

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

Juni 1975

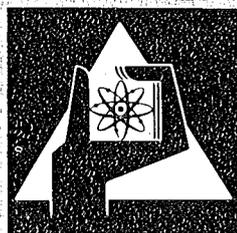
KFK 2108

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

GRUCAL

Ein Programmsystem zur Berechnung
makroskopischer Gruppenkonstanten

D. Woll



**GESELLSCHAFT
FÜR
KERNFORSCHUNG M.B.H.**

KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

KFK 2108

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Projekt Schneller Brüter

GRUCAL

Ein Programmsystem zur Berechnung
makroskopischer Gruppenkonstanten

von

D. Woll

Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe

Zusammenfassung

Für Reaktorberechnungen werden zur Beschreibung der Wechselwirkungen von Neutronen und Isotopen material- und mischungsabhängige energiegemittelte neutronenphysikalische Daten benötigt.

Das Mehrgruppenquerschnittsprogramm GRUCAL berechnet für vorgegebene Materialmischungen diese makroskopischen Gruppenkonstanten aus den materialabhängigen Daten der Gruppenkonstantendatei GRUBA.

Die Vorschriften zur Berechnung der Gruppenkonstanten sind nicht starr im Programm festgelegt, sondern werden von einem Steuerfile gelesen. Dadurch kann GRUCAL leicht an unterschiedliche Problemstellungen oder verschiedenartige Gruppenkonstanten-Konzepte angepaßt werden.

Abstract

GRUCAL, a computer program for calculating macroscopic group constants

Nuclear reactor calculations require material- and composition-dependent, energy averaged nuclear data to describe the interaction of neutrons with individual isotopes in material compositions of reactor zones. The code GRUCAL calculates these macroscopic group constants for given compositions from the material-dependent data of the group constant library GRUBA.

The instructions for calculating group constants are not fixed in the program, but will be read at the actual execution time from a separate instruction file. This allows to accommodate GRUCAL to various problems or different group constant concepts.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einführung	8
2. Benutzung des Programmsystems GRUCAL	11
3. Variable Berechnung makroskopischer abgeschirmter Wirkungsquerschnitte mit Hilfe des Steuerfiles.	25
3.1 Übersicht über die in GRUCAL vorhandenen Formeln	26
3.2 Angaben im Steuerfile	26
3.3 Beispiel für einen Steuerfile	34
3.4 Aufbau des Steuerfiles	36
3.5 Aufnahme des Steuerfiles	39
3.6 Berechnungsvorschriften für 26-, 208- und 275-Gruppen-Rechnungen	39
4. Zusammenfassung von Materialnamen in Gruppensatztabellen	47
4.1 Auswahl des gruppensatzabhängigen Materialnamens	47
4.2 Übernehmen von CHI und 1/V	48
4.3 Aufbau der Gruppensatztabelle	48
4.4 Erstellen der Gruppensatztabelle	48
5. Berechnung der Resonanzselbstabschirmungsfaktoren	49
5.1 Energieinterpolation	49
5.2 σ_0 -Interpolation	50
5.3 Temperaturinterpolation	52
6. REM ϕ -Verfahren	55
6.1 Berechnung der elastischen Ausstreuung nach dem REM ϕ -Verfahren	55
6.2 Festlegung von Materialien und Gruppen, für die REM ϕ -Korrektur durchgeführt wird.	56
6.3 REM ϕ -GRUBA-File	57
6.4 Aufbau der zur Wichtung benutzten Stoßdichte	57

	Seite
7. Berechnung des Spaltspektrums CHI einer Materialmischung	58
7.1 Wichtung des materialabhängigen Spaltspektrums	58
7.2 Verbesserung des Spaltspektrums	59
7.2.1 Aufbau der zur Wichtung benötigten Datei mit Flüssen	59
8. Sekundäreingabe	60
8.1 Aufbau der Sekundärfiles	60
9. Jobstatistik und GRUCAL-News	61
9.1 Arbeitsweise der Jobstatistik	61
9.2 GRUCAL-News	61
9.3 Aufbau des Jobstatistikfiles	61
10. Ablauf der Querschnittsberechnung	63
10.1 Arbeitsspeicher	63
10.1.1 Programmlänge und Größe des Arbeitsspeichers	63
10.1.2 Organisationsspeicher und wichtige Variable	65
10.1.3 Arbeitsfeld für Querschnittsberechnung	65
10.2 Aufbereiten der Eingabe	67
10.3 Berechnung der Querschnitte	68
10.3.1 Bereitstellen mikroskopischer Daten für eine Gruppe	68
10.3.2 Berechnung makroskopischer Querschnitte in einer Gruppe	68
10.3.2.1 Berechnung mischungsabhängiger Konstanten	70
10.3.2.2 Berechnung makroskopischer material- abhängiger Daten	70
10.3.2.3 Berechnung auswertabhängiger Daten	70
10.3.3 Zusammenstellen Gruppenblock	71
10.4 Erstellen SIGMN-File und Drucken makroskopischer Querschnitte	71

	Seite
11. Erweiterung von GRUCAL um neue Querschnittstypen	72
11.1 Erweiterung des Steuerfiles	72
11.2 Einbringen neuer Formeln in GRUCAL	72
11.3 Testhilfen	74
11.3.1 Inhalt des COMMON-Speichers /GRØUC /	74
11.3.2 Angabe der behandelten Gruppe	74
11.3.3 Testangaben für Ablauf der Querschnitts- berechnung in einer Gruppe	74
12. Aufbau des SIGMN-Files /2/	74a
12.1 Label-Satz	74a
12.2 Erklärungsteil	74b
12.3 Gruppenteile	74b
12.4 Aufbau der Vektortypen	74c
12.4.1 Vektortypen für Streuung	74c
12.4.2 Vektortyp für Energieangaben	74d

Listen

	Seite
1 Eingabebeschreibung	12
2 In GRUCAL enthaltene Formeln	27
3 Steuerfile für 208-Gruppen	40
4 Berechnungsvorschriften für 208-Gruppen-Rechnungen	42
5 Aufnahmeprogramm für Steuerfile	75
6 Aufnahmeprogramm für Gruppensatztabelle	77
7 Unterprogramm IMIWQ	79
8 Bedeutung der in GRUCAL benutzten Variablen und Pointer im COMMON-Speicher /GRUC/	82
9 In GRUCAL benutzte Unterprogramme	87
10 Programmstruktur von GRUCAL	94
11 Overlay-Struktur von GRUCAL	96

Abbildungen

1 Belegung des Arbeitsfeldes mit Daten	66
2 Strukturdiagramm GRUCAL	64
3 Strukturdiagramm Querschnittsberechnung	69

Literatur

- /1/ D. Woll
Aufbau und Verwaltung der Gruppenkonstantenbibliothek GRUBA
KFK 1815 , Mai 1973
- /2/ H. Bachmann, D. Sanitz
Definition, Speicherung und Verarbeitung makroskopischer Gruppen-
konstanten in SIGMN-Struktur.
Persönliche Mitteilung, Sept. 1970
- /3/ B. Krieg
Handling and Service Programs for the Karlsruhe Nuclear Data
File KEDAK.
KFK 1725, Juni 1973
- /4/ H. Huschke, D. Woll
GRUCAL, ein Verfahren zur Berechnung von makroskopischen Gruppen-
konstanten, Teil I: Methoden für ein Vielgruppenkonzept.
Persönliche Mitteilung, Nov. 1971
- /5/ H. Huschke
Verzeichnis der mikroskopischen und der makroskopischen Gruppen-
konstanten für wenig Gruppen.
Persönliche Mitteilung, Juli 1973
- /6/ J.L. de Francisco-Sainz
Interpolationsformeln für die Temperaturabhängigkeit der Resonanz-
selbstabschirmungsfaktoren.
Persönliche Mitteilung, April 1973
- /7/ E. Kiefhaber, K. Ott
Interpolationsformeln für Selbstabschirmungsfaktoren
KFK 384, Dezember 1965
- /8/ H. Huschke
Gruppenkonstanten für dampf- und natriumgekühlte schnelle Reaktoren
in einer 26-Gruppendarstellung.
KFK 770, April 1968

1. Einführung

Bei nuklearen Reaktorberechnungen werden Daten benötigt, die Wechselwirkungen von Neutronen verschiedener Energien mit einzelnen Materialien oder Materialmischungen beschreiben.

Die Wechselwirkungsprozesse wie Spaltung oder Streuung von Neutronen mit Isotopen oder Elementen werden durch Neutronenwirkungsquerschnitte beschrieben, die auf besonderen Files wie KEDAK /3/ zur Verfügung stehen. Wegen der großen Datenmengen ist eine direkte Benutzung dieser Files meist zu aufwendig, daher werden für Einzelmaterialien, d.h. Isotope oder Elemente mikroskopische Gruppenkonstanten als Mittelwerte über Energiebereiche (Gruppen oder Intervalle) gebildet und auf Dateien wie GRUBA /1/ gespeichert.

Die bei Reaktorberechnungen erforderlichen makroskopischen Gruppenkonstanten für Materialmischungen werden aus den mikroskopischen Daten der Einzelmaterialien berechnet.

Bedingt durch den Resonanzverlauf vieler Neutronenwirkungsquerschnitte muß die gegenseitige Beeinflussung der einzelnen Materialien der Mischungen beachtet werden. Dieser Effekt wird in den Resonanzselbstabschirmungsfaktoren, die von der jeweils betrachteten Materialmischung abhängen, berücksichtigt /8/.

Das Mehrgruppenquerschnittsprogramm GRUCAL dient zur Berechnung makroskopischer Gruppenkonstanten unter Benutzung der Gruppenkonstantendatei GRUBA /1/.

GRUCAL erlaubt die Berechnung material-, mischungs- und von Materialsummen abhängiger makroskopischer Wirkungsquerschnitte sowie materialabhängiger mikroskopischer abgeschirmter Querschnitte für eine Reihe vom Benutzer vorgegebener Querschnittstypen.

Mikroskopische Ausgangsdaten können gruppenabhängige Daten sein oder, bei einer feineren Einteilung der Gruppen in Intervalle, intervallabhängige Daten. Sekundäreingabe ermöglicht das Ersetzen der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte des GRUBA-Files durch benutzereigene Daten.

Die Resonanzselbstabschirmung wird durch den Abschirmfaktor berücksichtigt oder, bei intervallabhängigen Daten, durch Wichtung der Intervalldaten mit dem totalen Querschnitt der jeweiligen Mischung.

Die elastischen Ausstreuquerschnitte können nach dem REMO-Verfahren [18/ Kap. 3.5] unter Benutzung von intervallabhängigen Daten und einem geeigneten Wichtungsspektrum korrigiert werden.

Das materialabhängige Spaltspektrum kann mit den zugehörigen Spaltraten gewichtet werden, die z.B. als Ergebnis nulldimensionaler Berechnungen für den Neutronenfluß ermittelt wurden.

Die Ausgabe der Querschnitte erfolgt in SIGMN-Struktur [2/], die Druckausgabe ist über Eingabe weitgehend zu steuern.

Die Art der Berechnung der einzelnen Querschnittstypen ist im Programm nicht starr festgelegt, sondern in einem Steuerfile ist angegeben, welche Querschnittstypen berechnet werden sollen und welche der in GRUCAL enthaltenen Formeln dafür verwendet werden sollen. Für Standardrechnungen stehen entsprechende Steuerfiles zur Verfügung.

Für die Verwendung einer bestimmten Formel können im Steuerfile Bedingungen gestellt werden, z.B. für die Anzahl der zur Berechnung benutzten Daten. Dadurch ist es möglich, denselben Querschnittstyp material- und gruppenabhängig auf verschiedene Arten zu berechnen, z.B. abhängig davon, ob ein Gruppenmittelwert oder ob intervallabhängige Daten auf GRUBA enthalten sind. Dies ermöglicht sowohl die Benutzung von GRUBA-Dateien, bei denen sich die Darstellungsart der Daten material- und gruppenabhängig ändert, als auch die Benutzung von Dateien mit verschiedenem Inhalt.

Die Speicheraufteilung in GRUCAL ist voll dynamisch, der Umfang der Rechnungen wird nur durch den zur Verfügung stehenden Kernspeicher begrenzt. Als Arbeitsspeicher wird GRUCAL der gesamte, in der Region nicht benötigte Speicherplatz zur Verfügung gestellt.

Die Eingabe ist in Blockform unter Verwendung von im allgemeinen selbsterklärenden Kennworten aufgebaut. Eingabeblocke für nicht benötigte Programmvarianten können weggelassen werden. Eine Gruppensatztabelle erleichtert durch Zusammenfassung mehrerer Materialien zu Gruppensätzen mit vereinfachter Schreibweise der Materialnamen die Eingabe.

Auf einem Jobstatistikfile werden Angaben über Umfang und Ablauf der GRUCAL-Rechnungen sowie über die Benutzung der verschiedenen GRUBA-Files festgehalten.

Die Einführung neuer Querschnittstypen ist in den meisten Fällen über eine Erweiterung des Steuerfiles möglich. Falls notwendig kann in GRUCAL

leicht eine Erweiterung um neue Formeln durchgeführt werden. Eine fest einprogrammierte Testhilfe erleichtert das Testen von neuen Formeln und neuen Steuerfiles.

Bei einer Querschnittsberechnung mit GRUCAL wird zunächst die Eingabe aufbereitet und in Form von Kennziffern im Organisationsspeicher gespeichert, d.h. es wird festgestellt, welche Querschnittstypen berechnet werden sollen und ob sie mischungsabhängig, materialabhängig oder als Summe über Einzelmaterialien verlangt werden, welche Querschnittstypen zur Berechnung benutzt werden und für welche Materialien und Querschnittstypen mikroskopische Daten von GRUBA benötigt werden. Die nachfolgende Berechnung wird gruppenweise durchgeführt.

Für jede Gruppe werden die mikroskopischen Daten vom GRUBA-File und gegebenenfalls die Sekundärdaten eingelesen.

Für jede Mischung werden nach Berechnung einiger für die Wichtung benötigter mischungsabhängiger Daten für alle Materialien der Mischung alle benötigten Querschnittstypen nach den Angaben des Steuerfiles berechnet. Dabei kann auf bereits berechnete Daten desselben Materials zurückgegriffen werden. Anschließend werden aus diesen Daten die mischungsabhängigen Querschnitte zusammengesetzt. Nach Berechnung aller makroskopischer Daten der Gruppe wird ein Gruppenblock in SIGMN-Struktur erstellt und auf eine Hilfsdatei geschrieben.

Das Programm ist überwiegend in IBM FORTRAN IV geschrieben unter Verwendung einiger kleinerer Assembler Unterprogramme und läuft in Karlsruhe auf der IBM 370-168.

Der vorliegende Bericht enthält in Abschnitt 2 eine Einführung in die Benutzung von GRUCAL, die für die Standardanwendung ausreichend ist. Informationen über die in GRUCAL benutzten Formeln enthalten Abschnitt 3 und 5. Abschnitt 10 ist für Leser gedacht, die den Programmablauf von GRUCAL verstehen und Kenntnisse über die Datenorganisation im Kernspeicher erhalten wollen. Abschnitt 11 schließlich ist nur für den Leser interessant, der an eine Erweiterung des Programms denkt.

2. Die Benutzung des Programmsystems GRUCAL

Durch einen Aufruf von GRUCAL kann eine der folgenden Aufgaben durchgeführt werden:

- a) Berechnung makroskopischer Querschnitte ausgehend von einem GRUBA File mit der gewünschten Gruppenzahl und dazugehörigem Steuerfile
 - b) Ersetzen des Spaltspektrums in einem vorhandenen SIGMN-File
 - c) Drucken der Querschnitte aus einem vorhandenen SIGMN-File
- ferner
- d) Drucken Eingabebeschreibung
 - e) Drucken Steuerfile

Die beiden letzten Aufgaben d) und e) können auch zusammen mit der Berechnung makroskopischer Querschnitte a) durchgeführt werden.

Liste 1 enthält Kurzangaben über das Programm, die Eingabebeschreibung sowie Angaben über die benötigten Dateien. Diese Liste ist, auf dem neuesten Stand gehalten, im Programm gespeichert und kann jederzeit ausgedruckt werden. Die in ihr enthaltenen Angaben sind für die Standardbenutzung von GRUCAL ausreichend.

Hinweise über das REMØ-Verfahren und über die Berechnung des Spaltspektrums werden in Abschnitt 6 und 7 dieses Berichtes gegeben.

```

PROGRAMM      GRUCAL
ZWECK         BERECHNUNG MAKROSKOPISCHER ISOTOP- UND MISCHUNGS-
              ABHAENIGER GRUPPENKONSTANTEN
AUTOR         WOLL / INR TEL. 2447
STAND         08.11.74
BIBLIOTHEK   NUSYS
EINGABE-     ERHAELTLICH DURCH FOLGENDEN JOB
BESCHREIBUNG //   JOBKARTE
              // EXEC FHG,LIB=NUSYS,NAME=GRUCAL
              //

SPEICHERBEDARF DIE GRUCAL ZUR VERFUEGUNG GESTELLTE REGION WIRD ZUM TEIL
                DURCH PROGRAMME UND EIN/AUSGABEPUFFER BELEGT.
                DER VERBLEIBENDE SPEICHERPLATZ WIRD ALS ARBEITSSPEICHER BENUTZT.
                PROGRAMMLAENGE 120 K BYTES
                PUFFERSPEICHER DEFAULT (10+{ANZAHL ZUSATZFILES}*2) K BYTES
                UEBERSCHREIBEN SIEHE S01
                ARBEITSSPEICHER RICHTWERTE
                  WENIG GRUPPEN      20 K BYTES
                  VIEL GRUPPEN      (80+10*ANZ.MAT) K BYTES

DATEIEN       STATISTIKFILE          EINHEIT 9
              INTERNE EINGABEEINHEIT, NORMAL EINHEIT 8

              GRUBAFILE              EINHEIT 1
              STEUERFILE
              GRUPPENSATZTABELLE
              QUERSCHNITTSFILE
              HILFSFILE
              REMOFILE FUER REMC-KORREKTUR

UMFANG        RICHTWERTE FUER QUERSCHNITTS- UND HILFSFILE
              WENIG GRUPPEN      10-20 SPUREN
              VIEL GRUPPEN      50-200 SPUREN

RECHENZEITEN MASSGEBLICH IST DIE GESAMTANZAHL ALLER MAT. ALLER MISCHUNGEN
              RICHTWERTE GIBT FOLGENDE TABELLE (SEC)

              NGR * ZEIT PRO MATERIAL
              * WENIG MAT * VIEL MAT
              *****
              26 * 0.7 * 0.2
              208 * 5.0 * 3.0
              275 * 8.0 *

HINWEIS FUER FEHLERHAFTER LAEUFEN
              BEI AUFTRETEN EINES COMPLETEICNCODES OC4 OC5 80A
              DIE LETZTE VON GRUCAL AUSGEGEBENE NACHRICHT BEACHTEN.

VERWALTUNG    BRAUN / INR TEL. 2475

```

LISTE 1 EINGABEBESCHREIBUNG

DATEISPEZIFIKATION

STAND 05.08.73

ALLE BENDELTIGTEN DATEIEN BEFINDEN SICH AUF DER 2314-PLATTE NUSYSO
DER 275-GRUPPEN GRUBA-FILE AUF DER 2314-PLATTE GFK030

FOLGENDE SETUP KARTEN SIND NOTWENDIG
/*SETUP DEVICE=2314, ID=NUSYSO
FUER 275 GRUPPEN ZUSAETZLICH
/*SETUP DEVICE=2314, ID=GFK030

KONTROLLFILE

UNIT=2314, VOL=SER=NUSYSO, DSN=JBGRUC, DISP=SHR

GRUBAFILE STEUERFILE GRUPPENSATZTABELLE

DISP=SHR, UNIT=2314, VOL=SER=NUSYSO FALLS NICHT ANDERS VERMERKT

GRP *	GRUBA - FILE	* STEUER	* GRPS	* IDENT.GRUBA	* KENNWORT GRPS
* DSN	* VOL	* DSN	* DSN	* IDENT IN K11	* IDGSM IN K17

26 *	GRUBA.KFKINR	* NUSYSO	* F26	* GRSTAB * KFKINR	* KFKINR
*	*	*	*	* MOXTOT	*
208 *	G200DA1	* NUSYSO	* F200	* GRSTAB * 200GR	* GR200
*	*	*	*	*	*
275 *	G275DA06	* GFK030	* F275K	* GRSTAB * GR-V-275	*
*	*	*	*	*	*

REMOFILE, NUR NOTWENDIG FUER REMO-KORREKTUR
UNIT=2314, VOL=SER=NUSYSO, DSN=REMO, DISP=SHR
IDENTIFIKATION IN K41 REMO26GR

EINGABE

IN DER FOLGENDEN EINGABEBESCHREIBUNG IST DIE BEDEUTUNG DER EINGABEGROESSEN DER GRUCAL-EINGABE ERKLAERT.

EINE ZEICHENKETTE 'ABCD ' IST WIE ANGEGEBEN ZU LOCHEN, ABCD BEDEUTET, DASS DER INHALT VON ABCD ANZUGEBEN IST.
EINE ZEILE BEGINNEND MIT S__ ENTHAELT EINEN HINWEIS FUER DIE EINGABE, K__ BEDEUTET DEN ANFANG EINES NEUEN EINGABESATZES.
FUER JEDE VARIABLE FOLGT AUF DEN VARIABLENNAMEN EINE ERKLAERUNG.
DIE VERSCHIEDENEN MOEGlichkeiten DER EINGABE FUER EINE VARIABLE SIND UNTEREINANDER ANGEGEBEN, DIE ERLAEUTERUNGEN FUER DIE EINZELNEN VARIABLEN SIND DURCH EINE LEERZEILE GETRENNT.
DIE EINGABE IST NACH BLOECKEN GEORDNET, DIE REIHENFOLGE DER BLOECKE IST, AUSSER FUER DEN ERSTEN BLOCK UND FUER DIE SEKUNDAEREINGABE, BELIEBIG.
FUER STANDARDQUERSCHNITTSBERECHNUNGEN SIND NUR DIE BLOECKE 'GRUCAL ' 'MISCH ' SOWIE FUER DRUCKAUSGABE 'DRUCKWQ ' ERFORDERLICH.

DIE EINGABE MUSS DEN FREEFO-KONVENTIONEN ENTSPRECHEN.

IM FOLGENDEN DIE WICHTIGSTEN REGELN:

DATEN EINES NEUEN EINGABESATZES MUESSEN IN SPALTE 1 EINER KARTE BEGINNEN, FOLGEKARTEN FUER DEN GLEICHEN EINGABESATZ DUERFEN ERST AB SPALTE 2 BEGINNEN. DATEN SIND DURCH MINDESTENS EIN LEERZEICHEN ZU TRENNEN.
ZAHLEN DUERFEN KEINE LEERZEICHEN ENTHALTEN.

FESTKOMMAZAHLEN (I.A. DURCH N ALS ERSTES ZEICHEN DES VARIABLENNAMENS GEKENNZEICHNET) SIND OHNE PUNKT ZU LOCHEN, GLEITKOMMAZAHLEN MIT PUNKT.
NAMEN SIND IN ' EINZUSCHLIESSEN, SIE BESTEHEN I.A. AUS 8 ZEICHEN.

