

EGS5 サンプルプログラム (ucnaicgv.f)
NaI 検出器の応答計算 (cg Version)
(July 21 2006, Draft)

平山 英夫、波戸 芳仁

〒 305-0801 茨城県つくば市大穂 1 - 1
高エネルギー加速器研究機構

目 次

1. Combinatorial Geometry (CG)	1
1.1. Body の定義	1
1.2. リージョンの定義	1
1.3. リージョン定義の例	2
2. サンプルプログラム ucnaicgv.f の概要	4
2.1. CG 入力データ	4
3. ユーザーコード の内容	5
3.1. メインプログラム: Step 1	5
3.2. メインプログラム: Step 2	7
3.3. メインプログラム: Step 3	7
3.4. メインプログラム: Step 4	9
3.5. メインプログラム: Step 5	9
3.6. メインプログラム: Step 6	9
3.7. メインプログラム: Step 7	10
3.8. メインプログラム: Step 8	10
3.8.1. 統計誤差:	11
3.9. メインプログラム: Step 9	12
3.10. Subroutine ausgab	13
3.11. Subroutine howfar	14
4. ucnaif.f と ucnaicgv.f の計算速度の比較	15
5. 実習課題	16
5.1. 実習課題 1 : NaI 検出器の計算	16
5.2. 実習課題 2 : Ge 検出器の計算	16
5.3. 実習課題 3 : 空気電離箱の計算	16
6. 実習課題の解答例	17
6.1. 実習課題 1	17
6.2. 実習課題 2	20
6.3. 実習課題 3	21

1. Combinatorial Geometry (CG)

1.1. Body の定義

EGS 用 CG [1] では、以下のような立体 (Body) を使用する事ができる。

1. 直方体 (RPP)

x-, y- と z- 方向の最小値及び最大値で定義する。各面はいずれかの軸と平行である。

2. 球 (SPH)

球の中心を示すベクトル V と半径で定義する。

3. 円筒 (RCC)

円筒の底面の中心を示すベクトル V と、中心からの高さベクトル H 及び円筒の半径で定義する。

4. 円錐台 (TRC)

円錐の底面の中心を示すベクトル V 、底面中心からの上面中心への高さベクトル H 、 及び底面と上面のそれぞれの半径 R_1 及び R_2 で定義する。

5. トーラス (TOR)

いずれかの軸に平行なトーラスの中心を示すベクトル V 、 トーラス中心から、チューブの中心までの距離 R_1 、チューブの半径 R_2 及びトーラスの方向を示す番号、 ($n: x/y/z = 1/2/3$) で定義する。更に、トーラスの始まりの角度 θ_1 と終わりの角度 θ_2 を指定する。トーラス全体を使用する場合には、 $\theta_1=0$, 及び $\theta_2=2\pi$ とする。

表 1: 各形状の立体とその記述のためのデータ

形状		各形状の立体を定義するデータ					
RPP	#	Xmin	Xmax	Ymin	Ymax	Zmin	Zmax
SPH	#	Vx	Vy	Vz	R		
RCC	#	Vx	Vy	Vz	Hx	Hy	Hz
			R				
TRC	#	Vx	Vy	Vz	Hx	Hy	Hz
		R1	R2				
TOR	#	Vx	Vy	Vz	R1	R2	
		θ_1	θ_2	n			

1.2. リージョンの定義

各リージョンは、body の組み合わせにより定義する。組み合わせには、特別な記号、 +, - 及び OR が使われる。

+ 記号の後に body 番号が書かれた場合には、body の内側の領域がリージョンとなる。一方、- 記号の後に body 番号が書かれた場合には、body の外側の領域がリージョンとなる。body 番号の後に+又は- 記号と body 番号が続く場合には、間に AND 記号があるのと同じである。従って、+1 +2 は、body 1 の内側でなかつ body 2 の内側を意味するので、body 1 と body 2 の重なった領域となる。一方、+1 -2 は、body 1 の内側でなかつ body 2 の外側を意味するので、body 1 の領域中で body 2 と重なっていない領域を意味することになる。Body 番号が OR 記号の後に書かれた場合は、OR 記号は結合記号として使用される。リージョンが、OR 記号で結合したサブリージョンの組み合わせで定義される場合もある。2つ以上の OR 記号が使われる場合、OR の機能は、OR 記号

の間及び OR 記号からリージョン定義の行の最後までに含まれる全ての body 番号に、+ や - 記号に関係なく適用される。

1.3. リージョン定義の例

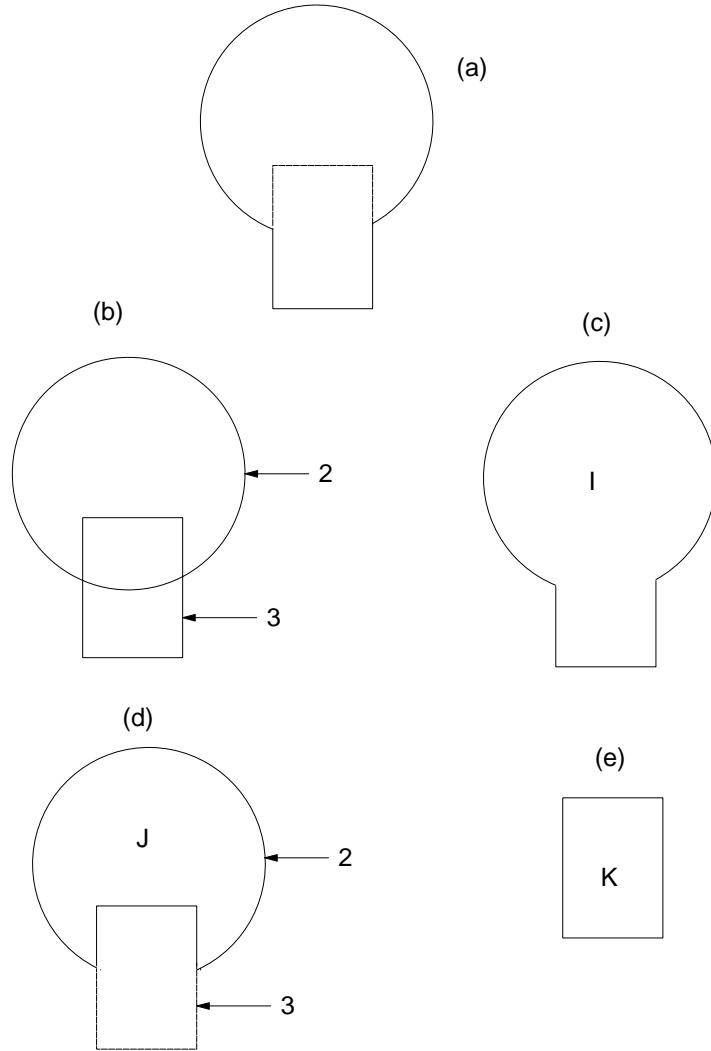


図 1: Combinatorial Geometry の例

第 1 図に示すような、球 (body 2) に円筒 (body 3) が挿入している様な体系を考える。もし、球と円筒の物質が同じであれば、リージョン I (図 1c) の様に一つのリージョンとする事ができる。リージョン I は、

$$I = +2 \text{OR} + 3$$

と記述する。これは、リージョン I が、body 2 か body 3 のどちらかに属する領域である事を意味している。

球と円筒が異なる物質の場合、円筒部を除外した球には、円筒部のリージョン番号 (K) と異なったリージョン番号を付ける (例えば J)。

リージョン J (図 1d) は、

$$J = +2 - 3$$

と記述する。これは、body 2 に属するが、body 3 に属さない領域を意味する。

リージョン K (図 2e) は、単に

$$K = +3$$

と記述する。これは、body 3 の属する領域を意味する。

2 つ以上の body を組み合わせる場合には、+、- や OR 記号を含む長い記述となる。しかしながら、形状中の全ての点は、どれか一つのリージョンとして定義される様にしなければならない。

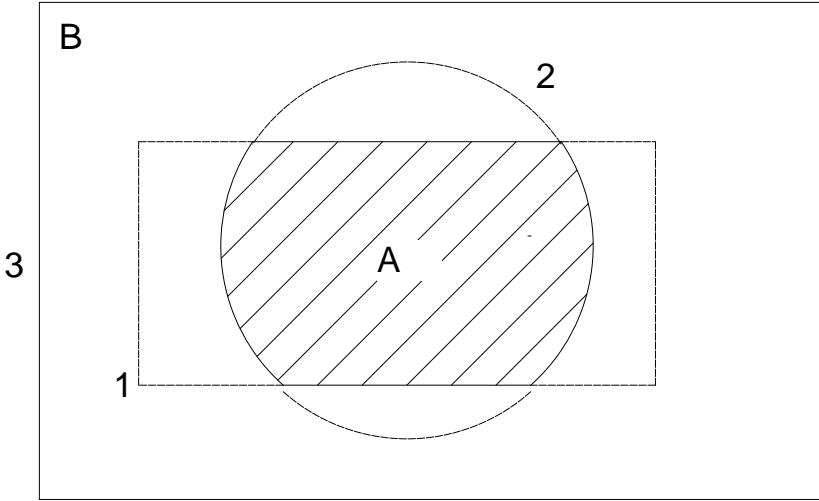


図 2: Use of OR operator.

