

2. Проводяться відкриті семінари та лекції з метою популяризації ВПЗ серед студентів та викладачів, що дає змогу мотивувати їх опанувати новітні програмні засоби, усунути психологічний бар'єр, інформувати їх про нові можливості ВПЗ.

3. При розробці методичного забезпечення для викладання відповідних курсів враховується брак теоретичної та практичної підготовки користувачів UNIX-систем.

Використання ВПЗ у навчальному процесі має наступні переваги:

- розширення кругозору студентів та мотивація до нестандартного мислення;
- можливість аналізувати готові проекти;
- вищий фаховий рівень студентів у галузі ІТ у порівнянні з тими студентами, які не використовують ВПЗ;
- використання легального ПЗ;
- підвищення самостійності студента й уміння працювати з оригінальною технічною документацією;
- можливість ефективного використання застарілої техніки;
- спрощення процесу підготовки студентів дистанційної та заочної форм навчання, шляхом підготовки власних інсталяційних та "живих" ISO-образів.

Джерела:

1) Кафедра комп'ютерних систем та мереж [Електронний ресурс]. - Режим доступу: URL: <http://kaf-ks.tntu.edu.ua/> — Назва з екрану.

2) Mkimage/Profiles/m-p ALT Linux Wiki [Електронний ресурс]. - Режим доступу: URL: <http://www.altlinux.org/M-p> — Назва з екрану.

Вільне програмне забезпечення TALYS для генерування наукових даних та аналізу ядерних реакцій

Малихіна Т.В.

*Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна
tmalykhina@univer.kharkov.ua*

The TALYS software to study fundamental processes of interaction of radiation with matter is presented. **TALYS** is open-source versatile tool for the analyses of basic microscopic scientific experiments or to generate nuclear data for applications.

TALYS [1, 2] – програма для моделювання ядерних реакцій, що викликаються нейтронами, фотонами, протонами, дейтронами, тритонами, ядрами ^3He і альфа-частинками в діапазоні енергій до 200 МеВ для матеріалів з атомною масою від 12 і вище. Области застосування TALYS – комп'ютерне моделювання реакторів, розрахунки у фізиці прискорювачів заряджених частинок, розрахунки, пов'язані з утилізацією радіоактивних

відходів, дослідження в області виробництва ізотопів медичного призначення, радіотерапія, астрофізика тощо.

Програму TALYS створено співробітниками NRG (Nuclear Research and consultancy Group), Нідерланди, та організації CEA, Франція. Ідея її створення виникла у 1998 році: розробниками було прийнято рішення об'єднати результати своїх досліджень в області ядерних реакцій в єдиному програмному продукті. Подібно більшості наукових проєктів, TALYS завжди знаходиться в стані розробки. Однак, кожна нова версія стає доступна користувачам лише після етапу верифікації. На сьогоднішній день TALYS працює під управлінням ОС Linux, має докладну документацію користувача, надає велику кількість прикладів і нескладна у використанні.

Серед особливостей можна відзначити: точну реалізацію багатьох сучасних ядерно-фізичних моделей; опис механізмів реакцій в широкому діапазоні енергій (0.001 - 200 MeV) для елементів з атомної масою $A > 12$; повні дані щодо перетинів і енергетичних спектрів, кутового розподілу і зворотного розсіювання частинок, а також інші особливості [2], необхідні фізикам-дослідникам.

На сьогоднішній день останньою версією є версія TALYS 1.4. Для інсталяції на комп'ютер користувача потрібно завантажити архів talys.tar з офіційного сайту [1], розпакувати архів в середовищі ОС Linux, після чого в домашньому каталозі користувача буде створено каталог talys, в якому є каталоги samples, source, structure, файл readme з подальшою інструкцією щодо встановлення TALYS, а також файл talys.setup, що є сценарієм для інсталяції. Для виконання сценарію на комп'ютері повинен бути встановленим компілятор мови програмування Фортран: f95 або g95. Сценарій talys.setup налаштовує змінні оточення, перевіряє права доступу користувача та виконує компіляцію.

Каталог source містить 289 підпрограм мовою Фортран (source code) та файл talys.cmb, що містить змінні оточення та common-блоки. Каталог structure містить підкаталоги, в яких розташовано файли з даними щодо всіх фізичних процесів та вихідних даних TALYS. Каталог doc містить документацію у *.pdf та *.ps форматах, каталог samples містить приклади використання TALYS.

Якщо сценарій talys.setup під час виконання повідомляє про помилку виконання, то доведеться виконати команди цього сценарію по черзі

```
chmod -R u+rwX talys
cd talys/source
f95 -c *.f
f95 *.o -o talys
mv talys /bin
rehash
```

та спробувати переглянути наявні приклади:

```
cd samples
verify
```

Для роботи з програмою TALYS потрібно створити свій файл `input`, в якому обов'язково вказати лише чотири величини (інші ключові слова вказуються лише за вимогою користувача і впливають на кількість та деталізацію наукових даних, що мають бути отримані), наприклад:

```
projectile n
element 5
mass 10
energy energies
```

В цьому прикладі первинними частинками вказані нейтрони, середовище, яке вони перетинають та взаємодіють, має атомний номер $z=5$, атомну масу $A=10$, файл з енергіями первинних частинок має назву `energies` (тобто у цьому текстовому файлі вказані значення енергій; по одному значенню в кожному рядку). Для виконання TALYS зручно мати свій сценарій, що містить команди, вказані на рис.2.

Програма TALYS виконується досить швидко, за декілька секунд створюються вихідні текстові файли. Файл `output` містить всю отриману наукову інформацію загалом, а інші текстові файли (порядку 20 файлів, залежно від вимог, вказаних користувачем у файлі `input`) окремо містять ті ж самі дані, наприклад, дані щодо перетину ядерних реакцій, створення ізотопів, тощо, які користувач має обробити зручним для нього способом – створити графіки, діаграми тощо.

Висновки. Програма TALYS може бути використана для генерації наукових даних і аналізу ядерних реакцій для вивчення фундаментальних процесів ядерно-фізичних взаємодій. Важливою перевагою є те, що TALYS є вільним програмним забезпеченням з відкритим кодом і тому може бути використана широким колом науковців у своїх дослідженнях.

```
File Edit Options Help
#!/bin/sh
#
# This script runs TALYS for each sample case
# present in the new-directories and determines
# the numerical differences with the results of
# the org-directory
#
files=`find . -name input | grep new`
#
homedir=`pwd`
for f in ${files}
do
    dir=`dirname ${f}`
    cd ${dir}
    pwd
    talys < input > output
    diff -bitw output ../org/output > outputdiff
    cd $homedir
done
```

Рис. 1. Вміст файлу `my_start`

Джерела:

- 1) Веб-ресурс проєкта TALYS: <http://www/talys.eu>
- 2) A.J. Koning, S. Hilaire and M.C. Duijvestijn, .TALYS-1.0., Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, April 22-27, 2007, Nice, France, editors O.Bersillon, F.Gunsing, E.Bauge, R.Jacqmin, and S.Leray, EDP Sciences, 2008, p. 211-214.