MIT EINEM AUFRUF KANN GRUCAL EINE DER FOLGENDEN AUFGABEN DURCHFUEHREN

*	QUERSCHNITTSBERECHNUNG	EINGABE VON S00 BIS S99
*	DRUCKEN SIGMN-FILE	EINGABE VCN SD1 BIS SD9
*	DRUCKEN FORMELN	EINGABE VON SF1 BIS SF9
*	ERSETZEN CHI	EINGABE VON SC1 BIS SC9

S00 UEBERSCHREIBEN VON DEFAULTPUFFERSPEICHERGROESSEN, STANDARD EINGABEEINHEITEN

S01 FALLS SPEZIELLE, VOM STANDARDWERT 800, ABWEICHENDE BLOCKUNG VON QUERSCHNITTS-, HILFS- ODER SEKUNDAERFILE K01, SONST S02

K01 FORMATGEBUNDEN (2A4)

BUFF	STEUERWORT, WIE ANGEGEBEN ZU LOCHEN
KBUF	GROESSE DES ZUSAETZLICH ZUM DEFAULTPUFFERSPEICHERS BENOETIGTEN PUFFERSPEICHERS IN K BYTES

S02 FALLS EINGABEEINHEIT.NE.5 INTERNE EINGABEEINHEIT.NE. 8 ODER KEINE UMWANDLUNG DURCH FREEFO K02 SONST S11

K02 FORMATGEBUNDEN (4A4)

UNIT	STEUERWORT, WIE ANGEGEBEN ZU LOCHEN
MTC	EXTERNE EINGABEEINHEIT 4 ZEICHEN BLANK, FALLS EINHEIT 5
MTIN	INTERNE EINGABEEINHEIT 4 ZEICHEN BLANK, FALLS EINHEIT 8
KFORM	KENNWORT FUER FREEFO-UMWANDLUNG 4ZEICHEN NO KEINE UMWANDLUNG DURCH FREEFO BLANK UMWANDLUNG DURCH FREEFO

S10 QUERSCHNITTSBERECHNUNG

S11 BEGINN EINGABE FUER STANDARDQUERSCHNITTSBERECHNUNG

K10 *GRUCAL

K11 IDENT IDENTIFIKATION GRUBA-FILE 8 ZEICHEN
KP1SN KENNWORT ART DER NACHFOLGENDEN RECHNUNG
' ' ' FUER NACHF. DIFF. RECHNUNG
'P1-RECH.' FUER NACHF. P1-RECHNUNG
'SN-RECH.' FUER NACHF. SN-RECHNUNG
KH2 KENNWORT WASSERSTOFFBEHANDLUNG
' ' ' KEINE H2-SONDERBEHANDLUNG
'H2SONDER' FUER H2-SONDERBEHANDLUNG
NTG FORTRANEINHEIT GRUPPENSATZTABELLE
NTS FORTRANEINHEIT STEUERFILE
NTWQ FORTRANEINHEIT SIGMN-FILE
NTH FORTRANEINHEIT HILFSFILE

K15 *MISCH

K16 NMISCH ANZAHL MISCHUNGEN

S17 FUER JEDE MISCHUNG (K17 BIS K18)

K17 NMATM ANZAHL MATERIALIEN DER MISCHUNG

IDGSM KENNWORT FUER BENUTZUNG GRUPPENSATZTABELLE
NAME DES BENUTZTEN GRUPPENSATZES 8 ZEICHEN
' ' ' FALLS KEIN GRUPPENSATZ BENUTZT
IDV KENNWORT FUER UEBERNAHME I/V
NAME DES MATERIALS VON DEM I/V UEBERNOMMEN 8 ZEICHEN
' ' ' FALLS MATERIALNAME I/V AUS GRUPPENSATZTABELLE
D.H. VERWENDUNG VON STANDARDWERTEN
IDCHI KENNWORT FUER UEBERNAHME CHI
NAME DES MATERIALS VON DEM CHI UEBERNOMMEN
' ' ' FALLS MATERIALNAME CHI AUS GRUPPENSATZTABELLE
D.H. VERWENDUNG EINES STANDARDSPALTSPEKTRUMS

S18 FUER JEDES MATERIAL DER MISCHUNG K18

K18 MATNAM MATERIALNAME 8 ZEICHEN
ZEICHEN 1-5 ENTHALTEN MATERIALBEZEICHNUNG
ZEICHEN 6-8 ENTHALTEN GRUPPENSATZBEZEICHNUNG , FALLS LEER,
WIRD DAS ZU DEM GRUPPENSATZ GEGHORENDE MATERIAL BENUTZT
TEMP TEMPERATUR DES MATERIALS IN GRAD KELVIN
TZ TEILCHENZAHL DES MATERIALS IN ATOME PRO 10** - 24 CM**3

S19 EINGABEENDE FUER STANDARDQUERSCHNITTSBERECHNUNG, DRUCKAUSGAE SIEHE S35

WERDEN SOLL.
NUR MOEGLICH, WENN AUSWERTUNG FUER ALLE
EINZELMATERIALIEN.

KN KENNZIFFER FUER TEILCHENZAHL DES AUSWERTTYP
0 TEILCHENZAHL TZ DES MATERIALS
1 TEILCHENZAHL I.
DIE LETZTEN 3 ZEICHEN DES MATERIALLABELS
IM QUERSCHNITTSNAMEN WERDEN MIC GESETZT.

NSM KENNZIFFER FUER SUMMATION UEBER MATERIALIEN
ANZAHL MATERIALIEN UEBER DIE SUMMIERT WERDEN SOLL
0 FALLS AUSWERTUNG FUER ALLE EINZELMATERIALIEN

(KSMAT(I), NAMEN DER MATERIALIEN, UEBER DIE SUMMIERT WERDEN SOLL 8 ZEICHEN
I=1,NSM)
' ' FALLS AUSWERTUNG FUER ALLE EINZELMATERIALIEN

S35 FALLS DRUCKAUSGABE K35 BIS K37

K35 'DRUCKWQ '

K36 NDRT ANZAHL DRUCKTYPEN

S36 FUER JEDEN DRUCKTYP K37

K37 NAMCAT KENNWORT FUER DEN ZU DRUCKENDEN TYP
NAME DES ZU DRUCKENDEN TYP MIT LABEL 16 ZEICHEN
'SKALAR ' FALLS DRUCKAUSGABE FUER ALLE SKALARTYPEN
'VEKTOR ' FALLS DRUCKAUSGABE FUER ALLE VEKTORTYPEN
' ' FALLS DRUCKAUSGABE FUER ALLE TYPEN

NGRU KENNZIFFER FUER GRUPPEN DES ZU DRUCKENDEN TYP
ERSTE ZU DRUCKENDE GRUPPE
0 FALLS DRUCKAUSGABE FUER ALLE GRUPPEN

NGRO KENNZIFFER FUER GRUPPEN DES ZU DRUCKENDEN TYP
LETZTE ZU DRUCKENDE GRUPPE
0 FALLS DRUCKAUSGABE FUER ALLE GRUPPEN

S40 FALLS REMO-KORREKTUR S41 BIS S69

S41 STANCARDEINGABE FUER STANDARD-REMO-KORREKTUR

S42 NUR MOEGELICH FUER 26 GRUPPEN

K40 *REMC ' '

K41 NTREM FORTRANEINHEIT REMO-FILE

IDREM IDENTIFIKATION REMO-FILE 8 ZEICHEN

K42 NMREM ANZAHL MISCHUNGEN MIT REMO-KORREKTUR

S43 FUER JEDE MISCHUNG MIT REMO-KORREKTUR K43

K43 NRM NUMMER DER MISCHUNG

NAMSTD NAME DER STOSSDICHTE, DIE ZUR REMO-KORREKTUR IN DER MISCHUNG BENUTZT 8 ZEICHEN

S44 FOLGENDE STOSSDICHTEN PHI(I)*STOT(I) MIT PHI(I)=FLUSS(I)*DU(I)
FUER 208 GRUPPEN I, DAVON 196 FEINGRUPPEN UND 12 26-GRUPPEN
SIND INTERN IN GRUCAL ENTHALTEN

'I.0 '
'SNR-2 '
'CHIETCON'
'DU '

MIT S60 KOENNEN WEITERE STOSSDICHTEN BENUTZT WERDEN

S45 DIESE STANCARDEINGABE BEWIRKT, DASS REMC-KORREKTUR FUER ALLE AUCH AUF DEM REMO-FILE ENTHALTENEN
MATERIALIEN IN DEN GRUPPEN 1 BIS 14 IN DEN ANGEGBEN MISCHUNGEN DURCHGEFUEHRT WIRD.
BEZUEGLICH MATERIALIEN UND GRUPPEN ABWEICHENDE KORREKTUREN KOENNEN DURCH S50 ANGEGBEN WERDEN.

S46 ENDE STANCARDEINGABE REMO-KORREKTUR

S50 FALLS VON DER STANDARD-REMO-KORREKTUR ABWEICHENDE KORREKTUREN ZUSAETZLICH K50 BIS S54

K50 *REMCBER. '

K51 NREMB ANZAHL KORREKTURANGABEN

S51 FUER JEDE KORREKTURANGABE K52 BIS K53

K52 KRBMI KENNZIFFER FUER MISCHUNGEN
MISCHUNGSNUMMER
0 KORREKTURANGABE GILT FUER ALLE MISCHUNGEN

NRBMAT ANZAHL DER MATERIALANGABEN DER KORREKTURANGABE

S53 FUER JEDE MATERIALANGABE K53

K53 RAMAT KENNWORT FUER MATERIALIEN 8 ZEICHEN
MATERIALNAME
' ' KORREKTURANGABE GILT FUER ALLE MATERIALIEN

KRBU KENNZIFFER FUER ANFANGSGRUPPE FUER REMO-KORREKTUR

ERSTE GRUPPE, FUER DIE REMO-KORREKTUR
0 REMO-KORREKTUR FUER ALLE GRUPPEN
NORMAL VON GRUPPE 1 BIS GRUPPE 14

KRBD KENNZIFFER FUER ENDGRUPPE FUER REMO-KORREKTUR
LETZTE GRUPPE, FUER DIE REMO-KORREKTUR
0 FUER REMO-KORREKTUR FUER ALLE GRUPPEN

S60 FALLS EINGABE VON EXTERNEN STOSSDICHTEN K60 BIS K64

K60 'STDICHTE'

K61 NSTD ANZAHL STOSSDICHTEN

S62 FUER JEDE STOSSDICHTEN K62 BIS K64

K62 NAMSTD NAME DER STOSSDICHTEN 8 ZEICHEN

KUNIT KENNWORT FUER EINGABEEINHEIT
NUMMER DER FORTRANEINHEIT
'CARD' STOSSDICHTEN FOLGT IN FORM VON KARTEN

S63 FUER JEDE STOSSDICHTEN IN KARTENFORM K63 K64

K63 NDSTD ANZAHL DATEN DER STOSSDICHTEN

K64 (STD(I),I=1,NDSTD) STOSSDICHTEN

S65 DER AUFBAU DER STOSSDICHTEN AUF EXTERNEN EINHEITEN ENTSPRICHT K63 UND K64

S66 STOSSDICHTEN MIT GLEICHEM NAMEN WIE IM PROGRAMM ENTHALTENE UEBERLAGERN DIESE TEMPORAER

S69 ENDE EINGABE REMO-KORREKTUR

S70 FALLS MISCHUNGSABHAENIGE GEWICHTE FUER CHI K70 BIS K73

S71 NUR MOEGLICH FUER 26 GRUPPEN

K70 'Gew.CHI '

K71 NMISCH ANZAHL MISCHUNGEN (VGL. K21)

S71 FUER JEDE MISCHUNG (K72 BIS K73)

K72 NMMC KENNWORT FUER WICHTUNG CHI
0 KEINE WICHTUNG FUER DIESE MISCHUNG
DAS IN 'MISCH ' FESTGELEGTE CHI WIRD UEBERNOMMEN.
ANZAHL MATERIALIEN DER MISCHUNG, FUER DIE GEWICHTE
ANGEGEBEN WERDEN.

S72 FUER JEDES MATERIAL, FUER DAS EIN GEWICHT ANGEGEBEN WIRD K73

K73 MATC MATERIALNAME (VGL. K23)

GEWC GEWICHT ZUR WICHTUNG VON CHI DES JEWEILIGEN MATERIALS
DIE SUMME DER GEWICHTE EINER MISCHUNG WIRD AUF 1. NORMIERT.

S80 FALLS DRUCKAUSGABE DER FORMELN DER QUERSCHNITTSBERECHNUNG K80

K80 'ERKL.TYP'

S81 FALLS DRUCKAUSGABE DER EINGABEBESCHREIBUNG K81

K81 'EINGABE '

S82 FALLS TESTAUSDRUCKE K82 UND K83

K82 'TEST '

K83 I1 KENNWORT
 ERSTE GRUPPE FUER TESTAUSDRUCKE
 'COMMON' ANGABE INHALT COMMONSPEICHER /GROUC/
 -1 ANGABE JEWEILS BEHANDELTE GRUPPE

 I2 KENNWORT
 LETZTE GRUPPE FUER TESTAUSDRUCKE
 NICHT BENOETIGT
 0

S84 FALLS QUERSCHNITTSANGABE IM SIGMN-FILE IN MEHREREN SAETZEN K84

K84 'SIGNSATZ'

S90 ENDLABEL NUR ERFORDERLICH, FALLS SEKUNDAEREINGABE FOLGT.

K90 'GRUCEND '

S91 FALLS SEKUNDAEREINGABE UEBER KARTE S80 BIS S89

S99 EINGABEENDE FUER QUERSCHNITTSBERECHNUNG

SS0 AUFBAU EINES SEKUNDAERFILES SS1 BIS SS9

SS1 FUER JEDEN ZU AENDERNDEN DATENSATZ NACH GRUPPEN GEORDNET KS1

KS1 IGR GRUPPENNUMMER
 MAT MATERIALNAME 8 ZEICHEN
 TYP TYPNAME 8 ZEICHEN
 NVARB VERARBEITUNGSKENNZIFFER
 NDAT ANZAHL DATEN
 (DAT(I), DATENSATZ
 I=1,NDAT)

SS2 ENDE DER SEKUNDAEREINGABE DURCH ENDLABEL ODER KS2

KS2 0 'END ' ' ' 0 0 0.

SS9 ENDE SEKUNDAERFILE

SC1 ERSETZEN MISCHUNGSABHAENGIGES CHI

SC2 NUR MOEGLICH FUER 26 GRUPPEN

SC3 VORAUSSETZUNG ZUM ERSETZEN MISCHUNGSABHAENGIGER CHI SIND

1. IN DEM ZU KORRIGIERENDEN SIGMN-FILE
 - A. MAKROSKOPISCHES ISOTOPABHAENGIGES NUSF
 - B. MIKROSKOPISCHES ISOTOPABHAENGIGES CHIZU ERHALTEN DURCH FOLGENDE EINGABEBLOCKE BEI DER ERSTELLUNG DES SIGMN-FILES

```
'AUSWERT '
'ZUSATZ ' 2
'NUSF ' ' ' 0 0 '
'CHI ' ' ' 1 0 '
```

```
'GEW.CHI '
MIT NMMC>0 FUER ALLE MISCHUNGEN
```

2. MISCHUNGSABHAENGIGE NEUTRONENFLUESSE
ZU ERHALTEN Z.B. DURCH EINEN NULLDIMENSIONALEN KARCOS-LAUF

KC1 'GRUCHI '

KC2 NTWQ FORTRANEINHEIT SIGMN-FILE

NTFL FORTRANEINHEIT NEUTRONENFLUESSE

NTWQH FORTRANEINHEIT HILFSFILE IM UMFANG DES SIGMN-FILES
O MOEGLICH, D.H. KEINE BENUTZUNG EINES HILFSFILES,
FALLS DER SIGMN-FILE IN EINEM SATZ GESCHRIEBEN IST

KC3 'GRUCEND '

SC9 EINGABEENDE FUER ERSETZEN CHI

SD1 DRUCKEN EINES SIGMN-FILES

KD1 'GRUDRUCK'

KD2 NTWQ FORTRANEINHEIT SIGMN-FILE

SD2 DIE FOLGENDE EINGABE ENTSPRICHT K35 BIS K37

KD3 'GRUCEND '

SD9 EINGABEENDE FUER DRUCKEN SIGMN-FILE

SF1 DRUCKEN DER FORMELN DER QUERSCHNITTSBERECHNUNG

KF1 'GRUERKL.'

KF2 NTS FORTRANEINHEIT STEUERFILE

KF3 'GRUCEND '

SF9 EINGABEENDE FUER DRUCKEN FORMELN

BEISPIEL FUER QUERSCHNITTSBERECHNUNG

```
//INR067A2 JOB (0067,101,P0000),WOLL,REGION=200K
/*SETUP DEVICE=2314,ID=NUSYS0
// EXEC FPG,LIB=NUSYS,NAME=GRUCAL
//G.FT01F001 DD UNIT=2314,VOL=SER=NUSYS0,DSN=GRUBA.KFKINR,DISP=SHR
//G.FT08F001 DD UNIT=SYSDA,SPACE=(TRK,2)
//G.FT09F001 DD UNIT=2314,VOL=SER=NUSYS0,DSN=JBGRUC,DISP=SHR
//G.FT10F001 DD UNIT=2314,VOL=SER=NUSYS0,DSN=GRSTAB,DISP=SHR
//G.FT11F001 DD UNIT=2314,VOL=SER=NUSYS0,DSN=F26,DISP=SHR
//G.FT12F001 DD UNIT=SYSDA,SPACE=(TRK,20)
//G.FT13F001 DD UNIT=SYSDA,SPACE=(TRK,20)
//G.FT14F001 DD UNIT=2314,VOL=SER=NUSYS0,DSN=REMO,DISP=SHR
//G.FT15F001 DD UNIT=3330,VOL=SER=TSTLIB,DSN=STD,DISP=SHR
//G.SYSIN DD *
'GRUCAL '
'KFKINR ' ' ' ' ' 10 11 12 13
'MISCH '
2
3 ' ' 'U 235 ' 'AL '
'C ' 300. 0.93-3
'U 235 ' 900. 2.03-3
'U 238 ' 900. 8.10-3
3 ' ' 'U 235 ' 'AL '
'C ' 2100. 1.26-3
'U 235 ' 2100. 1.76-3
'U 238 ' 2100. 7.63-3
'DRUCKWQ '
1
' ' 0 0
'AUSWERT '
'ZUSATZ ' 4
'SCAPT ' 'URAN ' 0 2 'U 235 ' 'U 238 '
'SBE ' ' ' 0 0 ' '
'NUSF ' ' ' 0 0 ' '
'CHI ' ' ' 1 0 ' '
'ERKL.TYP'
'SEKINPT '
1 'DRALTNEU'
8
'GEW.CHI '
2
2
'U 235 ' 0.5
'U 238 ' 0.5
0
'REMO '
14 'REMO26GR'
2
1 'SNR '
2 'SNR-2 '
'REMOBER.'
1
0 1
'C ' 1 10
'STDICHTE'
1
'SNR ' 15
'GRUCEND '
2 'C ' 'SCAPT ' 0 1 1.5-2
```

3. Variable Berechnung makroskopischer abgeschirmter Wirkungs- querschnitte mit Hilfe des Steuerfiles

GRUCAL erlaubt die Berechnung eines Querschnittstyps nach mehreren verschiedenen Vorschriften in Abhängigkeit von den vorliegenden Daten.

Dies ermöglicht sowohl die Verarbeitung von Gruppensätzen, bei denen sich die Datenstruktur für einen Typ gruppen- und materialabhängig ändert:

(208 Gruppen - GRUBA /4/ mit Intervalldaten für leichte Isotope,
208 Gruppen-Daten für schwere Isotope,
26 -Gruppen-Daten für nicht auf KEDAK /3/ enthaltene Isotope und
26 -Gruppen-Daten für alle Isotope für Energien < 1 keV)

als auch von Gruppensätzen mit unterschiedlichem Inhalt:

(275-Gruppen-GRUBA mit Intervalldaten und 275-Gruppen-Daten
und 26-Gruppen-GRUBA /5/ mit 26-Gruppen-Daten)

In GRUCAL sind eine Reihe von Formeln enthalten und eine Auswahl-
routine, die nach den Angaben eines Steuerfiles in Abhängigkeit von
den jeweils vorliegenden Daten die richtige Formel auswählt. Im Steuer-
file sind die zu berechnenden Querschnittstypen festgelegt, die zur Berechnung
benutzten Querschnittstypen, die in Frage kommenden Formeln und die Bedingungen
für ihre Benutzung.

Bei der Berechnung der Querschnitte wird für alle Gruppen für jedes Ma-
terial jeder Mischung durch die Auswahlroutine die nach den Angaben des
Steuerfiles für die vorliegenden Daten zutreffende Formel bestimmt und
zur Berechnung angelaufen.

Nach Berechnung aller materialabhängigen Querschnitte für alle Materialien
einer Mischung in der jeweiligen Gruppe werden nach den Vorschriften des
Steuerfiles die mischungs- und die materialsommen-abhängigen Querschnitte
bestimmt.

3.1 Übersicht über die in GRUCAL vorhandenen Formeln

Liste 2 gibt alle in GRUCAL zur Zeit enthaltenen Formeln wieder. Diese Liste wird von GRUCAL mit einem speziellen Steuerfile erzeugt und kann jederzeit ausgedruckt werden.

3.2 Angaben im Steuerfile

Der Steuerfile enthält für jeden zu berechnenden Querschnittstyp Angaben, welche Querschnittstypen zur Berechnung benutzt werden sollen und welche Formeln in Frage kommen.

Zur Berechnung können Querschnitte vom GRUBA-File benutzt werden oder Querschnitte, die bereits früher nach den Angaben des Steuerfiles berechnet worden sind.

Für die benutzten Querschnittstypen können Bedingungen für die Anzahl der Daten und die auf dem GRUBA-File /1/ enthaltene Verarbeitungskennziffer gestellt werden.

Mehrere in Frage kommende Formeln werden zu einer Formelgruppe zusammengefaßt, um Steuerfiles mit mehreren Querschnittstypen, die gleiche Berechnungsvorschriften haben, zu vereinfachen.

Zur Berechnung der mischungsabhängigen makroskopischen Querschnitte aus den materialabhängigen Querschnitten können ebenfalls Vorschriften angegeben werden. Der zur Wichtung der Intervalldaten benutzte Querschnittstyp kann ebenfalls angegeben werden. Ferner sind Angaben möglich, für welche Art der Nachfolgerechnung (Diffusion-, SN-, PI-Rechnung) die Querschnitte benötigt werden und ob sie bei Wasserstoffsonderbehandlung benötigt werden.

Der nachstehend beschriebene Steuerfile besteht aus zwei Teilen: den Querschnittsangaben und den Formelangaben. Die folgende Tabelle gibt Inhalt und Bedeutung der im Steuerfile enthaltenen Angaben wieder.