OR 記号を使ったもっと複雑な例として、第 2 図の斜線部の領域 A と斜線を引いていない領域 B を考える。これらのリージョンは、2 つの直方体 (body 1 と 3) と、一つの円筒 (body 2) で記述される。それぞれのリージョンは、

$$A = +1 + 2$$

そして

$$B = +3 - 1 \text{OR} + 3 - 2$$

と記述する。OR 記号は、次に OR 記号が現れるまで、それに続く全ての body 番号に適用される事に注意する必要がある。

2. サンプルプログラム ucnaicgv.f の概要

ucnaicgv.f は、CG を使って形状を記述するユーザコードである。CG 入力データは、ユニット 4 のデータファイルに記述する。

2.1. CG 入力データ

図 3 に示すように円筒の組み合わせで体系を定義している。

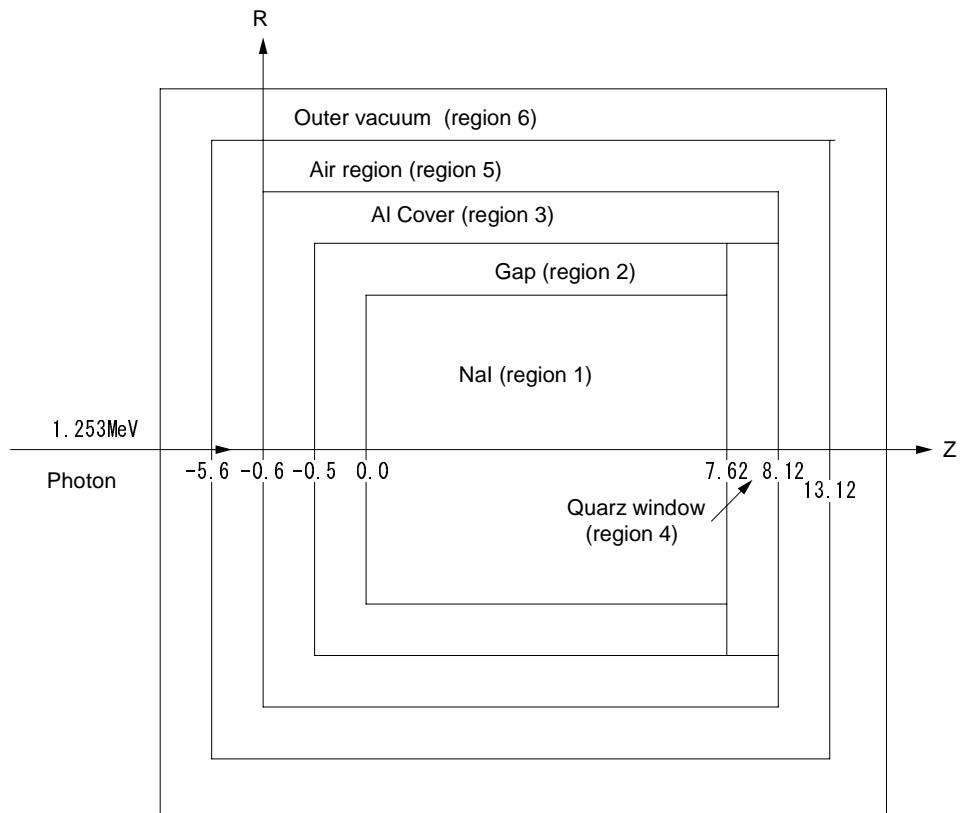


図 3: ucnaicgv.f のジオメトリー

この形状の入力データは、以下のように記述する。

RCC	1	0.00	0.0	0.0	0.00	0.0
		7.62	3.81			
RCC	2	0.00	0.0	-0.5	0.00	0.0
		8.12	4.31			
RCC	3	0.00	0.0	-0.6	0.00	0.0
		8.72	4.41			
RCC	4	0.00	0.0	7.62	0.00	0.0
		0.5	4.31			
RCC	5	0.00	0.0	-5.6	0.00	0.0
		18.72	9.41			
RCC	6	0.0	0.0	-10.0	0.0	0.0
		30.0	12.0			

```

END
Z1      +1
Z2      +2      -1
Z3      +3      -2      -4
Z4      +4
Z5      +5      -3
Z6      +6      -5
END
1      0      2      3      4      0

```

最後の行は、対応するリージョンの物質番号である。

1. 線源条件

- 入射粒子は、エネルギー 1.253MeV の光子
- 入射粒子の角度は、Z-軸に沿って (0.0, 0.0, -5.0) に垂直入射

2. 得られる情報

- CGview 用の飛跡データ (egs5job.pic)
- 計算結果 (egs5job.out)
 - 使用する物質に関するデータ
 - 各リージョンに関する情報
 - ピーク及び全検出効率
 - レスポンス
 - NaI 検出器領域の入ってくる、光子、電子、陽電子のスペクトル

3. ユーザーコードの内容

3.1. メインプログラム: Step 1

egs5 は、Fortran で書かれているので、egs5 やジオメトリー、ユーザーコードで使われている変数の配列の大きさは、別のファイルに parameter 文で指定し、include 機能によりユーザーコードに取り入れている。common についても、同じく include 機能を用いている。

egs5 に直接関係する include 関係のファイルは、include/ディレクトリ (egs に関係するもの)、pegscommons/ (pefs に関係するもの) および auxcommons/ (egs5 の著者から提供しているジオメトリー関係のサブルーティン等ユーザーコードにのみ関係するもの) とリンクすることにより、使用できるようにしている。^{*}

この点が、Fortran のマクロ機能により、ユーザーコードで再設定できた EGS4 の場合と最も異なることである。従って、egs5 に直接関係する配列の大きさを変更場合は、include/egs5_h.f 内の、他の場合は、auxcommons/aux_h.f の当該 parameter 文の値を変更することになる。

最初の設定は、egs に直接関連する include 文である。

```

implicit none

!
-----  

! EGS5 COMMONs  

-----
include 'include/egs5_h.f'                      ! Main EGS "header" file

include 'include/egs5_bounds.f'
include 'include/egs5_edge.f'

```

^{*}これらの設定は、egs5run スクリプトで設定される。

```

include 'include/egs5_media.f'
include 'include/egs5_misc.f'
include 'include/egs5_switches.f'
include 'include/egs5_uphiot.f'
include 'include/egs5_useful.f'
include 'include/randomm.f'

```

include 'include/egs5.h.f' は必ず必要であるが、それ以外の common に関連する include 文は、メインプログラムで、使用する可能性があるものだけで良い。[†]

次の、設定は、ジオメトリー関係のサブルーティン等ユーザーコードに関連する include 文である。

```

!
-----  

Auxiliary-code COMMONs  

-----  

include 'auxcommons/aux_h.f'      ! Auxiliary-code "header" file  

include 'auxcommons/edata.f'  

include 'auxcommons/etaly1.f'  

include 'auxcommons/instuf.f'  

include 'auxcommons/lines.f'  

include 'auxcommons/watch.f'  

include 'auxcommons/etaly2.f'      ! Added SJW for energy balance  

!
-----  

cg related COMMONs  

-----  

include 'auxcommons/geom_common.f' ! geom-common file  

integer irinn

```

最後の include 文が、CG に関連したもので、CG を使用する場合には常にこの表現とする。個々のユーザーコード内で使用する common を次に定義する。

```

common/totals/                                ! Variables to score
* depe,deltae,spec(3,50),maxpict
real*8 depe,deltae,spec
integer maxpict

```

メインプログラムの先頭で、implicit none 宣言をしているので、メインプログラムで使用している全ての変数の型式宣言をする必要がある。

実行文の先頭で、使用するユニットを open する。egs5 では、pegs5 をプログラムの一部として含む構造を標準としている。pegs の実行に伴い、ユニット 7-26 は、close されることから、メインプログラムで open していても、pegs 実行後に、再度 open することが必要となる。そのため、ユニット 7-26 の使用を避ける方が良い。

```

!
-----  

! Open files  

-----  

open(6,FILE='egs5job.out',STATUS='unknown')
open(4,FILE='egs5job.inp',STATUS='old')
open(39,FILE='egs5job.pic',STATUS='unknown')

```

ユニット 39 は、飛跡情報の出力ファイルである。

その後、各カウンターをリセットするサブルーティン counters_out(0) を call する。

[†]EGS4 の COMIN マクロに対応する扱いである。

3.2. メインプログラム: Step 2

物質データ及び各物質の Characteristic Dimension を設定した後で、pegs5 を call する。medarr のデータは必ず 24 文字分を指定する必要がある。物質名が 24 文字未満の場合には空白を補って、合計 24 文字とする。Characteristic Dimension は、当該物質で構成されるリージョンの最も小さいサイズ (1 cm × 1 cm × 1 cm の立方体であれば 1cm) に設定する。

```
nmed=4

!
! =====
call block_set                      ! Initialize some general variables
!
! =====

!
! -----  

! define media before calling PEGS5
! -----  

!

medarr(1)='NAI'                      ,
medarr(2)='AL'                        ,
medarr(3)='QUARTZ'                    ,
medarr(4)='AIR-AT-NTP'                ,

do j=1,nmed
  do i=1,24
    media(i,j)=medarr(j)(i:i)
  end do
end do

chard(1) = 3.81d0          ! automatic step-size control
chard(2) = 0.1d0
chard(3) = 0.5d0
chard(4) = 5.0d0

write(6,*) 'chard =',(chard(j),j=1,nmed)

!
! -----  

! Run KEK PEGS5 before calling HATCH
! -----  

!

write(6,100)
100 FORMAT(' PEGS5-call comes next')

!
! =====
call pegr5
!
! =====
```

3.3. メインプログラム: Step 3

飛跡データファイルのフォーマットを指定する nprec1 を設定する。このユーザーコードでは、フリーフォーマットの 3 を指定する。計算結果の出力ファイルに、CG データの開始を示す CG data を書き込み、その後 CG の入力データを読み込み、cg データを指定したファイル (この場合は、6) に出力する処理を行うサブルーティン geomgt を call する。その後、CG データの終了を意味する End of CG data を出力する。次に、飛跡データファイルに必要な情報を出力する。出力ユニットである ifto は、39 に設定している。PICT のデータモードを示す文字列 (CSTA-FREE 又は、CSTA) を出力し、再度 subroutine geomgt により CG データを飛跡データファイルに出力する。最後に CG データの終了を意味する CEND を出力する。これらの処理後、cg データから、リージョン総数である nreg を引き出す。

CG を使用する場合には、この部分が必ず必要であり、変更する必要はない。

```

write(6,*)
!-----+
! initialize cg related parameter
!-----+
npreci=3      ! PICT data mode for CGView in free format
ifti = 4       ! Input unit number for cg-data
ifto = 39      ! Output unit number for PICT

write(6,fmt="(' CG data')")
call geomgt(ifti,6) ! Read in CG data
write(6,fmt="(' End of CG data',/)")
if(npreci.eq.3) write(ifto,fmt="('CSTA-FREE')")
if(npreci.eq.2) write(ifto,fmt="('CSTA')")

rewind ifti
call geomgt(ifti,ifto)! Dummy call to write geom info for ifto
write(ifto,110)
110 FORMAT('CEND')

!-----+
! Get nreg from cg input data
!-----+
nreg=izonin

!-----+
! 物質番号の設定を、CG データの最後で定義した情報から読み込んだ後、各リージョン カットオフエネルギー、オプションの設定（このユーザーコードでは、光電子の X 線の発生）を行う。
!-----+
Ranlux 乱数のシード inseed の値を設定し、初期化する。

!   Read material for each refion from egs5job.data
    read(4,*) (med(i),i=1,nreg)

!   Set option except vacuum region

    do i=2,nreg-2
        if(med(i).ne.0) then
            iphter(i) = 1      ! Switches for PE-angle sampling
            iedgfl(i) = 1      ! K & L-edge fluorescence
            iauger(i) = 0      ! K & L-Auger
            irayl(i) = 0       ! Rayleigh scattering
            lpolar(i) = 0      ! Linearly-polarized photon scattering
            incohr(i) = 0      ! S/Z rejection
            iprofr(i) = 0      ! Doppler broadening
            impacr(i) = 0      ! Electron impact ionization
        end if
    end do

!-----+
! Random number seeds. Must be defined before call hatch
! or defaults will be used. inseed (1- 2^31)
!-----+
luxlev = 1
inseed=1
write(1,120) inseed
120 FORMAT('/', ' inseed=',I12,5X,
*           ' (seed for generating unique sequences of Ranlux)')
!=====+
! call rluxinit ! Initialize the Ranlux random-number generator
!=====+

