

KfK 3745
August 1984

**Aufbau der
Gruppenkonstantenbibliothek
GRUBA und ihre Verwaltung
durch das Programmsystem
GRUMA**

D. Woll
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

KfK 3745

Aufbau der
Gruppenkonstantenbibliothek GRUBA
und ihre Verwaltung durch das
Programmsystem GRUMA

D. Woll

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Bei der Berechnung Schneller Reaktoren hat sich im KfK eine Kette von Dateien und Programmen bewährt, die, ausgehend von energiepunktabhängigen Wahrscheinlichkeiten für Wechselwirkungen zwischen Neutronen und Materialien, energiegruppenabhängige Daten für diese Größen zur Verfügung stellen und letztlich die Berechnung der Kenndaten eines Reaktors ermöglichen. Als zentrale Basisdatei für die Durchführung von nuklearen Reaktorberechnungen enthält der GRUBA-File material- und querschnittstyp-abhängige Gruppenwirkungsquerschnitte. Er wird verwaltet durch das Management-Programm GRUMA, mit dem Neuerstellung und Veränderung eines bestehenden GRUBA-Files einschließlich der Dokumentation der Veränderungen, die dazu notwendige Bearbeitung der Eingabe-Files sowie das Ausdrucken der auf GRUBA vorhandenen Daten durchgeführt werden können. Der Bericht ersetzt für die praktische Arbeit mit GRUMA und GRUBA den bisherigen Bericht KfK 1815; er enthält ferner alle seit Erstellung von GRUMA neu eingeführten Optionen, die allgemeingültigen Charakter besitzen.

Structure of the Group-Constant-Library GRUBA and its Management by the Program-System GRUMA

Abstract

For nuclear calculations of Fast Reactors a chain of programs and associated data libraries has been established and successfully applied at KfK. Starting from energy-dependent probabilities for interactions between neutrons and isotopes, they allow to derive - as an intermediate step - averaged energygroup-dependent data stored on the GRUBA-file, which eventually are used to calculate the characteristic nuclear parameters of a reactor under investigation. The GRUBA-file contains material- and reaction-type-dependent group-cross-sections and similar quantities combined in a so called set of group-constants. The file is managed by the program-system GRUMA, which allows to open a new file and to change an existing one, to prepare input-files, to document changes and to print data contained in the GRUBA-file. For practical work with GRUMA and GRUBA the present report replaces the old report KfK 1815; it includes all new options of general character.

Inhaltsangabe

	Seite
Einführung.....	1
Zweck des Berichtes.....	5
Aufbau des GRUBA-Files.....	6
Zahlendarstellung.....	6
Inhaltsteil.....	7
Gruppenblöcke.....	8
History.....	9
Physikalische Dimensionen und Energiegruppenschema.....	9
Eingabe-Kurzbeschreibung für Gruma.....	10
Erforderliche Job-Control-Language.....	10
Eingabe-Konventionen.....	10
Überschreiben default-Werte.....	11
Name und Funktion der Eingabe-Label.....	12
GRUMA Eröffnung des GRUMA-Laufs.....	13
Aufruf der Programmzweige.....	13
ENDGRUMA Abschluß des GRUMA-Laufs.....	13
OPEN Eröffnen GRUBA-File.....	14
COPYDAT Aufnehmen Daten.....	15
Aufbau der Eingabesätze.....	15
Aufbau der Eingabesätze für spezielle Datentypen....	16
Sonderformen der Eingabesätze.....	17
Kopieren eines GRUBA-Files.....	17
COPYDCLR Aufnehmen, Löschen oder Ändern von Materialien oder Typen.....	18
HISTORY Drucken der History.....	19
DEL.HIST Löschen der History.....	19
COMPGRB Vergleichen zweier GRUBA-Files.....	20
CHNGDASQ Umwandeln in sequentielle Form.....	21
Aufbau des sequentiellen GRUBA-Files.....	22
CONTENTS Inhaltsangabe für Materialien oder Typen....	23
GRBCNT Gruppenweise Inhaltsangabe für Daten.....	23
PRINTDAT Drucken Daten, Erzeugen Eingabe-File.....	24
PRINTGRU Drucken Records eines GRUBA-Files.....	25
SORTDAT Sortieren eines Eingabe-Files.....	25
PRINTSTZ Drucken oder Stanzen eines Eingabe-Files....	26
COPYINPT Kopieren eines Eingabe-Files.....	26
CIFORMAT Umwandeln eines Eingabe-Files von maschinen- interner Darstellung in card-image-Format....	26
STOTW Durchführen STOTW-Korrektur.....	27
Leseroutine GRUSEEK.....	28
Initialisierung.....	28
Lesen Daten.....	29
Literaturangaben.....	35
Beispiele	
1. Erstellung eines GRUBA-Files.....	37
2. Ausdrucken einer History, Inhaltsangabe der Daten eines GRUBA-Files.....	39

Einführung

Bei der Berechnung eines Reaktors werden viele interessierende Größen aus der Verteilung der Neutronen im Reaktor bestimmt. Dazu werden u.a. Wirkungsquerschnitte benötigt, die für Neutronen einer vorgegebenen Energie die Wahrscheinlichkeiten von Wechselwirkungen wie Spaltung, Einfang oder Streuung in andere Energiebereiche mit den im Reaktor vorhandenen Kernen von Brut- und Spaltmaterialien, Strukturmaterialien, Kühlmitteln, Neutronen-moderatoren und -absorbern beschreiben. Die Daten müssen in einer Form vorliegen, die es ermöglicht, abhängig von der gewünschten Genauigkeit der interessierenden Größen den Aufwand für ihre Bestimmung möglichst gering zu halten.

Im Rahmen der F+E-Arbeiten für die Entwicklung Schneller Reaktoren wurde im INR des KfK das nachfolgend beschriebene Verfahren /2/ /10/ zur Bereitstellung der für eine Reaktorberechnung benötigten Daten entwickelt, das in Abb.1 und Abb.2 schematisch dargestellt wird.

(Abb.1): Die ausgewerteten punktwisen energieabhängigen Wirkungsquerschnitte, die mit Hilfe des Programmsystems KEMA /3/ auf der Datei KEDAK /3/ gespeichert sind, müssen zur praktischen Durchführung von Reaktorberechnungen auf wenige (i.a. 26 bis 208) Energiegruppen kondensiert werden. Diese Erstellung repräsentativer Gruppenwirkungsquerschnittsdaten, die durch teilweise komplizierte Mittelung gewonnen werden, wird von den Programmsystemen

MIGROS /4/ (für eine kleine Gruppenzahl z.B. 26, bei der die Resonanzstruktur der Wirkungsquerschnitte durch Wichtung mit einem typischen Neutronenspektrum berücksichtigt wird) und FIDAS /5/ (für eine große Gruppenzahl z.B. 208, bei der zur besseren Behandlung der elastischen Streuung vor allem der Strukturmaterialien die Energiegruppen zusätzlich in Intervalle unterteilt sind) durchgeführt.

Da diese Rechnungen sehr aufwendig sind und nicht für jede Reaktorberechnung neu durchgeführt werden können, müssen die erhaltenen gruppenabhängigen Daten auf einer Datei, dem GRUBA-File, gespeichert werden. Dazu wandeln die Programmsysteme MITRA /6/ bzw. FITRA /7/ die durch MIGROS bzw. FIDAS berechneten Daten in Eingabedaten für das GRUBA-Management-Programm GRUMA um, mit dessen Hilfe die Daten auf den GRUBA-File aufgenommen werden können. Der Aufbau von GRUBA und die Funktion von GRUMA sind Gegenstand dieses Berichtes.

(Abb.2): Aus den auf GRUBA enthaltenen Daten werden durch das Programm GRUCAL /8/ mischungsabhängige Wirkungsquerschnitte berechnet und in einem SIGMN-File /8/ zur Verfügung gestellt. Zur Erprobung neuer Daten können dabei von GRUCAL Eingabedaten für spätere GRUMA-Aufnahmeläufe in Form von Sekundär-Files berücksichtigt werden. Die Vorschriften für die Berechnung der vom Benutzer gewünschten mischungsabhängigen Wirkungsquerschnitte aus den auf dem jeweiligen GRUBA-File enthaltenen Daten werden dem sog. Steuerfile /8/ entnommen, der GRUBA-Files mit unterschiedlichen Datentypen (z.B. eine größere Zahl von Partialquerschnitten) und unterschiedlichen Anwendungsfällen (z.B. nachfolgende Diffusions- oder Sn-Rechnung) angepaßt werden kann. Dadurch wird eine hohe Flexibilität für verschiedenartige Aufgabenstellungen erreicht. Die im SIGMN-File enthaltenen Daten bilden die Grundlage für Reaktorberechnungen in 0-, 1- oder mehrdimensionalen Diffusions- oder Transportprogrammen zur Bestimmung der Neutronenverteilung und der daraus abgeleiteten Kenngrößen.

Das geschilderte Vorgehen hat sich bei der Berechnung Schneller Reaktoren bewährt und konnte auch erfolgreich für andere Reaktortypen und Aufgabenstellungen angewandt werden /9/ /10/.

Der GRUBA-File enthält Energiegruppen- und Material- abhängige Daten für Datentypen wie Wirkungsquerschnitte, Abschirmfaktoren, Übergangswahrscheinlichkeiten und Neutronenverteilungen. Die Zahl der Energiegruppen ist festgelegt, eine Unterteilung der Energiegruppen in Energieintervalle ist möglich. Eine zu den Daten gehörende Verarbeitungskennziffer kennzeichnet den Aufbau und damit die weitere Verarbeitung der Daten. Die Zahl der zu einem Material und einem Datentyp gehörenden Daten kann sich von Gruppe zu Gruppe ändern. Wegen der zum Zeitpunkt des Entwurfs von GRUBA teuren Speichermedien wurde besonderer Wert auf platzsparende Speicherung gelegt. Das Managementprogramm GRUMA bearbeitet die direct-access-Form von GRUBA mit durchgehender Adressierung. Diese Form enthält nur relevante Daten, die durch ihre Anfangsadresse, die Anzahl der Daten und ihre Verarbeitungskennziffer beschrieben werden. Die Übertragung von Eingabedaten findet in Form von Eingabesätzen auf Eingabe-Files statt. GRUMA enthält Programmzweige

- zur Erstellung und Veränderung eines GRUBA-Files,
- zum Bearbeiten von Eingabe-Files, zum Ausdrucken, zum Vergleichen,
- zum Umwandeln in eine sequentielle Form,
- zum Drucken und Löschen einer History, die den Ablauf der Entstehung eines GRUBA-Files festhält,

und zum Überprüfen der ordnungsgemäßen Arbeitsweise von GRUMA.

Für das Lesen der Daten eines GRUBA-Files steht die allgemein einsetzbare Leseroutine GRUSEEK zur Verfügung, die dem Benutzer die zu einer Gruppe, einem Material und einem Datentyp gehörenden Daten anliefert. Dabei können die Daten des GRUBA-Files temporär durch die Daten eines Sekundär-Files, der den gleichen Aufbau wie ein Eingabe-File hat, überlagert werden.