BERECHNUNGSVORSCHRIFTEN QUERSCHNITTSTYPEN

LISTE 2 IN GRUCAL ENTHALTENE FORMELN

TZ	TEILCHENZAHL DES MATERIALS IN DER MISCHUNG	
SUM(K)<...>	SUMME UEBER K VON ...	
E	MITTLERE ENERGIE DER GRUPPE	
DE(L)	ENERGIEINTERVALL DER STUETZPUNKTE	
U	LETHARGIE DER MITTLEREN ENERGIE DER GRUPPE	
DU	DIFFERENZ DER LETHARGIEN DER GRUPPENGRENZEN	
STW(L)	SIGMA TOTAL ZUR WICHTUNG MIT STOTW	
L	STUETZPUNKTINDEX	
G	BETRACHTETE GRUPPE G	
H	EINSTREUGRUPPE H	
(G-H)	STREUWERT AUS GRUPPE G NACH GRUPPE H	
N	ANZAHL DATEN	
K	VERARBEITUNGSKENNZIFFER	
MAT.H2	FALLS ALS MATERIAL WASSERSTOFF VORLIEGT	
DIFF-RECH.	NACHFOLGENDE DIFFUSIONSRECHNUNG	
P1-RECH.	NACHFOLGENDE P1-RECHNUNG	
SN-RECH.	NACHFOLGENDE SN-RECHNUNG	
H2SONDER	WASSERSTOFFSONDERBEHANDLUNG	
REMO-KORR.	REMO-KORREKTUR DER ELASTISCHEN STREUUNG	
STD(I)	STOSSDICHTE	
STWR(L)	SIGMA TOTAL ZUR WICHTUNG REMO-KORREKTUR MIT STROW	
I	FEINGRUPPENINDEX, 14 FEINGRUPPEN PRO GRUPPE	
MAT.REMO	MATERIAL, FUER DAS REMO-KORR. DURCHGEFUHRT	
FRM01	SKALAR	
	BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FFAKT	FORMEL 1
	FFAKT VON GRUBA MIT N.GE.1	
FRM02	SKALAR	
	TZ*SIGMA	FORMEL 2
	SIGMA VON GRUBA MIT N.EQ.1	
FRM03	SKALAR	
	TZ*SIGMA*FFAKT	FORMEL 3
	SIGMA VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FFAKT AUS DATEN MIT N.EQ.1	
FRM04	SKALAR	
	TZ*SIGMA*	FORMEL 4
	SIGMA VON GRUBA MIT N.GT.1	
FRM05	SKALAR	
	TZ* SUM(L)<SIGMA(L)* DE(L)/ (E(L)*STW(L)) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>	FORMEL 5
	SIGMA VON GRUBA MIT N.GT.1	
FRM06	SKALAR	
	TZ* SUM(L)<SIGMA(L)* DE(L)/STW(L)**2 > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>	FORMEL 6
	SIGMA VON GRUBA MIT N.GT.1	
FRM07	SKALAR	
	TZ* SUM(L)<SIGMA(L)* DE(L)/ (E(L)**1.5*STW(L)**2) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>	FORMEL 7
	SIGMA VON GRUBA MIT N.GT.1	
FRM08	SKALAR	
	TZ* SUM(L)<SIGM1(L)*SIGM2(L)* DE(L)/STW(L)**2 > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>	FORMEL 8
	SIGM1 VON GRUBA MIT N.GT.1	
	SIGM2 VON GRUBA MIT N.GT.1	

FRM31	VEKTOR		
	DE(G)	$2./3.*(E(G)**1.5-E(G+1)**1.5)$	DU(G)
	DE(G)	$2./3.*(E(G)**1.5-E(G+1)**1.5)$	DU(G)
			FORMEL 31
FRM32	VEKTOR		
	TZ*MATRX(G-H)		
	MATRX	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 32
FRM33	SKALAR		
	TZ*SIGM1*SIGM2*FFAKT		
	SIGM1	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SIGM2	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	FFAKT	AUS DATEN MIT N.EQ.1	FORMEL 33
FRM34	SKALAR		
	UEBERNEHMEN 1/V	FUER GRUPPENSATZ	
	1/V	AUS DATEN MIT N.EQ.1	FORMEL 34
FRM35	SKALAR		
	UEBERNEHMEN CHI		
	GEWICHT*CHI	FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHI	AUS DATEN MIT N.EQ.1	FORMEL 35
FRM36	VEKTOR		
	MATRX(G-H)=0.	FUER H.GT.196	
	MATRX	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 36
FRM37	SKALAR		
	UEBERNEHMEN MATRX(G- G+1)		
	MATRX	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 37
FRM38	SKALAR		
	TZ*SUM(L)<SIGMA(L)* DE(L)/ (E(L)**1.5*STW(L)) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>		
	SIGMA	VON GRUBA MIT N.GT.1	FORMEL 38
FRM39	SKALAR		
	TZ* SUM(L)<SIGM1(L)*SIGM2(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>		
	SIGM1	VON GRUBA MIT N.GT.1	
	SIGM2	VON GRUBA MIT N.GT.1	FORMEL 39
FRM40	SKALAR		
	SIGM1(L)+SIGM2(L)+.....(L)+SIGMN(L)		
	SIGM1	VON GRUBA MIT N.GT.1	
	SIGM2	VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
	VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
	SIGMN	VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 40
FRM41	SKALAR		
	REMO-KORREKTUR		
	TZ*SUM(I)<STD(I)*SUM(L)<SIGMA(L)*PNTIK(L)*STWR(L)>>/SUM(I)<SUM(L)<STWR(L)>>		
	SIGMA	VON GRUBA MIT N.GT.1	
	PNTIK	VON GRUBA MIT N.GT.1	FORMEL 41
FRM42	VEKTOR		
	TZ*SIGMA*FFAKT*PNTIK(G-H)	MIT (G-G+1)ERSETZT DURCH SIGM1	
	SIGMA	VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	PNTIK	VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FFAKT	AUS DATEN MIT N.GE.1	
	SIGM1	AUS DATEN MIT N.EQ.1	FORMEL 42

S t e u e r f i l e

I. Querschnittsangaben

Für jeden zu berechnenden Querschnittstyp sind folgende Angaben enthalten:

Name	Bedeutung	Inhalt
NAME		Name des zu berechnenden Querschnittstyps, 8 Zeichen
K1	Kennziffer für die Art der nachfolgenden Neutronenflußberechnung	0 ohne Bedingung 1 nur für nachfolgende Diffusionsrechnung 2 nur für nachfolgende P1-Rechnung 3 nur für nachfolgende SN-Rechnung
K2	Kennziffer für Sonderbehandlung Wasserstoff	0 ohne Bedingung 1 nur für Wasserstoffsonderbehandlung 2 nicht für Wasserstoffsonderbehandlung
K3	Kennziffer für Standardtyp	0 kein Standardtyp 1 Standardtyp
K4	Kennziffer Skalar-Vektortyp	0 Skalartyp 1 Vektortyp
K5	Kennziffer für Berechnung des Querschnittstyps wenn Wasserstoff als Material vorliegt	0 ohne Bedingung 1 nicht für Material Wasserstoff 2 nur für Material Wasserstoff
NRFRG		Nummer der Formelgruppe
NTGRB		Anzahl der zur Berechnung von GRUBA benötigten Querschnittstypen in NAMGRB
NTDAT		Anzahl der zur Berechnung benötigten, bereits berechneten Querschnittstypen in NAMDAT

Name	Bedeutung	Inhalt
KMISCH	Kennziffer für die Berechnung mischungsabhängiger Querschnitte aus den materialabhängigen Querschnitten	<ul style="list-style-type: none"> 1 Materialunabhängig 2 Summe über Skalartypen 3 Summe über Vektortypen 4 Summe für Diffusionskonstante 5 nicht definiert für Mischung 6 Summe über materialabhängige Spaltspektren
NAMGRB		Namen der zur Berechnung von GRUBA benötigten Typen 8 Zeichen
NAMDAT		Namen der zur Berechnung benötigten, bereits früher berechneten Typen 8 Zeichen

II. Formelangaben

Für jede Formelgruppe sind folgende Angaben enthalten:

NFR		Anzahl der zur Formelgruppe gehörenden Formeln
Zu jeder Formel der Formelgruppe		
NRFR		Nummer der Formel in GRUCAL
KFI	Kennziffer für Berechnung nach der jeweiligen Formel, wenn Wasserstoff als Material vorliegt	0 ohne Bedingung 1 Formel nicht für Wasserstoff 2 Formel nur für Wasserstoff
NTB		Anzahl der zur Berechnung nach dieser Formel benötigten Typen
NRT		Nummern der zur Berechnung nach dieser Formel benötigten Querschnittstypen, wenn alle in den Querschnittsangaben angegebenen Querschnittstypen durchnummeriert werden
KBDG	Bedingungen für alle zur Berechnung des Querschnitts nach dieser Formel benötigten Typen	Im Folgenden bedeuten: <div style="margin-left: 40px;"> N Anzahl Daten K Verarbeitungskennziffer </div> <div style="margin-left: 20px;"> 0 N.GE.1 1 N.EQ.1 2 N.GT.1 3 K.EQ.0. ØR.K.EQ.3 4 K.EQ.1.ØR.K.EQ.4 5 keine Bedingung </div>

3.3 Beispiel für einen Steuerfile

Der makroskopische Einfangquerschnitt Σ_{capt} eines Materials soll berechnet werden als

$$\text{oder} \quad \begin{array}{l} \text{TZ} * \sigma_{\text{capt}} * f_{\text{capt}} \\ \text{TZ} * \frac{S}{K} \frac{\frac{\sigma_{\text{capt}}^K}{\Sigma_{\text{tot}}^K}}{\frac{1}{\Sigma_{\text{tot}}^K}} \end{array}$$

Dabei bedeuten:

- S Summe
- TZ Teilchenzahl
- σ_{capt} mikroskopischer Einfangquerschnitt des Materials
- f_{capt} Abschirmfaktor des Materials in der Mischung
- Σ_{tot} makroskopischer totaler Querschnitt der Mischung
- K Intervallindex bei Intervalleinteilung einer Gruppe

In GRUCAL stehen u.a. folgende Formeln zur Verfügung:

Nr.	Formel	zur Berechnung benötigte Querschnitte
1	Berechnung f - Faktoren	f
3	$\text{TZ} * \sigma * f$	σ f
4	$\text{TZ} * \frac{S}{K} (\sigma^{\frac{K}{\Sigma_{\text{tot}}^K}}) / \frac{S}{K} (1./\Sigma_{\text{tot}}^K)$	σ

Die zur Berechnung benötigten Teile des Steuerfiles haben folgenden Aufbau:

3.4 Aufbau des Steuerfiles

Der Steuerfile besteht aus drei Sätzen,

Satz 1 enthält die Querschnittsangaben
außer den Namen

Satz 2 die Querschnittsnamen

Satz 3 die Formelangaben

Folgende Tabelle gibt den Aufbau der Sätze an.

Stelle kennzeichnet die Dezimalstelle in dem betrachteten Wort,
die niedrigste Dezimalstelle wird mit 1 bezeichnet.

Satz	Wort	Stelle	Inhalt	Bedeutung
1	1		NDAT	Anzahl Daten
	2		NTYPB	Anzahl der durch den Steuerfile zu berechnenden Querschnittstypen
	Für jeden zu berechnenden Querschnittstyp I, I = 1, NTYPB Wert 3 bis Wert 7			
	3	4	K1	Kennziffer Art Neutronenflußberechnung
		3	K2	Kennziffer Sonderbehandlung Wasserstoff
		2	K3	Kennziffer Standardtyp
		1	K4	Kennziffer Skalar-Vektor-Typ
	4		NADRN	Anfangsadresse der Namen im 2.Satz der zur Berechnung benötigten Querschnittstypen
	5	3	K5	Kennziffer Berechnung, wenn Material Wasserstoff
		1	NRFRG	Nummer Formelgruppe
	6	2	NTGRB	Anzahl zur Berechnung von GRUBA benötigten Querschnittstypen
		1	NTDAT	Anzahl zur Berechnung aus Daten benötigten Querschnittstypen
	7		KMISCH	Kennziffer Berechnung wirkungsabhängiger Querschnitte
2	1		NDAT	Anzahl 8-byte Daten
	2-(NTYPB+1)		NAME	Namen der zu berechnenden Querschnittstypen
	(NTYPB+2) u. f.		NAMGRB NAMDAT	Namen der zur Berechnung jeweils eines Typs benötigten Querschnittstypen
			NAMW	Namen des zur Wichtung zu benutzenden Querschnittstypes

Satz	Wort	Stelle	Inhalt	Bedeutung
3	1		NDAT	Anzahl Daten
	2		NFRGR	Anzahl Formelgruppen
	Für jede Formelgruppe I, I = 1, NFRGR Wort 3 bis 8			
	3		NADRF	Anfangsadresse der Angaben zur ersten Formel der Formelgruppen
	4		NFR	Anzahl Formeln der Formelgruppen
	Für jede Formel der Formelgruppe Wort 5 bis 8			
	5	2	NRFR	Nummer der Formel
		1	KF1	Kennziffer Benutzung Formel, wenn Material Wasserstoff
6		NTB	Anzahl zur Berechnung mit der Formel benötigten Querschnittstypen	
7	NTB	NRT	Nummer zur Berechnung benötigter Querschnittstypen	
	.			
	1			
8	NTB	KBDG	Bedingungen für die zur Berechnung benötigten Querschnittstypen	
	.			
	1			

3.5 Aufnahme des Steuerfiles

Zur Erstellung eines Steuerfiles besteht ein Aufnahmeprogramm, dessen Liste in 5 enthalten ist. Die Eingabe ist formatgebunden, ihr Aufbau entspricht weitgehend der Beschreibung in 3.2 und ist im Detail dem Kommentar der Programmliste 5 zu entnehmen. Liste 3 enthält die Eingabe für einen Steuerfile für 208-Gruppenrechnungen. Der Steuerfile wird auf Fortran-Einheit 1 erstellt.

3.6 Berechnungsvorschriften für 26-, 208- und 275-Gruppen-Rechnungen

Liste 4 enthält die Berechnungsvorschriften für 208-Gruppen-Rechnungen. Die 208-Gruppen-Rechnungen umfassen sowohl die 26-Gruppen-Rechnungen mit nur gruppenabhängigen Wirkungsquerschnitten (Ausnahme REM \emptyset -Korrektur) als auch 275-Gruppen-Rechnungen mit nur intervallabhängigen Wirkungsquerschnitten. Ein Großteil der physikalischen Überlegungen stützt sich auf Ausarbeitungen von Herrn H. Huschke /4/ /5/. Die zu einem Steuerfile (26-, 208- und 275-Gruppen) gehörenden Berechnungsvorschriften können jederzeit mit GRUCAL ausgedruckt werden.

QUERSCHNITTSTYPEN

S	C0000	0000	111	11	1	12222	22222	23333	
P	12345	6789	012	34	8	90123	45678	90123	

1	FCAPT	0	1	10	5	FCAPT				
2	FFISS	0	1	10	5	FFISS				
3	FELSC	0	1	10	5	FELSC				
4	FTOT1	2000	1	10	5	FTOT				
5	FELS1	2000	1	10	5	FELSC				
6	FTR	0	1	10	5	FTR				
7	CHI	10	2	10	1	CHI				
8	1/V	10	3	10	1	1/V				
9	SCAPT	10	4	11	2	SCAPT	FCAPT			
10	SFISS	10	4	11	2	SFISS	FFISS			
11	SE	0	4	11	2	SELSC	FELSC			
12	SI	0	5	10	2	SINSC				
13	SN2N	0	5	10	2	SN2N				
14	NUSF	10	6	11	2	NUE	SFISS			
15	SBEH	210	207	20	2	SBEH0	SELSC			
16	SME	1	8	22	3	SELSC	P0EIK	SBEH	FELSC	
17	SMI	1	9	20	3	SINSC	POIIK			
18	SMN2	1	9	20	3	SN2N	POIIK			
19	SMN2N	1	10	1	3	SMN2				
20	SBE	0	11	2	2	SBEH	SME			
21	SBI	0	12	1	2	SMI				
22	SBN2N	0	12	1	2	SMN2N				
23	SREM	10	13	5	2	SCAPT	SFISS	SBE	SBI	SBN2N
24	STOT	10	13	5	2	SCAPT	SFISS	SE	SI	SN2N
25	STOTH	2000	14	50	5	SCAPT	SELSC	SINSC	SFISS	SN2N
26	STOT1	2000	25	3	2	STOTH	FTOT1	STOT		
27	MSE1	2000	15	21	2	SELSC	MUEL	FELS1		
28	STR	10	16	13	2	STR	FTR	STOT1	MSE1	
29	SBEH1	2210	220	20	2	SBEH1	SELSC			
30	SME1	2001	17	22	3	SELSC	P1EIK	SBEH1	FELS1	
31	SBE1	2000	18	2	2	SBEH1	SME1			
32	STRB1	2000	24	2	2	STR	SBE1			
33	DIFKO	10	19	1	4	STRB1				
34	SMTOT	111	21	3	3	SME	SMI	SMN2N		
35	SMTH	211	122	1	3	SMTOT				
36	SME1H	2211	122	1	3	SME1				
37	DE	11	23	0	1					
38	SBH01	3200	226	20	2	SBEH1	SELSC			
39	SME01	3001	27	22	3	SELSC	P1EIK	SBH01	FELS1	
40	SM01H	3211	122	1	3	SME01				
41	MSE0	3000	28	21	2	SELSC	MUEL	SE		
42	STRTR	3010	16	13	2	STR	FTR	STOT	MSE0	
43	SBE01	3000	18	2	2	SBH01	SME01			
44	STRB0	3000	24	2	2	STRTR	SBE01			
45	DIFK	3010	19	1	4	STRB0				

WICHT: STOTW
WREM:

LISTE

3

STEUERFILE FÜR 208 GRUPPEN
EINGABE FÜR DAS
AUFNAHMEPROGRAMM

FORMELGRUPPEN

S 000 000000111111111122222
P N 123 456789012345678901234

1	1	10 1	1	0	23	1			
2	1	350 1	1	5	24	1	310 0	0	0
3	1	340 1	1	5	25	3	200 2	12	55
4	2	30 2	12	10			30 2	12	11
		40 1	1	2			60 1	1	2
5	2	20 1	1	1	26	2	220 1	3	5
		40 1	1	2			20 1	1	1
6	1	190 2	12	0	27	4	380 1	2	2
7	2	20 1	1	1			131 3	124	131
		50 1	2	2			111 2	12	24
8	4	130 3	124	130			141 3	124	141
		140 3	124	140			272 1	3	1
		110 2	12	24	28	2	190 2	23	11
		262 1	3	0			390 2	12	22
9	3	100 2	12	13					
		120 2	12	14					
		110 2	12	24					
10	1	290 1	1	0					
11	2	170 1	2	0					
		180 1	1	0					
12	1	170 1	1	0					
13	1	200 5	12345	55555					
14	2	200 5	12345	15555					
		400 5	12345	25555					
15	2	80 2	12	22					
		330 3	123	110					
16	2	210 2	34	11					
		30 2	12	10					
17	4	130 3	124	130					
		160 3	124	140					
		150 2	12	24					
		272 1	3	0					
18	2	170 1	2	0					
		300 1	1	0					
19	1	230 1	1	0					
20	2	20 1	1	1					
		70 1	2	2					
21	1	240 3	123	555					
22	1	250 1	1	0					

TZ TEILCHENZAHL DES MATERIALS IN DER MISCHUNG
 SUM(K)<...> SUMME UEBER K VON ...
 E MITTLERE ENERGIE DER GRUPPE
 DE(L) ENERGIEINTERVALL DER STUETZPUNKTE
 U LETHARGIE DER MITTLEREN ENERGIE DER GRUPPE
 DU DIFFERENZ DER LETHARGIEN DER GRUPPENGRENZEN
 STW(L) SIGMA TOTAL ZUR WICHTUNG MIT STOTW
 L STUETZPUNKTINDEX
 G BETRACHTETE GRUPPE G
 H EINSTREUGRUPPE H
 (G-H) STREUWERT AUS GRUPPE G NACH GRUPPE H
 N ANZAHL DATEN
 K VERARBEITUNGSKENNZIFFER
 MAT.H2 FALLS ALS MATERIAL WASSERSTOFF VORLIEGT
 DIFF-RECH. NACHFOLGENDE DIFFUSIONSRECHNUNG
 P1-RECH. NACHFOLGENDE P1-RECHNUNG
 SN-RECH. NACHFOLGENDE SN-RECHNUNG
 H2SONDER WASSERSTOFFSONDERBEHANDLUNG
 REMO-KORR. REMO-KORREKTUR DER ELASTISCHEN STREUUNG
 STD(I) STOSSDICHTE
 STWR(L) SIGMA TOTAL ZUR WICHTUNG REMO-KORREKTUR MIT
 I FEINGRUPPENINDEX, 14 FEINGRUPPEN PRO GRUPPE
 MAT.REMO MATERIAL, FUER DAS REMO-KORR. DURCHGEFUEHRT

FCAPT SKALAR

BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FCAPT
FCAPT VON GRUBA MIT N.GE.1

FORMEL 1

FFISS SKALAR

BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FFISS
FFISS VON GRUBA MIT N.GE.1

FORMEL 1

FELSC SKALAR

BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FELSC
FELSC VON GRUBA MIT N.GE.1

FORMEL 1

FTOT1 SKALAR NUR P1-RECH.

BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FTOT
FTOT VON GRUBA MIT N.GE.1

FORMEL 1

FELS1 SKALAR NUR P1-RECH.

BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FELSC
FELSC VON GRUBA MIT N.GE.1

FORMEL 1

FTR SKALAR

BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FTR
FTR VON GRUBA MIT N.GE.1

FORMEL 1

CHI SKALAR STANDARD

UEBERNEHMEN CHI
GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI
CHI VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG

FORMEL 35

I/V SKALAR STANDARD

UEBERNEHMEN I/V FUER GRUPPENSATZ
I/V VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG

FORMEL 34

SCAPT	SKALAR	STANDARD				
	TZ*SCAPT*FCAPT					FORMEL 3
	SCAPT	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	FCAPT	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	TZ*SCAPT*					FORMEL 4
	SCAPT	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SFISS	SKALAR	STANDARD				
	TZ*SFISS*FFISS					FORMEL 3
	SFISS	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	FFISS	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	TZ*SFISS*					FORMEL 4
	SFISS	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SE	SKALAR					
	TZ*SELSC*FELSC					FORMEL 3
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	FELSC	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	TZ*SELSC*					FORMEL 4
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SI	SKALAR					
	TZ*SINSC					FORMEL 2
	SINSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	TZ*SINSC*					FORMEL 4
	SINSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SN2N	SKALAR					
	TZ*SN2N					FORMEL 2
	SN2N	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	TZ*SN2N *					FORMEL 4
	SN2N	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
NUSF	SKALAR	STANDARD				
	NUE *SFISS					FORMEL 19
	NUE	VON GRUBA	MIT	N.GE.1		
	SFISS	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
SBEH	SKALAR	STANDARD			NUR H2SONDER	NUR MAT.H2
	TZ*SBEHO					FORMEL 2
	SBEHO	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	TZ* SUM(L)<SELSC(L)* DE(L) / (E(L)*STW(L)) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>					FORMEL 5
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SME	VEKTOR					
	TZ*SELSC*FELSC*POEIK(G-H)					FORMEL 13
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	POEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.0.DR.K.EQ.3		
	FELSC	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		

	TZ*SELSC*FELSC* SUM(L)<POEIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)> SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1 POEIK VON GRUBA MIT K.EQ.1.OR.K.EQ.4 FELSC AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 14
	TZ* SUM(L)<SELSC(L)*POEIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)> SELSC VON GRUBA MIT N.GT.1 POEIK VON GRUBA MIT K.EQ.1.OR.K.EQ.4	FORMEL 11
	DE(H)*SBEH SBEH AUS DATEN MIT N.GE.1	NUR MAT.H2 FORMEL 26
SMI	VEKTOR	
	TZ*SINSC*POIIK(G-H) SINSC VON GRUBA MIT N.EQ.1 POIIK VON GRUBA MIT K.EQ.0.OR.K.EQ.3	FORMEL 10
	TZ*SINSC* SUM(L)<POIIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)> SINSC VON GRUBA MIT N.EQ.1 POIIK VON GRUBA MIT K.EQ.1.OR.K.EQ.4	FORMEL 12
	TZ* SUM(L)<SINSC(L)*POIIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)> SINSC VON GRUBA MIT N.GT.1 POIIK VON GRUBA MIT K.EQ.1.OR.K.EQ.4	FORMEL 11
SMN2	VEKTOR	
	TZ*SN2N *POIIK(G-H) SN2N VON GRUBA MIT N.EQ.1 POIIK VON GRUBA MIT K.EQ.0.OR.K.EQ.3	FORMEL 10
	TZ*SN2N * SUM(L)<POIIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)> SN2N VON GRUBA MIT N.EQ.1 POIIK VON GRUBA MIT K.EQ.1.OR.K.EQ.4	FORMEL 12
	TZ* SUM(L)<SN2N (L)*POIIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)> SN2N VON GRUBA MIT N.GT.1 POIIK VON GRUBA MIT K.EQ.1.OR.K.EQ.4	FORMEL 11
SMN2N	VEKTOR	
	2.*SMN2 (G-H) SMN2 AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 29
SBE	SKALAR	
	SUM(H.GT.G)<SME (G-H)> SME AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 17
	E(G+1)*SBEH SBEH AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 18
SBI	SKALAR	
	SUM(H.GT.G)<SMI (G-H)> SMI AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 17
SBN2N	SKALAR	
	SUM(H.GT.G)<SMN2N(G-H)> SMN2N AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 17
SREM	SKALAR STANDARD	
	SCAPT+SFISS+SBE +SBI +SBN2N	FORMEL 20