```

3.4. メインプログラム: Step 4

入射粒子のパラメータを設定する。この例では、単一エネルギーの光子(1.253MeV)が、垂直に検出器の中心に入射するとしている。なお CG を用いる場合には、irin=0 と指定することにより irin を自動的に設定することができる。このユーザーコードでは線源位置は固定なので、irin=0 の場合は、直後に irin を CG により求めるルーチンが書かれている。

```
! Define initial variables for incident particle normally incident
! on the slab
  iqin=0           ! Incident particle charge - photons
  ekein=1.253     ! Incident particle kinetic energy
  xin=0.0          ! Source position
  yin=0.0
  zin=-5.0
  uin=0.0          ! Moving along z axis
  vin=0.0
  win=1.0
  irin=0           ! Starting region (0: Automatic search in CG)
  wtin=1.0         ! Weight = 1 since no variance reduction used

! pdf data for many source
  deltae=0.05      ! Energy bin of response

!-----
! Get source region from cg input data
!-----

!
  if(irin.le.0.or.irin.gt.nreg) then
    call srzone(xin,yin,zin,iqin+2,0,irin)
    call rstnxt(iqin+2,0,irin)
  end if
```

3.5. メインプログラム: Step 5

最大電子エネルギー(全エネルギー)を表す emaxe を設定後に subroutine hatch を呼ぶ。hatch で読み込まれた物質データや、リージョンに設定した情報を確認のために出力するようにしている。

```
emaxe = ekein + RM

  write(6,130)
130  format(/' Call hatch to get cross-section data')

!
! -----
! Open files (before HATCH call)
! -----
  open(UNIT=KMPI,FILE='pgs5job.pegs5dat',STATUS='old')
  open(UNIT=KMPO,FILE='egs5job.dummy',STATUS='unknown')

  write(6,140)
140  FORMAT(/, ' HATCH-call comes next',/)

!
=====
```

3.6. メインプログラム: Step 6

普通のユーザーコードでは、このステップで形状に関する情報(平板、円筒、球等)を記述するが、本ユーザーコードでは cg で形状を指定しているので、このステップで記述する事項はない。

3.7. メインプログラム: Step 7

ausgab に必要な設定を行う。エネルギー bin の幅を、入射エネルギーと bin 数 (50) から計算する。Ncases は、ヒストリー数で、maxpict は、飛跡情報を記録するヒストリー数である。

```
! Energy bin width
deltae=ekein / 50

! Zero the variables
depe=0.D0
pefs=0.D0
pef2s=0.D0
tefs=0.D0
tef2S=0.D0
do j=1,50
    phs(j)=0.D0
    ph2s(j)=0.D0
    do ntype=1,3
        spec(ntype,j)=0.D0
        specs(ntype,j)=0.D0
        spec2s(ntype,j)=0.D0
    end do
end do

! Set histories
ncases=10000
! Set maximum number for pict
maxpict=50
```

3.8. メインプログラム: Step 8

飛跡表示ファイルにバッチ番号を出力した後で、ncases ヒストリーだけ subroutine shower を call する。各ヒストリー毎に、NaI 領域での吸収エネルギーの有無を調べ、吸収エネルギーがある場合には、全検出効率の数に wtin を加え、そのエネルギーが入射粒子の 99.9% 以上の時は、ピーク検出効率の数に wtin を加える。また、吸収エネルギーの値により、波高分布の対応するチャンネルに wtin を加える。統計誤差評価のために、粒子スペクトルを含め上記の変数のヒストリー毎の結果の自乗値の和を求めておく。

```
! Write batch number
write(39,fmt="(0      1')")

do i=1,ncases
    ! -----
    ! Start of shower call-loop
    ! -----
    ! Select incident energy
    eparte = 0.d0
    epartd = 0.d0
    ! Initialize some energy-balance
    ! tallying parameters (SJW)
    ekin = ekein
    wtin = 1.0

    wtsum = wtsum + wtin
    etot = ekin + iabs(iqin)*RM
    if(iqin.eq.1) then
        availke = ekin + 2.0*RM
    else
        availke = ekin
    end if
    ! Keep running sum of weights
    ! Incident total energy (MeV)
    ! Available K.E. (MeV) in system
    ! for positron
    ! Available K.E. (MeV) in system
    ! for photon and electron
```

```

totke = totke + availke           ! Keep running sum of KE

!
!-----Select incident angle-----!

!
!-----Print first NWRITE or NLINES, whichever comes first-----
!
if (ncount .le. nwrite .and. ilines .le. nlines) then
  ilines = ilines + 1
  write(6,280) etot,xin,yin,zin,uin,vin,win,iqin,irin,idin
280   FORMAT(4G15.7/3G15.7,3I5)
end if

!
!=====call shower (iqin,etot,xin,yin,zin,uin,vin,win,irin,wtin)=====
!
!-----Added for energy balance tests (SJW)-----
if(DABS(eparte + epartd - availke)/availke .gt. 1.d-10) then
  write(6,290) icases, eparte, epartd
290   FORMAT('Error on # ',I6,' Escape = ',F9.5,
*          ' Deposit = ',F9.5)
end if

!
!-----If some energy is deposited inside detector add pulse-height
!-----and efficiency.-----

if (depe .gt. 0.D0) then
  ie=depe/deltae + 1
  if (ie .gt. 50) ie = 50
  phs(ie)=phs(ie)+wtin
  ph2s(ie)=ph2s(ie)+wtin*wtin
  tefs=tefs + wtin
  tef2s=tef2s + wtin*wtin
  if(depe .ge. ekein*0.999) then
    pefs=pefs +wtin
    pef2s=pef2s +wtin
  end if
  depe = 0.D0
end if
do ntype=1,3
  do ie=1,50
    specs(ntype,ie)=specs(ntype,ie)+spec(ntype,ie)
    spec2s(ntype,ie)=spec2s(ntype,ie) +
*      spec(ntype,ie)*spec(ntype,ie)
    spec(ntype,ie)=0.D0
  end do
end do

ncount = ncount + 1           ! Count total number of actual cases

!
!-----End of CALL SHOWER loop-----
!

call plotxyz(99,0,0,0.D0,0.D0,0.D0,0.D0,0,0.D0)

write(39,fmt="(9'')")         ! Set end of batch for CG View

```

3.8.1. 統計誤差: x をモンテカルロ計算で計算したい量(スコアーする量)とする。モンテカルロ計算の結果には、その統計誤差が必要である。ucnaicgv.fでは、次のようなMCNPで使用してい

る方法を採用している。

- ヒストリー数を N とする。
- x_i を i 番目のヒストリーの結果とする。
- x の平均値を計算する:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (1)$$

- x_i の分散値を以下の式から求める。:

$$s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \simeq \bar{x^2} - \bar{x}^2 \quad (\bar{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2). \quad (2)$$

- \bar{x} の分散値は、

$$s_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{N} s^2 \simeq \frac{1}{N} [\bar{x^2} - \bar{x}^2] \quad (3)$$

となる。

- 統計誤差として、

$$s_{\bar{x}} \simeq \left[\frac{1}{N} (\bar{x^2} - \bar{x}^2) \right]^{1/2} \quad (4)$$

を用いる。

先の計算した結果とその自乗の和は、上記の処理に用いる。

3.9. メインプログラム: Step 9

得られた結果を処理して打ち出す処理を行う。ピーク検出効率、全検出効率及び波高分布について、ヒストリー毎の結果の和と結果の自乗和から、平均値とその統計誤差を求めて出力する。

```

!
!-----#
! Calculate average and its deviation
!-----#
!
!
!-----#
! Peak efficiency
!-----#
avpe = pefs/ncount
pef2s=pef2s/ncount
sigpe=dsqrt((pef2s-avpe*avpe)/ncount)
avpe = avpe*100.0
sigpe = sigpe*100.0
write(6,350) avpe,sigpe
350 FORMAT(' Peak efficiency = ',G11.4,'+-',G9.2,' %')
!
!-----#
! Total efficiency
!-----#
avte = tefs/ncount
tef2s = tef2s/ncount
sigte = dsqrt((tef2s-avte*avte)/ncount)
avte = avte*100.0
sigte = sigte*100.0
write(6,360) avte,sigte
360 FORMAT(' Total efficiency = ',G11.4,'+-',G9.2,' %')

```

```

!
!-----  

! Pulse height distribution  

!-----  

! write(6,370)  

370 FORMAT(' Pulse height distribution ')  

do ie=1,50  

  elow=deltae*(ie-1)  

  eup=deltae*ie  

  if (elow .gt. ekein ) go to 390  

  avph = phs(ie)/ncount  

  ph2s(ie)=ph2s(ie)/ncount  

  sigph=dsqrt((ph2s(ie)-avph*avph)/ncount)  

  avph = avph/deltae  

  sigph= sigph/deltae  

  write(6,380) eup,avph,sigph  

380  FORMAT(' E (upper-edge --',G10.4,' MeV )=',G15.5,'+-',G15.5,  

*           ' counts/MeV/incident');  

  end do  

390  continue

```

その後、同様にして NaI 検出器に入射した粒子のスペクトルについて、平均と統計誤差を求めて出力する。

3.10. Subroutine ausgab

AUSGAB は、ユーザが求める情報をスコアするサブルーチンである。最初に、メインプログラムと同様に、include 文及びローカル変数の型式宣言を行う。

iarg < 5 の場合には、それぞれのリージョンでの吸収エネルギーを計算する。

物質番号が 1(NaI) の時は、ステップ中での吸収エネルギーを、検出器の吸収エネルギーに加える。検出器中で更に、粒子が外部から検出器部に入ってきた場合かどうかの判定を行い、外部から入ってきた粒子の場合は、粒子に応じて、エネルギー毎の集計用配列変数に wt を加算する。ヒストリー数が maxpict 以下の時は、飛積情報を出力するために plotxyz を call する。

```

!
!-----  

! Set some local variables  

!-----  

  irl = ir(np)  

  iql = iq(np)  

  edepwt = edep*wt(np)  

!
!-----  

! Keep track of energy deposition (for conservation purposes)  

!-----  

  if (iarg .lt. 5) then  

    esum(iql+2,irl,iarg+1) = esum(iql+2,irl,iarg+1) + edepwt  

    nsum(iql+2,irl,iarg+1) = nsum(iql+2,irl,iarg+1) + 1  

!
! added SJW for particle by particle energy balance  

  if(irl.eq.1) then  

    eparte = eparte + edepwt  

  else  

    epartd = epartd + edepwt  

  endif  

  end if  

!
!-----  


