций в области неразрешенных резонансов [1]
GAMINR	Расчет групповых анизотропных констант фотоатомного взаимодействия (гамма-прохождения) [1]
RMK, RMK2	Расчет групповых анизотропных нейтронных констант, констант гамма-образования и взаимодействия быстрых заряженных частиц с ядрами [1, 11]
ERRORR	Расчет групповых ковариационных матриц [1]
FINAL	Объединение групповых констант различных типов взаимодействия с ядрами изотопов в единую систему групповых констант, контроль корректности данных
STORE	Помещение системы групповых констант в БД GROUND2

Как видно из таблицы, часть счетных модулей комплекса GROUND2 заимствована из процессингового кода NJOY. Программы CROSUM и MATRUM являются в некоторой степени аналогами программ BROADR и THERMR комплекса NJOY. Они позволяют рассчитывать зависимости сечений нейтронно-ядерных реакций не только от теплового, но и от газодинамического движения ядер изотопов. Программа RMK2 [11] предназначена для расчета групповых констант взаимодействия нейтронов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов, в результате которых рождаются вторичные нейтроны и заряженные частицы. По своим функциональным возможностям программа RMK2 близка к программе GROUPER комплекса NJOY, однако наряду с общепринятыми характеристиками процессов она рассчитывает групповое распределение кинетической энергии продуктов реакций и групповое энерговыделение реакций с учетом энергии вторичных частиц. Также в случае отсутствия данных по угловым или энергоугловым распределениям возможен расчет констант для двухчастичных или многочастичных реакций в приближении изотропного распределения продуктов реакции в системе центра масс или в приближении равенства  $N$ -частичных фазовых объемов соответственно.

### **Единая система групповых констант**

Как уже было сказано, программа GDF организует и контролирует многоэтапный расчет групповых констант для каждого взаимодействия *частица – изотоп*, по завершении которого получается множество файлов групповых констант в формате GENDF [1] или производном от него формате. Этапом, предшествующим записи групповых данных в БД GROUND2, является объединение для каждого изотопа множества файлов групповых констант, описывающих взаимодействие выбранного набора частиц с данным изотопом. В комплексе GROUND2 эта операция осуществляется программой FINAL, которая, кроме объединения групповых данных конкретного изотопа в один файл, выполняет также операции контроля физической и форматной корректности рассчитанных групповых данных и создания суммарных реакций из указанного перечня исходных групповых величин (например, реакции суммарного неупругого рассеяния из групповых данных для уровней неупругого рассеяния  $MT = 51, \dots, 91$  в терминологии формата ENDF). Это позволяет существенно экономить время расчета макроскопических констант, дисковую и оперативную память для хранения групповых данных.

Логическая структура единой системы групповых констант представлена на рис. 11. При ее разработке ключевыми вопросами являлись согласованность данных и их максимально компактное хранение (только уникальных данных). Концепция единой системы групповых констант отвечает следующим требованиям.

1. Система групповых констант содержит для каждого изотопа согласованный по энергетическим разбиениям набор групповых величин, характеризующих взаимодействие этого изотопа с конкретной налетающей частицей.

2. Изотоп является основным объектом, с которым производятся операции с точки зрения потребления единой системы групповых констант. Он содержит ссылки на групповые константы для каждой фиксированной налетающей частицы (каждого типа взаимодействия).

3. Характеристики взаимодействия изотопа с конкретной частицей (групповые константы) являются уникальными и неделимыми и посредством механизма ссылок могут использоваться (но только целиком!) более чем в одном изотопе. Этот механизм применяется в случае отсутствия необходимых ядерных данных для какого-либо взаимодействия *частица – изотоп*.

4. Каждая реакция в общем случае является многочастичной, т. е. в результате нее может продуцироваться множество различных вылетающих частиц (в том числе ни одной). При этом для фиксированной частицы используется одно и то же энергетическое разбиение вне зависимости от того, является ли частица налетающей или вылетающей.



Рис. 11. Логическая структура единой системы групповых констант

Структура единой системы групповых констант не является жестко фиксированной, а построена по принципу графа, в котором вершинами являются логические объекты, а все ребра получаются при помощи целочисленного или строкового атрибута, что также делает их различимыми между собой. Это позволяет пополнять систему групповых констант новыми классами данных произвольной структуры без влияния на потребителей. То есть если в системе появятся новые данные, а программа-потребитель еще «не умеет» их обрабатывать, то они будут проигнорированы, в то время как требуемые данные будут обработаны в штатном режиме. Таким способом обеспечивается стабильность выполнения программ – потребителей групповых констант.