	SCAPT	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SFISS	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SBE	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SBI	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SBNZN	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
STOT	SKALAR	STANDARD				
	SCAPT+SFISS+SE	+SI	+SNZN			FORMEL 20
	SCAPT	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SFISS	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SE	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SI	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SNZN	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
STOTH	SKALAR		NUR	P1-RECH.		
	SCAPT+SELSC+SINSC+SFISS+SNZN					FORMEL 20
	SCAPT	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SINSC	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SFISS	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SNZN	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SCAPT(L)+SELSC(L)+SINSC(L)+SFISS(L)+SNZN(L)					FORMEL 40
	SCAPT	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SINSC	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SFISS	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
	SNZN	VON GRUBA	MIT	N,K	BELIEBIG	
STOT1	SKALAR		NUR	P1-RECH.		
	TZ*STOTH*FTOT1					FORMEL 3
	STOTH	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	FTOT1	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	TZ*SUM(L)<STOTH(L)*DE(L)/STW(L)**2 > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>					FORMEL 6
	STOTH	AUS DATEN	MIT	N.GT.1		
	UEBERNEHMEN STOT					FORMEL 22
	STOT	AUS DATEN	MIT	N,K	BELIEBIG	
MSE1	SKALAR		NUR	P1-RECH.		
	TZ*SUM(L)<SELSC(L)*MUEL(L)*DE(L)/STW(L)**2 > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>					FORMEL 8
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
	MUEL	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
	TZ*SELSC*MUEL *FELS1					FORMEL 33
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	MUEL	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	FELS1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
STR	SKALAR	STANDARD				
	STOT1-MSE1					FORMEL 21
	STOT1	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	MSE1	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	TZ*STR *FTR					FORMEL 3
	STR	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	FTR	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		

SBEH1	SKALAR	STANDARD	NUR P1-RECH.	NUR H2SONDER	NUR MAT.H2	
	TZ*SBEH1					FORMEL 2
	SBEH1	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	TZ* SUM(L)<SELSC(L)* DE(L)/ (E(L)**1.5*STW(L)**2) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>					FORMEL 7
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SME1	VEKTOR		NUR P1-RECH.			
	TZ*SELSC*FELS1*PIEIK(G-H)					FORMEL 13
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	PIEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.0.OR.K.EQ.3		
	FELS1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	TZ*SELSC*FELS1* SUM(L)<PIEIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L)**2 > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>					FORMEL 16
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	PIEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.1.OR.K.EQ.4		
	FELS1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	TZ* SUM(L)<SELSC(L)*PIEIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L)**2 > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)**2>					FORMEL 15
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
	PIEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.1.OR.K.EQ.4		
	2./3.*(E(H)**1.5-E(H+1)**1.5)*SBEH1					NUR MAT.H2 FORMEL 27
	SBEH1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
SBE1	SKALAR		NUR P1-RECH.			
	SUM(H.GT.G)<SME1 (G-H)>					FORMEL 17
	SME1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	2./3.*E(G+1)**1.5*SBEH1					FORMEL 30
	SBEH1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
STRB1	SKALAR		NUR P1-RECH.			
	STR +SBE1					FORMEL 20
	STR	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
	SBE1	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
DIFKO	SKALAR	STANDARD				
	1./ (3.*STRB1)					FORMEL 23
	STRB1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
SMTOT	VEKTOR	STANDARD		NICHT H2SCNDER		
	SME (G-H)+SMI (G-H)+SMN2N(G-H)					FORMEL 24
	SME	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
	SMI	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
	SMN2N	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
SMTN	VEKTOR	STANDARD		NUR H2SONDER	NICHT MAT.H2	
	UEBERNEHMEN SMTOT(G-H)					FORMEL 25
	SMTOT	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
SME1H	VEKTOR	STANDARD	NUR P1-RECH.	NUR H2SONDER	NICHT MAT.H2	
	UEBERNEHMEN SME1 (G-H)					FORMEL 25
	SME1	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
DE	VEKTOR	STANDARD				
	DE(G)	2./3.*(E(G)**1.5-E(G+1)**1.5)		DU(G)		
	DE(G)	2./3.*(E(G)**1.5-E(G+1)**1.5)		DU(G)		FORMEL 31

SBH01	SKALAR	NUR SN-RECH.	NUR H2SCNDR	NUM MAT.H2		
	TZ*SBEH1					FORMEL 2
	SBEH1	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	TZ*SUM(L)<SELSC(L)* DE(L)/ (E(L)**1.5*STW(L)) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>					FORMEL 38
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
SME01	VEKTOR	NUR SN-RECH.				
	TZ*SELSC*FELS1*PIEIK(G-H)				NICHT MAT.H2	FORMEL 13
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	PIEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.0.OR.K.EQ.3		
	FELS1	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	TZ* SUM(L)<SELSC(L)*PIEIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>				NICHT MAT.H2	FORMEL 11
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
	PIEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.1.OR.K.EQ.4		
	TZ*SELSC*FELS1* SUM(L)<PIEIK(G-H)(L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>				NICHT MAT.H2	FORMEL 14
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	PIEIK	VON GRUBA	MIT	K.EQ.1.OR.K.EQ.4		
	FELS1	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	2./3.*(E(H)**1.5-E(H+1)**1.5)*SBH01				NUR MAT.H2	FORMEL 27
	SBH01	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
SM01H	VEKTOR	STANDARD	NUR SN-RECH.	NUR H2SONDER	NICHT MAT.H2	
	UEBERNEHMEN SME01(G-H)					FORMEL 25
	SME01	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
MSE0	SKALAR	NUR SN-RECH.				
	MUEL *SE					FORMEL 19
	MUEL	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	SE	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	TZ* SUM(L)<SELSC(L)*MUEL (L)* DE(L)/STW(L) > / SUM(L)<DE(L)/STW(L)>					FORMEL 39
	SELSC	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
	MUEL	VON GRUBA	MIT	N.GT.1		
STRTR	SKALAR	STANDARD	NUR SN-RECH.			
	STOT -MSE0					FORMEL 21
	STOT	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	MSE0	AUS DATEN	MIT	N.EQ.1		
	TZ*STR *FTR					FORMEL 3
	STR	VON GRUBA	MIT	N.EQ.1		
	FTR	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
SBE01	SKALAR	NUR SN-RECH.				
	SUM(H.GT.G)<SME01(G-H)>					FORMEL 17
	SME01	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
	2./3.*E(G+1)**1.5*SBH01					FORMEL 30
	SBH01	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		
STRB0	SKALAR	NUR SN-RECH.				
	STRTR+SBE01					FORMEL 20
	STRTR	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
	SBE01	AUS DATEN	MIT	N,K BELIEBIG		
DIFK	SKALAR	STANDARD	NUR SN-RECH.			
	1./ (3.*STRB0)					FORMEL 23
	STRB0	AUS DATEN	MIT	N.GE.1		

4. Zusammenfassung von Materialnamen in Gruppensatztabellen

Zu einem Material können, bedingt durch verschiedene Ausgangsdaten auf KEDAK /3/ oder Wichtungsfunktionen bei der Energiemittelung der Wirkungsquerschnitte, mehrere Gruppenkonstantensätze für den gleichen Wirkungsquerschnittstyp bestehen.

Die Speicherung dieser Gruppenkonstanten auf GRUBA /1/ erfolgt unter einem aus acht Zeichen bestehenden Materialnamen, dessen erste fünf Zeichen das Material und dessen letzte drei Zeichen die Ausgangsdaten und die Wichtungsfunktion kennzeichnen. Materialien mit Ausgangsdaten der gleichen Quelle und gleicher Wichtungsfunktion können zu einem Gruppensatz zusammengefaßt werden.

Die Gruppensatztabelle gibt dem Benutzer die Möglichkeit, ohne Kenntnis der speziellen Kennzeichnung mit den Materialien eines Gruppensatzes zu arbeiten. In diesem Falle sind nur die ersten fünf Zeichen des Materialnamens anzugeben. Ferner ist in der Gruppensatztabelle die Zuordnung des Spaltspektrums CHI und der mittleren Neutronengeschwindigkeit $1/V$ zu einzelnen Materialien enthalten.

4.1 Auswahl des gruppensatzabhängigen Materialnamens

Gibt der Benutzer in der Mischungseingabe für eine Mischung einen Gruppensatznamen an, wird in GRUCAL mit Hilfe der Gruppensatztabelle der wirkliche Materialname mit Kennzeichnung in den letzten drei Zeichen bestimmt. Dazu werden die ersten fünf Zeichen des angegebenen Materialnamens mit den ersten fünf Zeichen der Materialnamen des angegebenen Gruppensatzes auf Übereinstimmung überprüft. Diese Bestimmung entfällt, wenn in der Eingabe ein vollständiger Materialname mit Kennzeichnung angegeben wird, dann wird mit dem angegebenen Material gearbeitet. Wird in einer Mischung kein Gruppensatz angegeben, müssen für diese Mischung die vollen Materialnamen mit Kennzeichnung angegeben werden.

In der Druckausgabe und bei materialabhängigen Querschnitten auf dem SIGMN-File erscheinen stets die vom Benutzer in der Eingabe angegebenen Materialnamen.

4.2 Übernahme von CHI und 1/V

Auf GRUBA sind die gruppenabhängigen Werte für das nicht materialabhängige Standardspaltspektrum CHI und die nicht mischungsabhängige mittlere Neutronengeschwindigkeit 1/V formal einem beliebigen Material zugeordnet (z.Zt. CHI zu AL, 1/V zu U 235). Diese Zuordnung ist in der Gruppensatztabelle festgehalten. Die Namen der Materialien, von denen CHI bzw. 1/V zu übernehmen sind, werden in GRUCAL bei Angabe eines Gruppensatzes aus der Gruppensatztabelle entnommen, wenn sie nicht in der Eingabe angegeben sind.

Wird kein Gruppensatz benutzt, sind die entsprechenden Materialien in der Eingabe anzugeben. Diese Angabe entfällt für eine Mischung für das Spaltspektrum CHI, in der das Spaltspektrum aus den materialabhängigen Daten berechnet wird.

4.3 Aufbau der Gruppensatztabelle

Die Gruppensatztabelle hat folgenden Aufbau:

1 Satz	1
	Anzahl Gruppensätze
für jeden Gruppensatz folgender Satz	
	Anzahl Daten des Satzes in 4-byte Worten
	Name des Gruppensatzes
	Name des Materials, von dem 1/V zu übernehmen ist (8 Zeichen)
	Name des Materials, von dem CHI zu übernehmen ist (8 Zeichen)
	Anzahl Materialien des Gruppensatzes
	Materialnamen (8 Zeichen)

4.4 Erstellen der Gruppensatztabelle

Liste 6 im Anhang enthält das Aufnahmeprogramm. Die Eingabebeschreibung ist in Form von Kommentaren enthalten.

5. Berechnung der Resonanzselbstabschirmungsfaktoren

Der material- und mischungsabhängige Resonanzselbstabschirmungsfaktor f für einen Querschnittstyp (im weiteren kurz f -Faktor) ist abhängig von der Energiegruppe i , dem Untergrundquerschnitt σ_0 und der Temperatur T . Da der f -Faktor nur an wenigen Stützpunkten für Energie (für energieabhängige Speicherung), σ_0 und T gespeichert wird, sind bei der Berechnung Interpolationen notwendig, die in folgender Reihenfolge ausgeführt werden:

1. Energieinterpolation
2. σ_0 -Interpolation
3. Temperaturinterpolation

5.1 Energieinterpolation

Schwach energieabhängige f -Faktoren werden auf GRUBA nicht gruppenabhängig gespeichert sondern energieabhängig für nur wenige Energiestützstellen.

Der gruppenabhängige f -Faktor wird durch Interpolation für die mittlere Energie der Gruppe i bestimmt /4/.

Es seien

- | | |
|-------|----------------------------------|
| f_1 | f -Faktor zu der Energie E_1 |
| f_2 | f -Faktor zu der Energie E_2 |
| E | $= 0.5 * (E_i + E_{i+1})$ |

Der zu der mittleren Energie E der Gruppe i gehörende f -Faktor ergibt sich zu:

a) für $f_1 < f_2 < 0.9999$

$$f = \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{1-f_1^2}{f_1^2} \left\{ \frac{1-f_2^2}{1-f_1^2} \cdot \frac{f_1^2}{f_2^2} \right\} \frac{\ln E - \ln E_1}{\ln E_2 - \ln E_1}}}$$

b) für $f_1 < 0.9999$ und $f_2 > 0.9999$

Es wird gesetzt: $f_2 = 0.9999$

Berechnung nach a)

c) für $0.9999 > f_1 > f_2$

$$f = \frac{f_1 + f_2}{2}$$

d) für $f_1 > 0.9999$ und $f_2 > 0.9999$

$f = 1.$

5.2 σ_0 -Interpolation /7/

Der Untergrundquerschnitt σ_0^K für das Material K einer Mischung mit M Materialien wird berechnet zu

$$\sigma_0^K = \frac{\sum_{j \neq K}^M N^j \sigma_{\text{tot}}^j}{N^K}$$

wobei

N^j die Teilchenzahl

σ_{tot}^j der zur Berechnung der Selbstabschirmung benötigte totale makroskopische Wirkungsquerschnitt

des Materials j bedeuten.

Die f-Faktoren sind an den σ Stützstellen

$$\sigma_i = 0. \quad 10 \cdot i^{-1} \quad i = 2,7$$

gespeichert. Dabei wird vorausgesetzt, daß aus physikalischen Gründen alle gespeicherten f-Faktoren größer als 0. sind.

f-Faktoren gleich 1. für die großen Werte von σ werden nicht gespeichert, falls sie für alle folgenden σ -Werte ebenfalls 1. sind.

Die f-Faktoren werden mit der Formel

$$f = \sqrt{\frac{\sigma_0 + a}{\sigma_0 + b}}$$

für den vorliegenden Wert von σ_0 interpoliert.

Es möge gelten $\sigma_i < \sigma_0 < \sigma_{i+1}$

Zur Berechnung von a und b sind folgende Fälle zu unterscheiden:

a) $|1.0 - f_i| > 1.0E-4$
 $|1.0 - f_{i+1}| > 1.0E-4$

$$f_i \neq f_{i+1}$$
$$b = \frac{\sigma_{i+1} (1 - f_{i+1}^2) - \sigma_i (1 - f_i^2)}{f_{i+1}^2 - f_i^2}$$

$$a = f_i^2 \cdot b - \sigma_{i+1} (1 - f_i^2)$$

b) $|1.0 - f_i| > 1.0E-4$
 $|1.0 - f_{i+1}| < 1.0E-4$

$$a = 10.$$
$$b = \frac{\sigma_i + 10.}{f_i^2} - \sigma_i$$

c) $|1.0 - f_i| < 1.0E-4$
 $|1.0 - f_{i+1}| > 1.0E-4$

$$a = 10.$$
$$b = \frac{\sigma_{i+1} + 10.}{f_{i+1}^2} - \sigma_{i+1}$$

Fälle b) und c) führen zu einer i.a. kleinen Sprungstelle in den f-Faktoren an der Stelle $\sigma_0 = \sigma_{i+1} - \varepsilon$ bzw. $\sigma_0 = \sigma_i - \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$, beliebig klein)

d) $f_i = f_{i+1}$

$$f = f_i = f_{i+1}$$

Ist σ_0 größer als das zu dem als letztem Wert gespeicherte f_i gehörige σ_i wird nach b) extrapoliert.

5.3 Temperaturinterpolation /6/

In GRUCAL sind vier Interpolationsformeln zur Temperaturinterpolation enthalten.

f_i seien die f-Faktoren zu den Temperaturen T_i , f der zur Temperatur T interpolierte f-Faktor.

Abgeleitet aus den jeweils angegebenen Grundformeln ergeben sich folgende Interpolationsformeln:

(1) modifizierte 2-Punkt-Formel:

$$f = \sqrt{\frac{T_2 f_1^2 - T_1 f_2^2 + (f_2^2 - f_1^2) T}{(T_2 - T_1)}}$$

abgeleitet aus der Grundformel

$$F = \sqrt{a_1 + a_2 T}$$

(2) 2-Punkt Formel

$$f = \frac{f_2(1-f_1)\sqrt{T_1} - f_1(1-f_2)\sqrt{T_2} + (f_1-f_2)\sqrt{T}}{(1-f_1)\sqrt{T_1} - (1-f_2)\sqrt{T_2} + (f_1-f_2)\sqrt{T}}$$

abgeleitet aus der Grundformel

$$f = \frac{b_1 + \sqrt{T}}{b_2 + \sqrt{T}}$$

(3) 3-Punkt-Formel

$$f = \frac{f_1 a_1 (\sqrt{T_2 T_3} + \sqrt{T_1 T}) + f_2 a_2 (\sqrt{T_1 T_3} + \sqrt{T_2 T}) + f_3 a_3 (\sqrt{T_1 T_2} + \sqrt{T_3 T})}{a_2 (\sqrt{T_2 T_3} + \sqrt{T_1 T}) + a_2 (\sqrt{T_1 T_3} + \sqrt{T_2 T}) + a_3 (\sqrt{T_1 T_2} + \sqrt{T_3 T})}$$

mit

$$a_1 = (f_2 - f_3)$$

$$a_2 = (f_3 - f_1)$$

$$a_3 = (f_1 - f_2)$$

abgeleitet aus der Grundformel

$$f = \frac{c_1 + c_2 \sqrt{T}}{c_3 + \sqrt{T}}$$

(4) 4-Punkt-Formel

$$f = A_0 + A_1 \sqrt{T} + A_2 \ln T + A_3 / \sqrt{T}$$

wobei die Koeffizienten A_K $K = 0,3$ durch Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A_0 + A_1 \sqrt{T_i} + A_2 \ln T_i + A_3 / \sqrt{T_i} = f(T_i)$$
$$i = 1,4$$

berechnet werden.

Formel (4) wird zur Temperaturinterpolation benutzt, falls f-Faktoren für vier Temperaturen auf GRUBA gespeichert sind.

Formel (3) wird zur Temperaturinterpolation benutzt, falls f-Faktoren für drei Temperaturen, Formel (2), falls f-Faktoren für nur zwei Temperaturen gespeichert sind.

Die gewählten Formeln sind vereinfachte Darstellungen, die meist gute Näherungen ergeben. Sie können jedoch nicht alle vorkommenden Fälle angemessen beschreiben, insbesondere können in Ausnahmefällen Null- oder Polstellen im interessierenden Temperaturbereich auftreten.

Beim Auftreten einer Null- oder Polstelle im Temperaturbereich von $T_U = 270^\circ\text{K}$ bis $T_O = 3400^\circ\text{K}$ wird eine andere Interpolationsformel angelaufen.

Es wird benutzt:

Formel (3) statt Formel (4)

wenn

- a) die Koeffizienten A_K , $K = 0,3$ nicht bestimmbar sind.
- b) der interpolierte f-Faktor < 0 ist.

Es wird benutzt:

Formel (2) statt Formel (3)

Formel (1) statt Formel (2)

wenn

- a) Nenner oder Zähler der Formel eine Nullstelle für eine Temperatur T_0 mit $T_U < T_0 < T_O$ haben
- b) der interpolierte f-Faktor < 0 ist
- c) der interpolierte f-Faktor > 1 ist und nicht mindestens ein Ausgangswert ebenfalls > 1 ist.

Fälle b) und c) können wegen der Überprüfung nach a) nur auftreten für eine Interpolationstemperatur T mit $T < T_U$ oder $T > T_O$

- d) nur für Formel (3)
Zwei Ausgangs-f-Faktoren gleich sind.

Ist die relative Abweichung aller drei Ausgangs-f-Faktoren bei Formel (3) bzw. beider f-Faktoren bei Formel (2) kleiner $\epsilon = 1.0^{-5}$, wird der zu der mittleren bzw. höchsten Temperatur gehörende Wert benutzt.

Ist in Formel (1) das Argument der Wurzel < 0 ., wird die Interpolation mit Fehlermeldung abgebrochen.

6. REMØ-Verfahren

Bei der Berechnung der Wirkungsquerschnitte eines bestimmten Materials nach dem üblichen σ_0 -Konzept wird die Resonanzselbstabschirmung durch Abschirmfaktoren berücksichtigt. Dazu wird die Näherungsannahme gemacht, daß der Einfluß der weiteren Materialien der Mischung auf den berechneten Querschnitt durch einen energieunabhängigen Untergrundquerschnitt berücksichtigt werden kann. Besonders für die elastische Streuung ist dies eine relativ grobe Näherung. Hinzu kommt, daß meist die Resonanzselbstabschirmungsfaktoren für die elastische Streuung innerhalb der gesamten Gruppe auch als Resonanzselbstabschirmungsfaktoren für die Ausstreuung aus einer Gruppe benutzt werden. Dadurch kann z.B. der Einfluß der Position einer Streuresonanz innerhalb einer Gruppe nicht angemessen behandelt werden.

Nach dem REMØ-Verfahren, vgl. Kap. 3.5 in /8/, kann der elastische Ausstreuquerschnitt in die benachbarte, energetisch tiefer liegende Gruppe durch einen Wert ersetzt werden, der aus intervallabhängigen Daten durch Wichtung mit einer geeigneten Stoßdichte bestimmt wurde.

Voraussetzung ist ein REMØ-GRUBA-File, der die im nächsten Abschnitt erläuterten intervallabhängigen Daten für die Materialien enthält, deren elastische Ausstreuung nach dem REMØ-Verfahren verbessert werden soll.

6.1 Berechnung der elastischen Ausstreuung nach dem REMØ-Verfahren

Die elastische Streuung e_{Σ}^K eines Materials K aus der Gruppe g in die Gruppe g+1 wird berechnet zu:

$$e_{\Sigma}^K = N^K \frac{\frac{\sum_{L} \left(\frac{S_{FL}^K}{L} \right)_{j \in L} \cdot \frac{e_{\sigma_j}^K \cdot e_{p_j}^K}{S_{NK}^K \cdot \text{tot}^{\sigma_j}_K}}{1}}{\sum_{L} \left(\frac{S_{FL}^K}{L} \right)_{j \in L} \cdot \frac{e_{\sigma_j}^K}{S_{NK}^K \cdot \text{tot}^{\sigma_j}_K}}$$

Dabei bedeuten:

- K Materialindex
- L Feingruppenindex

j	Intervallindex für Intervalle in der Feingruppe L
S	Summe
N	Teilchenzahl
F	Stoßdichte (Integral über eine Feingruppe)
Σ	makroskopischer Wirkungsquerschnitt
σ	mikroskopischer Wirkungsquerschnitt
σ_j^K	elastischer Wirkungsquerschnitt
$e_{p_j}^K$	Übergangswahrscheinlichkeit für elastische Streuung von Neutronen aus dem Intervall j der Gruppe g in die Gruppe g+1
$\sigma_{tot_j}^K$	totaler Wirkungsquerschnitt

In der Materialsumme über den totalen Wirkungsquerschnitt werden nur die intervallabhängigen Daten der Materialien summiert, für die die REMØ-Korrektur in der jeweiligen Gruppe und Mischung durchgeführt wird; für die übrigen Materialien wird der intervallunabhängige totale Wirkungsquerschnitt σ_g^K der Gruppe g summiert.

6.2 Festlegung von Materialien und Gruppen, für die REMØ-Korrektur durchgeführt wird

Bei der Standard-REMØ-Korrektur wird in einer Mischung, für die Korrektur gewünscht wird, die elastische Streuung für die Materialien und Gruppen verbessert, für die Daten auf dem REMØ-GRUBA-File vorhanden sind. Über Eingabe können, vom Standard abweichend, für jede Mischung Materialien und Gruppenbereiche bestimmt werden, für die eine REMØ-Korrektur durchgeführt werden soll.

Über Sekundäreingabe kann die Anzahl der Materialien, für die REMØ-Korrektur möglich ist, erweitert werden oder bei entsprechender Eingabe zugehöriger Stoßdichten auch die Zahl der Gruppen.

Auskunft über die Materialien, für die eine REMØ-Korrektur möglich ist, gibt eine Inhaltsangabe des REMØ-GRUBA-Files (vgl. Kap. 2.10 in /1/).