```

```

! Score energy deposition inside NaI detector
-----
if (med(irl). eq. 1) then
  depe = depe + edepwt

-----
Score particle information if it enters from outside
-----
if (irl .ne. irold .and. iarg .eq. 0) then
  if (iql .eq. 0) then          ! photon
    ntype=1
    ie = e(np)/deltae +1
    if(ie .gt. 50) ie = 50
  elseif (iql .eq. -1) then      ! electron
    ntype=2
    ie = (e(np) - RM)/deltae +1
    if(ie .gt. 50) ie = 50
  else                          ! positron
    ntype=3
    ie = (e(np) - RM)/deltae +1
    if(ie .gt. 50) ie = 50
  end if
  spec(ntype,ie) = spec(ntype,ie) + wt(np)
end if
end if

-----
Print out stack information (for limited number cases and lines)
-----
if (ncount .le. nwrite .and. ilines .le. nlines) then
  ilines = ilines + 1
  write(6,100) e(np),x(np),y(np),z(np),u(np),v(np),w(np),
*           iql,irl,iarg
100   FORMAT(4G15.7/3G15.7,3I5)
end if

-----
Print out particle transport information (if switch is turned on)
-----
=====
if (iwatch .gt. 0) call swatch(iarg,iwatch)
=====

-----
Output particle information for plot
-----
if (ncount.le.maxpict) then
  call plotxyz(iarg,np,iq(np),x(np),y(np),z(np),e(np),ir(np),
*           wt(np))
end if

return
end

```

3.11. Subroutine howfar

CG を利用するかぎりユーザーが howfar を変更する必要は一切ない。

以下、参考のため howfar の機能を述べる。howfar は、粒子の進行方向でのリージョン境界までの距離を計算し、反応点までの距離との比較をし、境界までの距離の方が短い場合には粒子の移動距離を境界までの距離に置き換え、リージョンが変わるという処理を行う。

その他に、howfar では、ユーザが粒子の追跡を止める設定を行う (idisc=1)。通常は、粒子が検

討している領域の外に出て追跡を終了する場合にこの設定を行う。

4. ucnaif.f と ucnaicgv.f の計算速度の比較

複雑な形状の計算を行う場合には、cg は相対的に容易であるが、反面、円筒平板形状の howfar に較べ、計算時間が長いという問題がある。対象とする問題によって、違いは異なるが、円筒平板形状を使用している ucnaif.f と ucnaicgv.f で全く同じ条件の計算を行うと、ucnaif.f の方が 1.6 倍速いという結果が得られている。[2]

5. 実習課題

5.1. 実習課題 1 : NaI 検出器の計算

次のように変更して、ピーク検出効率及び全検出効率の変化を調べよ。

1. 線源を、Cs-137 の単一エネルギー光子 (0.662MeV) に変える。
2. 線源を、Co-60 に変え、1.173MeV と 1.333MeV 光子と同じ確率で発生させる。
3. 1.253MeV 線源について、一方向 (Z-方向) のみに放出している線源光子を、等方線源に変更する。
4. 1.253MeV 一方向線源で、検出器の有感領域の厚さを 2 倍する。

5.2. 実習課題 2 : Ge 検出器の計算

検出器を、Ge に変更して、同じ大きさの NaI と、1.253MeV 線源に対するピーク及び全検出効率と比較せよ。

5.3. 実習課題 3 : 空気電離箱の計算

検出器を、 20° 、1 気圧の空気に変え、1.253MeV 線源に対して、吸収エネルギーを求めよ。検出器の途中のギャップを除き、3 インチ直径で 3 インチ長さの空気の領域の周辺に厚さ、5mm の Al がある形状とする。Al カバーの周辺に厚さ 5cm の空気層があるとする。

空気の W 値 (33.97eV/pair) を用いて、入射光子 1 個当たりのこの電離箱の出力 (Coulomb/source) を求めよ。電荷素量を、 1.602×10^{-19} C/e とする。

6. 実習課題の解答例

比較のために、ucnaicgv.f の計算モードで、ヒストリー数 10000 の場合の結果 (egs5job.out) を別な名称のファイル名 (例えば、nai.out) で保存しておく。

6.1. 実習課題 1

1. Cs-137 線源

- cp ucnaicgv.f ucnaicgv1.f
- cp ucnaicgv.data ucnaicgv1.data
- cp ucnaicgv.inp ucnaicgv1.inp
- ucnaicgv1.f を以下のように変更する。
 - ucnaicgv1.f 中の

```
ekein=1.253      ! Incident particle kinetic energy
```

を

```
ekein=0.662      ! Incident particle kinetic energy
```

に変更する。
- ucnaicgv1.f を egs5run で実行する。
ユニット 4、ユニット 25 のファイル名は、何も入力しないでリターンする。
- ”Does this user code read from the terminal?” に対して 1 を入力する。
- 計算が終了したら、egs5job.out を調べ、1.253MeV の結果と比較する。計算結果をもっともよく表す指標として、ピーク効率と全効率を下の表に示す。

変更前後の効率		
	ピーク効率 (P_{eff})	全効率 (T_{eff})
ucnaicgv	37.9 ± 0.5 %	77.0 ± 0.4 %
ucnaicgv1	59.5 ± 0.5 %	87.5 ± 0.3 %

なお、計算機、コンパイラの違いにより、計算の状況がかわり、数値は統計誤差程度の変動を示すことがありうる。

2. Co-60 source

- cp ucnaicgv.f ucnaicgv2.f
- cp ucnaicgv.data ucnaicgv2.data
- cp ucnaicgv.inp ucnaicgv2.inp
- ucnaicgv2.f を以下のように変更する。
 - 最高エネルギーの変更

```
ekein=1.253      ! Incident particle kinetic energy
```

を

```
ekein=1.333      ! Incident particle kinetic energy
```

に変更する。
 - 線源のエネルギー決定部分の変更

```
ekin = ekein
```

を

```
call randomset(rnnow)
if(rnnow.le.0.5) then
    ekin=1.173
else
    ekin=1.333
end if
```

に変更する。

– 入射エネルギー出力部の変更

```
      write(1,340) ekin
340   FORMAT(' Results for ',G15.5,'MeV photon')
```

を

```
      write(1,340)
340   FORMAT(' Results for Co-60 gamma-ray (1.173 and 1.333 MeV')/)
```

に変更する。

- ucnaicgv2.f を egs5run で実行する。
ユニット 4、ユニット 25 のファイル名は、何も入力しないでリターンする。
- ”Does this user code read from the terminal?”に対して 1 を入力する。
- 計算が終了したら、egs5job.out を調べ、1.253MeV の結果と比較する。波高分布に 2 つの入射エネルギーに対応したピークがあることを確認する。

3. 等方線源

- cp ucnaicgv.f ucnaicgv3.f
- cp ucnaicgv.data ucnaicgv3.data
- cp ucnaicgv.inp ucnaicgv3.inp
- ucnaicgv3.f を以下の様に変更する。
 - 2π での等方角度分布をサンプリングする文を追加する。

```
! -----
|   Select incident angle
! -----
```

を

```
! -----
|   Select incident angle
! -----
275    call randomset(rnnow)
        zi0=rnnow
        call randomset(rnnow)
        xi0=2.0*rnnow-1.0
        call randomset(rnnow)
        yi0=2.0*rnnow-1.0
        rr0=dsqrt(xi0*xi0+yi0*yi0+zi0*zi0)
        if(rr0.gt.1.0) go to 275
        win = zi0/rr0
        uin = xi0/rr0
        vin = yi0/rr0
```

に変更。

- ucnaicgv3.f を egs5run で実行する。
ユニット 4、ユニット 25 のファイル名は、何も入力しないでリターンする。
- ”Does this user code read from the terminal?”に対して 1 を入力する。

- 計算が終了したら、CGview の”体系・飛跡データの読み込み”で、egs5job.pic を選択し、等方線源となっていることを確認する。
- egs5job.out を調べ、ビーム入射の場合と結果を比較する。
結果の例: $P_{\text{eff}} = 3.4 \pm 0.2 \%$, $T_{\text{eff}} = 9.0 \pm 0.3 \%$

4. 長さ 2 倍の NaI

- `cp ucnaicgv.f ucnaicgv4.f`
- `cp ucnaicgv.data ucnaicgv4.data`
- `cp ucnaicgv.inp ucnaicgv4.inp`
- `ucnaicgv4.f` を以下のように変更する。

- 検出器の長さの変更

`tdet=7.62`

を

`tdet=7.62*2.0`

に変更する。

- この修正は、計算とは直接関係しないことである。CG を使用する場合、CG 入力データから検出器のサイズ等を直感できないので、どの様な形狀の計算か判るようにするためのものである。実際の形狀の変更は、`ucnaicgv4.data` で行う。

