УДК 621.039.51:539.17:004.652.4

DOI 10.26583/npe.2017.4.13

КОНВЕРТАЦИЯ БИБЛИОТЕК ENDF В РЕЛЯЦИОННЫЙ ФОРМАТ

А.Г. Юферов

Обнинский институт ядерной энергетики (ИАТЭ НИЯУ МИФИ) 249040, Калужская обл., г. Обнинск, Студгородок, 1



Рассмотрены вопросы преобразования систем констант формата ENDF в реляционные базы данных. Такое преобразование может стать одним из средств, упрощающих освоение и эксплуатацию фактографической информации, методик и алгоритмов в сфере ядерных данных и, следовательно, повышающих эффективность применения соответствующих вычислительных кодов. В работе кратко рассмотрена инфологическая модель библиотек ENDF. Описана возможная структура таблиц соответствующей реляционной базы данных. Предлагаемая схема базы данных и форма таблиц учитывают наличие как единичных, так и множественных свойств рассматриваемых изотопов. Принимается во внимание различие требований, предъявляемых к организации передачи констант из реляционных таблиц в программы и к организации визуального анализа данных в таблицах физиком-оценщиком. Описаны алгоритмы конвертации и результаты преобразования применительно к библиотекам РОСФОНД-А и ENDF/B-VII.1. Указаны преимущества выполнения расчетов непосредственно в среде СУБД для упрощения программирования и исключения необходимости решения ряда задач по верификации и валидации данных. Указаны возможные подходы, обеспечивающие эксплуатацию наследуемого программного обеспечения совместно с библиотеками констант в реляционном формате. Предложены некоторые терминологические уточнения, облегчающие построение инфологической модели для формата ENDF. Программы конвертации и библиотека ENDF/B-VII.1-neutrons в реляционном формате размещены на общедоступном сайте.

Ключевые слова: библиотеки ENDF, конвертация, реляционный формат.

ВВЕДЕНИЕ

Вопросам организации машиночитаемых данных для нейтронно-физических расчетов (НФР) всегда уделялось большое внимание (см., в частности, [1-20]). Расположение информации в библиотеке констант (формат данных) существенно влияет на эффективность расчета, определяя скорость и, подчас, точность вычислений. Анализ программ НФР показывает, что до 60% кода предназначено для реализации функций управления данными. Немаловажным характер организации данных является и для физика-оценщика, обусловливая возможности оперативной выборки, систематики, визуализации и сопоставления данных.

Наиболее распространенный текстовый формат файлов оцененных данных ENDF стал стандартом де-факто в силу исторических причин. Он воспроизводит перфокарточную и ленточную организацию данных, что определяет порядок доступа к

информации и вносит соответствующие ограничения на стиль программирования и обработки данных. Усилия по развитию и стандартизации форматов ядерных данных в рамках традиционных технологий работы с текстовыми файлами не приводят к радикальным решениям в плане уменьшения затрат на управление данными, поскольку появление новой экспериментальной информации и потребности прикладных задач обусловливают введение новых типов данных, требующих изменения форматов и создания специального программного обеспечения [17 – 20].

Объем фактографической информации, методик и алгоритмов в сфере константного обеспечения в настоящее время очень велик. Поэтому весьма актуальна задача поиска средств, упрощающих освоение и эксплуатацию этого информационного массива. Использование технологии, где операции поиска, выборки и обновления информации стандартизированы инвариантно к природе данных, позволило бы сократить трудозатраты программистов, сосредоточиться на функциональной (прикладной) части расчетных кодов, повысить читабельность (самодокументируемость) и верифицируемость программ. В настоящее время такую технологию предоставляют системы управления реляционными базами данных (СУБД). Одна из главных концепций этого подхода состоит в том, что физическая и логическая организации данных разделены. Централизованное управление базой данных (БД) обеспечивает стандартные низкоуровневые операции с данными, исключая необходимость программирования этих операций в конкретных приложениях.

В работе кратко описаны концепция и технология, а также программы и результаты конвертации библиотек РОСФОНД-А и ENDF/B-VII.1 в реляционный формат. Программы конвертации и библиотека ENDF/B-VII.1 в реляционном формате размещены на общедоступном сайте http://178.215.91.20/nd.

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РЕЛЯЦИОННЫХ СУБД В НФР

Известен положительный опыт применения реляционных баз данных в библиотеках ядерных констант [21 – 25]. Однако представляется, что технологию СУБД, дающую «стандартные средства для решения стандартных задач» управления данными, следует использовать более широко. Метафора таблицы для представления данных в программе является очень сильным средством, определяющим стиль и эффективность программирования. Табличная форма реляционных БД гораздо лучше соответствует задаче организации вариантных расчетов (а также задачам верификации и валидации [26]), чем традиционные структуры данных.

Хранение данных в реляционной базе исключает необходимость явного размещения и контроля управляющей информации (разделительных записей, параметров навигации, указателей типа данных, счетчиков, флагов и т.д.). Корректное позиционирование данных обеспечивается на основе информационного принципа описания объектов, согласно которому каждому объекту сопоставляется строка таблицы — уникальный кортеж пар **чимя свойства объекта, значение свойства>**. Тем самым снимается задача разработки специальных руководств по организации и форматированию данных, не тратится время на изучение управляющей информации, на освоение ее корректного применения в обрабатывающих программах.