6.3 REMØ-GRUBA-File

Der REMØ-GRUBA-File enthält im GRUBA-Format /1/ intervallabhängige Daten für elastische Streuung, Übergangswahrscheinlichkeit in die nächste Gruppe und den totalen Wirkungsquerschnitt einer Reihe von Materialien für die ersten 14 Gruppen des 26-Gruppen-Satzes. Jede Gruppe ist in 14 lethargieäquidistante Feingruppen unterteilt, jede Feingruppe enthält 5 energieäquidistante Intervalle. Diese Daten werden, falls REMØ-Korrektur in dem Lauf durchgeführt wird, durch die Leseroutine den aus dem GRUBA-File stammenden Daten für die benötigten Materialien hinzugefügt.

6.4 Aufbau der zur Wichtung benutzten Stoßdichte

In GRUCAL sind eine Reihe von Standard-Stoßdichten für 196 Feingruppen enthalten (s. Eingabebeschriftung).

Weitere Stoßdichten, berechnet z.B. mit nulldimensionalen 208-Gruppen-Rechnungen, können als Eingabe eingebracht werden. Dabei überlagern Stoßdichten aus der Eingabe evtl. bereits im Programm enthaltene Stoßdichten mit gleichem Namen. Wird über Sekundäreingabe REMØ-Korrektur in mehr als 14 Gruppen durchgeführt, ist zu beachten, daß eine entsprechend erweiterte Stoßdichte angeliefert werden muß.

7. Berechnung des Spaltspektrums CHI einer Materialmischung

Im Normalfall wird als Spaltspektrum CHI einer Mischung das Spaltspektrum eines bestimmten Materials des GRUBA-Files verwendet, dessen Name entweder der Gruppensatztabelle oder der externen Eingabe entnommen wird (siehe 4.2).

(Verschiedene Isotope des gleichen Elementes sind im folgenden als unterschiedliche Materialien aufzufassen).

Für genauere Berechnungen kann die Abhängigkeit des mischungsabhängigen Spaltspektrums von den Neutronenproduktionsraten der einzelnen Spaltmaterialien der Mischung berücksichtigt werden. Voraussetzung für diese Berechnungen sind materialabhängige Spaltraten auf dem GRUBA-File.

Die Verbesserung des Spaltspektrums erfolgt iterativ. Für die erste Querschnittsberechnung werden in GRUCAL von außen einzugebende Schätzungen der Produktionsraten benutzt, die hier kurz als Gewichte bezeichnet werden.

Nach der mit diesen Querschnitten erfolgten Flußberechnung können in GRUCAL die Neutronenproduktionsraten berechnet und zur Bestimmung eines verbesserten mischungsabhängigen Spaltspektrums benutzt werden.

7.1 Wichtung des materialabhängigen Spaltspektrums

Die vom Benutzer für die einzelnen Materialien K der Mischungen angegebenen Gewichte G^K werden auf 1 normiert und zur Berechnung des mischungsabhängigen Spaltspektrums χ der Gruppe i benutzt:

$$\chi_i = \sum_K \frac{G^K}{\sum_K G^K} \chi_i^K \quad 7/1$$

Für Mischungen ohne Wichtung wird das Standardspaltspektrum eines Materials übernommen.

7.2 Verbesserung des Spaltspektrums

In GRUCAL werden aus den Flüssen ϕ_i der Gruppe i und den Spaltproduktionsquerschnitten $\nu\Sigma_{f,i}^K$ der Materialien K die Neutronenproduktionsraten P^K für die einzelnen Materialien der Mischungen berechnet:

$$P^K = \sum_i \phi_i \nu\Sigma_{f,i}^K$$

Entsprechend 7/1 werden verbesserte mischungsabhängige Spaltspektren χ_i berechnet

$$\chi_i = \sum_K \frac{P^K}{\sum_K P^K} \chi_i^K$$

Das mischungsabhängige Spaltspektrum χ_i wird im SIGMN-File durch die verbesserten Daten ersetzt.

Voraussetzung für die Verbesserung des Spaltspektrums sind gruppenabhängige Flüsse für die einzelnen Mischungen sowie ein SIGMN-File, der materialabhängige Spaltspektren χ_i^K und materialabhängige Spaltproduktionsquerschnitte $\nu\Sigma_{f,i}^K$ enthält. Diese materialabhängigen Daten können bei der Erstellung des SIGMN-Files als Auswerttypen erzeugt werden. Die materialabhängigen Spaltspektren einer Mischung können nur geschrieben werden, wenn das Spaltspektrum der entsprechenden Mischung gewichtet wird.

7.2.1 Aufbau der zur Wichtung benötigten Datei mit Flüssen

Für die gruppenabhängigen Flüsse wird eine Datei mit folgendem Aufbau erwartet:

für jede Gruppe ein Satz, der die Flüsse in der Gruppe
für jede Mischung enthält.

8. Sekundäreingabe

Durch Sekundäreingabe können mikroskopische Daten des GRUBA-Files durch benutzereigene Daten ersetzt werden. Dabei ist mehrfache Überlagerung möglich, d.h. ein Sekundärfile kann durch einen weiteren Sekundärfile überlagert werden. Das Einlesen der Sekundärfiles und damit die Überlagerung erfolgt in der Reihenfolge der Angabe ihrer Fortraneinheiten in der Eingabe.

8.1 Aufbau der Sekundärfiles

Die Sekundärfiles enthalten für zu ändernde Daten einer Gruppe, eines Materials und eines Typs jeweils einen Datensatz mit folgendem Aufbau:

Gruppennummer
Materialname 8 Zeichen
Typname 8 Zeichen
Verarbeitungskennziffer
Anzahl Daten
Daten

Die Bedeutung der Verarbeitungskennziffer und der Aufbau der Daten ist in Kap. 1.3 von /1/ erklärt.

Die Datensätze müssen nach Gruppen geordnet sein. Innerhalb einer Gruppe ist die Reihenfolge von Materialien oder Querschnittstypen beliebig. Ein Sekundärfile wird abgeschlossen durch einen Endlabel oder durch folgenden Satz

0 'END ' ' ' 0 0 0

Der Aufbau eines Sekundärfiles ist identisch mit dem Aufbau eines Eingabefiles für einen GRUBA-Aufnahmelaufl /1/.

9. Jobstatistik und GRUCAL-News

Um einen Überblick über Art und Umfang der mit GRUCAL durchgeführten Rechnungen sowie über die Benutzung der einzelnen GRUBA-Files zu erhalten, werden Angaben über die durchgeführten Rechnungen und über die benutzten GRUBA-Files auf einem Jobstatistikfile festgehalten. Ferner enthält er Mitteilungen an den Benutzer, die bei jedem GRUCAL-Lauf in Form von News gedruckt werden.

9.1 Arbeitsweise der Jobstatistik

Auf dem Jobstatistikfile werden Angaben über die letzten 99 Jobs festgehalten. Um Hinweise auf Fehlermöglichkeiten auch bei Jobabbruch zu erhalten, werden die Angaben, jeweils ergänzt um neue Daten, mehrfach auf den gleichen Platz geschrieben, am Jobbeginn, nach Einlesen der Eingabe und am Jobende. Vom Programm erkannte Fehler werden durch einen negativen Wert in Wort 10 und den Fehlercode gekennzeichnet.

Ferner werden für max. 20 GRUBA-Files die jeweils acht letzten Benutzer festgehalten, die Reihenfolge der Benutzernamen gibt zugleich die Reihenfolge der Benutzungen an.

9.2 GRUCAL-News

Am Ende jedes fehlerfreien Jobs oder wenn GRUCAL einen Fehler erkannt hat, werden die letzten 19 Sätze des Jobstatistikfiles gedruckt. Dadurch besteht die Möglichkeit, den Benutzer auf Programm- oder Dateiänderungen hinzuweisen.

9.3 Aufbau des Jobstatistikfiles

Der Jobstatistikfile ist ein Direct-Access-File von 140 Sätzen zu 20 4-byte-Worten Länge. Er wird initiiert mit 140 Sätzen zu 20 Worten 0.

Er hat folgenden Aufbau:

Satz 1	Wort 1	Gesamtanzahl aller mit dem Jobstatistik- file durchgeführten GRUCAL-Läufe
Satz 2 - Satz 100		
	Wort 1 + 2	Benutzer, erste 6 Zeichen des Jobnamens
	Wort 3 + 4	Datum des Jobs
	Wort 5 + 6	Anfangszeit
	Wort 7 + 8	Endzeit
	Wort 9	benötigte CPU-Zeit
	10	Größe des Arbeitsspeichers oder Fehlercode <0
	11	freier Arbeitsspeicher
	12	Anzahl Gruppen
	13	Anzahl Mischungen
	14	Gesamtanzahl aller Mat. aller Mischungen
	15 + 16	Identifikation des GRUBA-Files
	17	Datum des GRUBA-Files
	18	Anzahl Daten des SIGMN-Files
Satz 101 - Satz 120		
	Wort 1 + 2	Identifikation des GRUBA-Files
	Wort 3	Anzahl Benutzungen des GRUBA-Files
	Wort (5+6)-(19+20)	Namen der acht letzten Benutzer des GRUBA-Files, der älteste Benutzer ist in Wort 5+6 gespeichert
Satz 121		
	Wort 1	Anzahl Sätze Mitteilungen
Satz 122 - 140		
		Mitteilungen an den Benutzer.

10. Ablauf der Querschnittsberechnung

Der weder vom Programm noch von Ein-/Ausgabepuffern belegte freie Speicherplatz wird GRUCAL als Arbeitsspeicher zur Verfügung gestellt.

Die Eingabe wird mit der Inhaltsangabe des GRUBA-Files, den Angaben der Gruppensatztabelle und des Steuerfiles aufbereitet, d.h. sie wird in Form von Feldern mit Kennziffern und Indizes, die später eine leichte Verarbeitung ermöglichen, im Organisations- teil des Arbeitsspeichers gespeichert.

Bei der nachfolgenden Berechnung werden jeweils in einer Gruppe für alle Isotope einer Mischung alle im Steuerfile festgelegten Querschnitte berechnet, aus den materialabhängigen Querschnitten werden für diese Mischung die mischungs- bzw. materialsommen- abhängigen Querschnitte zusammengesetzt. Für jeweils eine Gruppe wird ein vorläufiger Gruppenblock /2/ erstellt und auf einer Hilfs- datei gespeichert. Nach Berechnung der Daten für alle Gruppen wird der endgültige SIGMN-File /2/ zusammengesetzt und ausgegeben.

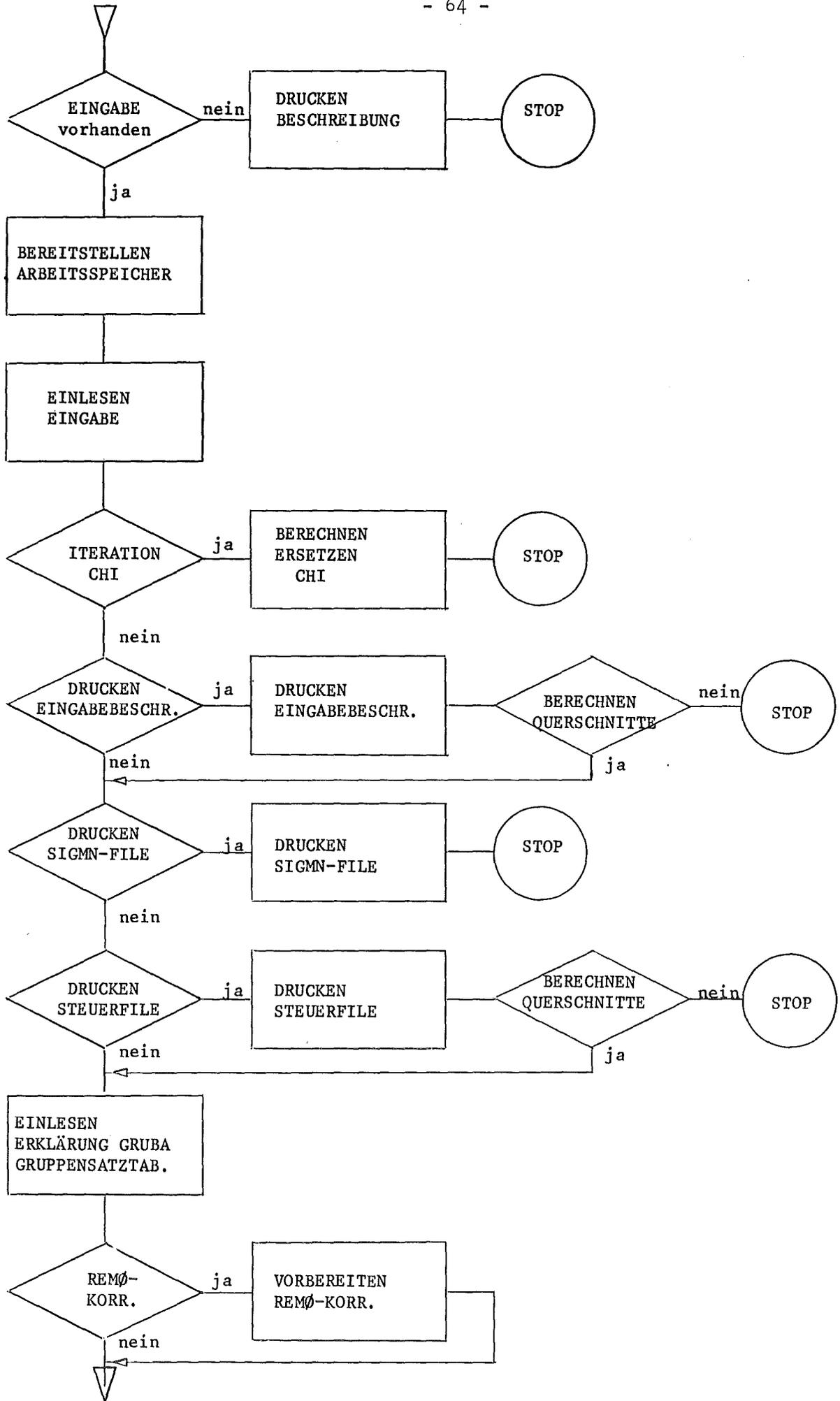
Abb. 2 zeigt den grundsätzlichen Programmablauf von GRUCAL. Liste 10 enthält die Programmstruktur von GRUCAL, Liste 11 die dazugehörige Overlay-Struktur. Liste 10 führt die in GRUCAL benutz- ten Unterprogramme mit einer Kurzerklärung ihrer Funktion auf.

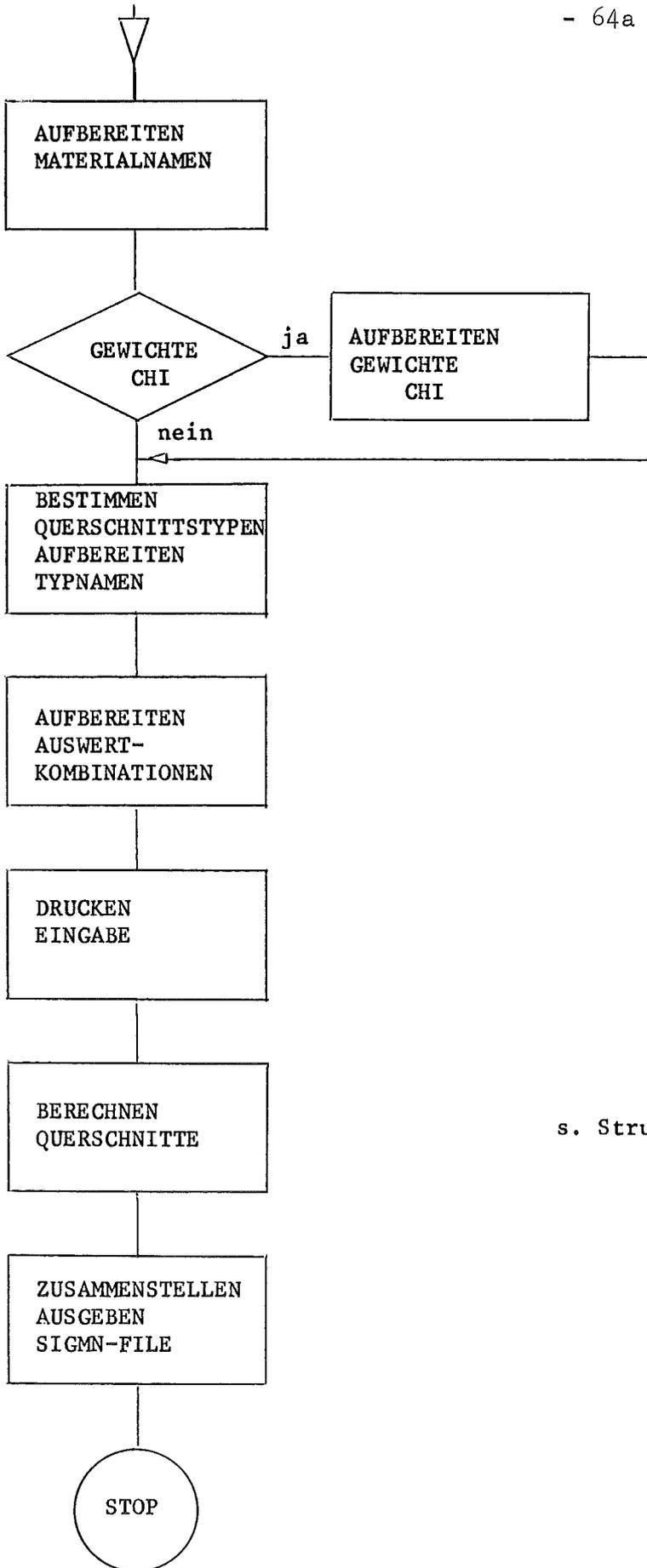
10.1 Arbeitsspeicher

10.1.1 Programmlänge und Größe des Arbeitsspeichers

Die Programmlänge in Overlay-Struktur beträgt 102 K bytes. Puffer- speicher für die Ein- und Ausgabeeinheiten 5 und 6 wird durch Er- öffnen der Dateien angelegt. Für die Puffer weiterer externer Dateien wird Speicherplatz folgender Größe freigehalten

$$\text{NBUF} + 8 + (\text{NF}-4) * 2 \text{ in K-byte}$$





s. Strukturdiagramm - Querschnittsberechnung

Abb.2: STRUKTURDIAGRAMM GRUCAL

wobei

NBUF der in der Eingabe angegebene zusätzliche
Speicherplatz für vom Standard abweichende
Blockung, default 0

und

NF die Anzahl der in dem Step deklarierten externen
Dateien (für NF < 4 wird NF = 4 gesetzt)

bedeuten.

Der verbleibende Speicherplatz wird GRUCAL als Arbeitsspeicher zur Verfügung gestellt.

Alle Felder in GRUCAL sind variabel dimensioniert, der Umfang der möglichen Rechnungen wird nur durch die Größe des zur Verfügung stehenden Speicherplatzes begrenzt.

10.1.2 Organisationsspeicher und wichtige Variable

Im Organisationsspeicher als erstem Teil des Arbeitsspeichers werden beim Aufbereiten der Eingabe Felder mit Kennziffern und Indizes für die spätere Berechnung angelegt.

Die Anfangsadressen dieser Felder im Arbeitsspeicher werden in dem labeled COMMON / GROUC / festgehalten. Liste 8 im Anhang gibt die Namen, Länge und Bedeutung der Felder an. Im ganzen Programm benutzte Variable werden ebenfalls im COMMON / GROUC / gespeichert. Ihre Namen und Bedeutung werden ebenfalls in Liste 8 erklärt.

10.1.3 Arbeitsfeld für Querschnittsberechnung

Der zu Beginn der eigentlichen Querschnittsberechnung noch freie Teil des Arbeitsspeichers wird den Rechenprogrammen als Arbeitsfeld zur Verfügung gestellt.

Die Belegung des Arbeitsfeldes mit Daten zeigt Abbildung 1.

1. Einlesen mikroskopischer Daten der Gruppe N

mikrosk. Daten der Gruppe N-1 Pointer	Daten	mikrosk. Daten der Gruppe N Daten von Pointer	GRUBA	N-1	Sek.
---	-------	---	-------	-----	------

2. Speicherung makroskopischer Daten der Gruppe N

mikrosk. Daten	Pointer für Auswert-und Misch.Daten Mischung	Hilfsfeld für materialabh. Daten jeweils einer Mischung	auswert- und mischungsabh. Daten
Pointer	Daten	Pointer	Daten
	1 2		Mischung 2 1

3. Zusammenstellen Gruppenblock aus auswert- und mischungsabhängigen Daten

Pointer für Auswert-und Misch.Daten Mischung	Gruppenblock	auswert- und mischungsabh. Daten
1 2 3 4		Mischung 4 3 2 1

Abbildung 1 Belegung des Arbeitsfeldes im Rechenteil mit Daten einer Gruppe

Die Speicherung von mikroskopischen sowie material-, mischungs- und auswert-abhängigen Daten erfolgt in Verweistechnik, d.h. ein Adressteil enthält für alle gespeicherten Daten die Anzahl Daten und ihre Adresse im Arbeitsfeld. Für mikroskopische Daten ist der Adressteil um die auf dem GRUBA-File enthaltene /1/ Verarbeitungskennziffer erweitert, für materialabhängige makroskopische Daten wird 0 gesetzt.

Der Adressteil hat folgenden Aufbau:

1. Wort Adresse der Daten im Arbeitsfeld
2. Wort Verarbeitungskennziffer bzw. 0.
 entfällt für auswert- und mischungsabhängige Daten
3. Wort Anzahl Daten

10.2 Aufbereiten der Eingabe (Abb. 2)

Die angegebenen Materialnamen werden mit Hilfe der Gruppensatz-tabelle aufbereitet und Felder mit Indizes für die Materialien angelegt.

Die vom Benutzer gewünschten Querschnittstypen werden aus den Standardtypen, Typangaben in der Eingabe sowie aus der Art der nachfolgenden Rechnung und der Wasserstoffbehandlung bestimmt. Aus den Angaben des Steuerfiles werden die zu ihrer Berechnung notwendigen Querschnittstypen und die vom GRUBA-File benötigten Typen bestimmt und in Feldern in Form von Indizes gespeichert. Die Material-Typkombinationen der Auswertangaben werden ausgewertet, dabei werden die mischungsabhängigen Querschnitte als Material-Typkombination mit Summe über alle Materialien der Mischung behandelt. Falls REMØ-Korrektur vorgenommen werden soll, wird für jede Mischung die benutzte Stoßdichte festgestellt und aus dem Programm oder der Eingabe in ein Arbeitsfeld übertragen, falls sie dort nicht bereits gespeichert ist. Aus den Angaben des Inhaltsteils

des REMØ-GRUBA-Files wird festgestellt, für welche Materialien und Gruppen REMØ-Korrektur durchgeführt werden kann. Diese Angaben werden bei von der Standardkorrektur abweichenden zusätzlichen Korrekturangaben entsprechend verändert.

10.3 Berechnung der Querschnitte

Die Berechnung der Querschnitte erfolgt gruppenweise, d.h. für jeweils eine Gruppe werden alle benötigten mikroskopischen Daten eingelesen, die vom Benutzer gewünschten makroskopischen auswertabhängigen Daten berechnet und auf eine Hilfsdatei geschrieben. (vgl. Strukturdiagramm (Abb.3) Querschnittsberechnung).

10.3.1. Bereitstellen mikroskopischer Daten für eine Gruppe

Die benötigten mikroskopischen Daten werden von GRUBA und, falls REMØ-Korrektur durchgeführt wird, von REMØ-GRUBA eingelesen und im Anschluß an die mikroskopischen Daten der vorhergehenden Gruppe im Arbeitsfeld gespeichert (vgl. Abb. 1). Gesteuert durch Angaben im GRUBA-File werden Daten aus der vorhergehenden Gruppe übernommen. Sekundärdaten, soweit vorhanden, werden im Anschluß an die mikroskopischen Daten vom GRUBA-File gespeichert und die auf die Daten verweisenden Pointer entsprechend verändert. Vor Beginn der Querschnittsberechnung in dieser Gruppe werden die mikroskopischen Daten an den Anfang des Arbeitsfeldes verschoben (vgl. Abb. 1).