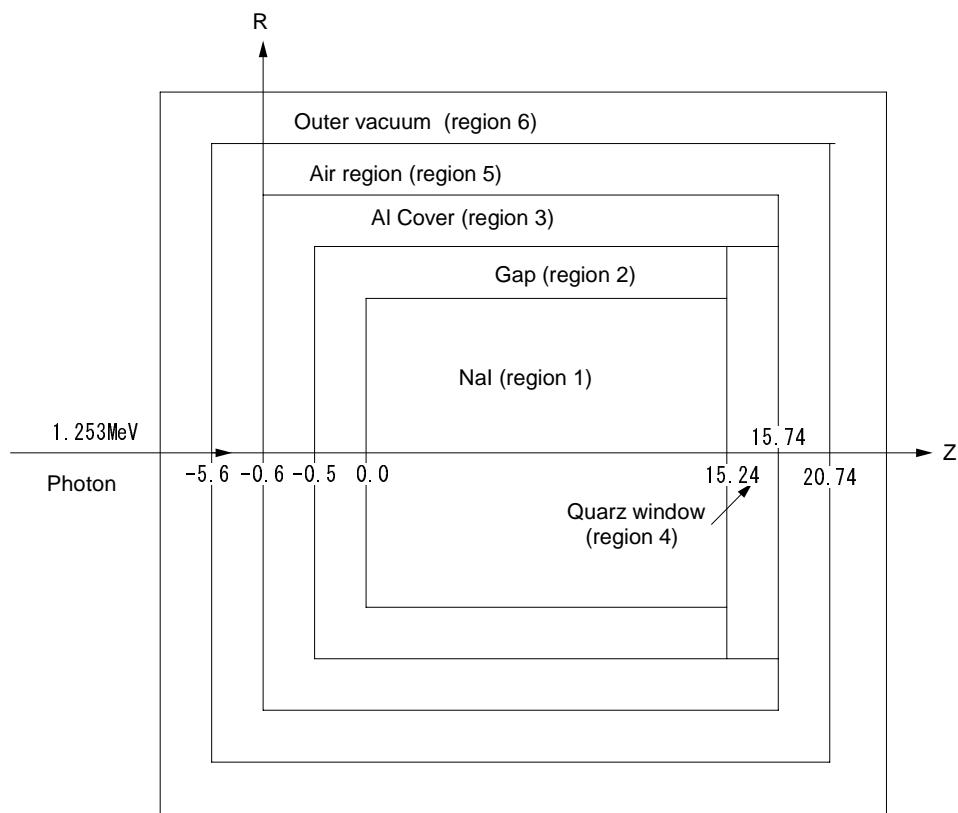


図 4: Geometry of ucnaicgv4.f

- `ucnaicgv4.data` を以下の様に変更する。

```

RCC    1      0.00      0.0      0.0      0.00      0.0
          15.24     3.81
RCC    2      0.00      0.0     -0.5      0.00      0.0
          15.74     4.31
RCC    3      0.00      0.0     -0.6      0.00      0.0
          16.34     4.41
RCC    4      0.00      0.0     15.24      0.00      0.0
          0.5      4.31
RCC    5      0.00      0.0     -5.6      0.00      0.0
          26.34     9.41
RCC    6      0.00      0.0    -10.0      0.00      0.0
          36.74    12.0
END
Z1      +1
Z2      +2      -1
Z3      +3      -2      -4
Z4      +4
Z5      +5      -3
Z6      +6      -5
END
1      0      2      3      4      0

```

- 作成した ucnaicgv4.data をチェックする。

- CGview の”体型データ作成”のファイル作成を選択。
- ファイルの種類として”すべてのファイル”とし、ucnaicgv4.data を選択する。
- 表示を選択し、設定通りに形状となっていることを確認する。
- ”設定”の”体型定義確認”を実施する。

- ucnaicgv4.f を egs5run で実行する。

ユニット 4、ユニット 25 のファイル名は、何も入力 CGview しないでリターンする。

- ”Does this user code read from the terminal?”に対して 1 を入力する。

- 計算が終了したら、CGview の”体系・飛跡データの読み込み”で、egs5job.pic を選択し、検出器の長さが 2 倍になっていることを確認する。

- egs5job.out を調べ、元の長さの結果と比較する。

結果の例: $P_{\text{eff}} = 53.4 \pm 0.5\%$, $T_{\text{eff}} = 93.9 \pm 0.2\%$

6.2. 実習課題 2

1. cp ucnaicgv.f ucnaicgv5.f
2. cp ucnaicgv.data ucnaicgv5.data
3. cp ucnaicgv.inp ucnaicgv5.inp
4. ucnaicgv5.f を以下のように変更する。

- 物質の変更

```
medarr(1)='NAI' ,
```

を

```
medarr(1)='GE' ,
```

に変更する。ここで medarr のデータとして、24 文字を指定していることに注意せよ。

5. ucnaicgv5.inp の変更

```
COMP
  &INP NE=2,RHO=3.67, PZ=1,1,IRAYL=1 /END
    NAI
    NAI
  NA I
```

を

```
ELEM
  &INP IRAYL=1 /END
    GE
    GE
```

に変更する。(1行に2度、GEと書く場合は31カラム目から書くことに注意せよ。)

6. ucnaicgv5.f を egs5run で実行する。

ユニット4、ユニット25のファイル名は、何も入力しないでリターンする。

7. "Does this user code read from the terminal?"に対して1を入力する。

8. 計算が終了したら、egs5job.out を調べ、NaIの結果と比較する。

結果の例: $P_{\text{eff}} = 39.6 \pm 0.5 \%$, $T_{\text{eff}} = 87.3 \pm 0.3 \%$

6.3. 実習課題3

1. cp ucnaicgv.f ucioncgv.f
2. cp ucnaicgv.data ucioncgv.data
3. cp ucnaicgv.inp ucioncgv.inp
4. ucioncgv.f を以下のように修正する。

- 計算結果の統計処理で使用する変数を追加

```
* xi0,yi0,zi0
```

を

```
* xi0,yi0,zi0,avab,depes,depe2s,sigab
```

に変更。

- 使用する物質数の変更。

```
character*24 medarr(4)
```

を

```
character*24 medarr(2)
```

に,

```
nmed=4
```

を

```
nmed=2
```

に変更。

- 物質名の変更。

```
medarr(1)='NAI' ,
medarr(2)='AL' ,
medarr(3)='QUARTZ' ,
medarr(4)='AIR-AT-NTP' ,
```

を

```
medarr(1)='AIR-AT-NTP' ,  
medarr(2)='AL' ,
```

に変更。

- 物質の数の減少にともない不要となった chard 指定文を削除。

```
chard(3) = 0.5d0  
chard(4) = 5.0d0
```

を削除。

- 初期化変数の追加

```
! Zero the variables  
depe=0.D0
```

を

```
! Zero the variables  
depe=0.D0  
depes=0.D0  
depe2s=0.D0
```

に変更

- ヒストリーフィルを 100,000 に増やす。

```
! Set histories  
ncases=10000
```

を。

```
! Set histories  
ncases=100000
```

に変更する。

- 空気中での吸収エネルギーを合計するルーチンの追加。

```
if (depe .gt. 0.D0) then  
  ie=depe/deltae + 1
```

を

```
if (depe .gt. 0.D0) then  
  depes=depes+depe  
  depe2s=depe2s+depe*depe  
  ie=depe/deltae + 1
```

に変更

- 円筒と平板数の減少に伴い、計算終了後の形状に関する出力部を変更する。

```
tdet=7.62  
rdet=3.81  
tcov=0.1  
rtcov=0.1  
tgap=0.5  
rtgap=0.5  
330  write(1,330) tdet,rdet,tcov,rtcov,tgap,rtgap  
      FORMAT(/' Detector length=',G15.5,' cm'/'  
      *      ' Detector radius=',G15.5,' cm'/'  
      *      ' Al cover thickness=',G10.2,' cm'/'  
      *      ' Al cover side thickness=',G10.2,' cm'/'  
      *      ' Front gap =',G10.2,' cm'/' Side gap =',G10.2,' cm'/)
```

を

```
    tdet=7.62
    rdet=3.81
    tcov=0.5
    rtcov=0.5
    write(1,330) tdet,rdet,tcov,rtcov
330  FORMAT(/' Detector length=',G15.5,', cm'/
*           ' Detector radius=',G15.5,', cm'/
*           ' Al cover thickness=',G10.2,', cm'/
*           ' Al cover side thickness=',G10.2,', cm'/)
```

に変更する。

- 空気中での平均吸収エネルギーとその統計誤差を計算する以下のルーチン、及び出力を計算するルーチンを加える。

```
! -----
! Pulse height distribution
! -----
write(1,370)
```

を

```
! -----
! Absorbed energy in air
! -----
avab = depes/ncount
depe2s = depe2s/ncount
sigab = sqrt((depe2s - avab*avab)/ncount)
write(6,362) avab,sigab
362  FORMAT(' Absorbed energy in air =',G10.3,'+-',G9.2,', MeV/photon')
avab = avab /33.97D-6 *1.602D-19
sigab= sigab /33.97D-6 *1.602D-19
write(6,364) avab,sigab
364  FORMAT(' Output current =',G10.3,'+-',G9.2,', C/photon')

! -----
! Pulse height distribution
! -----
write(1,370)
```

に変更する。

5. ucioncgv.data を以下のように変更する。

RCC	1	0.00	0.0	0.0	0.00	0.0
		7.62	3.81			
RCC	2	0.00	0.0	-0.5	0.00	0.0
		8.62	4.31			
RCC	3	0.00	0.0	-5.5	0.00	0.0
		18.62	9.31			
RCC	4	0.00	0.0	-6.0	0.00	0.0
		20.62	10.31			
END						
Z1		+1				
Z2		+2	-1			
Z3		+3	-2			
Z4		+4	-3			
END						
	1	2	1	0		

6. ucnioncgv.inp を以下のように変更する。

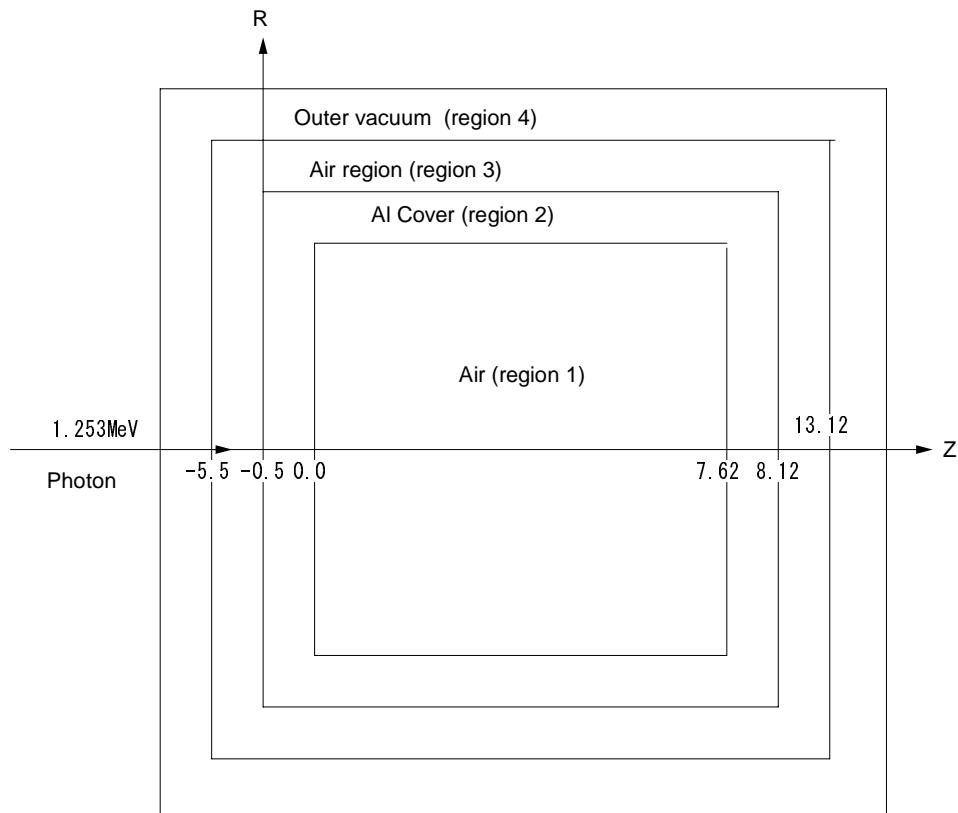


図 5: Geometry of ucioncgv.f

```

MIXT
&INP NE=3,RHO= 1.2050E-03,RHOZ= 0.755,0.232,0.013,
      GASP=0.93174, IRAYL=1 /END
AIR-AT-NTP          AIR-GAS
N O AR
ENER
&INP AE=0.521,AP=0.010,UE=2.511,UP=2.0 /END
PWLF
&INP /END
DECK
&INP /END
ELEM
&INP IRAYL=1 /END
AL           AL
AL
ENER
&INP AE=0.521,AP=0.010,UE=2.511,UP=2.0 /END
PWLF
&INP /END
DECK
&INP /END