### ***Визуализация групповых данных***

Для отображения групповых данных в комплексе программ константного обеспечения GROUND2 используется программа GX2. Она является инструментом обзора и графической визуализации содержащихся в БД GROUND2 рассчитанных групповых величин – микроскопических групповых констант ядерно-физических процессов. Имеющиеся в GX2 средства табличного и графического представления данных предназначены для визуального анализа пользователем содержимого систем групповых констант с целью выработки рекомендаций по их использованию в расчетах задач переноса нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц. На рис. 12 представлен пример табличной визуализации спектра мгновенных нейтронов деления  $^{235}\text{U}$ .

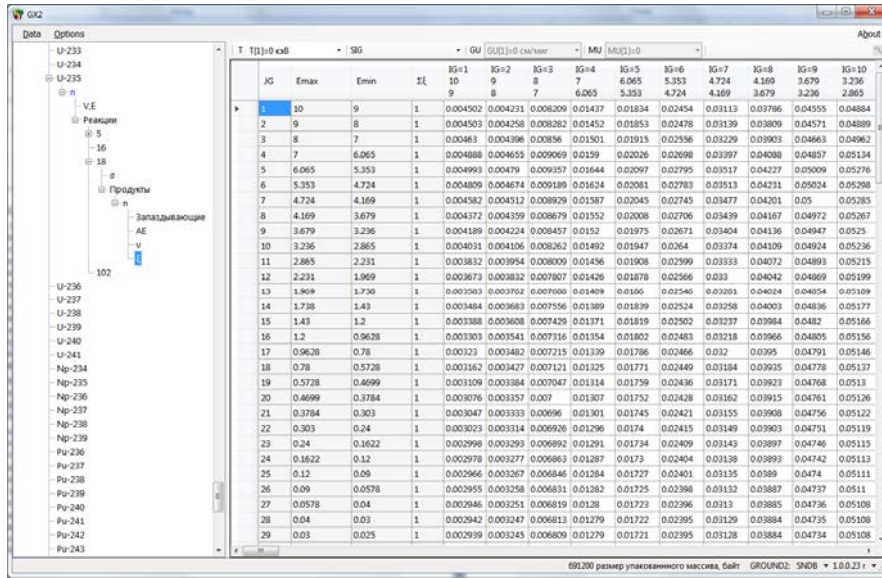


Рис. 12. Пример табличной визуализации группового спектра нейтронов деления  $^{235}\text{U}$  в программе GX2

Для графического отображения групповых величин в комплексе GROUND2 используется служебная программа APS. Она создана на основе клиент-серверной технологии передачи данных через оперативную память, что позволяет в общем случае использовать ее для отображения графических зависимостей из различных программ-поставщиков. Например, можно на одном графике отобразить экспериментально измеренные, оцененные спектральные и групповые сечения ядерных реакций (рис. 13).

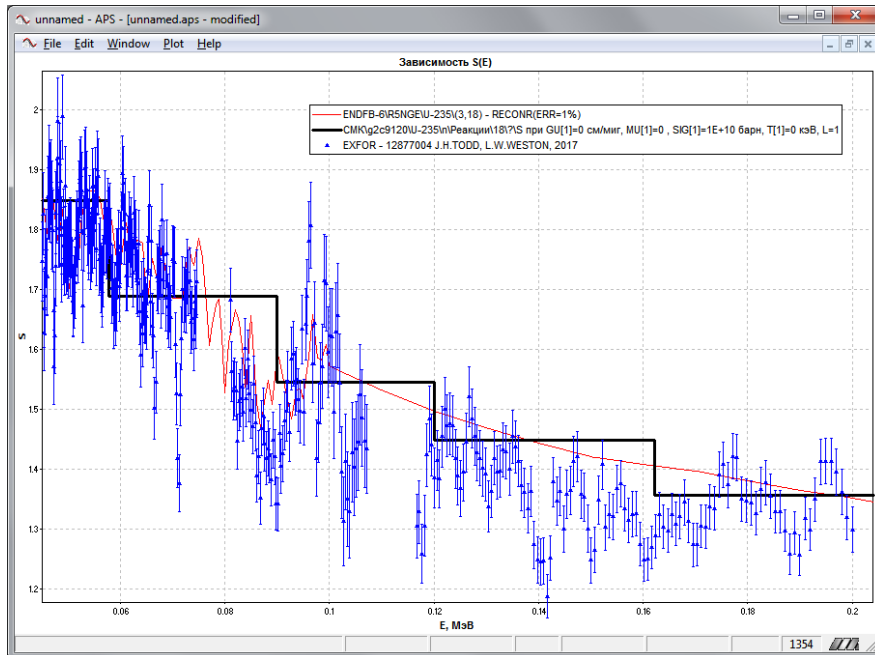


Рис. 13. Пример графического отображения сечения деления  $^{235}\text{U}$  из разных источников:  $\blacktriangle$  – экспериментальные данные EXFOR, — — — о цененные данные ENDF/B-6, — — — групповые данные БД GROUND2