10.3.2. Berechnung makroskopischer Querschnitte in einer Gruppe

Innerhalb einer Gruppe erfolgt die Berechnung der Querschnitte mischungsweise, d.h. es werden für jeweils eine Mischung zunächst die benötigten materialabhängigen makroskopischen Querschnitte für alle Materialien der Mischung berechnet und daraus die vom Benutzer gewünschten mischungs- bzw. auswertabhängigen Querschnitte (vgl. Strukturdiagramm Querschnittsberechnung). Abb. 1 erläutert die

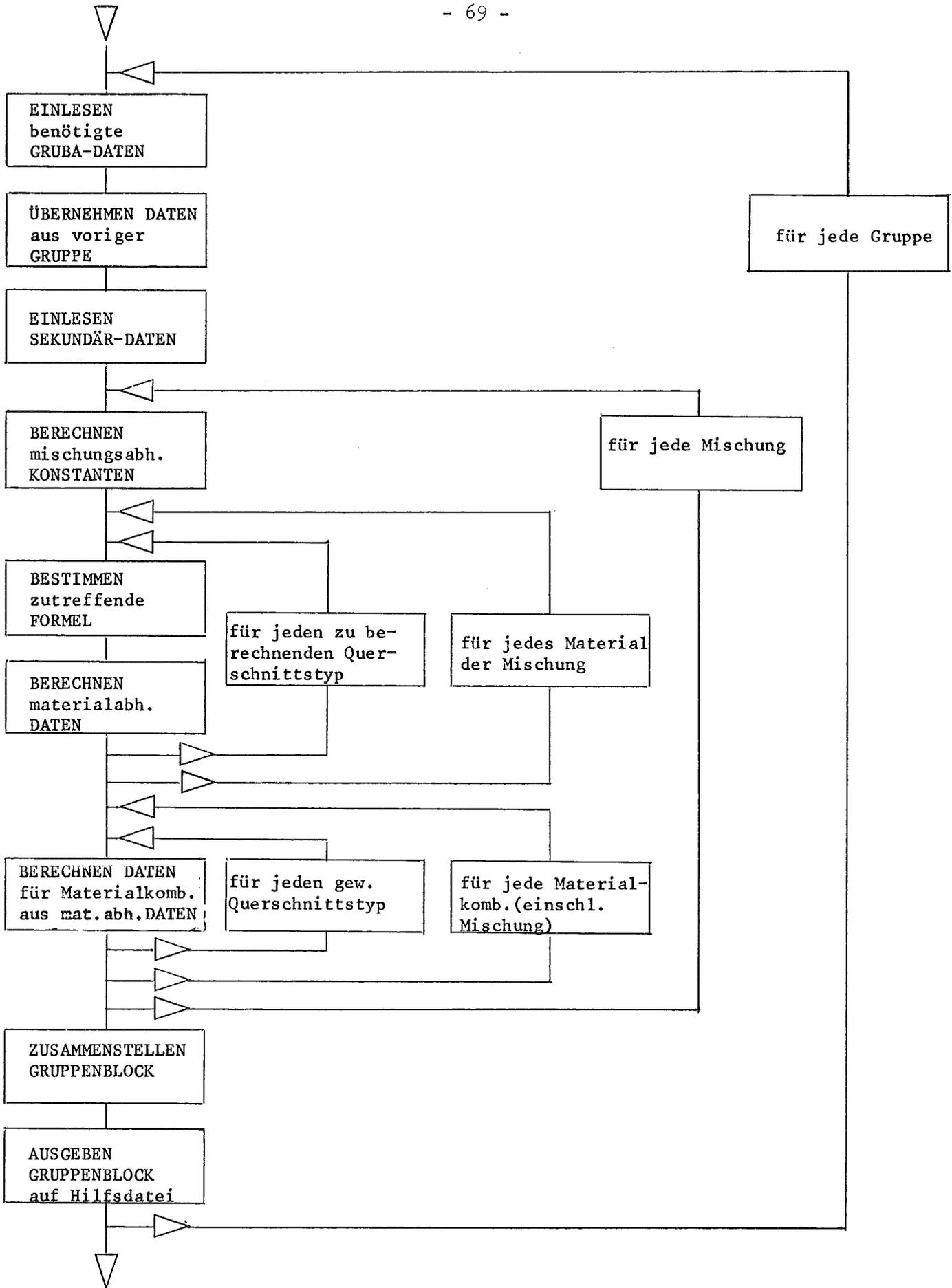


Abb. 3: STRUKTURDIAGRAMM QUERSCHNITTSBERECHNUNG

Belegung des Arbeitsspeichers mit mikroskopischen Daten und mit material- und auswertabhängigen makroskopischen Daten.

10.3.2.1 Berechnung mischungsabhängiger Konstanten

Für jede Mischung werden vor Berechnung der makroskopischen Querschnitte die totalen Wirkungsquerschnitte Σ_{tot} der Mischung sowie Σ_{tot}^i des Materials und bei Feinunterteilung der Gruppe die entsprechenden feingruppenabhängigen Daten berechnet.

Für σ_0 -Interpolation werden die Untergrundquerschnitte

$$\sigma_0^i = \frac{S_i \Sigma_{\text{tot}}^i}{N^i}$$

mit N Teilchenzahl und i,K Materialindex berechnet. Ferner werden die zur Wichtung bei Feingruppenunterteilung oder bei REMØ-Korrektur benötigten mischungsabhängigen Konstanten berechnet.

10.3.2.2 Berechnung makroskopischer materialabhängiger Daten

Für jedes Material einer Mischung wird der für den Lauf aufbereitete Steuerfile abgearbeitet.

Für jeden zu berechnenden Querschnittstyp wird die zutreffende Formelnummer bestimmt. Dazu werden für jede angegebene Formel der zu dem Querschnittstyp gehörenden Formelgruppen die im Steuerfile angegebenen Bedingungen für die zur Berechnung benutzten Querschnittstypen mit den vorliegenden Daten verglichen. Bei Übereinstimmung wird der Querschnitt mit der entsprechenden Formel berechnet und im Arbeitsfeld gespeichert. Trifft keine Formel zu, wird der Querschnitt 0. gesetzt.

10.3.2.3 Berechnung auswertabhängiger Daten

Aus den materialabhängigen Daten einer Mischung werden, entsprechend der Eingabe, Summen über ein oder mehrere Materialien der Mischung gebildet. Dabei wird der mischungsabhängige Querschnitt ebenfalls als Auswertquerschnitt mit Summe über alle Materialien der Mischung behandelt. Eine Kennziffer des Steuerfiles steuert die Art der Summation z.B. von Skalar- oder Vektortypen. Abgeschirmte mikroskopische Wirkungsquerschnitte eines Materials werden durch Division durch die Teilchenzahl des Materials gewonnen. Die auswertabhängigen Daten werden für alle Mischungen vom Ende des Arbeitsfeldes her gespeichert und stehen nach Berechnung der Daten für alle Mischungen zur Bildung des Gruppenblocks zur Verfügung. Die materialabhängigen Daten einer Mischung werden jeweils von den materialabhängigen Daten der nächsten Mischung überspeichert (vgl. Abb. 1).

10.3.3 Zusammenstellen Gruppenblock

Nach Berechnung der auswertabhängigen Daten für alle Mischungen in einer Gruppe wird in dem Teil des Arbeitsfeldes, der die materialabhängigen Daten jeweils einer Mischung enthielt, ein vorläufiger Gruppenblock in SIGMN-Struktur /2/ erstellt und auf eine Hilfsdatei geschrieben.

10.4 Erstellen SIGMN-File und Drucken makroskopischer Querschnitte

Nach Abschluß der Berechnung wird der Erklärungsteil des SIGMN-Files auf eine vom Benutzer angegebene Fortran-Einheit geschrieben. Die Gruppenblöcke mit den makroskopischen Daten jeweils einer Gruppe werden von der Hilfsdatei kopiert, in Abhängigkeit von der Kernspeichergröße sowie einer Eingabekennziffer werden sie dabei u.U. zu einem Satz mit modifizierten Adressen zusammengefaßt. Beim Kopieren der Gruppenblöcke werden die vom Benutzer in der Eingabe angegebenen Querschnittstypen für die Druckausgabe aufbereitet und ausgedruckt.

11. Erweiterung von GRUCAL um neue Querschnittstypen

Die Einführung neuer Wirkungsquerschnittstypen ist in den meisten Fällen über eine Erweiterung des Steuerfiles ohne Veränderung des Programms möglich. Sind die zu benutzenden Formeln nicht in GRUCAL enthalten, muß das Programm um die entsprechenden Formeln erweitert werden. Einprogrammierte Testmöglichkeiten erleichtern das Testen sowohl neuer Steuerfiles als auch neuer Formeln.

11.1 Erweiterung des Steuerfiles

Bei der Einführung neuer Querschnittstypen ist zunächst zu prüfen, ob der Querschnittstyp mit den in GRUCAL enthaltenen Formeln (s. Liste 2) berechnet werden kann, wobei die Berechnung auch in mehreren Schritten mit Hilfstypen nach bereits vorhandenen Formeln erfolgen kann. Sind alle benötigten Formeln in GRUCAL vorhanden, kann der Steuerfile mit dem Aufnahmeprogramm (Liste 5) erstellt und mit den in 11.3 beschriebenen Testhilfen getestet werden.

11.2 Einbringen neuer Formeln in GRUCAL

Die in GRUCAL enthaltenen Formeln sind in dem Unterprogramm IMIWQ (Liste 7) programmiert. Eine Formel dient zur Berechnung der Daten für einen Typ eines Materials einer Mischung in einer Gruppe.

Im folgenden ist die Bedeutung einiger Variablen und Felder erklärt, deren Kenntnis zur Programmierung weiterer Formeln wichtig ist:

ARB, NARB	im EQUIVALENCE stehendes Arbeitsfeld
IERK	Adresse in NARB des Erklärungsteils des zu berechnenden Materials und Typs
ISP	Anfangsadresse in ARB für die Speicherung der zu berechnenden Daten

NFØRM	Formelnummer
J1, J2, J3	Anfangsadresse in ARB für den 1., 2., 3. der Daten in der Formel benutzten
K1, K2, K3	Verarbeitungskennziffer Querschnittstyp
N1, N2, N3	Anzahl Daten
BKH	Feld der Adressen in NARB der Adressteile aller in der Formel benutzten Typen. Es enthält: NARB (BKH(I)+1) die Anfangsadresse -1 in ARB der Daten NARB (BKH(I)+2) die Verarbeitungskennziffer NARB (BKH(I)+3) die Anzahl Daten für den I.ten in der Formel benutzten Typ. Die gleichen Angaben sind für die ersten drei Typen in J1 ..., K1 ..., N1 ... enthalten.
TX	Teilchenzahl

Beim Einbringen neuer Formeln ist vorzusehen, daß die Daten aus TX, ARB(J1) ... ARB (J1+N1-1), ARB(J2) ..., ARB (J2+N2-1) usw. berechnet werden und in ARB (ISP), ARB (ISP+1) ... gespeichert werden.

Die Anzahl der berechneten Daten ist in NARB (IERK+3) zu speichern, ISP ist um die Anzahl berechneter Daten zu erhöhen.

Werden mehr als drei Querschnittstypen zur Berechnung benutzt, sind die Anfangsadressen der Daten und ihre Anzahl für den vierten und folgende Typen mit Hilfe des Feldes BKH zu bestimmen.

Als Beispiel können die in IMIWQ (Liste 7) bereits enthaltenen Formeln benutzt werden.

Im Steuerfile ist die entsprechende Benutzung der neuen Formel vorzusehen.

Soll der geänderte Steuerfile mit der neuen Formel gedruckt werden, muß sinngemäß die Druckroutine STFILE für den Steuerfile erweitert werden.

11.3 Testhilfen

Über Eingabe gesteuert können mehrere Testausdrucke bei GRUCAL-Läufen erzeugt werden. Sie erleichtern das Testen von neuen Steuerfiles und Formeln, können aber auch Hinweise bei fehlerhaften Läufen z.B. infolge inkonsistenter Daten auf GRUBA geben.

11.3.1 Inhalt des COMMON-Speichers / GROUC /

Der Inhalt des COMMON-Speichers / GROUC / wird beim Aufbereiten der Eingabe nach Durchlaufen der wichtigsten Organisationsroutinen gedruckt. Die Bedeutung der Variablen ist in Liste 8 erklärt.

11.3.2 Angabe der behandelten Gruppe

Die behandelte Gruppe wird zu Beginn der Berechnung der Daten für diese Gruppe ausgegeben. Bei fehlerhaften Läufen (Underflow, Divide Check u.a.) erhält man Information über die Gruppe, in der Fehler auftreten. Nach 11.3.3 sind dann gezielte Testausdrucke möglich.

11.3.3 Testangaben für Ablauf der Querschnittsberechnung in einer Gruppe

Für jeden Querschnittstyp eines Materials in einer Mischung werden in den ausgewählten Gruppen die Formelnummer, nach der die Berechnung erfolgt, sowie Anfangsadresse, Verarbeitungskennziffer und Anzahl der zur Berechnung benutzten Daten ausgegeben. Die Variablen entsprechen den in 11.2. erklärten Variablen. Zusammen mit dem Ausdruck des Steuerfiles liefern die Testangaben Hinweise für die Ursache der Fehler in einer Formel.

12. Aufbau des SIGMN-Files /2/

Der SIGMN-File enthält nach Gruppen geordnet die von GRUCAL berechneten makroskopischen Gruppenkonstanten für Materialien, Materialkombinationen bzw. Mischungen, im weiteren kurz Mischung. Er besteht aus einem Label-satz, einem Erklärungsteil, der Angaben über Inhalt und Aufbau des SIGMN-Files enthält, und den Gruppenteilen, die für jeweils eine Energiegruppe die makroskopischen Daten enthalten.

Es sind zwei Formen des SIGMN-Files zu unterscheiden:

1. Erklärungsteil und Gruppenteile bilden zusammen einen Satz.
2. Erklärungsteil und jeder Gruppenteil bilden je einen Satz.

In welcher Form der SIGMN-File ausgeschrieben wird, hängt von dem GRUCAL zur Verfügung stehenden Kernspeicher ab. Über Eingabe kann gesteuert werden, daß der SIGMN-File stets in mehreren Sätzen ausgeschrieben wird.

Die Gruppenkonstanten werden nach Skalar- und Vektortypen unterschieden. Skalartypen bestehen aus genau einem Wort pro Energiegruppe und Material bzw. Mischung. Vektortypen sind alle sonstigen Daten.

Die Namen der Querschnittstypen bestehen aus jeweils zwei Wörtern zu je 8 Zeichen. Das erste Wort enthält den Querschnittsnamen, der im Steuerfile festgelegt wird. Das zweite Wort kann eine Materialspezifikation enthalten, die über GRUCAL-Eingabe festgelegt wird.

12.1 Label-Satz

Der SIGMN-File beginnt mit dem Label-Satz

- | | |
|---------------|---|
| 1.Wort | 0 |
| 2. und 3.Wort | 'SIGMN ...' |
| 4.Wort | Anzahl aller Daten des SIGMN-Files (> 0 falls der SIGMN-File aus einem Satz besteht, < 0 sonst) |

12.2 Erklärungsteil

Auf den Labelsatz folgt der Erklärungsteil.

Alle angegebenen Adressen beziehen sich auf das erste Wort des Erklärungsteils, dem die Adresse 0 zugeordnet ist.

Der Erklärungsteil hat folgenden Aufbau:

1.Wort	Anzahl der Daten des Erklärungsteils
2.Wort	identisch mit dem 4.Wort des Labelsatzes
3.Wort	Anzahl der Mischungen
4.Wort	Anzahl der Energiegruppen
5.Wort	Adresse der Adresse des ersten Gruppenteils
6.Wort	Anzahl der Skalartypen
7.Wort	Adresse der Namen der Skalartypen
8.Wort	Anzahl der Vektortypen
9.Wort	Adresse der Namen der Vektortypen
10. u. f. Worte	Namen der Skalartypen
	...
	Namen der Vektortypen
	...
	Adresse jedes Gruppenteils, falls der SIGMN-File aus einem Satz bestände.

12.3 Gruppenteile

Auf den Erklärungsteil folgen für jede Energiegruppe die Gruppenteile. Die Anordnung der Typen im Erklärungsteil bestimmt in jedem Gruppenteil die Reihenfolge der Worte der Skalartypen sowie die Reihenfolge der Adressen der Vektortypen. Die Adressen im Gruppenteil beziehen sich auf das erste Wort im Erklärungsteil, falls der SIGMN-File aus einem Satz besteht, oder auf das erste Wort des jeweiligen Gruppenteils, falls jeder Gruppenteil einen Satz bildet. Ein Gruppenteil hat folgenden Aufbau:

1.Wort	Anzahl der Daten des jeweiligen Gruppenteils
2.Wort	Nummer der Energiegruppe
3.Wort	Adresse der Werte der Skalartypen
4.u.f.Worte	Adressen der Werte der Vektortypen
	...
	Werte des ersten Skalartyps für alle Mischungen
	...
	Werte des letzten Skalartyps für alle Mischungen
	Werte des ersten Vektortyps
	...
	Werte des letzten Vektortyps

12.4 Aufbau der Vektortypen

Es sind Vektortypen für Streuung sowie ein Vektortyp für Energieangaben definiert.

12.4.1. Vektortypen für Streuung

Der Vektortyp für Streuung hat innerhalb eines Gruppenteils folgenden Aufbau:

1.Wort	Streubreite $g_e \sim g_a + 1$
2.Wort	erste Gruppe, in die gestreut wird g_a
3.Wort	letzte Gruppe, in die gestreut wird g_e
4.Wort	$\Sigma g \rightarrow g_a$ für alle Mischungen
	...
	$\Sigma g \rightarrow g_e$ für alle Mischungen

wobei $\Sigma g \rightarrow j$ der Wert für Streuung aus der betrachteten Gruppe g in die Gruppe j bedeutet.

12.4.2 Vektortyp für Energieangaben

Der Vektortyp hat folgenden Aufbau:

- | | |
|---------|-----------------------------------|
| 1. Wort | $E_g \sim E_{g+1}$ |
| 2. Wort | $2/3 (E_g^{3/2} - E_{g+1}^{3/2})$ |
| 3. Wort | ΔU_g |

wobei E_g die obere Energiegrenze, E_{g+1} die untere Energiegrenze der betrachteten Gruppe, ΔU die Lethargiebreite $\ln (E_{g+1}/E_g)$ bedeuten.

Herrn J. Braun möchte ich für seine umfangreiche Unterstützung beim Testen des Programms danken.

LISTE 5 AUFNAHMEPROGRAMM FÜR STEUERFILE

```

C
C   AUFNEHMEN STEUERFILE
C
C   INTEGER SV(100),ADR(100),GR(100),NN(100),KZFM(100),A(100,5#
#),
C   1 ACRF(100),NFRM(100),B(800)
C   REAL*8 NAMEN(10),NA(400),END/8HENDE /,NH(100)
C   EQUIVALENCE (A(1),ADRF(1),SV(1)),(A(101),NFRM(1),ADR(1)),
C   1 (A(201),GR(1)),(A(301),NN(1)),(A(401),KZFM(1))
C
C   EINGABE FORMATGEBUNDEN
C
C   I=1
C
C   FUER JEDEN QUERSCHNITTSTYP
C
C   SP 1   NAME DES QUERSCHNITTSTYPS
C   6     1 NUR FUER DIFF.RECHN. 2 NUR FUER P1-RECHN.
C   3     3 NUR FUER SN-RECHN.
C   7     1 NUR NICHT H2SONDER 2 NUR H2SCNDR
C   3     3 NUR FUER REMO-KORREKTUR
C   8     1 STANDARDTYP
C   9     0 SKALARTYP 1 VEKTORTYP
C   10    1 NICHT FUER H2 2 NUR FUER H2
C   3     3 NUR FUER MAT. MIT REMO-KORREKTUR
C   11-12 FORMELGRUPPENNUMMER
C   13    ANZAHL TYPEN VON GRUBA
C   14    ANZAHL BEREITS BERECHNETE TYPEN
C   18    FORMELNUMMER FUER BERECHNUNG MISCHUNGSABH. WQ
C   1     1 MATERIALUNABHAENGIG
C   2     2 SUM(ISOTOPE)<SKALARTYPEN>
C   3     3 SUM(ISOTOPE)<VEKTORTYPEN>
C   4     4 SUM(ISOTOPE)<DIFFUSIONSKONSTANTE>
C   5     5 NICHT DEFINIERT FUER MISCHUNG
C   6     6 MAT.ABH. UNABH. CHI
C   19-23 NAMEN GRUBATYPEN
C   24-28
C   29-33 NAMEN BEREITS BERECHNETER TYPEN
C   ...*
C
C   I=1
C
C   SP 1   ENDE
C
C   SP 1   QUERSCHNITT FUER WICHTUNG
C
C   SP 1   QUERSCHNITT FUER WICHTUNG REMO
C
C   FUER JEDE FORMELGRUPPE
C
C   SP 1   ANZAHL FORMELN
C
C   FUER JEDE FORMEL
C
C   SP 1- 2 FORMELNUMMER
C   LISTE AUS GRUCAL 'GRUDRSTF' MIT STEUERFILE FORME#
C LN      3   1 NICHT FUER H2 2 NUR FUER H2
C
C
C   3 NUR FUER MAT. MIT REMO-KORREKTUR
C   4 ANZAHL BENDEETIGTER TYPEN
C   5-14 RECHTSBUENDIG
C   NUMMERN DER NAMEN DER BENDEETIGTEN TYPEN
C   15-24 RECHTSBUENDIG
C   BEDINGUNG DES JEWEILS BENDEETIGTEN TYPS
C   0 N.GE.1
C   1 N.EQ.1
C   2 N.GT.1
C   3 K.EQ.0.OR.K.EQ.3
C   4 K.EQ.1.OR.K.EQ.4
C   5 N.GE.0
C
C   I=1
C
C   SP 1   0
C
C   SP 1 NAME STEUERFILE
C   SP 9 DATUM AUFNAHME STEUERFILE
C   SP 17 TEXT
C
C   WRITE (6,6)
C   WRITE (6,20)
C   20 FORMAT ('1QUERSCHNITTSTYPEN'/
C   *'0S 00000 0000 111 11 1 12222 22222 23333'/
C   *' P 12345 6789 012 34 8 90123 45678 90123'/
C   *' ')
C   REWIND 1
C   M=0
C   IN=2
C   101 M=M+1
C   READ (5,1) NH(M),SV(M),GR(M),NN(M),KZFM(M),NAMEN
C   1 FORMAT (A5,I4,I3,I2,I4,10A5)
C   IF(NH(M).EQ.END) GO TO 110
C   WRITE (6,2) M, NH(M),SV(M),GR(M),NN(M),KZFM(M),NAMEN
C   2 FORMAT (1H ,I2,5X,A5,I5,I4,I3,I5,1H ,10A6)
C   ADR(M)=IN
C   N=NN(M)/10
C   N=NN(M)-9*N
C   IF (N.EQ.0) GO TO 101
C   DO 102 K=1,N
C   IN=IN+1
C   102 NA(IN)=NAMEN(K)
C   GO TO 101
C   110 READ (5,1) NA(1)
C   WRITE (6,11) NA(1)
C   11 FORMAT (' WICHT: ',A8)
C   READ(5,1) NA(2)
C   WRITE (6,12) NA(2)
C   12 FORMAT (' WREM: ',A8)
C   M=M-1
C   DO 111K=1,M
C   111 ADR(K)=ADR(K)+M
C   NDAT=5*M+1
C   WRITE (1) NDAT,M,((A(I,K),K=1,5),I=1,M)
C   WRITE (6,21)
C   21 FORMAT (1H1)