```

7. ucioncgv.f を egs5run で実行する。

ユニット 4 及びユニット 25 のファイル名は、何も入力しないでリターンする。

8. "Does this user code read from the terminal?" に対して 1 を入力する。

9. 計算が終了したら、CGview の「体系・飛跡データの読み込み」で、egs5job.pic を選択し、形状及び飛跡が NaI の場合と違っていることを確認する。

10. egs5job.out を調べ、計算したい情報が得られていることを確認する。結果の例を下の表に示す。

電離箱の計算結果	
ピーク効率 P_{eff} (%)	0.0
全効率 T_{eff} (%)	1.4 ± 0.4e-1
吸収エネルギー (MeV/ γ)	0.24e-3 ± 0.9e-5
出力 (C/ γ)	0.11e-17 ± 0.4e-19

参考文献

- [1] T. Torii and T. Sugita, “Development of PRESTA-CG Incorporating Combinatorial Geometry in EGS4/PRESTA”, *JNC TN1410 2002-201*, Japan Nuclear Cycle Development Institute (2002).
- [2] T. Sugita, T. Torii, A. Takamura, “Incorporating Combinatorial Geometry to the EGS5 Code and Its Speed-Up”, Twelfth EGS User’s Meeting in Japan, KEK Proc. **2005-10**, 7-21, (KEK, Tsukuba, 9 - 11 Aug. 2005).

Appendix 1 Full listings of ucnaicgv.f

```
*****
***** KEK, High Energy Accelerator Research *
***** Organization *
*** u c n a i c g v *****
***** EGS5.0 USER CODE - 08 July 2006/1600 *
***** This is a general User Code based on the cg geometry scheme. *
***** *
PROGRAMMERS: H. Hirayama *
Applied Research Laboratory *
KEK, High Energy Accelerator Research Organization *
1-1, Oho, Tsukuba, Ibaraki, 305-0801 *
Japan *
E-mail: hideo.hirayama@kek.jp *
Telephone: +81-29-864-5451 *
Fax: +81-29-864-4051 *
Y. Namito *
Radiation Science Center *
Applied Research Laboratory *
KEK, High Energy Accelerator Research Organization *
1-1, Oho, Tsukuba, Ibaraki, 305-0801 *
Japan *
E-mail: yoshihito.namito@kek.jp *
Telephone: +81-29-864-5489 *
Fax: +81-29-864-1993 *
*****
***** The ucnaicgv.f User Code requires a cg-input file only *
***** (e.g., ucnaicgv.data). *
***** The following shows the geometry for ucnaicg.data. *
***** Input data for CG geometry must be written at the top of data-input *
***** file together with material assignment to each region. Cg-data can *
***** be checked by CGview. *
***** This user code corresponds to ucnaicgp.mor for egs4. *
***** Use Ranlux random number generator. *
***** *
----- cg Geometry (ucnaicgv) -----
*****
R
+
+-----+-----+-----+
|           Outer vacuum region           |
+-----+-----+-----+-----+ R=9.41
|           Air                         |
+-----+-----+-----+-----+ R=4.41
|           Al cover                    |
+-----+-----+-----+-----+ R=4.31
|           Gap                         |
+-----+-----+-----+-----+ R=3.81
|           Quartz                     |
+-----+-----+-----+-----+
NaI
1.253 MeV
======>+-----+-----+-----> Z
photons -5.6 -0.6 -0.5 0.0    7.62 8.12 13.12
      -5.0
*****
23456789|123456789|123456789|123456789|123456789|123456789|123456789|12
-----
----- main code -----
-----
Step 1: Initialization
-----
implicit none
```

```

-----  

EGS5 COMMONS  

-----  

include 'include/egs5_h.f'           ! Main EGS "header" file  

include 'include/egs5_bounds.f'  

include 'include/egs5_brempr.f'  

include 'include/egs5_edge.f'  

include 'include/egs5_media.f'  

include 'include/egs5_misc.f'  

include 'include/egs5_thresh.f'  

include 'include/egs5_uphiot.f'  

include 'include/egs5_useful.f'  

include 'include/egs5_usersc.f'  

include 'include/egs5_userxt.f'  

include 'include/randomm.f'  

-----  

Auxiliary-code COMMONS  

-----  

include 'auxcommons/aux_h.f'      ! Auxiliary-code "header" file  

include 'auxcommons/edata.f'  

include 'auxcommons/etaly1.f'  

include 'auxcommons/instuf.f'  

include 'auxcommons/lines.f'  

include 'auxcommons/nfac.f'  

include 'auxcommons/watch.f'  

include 'auxcommons/etaly2.f'       ! Added SJW for energy balance  

-----  

cg related COMMONS  

-----  

include 'auxcommons/geom_common.f' ! geom-common file  

integer irinn  

common/totals/                      ! Variables to score  

* depe,deltae,spec(3,50),maxpict  

real*8 depe,deltae,spec  

integer maxpict  

!**** real*8                           ! Arguments  

real*8 totke  

real*8 rnnow,etot  

real*8 esumt  

real*8                                     ! Local variables  

* availke,avpe,avph,avspe,avspg,avspp,avte,desci2,ekin,pefs,pef2s,  

* rr0,sigpe,sigte,sigph,sigspg,sigspe,sigspp,tefs,tef2s,wtin,wtsum,  

* xi0,yi0,zi0  

real*8  

* phs(50),ph2s(50),specs(3,50),spec2s(3,50)  

real                                         ! Local variables  

* elow,eup,rdet,rtcov,rtgap,tcov,tdet,tgap  

real  

* tarray(2),tt,tt0,tt1,cputime  

integer  

* i,icases,idin,ie,ifti,ifto,ii,iiz,imed,ireg,isam,  

* izn,nlist,j,k,n,ner,ntype  

character*24 medarr(4)  

-----  

Open files  

-----  

Units 7-26 are used in pegs and closed. It is better not  

to use as output file. If they are used, they must be opened  

after getcg etc. Unit for pict must be 39.  

-----  

open(6,FILE='egs5job.out',STATUS='unknown')  

open(4,FILE='egs5job.inp',STATUS='old')  

open(39,FILE='egs5job.pic',STATUS='unknown')

```

```

!
! =====
call counters_out(0)
! =====

!--- Step 2: pegs5-call
-----

!
! ----- Define media before calling PEGS5 -----
!

nmed=4

!
! ===== call block_set           ! Initialize some general variables
! =====

medarr(1)='NAI'                   ,
medarr(2)='AL'                    ,
medarr(3)='QUARTZ'                ,
medarr(4)='AIR-AT-NTP'             ,

do j=1,nmed
  do i=1,24
    media(i,j)=medarr(j)(i:i)
  end do
end do

chard(1) = 7.62d0      ! automatic step-size control
chard(2) = 0.1d0
chard(3) = 0.5d0
chard(4) = 5.0d0

write(6,*) 'chard =',(chard(j),j=1,nmed)

!
! ----- Run KEK PEGS5 before calling HATCH -----
!

write(6,100)
100 FORMAT(' PEGS5-call comes next')

!
! ===== call pegs5
! =====

!--- Step 3: Pre-hatch-call-initialization
-----

write(6,*) 'Read cg-related data'

!
! ----- Initialize CG related parameters -----
!

npreci=3      ! PICT data mode for CGView in free format

ifti = 4      ! Input unit number for cg-data
ifto = 39     ! Output unit number for PICT

write(6,fmt="(' CG data')") 
call geomgt(ifti,6) ! Read in CG data
write(6,fmt="(' End of CG data',/)")

if(npreci.eq.3) write(ifto,fmt="('CSTA-FREE')")
if(npreci.eq.2) write(ifto,fmt="('CSTA')")

rewind ifti
call geomgt(ifti,ifto)! Dummy call to write geom info for ifto
write(ifto,110)
110 FORMAT('CEND')

!--- Get nreg from cg input data
-----

nreg=izonin

!
! Read material for each refion from egs5job.data
read(4,*) (med(i),i=1,nreg)

!
! Set option except vacuum region