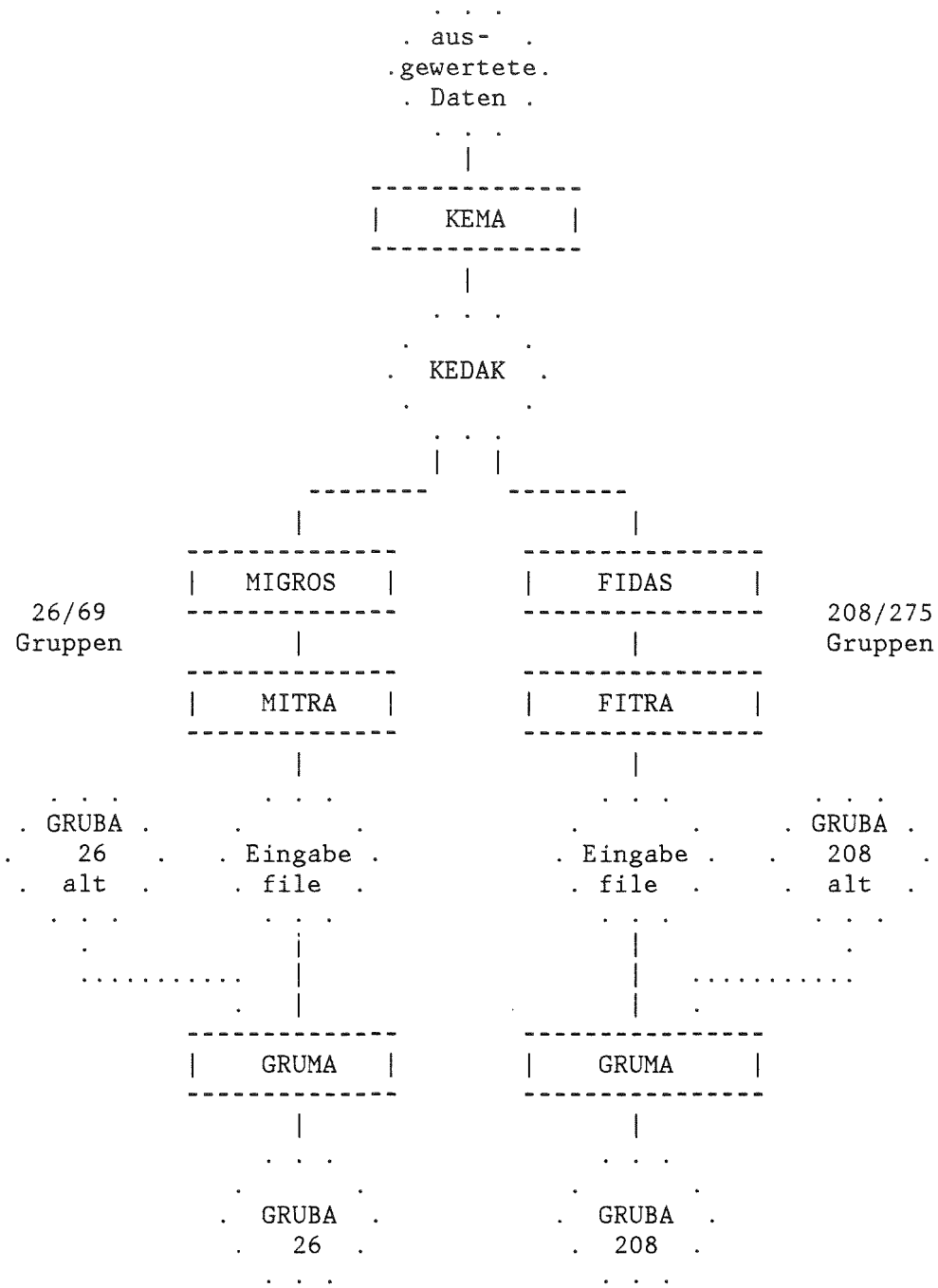


Abb.1 Standard-Vorgehen zur Erstellung eines GRUBA-Files für die Berechnung Schneller Reaktoren

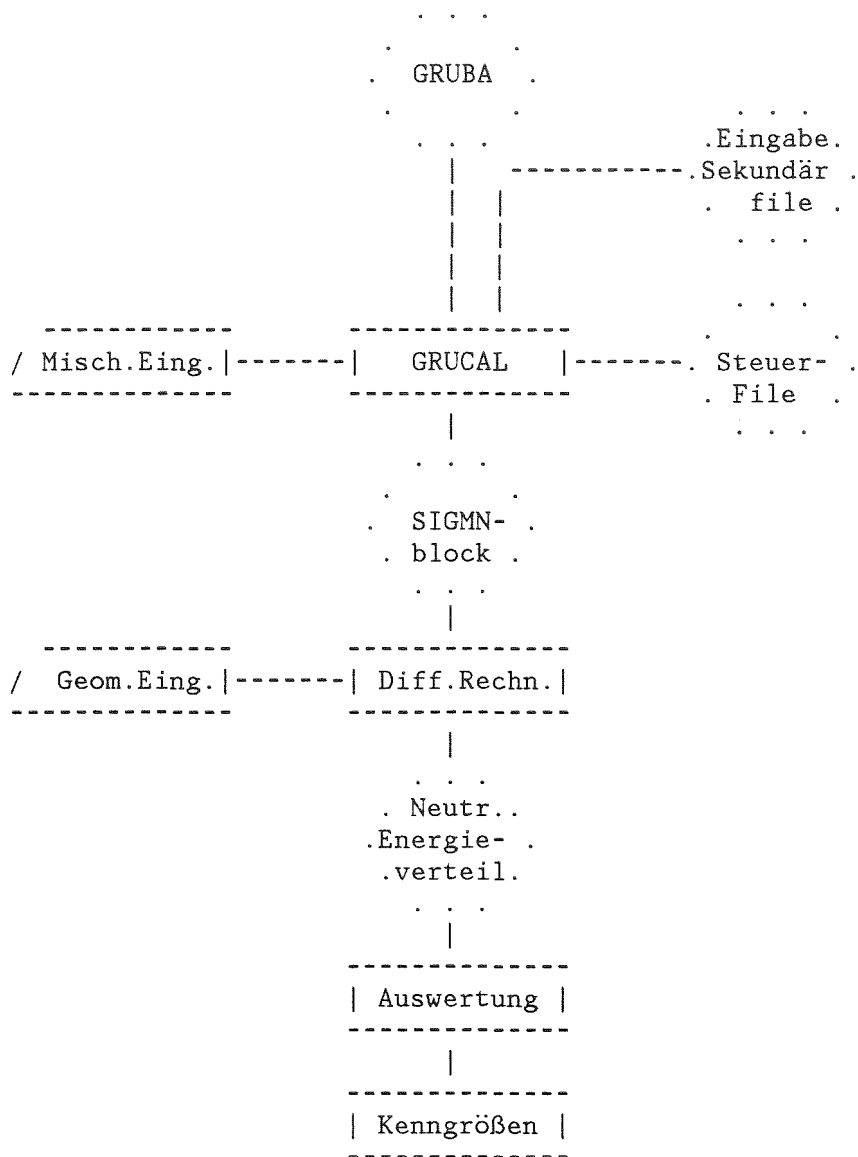


Abb.2 Beispiel für die Durchführung einer Reaktorberechnung

Zweck des Berichtes

Seit der Erstellung des Programmsystems im Jahre 1972 wurde GRUMA laufend verbessert und erweitert +. Dabei wurde u.a. eine History auf dem GRUBA-File eingeführt, die den Ablauf der Erstellung des GRUBA-Files festhält. Die korrekte Durchführung von Aufnahme-läufen wird durch ein Vergleichsprogramm überprüft, das den alten mit dem bei dem Aufnahmelauf entstehenden neuen GRUBA-File vergleicht. In Sonderfällen auftretende Fehler konnten dadurch sofort erkannt und endgültig beseitigt werden. Neue Anforderungen, u.a. durch die Erstellung des KFKINR2-Gruppensatzes /11/, wurden berücksichtigt und der Wunsch nach kostengünstigerer Arbeitsweise durch einen sequentiellen GRUBA-File erfüllt. Der bei der Erstellung von GRUMA erschienene Bericht KFK 1815 /1/ ist daher teilweise überholt und nicht vollständig. Der vorliegende Bericht soll den aktuellen Stand der bereits beschriebenen Programmzweige angeben sowie die Funktion und Anwendung der neu erstellten Optionen beschreiben. Durch eine kurze Beschreibung aller wesentlichen Merkmale von GRUBA und GRUMA soll er dem Benutzer eine kurze Anleitung für das Arbeiten mit GRUMA zur Verfügung stellen und damit für die praktische Arbeit mit GRUBA-Dateien den Bericht KFK 1815 ersetzen. Er soll insbesondere aufzeigen, wie bei der Erstellung eines neuen oder bei der Veränderung eines bestehenden GRUBA-Files vorzugehen ist. Zum tieferen Verständnis der Arbeitsweise von GRUMA sollte weiterhin der Bericht KFK 1815 herangezogen werden.

+ Diese Arbeiten wurden von J.Braun und D.Woll durchgeführt.

*** Aufbau des GRUBA-Files ***

Der GRUBA-File ist als direct-access-Datei mit Records von 422 4-byte Worten aufgebaut. Der gesamte File ist durchgehend adressiert, dadurch wird ein schnelles Auffinden der benötigten Daten ermöglicht. Für spezielle Anwendungen, bei denen die Reihenfolge des Lesens bekannt ist, kann zur Einsparung von Rechenkosten in GRUCAL eine sequentielle Variante (siehe Programmzweig CHNGDASQ) erzeugt werden mit dem Nachteil größeren Platzbedarfes und sehr ineffektiven Lesens, falls die Reihenfolge des Lesens nicht mit der bei der Erstellung festgelegten Reihenfolge übereinstimmt. Das GRUBA-Management-Programm GRUMA bearbeitet die direct-access-Form von GRUBA, daher wird hier der Aufbau des direct-access-Files beschrieben.

Der GRUBA-File besteht aus dem Inhaltsteil, den Gruppenblöcken, die für jede Gruppe Adressteil und Datenteil umfassen, und der History.

Zahlendarstellung

Der GRUBA-File ist i.a. in 4-byte-Worten aufgebaut, 8-byte-Worte werden im folgenden durch R*8 gekennzeichnet. Gruppengrenzen und Daten werden als Gleitkommazahlen dargestellt, alle übrigen 4-byte-Worte, insbesondere Adressen, Kennziffern und Größen, die eine Anzahl enthalten, sind in Festkommadarstellung geschrieben.

Inhaltsteil

Record	Wort	Inhalt
1	1,2	ID Identifikation GRUBA-File R*8
	3	NDTM Datum TTMMJJ
	4	NGR Anzahl Gruppen
	5	MST max. Anzahl Intervalle in einer Gruppe
	6	NTYP Anzahl Datentypen
	7	NMAT Anzahl Materialien
	8	KUBRG Kennziffer für Datenübernahme aus anderen Gruppen 0 keine Übernahme 1 Übernahme für GRUBA-Files mit Daten zur REMO-Korrektur /12/: Nummer der Gruppe, bis zu der Daten für die REMO-Korrektur vorhanden sind
	9	KUBRM Kennziffer für Datenübernahme von anderen Materialien oder Datentypen 0 keine Übernahme 1 Übernahme
	10	Anfangsadresse der Gruppengrenzen
	11	Anfangsadresse der Intervallzahlen pro Gruppe
	12	Anfangsadresse der Datentypnamen
	13	Anfangsadresse der Materialnamen
	14	Anfangsadresse der Namen der Basismaterialien
	15 u.f.	Anfangsadressen für jeden Gruppenblock
	15+NGR u.f.	maximal belegte Adresse

Record	Wort	Inhalt
2	1 u.f.	(GR(I),I=1,NGR) Gruppengrenzen
	NGR+1 u.f.	(NST(I),I=1,NGR) Anzahl Intervalle pro Gruppe
3	1 u.f.	(TYPF(I),I=1,NTYP) Datentypnamen R*8
	NTYP*2+1 u.f.	(MATF(I),I=1,NMAT) Materialnamen R*8
	NTYP*2+	
	NMAT*2+1 u.f.	(BASF(I),I=1,NMAT) Namen der Basismaterialien R*8

Anmerkung: Die Aufteilung in Records kann sich ändern, wenn durch
entsprechend große Werte von NGR, NTYP oder NMAT
Recordgrenzen überschritten werden.

Gruppenblöcke

Für jede Gruppe mindestens zwei Records:

Record Wort	Inhalt
G1	1 u.f. Adressteil ((ADR(IMAT,ITYP),IMAT=1,NMAT),ITYP=1,NTYP), maximal belegte Adresse im Datenteil des Gruppenblocks
G2	1 u.f. Daten, gespeichert in der Reihenfolge ihres Auftretens im Adressteil

Im folgenden bedeuten

IGR	betrachtete Gruppe
MAT	betrachtetes Material R*8
IMAT	Index von MAT in MATF R*8
TYP	betrachteter Datentyp
ITYP	Index von TYP in TYPF
NDAT	Anzahl der zu IGR MAT TYP gehörenden Daten
NVARB	ihre Verarbeitungskennziffer zur Steuerung der Weiterverarbeitung der Daten in GRUCAL, siehe COPYDAT
NADR	(Adresse des ersten Wortes der jeweiligen Daten)-1 (DAT(I),I=1,NDAT) die zu IGR MAT TYP gehörenden Daten.