```

```

WRITE (6,6) NDAT,M
6 FORMAT (1H ,2I3)
WRITE (6,3) ((A(I,K),K=1,5),I=1,M)
3 FORMAT (1H ,5(I5,I4,I4,I3,I5,4X))
NDAT=IN+M
NCAT1=2*NDAT+1
WRITE (1) NDAT1,NDAT,(NH(I),I=1,M),(NA(I),I=1,IN)
WRITE (6,6)
WRITE (6,6) NDAT
WRITE (6,4) (NH(I),I=1,M)
WRITE (6,4) (NA(I),I=1,IN)
4 FORMAT (1H ,20A6)
WRITE (6,22)
22 FORMAT ('1FORMELGRUPPEN'/
*' QS      000 000000111111111122222'/
*' P      N      123 456789012345678901234'/
*' ')
M=0
IN=0
121 M=M+1
READ(5,5) NFRM(M)
5 FORMAT (I1)
IF (NFRM(M).EQ.0) GO TO 130
WRITE (6,6) M,NFRM(M)
ADPF(M)=IN
N=NFRM(M)
DO 122 I=1,N
READ (5,7) (B(IN+K),K=1,4)
7 FORMAT (I3,I1,I10,I10)
WRITE (6,8) (B(IN+K),K=1,4)
8 FORMAT (11X,I4,I2,I10,I10)
122 IN=IN+4
GO TO 121
130 M=M-1
N=2*M+1
DO 131 I=1,M
131 ADRF(I)=ADRF(I)+N
NCAT=N+IN
WRITE (1) NDAT,M,((A(I,K),K=1,2),I=1,M),(B(I),I=1,IN)
WRITE (6,21)
WRITE (6,6) NDAT,M
WRITE (6,9) ((A(I,K),K=1,2),I=1,M)
9 FORMAT (1H ,15(I4,I2,2X))
WRITE (6,10) (B(I),I=1,IN)
10 FORMAT (1H ,4(2I4,2I10,2X))
READ(5,13) (NA(I),I=1,10)
13 FORMAT(10A8)
M=20
WRITE(1) M,(NA(I),I=1,10)
WRITE (6,14) (NA(I),I=1,10)
14 FORMAT ('OSTEUERFILE ',A8/' VOM ',A8/' O',8A8)
STCP
END

```

LISTE 6 AUFNAHMEPROGRAMM FÜR GRUPPENSATZTABELLE

<pre> VERWALTEN GRUPPENSATZTABELLE REAL*8 F(1140) EINGABE K1 EINHEIT GRUPPENSATZTAB. ALT EINHEIT GRUPPENSATZTAB. # NEU S10 GRUPPENSATZ AUFNEHMEN K10 'GENER ' GRUPPENSATZNAME K11 MATNAME1/V MATNAMECHI ANZ.MAT (MATNAMEN) S20 GRUPPENSATZ LOESCHEN K20 'DROP ' GRUPPENSATZNAME I=1 S30 MATERIALIEN AUFNEHMEN K30 GRUPPENSATZNAME 'GENER ' K31 ANZ.MAT (MATNAMEN) S40 MATERIALIEN LOESCHEN K40 GRUPPENSATZNAME 'DROP ' K41 ANZ.MAT (MATNAMEN) K50 'END ' ' ' ' LDIM=1140 NTOUT=6 NTIN=8 CALL FREEFD (5,NTIN,NTOUT,F,F,F) NMATM=100 NGRS=10 LNGRS=1 LN1V=LNGRS+NGRS LNCHI=LN1V+NGRS LF=LNCHI+NGRS LNMAT=LF+NMATM LN=LNMAT+NGRS*NMATM IF(LN+(NGRS+1)/2.GT.LDIM) GO TO 100 CALL GRSTAB (NTIN,NTOUT, NMATM,NGRS,F(LNGRS),F# #(LN1V), *F(LNCHI),F(LF),F(LNMAT),F(LN)) 102 STOP 100 WRITE (NTOUT,101) 101 FORMAT ('OFELDUEBERLAUF') GO TO 102 END </pre>	<pre> SUBROUTINE GRSTAB (NTIN,NTOUT, NMATM,NGRS,NAME# #,N1V, * NCHI,FELD,MAT,NMAT) C INTEGER*4 NMAT(2) REAL*8 NAME(2),N1V(2),NCHI(2),MAT(NMATM,NGRD),FELD(2), * NAMI,NAM2,GENER/'GENER '/,DROP/'DROP '/,BLANK/' # '/' * END/'END '/ C READ (NTIN) NTGRS,NTGRSN IF (NTGRS.NE.0) REWIND NTGRS IF(NTGRS.GT.0) GO TO 10 NGRS=0 NGRSG=0 GO TO 20 C 10 READ (NTGRS) I,NGRS NGRSG=NGRS C DO 1 IGRS=1,NGRS READ (NTGRS) I,NAME(IGRS),N1V(IGRS),NCHI(IGRS),N, * (MAT(I,IGRS),I=1,N) 1 NMAT(IGRS)=N C 20 READ(NTIN) NAMI,NAM2 C IF(NAMI.NE.GENER) GO TO 21 NGRS=NGRS+1 NGRSG=NGRSG+1 NAME(NGRSG)=NAM2 READ(NTIN) N1V(NGRSG),NCHI(NGRSG),N,(MAT(I,NGRSG),I=1,N) NMAT(NGRSG)=N IF(N.GT.NMATM) GO TO 990 IF(NGRSG.GT.NGRD) GO TO 990 GO TO 20 C 21 IF(NAMI.NE.DROP) GO TO 22 IF(NGRS.EQ.0) GO TO 999 DO 31 IGRS=1,NGRSG IF(NAME(IGRS).EQ.NAM2) GO TO 32 31 CONTINUE GO TO 20 32 NAME(IGRS)=BLANK NGRS=NGRS-1 GO TO 20 C 22 IF(NAMI.EQ.END) GO TO 61 IF(NGRS.EQ.0) GO TO 999 DO 41 IGRS=1,NGRSG IF(NAME(IGRS).EQ.NAM1) GO TO 42 41 CONTINUE GO TO 999 C 42 IF(NAM2.NE.GENER) GO TO 23 N=NMAT(IGRS) READ(NTIN) N1,(MAT(N+I ,IGRS),I=1,N1) NMAT(IGRS)=NMAT(IGRS)+N1 </pre>
--	--

```

        IF(NMAT(IGRS).GT.NMATM) GO TO 990
        GO TO 20

23 IF(NAM2.NE.DROP) GO TO 999
    READ(NTIN) N1,(FELD(I),I=1,N1)
    IF(N1.GT.NMATM) GO TO 990
    N=NMAT(IGRS)
    DO 51 I=1,N1
    DO 52 K=1,N
    IF(MAT(K,IGRS).EQ.FELD(I)) GO TO 53
52 CONTINUE
    GO TO 51
53 IF(K.EQ.N) GO TO 55
    K1=K+1
    DO 54 K=K1,N
54 MAT(K-1,IGRS)=MAT(K,IGRS)
55 N=N-1
51 CONTINUE
    NMAT(IGRS)=N
    GO TO 20

990 WRITE (NTOUT,991)
991 FORMAT('ODIMENSION ZU KLEIN')
99 STCP

999 WRITE (NTOUT,998)
998 FORMAT('OFEHLER')
GO TO 99

61 WRITE (NTOUT,101)
101 FORMAT('IGRUPPENSATZTABELLE/' ' ')
    IF (NTGRSN.NE.0) REWIND NTGRSN
    I=1
    IF(NTGRSN.NE.0) WRITE (NTGRSN) I,NGRS
    DC 62 IGRS=1,NGRS
    IF(NAME(IGRS).EQ.BLANK) GO TO 62
    N=NMAT(IGRS)
    WRITE (NTOUT,102) NAME(IGRS),NIV(IGRS),NCHI(IGRS),N
    WRITE (NTOUT,103) (MAT(I,IGRS),I=1,N)
102 FCRMAT('0GRUPPENSATZ ',A8/' 1/V VON ',A8,5X,'CHI VON #
# ',A8/
*/3X,I3,' MATERIALIEN')
103 FORMAT (10(3X,A8))
    I=7+2*N
    IF(NTGRSN.NE.0) WRITE(NTGRSN) I,NAME(IGRS),NIV(IGRS),NCHI(
#IGRS),
* N,(MAT(I,IGRS),I=1,N)
62 CCNTINUE
    RETURN
    END

```

MAKROSKOPISCHE QUERSCHNITTE FUER EINE GRUPPE FUER EINE MIS# C
CHUNG #

SUBROUTINE IMIWQ (ARB,NARB,BKH,WGR,BE,BST,BEST,BEST2,BS#,B#
#H,
1 SNC,SNV,WGR15,KSTD,STD)

REAL*4 ARB(2),TZM(2),TEMPM(2),WGR(2),BE(2),BST(2),BEST(2),
1 BEST2(2),BSC(2),BH(2),WGR15(2),CGEWM(2),STD(2)
INTEGER*4 NARB(2),MATM(2),BKH(2),SNC(2),SNV(2),KSTD(2)
LCGICAL*4 H2,STR197
EXTERNAL SUM2,SUM3,SUM6,SUM7

COMMON /GROUC/ KP(200)
EQUIVALENCE (NTYPB,KP(30)),(IERK,KP(150)),(ISP,KP(149)),
1 (NFORM,KP(148)),(NTB3,KP(147)),(LWQG,KP(106)),(IMAT,KP(47#
#)),
2 (ITYP,KP(48)) , (J1,KP(62)),(K1,KP(63)),(N1,KP(6#
#4)),
4 (J2,KP(65)),(K2,KP(66)),(N2,KP(67)),(J3,KP(68)),(K3,KP(69#
#)),
5 (N3,KP(70)),(M,KP(61)),(MST,KP(41)),(NGR,KP(18)),(TX,KP(1#
#46)),
6 (NTYPK,KP(17)),(LWQMI,KP(120)),(NTOUT,KP(33)),
7 (IMISCH,KP(38)),(IGR,KP(34)),(ISPA,KP(139)),(IERR,KP(55))#
#,
8 (NAKM2,KP(135)),(JERR,KP(52)),(NMICHI,KP(161)),
9 (MSTR,KP(198)),(NERRCD,KP(59)),(NAMERR,KP(57)),(NMREM,KP(#
#175))

NTB3=3*NTYPB
RETURN

ENTRY MIWQ (NM,MATM,TZM,TEMPM,CGEWM,NMCM,*)

IERR=0
I1=JERR/1000
I2=JERR-I1*1000
IF(IGR.GE.I1.AND.IGR.LE.I2) IERR=1

IERK=LWQMI+NAKM2-3
ISP=IERK+3*NTYPK*NM+4
MATERIALSCHLEIFE
DO 10 IMAT=1,NM
IF (IERR.EQ.1) WRITE (NTOUT,300) IGR,IMISCH,IMAT
300 FORMAT (' IGR',I5,' IMISCH',I4,' IMAT',I5)
TX=TZM(IMAT)
TYPSCHEIFE
DO 20 ITP=1,NTYPK
IERK=IERK+3
NARB(IERK+1)=ISP-1
NARB(IERK+2)=0
NARB(IERK+3)=0
IF(TX .EQ.0) GO TO 20
BESTIMMEN FORMEL
CALL FCRMNR(MATM(IMAT))

IF(NFORM.EQ.0) GO TO 20
SETZEN DATENADRESSEN J, VERARBEITUNGSKENNZIFFERN K, ANZAHL#
DATEN N

I1=BKH(1)
J1=NARB(I1+1)+1
K1=NARB(I1+2)
N1=NARB(I1+3)
IF(IERR.EQ.1) WRITE (NTOUT,302) ITP,NFORM,J1,K1,N1
302 FORMAT (' ITP',I4,' NFORM',I4,' J1',I6,' K1',I3,' #
N1',I5)

IF(M.EQ.1) GO TO 40
I1=BKH(2)
J2=NARB(I1+1)+1
K2=NARB(I1+2)
N2=NARB(I1+3)
IF (IERR.EQ.1) WRITE (NTOUT,303) J2,K2,N2
303 FORMAT ('+',T57,'J2',I6,' K2',I3,' N2',I5)

IF(M.EQ.2) GO TO 40
I1=BKH(3)
J3=NARB(I1+1)+1
K3=NARB(I1+2)
N3=NARB(I1+3)

IF (IERR.EQ.1) WRITE (NTOUT,304) J3,K3,N3
304 FORMAT ('+',T90,'J3',I6,' K3',I3,' N3',I5)
C
40 CONTINUE
GO TO (101,102,103,104,105,106,107,108,109,110,111,112,113#
#,114,
1 115,116,117,118,119,120,121,122,123,124,125,126,127,128,1#
#29,130,
2 131,132,133,134,135,136,137,138,139,140,141,142),NFORM

C
101 ARB(ISP)=FFAKT(ARB(J1),BS((IMAT),TEMPM(IMAT))
IF(ARB(ISP).LT.0.0) RETURN 1
GO TO 201

C
102 ARB(ISP)=TX*ARB(J1)
GO TO 201

C
103 ARB(ISP)=TX*ARB(J1)*ARB(J2)
GO TO 201

C
104 ARB(ISP)=TX*SUM2(ARB(J1))
GO TO 201

C
105 ARB(ISP)=TX*SUM4(ARB(J1))
GO TO 201

C
106 ARB(ISP)=TX*SUM6(ARB(J1))
GO TO 201

C
107 ARB(ISP)=TX*SUM5(ARB(J1))
GO TO 201

C
108 ARB(ISP)=TX*SUM7(ARB(J1),ARB(J2))
GO TO 201

C
109 ARB(ISP)=TX*SUM6(ARB(J1))

```

GO TO 201
110 CALL MATR1 (1.0, &20)
GO TO 202
111 CALL MATR2 (SUM3, &20)
GO TO 202
112 CALL MATR3 (1.0, SUM2, &20)
GO TO 202
113 CALL MATR1 (ARB(J3), &20)
GO TO 202
114 CALL MATR3 (ARB(J3), SUM2, &20)
GO TO 202
115 CALL MATR2 (SUM7, &20)
GO TO 202
116 CALL MATR3 (ARB(J3), SUM6, &20)
GO TO 202
117 IF(N1.EQ.0) GO TO 20
CALL SUMSTR
GO TO 201
118 ARB(ISP)=WGR(IGR+1)*ARB(J1)
GO TO 201
119 ARB(ISP)=ARB(J1)*ARB(J2)
GO TO 201
120 CALL SUMWQ
GO TO 201
121 ARB(ISP)=ARB(J1)-ARB(J2)
GO TO 201
122 ARB(ISP)=ARB(J1)
GO TO 201
123 IF(ARB(J1).EQ.0.0) GO TO 20
ARB(ISP)=.33333333/ARB(J1)
GO TO 201
124 CALL SUMMTR
GO TO 20
125 CALL UEMTR(1.0)
GO TO 203
126 CONTINUE
127 IF(IGR.EQ.NGR) GO TO 20
I1=IGR+1
NARB(ISP)=I1
DC 236 I2=I1, NGR
ISP=ISP+1

```

```

IF(INFORM.EQ.26) ARB(ISP)=ARB(J1)*(WGR(I2)-WGR(I2+1))
IF(INFORM.EQ.27) ARB(ISP)=ARB(J1)*0.66666666*(WGR15(I2)
1-WGR15(I2+1))
236 CONTINUE
ISP=ISP+1
NARB(IERK+3)=NGR-I1+1
GO TO 20
C
128 ARB(ISP)=1.-ARB(J1)
GO TO 201
C
129 CALL UEMTR(2.0)
GO TO 203
C
130 ARB(ISP)=ARB(J1)*0.66666666* WGR15(IGR+1)
GO TO 201
C
131 ARB(ISP)=WGR(IGR)-WGR(IGR+1)
ARB(ISP+1)=0.66666666*(WGR15(IGR)-WGR15(IGR+1))
ARB(ISP+2)=ALOG(WGR(IGR+1)/WGR(IGR))
ISP=ISP+3
NARB(IERK+3)=3
GO TO 20
C
132 CALL UEMTR (TX)
GO TO 203
C
133 ARB(ISP)=TX*ARB(J1)*ARB(J2)*ARB(J3)
GO TO 201
C
134 I1=BKH(1)+(SNV(IMISCH)-MATM(IMAT))*NTB3
J1=NARB(I1+1)+1
ARB(ISP)=ARB(J1)
GO TO 201
C
135 IF (NMICHI.EQ.0) GO TO 251
IF(NMMC.EQ.0) GO TO 251
IF(CGEMM(IMAT).NE.0.0) GO TO 252
ARB(ISP)=-ARB(J1)
IF(N1.EQ.0) ARB(ISP)=0.
GO TO 201
252 ARB(ISP)=CGEMM(IMAT)*ARB(J1)
GO TO 201
251 I1=BKH(1)+(SNC(IMISCH)-MATM(IMAT))*NTB3
J1=NARB(I1+1)+1
ARB(ISP)=ARB(J1)
GO TO 201
C
136 IF(STR197(MATM(IMAT)))GO TO 239
IF((NARB(J1)+N1-1).GT.196) N1=196-NARB(J1)+1
239 CALL UEMTR (1.0)
GO TO 203
C
137 J2=IGR+2-NARB(J1)
IF (IGR.EQ.NGR.OR.J2.LE.0) GO TO 20
ARB(ISP)=ARB(J1+J2)
GO TO 201
C

```

```

138 ARE(ISP)=TX*SUM8 (ARB (J1))
GC TO 201

139 ARB(ISP)=TX*SUM9 (ARB (J1),ARB (J2))
GC TO 201

140 CALL WQJ
GC TO 200

141 SZ=0.
SN=0.
N=N2/MST
J5=KSTD (IMISCH)
J4=1

DC 261 I1=1,N
J5=J5+1
SZ=SZ+SUM10 (ARB (J1),ARB (J2),BEST (J4) )*STD (J5)
SN=SN+SUM1 (BEST (J4) )*STD (J5)
J1=J1+MST
J2=J2+MST
261 J4=J4+MST
ARE (ISP)=TX*SZ/SN
GC TO 201

142 CALL MATR1 (ARB (J3),&20)

J3=ISP-N2-1
J1=J3+2+IGR-NARB (J3)
IF (J1.LE.J3.OR.J1.GT.(J3+N2) )GO TO 262
I1=BKH (4)
J2=NARB (I1+1)+1
ARE (J1)=ARB (J2)
GO TO 202

262 NERRCD=19
NAPERR=IGR
RETURN 1

201 ISP=ISP+1
NARB (IERK+3)=1
GC TO 200

202 NARB (IERK+3)=N2
GC TO 200

203 NARB (IERK+3)=N1
GC TO 200

204 CCNTINUE
ENDE TYPSCHEIFE
104 CCNTINUE
ENDE MATERIALSCHLEIFE

CALL TADRA (ISP,ISPA,6999)
IF (NMREM.GT.0) KSTD (IMISCH)=KSTD (IMISCH)+MSTR/MST
RETURN

```

```

999 RETURN 1
C
END

```

LISTE 8 BEDEUTUNG der in GRUCAL benutzten VARIABLEN und POINTER
im COMMON-Speicher /GROUC/

Die Uebertragung der Variablen und Pointer erfolgt ueber einen labeled Commonspeicher /GROUC/ mit 210 4-byte -Worten. Die folgende Liste enthaelt die Adressen der Variablen und Pointer im Commonspeicher, ihre Namen bei Zuordnung ueber ein Equivalencestatement, ihre Bedeutung, sowie die Laengen der zu den Pointern gehoerenden Felder.

Pointernamen sind im allgemeinen durch den Anfangsbuchstaben L gekennzeichnet, der Name des dazugehoerigen Feldes bei Uebertragung in Unterprogramme entspricht dem Pointernamen ohne fuehrendes L .

In Klammern gesetzte Groessen geben den jeweiligen Inhalt der Variablen an.

Adr. Name Feldlaenge Bedeutung

Adr.	Name	Feldlaenge	Bedeutung
1	IDGR		Identifikation GRUBA-File
2			8-byte-Wort
3	NTWQD		Fortraneinheit fuer zu druckenden SIGMN-File
4	NDSMN		Anzahl Daten SIGMN-File
5	NTG		Fortraneinheit GRUBA-File
6	NTWQ		Fortraneinheit SIGMN-File
7	NTH		Fortraneinheit Hilfsfile
8	NMP		Kennziffer M(0)-P1(1)-SN(2)-Rechnung
9	NMISCH		Anzahl Mischungen
10	LH		max. belegte 4-byte-Adresse im Arbeitsspeicher
11	NMMG		Gesamtanzahl Mat. aller Mischungen
12	NZT		Anzahl Zusatz(>0), allein.<0) Typen
13	NSFL		Anzahl Sekundaerfiles
14	NMTK		Anzahl Mat.-Typ.-Kombinationen
15	NMSG		Gesamtanzahl Auswertmat., ueber die summiert wird
16	NGRS		Anzahl Gruppensaetze in Gruppensatztab.
17	NTYPK		Anzahl Querschnittstypen auf Kontrollfile
18	NGR		Anzahl Gruppen
19	NMATG		Anzahl Mat. auf GRUBA
20	NTYPG		Anzahl Typen auf GRUBA
21	NDTM		Datum des GRUBA-Files
22	NMATB		Anzahl von GRUBA benoetigter Mat.
23	NST		max. Anzahl Stuetzstellen
24	NH2		Kennziffer keine(0), H2-Sonderbehandlung (1)
25	NT2N		Kennziffer SIGMN-File 2(0), NGR+1 Saetze (1)
26	NVEKT		Anzahl gewuenschte Vektortypen
27	NSKAL		Anzahl gewuenschte Skalartypen
28	NSKV		NVEKT+NSKAL
29	NZTB		Anzahl zu berechnender Typen
30	NTYPB		Anzahl von GRUBA benoetigter Typen
31	NWQA		Anzahl aus Gruba ausgewaehlter Daten
32	NTIN		FREEFO-Einheit Eingabe
33	NTOUT		Fortraneinheit Ausgabe

34	IGR		laufende Gruppennummer
35	LDIM		Feldlaenge Arbeitsspeicher
36	NMMAX		max. Anzahl Mat. pro Mischung
37	LDARB		Feldlaenge Arbeitsfeld ARB fuer WQ ohne Organisationspeicher
38	IMISCH		laufende Mischungsnummer
39	NUBWQ		Kennziffer keine (0), Datenuebern.(1) aus voriger Gruppe
40	ISTOT		Index SIGMATOT fuer Wichtung
41	MST		Anzahl Stuetzpunkte der Gruppe
42	SEST		SUM DE/STOT der Mischung
43	SEST2		SUM DE/STOT**2 der Mischung
44	MATYP3		3*NMATB*NTPB
45	EMT		mittlere Energie der Gruppe
46	DE		DE der Gruppe
47	IMAT		laufende Matnummer in der Mischung
48	ITYP		laufende Typnummer
49	NIH2		Anzahl Mat. mit H2-Sonderbehandlung
50	N197		Anzahl Mat. mit Streuung ueber Gruppe 197
51	NTSTF		Fortraneinheit Steuerfile
52	IERR		Kennwort Fehlerausdruck
53	N		Uebertragung Anzahl Daten
54	I1		Uebertragung Anzahl Daten
55			
56	NDRINP		Kennziffer nicht(0), Drucken(1), und Rechnen (2) Eingabebesreibung
57	NAMERR		Name fuer Fehlerausgang
58			8-byte-Wort
59	NERRCD		Fehlercode
60	NINDI		Index Einleseblock (KAPROS)
61	M		Anzahl fuer jeweilige Formel benoetigte Typen
62	J1		Anfangsadresse
63	K1		Verarbeitungskennz. Daten 1.Typ
64	N1		Anzahl
65	J2		
66	K2	s.o.	Daten 2.Typ
67	N2		
68	J3		
69	K3	s.o.	Daten 3.Typ
70	N3		
71	LMNMM	NMISCH	Anzahl Mat. pro Mischung
72	LMAGRS	2*NMISCH	Gruppensatzname fuer jede Mischung
73	LMAC	2*NMISCH	Matname CHI fuer jede Mischung
74	LMAV	2*NMISCH	Matname 1/V fuer jede Mischung
75	LMAM	2*NMMG	Matnamen aller Mat. aller Misch.
76	LMTP	NMMG	Temperaturen aller Mat.
77	LMTZ	NMMG	Teilchenzahlen aller Mat.
78	LTA	2*NZT	Namen Zusatz/allein. Typen
79	LSN	NSFL	Fortraneinheiten Sekundaerfiles
80	LAAT	2*NMTK	Typnamen fuer Mat.Typ.Kombination
81	LANMS	NMTK	fuer jede Mat.Typ.Komb. Anzahl Mat., ueber die summiert wird
82	LAAL	2*NMTK	Labelname fuer Mat.Typ.Kombination
83	LAKTZ	NMTK	Kennziffer Teilchenzahl N (0), 1. (1) fuer jede Mat.Typ.Komb.
84	LAAMS	2*NMSG	Namen Mat., ueber die summiert wird

fuer jede Mat.Typ.Komb.