```

```

do i=1,nreg-1
  if(med(i).ne.0) then
    iphter(i) = 1      ! Switches for PE-angle sampling
    iedgfl(i) = 1      ! K & L-edge fluorescence
    iauger(i) = 0      ! K & L-Auger
    iraylrl(i) = 0     ! Rayleigh scattering
    lpolar(i) = 0       ! Linearly-polarized photon scattering
    incohr(i) = 0       ! S/Z rejection
    iprofr(i) = 0       ! Doppler broadening
    impacr(i) = 0       ! Electron impact ionization
  end if
end do

! -----
! Random number seeds. Must be defined before call hatch
! or defaults will be used. inseed (1- 2^31)
! -----
luxlev = 1
inseed=1
120 write(6,120) inseed
FORMAT('/', 'inseed=', I12,5X,
*           '(seed for generating unique sequences of Ranlux)')
!
======
call rluxinit ! Initialize the Ranlux random-number generator
=====
! -----
! Step 4: Determination-of-incident-particle-parameters
! -----
! Define initial variables for incident particle normally incident
! on the slab
iqin=0          ! Incident particle charge - photons
ekein=1.253    ! Incident particle kinetic energy
xin=0.0         ! Source position
yin=0.0
zin=-5.0
uin=0.0          ! Moving along z axis
vin=0.0
win=1.0
irin=0          ! Starting region (0: Automatic search in CG)
wtin=1.0         ! Weight = 1 since no variance reduction used
!
pdf data for many source
deltae=0.05      ! Energy bin of response

! -----
! Get source region from cg input data
! -----
!
if(irin.le.0.or.irin.gt.nreg) then
  call srzone(xin,yin,zin,iqin+2,0,irin)
  call rstnxt(iqin+2,0,irin)
end if

! -----
! Step 5: hatch-call
! -----
!
! Maximum total energy of an electron for this problem must be
! defined before hatch call
emaxe = ekein + RM          ! photon
!
write(6,130)
130 format('/', 'Call hatch to get cross-section data')

! -----
! Open files (before HATCH call)
! -----
open(UNIT=KMPI,FILE='pgs5job.pegs5dat',STATUS='old')
open(UNIT=KMP0,FILE='egs5job.dummy',STATUS='unknown')

write(6,140)
140 FORMAT('/', 'HATCH-call comes next',/)

!
======
call hatch
=====
!
```

```

!     Close files (after HATCH call)
! -----
!     close(UNIT=KMPI)
!     close(UNIT=KMP0)

! -----
!     Print various data associated with each media (not region)
! -----
      write(6,150)
150  FORMAT('/', Quantities associated with each MEDIA:')
      do j=1,nmed
        write(6,160) (media(i,j),i=1,24)
160  FORMAT('/',1X,24A1)
        write(6,170) rhom(j),rlcm(j)
170  FORMAT(5X,' rho=',G15.7,' g/cu.cm      rlc=',G15.7,' cm')
        write(6,180) ae(j),ue(j)
180  FORMAT(5X,' ae=',G15.7,' MeV    ue=',G15.7,' MeV')
        write(6,190) ap(j),up(j)
190  FORMAT(5X,' ap=',G15.7,' MeV    up=',G15.7,' MeV',/)
      end do

! -----
!     Print media and cutoff energies assigned to each region
! -----
      do i=1,nreg
        if (med(i) .eq. 0) then
          write(6,200) i
          FORMAT(' medium(',I3,')=vacuum')
        else
          write(6,210) i,(media(ii,med(i)),ii=1,24),ecut(i),pcut(i)
210  FORMAT(' medium(',I3,')=',24A1,
           'ecut=',G10.5,' MeV, pcut=',G10.5,' MeV')
        *
        -----Print out energy information of K- and L-X-rays
        -----
        if (iedgfl(i) .ne. 0) then          ! Output X-ray energy
          ner = nne(med(i))
          do iiz=1,ner
            izn = zelem(med(i),iiz) ! Atomic number of this element
            write(6,220) izn
            FORMAT(' X-ray information for Z=',I3)
            write(6,230) (ekx(ii,izn),ii=1,10)
            FORMAT(' K-X-ray energy in keV',/,
                   4G15.5/,4G15.5/,2G15.5)
            write(6,240) (elx1(ii,izn),ii=1,8)
            FORMAT(' L-1 X-ray in keV',/,4G15.5/,4G15.5)
            write(6,250) (elx2(ii,izn),ii=1,5)
            FORMAT(' L-2 X-ray in keV',/,5G15.5)
            write(6,260) (elx3(ii,izn),ii=1,7)
            FORMAT(' L-3 X-ray in keV',/,4G15.5/,3G15.5)
          end do
          end if
        end if
      end do
      write(6,fmt="(' CG data')")

      write(39,fmt="('MSTA')")
      write(39,fmt="(i4)") nreg
      write(39,fmt="(15i4)") (med(i),i=1,nreg)
      write(39,fmt="('MEND')")

! -----
!     Step 6: Initialization-for-howfar
! -----
! -----
!     Step 7: Initialization-for-ausgab
! -----



      ncount = 0
      ilines = 0
      nwrite = 10
      nlines = 10
      idin = -1
      totke = 0.
      wtsum = 0.

      =====
      call ecnsv1(0,nreg,totke)
      call ntally(0,nreg)

```

```

!
=====
270 write(6,270)
      format( /, ' Energy/coordinates/direction cosines/etc.',/,
      *           6X,'e',16X,'x',14X,'y',14X,'z'/
      *           1X,'u',14X,'v',14X,'w',9X,'iq',4X,'ir',3X,'iarg',/)

!
! Energy bin width
deltae=ekein / 50

!
! Zero the variables
depe=0.D0
pefs=0.D0
pef2s=0.D0
tefs=0.D0
tef2S=0.D0
do j=1,50
  phs(j)=0.D0
  ph2s(j)=0.D0
  do ntype=1,3
    spec(ntype,j)=0.D0
    specs(ntype,j)=0.D0
    spec2s(ntype,j)=0.D0
  end do
end do

!
! Set histories
ncases=10000
!
! Set maximum number for pict
maxpict=50

tt=etime(tarray)
tt0=tarray(1)

-----
| Step 8: Shower-call
-----
| Write batch number
write(39,fmt="(0     1')")

|
| do i=1,ncases
|   -----
|   | Select incident energy
|   |
|   | eparte = 0.d0          ! Initialize some energy-balance
|   |         ! tallying parameters (SJW)
|   |
|   | ekin = ekein
|   | wtin = 1.0
|   |
|   | wtsum = wtsum + wtin
|   | etot = ekin + iabs(iqin)*RM
|   | if(iqin.eq.1) then
|   |   availke = ekin + 2.0*RM
|   | else
|   |   availke = ekin
|   | end if
|   |
|   | totke = totke + availke
|   |         ! Keep running sum of KE
|   |
|   | Select incident angle
|   |
|   |
|   | Print first NWRITE or NLINES, whichever comes first
|   |
|   | if (ncount .le. nwrite .and. ilines .le. nlines) then
|   |   ilines = ilines + 1
|   |   write(6,280) etot,xin,yin,zin,uin,vin,win,iqin,irin,idin
280   |   FORMAT(4G15.7/3G15.7,3I5)
|   | end if
|   |
|   =====
|   | call shower (iqin,etot,xin,yin,zin,uin,vin,win,irin,wtin)
|   |
|   =====
|   | Added for energy balance tests (SJW)

```

```

        if(DABS(eparte + epartd - availke)/availke .gt. 1.d-10) then
            write(6,290) icases, eparte, epartd
290      FORMAT(' Error on # ',I6,' Escape = ',F9.5,
*                  ' Deposit = ',F9.5)
        end if

!     If some energy is deposited inside detector add pulse-height
!     and efficiency.

        if (depe .gt. 0.D0) then
            ie=depe/deltae + 1
            if (ie .gt. 50) ie = 50
            phs(ie)=phs(ie)+wtin
            ph2s(ie)=ph2s(ie)+wtin*wtin
            tefs=tefs + wtin
            tef2s=tef2s + wtin*wtin
            if(depe .ge. ekein*0.999) then
                pefs=pefs +wtin
                pef2s=pef2s +wtin
            end if
            depe = 0.D0
        end if
        do ntype=1,3
            do ie=1,50
                specs(ntype,ie)=specs(ntype,ie)+spec(ntype,ie)
                spec2s(ntype,ie)=spec2s(ntype,ie) +
*                  spec(ntype,ie)*spec(ntype,ie)
                spec(ntype,ie)=0.D0
            end do
        end do

        ncount = ncount + 1           ! Count total number of actual cases

    end do                         ! -----
*                                     ! End of CALL SHOWER loop
*                                     ! -----

call plotxyz(99,0,0,0.D0,0.D0,0.D0,0.D0,0,0.D0)

write(39,fmt="(9')")           ! Set end of batch for CG View

tt=etime(tarray)
tt1=tarray(1)
cpu_time=tt1-tt0
write(6,300) cpu_time
300  format(' Elapsed Time (sec)=',G15.5)

!---
! Step 9: Output-of-results
!---
        write(6,310) ncount,ncases,totke
310  FORMAT(/, ' Ncount=',I10,' (actual cases run)',/,
*          ' Ncases=',I10,' (number of cases requested)',/,
*          ' TotKE =',G15.5,' (total KE (MeV) in run)')

        if (totke .le. 0.D0) then
            write(6,320) totke,availke,ncount
320  FORMAT(/, ' Stopped in MAIN with TotKE=',G15.5,/, 
*          ' AvailKE=',G15.5, /, ' Ncount=',I10)
            stop
        end if

        tdet=7.62
        rdet=3.81
        tcov=0.1
        rtcov=0.1
        tgap=0.5
        rtgap=0.5
        write(6,330) tdet,rdet,tcov,rtcov,tgap,rtgap
330  FORMAT(/' Detector length=',G15.5,' cm'/
*          ' Detector radius=',G15.5,' cm'/
*          ' Al cover thickness=',G10.2,' cm'/
*          ' Al cover side thickness=',G10.2,' cm'/
*          ' Front gap =',G10.2,' cm'/' Side gap =',G10.2,' cm'/' )

        write(6,340) ekin
340  FORMAT(' Results for ',G15.5,' MeV photon'/' )
!
```

```

! Calculate average and its deviation
-----
!-----Peak efficiency
avpe = pefs/ncount
pef2s=pef2s/ncount
sigpe=dsqrt((pef2s-avpe*avpe)/ncount)
avpe = avpe*100.0
sigpe = sigpe*100.0
write(6,350) avpe,sigpe
350 FORMAT(' Peak efficiency =',G11.4,'+-',G9.2,' %')

!-----Total efficiency
avte = tefs/ncount
tef2s = tef2s/ncount
sigte = dsqrt((tef2s-avte*avte)/ncount)
avte = avte*100.0
sigte = sigte*100.0
write(6,360) avte,sigte
360 FORMAT(' Total efficiency =',G11.4,'+-',G9.2,' %')

!-----Pulse height distribution
!-----write(6,370)
370 FORMAT(/' Pulse height distribution ')
do ie=1,50
  elow=deltae*(ie-1)
  eup=deltae*ie
  if (elow .gt. ekein ) go to 390
  avph = phs(ie)/ncount
  ph2s(ie)=ph2s(ie)/ncount
  sigph=dsqrt((ph2s(ie)-avph*avph)/ncount)
  avph = avph/deltae
  sigph= sigph/deltae
  write(6,380) eup,avph,sigph
380 FORMAT(' E (upper-edge --',G10.4,' MeV )=',G15.5,'+-',G15.5,
*           ' counts/MeV/incident');
  end do
390 continue

!-----Particle spectrum. Incident particle spectrum to detector.
!-----write(6,400)
400 FORMAT(/' Particle spectrum crossing the detector plane'/
*           30X,'particles/MeV/source photon'/
*           ' Upper energy',11X,' Gamma',18X,' Electron',
*           14X,' Positron')

do ie=1,50
  elow=deltae*(ie-1)
  eup=deltae*ie
  if (elow .gt. ekein ) go to 420

!-----Gamma spectrum per MeV per source
-----

  avspg = specs(1,ie)/ncount
  spec2s(1,ie)=spec2s(1,ie)/ncount
  sigspg=dsqrt((spec2s(1,ie)-avspg*avspg)/ncount)
  avspg=avspg/deltae
  sigspg= sigspg/deltae

!-----Electron spectrum per MeV per source
-----

  avspe = specs(2,ie)/ncount
  spec2s(2,ie)=spec2s(2,ie)/ncount
  sigspe=dsqrt((spec2s(2,ie)-avspe*avspe)/ncount)