Ein Wort ADR(IMAT,ITYP) kann folgende Angaben enthalten:

1. einen Verweis auf den Datenteil in der Form
-(NVARB*134217728+NADR) wobei $134217728=2^{**27}$
Die Adresse ergibt sich
direkt für NVARB=0
durch Subtraktion von 134217728 für NVARB=1
durch Subtraktion von 268435456 für NVARB=2
durch Subtraktion von 402653184 für NVARB=3
durch Subtraktion von 536870912 für NVARB=4
NDAT ergibt sich mit Hilfe der nächsten nachfolgenden
echten Adresse im Adressteil.
2. den Wert des Querschnitts selbst, wenn
NDAT=1 , NVARB=0 und DAT(1).GE.0.0
3. einen Verweis auf eine andere Gruppe in der Form -IGR
4. einen Verweis auf einen anderen Datentyp oder ein anderes
Material der gleichen Gruppe in der Form -NVERW
wobei NVERW die Adresse des Wortes im Adressteil ist, auf das
verwiesen wird.
5. die Kennzeichnung, daß keine Daten vorhanden sind, durch
-2147483647 wobei $-2147483647=-(2^{**32}-1)$
6. eine Kennzeichnung für gesetzte Daten:
-2147483646 für einen Skalartyp mit dem Wert 0.0
-2147483645 für einen Skalartyp mit dem Wert 1.0
-2147483644 für einen Vektortyp mit dem Wert 0.0
-2147483643 für einen Vektortyp mit dem Wert 1.0
Daten werden im KFKINR2-Satz /11/ gesetzt, wenn sie nicht als
Gruppenkonstanten zur Verfügung stehen, zur Weiterverarbeitung
im Querschnitts-Programm GRUCAL jedoch formal mit einem Wert 0.0
oder 1.0 gefüllt sein müssen. (Für die anderen Gruppensätze
werden die entsprechenden Daten von GRUCAL generiert).

History

Die auf die Gruppenblöcke folgenden Records enthalten in der History Einträge über die durch COPYDAT oder COPYDCLR auf dem GRUBA-File durchgeführten Änderungsläufe. Jeder Record enthält Einträge für maximal 10 Aufnahmeläufe. Die Records haben folgenden Aufbau:

R*4-Wort	Inhalt
1	Kennwort 'HIST' im ersten Record der History ' ' in den weiteren Records
2	Kennwort N im ersten Record der History: Anzahl der Einträge in der History ' ' in den weiteren Records

Für jeden Eintrag folgen 42 4-byte-Worte.
Sie haben folgenden Aufbau;

R*4-Wort	R*8-Wort	Inhalt
1 u.2	1	Jobname des Änderungslaufes R*8
3 u.4	2	Datum des Änderungslaufes TT.MM.JJ R*8
5 u.6	3	Art des Laufes R*8 OPEN COPYDAT COPYDCLR DEL.HIST
7 u.8	4	Identifikation des neuen GRUBA-Files R*8
9		Datum des GRUBA-Files
10		Anzahl der Materialien auf dem GRUBA-File
11		Anzahl der Datentypen auf dem GRUBA-File
12		Anzahl Records des GRUBA-Files ohne History
13 u.14	7	Volume, auf den der neue GRUBA-File geschrieben wurde
15 u.f.	8 u.f.	DSN (Datensatzname) des neuen GRUBA-Files 24 Zeichen
21 u.22	11	Disposition des neuen GRUBA-Files
23 u.24	12	Volume, von dem der alte GRUBA-File gelesen wurde
25 u.f.	13 u.f.	DSN (Datensatzname) des alten GRUBA-Files 24 Zeichen
31 u.32	16	Disposition des alten GRUBA-Files
33 u.34	17	Volume, von dem der Eingabe-File gelesen wurde
35 u.f.	18 u.f.	DSN (Datensatzname) des Eingabe-Files 32 Zeichen

Physikalische Dimensionen und Energiegruppenschema

Auf dem GRUBA-File sind keinerlei Maßangaben z.B. für Energien (eV) oder Wirkungsquerschnitte (barn) festgelegt, sie werden allein durch die Art der Weiterverarbeitung z.B. in GRUCAL bestimmt.

Üblicherweise werden bei den bisher installierten GRUBA-Files Wirkungsquerschnitte in barn und Energien in eV angegeben.

Die Gruppengrenzen werden nach Gruppen geordnet mit fallenden Energien angegeben (Gruppe 1 höchstenergetische Gruppe), der untere Wert für die letzte Gruppe wird nicht auf GRUBA gespeichert, sondern durch die Verarbeitungsprogramme gesetzt (0.001 eV in GRUCAL).

```
*****  
*** Eingabe-Kurzbeschreibung für GRUMA ***  
*****
```

Das GRUBA-Management-Programm GRUMA enthält Programmzweige zur Erstellung und Veränderung eines GRUBA-Files (OPEN, COPYDAT, COPYDCLR), zum Drucken und Löschen der History (HISTORY, DEL.HIST), zum Vergleichen und Umwandeln in sequentielle Form (COMPGRB, CHNGDASQ), zum Ausdrucken (CONTENTS, GRBCNT, PRINTDAT), zum Testen (PRINTGRU), zum Verarbeiten von Eingabe-Files in maschineninterner Darstellung und im card-image-Format (SORTDAT, PRINTSTZ, COPYINPT, CIFORMAT) sowie zur Aufbereitung von Eingabedaten (STOTW).

Erforderliche Job-Control-Language

Im KfK kann GRUMA durch folgendes EXEC-Statement aufgerufen werden:
// EXEC FHG,LIB=NUSYS,NAME=GRUMA
Ferner sind DD-Statements erforderlich für die FREEFO-Einheit /13/ 8 (siehe nachfolgender Abschnitt Eingabe-Konventionen)
//G.FT08F001 DD UNIT=SYSDA,SPACE=(TRK,100)
und die in der jeweiligen Eingabe deklarierten GRUBA-Files, Eingabe-Files und Hilfsfiles.

Eingabe-Konventionen

Die Eingabe muß nach FREEFO-Konventionen /13/ erstellt werden. Die wesentlichen Merkmale sind:
Die Eingabe ist Format-frei.
Die einzelnen Größen müssen durch mindestens ein Leerzeichen getrennt werden.
Die erste Größe eines Eingabesatzes muß an erster Stelle eines Satzes beginnen.
Folgesätze werden durch ein Leerzeichen an der ersten Stelle des Satzes gekennzeichnet.
Alphanumerische Zeichenketten, z.B. Namen und Label, müssen in Hochkommata eingeschlossen werden.
Die Darstellung von Gleit- und Festkommazahlen entspricht weitgehend FORTRAN-Konventionen.
Bei der Aufbereitung der Eingabe-Größen durch FREEFO /13/ werden die Format-freien Daten in maschineninterne Darstellung umgewandelt und auf die FREEFO-Einheit 8 geschrieben. Diese Einheit muß in einem DD-Statement deklariert werden.
I.a. sind die Eingabegrößen 4-byte-Worte, 8-byte-Worte werden durch R*8 gekennzeichnet.
Gruppengrenzen und Daten werden als Gleitkommazahlen dargestellt, alle übrigen 4-byte-Worte, insbesondere Kennziffern und Größen, die eine Anzahl enthalten, müssen in Festkommadarstellung angegeben werden.

Im folgenden bedeutet:

Kn Beginn eines neuen Eingabesatzes
Sn eine Bemerkung zur Eingabe.

*** Überschreiben default-Werte ***

Bei Bedarf müssen die in einem Standard-GRUMA-Lauf maximal zulässigen Werte für

Anzahl Gruppen	NGR	208
Anzahl Datentypen	NTYP	50
Anzahl Materialien	NMAT	100
Anzahl Datentyp- oder Materialänderungen	NL	50
Anzahl Daten eines Eingabesatzes	NH	1000
Länge der Ein- Ausgabepuffer in K bytes	LBUF	14

zu Beginn des GRUMA-Laufes überschrieben werden.

S1: falls Anzahl Gruppen NGR > 208

K1: 'NGR' Konstante
NGR Anzahl Gruppen

S2: falls Anzahl Typen NTYP > 50

K2: 'NTYP' Konstante
NTYP Anzahl Typen

S3: falls Anzahl Materialien NMAT > 100

K3: 'NMAT' Konstante
NMAT Anzahl Materialien

S4: falls Anzahl Datentyp- oder Materialänderungen NL > 50

K4: 'NL' Konstante
NL Anzahl Datentyp- oder Materialänderungen

S5: falls Anzahl Daten eines Datensatzes NH > 1000

K5: 'NH' Konstante
NH Anzahl Daten eines Datensatzes

S6: falls der für Ein- und Ausgabepuffer benötigte Platz
LBUF > 14 K byte

K6: 'LBUF' Konstante
LBUF Länge der Ein- und Ausgabepuffer in K byte
Nicht zu berücksichtigen sind Puffer für
die Einheiten 5,6 und 8 (FREEFO-Einheit)

*** Name und Funktion der Eingabe-Label ***

Label	* Funktion
GRUMA	* Eröffnen GRUMA-Eingabe *
OPEN	* Eröffnen GRUBA-File
COPYDAT	* Aufnehmen Daten auf GRUBA-File
COPYDCLR	* Aufnehmen, Löschen oder Ändern von Materialien * oder Typen auf dem GRUBA-File *
HISTORY	* Drucken der History
DEL.HIST	* Löschen der History *
COMPGRB	* Vergleichen zweier GRUBA-Files mit Berücksichtigung * eines Eingabe-Files
CHNGDASQ	* Umwandeln eines GRUBA-Files von direct-access-Form in * sequentielle Form *
CONTENTS	* Inhaltsangabe eines GRUBA-Files für Materialien oder Typen
GRBCNT	* Gruppenweise Inhaltsangabe eines GRUBA-Files für Daten
PRINTDAT	* Drucken der Daten eines GRUBA-Files, Erzeugen eines Eingabe-Files *
PRINTGRU	* Drucken Records eines GRUBA-Files *
SORTDAT	* Sortieren eines Eingabe-Files
PRINTSTZ	* Drucken oder Stanzen eines Eingabe-Files
COPYINPT	* Kopieren eines Eingabe-Files
CIFORMAT	* Umwandeln eines Eingabe-Files von maschineninterner * Darstellung in card-image-Format
STOTW	* Durchführen STOTW-Korrektur *
ENDGRUMA	* Schließen GRUMA-Eingabe

Die Funktion der den Labeln zugeordneten Programmzweige ist bei der Beschreibung der einzelnen Programmzweige näher erläutert.

```
*****  
*** GRUMA ***  
*****
```

Zweck: Eröffnung des GRUMA-Laufs

S0: Erster Eingabe-Label in der GRUMA-Eingabe nach dem evtl.
Überschreiben von default-Werten
K0: 'GRUMA ' Label R*8

```
*****  
*** Aufruf der Programmzweige ***  
*****
```

S1: Die einzelnen Programmzweige von GRUMA können durch Angabe ihres
Labels in beliebiger Reihenfolge aufgerufen werden. Auf den
folgenden Seiten wird die Eingabe der Programmzweige beschrieben.

K1: LABEL Label des aufzurufenden Programmzweiges R*8

S2: Auf den Label muß die Eingabe des jeweils aufgerufenen
Programmzweiges folgen

S3: Aufruf eines weiteren Programmzweiges oder K9: 'ENDGRUMA'

```
*****  
*** ENDGRUMA ***  
*****
```

Zweck: Abschluß des GRUMA-Laufs

S9: Letzter Eingabe-Label in der GRUMA-Eingabe
K9: 'ENDGRUMA' Label R*8

*** OPEN ***

Zweck: Erstellen des Inhaltsteils und der Adressteile eines GRUBA-Files als Vorbereitung zur Aufnahme von Daten.

Durch- Bei der Eröffnung eines GRUBA-Files wird der Inhalts-
führung: teil mit Kennworten, Gruppenangaben und Material- und Datentypnamen sowie für jede Gruppe der Adressteil mit dem Hinweis auf nicht vorhandene Daten und ein leerer Datenteil geschrieben.
Verweise auf Basismaterialien werden eingeführt.

K0: 'OPEN ' Label R*8

K1: NTW FORTRAN-Einheit GRUBA-File
NREC Anzahl Records mit 422 4-byte-Worten
Mindestangabe $3 + \text{NGR} * ((\text{NMAT} * \text{NTYP} / 422 + 1) + 1) + 1$
Dieser Wert muß mit der SPACE-Angabe des DD-Statements übereinstimmen

K2: ID Identifikation GRUBA-File R*8
NGR Anzahl Gruppen
MST Maximalzahl Intervalle in einer Gruppe
NTYP Anzahl Datentypen
NMAT Anzahl Materialien
KUBRG Kennziffer für Übernahme Daten von anderen Gruppen
0 Keine Übernahme vorgesehen
1 Übernahme vorgesehen
KUBRM Kennziffer für Übernahme Daten von anderen Materialien oder Typen der gleichen Gruppe
0 Keine Übernahme vorgesehen
1 Übernahme vorgesehen

K4: (GR(I), I=1, NGR) Gruppengrenzen (siehe phys. Dimensionen)

K5: (NST(I), I=1, NGR) Anzahl Intervalle für jede Gruppe

K6: (TYPF(I), I=1, NTYP) Namen der Datentypen R*8

K7: (MATF(I), BASF(I), I=1, NMAT) Namen der Materialien und der dazugehörigen Basismaterialien R*8
Ein Basismaterial ist ein Material, auf das von einem anderen Material verwiesen wird.
Ist ein solches Basismaterial nicht vorhanden, muß ' ' als Name eines Basismaterials angegeben werden.