Структура реляционных таблиц определяется только природой конкретной физической информации. В столбце таблицы хранятся однородные данные, например, полное сечение, и каждая запись (строка таблицы) идентифицируется (в данном случае) соответствующим значением энергии. Добавление записей (например, обусловленное расширением или детализацией энергетического интервала) является стандартной операцией, не требующей корректировки или включения какой-либо управляющей информации. Аналогично, добавление столбцов (например, с оценками погрешности констант) не требует изменения модулей запросов, осуществлявших

выборку данных из таблицы первоначальной структуры.

При выполнении расчетов непосредственно в среде СУБД упрощается программирование:

- разделяются этапы ввода и обработки данных;
- исключается задача форматирования входных и результирующих данных;
- проверка достоверности исходных данных выполняется вне обрабатывающих модулей в момент диалогового ввода данных в таблицы;
- адресация данных выполняется «по имени» без контроля их фактического размещения во внешней или в оперативной памяти;
- оптимизированные алгоритмы поиска в СУБД существенно ускоряют выборку данных;
- последовательности нажатий клавиш и запросы могут записываться и сохраняться для повторного выполнения и для вставки в текст программы;
- использование таблиц БД для исходных данных и результатов возможно в современных языках программирования на основе стандартных технологий доступа к данным.

Принципиальных проблем и недостатков, обусловленных переносом библиотек констант в среду реляционных баз данных, не существует. Еще в 2001 г. в докладе [6] были сформулированы цели и пути перевода в реляционный формат всех библиотек, сопровождаемых мировыми центрами ядерных данных. Предполагалось, что центры ядерных данных разработают стандартные схемы баз данных, в качестве общего языка программирования будет принят язык Java и примерно за пять лет библиотеки ядерных данных мигрируют в формат реляционных таблиц. В результате обеспечивался как локальный, так и удаленный доступ через единый интерфейс как к данным, так и к средствам их обработки. Однако по разным причинам заявленные цели в полном объеме на сегодняшний день не достигнуты. Так, при разработке седьмой версии библиотеки ENDF/B (2006 г.) констатировалась целесообразность перехода к реляционным форматам, но предлагаемые изменения сочли преждевременными в силу больших трудозатрат [9]. Таким образом, формат ENDF остается основной формой хранения информации в библиотеках оцененных нейтронных данных.

Конвертация файлов ENDF в реляционный формат составляет проблему не в силу большой трудоемкости и даже не по причине сложной разветвленной структуры рассматриваемых данных, а из-за наличия множества широко используемых программ, ориентированных на обработку данных в формате ENDF. Тем не менее, объективные потребности обеспечения разноплановых работ с очень большими массивами текстовой и числовой информации по ядерной физике стимулируют разработку новых форматов, призванных обеспечить стандартизацию и унификацию доступа к данным. В частности, завершена разработка унифицированного формата ядерных данных (GND — Generalized Nuclear Data [11]) на основе расширяемого языка разметки XML. В реляционный формат переводятся библиографические базы CINDA и базы экспериментальных данных EXFOR [24, 27]. Ведутся работы по переносу файлов оцененных данных формата ENDF и файлов групповых констант нейтронно-физического расчета в локальные и клиент-серверные СУБД [28, 29].

ПОСТРОЕНИЕ ИНФОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФАЙЛОВ ENDF

Инфологическая модель описывает предметную область в некоторых стандартных терминах и обозначениях для последующего отображения этого описания в схему реляционной базы данных –перечень таблиц определенной структуры и их связей.

Описание схемы базы данных для библиотек ENDF затрудняется имеющими место терминологическими противоречиями со стандартными понятиями информатики. В системе ENDF константы сгруппированы по материалам в виде текстовых файлов со строками, которые формально относятся к двум структурным уровням. Старший структурный элемент такого файла также (в системе ENDF) называется файлом. Поэтому для определенности далее текстовый файл на уровне библиотеки (на уровне операционной системы) будем называть файлом материала, а раздел верхнего уровня в файле материала — внутренним файлом.

Внутренний файл трактуется как раздел с «данными определенного класса». Однако понятие класса (в смысле наличия фиксированного перечня предикатов – условий и признаков принадлежности классу) здесь не является строгим – первые строки раздела содержат некоторую заголовочную информацию (в частности, идентификатор внутреннего файла МF), дополняющую основное содержание раздела. Это содержание разделяется на секции – структурные элементы второго уровня, которые (в терминологии ENDF) «описывают определенный тип данных». Основное содержание секции также предваряется записями заголовка. Таким образом, фактически имеется четыре структурных элемента: заголовок и данные первого уровня, заголовок и данные второго уровня. Заголовки содержат идентифицирующую или управляющую информацию и некоторые конкретные параметры материала. В строках и заголовков, и секций для размещения данных отводится десять полей фиксированной длины:

Р1, Р2, Р3, Р4, Р5, Р6, Материал, Файл, Секция, Строка,

из которых последние четыре — Материал, Файл, Секция, Строка — являются стандартными, а первые шесть хранят различную содержательную информацию. Смысловое содержание соседних строк может различаться. В этом отличие формата ENDF от реляционной модели, в которой смысл всех записей (строк) таблицы идентичен и определяется перечнем свойств, учитываемых для некоторого класса объектов, представленных записями таблицы. Значения свойств конкретного объекта сохраняются в полях записи, ассоциируемых с соответствующими столбцами таблицы.