Felder zu 85 bis 89 werden nur temporaer angelegt			
85	LGN	NGRS	Anzahl Mat. pro Gruppensatz
86	LGAV	2*NGRS	Matname 1/V fuer jeden Gruppensatz
87	LGAC	2*NGRS	Matname CHI fuer jeden Gruppensatz
88	LGAM		Matnamen aller Gruppensaetze
89	LGA	2*NGRS	Gruppensatznamen
90	LKNA	N	Kennziffern des Kontrollfiles
91	LKANA	2*N	Namen des Kontrollfiles
92	LKNF	N	Kennziffern Formeln des Kontrollfiles
93	LWGR	NGR	Gruppengrenzen
94	LWAM	2*NMATG	Namen Mat. auf GRUBA
95	LWAT	2*NTYPG	Namen Typen auf GRUBA
96	LST	NGR	Anzahl Stuetzstellen pro Gruppe
97	LSAM	2*NMMG	benutzte Matnamen aller Mat.
98	LSNC	NMISCH	Nummer Mat. fuer CHI fuer alle Misch.
99	LSNV	NMISCH	Nummer Mat. fuer 1/V fuer alle Misch.
100	LSNM	NMMG	Nummern aller Mat.
101	LSMB	NMATG	Kennziffern von GRUBA ben. (>0), nicht ben. (0) Mat.
102	LTAT	2*NTYPK	Namen gewuenschte Typen
103	LTNT	NTYPK	Nummern in KANA der zu berechn.Typen
104	LTTB	NTYPG	Kennziffern von GRUBA ben.(>0), nicht ben. (0) Typen
105	LTKNA	N	Namen in KANA d. Nummern ersetzt
106	LWQG		Pointer auf GRUBA-Satz in ARB
107	LWQ		Pointer von GRUBA ausgewaehlte Daten
108	LBSOIP	8	0. 10. 100. ... 10000000.
109	LBE	NST	Stuetzpunktenergien
110	LBST	NST	SIGMATOT an Stuetzpunkten
111	LBEST	NST	DE/SIGMATOT,an Stuetzpkt.
112	LBEST2	NST	DE/(SIGMATOT)**2 an Stuetzpunkt
113	LBSO	NMMAX	SIGMA0 fuer Mat.
114	LBH	NMMAX	SIGMATOT fuer Mat.
115	LBKH	10	Adressen Erklaerungsteil der fuer Formel benutzten Typen
116	LBKH1	10	Hilfsfeld
117	LARB	LDIM-LARB	Arbeitsfeld ARB fuer Querschnitte
118	LIH2	N197	Nummer Mat. mit Sonderbehandl. H2, Ueberstreuung ueber Gruppe 197
119	LWGR15	NGR	Gruppengrenzen **1.5
120	LWQMI		Pointer makrosk.isotopabh.WQ in ARB
121	LAATG	4*NAK	Namen der auszugebenden Typen fuer jede Auswertkombination
122	LAKTZG	NAK	Kennziffer Teilchenzahl 1 (1) , N (0) fuer jede Auswertkomb.
123	LANRT	NAK	Nummer des berechneten Typs
124	NSIAN		Kennziffer Drucken Sekundaerinput nicht (0), alt und neu (1), neu (2)
125	LAMNM	NMISCH*NAK	Anzahl Mat. pro Misch. pro Auswertkomb.
126	LAJM	NMISCH*NAK	Adresse Matnummer pro Misch. pro Auswertk.
127	LANRM	N	Matnummern pro Misch. pro Auswertkomb.
128	LAAM	NMA	Namen aller aufgerufenen Mat.
129	LNDTL	NGR+1	Anzahl Daten pro Gruppensatz
130	NDSFL		Kennziffer nicht (0), Drucken (1)

131	NTS		Fortraneinheit Steuerfile
132	NTK3		3*NTYPK
133	NSTRM		max. Ueberstrebweite
134	NSPFR		freier Arbeitsspeicher
135	NAKM2		2*NAK*NMISCH
136	NAK2		2*NAK
137	IDE		Typnummer DE
138	IERKA		Index Erklaerungsteil Auswertung
139	ISPA		Index Daten Auswertung
140	NDTMAX		max. Gruppensatzlaenge
141	NVA		Anzahl Vektortypen Auswertung
142	NSKA		Anzahl Skalartypen Auswertung
143	NMA		Anzahl aller aufgerufenen Mat.
144	NAUSW		Kennziffer nur Auswertwq.(-1), nur Mischwq. (0), Misch. und Auswertwq. (1)
145	NAK		Anzahl Auswertkombinationen
146	TX		Teilchenzahl des berechneten Mat.
147	NTB3		3*NTYPB
148	NFORM		jeweils zutreffende Formelnummer
149	ISP		Index makrosk.isotopabh. Daten
150	IERK		Index Erklaerungsteil makrosk. isotopabh. Daten
151	LDAT	2*NDRA	Namen der Drucktypen
152	LDNUG	NDRA	untere zu druckende Gruppe
153	LDNOG	NDRA	obere zu druckende Gruppe
154	NDRA		Anzahl Drucktypen
155	NPR		Anzahl Druckkombinationen
156	LPAT	2*NPR	Namen der Druckkombinationen
157	LPNRT	NPR	Nummer Auswertk. fuer jede Druckk.
158	LPTYP	NPR	Kennziffer Skalar(1), Vektor(3), DE (4)
159	LPUG	NPR	untere zu druckende Gruppe fuer jede Druckkombination
160	LPOG	NPR	obere zu druckende Gruppe fuer jede Druckkombination
161	NMICH1		Kennziffer fuer Wichtung CHI keine (0) Wichtung (NMISCH)
162	LCNMM	NMICH1	Anz.Mat. pro Misch. fuer Gewichte CHI
163	LCMAM	Sum.LCNMM	Matnamen fuer Gewichte CHI
164	LCGEW	Sum.LCNMM	Gewichte
165	LCGEWM	Sum.LCNMM	Materialnummern
166	NTFL		Fortraneinheit Fluesse
167	ICHI		Pointer materialabh.CHI
168	INUSF		Pointer materialabh.NUSF
169	NMSP		Anzahl Spaltmaterialien
170	ICHIG		Pointer mischungsabh. CHI
171	IDREM		Identifikation REMO-GRUBA
172			
173	NGRREM		Anzahl Gruppen REMO-GRUBA
174	NTREM		Fortraneinheit REMO-GRUBA
175	NMREM		Anzahl Mischungen mit REMO
176	LMREM	NMREM	Nummern der Mischungen mit REMO
177	LAREM	2*NMREM	Namen Stossdichte fuer Misch. mit REMO
178	NREMB		Anzahl Aenderungen Standard-REMO
179	LRBMI	NREMB	Kennziffern Misch. Aenderung
180	LRBMAT	NREMB	Anzahl Materialangaben fuer jede Aenderung
181	LRAMAT	2*MMGR	Kennwort Materialangabe
182	LRBU	MMGR	Kennziffer erste Gruppe

183	LRBO	NMMGR	Kennziffer letzte Gruppe
184	NSTDE		Anzahl Stossdichten Eingabe
185	LASTDE	2*NSTDE	Namen Stossdichte Eingabe
186	LNDSTE	NSTDE	Anzahl Daten jeder Stossdichte Eingabe
187	LSTDE		Stossdichten
188	LRST	NGR	Anzahl Stuetzstellen fuer REMO
189	NDTREM		Datum REMO-GRUBA
190	NSTD		Anzahl benutzte Stossdichten
191	LDIMH		temporaere maximale Feldlaenge
192	LNDST		Anzahl Daten fuer jede Stossdichte
193	LSTD		benutzte Stossdichten
194	LKSTD	NMISCH	Anfangsadressen benutzte Stossdichten
195	LMGRU	NMMG	erste Gruppe REMO fuer alle Mat.aller Misch.
196	LMGRO	NMMG	letzte Gruppe REMO fuer alle Mat.aller Misch.
197	LNRSTD	NMISCH	Nummern Stossdichte fuer alle Misch. falls kein REMO in der Misch (0)
198	MSTR		max. Anzahl Stuetzstellen REMO
199	ISTOTR		Index SIGMA tot fuer REMO
200	LRMTF	NMMAX	Kennziffern REMO fuer alle Mat.einer Misch. keine (0) , REMO (1) in der Gruppe
201	LWAMR	2*NMATR	Namen Materialien auf REMO-GRUBA
202	NMATR		Anzahl Materialien auf REMO-GRUBA
203	LMBER	NMMG	Kennwort REMO fuer alle Mat.aller Misch. REMO (1) , auch fuer Sekundaerdaten (0) kein REMO (-1)
204	LASTDB	NMISCH	Namen benutzte Stossdichten
205	LKSTH	NMISCH	Hilfsfeld Anfangsadressen Stossdichten

LISTE 9 In GRUCAL benutzte UNTERPROGRAMME

NAME	TYP	ENTRY	GERUF. SUBROUT.	BESCHREIBUNG
-----+-----+-----+-----+-----				
MAIN	Subr.		PRINPT PUFFER FREESP XTAREA JBKNTR FREE72 CNN GRUCAL PRNEW CCERR	Steuerprogramm Bereitstellen Arbeitsspeicher, Jobueberwachung Drucken Eingabebesreibung Umwandeln Eingabedaten Berechnen, Drucken Querschnitte
PRINPT	Subr.			Drucken Eingabebesreibung
PUFFER	Subr.		DDFIND	Feststellen benoet. Pufferspeicher
DDFIND	Subr.			Bestimmen Anzahl Dateien
FREESP	Subr.			Bestimmen freien Speicherplatz
XTAREA	Subr.Ass			Zuordnen Arbeitsspeicher
JBKNTR	Subr.	JBK JBKEND JBKERR PRNEW	RAC DATUM JOBNAM ZEIT	Fuehren Jobstatistik mit Gruppensatzstatistik Drucken GRUCAL-News
RAC	Subr.			Sperrern DA-Dateien
JOBNAM	Subr.Ass			Holen Jobname
FREE72	Subr.			Umwandeln free-formatted Eingabe
CON	Subr.	CNN		Umwandeln A-Format - Festkomma
GRUCAL	Subr.		GRUCIN ITCHI PRINPT RDSMN DRCKTP RDS DRSTF JBKNTR IDGIN IRINP TINPTS SETAM SGEWC SETAT	Steuerprogramm Lesen, Aufbereiten Eingabe Berechnen Querschnitte Ausgeben Querschnitte

			AUSW DRCKTP IRDREM DRUCK DRTEST KONST BERWQ GRPS ERROR PRCOMM	
GRUCIN	Subr.		EQ NADR TADR	Einlesen Eingabe
ITCHI	Subr.		WQTEST RFL FAKT	Steuerprogramm Iteration CHI
WQTEST	Subr.		EQCHAR	Bestimmen Indizes CHI NUSF in SIGMN-File
EQCHAR	L*4 Ass			Vergleichen 5 Zeichen von Doppelwort
RFL	Subr.			Lesen Fluesse
FAKT	Subr.		PRFC RDSIG	Bestimmen Wichtungsfaktor CHI Ersetzen CHI
PRFC	Subr.	PRFAK PRCHI	PRSKAL	Drucken Materialfaktoren , CHI
RDSIG	Subr.	REWSIG WRTSIG RNUSF RCHI WRTCHI		Lesen SIGMN Rewind Schreiben Lesen NUSF Lesen CHI Schreiben CHI
RDSMN	Subr.		NADR TADR	Einlesen Erklarungssatz SIGMN-File fuer Drucken
DRCKTP	Subr.		DRH IDR DRWQ NADR	Steuerprogramm Festlegung Kennziffern Druckausgabe
DRH	Subr.		EQ	Bestimmen Anzahl Drucktypen
IDR	Subr.	ADR	EQ	Setzen Kennziffern fuer einen Drucktyp
DRWQ	Subr.		ADR EQ	Feststellen Drucktypen aus Eingabe
RDS	Subr.		IPRWQ RDSWQ	Steuerprogramm Lesen, Drucken SIGMN-File

RDSWQ	Subr.		IPRWQ TADRA	Lesen, Drucken SIGMN-File
IPRWQ	Subr.	PRWQ	PRSSV	Drucken Querschnitte fuer eine Gruppe
PRSSV	Subr.	PRSKAL PRVEKT PRSPEZ		Drucken einen Datensatz Skalartypen Vektortypen
DRSTF	Subr.		STFILE NADR TADR	Steuerprogramm Drucken Steuerfile
STFILE	Subr.		WRT NDST	Drucken Steuerfile
WRT	Subr.			Drucken Zeile Steuerfile
IDGIN	Subr.		NADR TADR GRBA GRBE	Einlesen Steuerfile, Gruppensatztablelle, Erklaerungssatz GRUBA
GRBA	Subr.	GRBE DATNR	GRBA1 GRBA2 GRBE1 GRBE2 EQCHAR DATNR1 DATNR2	Steuerprogramm Lesen GRUBA REMO-GRUBA
GRBA1	Subr.	GRBE1 DEFI	DATGR1	Lesen GRUBA
DATGR1	Subr.	DATNR1	ITL1 NVGL	Speichern Datensatz von GRUBA
ITL1	Subr.	TL1		Lesen Record von GRUBA
DEFI	Subr.Ass			Initialisieren DA-File
GRBA2	Subr.	GRBE2 DEFI	DATGR2	Lesen REMO-GRUBA
DATGR2	Subr.	DATNR2	ITL2 NVGL	Speichern Datensatz von REMO-GRUBA
ITL2	Subr.	TL2		Lesen Record von REMO-GRUBA
IRINP	Subr.	IRDREM	DRISTD REMIMP DRREM	Initialisieren, Aufbereiten REMO-Eingabe
DRISTD	Subr.	DRSTD DRREM		Drucken Stossdichte Eingabe REMO-Korrektur

REMINP	Subr.		ISTSTD EQCHAR	Aufbereiten Eingabe REMO
ISTSTD	Subr.	STSTD	DRSTD	Bereitstellen Stossdichte
TINPTS	Subr.		TINPT	Steuerprogramm Pruefen Eingabe
TINPT	Subr.			Pruefen Eingabe
SETAM	Subr.		MATNAM NADR TADR	Steuerprogramm Verarbeitung Materialnamen
MATNAM	Subr.		IERSA EQCHAR EQ NVGL	Bestimmen gruppensatzabh. Matnamen, von GRUBA benoetigte Materialien, Materialien mit Sonderbehandlung Ersetzen Matnamen durch Nummern
IERSA	Subr.	ERSA	EQCHAR	Ersetzen Matnamen durch gruppensatzabh. Namen
SGEWC	Subr.		SETGEW	Steuerprogramm Setzen Gewichte CHI
SETGEW	Subr.			Normieren Gewichte CHI Setzen Materialindizes fuer CHI
SETAT	Subr.		GEWTYP BERTYP GRBTYP KNTRF NADR TADR	Steuerprogramm Verarbeitung Typnamen
GEWTYP	Subr.		PRTBDG NDST NVGL	Bestimmen gewuenschte Typen, Ordnen Skalar-Vektortypen
PRTBDG	L*4		NDST	Pruefen Sonderbed. M-P1-Sn , H2
BERTYP	Subr.		PRTBDG NDST NVGL	Bestimmen zu berechnende Typen
GRBTYP	Subr.		NDST NVGL	Bestimmen von GRUBA benoetigte Typen
KNTRF	Subr.		NDST NVGL	Ersetzen Namen im Steuerfile durch Nummern
AUSW	Subr.		AUSWH IKOMB IAUSWK NADR TADR	Steuerprogramm Zusammenstellen Auswertkombinationen
AUSWH	Subr.		CHAR15 EQ	Bestimmen Auswertmaterialien Anzahl Auswertkombinationen

CHAR15	R*8	Ass		Blanksetzen letzte 3 Zeichen
IKOMB	Subr.	AKOMB	EQCHAR	Setzen Kennziffern, Namen fuer eine Auswertkombination
IAUSWK	Subr.	AUSWK	IKOMB NDST EQ NVGL	Setzen Auswertkombinationen fuer Skalar-Vektortypen
DRUCK	Subr.		DRKINP	Steuerprogramm Drucken Eingabe
DRKINP	Subr.	DRTEST		Drucken Eingabe Erklaerung Testausgabe
KONST	Subr.		TADR	Setzen Konstanten, Hilfsfelder
BERWQ	Subr.		IRDWQ IUBRN IVSB ISEK ISUM IREMO IGRMK IMIWQ ISTREU IFRNR IFAKT IFH2 IMATR IAWQ IGRPB	Steuerprogramm Berechnung makroskopischer selbstabgeschirmter isotop-Auswertkombinations-abh. Querschnitte
IRDWQ	Subr.	READWQ	DATNR	Einlesen mikroskop. Querschnitte
IUBRN	Subr.	UBRNWQ	TADR	Uebernehmen Querschnitte von vorhergehender Gruppe
IVSB	Subr.	VSBWQ		Verschieben mikroskop. Querschnitte auf Anfang Arbeitsfeld
ISEK	Subr.	SEKWQ	WRTSEK IND	Einlesen Sekundaerquerschnitte
WRTSEK	Subr.			Drucken Zeile Sekundaerdaten
IND	I*4		NVGL	Setzen Index Name
IGRMK	Subr.	GRE GRMK	SUM1 IREMO	Setzen Gruppen- und mischungsabh. Materialkonstanten
IREMO	Subr.	REMINO REMO		Ueberpruefen Bedingungen REMO
IMIWQ	Subr.	MIWQ	IFRNR IFAKT ISUM IFH2	Berechnen makrosk. selbstabgesch. isotopabhaengige Querschnitte fuer eine Gruppe fuer eine Mischung

			IMATR TADR	
IFRNR	Subr.	FORMNR	H2	Bestimmen der fuer die Daten einer Gruppe, eines Materials und eines Typs zutreffenden Formelnummer
IFAKT	R*4	FFAKT	IBFAKT NFXFL TSTEMP TSFAK	Berechnen temperaturabh.F-Faktor
TSTEMP	Subr.			Pruefen auf Nullstelle Interpolation
TSFAK	Subr.			Pruefen F-Faktoren
IBFAKT	R*4	BFAKT	EQ1	Berechnen F-Faktor fuer eine Standardtemperatur
EQ1	L*4			0.9999<Arg<1.0001
NFXFL	I*4			Pruefen, Umwandeln Gleitkomma - Festkomma
ISUM	R*4	SUM1 SUM2 SUM3 SUM4 SUM5 SUM6 SUM7 SUM8 SUM9 SUM10		Summation ueber Stuetzstellen
IMATR	Subr.	MATR1 MATR2 MATR3 UEMTRA UEMTR SMTRA SUMMTR SUMSTR SUMDWQ SUMWQ WQJ SWQPL	STREU	Verarbeiten Streumatr., Querschnitte Berechnen Matrizen Berechnen Matrizen Berechnen Matrizen Uebernehmen Auswertmatrix Uebernehmen isotopabh. Matrix Addieren Auswertmatrizen Addieren isotopabh. Matrizen Summieren Streuung Addieren Diffusionskonstante Addieren Querschnitt Berechnen Summe Stuetzpunkte Addieren pos. Querschnitte
IFH2	L*4	H2 STR197		Pruefen Material auf H2-Sonderbehandlung Streuung ueber Gruppe 196
ISTREU	Subr.	STREU		Pruefen Streuquerschnitte auf 0.

				Setzen Nummer erste Einstreugruppe
I AWQ	Subr.	AUSWO INWQ	IMATR NDST TADR	Berechnen Auswertquerschnitte aus isotopabh. Querschnitten Initiieren Speicherindex
I GRPB	Subr.	GRPBLK	TADR	Zusammenstellen Gruppenblock, Ausschreiben auf Hilfsdatei
GRPS	Subr.		GRPSTZ IPRWQ	Steuerprogramm Zusammenstellen, Drucken Gruppensatz
GRPSTZ	Subr.		PRWQ	Zusammenstellen, Drucken Gruppensatz

FEHLERBEHANDLUNG

ERROR	Subr.			Drucken Fehlernachricht
CCERR	Subr.Ass		CCEND	Fehlerbehandlung Completioncode
CCEND	Subr.		ERROR	Aufruf ERROR fuer Completioncode

ALLGEMEINE HILFSPROGRAMME

NADR	I*4	NEWADR NDWADR		Setzen Adresse fuer Einfachwort Doppelwort
TADR	Subr.	TADRA		Testen Adresse im Arbeitsfeld, im Querschnittsfeld
EQ	L*4			Vergleichen Namen
NVGL	I*4			Bestimmen Index Doppelwort in Tab.
NDST	I*4			Ausschneiden Ziffern aus Festkommaz.
PRCOMM	Subr.			Drucken Inhalt Common /GROUC/

LISTE 10 PROGRAMMSTRUKTUR von GRUCAL

Jedes Programm ruft die in der naechsten Spalte stehenden Unterprogramme auf.

Im allgemeinen werden alle Programme zur Uebertragung von Feldern initialisiert, diese Initialisierungsaufrufe sind nur aufgefuehrt, wenn sie von einem anderen Programm als dem rufenden erfolgen.

Aufrufe der folgenden Programme sind nicht aufgefuehrt:

EQ NDWADR NEWADR TADR TADRA NVGL NDST PRCOMM


```
INCLUDE LOAD(GRUCAL)
ENTRY MAIN
INSERT MAIN,GRUCAL,EQ,NADR,TADR,NVGL,NDST,EQCHAR,GROUC,JB,
      ZEIT,CHAR15,PRSSV
OVERLAY A
INSERT ITCHI,PRFC,RDSIG
OVERLAY B
INSERT WQTEST,RFL
OVERLAY B
INSERT FAKT
OVERLAY A
INSERT TINPT,TINPTS
OVERLAY A
INSERT PRINPT
OVERLAY A
INSERT PREINF
OVERLAY A
INSERT ERROR
OVERLAY A
INSERT FREEFO,CON,XTAREA,PUFFER,FREESP,DDDRU,DDTEST
OVERLAY A
INSERT JBKNTR,JOBNAM,DATUM,RAC
OVERLAY A
INSERT SGEWC,SETGEW
OVERLAY A
INSERT GRUCIN,IDGIN,RDSMN
OVERLAY A
INSERT DRISTD,IRINP,REMINP,ISTSTD,STD
OVERLAY A
INSERT SETAM,MATNAM,IERSA
OVERLAY A
INSERT SETAT,GEWTYP,PRTBDG,BERTYP,GRBTYP,KNTRF
OVERLAY A
INSERT AUSW,AUSWH,IKOMB,IAUSWK
OVERLAY A
INSERT DRUCK,DRKINP,KONST,DRCKTP,DRH,IDR,DRWQ
OVERLAY A
INSERT DRSTF,STFILE,WRT
OVERLAY A
INSERT BERWQ,IRDWQ,IGRPB,IUBRN,IVSB,ISEK,ISUM,IGRMK,IMIWQ,ISTREU,
      IFRNR,IFAKT,IFH2,IMATR,IAWQ,IND,WRTSEK,IBFAKT,IEMO,
      TSTEMP
OVERLAY A
INSERT GRPS,GRPSTZ,I PRWQ,RDS,RDSWQ
```

LISTE 11 Overlay-Struktur von GRUCAL