*** COPYDAT ***

Zweck: Aufnehmen, Ersetzen oder Löschen von
Daten oder Verweisen.

Durch- Der GRUBA-File wird gruppenweise unter
führung: Berücksichtigung der Eingabesätze kopiert.

Voraus- Die Eingabesätze müssen auf dem Eingabe-File
setzung: in maschineninterner Darstellung (Umwandlung durch FREEFO)
nach Gruppen geordnet vorliegen (Programmzweig SORTDAT).

Hinweis: Im Anschluß an COPYDAT wird im Normalfall (siehe S1 sowie
COMPGRB) automatisch der Programmzweig COMPGRB aufgerufen.

K0: 'COPYDAT ' Label R*8

K1: NTR FORTRAN-Einheit alter GRUBA-File
NTW FORTRAN-Einheit neuer GRUBA-File
NREC Anzahl Records mit 422 4-byte-Worten des neuen Files
Mindestlänge siehe OPEN zusätzlich
dem Platzbedarf für die Daten im Datenteil
NDRCK Kennziffer für Drucken Daten
0 keine Druckausgabe Daten
1 Ausgabe von IGR MAT TYP NVARB NDAT
2 Ausgabe von IGR MAT TYP NVARB NDAT
und max. 5 Daten
-1 keine Änderung des Datums bei Kopieren

K3: NZW FORTRAN-Einheit Eingabe-File
Für Dateneingabe in der GRUBA-Eingabe
NZW=8 (FREEFO-Einheit)
Daten auf einem externen File (NZW.NE.8) müssen
in maschineninterner Darstellung vorliegen.

S1: Falls Datenvergleich für NZW=8 durchgeführt werden soll

K4: 'UNIT' Konstante
NZH FORTRAN-Einheit Zwischendatei

S2: für Eingabe der Daten in der GRUBA-Eingabe
folgen die Eingabesätze

Aufbau der Eingabesätze

S1: für jeden Eingabesatz

K1: IGR Gruppennummer
MAT Materialname R*8
TYP Typname R*8
NVARB Verarbeitungskennziffer
NDAT Anzahl Daten
(DAT(I),I=1,NDAT) Daten

S2: Die Eingabesätze werden abgeschlossen durch K2.
K2 ist zwingend notwendig für Eingabesätze
innerhalb der GRUBA-Eingabe.

K2: 0 'END ' ' 0 1 0.

Aufbau der Eingabesätze für spezielle Datentypen

Datentyp	NVARB	NDAT	DAT
Wirkungs- querschnitt S	0 0	1 NST	S (S(I), I=1, NST)
Abschirm- faktor F	0 1 2 3 4	1 2+NS*NT 3+NT+NE +NE*NS*NT 2+NT +NS*NT 2+NT+NS +NT*NS	1.0 NT, NS, ((F(IS, IT), IS=1, NS), IT=1, NT) NT, NS, NE, (T(IT, IT=1, NT), E(IE), IE=1, NE), ((F(IE, IS, IT), IE=1, NE), IS=1, NS), IT=1, NT) NT, NS, (T(IT), IT=1, NT), (F(IS, IT), IS=1, NS), IT=1, NT) NT, NS, (T(IT), IT=1, NT), (SO(IS), IS=1, NS), (F(IS, IT), IS=1, NS), IT=1, NT)
Übergangs- wahrschein- lichkeit P	0 1 3 4	IGRL-KGR1+1 (IGRL-KGR1 +1)*NST IGRL-IGRE+2 (IGRL-IGRE +1)*NST+1	(P(I), I=KGR1, IGRL) ((P(I, K), K=1, NST), I=KGR1, IGRL) IGRE, (P(I), I=IGRE, IGRL) IGRE, ((P(I, K), K=1, NST), I=IGRE, IGRL)

Dabei bedeuten:

NVARB Verarbeitungskennziffer
 NDAT Anzahl Daten
 DAT Daten
 NST Anzahl Intervalle der betrachteten Gruppe
 NT Anzahl Temperaturen
 Als Standardtemperaturen sind festgelegt:
 für NT=2 900K und 2100K
 NT=3 300K, 900K und 2100K
 NT=4 300K, 900K, 1500K und 3100K
 NS Anzahl sigma0-Werte, für die f-Faktoren gespeichert sind.
 Sind keine sigma0-Werte gespeichert, so sind
 f-Faktoren vorgesehen für die 7 Standard-sigma0-Werte
 0. 10. 100. 1000. 10.E4 10.E5 10.E6
 Für sigma0-Werte, für die für alle Temperaturen
 F.EQ.1.0 sind, werden keine Daten gespeichert.
 SO sigma0-Werte
 NE Anzahl Energiepunkte
 T Temperaturen
 E Energiepunkte
 KGR betrachtete Ausstreuerguppe
 KGR1 KGR+1
 IGR1 erste Einstreuerguppe
 IGRL letzte Einstreuerguppe

Sonderformen der Eingabesätze

Funktion	NVARB	NDAT	DAT
Löschen von Daten	-1	2	'DROP '
Verweis auf Basismaterial (siehe OPEN)	-1	2	'BASISMAT'
Verweis auf anderes Material	-1	4	'POINTMAT' VMAT Name des Materials, auf das verwiesen wird R*8
Verweis auf anderen Typ	-1	4	'POINTTYP' VTYP Name des Typs, auf den verwiesen wird R*8
Verweis auf andere Gruppe	-1	3	'POINTGRB' VGR Nummer der Gruppe, auf die verwiesen wird
Setzen Skalartyp 0.0	-1	3	'SKALAR ' 0.0
Setzen Skalartyp 1.0	-1	3	'SKALAR ' 1.0
Setzen Vektortyp 0.0	-1	3	'VEKTOR ' 0.0
Setzen Vektortyp 1.0	-1	3	'VEKTOR ' 1.0

Ein gesetzter Skalartyp wird beim Lesen generiert mit:

NVARB=0 NDAT=1 DAT(1)=0.0 bzw. 1.0

Ein gesetzter Vektortyp wird beim Lesen generiert mit:

NVARB=3 NDAT=2 DAT(1)=IGR (Nummer der betrachteten Gruppe)
DAT(2)=0.0 bzw. 1.0

*** Kopieren eines GRUBA-Files ***

Ein GRUBA-File kann durch den Programmzweig COPYDAT durch folgende Eingabe kopiert werden:

K0: 'COPYDAT ' Label R*8

K1: NTR FORTRAN-Einheit des zu kopierenden GRUBA-Files
NTW FORTRAN-Einheit des kopierten GRUBA-Files
NREC Anzahl Records des zu kopierenden GRUBA-Files
0 Konstante

K2: 8 Konstante

K3: 0
'END ' Konstante
' ' Konstante
0 Konstante
0 Konstante
0 Konstante

```
*****
*** COPYDCLR ***
*****
```

Zweck: Ändern, Einfügen oder Löschen
von Materialien oder Datentypen

Durchführung: Der GRUBA-File wird gruppenweise kopiert,
dabei werden die auftretenden Adressen entsprechend
den durchgeführten Änderungen modifiziert.

Hinweis: Im Anschluß an COPYDCLR wird im Normalfall (siehe COMPGRB)
automatisch der Programmzweig COMPGRB aufgerufen.

K0: 'COPYDCLR' Label R*8

K1: NTR FORTRAN-Einheit alter GRUBA-File
NTW FORTRAN-Einheit neuer GRUBA-File
NREC Anzahl Records mit 422 4-byte-Worten des neuen Files
Mindestlänge siehe OPEN unter Berücksichtigung
der durchzuführenden Änderungen zusätzlich
dem Platzbedarf für die Daten im Datenteil

S1: für jede Änderung K2

K2: N1	'MAT	'	für Materialänderung
	'TYP	'	für Datentypänderung
N2	'CHANGE	'	für Änderung
	'GENER	'	für Einfügen
	'DROP	'	für Löschen
N3	Name des zu ändernden, einzufügenden oder zu löschenden Materials oder Datentyps R*8		
N4	für Änderung: neuer Name R*8		
	für Einfügen Material: Name des Basismaterials (siehe OPEN)		
	'	'	sonst

S2: Eingabeende für COPYDCLR durch K3

K3: 'END


```
*****  
*** HISTORY ***  
*****
```

Zweck: Drucken der History eines GRUBA-Files

K0: 'HISTORY' Label R*8

K1: NTG FORTRAN-Einheit des GRUBA-Files, dessen History
gedruckt werden soll

```
*****  
*** DEL.HIST ***  
*****
```

Zweck: Löschen der History eines GRUBA-Files

Durch- Beim Löschen werden die vorhandenen Einträge in der History
führung: gelöscht, es wird jedoch im ersten Eintrag der neuen
History der Löschvorgang festgehalten.

K0: 'DEL.HIST' Label R*8

K1: NTG FORTRAN-Einheit des GRUBA-Files, dessen History
gelöscht werden soll

*** COMPGRB ***

Zweck: Vergleich zweier GRUBA-Files unter Berücksichtigung eines Eingabe-Files.

Durchführung: Für jede Gruppe, jedes Material und jeden Datentyp werden mit Hilfe von 2 GRUSEEK-Routinen die Daten auf NT1, unter Berücksichtigung eines Eingabe-Files NTS, und die Daten auf NT2 gelesen und miteinander verglichen.

S0: Das Vergleichsprogramm wird automatisch bei allen Aufrufen von COPYDAT (für NZW=8 nur bei Angabe von UNIT) und COPYDCLR aufgerufen. Dabei lassen auftretende Abweichungen auf einen fehlerhaften GRUBA-Lauf schliessen. Der Aufruf wird unterdrückt durch Angabe von K5, durch Angabe von K6 wird er anschließend wieder durchgeführt. Durch Angabe von K0 bis K2 kann das Vergleichsprogramm als eigenständiges Programm aufgerufen werden.

K0: 'COMPGRB' Label R*8

K1: NT1 FORTRAN-Einheit GRUBA-File
NTS Kennwort für dazugehörigen Eingabe-File
FORTRAN-Einheit
0 falls kein Eingabe-File

K2: NT2 FORTRAN-Einheit des mit NT1 zu vergleichenden GRUBA-Files

S5: Ausschalten des automatischen Aufrufs von COMPGRB für nachfolgende Aufrufe von COPYDAT oder COPYDCLR durch K5

K5: 'NOCOMP ' Konstante

S6: Einschalten des automatischen Aufrufs von COMPGRB für nachfolgende Aufrufe von COPYDAT oder COPYDCLR durch K6

K6: 'COMP ' Konstante

*** CHNGDASQ ***

Zweck: Umwandlung eines direct-access-GRUBA-Files in einen sequentiellen GRUBA-File.
(Siehe auch KAPROS-Modul /14/
GRDASQ von C.Broeders, D.Woll /15/)

Durchführung: Für jede Gruppe werden mit Hilfe von GRUSEEK die Daten für alle Materialien und Datentypen gelesen und in sequentieller Form ausgeschrieben. Für nicht vorhandene Daten wird ein leerer Satz geschrieben.

Anwendungsbereich: Die Verwendung eines sequentiellen GRUBA-Files ermöglicht eine Verringerung der Lesekosten in GRUCAL /8/. Sie ist zu empfehlen, wenn für eine Reihe von Materialien eine größere Zahl von GRUCAL-Läufen durchgeführt werden soll. GRUCAL kann sowohl die direct-access-Version als auch die sequentielle Version von GRUBA verarbeiten, die Unterscheidung wird anhand des Dateinamens gemäß den Namenskonventionen von KAPROS /14/ getroffen. Für sequentielle GRUBA-Files ist dynamische Datei-Allokierung (siehe Computer-interne Eingabebeschreibung von GRUCAL /8/) nicht möglich.