Рассматриваемая предметная область содержит три основных класса: МАТЕРИАЛЫ, ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ (РЕАКЦИИ) и РАСПАДЫ. Вся остальная информация может трактоваться как совокупность свойств указанных сущностей. Выделение в предметной области иных сущностей, т.е. некоторых подклассов, например, ИЗОТОПОВ или РЕЗОНАНСНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, обусловлено практическими удобствами оперирования реляционными таблицами. Так, результирующая инфологическая модель файла резонансных параметров включает в себя следующие сущности:

- класс материалов;
- класс изотопов;
- класс взаимодействий, идентифицируемых интервалом энергии налетающих нейтронов;
- класс взаимодействий, определяющим атрибутом которых является значение орбитального момента;
 - класс взаимодействий, идентифицируемых спином ядра-мишени;
 - класс резонансных взаимодействий резонансов.

Перечень классов определяет схему базы данных. Каждому классу соответствует таблица, в записях которой хранятся скалярные характеристики экземпляров класса — материала, изотопа, взаимодействия, резонанса.

ОРГАНИЗАЦИЯ ТАБЛИЦ КОНСТАНТ В РЕЛЯЦИОННОЙ БАЗЕ ДАННЫХ

Распределение данных по таблицам определяется характером свойств. Свойство может быть единичным (скалярным, например, массовое число) или множественным (например, вектор отсчетов энергетической зависимости сечения). Все единичные свойства, присущие всем материалам, можно разместить в одной таблице. Специфические свойства, характерные для части материалов (например, для делящихся материалов), группируются в отдельные таблицы, чтобы исключить пробелы в таблице общих свойств.

Множественные свойства выражаются функциональными зависимостями (температурными, энергетическими). Если значения функции берутся для всех материалов в одних и тех же точках аргумента, то целесообразно трактовать эти точки как единичные свойства (например, сечение в заданной энергетической группе), отводя каждой точке аргумента (например, группе) отдельный столбец таблицы. В результате обеспечивается максимально плотное заполнение таблицы. Например, в подобной таблице можно хранить все основные групповые сечения. В таком случае первый столбец отводится для наименования материала, второй – для типа сечений, а остальные – для соответствующих групповых значений. В настоящее время допустимое количество столбцов в таблице может составлять несколько тысяч, так что подобное хранение возможно и для мультигруппового представления констант.

Описанное «горизонтальное» размещение групп (каждая группа в отдельном столбце таблицы) удобно для единовременной выборки всех данных энергетического распределения сечения — перенос содержимого текущей записи в массив выполняется одной командой типа COPYTOARRAY. С другой стороны, согласно основной концепции организации таблиц (один столбец — одно свойство), «автоматический» вывод на график осуществляется по столбцу. Поэтому для оперативного вывода энергетического распределения на график следует размещать группы «вертикально» — данные конкретной группы находятся в отдельной записи, а выборка столбца дает значения сечения по всем группам.

Указанные две задачи обработки являются типичными, так что целесообразно хранить таблицы в двух формах — с вертикальной и с горизонтальной записью энергетических зависимостей. С точки зрения сопровождения баз данных и объема необходимой программной поддержки такой подход не является обременительным.

Если наборы значений аргумента неодинаковы для разных материалов, то функциональную зависимость можно хранить только «вертикально», отводя для нее два столбца: в первом хранятся значения аргумента, а во втором — функции. При смежном размещении таких пар столбцов в таблице будут присутствовать пробелы, обусловленные различным количеством значений в наборах. При последовательном размещении пробелы отсутствуют, но потребуется предусмотреть поле для названия зависимости.

В библиотеке ENDF много усилий прилагается для однозначной идентификации материала посредством четырехразрядных номеров. Это обусловлено искусственным на сегодняшний день «перфокарточным» ограничением длины записи 80-ю символами. Целесообразно использовать для идентификации обычную химическую нотацию, например, для изомеров гафния — это идентификаторы 178Hfg, 178Hfm2 и 178Hfn или более удобная для визуального восприятия и компьютерной обработки форма типа Hf-178-m2. Добавка символа элемента избавляет от необходимости запоминать массовые числа и заряды для идентификации материалов, тем более что для составных материалов (вода, гидрид циркония и т.д.) все равно применяется условная нумерация. Все используемые наименования сохраняются в справочной таблице, связанной с полем идентификатора материала. Это поле заполняется путем выборки необходи-

мого значения из справочной таблицы, что исключает возможность набора случайного некорректного названия.

Полное количество таблиц определяется наличным числом сочетаний «материал-внутренний_файл-секция» и присутствием в секции единичных и (или) множественных свойств. Так, в библиотеке РОСФОНД-А находится 301 файл материалов, где присутствуют внутренние файлы семи типов: MF=1 — общая информация, MF=2 — резонансные параметры, MF=3 — сечения реакций и т.д. Кроме физических данных каждый файл материала содержит исторические, навигационные и статистические данные. Практика эксплуатации СУБД показывает, что такие данные следует хранить в отдельных таблицах. Всего в библиотеке РОСФОНД-А присутствует 4664 сочетания «материал-файл-секция», каждое из которых можно оформить в виде таблицы «материал-свойство». Такое максимально дробное представление может быть удобным для оценщика, анализирующего определенную реакцию.

Для обеспечения расчетных задач предпочтительнее более крупные группировки «файл-секция», которых в библиотеке РОСФОНД-А насчитывается 70. Таблица существующих группировок «файл-секция» включена в базу данных как навигационная. Основные разделы этих группировок объединяют однородные по физическому смыслу данные, и могут представляться отдельными таблицами. Так, все 25 секций файла 3 содержат энергетические зависимости сечений и производных величин. Поэтому всю информацию, даже при задании индивидуальной зависимости каждого сечения от энергии, можно разместить в одной таблице. С другой стороны, группировка «2-151» (файл 2, содержащий единственную секцию 151) содержит параметры разрешенных и неразрешенных резонансов. Структура этой информации достаточно сложна и поэтому целесообразно использование нескольких таблиц.