## *Заключение*

В РФЯЦ-ВНИИЭФ создан комплекс программ GROUND2, предназначенный для обработки оцененных ядерных данных и расчета систем групповых констант различных типов ядерных взаимодействий. Основными его особенностями являются:

- представление системы групповых констант в виде объединения групповых данных по всем типам взаимодействия с возможностью хранения данных для многочастичных реакций;
- гибкая структура системы групповых констант, основанная на хранении данных в виде направленного графа, которая позволяет расширять и пополнять ее любыми данными без влияния на ранее разработанные программы;
- открытая модульная архитектура;
- программная оболочка GDF подготовки и проведения расчетов систем групповых констант на основе технологии подключаемых модулей с многопоточным автоматическим расчетом групповых констант, гибким формированием последовательностей расчетов и сценариев их проведения;
- развитый инструментальный сервис по табличному и графическому отображению рассчитанных групповых величин.

Программные технологии, использованные при создании комплекса программ GROUND2, позволят внедрять в систему константного обеспечения РФЯЦ-ВНИИЭФ новые классы ядерно-физических данных, а также организовать расчеты новых характеристик ядерных взаимодействий без каких-либо критических изменений как в структуре комплекса константного обеспечения, так и в программах – потребителях групповых констант.

## *Список литературы*

1. MacFarlane R. E., Muir D. W., Boicourt R. M. et al. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016. Document LA-UR-17-20093, 2016.
2. Cullen D. E. PREPRO 2007, 2007 ENDF/B Pre-processing Codes (ENDF/B-VII Tested). LLNL, USA; The Nuclear Data Section, International Atomic Energy Agency (IAEA), Vienna, Austria.
3. Синица В. В., Абагян Л. П., Базазянц Н. О., Николаев М. Н. ГРУКОН – библиотека программ расчета групповых констант. – М.: Атомиздат, 1973.
4. Sinitsa V. V., Rineisky A. A. GRUKON – package of applied computer programs and operating procedures of functional modules. Rep. INDS(CCP)-344. Vienna, 1993.
5. Manturov G. N., Nikolaev M. N., Tsiboulya A. M. CONSYST code : Preprint IPPE-2828, 2000.
6. ENDF-6 Formats Manual. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII / Ed. by M. Herman and A. Trkov // CSEWG Document ENDF-102. Report BNL-90365-2009, Rev. 1. Brookhaven National Laboratory, 2010.
7. Алексеев А. В. Крутько Н. А., Касаткин С. С. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными // 66-я Международ. конф. «ЯДРО-2016» по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. – Саров, 11–14 октября 2016 г.

8. Алексеев А. В., Бнятов А. В., Касаткин С. С., Крутько Н. А. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными // XIV Международ. конф. «Супервычисления и математическое моделирование». – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 27–38.
9. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015616186 «Система константного обеспечения нейтронно-физических расчетов РФЯЦ-ВНИИЭФ (GROUND)» / Н. А. Крутько, А. В. Алексеев, С. С. Касаткин, А. В. Бнятов.
10. Гончаров Г. А., Горелов В. П., Фарафонов Г. Г. Особенности перехода к многогрупповому приближению при учете направленного движения ядер среды в шаре и телах вращения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1991. Вып. 2. С. 25–29.
11. Алексеев А. В., Барабанова Д. С., Бнятов А. В. и др. Методика и программа расчета групповых констант для двухчастичных и многочастичных реакций // XXIX науч.-техн. конф. «Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника-2018)». – Обнинск, 2018 г.

## **The GROUND2 Software System for Evaluated Nuclear Data Processing and Group Constant Systems Calculation**

A. V. Alekseev, A. V. Bnyatov, N. A. Krut'ko, S. S. Ratkevich

*The paper describes the GROUND2 software system for the processing of evaluated nuclear data and calculation of unified consistent systems of group constants coupling neutrons, gammas, and fast charged particles with isotope nuclei. The software system structure and capabilities of the GDF program shell, as well as the procedure of setting input data and calculating spectral and group characteristics of the interaction of particles with nuclei are presented. The software system capabilities in a part of storing and visually representing the group data are demonstrated.*