Hinweis: Zur Einsparung von Lesekosten in GRUCAL ist eine große Blockung des sequentiellen Files erforderlich, z.B. durch DCB=(RECFM=VBS,LRECL=16320,BLKSIZE=16320)

K0: 'CHNGDASQ' Label R*8

K1: ID Identifikation GRUBA R*8
NTDA FORTRAN-Einheit direct-access-GRUBA
NTS FORTRAN-Einheit sequentielles GRUBA

S1: Materialauswahl

K2: NMATU Kennwort für Übernahme Materialien
0 Übernahme aller Materialien
.GT.0 Anzahl der zu übernehmenden Materialien
KMATO Kennwort für Reihenfolge der Materialien auf dem sequentiellen File
0 Materialien in Reihenfolge des direct-access-Files
1 Materialien in durch K3 festgelegter Reihenfolge

S2: falls NMATU.GT.0 K3, sonst S3

K3: (MATF(I),I=1,NMATU) Namen der zu übernehmenden Materialien

S3: Typauswahl

K4: NTYPU Kennwort für Übernahme Typen
 0 Übernahme aller Typen
 .GT.0 Anzahl der zu übernehmenden Typen
KTYPO Kennwort für Reihenfolge der Typen auf dem
 sequentiellen File
 0 Typen in Reihenfolge
 des direct-access-Files
 1 Typen in durch K5 festgelegter Reihenfolge

S4: falls NTYPU.GT.0 K5, sonst S5

K5: (TYPF(I),I=1,NTYPU) Namen der zu übernehmenden Typen

S5: Eingabeende für CHNGDASQ

Aufbau des sequentiellen GRUBA-Files

1.Satz ID Identifikation GRUBA-File R*8
 NDTM Datum TTMMJJ
 NGR Anzahl Gruppen
 MST max. Anzahl Intervalle in einer Gruppe
 NTYP Anzahl Datentypen
 NMAT Anzahl Materialien

2.Satz (GR(I),I=1,NGR) Gruppengrenzen
 (NST(I),I=1,NGR) Anzahl Intervalle pro Gruppe

3.Satz (TYPF(I),I=1,NTYP) Datentypnamen R*8

4.Satz (MATF(I),I=1,NMAT) Materialnamen R*8

Pro Gruppe, Material und Typ ein Satz:

5.u.f.Sätze NVARB,NDAT,(DAT(I),I=1,NDAT)
 mit NVARB Verarbeitungskennziffer
 NDAT Anzahl Daten
 DAT Daten

Für nicht vorhandene Daten wird NDAT=0 und DAT(1)=0. gesetzt.

*** CONTENTS ***

Zweck: Drucken des Inhaltsteils eines GRUBA-Files
mit Kennworten, Angaben zur Gruppeneinteilung und
auf dem GRUBA-File enthaltenen Datentypen und Materialien.

K0: 'CONTENTS' Label R*8
K1: NTR FORTRAN-Einheit GRUBA-File

*** GRBCNT ***

Zweck: Für Einzelgruppen oder Gruppenbereiche wird in Form einer
Tabelle ausgegeben, für welche Datentypen und Materialien
Daten vorhanden sind bzw. welche Verweise existieren.

K0: 'GRBCNT ' Label R*8
K1: NT FORTRAN-Einheit GRUBA-File
S1: Falls Ausdruck der Erklärungsteile für alle in diesem Aufruf
betrachteten Gruppen K2
K2: 'TEST ' Konstante
S2: Für alle Einzelgruppen oder Gruppenbereiche, von denen eine
Inhaltsangabe gewünscht wird, S3 bis S5
S3: Falls Ausdruck der Verweise für die nachfolgende Gruppenangabe K4
K4: 'VERWEISE ' Konstante
K5: KENNGR Kennwort für Einzelgruppen oder Bereich
 'GRUPPE ' falls Inhaltsangaben für Einzelgruppen
 'BEREICH ' falls Inhaltsangabe für Gruppenbereich
KGR1 untere Energiegruppennummer
KGR2 obere Energiegruppennummer
S4: Falls KGR1=0 und KGR2=0 eingegeben werden, wird die entsprechende
Inhaltsangabe für alle Gruppen des betrachteten GRUBA-Files
ausgegeben
S5: Eingabe weiterer Gruppen oder Bereiche oder Eingabeende für GRBCNT

*** PRINTDAT ***

Zweck: Druckausgabe oder Erzeugen eines Eingabe-Files
der zu einer Gruppe, einem Material und einem Datentyp
gehörenden Daten. Die Behandlung von Verweisen wird durch
Eingabe gesteuert.

Durchführung: Die auf dem GRUBA-File vorhandenen Daten werden mit
Hilfe der Routine GRUSEEK gelesen.

K0: 'PRINTDAT' Label R*8

K1: ID Identifikation GRUBA-File R*8
NTR FORTRAN-Einheit GRUBA-File
NTW Kennwort Erstellung Eingabe-File
 0 keine Erstellung eines Eingabe-Files
 FORTAN-Einheit Eingabe-File
KTW zweistelliges Kennwort für Behandlung Eingabe-File
 Ziffer 1 .GT. 0 REWIND vor dem Schreiben
 Ziffer 2 .GT. 0 ENDFILE | nach dem
 REWIND | Schreiben

K2: NDRND Kennwort für Kennzeichnung nicht vorhandener Daten
 1 Angabe, falls Daten nicht vorhanden sind
 0 keine Angabe, falls Daten nicht vorhanden
KVV Kennwort Behandlung Verweise
 0 Verweise werden nicht aufgelöst
 1 Gruppenverweise werden aufgelöst
 2 Mat./Typ-Verweise werden aufgelöst
 3 alle Verweise werden aufgelöst
 -1 gesetzte Daten werden in der Eingabeform
 dargestellt (s. COPYDAT, Sonderformen)

K3: NMATP Anzahl auszugebender Materialien

S1: für jedes auszugebendes Material K4 bis S3

K4: MATP Kennwort für das auszugebende Material R*8
 Name des auszugebenden Materials
 ' ' falls alle Materialien ausgegeben
 werden sollen
NR Anzahl Datentyp-Gruppen-Kombinationen für das
 deklarierte Material

S2: für jede Datentyp-Gruppen-Kombination K5 bis S3

K5: MWQP Kennwort für den auszugebenden Datentyp R*8
 Name des auszugebenden Datentyps
 ' ' falls alle Datentypen ausgegeben
 werden sollen
KGR Kennwort für Gruppenangabe
 Nummer der Gruppe, für die Daten ausgegeben
 werden sollen
 0 falls Daten für alle Gruppen ausgegeben
 werden sollen

S3: Eingabeende für PRINTDAT

*** PRINTGRU ***

Zweck: Drucken der Records des Inhaltsteils eines GRUBA-Files
in I-, E- oder A-Format sowie der zu einem Gruppenbereich
gehörenden Records in I- und E-Format für Testzwecke.

K0: 'PRINTGRU' Label R*8

K1: NT FORTRAN-Einheit GRUBA-File
 NG1 erste Gruppe, für die Records gedruckt
 werden sollen
 NG2 letzte Gruppe, für die Records gedruckt
 werden sollen

*** SORTDAT ***

Zweck: Sortieren mehrerer in maschineninterner Darstellung
 vorliegender Eingabe-Files nach Energiegruppen

Durch- Eingabesätze eines Eingabe-Files werden soweit Platz vorhanden
führung: in den Arbeitsspeicher gelesen und beim Ausschreiben auf den
 geordneten Eingabe-File nach Gruppen geordnet. Beim erneuten
 Ausschreiben des Arbeitsspeichers mit weiteren Eingabesätzen
 auf den Hilfsfile werden die Eingabesätze in den bereits
 geordneten Eingabe-File einsortiert. Der Vorgang wird mit
 wechselnden Files wiederholt, bis alle Eingabe-Files
 abgearbeitet sind. Falls notwendig, wird zum Abschluß der
 Hilfsfile auf den geordneten Eingabe-File kopiert.

Hinweis: Der Programmzweig arbeitet umso effektiver, je größer der
 Arbeitsspeicher ist.

K0: 'SORTDAT ' Label R*8

K1: NNT Anzahl Eingabe-Files
 NTH FORTRAN-Einheit Hilfsfile
 NTSORT FORTRAN-Einheit für den geordneten Eingabe-File

S1: für jeden Eingabe-File K2
K2: NT FORTRAN-Einheit Eingabe-File

S2: Für Eingabe der Daten in der GRUBA-Eingabe ist NT=8 zu setzen.
Die Daten folgen im Anschluß an K2, ihr Aufbau ist
unter COPYDAT beschrieben.

*** PRINTSTZ ***

Zweck: Drucken oder Stanzen eines Eingabe-Files, der in maschinen-
interner Darstellung vorliegt.

K0: 'PRINTSTZ' Label R*8

K1: N Anzahl auszugebender Eingabe-Files
 NV1 Verschiebung der Druckausgabe der Überschrift
 NV2 Verschiebung der Druckausgabe der Daten
 um NV1 bzw. NV2 Spalten nach rechts.
 NV1,NV2=0,1,...,8

S1: für jeden auszugebenden Eingabe-File K2

K2: NT FORTRAN-Einheit Eingabe-File
 KSTZ Kennziffer Stanzen
 0 keine Stanzausgabe
 1 Stanzausgabe auf Einheit 7

*** COPYINPT ***

Zweck: Kopieren eines Eingabe-Files in maschineninterner Darstellung.

K0: 'COPYINPT' Label R*8

K1: NTR FORTRAN-Einheit des zu kopierenden Eingabe-Files
 NTW FORTRAN-Einheit für den kopierten Eingabe-File

*** CIFORMAT ***

Zweck: Umwandeln eines Eingabe-Files von maschineninterner Darstellung
in card-image-Format.
Das card-image-Format entspricht dem Aufbau der Eingabesätze
nach FREEFO-Konventionen /13/
(siehe Abschnitt Eingabe-Konventionen).

K0: 'CIFORMAT' Label R*8

K1: NTR FORTRAN-Einheit des Eingabe-Files in
 maschineninterner Darstellung
 NTW FORTRAN-Einheit für den im card-image-Format
 erzeugten Eingabe-File

*** STOTW ***

Zweck: Durchführung der STOTW-Korrektur
STOTW = SCAPT + SFISS + SELSC + SINSK + SN2N + (SN3N)
für einen Eingabe-File unter Berücksichtigung der bereits
auf GRUBA vorhandenen und nicht veränderten Daten.

Durch- Ein Eingabe-File wird zunächst ohne Übertragung der
führung: Eingabesätze für STOTW auf einen Hilfsfile kopiert
(Dadurch wird der Eingabe-File für GRUSEEK als Sekundär-
File zugänglich). Anschließend wird für jeweils eine
Gruppe der Hilfsfile auf den Eingabe-File mit STOTW-Korrektur
übertragen. Mit Hilfe der Routine GRUSEEK mit dem
Eingabe- File als Sekundär-File werden die Daten für
SCAPT, SFISS, SELSC, SINSK, SN2N und ggf. SN3N gelesen,
STOTW gebildet und auf den Eingabe-File mit
STOTW-Korrektur ausgegeben.

K0: 'STOTW ' Label R*8

K1: N Anzahl der zu korrigierenden Eingabe-Files

S1: Für jeden zu korrigierenden Eingabe-File NTE K2

K2: ID Identifikation GRUBA R*8
NTG FORTRAN-Einheit GRUBA-File
NTE FORTRAN-Einheit Eingabe-File
NTH FORTRAN-Einheit Hilfsfile
NTN FORTRAN-Einheit Eingabe-File mit STOTW-Korrektur

*** Leseroutine GRUSEEK ***

Die Leseroutine GRUSEEK dient zum Lesen der zu einer Gruppe, einem Material und einem Datentyp gehörenden Daten. Verweise auf andere Gruppen, andere Materialien oder Datentypen können berücksichtigt werden. Die Reihenfolge der Aufrufe ist beliebig. Durch die Benutzung von drei Puffern für das Einlesen der GRUBA-Records ist auch bei Datenverweisen eine hohe Effektivität von GRUSEEK gewährleistet. Die ursprüngliche Routine wurde erweitert auf das Lesen gesetzter Daten (siehe Aufbau des GRUBA-Files, COPYDAT) sowie um die Möglichkeit, Daten eines Sekundär-Files zu berücksichtigen. Der Sekundär-File hat den gleichen Aufbau wie ein Eingabe-File für GRUMA. Beim Lesen werden zunächst die Daten des GRUBA-Files gelesen, anschließend wird geprüft, ob auf dem Sekundär-File für die gewünschte Gruppe, das Material und den Datentyp Daten vorhanden sind. Gegebenenfalls werden sie gelesen und an das GRUSEEK rufende Programm übertragen. Zur Durchführung wird bei der Initialisierung von GRUSEEK für jeden Eingabesatz des Sekundär-Files ein Wort in der Form IGR*100000+ITYP*1000+IMAT in ein Arbeitsfeld gespeichert, das später beim Lesen zur Überprüfung, ob die gewünschten Daten auf dem Sekundär-File vorhanden sind, benutzt wird. Dabei wird vorausgesetzt, daß IMAT.LT.1000 und ITYP.LT.100 ist. Die Stellung des Sekundär-Files darf nicht durch Lesen des Files außerhalb von GRUSEEK verändert werden!

GRUSEEK steht in der Datei TSO067.PROGRAMM.FORT(GRUSEEK) zur Verfügung.

GRUSEEK besteht aus der Initialisierungsroutine GRB mit den Entries GRBA und GRBE und der Leseroutine DATGRB (Aufruf intern durch GRB) mit den vom Benutzer aufgerufenen Entries DATNAM bzw. DATNR.