В общем случае информация каждой группировки распределяется в таблицы двух типов с данными соответственно о единичных и множественных свойствах материалов. Для удобства анализа и оперативной выборки данных таблицы хранятся в двух форматах: «материал-все_свойства» и «свойство-все_материалы». Для сопоставления с файлами ENDF название таблицы типа «свойство-все_материалы» имеет форму МF_MT, т.е. образуется из идентификатора внутреннего файла МF и идентификатора секции МТ. Например, таблица «03_001» содержит полные нейтронные сечения всех материалов. Аналогично, название таблицы типа «материал-все_свойства» образуется в форме ZZAA_MF из шифра материала ZZAA и идентификатора внутреннего файла MF. В перспективе такая условная идентификация таблиц должна заменяться на содержательное осмысленное именование, что позволит пользователю без особой подготовки ориентироваться в схеме базы данных и обеспечит определенное самодокументирование программ обработки.

ПОРЯДОК КОНВЕРТАЦИИ БИБЛИОТЕК ENDF В РЕЛЯЦИОННУЮ БД

Хотя формат ENDF использует большое количество различных флагов и указателей, однако конкретные информационные блоки внутри секции не имеют специальных признаков. Нужный блок можно найти, только читая подряд все записи секции и вычисляя по указателям числа строк, отводимых под информационные блоки, начальную строку искомого блока. При наличии индивидуальных признаков блока конвертация библиотек ENDF в реляционный формат была бы тривиальной задачей.

Преобразование файлов формата ENDF в реляционные таблицы можно выполнить различными средствами. Такое преобразование является, по сути, разовой операцией, поэтому нет необходимости проектировать специальную программу конвертации, хранимую в форме ехе-модуля. Более уместно воспользоваться встроенным языком сценариев той или иной СУБД, выполняя конвертацию пошагово. Целе-

сообразно исходные текстовые файлы библиотеки констант построчно импортировать в базу данных «как есть», а затем поэтапно выполнять выделение необходимых фрагментов строк, создавая для их размещения новые таблицы или столбцы. Реляционные таблицы позволяют визуально оценить результаты каждого этапа и принять решение о пути дальнейших преобразований.

Сценарий конвертации файлов ENDF в реляционную БД включает в себя следующие шаги.

- 1. Файлы ENDF построчно импортируются в реляционные таблицы (сводные или индивидуальные для каждого файла) как текстовые строки.
- 2. Таблицы реструктурируют для выделения из строки основных навигационных реквизитов {Изотоп}, {Файл}, {Секция}, {Строка} и шести предусмотренных форматом ENDF информационных полей, которые удобно именовать просто как {1}, {2}, {3}, {4}, {5}, {6}. Тем самым разделяются этапы структурного и смыслового анализа строк. Для визуального контроля корректности конвертации шесть информационных столбцов сопровождаются идентификационными столбцами, в поля которых записываются флаги ENDF на этапе смыслового анализа данных.
- 3. Из полученных на этапе 2 таблиц выделяются таблицы, объединяющие данные секций по всем материалам, например, таблица «02_151» содержит данные секции МТ=151 из файла резонансных параметров МF=2.
- 4. Создаются и заполняются навигационно-информационные таблицы для секций, например, таблица энергетических интервалов «List_ER», в которой хранятся все скалярные параметры (флаги и физические величины), используемые для характеристики энергетического интервала (например, в различных представлениях резонансных параметров).
- 5. Создаются и заполняются информационные таблицы для секции. Так, таблица «SLBW_MLBW» хранит скалярные параметры разрешенных резонансов в одноуровневом и многоуровневом приближениях Брейта-Вигнера. Скалярные параметры различных представлений резонансных параметров или включить в единственную таблицу все. Эта возможность ограничена только допустимым количеством столбцов таблицы в конкретной СУБД.
- 5.1. Создаются и заполняются информационные таблицы для параметров с энергетической зависимостью. Таблицы таких функциональных зависимостей имеют простую структуру из одного или нескольких кортежей вида

{Изотоп}, {№ энерг. интервала}, {Энергия}, {Параметр}, {Схема интерполяции}.

Важно отметить, что уже второй из перечисленных шагов решал бы задачу конвертации, понимаемую как обеспечение прямого логического доступа к данным по их именам, если бы все информационные блоки имели смысловые указатели или флаги начала и конца блока. Однако формат ENDF предоставляет лишь флаги наличия и указатели количества данных, что позволяет осуществлять только последовательный доступ. Именно поэтому задача конвертации оказывается нетривиальной, требуя разработки алгоритма последовательного анализа всех строк файла ENDF для определение флагов наличия и количества данных.

Для обеспечения верификации и контроля данных создаваемые реляционные таблицы вначале сохраняют все навигационные параметры ENDF. Сценарии конвертации используют эти параметры для поиска информационных блоков в сводной таблице и генерации детализирующих таблиц. На этапах дальнейшей реструктуризации схема базы данных оптимизируется, в частности, исключаются поля флагов. Например, нетрудно видеть, что флаг LRU, указывающий, какие резонансы описываются в данном энергетическом интервале, может быть исключен, поскольку все ситуации

могут быть указаны флагом LRF, если множество его значений пополнить следующими величинами:

LRF = 0, определен только радиус рассеяния;

LRF = 8, в текущем энергетическом интервале описаны неразрешенные резонансы, причем от энергий зависят только средние делительные ширины;

LRF = 9, в текущем энергетическом интервале описаны неразрешенные резонансы, причем от энергии зависят средние расстояния между уровнем, ширины для конкурирующих реакций, средние приведенные нейтронные ширины, радиационные ширины и средние делительные ширины.

Полная нормализация, отвечающая всем теоретическим требованиям исключения избыточности, не проводится, чтобы на этапе эксплуатации БД избежать создания сложных запросов, замедляющих выборку данных.

Материалы, иллюстрирующие этапы и результаты выполнения представленного выше сценария (применительно к библиотекам $POC\PhiOHJAA$ и ENDF/BAVII.1-neutrons), приведены в работах [26, 30 – 32] и на сайте http://178.215.91.20/nd.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- 1. Сегодня реляционные СУБД являются единственным унифицированным средством для работы с большими объемами данных. Можно говорить о возникновении и формировании новой дисциплины ядерной информатики, опирающейся на технологию СУБД. Альтернативные технологии с необходимостью должны воспроизводить или заимствовать функциональность реляционных СУБД. В частности, электронные таблицы ограничены в таких функциях, как групповой поиск и выборка, а технология XML [11, 33] может рассматриваться только как низкоуровневый инструмент хранения и обмена.
- 2. Принципиальных проблем с миграцией библиотек констант в среду реляционных БД не существует. Размещение констант в реляционной базе данных может рассматриваться как форма представления исходного формата и применяться наряду с последним. Тем самым обеспечивается сохранение накопленного программного инструментария и применение технологий СУБД для организации расчетов как в ныне существующих, так и в новых комплексах НФР. Это дает дополнительные средства верификации библиотек и кодов.
- 3. Разработка стандартных схем для баз данных, потребность в чем отмечалась в докладе [6], не является однозначно необходимой. С одной стороны, «стандартность» задается логикой взаимосвязи и подчиненности ядерных данных, а с другой, разнообразие возможных задач не позволяет определить единственную оптимальную схему БД. Реляционная модель позволяет без особых затруднений адаптировать наличную базу данных к любой вновь возникшей задаче путем выборки и компоновки необходимых данных или путем реструктурирования таблиц. Определенную стандартизацию целесообразно предусмотреть только для упрощения репликации и синхронизации баз данных мировых центров ядерных данных.
- 4. Использование общего языка программирования для библиотек ядерных данных (в докладе [6] предлагался язык Java) также не является обязательным. Современная ситуация такова, что язык можно и нужно подбирать «под задачу» и любой язык может использовать стандартные технологии локального или удаленного доступа к базам данных.
- 5. Структура таблиц должна динамически оптимизироваться под конкретную задачу расчета. Вариабельность табличной компоновки требует сравнения возможных схем БД путем проведения вычислительных экспериментов для оценки эффектив-

ности работы с реляционным представлением файлов ENDF по критериям обозримости, удобства анализа, скорости выборки данных применительно к различным задачам и программным комплексам.

Литература

- 1. *Колесов В.Е., Николаев М.Н.* Формат библиотеки рекомендованных данных для расчета реакторов. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. 1972. № 8. Вып. 4. С. 3-66.
- 2. Parker K. The Aldermaston Nuclear Data Library. AWRE Rep. 0-70/63, 1963.
- 3. Woll D. Card Image Format of the Karlsruhe Evaluated Nuclear Data File KEDAK. KFK880, EANDC-E-112 «U», EUP-4160e, 1968.
- 4. Drake M.C. Data Formats and Procedures for the ENDF Neutron Cross Section Library. BNL-50274, 1970.
- 5. *Николаев М.Н., Рязанов Б.Г., Савоськин М.М., Цибуля А.М.* Многогрупповое приближение в теории переноса нейтронов. М.: Энергоатомиздат, 1984. 256 с.
- 6. Pronyaev V., Winchell D., Zerkin V., Muir D., Arcilla R. Requirements for the Next Generation of Nuclear Databases and Services. // J. Nucl. Sci. Technol. Suppl. 2. PP. 1476-1479. Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Tsukuba, Japan, 7–12 October 2001.
- 7. MacFarlane R.E. et al. NJOY 94.10 Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Sections form ENDF/B Data. RSIC Peripheral Shielding Routine Collection, PSR-355.
- 8. Larson N.M. SAMMY User Guidance for ENDF Formats. ENDF367, ORNL/TM2007/23, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN (March 2007).
- 9. ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, BNL-90365-2009, edited by M.W. Herman and A. Trkov (June 2009), revised by M.W. Herman, A. Trkov and D.A. Brown (Dec. 2011).
- 10. Beck B., Hedstrom G.W., Hill T.S., Marchetti A.A., McNabb D.P. ASCII format specifications for the Evaluated Nuclear Data Libraries (ENDL). Technical Report UCRL-TM-218475, LLNL, 2006.
- 11. Mattoon C.M. et al. Generalized Nuclear Data: A New Structure (with Supporting Infrastructure) for Handling Nuclear Data. // Nuclear Data Sheets. Dec 2012. Vol. 113. Iss. 12. PP. 3145-3171.
- 12. Абрамович С.Н., Горелов В.П., Горшихин А.А., Гребенников А.Н., Ильин В.И., Крутько Н.А., Фарафонтов Г.Г. Библиотека нейтронных данных TENDL и система 38-групповых нейтронных констант TENDL038. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. 2001. № 1. С. 11-26
- 13. Зизин М.Н., Загацкий Б.А., Темноева Т.А., Ярославцева Л.Н. Автоматизация реакторных расчетов. М.: Атомиздат, 1974. 103 с.
- 14. Sinitsa V.V., Rineiskiy A.A. GRUCON A Package of Applied Computer Programs, Rep. INDC(CCCP)-344, IAEA, Vienna (1993).
- 15. Кощеев В.Н., Николаев М.Н., Корчагина Ж.А., Савоськина Г.В. Библиотека оцененных нейтронных данных Φ 0НД-2.2. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. 2000. № 2. С. 40-70.
- 16. *Пляскин В.И., Косилов Р.А.* Справочно-информационные интерактивные системы ядерно-физических данных для различных приложений ядерной физики. М.: Энергоатомиздат, 2002. 375 с.
- 17. Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Программа подготовки констант CONSYST. Описание применения. Препринт ФЭИ-2828, Обнинск. 2000. 41 с.
- 18. Журавлев В.И., Воронков А.В., Брыкин А.Н., Синица В.В., Земсков Е.А., Кальченко В.В. Новые возможности GNDL системы константного обеспечения расчетов реакторов и защиты. // ВАНТ. Серия: Обеспечение безопасности АЭС. 2009. № 24. С. 29-37.
- 19. Кощеев В.Н., Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Библиотека групповых констант БНАБ_РФ для расчетов реакторов и защиты. // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2014. \mathbb{N}^2 3. C. 83-101.
- $20.\,$ Мантуров $\Gamma.H.,$ Николаев М.Н. Первоочередные задачи развития систем константного