1. Initialisierung

- 1.1. CALL GRB (FELD,LMAX,NT, ID,KUBR,NDTM,NGR,&RET1,&RET2)
mit FELD Arbeitsfeld
LMAX Länge Arbeitsfeld vor Aufruf
belegter Platz nach Aufruf
NT Feld für FORTRAN-Einheiten GRUBA-File
und Sekundär-File
NT(1) FORTRAN-Einheit GRUBA-File
falls Sekundär-Eingabe:
NT(2) 'UNIT' Kennwort
NT(3) FORTRAN-Einheit Sekundär-File
ID Identifikation GRUBA-File R*8
KUBR zweiziffriges Kennwort JK
J Kennziffer für die Form der von GRUSEEK
bereitgestellten Daten bei Vorliegen von
Verweisen oder gesetzten Daten
0 Normalform, Auflösung von Verweisen
bzw. Anlieferung von Daten
1 Anlieferung von Eingabesätzen
K Kennziffer für Datenübernahme bei Verweisen
0 keine Übernahme
1 Übernahme
2 Übernahme nur für Gruppenverweise
3 Übernahme nur für Material/Typ-Verweise

NDTM	Datum GRUBA-File
NGR	Anzahl Gruppen
RET1	Nummer des Rücksprungstatements, falls FELD zu klein dimensioniert
RET2	Nummer des Rücksprungstatements, falls ID nicht mit GRUBA-File übereinstimmend

oder

1.2.1. CALL GRBA (FELD,LMAX,NT,ID,KUBR,NDTM,NGR,MST,NTYP,NMAT,
&RET1,&RET2)

mit FELD		
LMAX		
NT		
ID		siehe 1.1.
KUBR		
NDTM		
NGR		
MST		max. Anzahl Intervalle in einer Gruppe
NTYP		Anzahl Typen
NMAT		Anzahl Materialien
RET1		siehe 1.1.
RET2		

1.2.2. CALL GRBE (GR,NST,TYPF,MATF)

mit GR	Gruppengrenzen (siehe phys. Dimensionen)
NST	Anzahl Intervalle pro Gruppe
TYPF	Typnamen R*8
MATF	Materialnamen R*8

1.3. Falls der assoziierten Variablen, die den in GRUSEEK benutzten direct-access-Lesebefehlen zugeordnet ist, ein Speicherplatz des rufenden Programms zugewiesen werden soll, kann das ENTRY ASSVAR aufgerufen werden. Diese Zuweisung kann notwendig werden, um bei Overlay-Struktur bei mehrfachen Initialisierungen die assoziierte Variable in das Rootsegment zu legen. Der Aufruf von ASSVAR muß vor dem Aufruf von GRB bzw. GRBA erfolgen.

CALL ASSVAR (IAS)

mit JAS	Name der Variablen, die als assoziierte Variable benutzt werden soll.
---------	--

2. Lesen Daten

2.1. CALL DATNAM (IGR,MAT,TYP,NVARB,NDAT,DAT,&RET1,&RET2)

oder

2.2. CALL DATNR (IGR,IMAT,ITYP,NVARB,NDAT,DAT,RETURN1,RETURN2)

mit IGR	Nummer der Gruppe der gesuchten Daten
MAT	Materialname R*8
IMAT	Materialindex in MATF
TYP	Typname R*8
ITYP	Typindex in TYFF
NVARB	Verarbeitungskennziffer der Daten
NDAT	Anzahl Daten
DAT	Daten
RET1	Nummer des Rücksprungstatements, falls Daten nicht vorhanden
RET2	Nummer des Rücksprungstatements, falls Gruppe, Material oder Typ falsch

Die nachfolgenden Diagramme sollen verdeutlichen, welche Ergebnisse die Leseroutine DATGRB beim Lesen des GRUBA-Files unter Berücksichtigung von Sekundäreingabe (SekInput in den Diagrammen) anliefert. Dabei soll insbesondere das Programmverhalten beim Auftreten von Verweisen gezeigt werden. Dargestellt werden die Programmabläufe in der Steuerroutine DATGRB und in den von ihr aufgerufenen Routinen DATRD zum Lesen des GRUBA-Files und SEK zum Lesen von Sekundäreingabe.

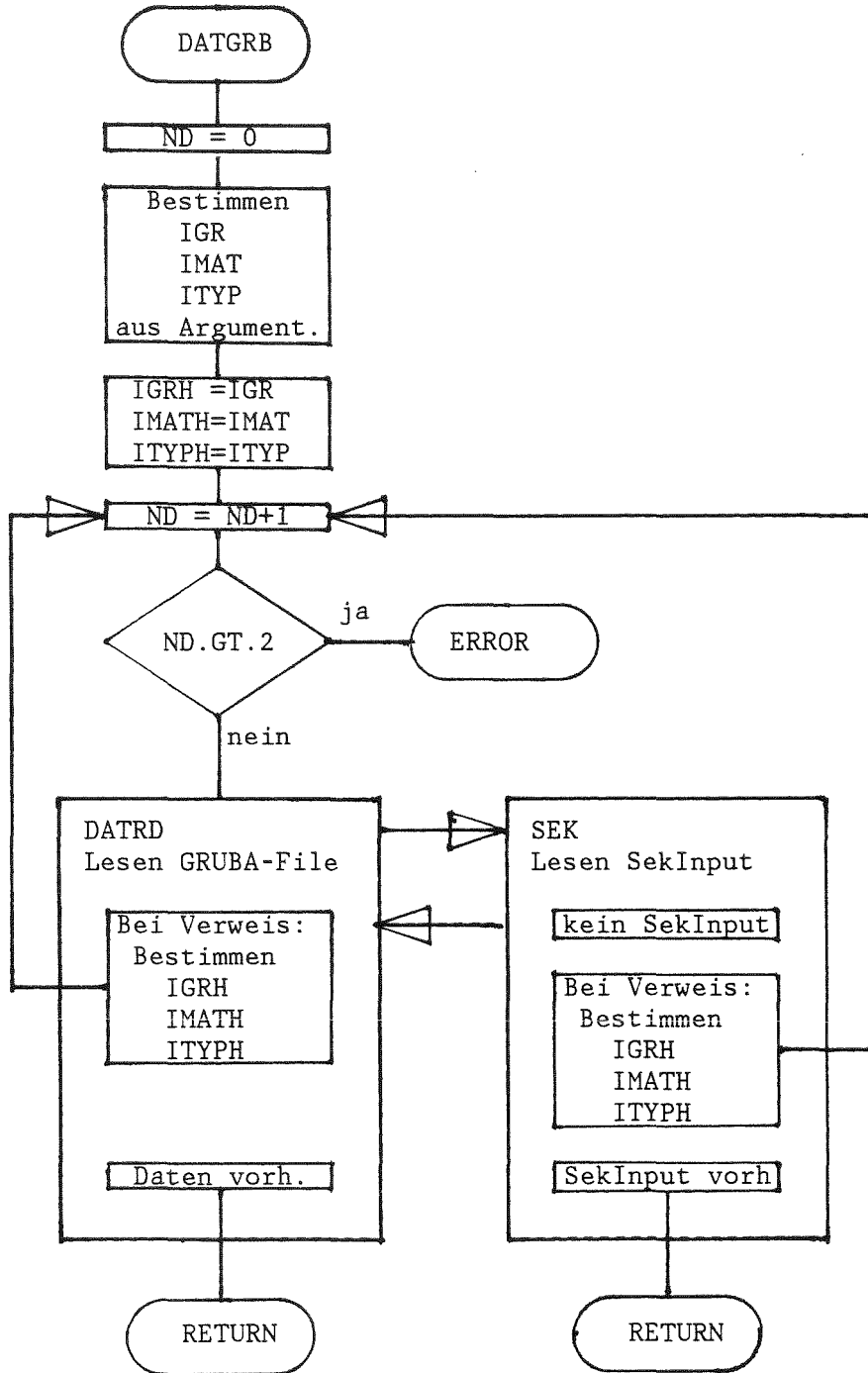


Abb.3. Programm-Logik beim Aufruf der Routine DATGRB zum Lesen der zu einer Gruppe, einem Material und einem Datentyp gehörenden Daten.

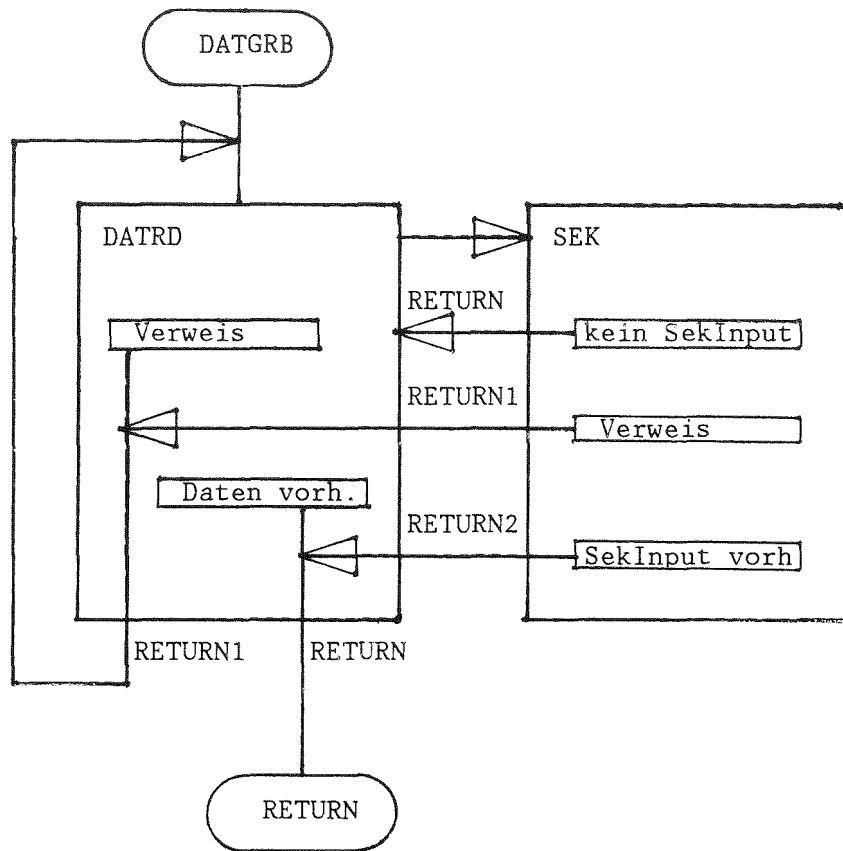


Abb.4. Rücksprung-Schema der von DATGRB aufgerufenen Routinen DATRD und SEK.

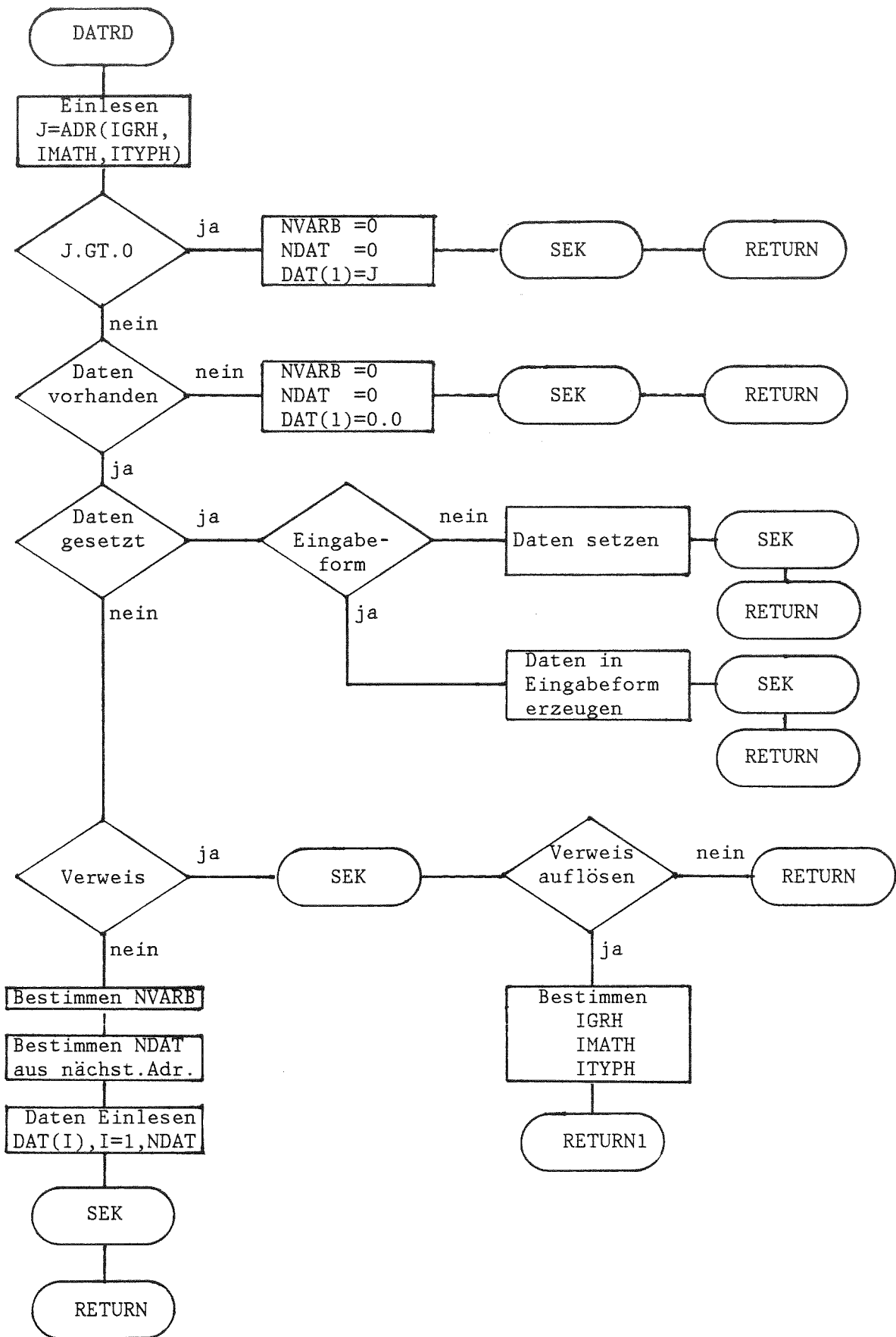


Abb.5. Programmablauf beim Lesen der Daten vom GRUBA-File durch die Routine DATRD.