- обеспечения расчетов реакторов и защиты. // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2016. № 2. С. 133-142.
- 21. *Бобошин И.Н.,Варламов В.В., Труханов С.К.* NESSY. Реляционная база данных по структуре и распадам ядер на IBM/PC. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. 1994. № 3-4. С. 75-81.
- 22. *Бобошин И.Н., Варламов А.В., Варламов В.В.* И Web-сервер ЦДФЭ НИИЯФ МГУ: базы ядерно-физических данных в гипертекстовом представлении. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. 1999. № 2. С.99-110.
- 23. *Бобошин И.Н., Варламов В.В., Варламов А.В., Руденко Д., Степанов М.Е.* Базы ядернофизических данных центра данных фотоядерных экспериментов. Препринт НИИЯФ МГУ 99-26\584, 1999. 24 с.
- 24. Варламов В.В., Иванов С.В., Песков Н.Н., Степанов М.Е. Новая поисковая машина для экспериментальных данных по ядерным реакциям из международной системы EXFOR. Сб. тр. III Всероссийской конференции по электронным библиотекам RCDL'2001. Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции. Петрозаводск, 11 13 сентября 2001 года. ISBN 5-9274-0055-8. КарНЦ РАН, 2001. С. 166-173.
- 25. Варламов В.В., Ишханов Б.С. Базы ядерных данных в научных исследованиях. Электронный ресурс http://nuclphys.sinp.msu.ru/bd/index.html (дата доступа 13.02.2017).
- 26. *Юферов А.Г. Николаев М.А., Комиссаров С.А.* Верификация и валидация файла резонансных параметров в реляционном формате. Препринт ФЭИ-3236. Обнинск, 2013. 20 с.
- 27. Further Development of EXFOR Summary Report of the Consultant's Meeting. INDC International Nuclear Data Committee. INDC(NDS)-0614. IAEA Headquarters, Vienna, Austria 6 9 March 2012.
- 28. Fan T.S. et al. Study on Relational ENDF Databases and Online Ser-vices. // Atomic Energy Science and Technology. Jan. 2005. Vol. 39. No. 1. PP. 28-32.
- 29. Алексеев А.В., Бнятов А.В., Касаткин С.С, Крутько Н.А. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными. / Тез. отраслевого семинара «Нейтроника-2012». Обнинск, 2012. С. 33-34.
- 30. $Юферов A.\Gamma$. Конвертация библиотеки РОСФОНД-А в реляционную базу данных. Препринт ФЭИ-3194. Обнинск, 2011. 28 с.
- 31. *Юферов А.Г., Комиссаров С.А., Николаев М.А.* Инфологическая модель файла резонансных параметров. Препринт ФЭИ-3233. Обнинск, 2013. 40 с.
- 32. Юферов А.Г., Комиссаров С.А., Николаев М.А. Реляционная модель файла угловых распределений. Препринт ФЭИ-3235. Обнинск, 2013. 20 с.
- 33. Холзнер С. XSLT. Библиотека программиста. СПб: Питер, 2002. 544 с.

Поступила в редакцию 17.03.2017 г.

Автор

<u>Юферов</u> Анатолий Геннадьевич, заведующий лабораторией, канд. физ.-мат. наук E-mail: anatoliy.yuferov@mail.ru

UDC 621.039.51:539.17:004.652.4

CONVERTING ENDF LIBRARIES INTO RELATIONAL FORMAT

Yuferov A.G.

Obninsk Insitute for Nuclear Power Ingineering, National Research Nuclear University MEPhi, 1 Studgorodok, Obninsk, Kaluga reg., 249040 Russia

ARSTRACT

The questions of converting the constants systems in the ENDF format into a relational database are considered. Such conversion may be one of the tools that simplify the development and exploitation of factual information, techniques and algorithms in the field of nuclear data, and consequently, increases the efficiency of the corresponding computational codes. The paper briefly reviewed the infological model of libraries ENDF. Is described the possible structure of the relational tables in the database. The proposed database schema and the form of tables takes into account the presence of both single and multiple properties of the considered isotopes. Is taken into account also the difference of requirements for transmission organization of relational tables into the programs and the organization of the visual analysis of data in the tables physicist appraiser. The algorithms of conversion and the results of conversion in relation to ROSFOND-A libraries and ENDF/B-VII.1 is described. Outlines the advantages of performing calculations directly in the DBMS environment to simplify programming and to exceptions the necessity of solving a number of tasks for verification and validation of data. Some possible approaches to ensure exploitation of legacy software in conjunction with the relational libraries of the constants is listed. Proposed some terminological clarification to facilitate the infological models construction for ENDF format. The conversion programs and library ENDF/B-VII.1-neutrons in the relational format posted on the public site http://178.215.91.20/nd.