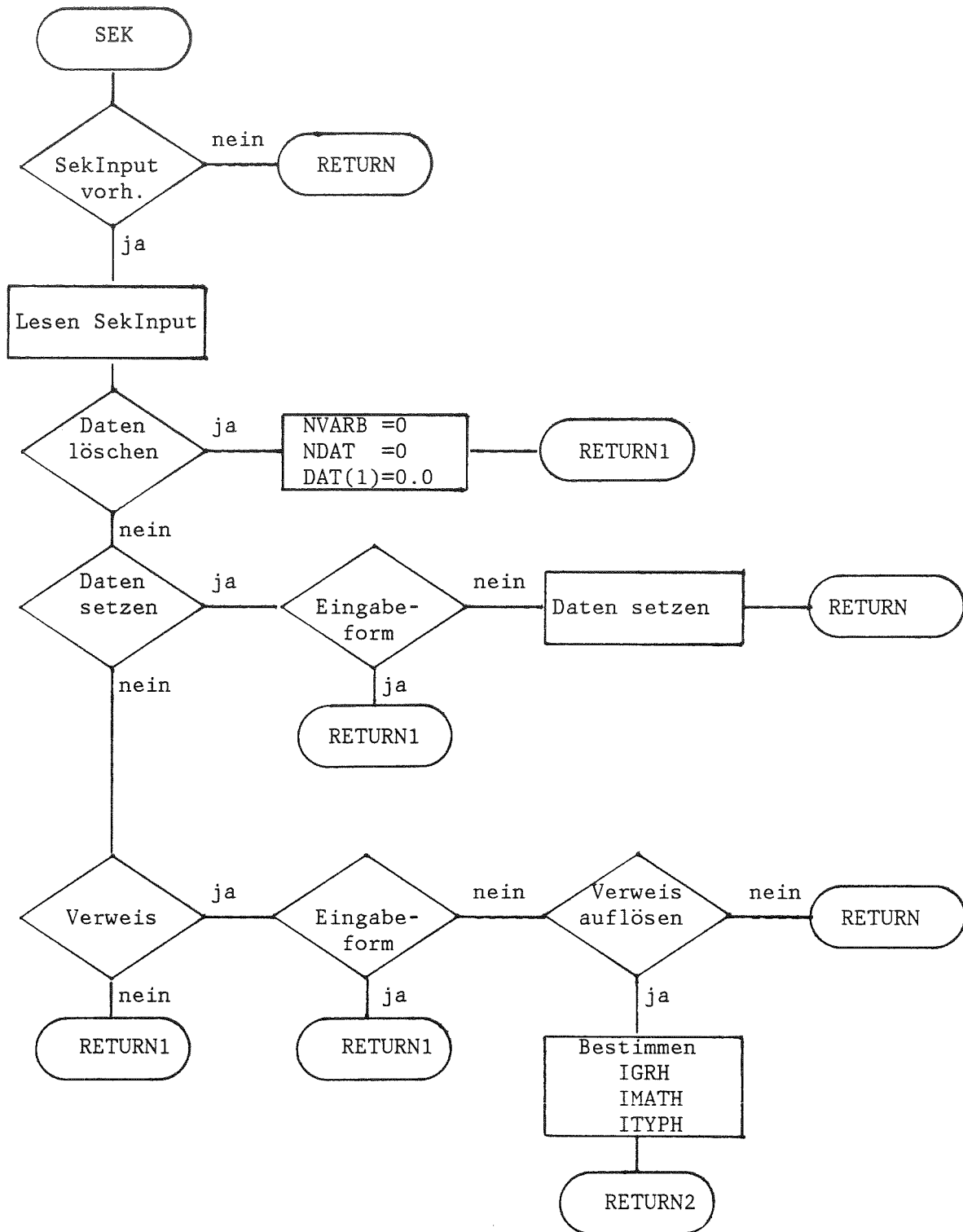


Abb.6. Programmablauf beim Lesen von Sekundäreingabe durch die Routine DATRD.

Der Autor möchte sich bei allen Kolleginnen und Kollegen bedanken, die durch kritische Durchsicht des Manuskriptes zur Verbesserung des vorliegenden Berichtes beigetragen haben. Besonders danken möchte er Herrn C.Broeders, der aufgrund seiner vielfältigen Erfahrungen wertvolle Anregungen zur endgültigen Fassung des Berichtes gegeben hat. Herrn J.Braun gebührt besonderer Dank für seine ständige Mitarbeit bei der Erweiterung, dem Testen und der Pflege der beschriebenen Programme und Dateien.

- /9/ C.H.M.Broeders
Neutronenphysikalische Untersuchungen zu
engen H₂O-moderierten Kernanordnungen.
Tagungsbericht Jahrestagung Kerntechnik 82
Seite 15 1982
- /10/ C.H.M.Broeders
unveröffentlichter Bericht (1982)
- /11/ E.Kiefhaber
unveröffentlichter Bericht
- /12/ D.Woll
The REMO-correction, an approximate calculational method
to improve the elastic-removal group-cross-section for neutrons.
KfK-Bericht in Vorbereitung
- /13/ H.Bachmann
FREEFO - Programmbeschreibung
unveröffentlichter Bericht
- /14/ H.Bachmann, D.Woll
Das Karlsruher Programmsystem KAPROS
Teil Ia
Kurzes KAPROS-Benutzerhandbuch
KfK 2317 Aug 76
- /15/ C.H.M.Broeders, D.Woll
GRDASQ - Programmbeschreibung
unveröffentlichter Bericht

Beispiele

1. Erstellung eines GRUBA-Files

1.1. Eröffnen eines GRUBA-Files und Aufnehmen von Daten

```
//INR067A1 JOB (0067,107,P6M2G),WOLL
// EXEC FHG,LIB=NUSYS,NAME=GRUMA
//G.FT01F001 DD UNIT=SYSDA,DCB=(LRECL=1688,BLKSIZE=1688,RECFM=F),
// SPACE=(1688,12)
//G.FT02F001 DD UNIT=DISK,VOL=SER=BAT00C,DSN=INR067.KSDA.TEST,
// SPACE=(1688,16),DCB=(LRECL=1688,BLKSIZE=1688,RECFM=F),
// DISP=(NEW,CATLG)
//G.FT03F001 DD DSN=INR067.TEST.DATEN,DISP=SHR
//G.FT08F001 DD UNIT=SYSDA
//G.SYSIN DD *
'GRUMA '
'OPEN '
1 12
'BEISPIEL' 4 0 14 5 0 0
1.05E7 1.0E5 4.65+3 1.0E2
0 0 0 0
'NUE ' 'SCAPT ' 'FCAPT ' 'SFISS ' 'FFISS ' 'SELSC '
'FELSC ' 'SINSC ' 'POIIK ' 'SN2N ' 'POEIK ' 'STOTW '
'FTOT ' 'CHI '
'U 235 ' 'U 238 ' 'PU239 '
'FE ' 'CR '
'COPYDAT '
1 2 16 0
3
'PRINTDAT'
'BEISPIEL' 2 0 0
0 0
1
' ' 1
' ' 0 0
'ENDGRUMA'
/*
//
```

1.2. Erweitern eines vorhandenen GRUBA-Files

```
//INR067A2 JOB (0067,107,P6M2G),WOLL
// EXEC FHG,LIB=NUSYS,NAME=GRUMA
//G.FT01F001 DD DSN=INR067.KSDA.TEST,DISP=SHR
//G.FT02F001 DD UNIT=SYSDA,DCB=(LRECL=1688,BLKSIZE=1688,RECFM=F),
// SPACE=(1688,16)
//G.FT03F001 DD DSN=INR067.TEST.NA,DISP=SHR
//G.FT08F001 DD UNIT=SYSDA
//G.SYSIN DD *
'GRUMA '
'COPYDCLR'
1 2 16
'MAT ' 'GENER ' 'NA ' ' ' '
'END ' ' ' ' ' '
'CONTENTS'
1
'COPYDAT '
2 1 16 0
3
'ENDGRUMA'
/*
//
```

2. Ausdrucken einer History

Inhaltsangabe der Daten eines GRUBA-Files

```
//INR067B JOB (0067,107,P6M2G),WOLL
// EXEC FHG,LIB=NUSYS,NAME=GRUMA
//G.FT01F001 DD DSN=INR909.KSDA.GR208,DISP=SHR
//G.FT08F001 DD UNIT=SYSDA
//G.SYSIN DD *
'GRUMA '
'HISTORY '
1
'GRBCNT '
1
'BEREICH ' 1 196
'BEREICH ' 197 208
'BEREICH ' 0 0
'VERWEISE'
'GRUPPE ' 1 1
'ENDGRUMA'
/*
//
```

Abb.7 zeigt den Ausdruck der History des 208-Gruppen-Gruba-Files, Abb.8 bis Abb.13 geben die Inhaltsangabe der Daten des 208-Gruppen-GRUBA-Files und die in Gruppe 1 auftretenden Verweise wieder. Zum Verständnis sei angemerkt, daß die ersten 196 Energiegruppen des 208-Gruppen-Files durch Unterteilung der ersten 14 Energiegruppen des 26-Gruppen-Files in jeweils 14 Untergruppen entstanden sind, für die Gruppen 197 bis 208 wurde die Energieeinteilung der Gruppen 15 bis 26 des 26-Gruppen-Files übernommen.

```

*****
G R U M A
*****
VERSION 10481
DATE 150384
AREA 215039 WORDS