Key words: ENDF library, conversion, relational format.

REFERENCES

- 1. Kolesov V.E., Nikolaev M.N. Format biblioteki rekomendovannykh dannykh dlya rascheta reaktorov [The format of the library of recommended data for the calculation of reactors]. *VANT. Ser. Yadernye konstanty.* 1972, no. 8, iss. 4, pp. 3-66 (in Russian).
- 2. Parker K. The Aldermaston Nuclear Data Library. AWRE Rep. 0-70/63, 1963.
- 3. Woll D. Card Image Format of the Karlsruhe Evaluated Nuclear Data File KEDAK. KFK880, EANDC-E-112 «U», EUP-4160e, 1968.
- 4. Drake M. S. Data Formats and Procedures for the ENDF Neutron Cross Section Library. BNL-50274, 1970.
- 5. Nikolaev M.N., Ryazanov B.G., Savoskin M.M., Cibulya A.M. *Mnogogruppovoe priblizhenie v teorii perenosa neytronov* [Multigroup approximation in the theory of neutron transport]. Moscow. Energoatomizdat Publ., 1984. 256 p. (in Russian).
- 6. Pronyaev V., Winchell D., Zerkin V., Muir D., Arcilla R. Requirements for the Next Generation of Nuclear Databases and Services. *J. Nucl. Sci. Technol.*, suppl. 2, pp. 1476-1479, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Tsukuba, Japan, 7–12 October 2001.
- 7. MacFarlane R. E., Muir D. E. NJOY94.61: Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Data, PSR-355, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico (1996).
- 8. Larson N.M. SAMMY User Guidance for ENDF Formats. ENDF367, ORNL/TM2007/23, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN (March 2007).
- 9. ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, BNL-90365-2009, edited by M.W. *Herman* and A. Trkov (June

- 2009), revised by M.W. Herman, A. Trkov and D.A. Brown (Dec. 2011).
- 10. Beck B., Hedstrom G. W., Hill T. S., Marchetti A. A., McNabb D. P. ASCII format specifi-cations for the Evaluated Nuclear Data Libraries (ENDL). Technical Report UCRL-TM-218475, LLNL, 2006.
- 11. Mattoon C.M., Beck B. R., Patel N. R., Summers N. C., Hedstrom G. W., Brown D. A. Generalized Nuclear Data: A New Structure (with Supporting Infrastructure) for Handling Nuclear Data. *Nuclear Data Sheets*, Dec 2012, v. 113, iss. 12, pp. 3145-3171.
- 12. Abramovich S.N., Gorelov V.P., Gorshikhin A.A., Grebennikov A.N., Ilin V.I., Krutko N.A., Farafontov G.G. Biblioteka neytronnykh dannykh TENDL i sistema 38-gruppovykh neytronnykh konstant TENDL038 [The TENDL Neutron Data Library and the 38-group neutron constant system TENDL038]. VANT. Ser. Yadernye konstanty. 2001, no. 1, pp. 11-26 (in Russian).
- 13. Zizin M.N., Zagaczkiy B.A., Temnoeva T.A., Yaroslavceva L.N. *Avtomatizaciya reaktornykh raschetov* [Automation of reactor calculations]. Moscow. Atomizdat Publ., 1974. 103 p. (in Russian).
- 14. Sinitsa V.V., Rineiskiy A.A. GRUCON A Package of Applied Computer Programs, Rep. INDC(CCCP)-344, IAEA, Vienna (1993).
- 15. Koshcheev V.N., Nikolaev M.N., Korchagina Zh.A., Savoskina G.V. Biblioteka ocenennykh neytron-nykh dannykh FOND-2.2 [Library of the estimated neutron data FOND-2.2]. VANT. Ser. Yadernye konstanty 2000, no. 2, pp. 40-70 (in Russian).
- 16. Plyaskin V. I., Kosilov R. A. *Spravochno-informacionnye interaktivnye sistemy yaderno-fizicheskikh dannykh dlya razlichnykh prilozheniy yadernoy fiziki* [Reference-information interactive systems of nuclear physical data for various applications of nuclear physics]. Moscow. Energoatomizdat Publ., 2002. 375 p. (in Russian).
- 17. Manturov G.N., Nikolaev M.N., Tsibulya A.M. *Programma podgotovki konstant CONSYST. Opisanie primeneniya*: Preprint FEI-2828 [CONSYST code for neutron constants preparation. Scope statement: IPPE Preprint -2828]. Obninsk, FEI Publ., 2000. 41 p. (in Russian).
- 18. Zhuravlev V.I., Voronkov A.V., Brykin A.N., Sinicza V.V., Zemskov E.A., Kalchenko V.V. Novye vozmozhnosti GNDL sistemy konstantnogo obespecheniya raschetov reaktorov i zashchity [New features of GNDL are the system of constant provision of reactor calculations and protection]. *VANT. Ser. Obespechenie bezopasnosti AES*. 2009, no. 24, pp. 29-37 (in Russian).
- 19. Koshcheev V.N., Manturov G.N., Nikolaev M.N., Cibulya A.M. Biblioteka gruppovykh konstant BNAB_RF dlya raschetov reaktorov i zashchity [Library of group constants BNAB_RF for reactor calculations and protection]. *Izvestiya vuzov. Yadernaya energetika*. 2014, no. 3, pp. 83-101 (in Russian).
- 20. Manturov G.N., Nikolaev M.N. Pervoocherednye zadachi razvitiya sistem konstantnogo obespeche-niya raschetov reaktorov i zashchity [Priorities for the development of systems for the constant supply of reactor calculations and protection]. *Izvestiya vuzov. Yadernaya energetika*. 2016, no. 2, pp. 133-142 (in Russian).
- 21. Boboshin I.N., Varlamov V.V., Trukhanov S.K. NESSY. Relyacionnaya baza dannykh po strukture i raspadam yader na IBM/PC [NESSY. Relational database on the structure and decays of cores on IBM / PC.]. VANT. Ser. Yadernye konstanty. 1994, no. 3-4, pp. 75-81 (in Russian).
- 22. Boboshin I. N., Varlamov A. V., Varlamov V. V. I Web-server CDFE NPI MSU: bazy yadernofizicheskikh dannykh v gipertekstovom predstavlenii [Web-server CDFE INPI MSU: databases of nuclear-physical data in hypertext representation]. VANT. Ser. Yadernye konstanty. 1999, no. 2, pp. 99-110 (in Russian).
- 23. Boboshin I.N., Varlamov V.V., Varlamov A.V., Rudenko D., Stepanov M.E. *Bazy yadernofizicheskikh dannykh centra dannykh fotoyadernykh eksperimentov* [The Centre for Photonuclear Experiments Data Nuclear Data Bases]. Preprint NIIYaF MGU 99-26\584, 1999. 24 p. (in Russian).
- 24. Varlamov V.V., Ivanov S.V., Peskov N.N., Stepanov M.E. Novaya poiskovaya mashina dlya eksperimentalnykh dannykh po yadernym reakciyam iz mezhdunarodnoy sistemy EXFOR [A new search engine for experimental data on nuclear reactions from the international system EXFOR]. Sbornik trudov Tretey Vserossiyskoy konferencii po Elektronnym Bibliotekam RCDL'2001. Elektronnye biblioteki: perspektivnye metody i tekhnologii, elektronnye kollekcii. [Proc. of the III All-Russian Conference on Electronic Libraries RCDL'2001. Electronic Libraries: Advanced Methods and Technologies, Digital Collections]. Petrozavodsk, 11 13 sent. 2001. KarNCz RAN, 2001, pp. 166-173 (in Russian).

- 25. Varlamov V.V., Ishkhanov B.S. Bazy yadernykh dannykh v nauchnykh issledovaniyakh [Nuclear databases in scientific research]. Available at: http://nuclphys.sinp.msu.ru/bd/index.html (accessed 13 Feb. 2017) (in Russian).
- 26. Yuferov A.G. Nikolaev M.A., Komissarov S.A. *Verifikaciya i validaciya fayla rezonansnykh parametrov v relyacionnom formate*: Preprint FEI-3236 [Verification and validation of the file of resonant parameters in the relational format: IPPE Preprint -2828]. Obninsk, FEI Publ., 2013. 20 p. (in Russian).
- 27. Further Development of EXFOR Summary Report of the Consultant's Meeting. INDC International Nuclear Data Committee. INDC(NDS)-0614. IAEA Headquarters, Vienna, Austria 6 9 March 2012.
- 28. Fan T.S., Huang G., Feng Y.G., Ye W.G., Liu W.L., Hong Y.J., Song X.X., Liu T.J., Chen J.X., Tang G.Y., Shi Z.M., Guo Z.Y. Study on Relational ENDF Databases and Online Services. *Atomic Energy Science and Technology*. Jan. 2005, v. 39, no. 1, pp. 28-31.
- 29. Alekseev A.V., Bnyatov A.V., Kasatkin S.S, Krutko N.A. Programmnyy kompleks GROUND kon-stantnogo obespecheniya yaderno-fizicheskimi dannymi [Software complex GROUND of constant supply with nuclear physical data]. *Tezisy otraslevogo seminara «Neytronika-2012»* [The thesis of the industry seminar "Neutronics-2012"]. Obninsk, 2012, pp. 33-34 (in Russian).
- 30. Yuferov A.G. *Konvertaciya biblioteki ROSFOND-A v relyacionnuyu bazu dannykh*: Preprint FEI-3194 [Converting the ROSFOND library to a relational database: IPPE Preprint-3194]. Obninsk, FEI Publ., 2011. 28 p. (in Russian).
- 31. Yuferov A.G., Komissarov S.A., Nikolaev M.A. *Infologicheskaya model fayla rezonansnykh parametrov*: Preprint FEI-3233 [Infologic model of the file of resonance parameters: IPPE Preprint -3233]. Obninsk, FEI Publ., 2013. 40 p. (in Russian).
- 32. Yuferov A.G., Komissarov S.A., Nikolaev M.A. *Relyacionnaya model fayla uglovykh raspredeleniy*: Preprint FEI-3235 [Relational model of the file of angular distributions: IPPE Preprint -3235]. Obninsk, FEI Publ., 2013. 20 p. (in Russian).
- 33. Holzner S. *XSLT. Biblioteka programmista* [XSLT. The programmer's library]. Saint Petersburg. Piter Publ., 2002. 544 p. (in Russian).

Author

<u>Yuferov</u>Anatoliy Gennadyevich, Head of Laboratory, Cand. Sci. (Phys.-Math.) E-mail: anatoliy.yuferov@mail.ru