```

HISTORY OF THIS GRUBA-FILE WITH 208 GROUPS

USER	DATE	RUN	IDENT	FILEDATE	NTYP	NMAT	LENGTH	WRITTEN VOL	GRUBA-FILE DSNAME	DISP
								READ-IN VOL	GRUBA-FILE DSNAME	DISP
								READ-IN VOL	DATA-FILE DSNAME	DISP
INR672G2	05.11.76	COPYDAT	200GR	110675	25	41	2791	NUSYS0	KSDA.G200DA1	OLD KEEP
								GFK030	KSDA.G200DA1	SHR KEEP
								CARD		
INR672G2	24.05.77	COPYDAT	200GR	110675	25	41	2791	GFK030	KSDA.G200DA2	OLD KEEP
								NUSYS0	KSDA.G200DA1	SHR KEEP
								CARD		
INR672MN	24.05.77	COPYDCLR	200GR	240577	25	42	2791	SCRDIG		OLD PASS
								GFK030	KSDA.G200DA2	SHR KEEP
INR672MN	24.05.77	COPYDAT	200GR	240577	25	42	2887	GFK030	KSDA.G200DA2	SHR KEEP
								SCRDIG		OLD PASS
INR672G3	24.05.77	COPYDAT	200GR	240577	25	42	3015	SCRDID	SYS77144.T050107.RV000.INR672MN.	OLD PASS
								GFK030	KSDA.G200DA2	SHR KEEP
								TSTLIB	GRUMA.INR487.N208TC	
INR672G3	24.05.77	COPYDAT	200GR	240577	25	42	3015	GFK030	KSDA.G200DA2	SHR KEEP
								SCRDID		OLD PASS
								TSTLIB	GRUMA INP. INR672. GR208. PONIK. POI I	
INR487CG	13.10.77	COPYDAT	200GR	131077	25	42	2950	TSTLB2	KSDA. INR487. G200DA3	OLD KEEP
								GFK030	KSDA. G200DA2	SHR KEEP
								TSTLIB	GRUMA. INR487. MNFEN I PU	
INR487CG	16.11.77	COPYDAT	200GR	161177	25	42	2950	TSTLB2	KSDA. INR487. G200DA4	OLD KEEP
								TSTLB2	KSDA. INR487. G200DA3	SHR KEEP
								TSTLIB	GRUMA. INR487. CRFR9	
INR487CG	04.12.77	COPYDAT	200GR	41277	25	42	2969	GFK082	KSDA. G200DA5	OLD KEEP
								GFK082	KSDA. G200DA4	SHR KEEP
								GFK082	GRUCAL. SEC INPT. C	
INR487CG	05.03.78	COPYDAT	200GR	50378	25	42	2999	GFK082	KSDA. GRST208	OLD KEEP
								GFK082	KSDA. G200DA5	SHR KEEP
								GFK082	GRUMA. U238. MATRS	
INR487CG	10.06.78	COPYDAT	200GR	100678	25	42	3000	GFK039	KSDA. G208NEW	OLD KEEP
								GFK039	KSDA. GRST208	SHR KEEP
								GFK039	SEC INPT. FECRMON I	

40

Abb.7 History des 208-Gruppen-GRUBA-Files

	* EINE *		* GRUPPENBEREICH *					
	* GRUPPE *		* VOLLSTAENDIG *			* NICHT VOLLSTAENDIG *		
			* NICHT *	* NICHT *		* NICHT *	* NICHT *	
			* GEMISCHT *	* GEMISCHT *		* GEMISCHT *	* GEMISCHT *	
DATEN NICHT VORHANDEN	*	*	*	*	*	*	*	*
DATEN GESETZT	*	1	*	1	*	+	*	0
VERWEIS ANDERE GRUPPE	*	G	*	G	*	+	*	H
VERWEIS ANDERES MATERIAL	*	M	*	M	*	+	*	N
VERWEIS ANDEREN TYP	*	T	*	T	*	+	*	S
DATEN VORHANDEN	*	*	*	*	*	+	*	.

Abb.8 Erklärung der in den nachfolgenden Tabellen benutzten Symbole

GRUBA GR208 VOM 100678 MIT 208 GRUPPEN
GRUPPEN 1 BIS 196

ISOTOP	T	N	S	S	S	S	S	M	S	S	S	S	C	F	F	F	F	F	P	P	P	P	F	1	
	Y	U	F	C	I	E	T	N	U	T	T	B	B	H	F	C	E	T	T	T	O	1	0	0	E
	P	E	I	A	N	L	O	2	E	R	O	E	E	I	I	A	L	O	R	O	E	E	I	N	L
		S	P	S	S	T	N	L	T	H	H	S	P	S	T	T	I	I	I	I	I	S	S	S	S
		S	T	C	C				W	O	1	S	T	C					1	K	K	K	K	1	
AL			*	*	*	*	*	*	*		*								*	*					T
B 10		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
B 11		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
BE		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
BI		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
C			*	*	*	*		*	*										*	*					T
CA		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
CL		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
CR			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
D																			*	*					T
EU		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
FE			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
GD		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
H			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
HE 4					*	*	*	*	*	*									*	*					T
HF		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
K		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
LI 6		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
MG		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
MO			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
N		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
NA			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
NB		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
NI			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
O			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T
PB		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
PU239		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*	+	+	+				*	*					T
PU240		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*	+	+	+	+			*						T
PU241		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*	*	*	*	*			*						T
PU242		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*	*	*	*	*			*						T
SI		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
SPP 9		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
TA		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
TH232		*	*	*	*	*	*	*	*	*			+	+	+	+	+		*						T
TI		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
U 233		*	*	*	*	*	*	*	*	*			+	+	+	+	+		*						T
U 235		*	*	*	*	*	*	*	*	*			+	+	+				*	*				*	T
U 236		*	*	*	*	*	*	*	*	*			+	+	+	+	+		*						T
U 238		*	*	*	*	*	*	*	*	*			+	+	+				*	*				+	T
V		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
ZR		*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+		*						T
MN			*	*	*	*	*	*	*	*									*	*					T

Abb.9 Inhaltsangabe für die Gruppen 1 bis 196

GRUBA GR208 VOM 100678 MIT 208 GRUPPEN
GRUPPEN 197 BIS 208

ISOTOP	T	N	S	S	S	S	S	M	S	S	S	S	C	F	F	F	F	F	P	P	P	P	F	1	
	Y	U	F	C	I	E	T	N	U	T	T	B	B	H	F	C	E	T	T	T	O	1	0	0	E
	P	E	I	A	N	L	O	2	E	R	O	E	E	I	I	A	L	O	R	O	E	E	I	N	L
		S	P	S	S	T	N	L	T	H	H	S	P	S	T	T	I	I	I	I	S	S	S	S	S
		S	T	C	C				W	O	1	S	T	C					1	K	K	K	K	1	
AL		*	*	*	*	*	*		*	*		*		*	*	*	*								T
B 10		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
B 11		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
BE		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
BI		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
C		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
CA		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
CL		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
CR		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
D		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
EU		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
FE		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
GD		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
H		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
HE 4		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
HF		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
K		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
LI 6		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
MG		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
MO		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
N		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
NA		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
NB		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
NI		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
O		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
PB		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
PU239		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
PU240		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
PU241		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
PU242		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
SI		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
SPP 9		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
TA		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
TH232		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
TI		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
U 233		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
U 235		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
U 236		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
U 238		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
V		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
ZR		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T
MN		*	*	*	*	*	*	*	*	*		*		*	*	*	*								T

Abb.10 Inhaltsangabe für die Gruppen 196 bis 208

GRUBA GR208 VOM 100678 MIT 208 GRUPPEN
GRUPPEN 1 BIS 208

ISOTOP	T	N	S	S	S	S	S	S	M	S	S	S	S	C	F	F	F	F	F	P	P	P	P	F	1	
	Y	U	F	C	I	E	T	N	U	T	T	B	B	H	F	C	E	T	T	T	O	1	0	0	E	/
	P	E	I	A	N	L	O	2	E	R	O	E	E	I	I	A	L	O	R	O	E	E	I	N	L	V
		S	P	S	S	T	N	L	T	H	H	S	P	S	T	T	I	I	I	I	I	I	I	I	S	
		S	T	C	C				W	O	1	S	T	C						1	K	K	K	K	1	
AL		.	.	*	*	*	.	.	.	*				*	T	
B 10		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	T	
B 11		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	T	
BE		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	T	
BI		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	T	
C		.	.	*	*	*	.	.	*	.	*				T	
CA		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	T	
CL		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
CR		.	.	*	*	*	*				T	
D		T	
EU		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
FE		.	.	*	*	*	.	.	*	.	*				T	
GD		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
H		.	.	*	.	*	*				T	
HE 4		*	*				T	
HF		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
K		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
LI 6		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
MG		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
MO		.	.	*	*	*	*				T	
N		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
NA		.	.	*	*	*	.	.	*	.	*				T	
NB		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
NI		.	.	*	*	*	*				T	
O		.	.	*	*	*	.	.	*	.	*				T	
PB		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	T	
PU239		*	*	*	*	*	.	.	*	.	*			*	+	+	+	T	
PU240		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	+	+	+	+	T	
PU241		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*	*	T	
PU242		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*	*	T	
SI		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
SPP 9		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
TA		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
TH232		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	+	T	
TI		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
U 233		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	+	T	
U 235		*	*	*	*	*	.	.	*	.	*				+	+	+	T	*
U 236		*	*	*	*	*	*	*	*	*	*				+	+	+	+	+	T	
U 238		*	*	*	*	*	.	.	*	.	*				+	+	+	T	
V		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
ZR		*	*	*	*	*	*	.	*	*	*				+	+	+	+	T	
MN		.	.	*	*	*	.	.	*	.	*				T	

Abb.11 Inhaltsangabe für die Gruppen 1 bis 208

VERWEISE:

FUER DATEN, FUER DIE EIN VERWEIS EXISTIERT, WIRD JEWEILS IN DEN ERSTEN DREI WORTEN
GRUPPENNUMMER MATERIALNAME TYPNAME
ANGEGEBEN, IN DEN NACHFOLGENDEN DREI WORTEN
NUMMER DER GRUPPE ODER NAME DES MATERIALS ODER NAME DES TYPS,
AUF DEN VERWIESEN WIRD

1	AL	PONIK	POIIK
1	B	10	PONIK	...	POIIK
1	B	11	PONIK	...	POIIK
1	BE	PONIK	POIIK
1	BI	PONIK	POIIK
1	C	PONIK	POIIK
1	CA	PONIK	POIIK
1	CL	PONIK	POIIK
1	CR	PONIK	POIIK
1	D	PONIK	POIIK
1	EU	PONIK	POIIK
1	FE	PONIK	POIIK
1	GD	PONIK	POIIK
1	H	PONIK	POIIK
1	HE	4	PONIK	...	POIIK
1	HF	PONIK	POIIK
1	K	PONIK	POIIK
1	LI	6	PONIK	...	POIIK
1	MG	PONIK	POIIK
1	MO	PONIK	POIIK
1	N	PONIK	POIIK
1	NA	PONIK	POIIK
1	NB	PONIK	POIIK
1	NI	PONIK	POIIK
1	O	PONIK	POIIK
1	PB	PONIK	POIIK
1	PU239	PONIK	POIIK
1	PU240	PONIK	POIIK
1	PU241	PONIK	POIIK
1	PU242	PONIK	POIIK
1	SI	PONIK	POIIK
1	SPP	9	PONIK	...	POIIK
1	TA	PONIK	POIIK
1	TH232	PONIK	POIIK
1	TI	PONIK	POIIK
1	U	233	PONIK	...	POIIK
1	U	235	PONIK	...	POIIK
1	U	236	PONIK	...	POIIK
1	V	PONIK	POIIK
1	ZR	PONIK	POIIK
1	MN	PONIK	POIIK

Abb.12 In Gruppe 1 des 208-Gruppen-GRUBA-Files auftretende Verweise

GRUBA GR208 VOM 100678 MIT 208 GRUPPEN
GRUPPE 1

ISOTOP	T	N	S	S	S	S	S	M	S	S	S	S	C	F	F	F	F	F	F	P	P	P	P	F	1	
	Y	U	F	C	I	E	T	N	U	T	B	B	H	F	C	E	T	T	T	O	1	0	0	E	/	
	P	E	I	A	N	L	O	2	E	R	O	E	E	I	I	A	L	O	R	O	E	E	I	N	L	V
		S	P	S	S	T	N	L	T	H	H	S	P	S	T	T	I	I	I	I	I	I	S	S		
ISOTOP		S	T	C	C				W	O	1	S	T	C					1	K	K	K	K	1		
AL			*	*	*		*	*	*		*									*	*	*	T			
B 10		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
B 11		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
BE		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
BI		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
C				*	*	*		*	*											*	*	*	T			
CA		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
CL		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
CR				*	*	*		*	*	*										*	*	*	T			
D																				*	*	*	T			
EU		*	*	*	*	*	*		*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
FE				*	*	*		*	*											*	*	*	T			
GD		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
H				*		*		*	*														T			
HE 4						*		*	*											*	*		T			
HF		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
K		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
LI 6		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
MG		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
MO				*	*	*		*	*											*	*	*	T			
N		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
NA				*	*	*		*	*											*	*	*	T			
NB		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
NI				*	*	*		*	*											*	*	*	T			
O				*	*	*		*	*											*	*	*	T			
PB		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
PU239		*	*	*	*	*	*	*	*	*			*	*	*	*				*	*	*	T			
PU240		*	*	*	*	*	*	*	*	*			*	*	*	*				*	*	*	T			
PU241		*	*	*	*	*	*	*	*	*			*	*	*	*				*	*	*	T			
PU242		*	*	*	*	*	*	*	*	*			*	*	*	*				*	*	*	T			
SI		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
SPP 9		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
TA		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
TH232		*	*	*	*	*	*	*	*	*			*	*	*	*				*	*	*	T			
TI		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
U 233		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
U 235		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T		*	
U 236		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
U 238		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
V		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
ZR		*	*	*	*	*	*	*	*	*				*	*	*	*			*	*	*	T			
MN				*	*	*		*	*											*	*	*	T			

Abb.13 Inhaltsangabe für die Gruppe 1