```

```

    avspe= avspe/deltae
    sigspe= sigspe/deltae

!-----Positron spectrum per MeV per source-----
!-----avsp = specs(3,ie)/ncount
!-----spec2s(3,ie)=spec2s(3,ie)/ncount
!-----sigsp=dsqrt((spec2s(3,ie)-avsp*avsp)/ncount)
!-----avsp= avsp/deltae
!-----sigsp= sigsp/deltae

        write(6,410) eup,avspg,sigspg,avspe,sigspe,avsp,sigsp
410      FORMAT(G10.5,' MeV--',3(G12.5,'+',G12.5))
      end do

420      continue

      nlist=1

!-----=====
!-----call ecnsv1(nlist,nreg,totke)
!-----call ntally(nlist,nreg)
!-----=====

!-----=====
!-----call counters_out(1)
!-----=====

      stop
      end

!-----last line of main code-----

!-----ausgab.f-----
!-----Version: 030831-1300
!-----Reference: SLAC-265 (p.19-20, Appendix 2)
!-----23456789|123456789|123456789|123456789|123456789|123456789|12
!-----Required subroutine for use with the EGS5 Code System
!-----A AUSGAB to:
!-----1) Score energy deposition
!-----2) Score particle information enter to detector from outside
!-----3) Print out particle transport information
!-----4) call plotxyz if imode=0
!-----


      subroutine ausgab(iarg)
      implicit none

      include 'include/egs5_h.f'          ! Main EGS "header" file
      include 'include/egs5_epcont.f'     ! COMMONs required by EGS5 code
      include 'include/egs5_misc.f'
      include 'include/egs5_stack.f'
      include 'include/egs5_useful.f'

      include 'auxcommons/aux_h.f'       ! Auxiliary-code "header" file
      include 'auxcommons/etaly1.f'       ! Auxiliary-code COMMONs
      include 'auxcommons/lines.f'
      include 'auxcommons/ntaly1.f'
      include 'auxcommons/watch.f'

      include 'auxcommons/etaly2.f'       ! Added SJW for energy balance
      common/totals/                   ! Variables to score
      * depe,deltae,spec(3,50),maxpict
      real*8 depe,deltae,spec
      integer maxpict

```

```

    integer                                ! Arguments
* iarg

    real*8                                ! Local variables
* edepwt

    integer
* ie,iql,irl,ntype

-----
| Set some local variables
-----
| irl = ir(np)
| iql = iq(np)
| edepwt = edep*wt(np)

-----
| Keep track of energy deposition (for conservation purposes)
-----
if (iarg .lt. 5) then
    esum(iql+2,irl,iarg+1) = esum(iql+2,irl,iarg+1) + edepwt
    nsum(iql+2,irl,iarg+1) = nsum(iql+2,irl,iarg+1) + 1

! added SJW for particle by particle energy balance
    if(irl.eq.nreg) then
        eparte = eparte + edepwt
    else
        epartd = epartd + edepwt
    endif
end if

-----
| Score energy deposition inside NaI detector
-----
if (med(irl). eq. 1) then
    depe = depe + edepwt

-----
| Score particle information if it enters from outside
-----
if (irl .ne. irold .and. iarg .eq. 0) then
    if (iql .eq. 0) then                      ! photon
        ntype=1
        ie = e(np)/deltae +1
        if(ie .gt. 50) ie = 50
    elseif (iql .eq. -1) then                 ! electron
        ntype=2
        ie = (e(np) - RM)/deltae +1
        if(ie .gt. 50) ie = 50
    else                                      ! positron
        ntype=3
        ie = (e(np) - RM)/deltae +1
        if(ie .gt. 50) ie = 50
    end if
    spec(ntype,ie) = spec(ntype,ie) + wt(np)
end if

-----
| Print out stack information (for limited number cases and lines)
-----
if (ncount .le. nwrite .and. ilines .le. nlines) then
    ilines = ilines + 1
    write(6,100) e(np),x(np),y(np),z(np),u(np),v(np),w(np),
*                   iql,irl,iarg
100   FORMAT(4G15.7/3G15.7,3I5)
end if

-----
| Print out particle transport information (if switch is turned on)
-----
=====
| if (iwatch .gt. 0) call swatch(iarg,iwatch)
=====

-----
| Output particle information for plot

```

```

!
-----  

if (ncount.le.maxpict) then  

  call plotxyz(iarg,np,iq(np),x(np),y(np),z(np),e(np),ir(np),  

*      wt(np))  

end if  

return  

end  

-----last line of ausgab.f-----  

-----howfar.f-----  

Version: 060620-1400  

Reference: T. Torii and T. Sugita, "Development of PRESTA-CG  

Incorporating Combinatorial Geometry in EGS4/PRESTA", JNC TN1410 2002-201,  

Japan Nuclear Cycle Development Institute (2002).  

Improved version is provided by T. Sugita. 7/27/2004  

-----  

!23456789|123456789|123456789|123456789|123456789|123456789|12  

-----  

Required (geometry) subroutine for use with the EGS5 Code System  

This is a CG-HOWFAR.  

-----  

subroutine howfar  

implicit none  

c  

include 'include/egs5_h.f'          ! Main EGS "header" file  

include 'include/egs5_epcont.f'    ! COMMONs required by EGS5 code  

include 'include/egs5_stack.f'  

include 'auxcommons/geom_common.f' ! geom-common file  

c  

integer i,j,jjj,ir_np,nozone,jty,kno  

integer irnear,irnext,irlold,irifg,itvlg,ihitcg  

double precision xidd,yidd,zidd,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np  

double precision tval,tval0,tval00,tval10,tvalmn,delhow  

double precision atvaltmp  

integer iq_np  

c  

ir_np = ir(np)  

iq_np = iq(np) + 2  

c  

if(ir_np.le.0) then  

  write(6,*) 'Stopped in howfar with ir(np) <=0'  

  stop  

end if  

c  

if(ir_np.gt.izonin) then  

  write(6,*) 'Stopped in howfar with ir(np) > izonin'  

  stop  

end if  

c  

if(ir_np.EQ.izonin) then  

  idisc=1  

  return  

end if  

c  

tval=1.d+30  

itvalm=0  

c  

body check  

u_np=u(np)  

v_np=v(np)  

w_np=w(np)  

x_np=x(np)  

y_np=y(np)  

z_np=z(np)  

c  

do i=1,nbbody(ir_np)  

  nozone=ABS(nbzone(i,ir_np))  

  jty=itblty(nozone)  

  kno=itblno(nozone)  

c  

rpp check  

  if(jty.eq.ityknd(1)) then  

    if(kno.le.0.or.kno.gt.irppin) go to 190

```

```

    call rppcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c sph check
    elseif(jty.eq.ityknd(2)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.isphin) go to 190
        call sphcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c rcc check
    elseif(jty.eq.ityknd(3)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.irccin) go to 190
        call rcccg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c trc check
    elseif(jty.eq.ityknd(4)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.itrcin) go to 190
        call trccg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c tor check
    elseif(jty.eq.ityknd(5)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.itorin) go to 190
        call torcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c rec check
    elseif(jty.eq.ityknd(6)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.irecin) go to 190
        call reccg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c ell check
    elseif(jty.eq.ityknd(7)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.iellin) go to 190
        call ellcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c wed check
    elseif(jty.eq.ityknd(8)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.iwedin) go to 190
        call wedcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c box check
    elseif(jty.eq.ityknd(9)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.iboxin) go to 190
        call boxcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c arb check
    elseif(jty.eq.ityknd(10)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.iarbin) go to 190
        call arbcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c hex check
    elseif(jty.eq.ityknd(11)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.ihexin) go to 190
        call hexcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c haf check
    elseif(jty.eq.ityknd(12)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.ihafin) go to 190
        call hafcg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c tec check
    elseif(jty.eq.ityknd(13)) then
        if(kno.le.0.or.kno.gt.itecin) go to 190
        call teccg1(kno,x_np,y_np,z_np,u_np,v_np,w_np)
c **** add new geometry in here
c
190  continue
end do

c
irnear=ir_np
if(itvalm.eq.0) then
    tval0=cgeps1
    xidd=x_np+tval0*u_np
    yidd=y_np+tval0*v_np
    zidd=z_np+tval0*w_np
310  continue
    if(x_np.ne.xidd.or.y_np.ne.yidd.or.z_np.ne.zidd) goto 320
    tval0=tval0*10.d0
    xidd=x_np+tval0*u_np
    yidd=y_np+tval0*v_np
    zidd=z_np+tval0*w_np
    go to 310
320  continue
    write(*,*) 'srzone:1'
    call srzone(xidd,yidd,zidd,iq_np,ir_np,irnext)
c
    if(irnext.ne.ir_np) then
        tval=0.0d0
        irnear=irnext
    else

```

```

tval00=0.0d0
tval10=10.0d0*tval0
irlold=ir_np
irlfg=0
330 continue
if(irlfg.eq.1) go to 340
    tval00=tval00+tval10
    if(tval00.gt.1.0d+06) then
        write(6,9000) iq(np),ir(np),x(np),y(np),z(np),
        & u(np),v(np),w(np),tval00
9000 format(' TVAL00 ERROR : iq,ir,x,y,z,u,v,w,tval=',
        & 2I3,1P7E12.5)
        stop
    end if
    xidd=x_np+tval00*u_np
    yidd=y_np+tval00*v_np
    zidd=z_np+tval00*w_np
    call srzold(xidd,yidd,zidd,irlold,irlfg)
    go to 330
340 continue
c
tval=tval00
do j=1,10
    xidd=x_np+tval00*u_np
    yidd=y_np+tval00*v_np
    zidd=z_np+tval00*w_np
c
    write(*,*) 'srzone:2'
    call srzone(xidd,yidd,zidd,iq_np,irlold,irnext)
    if(irnext.ne.irlold) then
        tval=tval00
        irnear=irnext
    end if
    tval00=tval00-tval
end do
if(ir_np.eq.irnear) then
    write(0,*) 'ir(np),tval=',ir_np,tval
end if
end if
else
do j=1,itvalm-1
    do i=j+1,itvalm
        if(atval(i).lt.atval(j)) then
            atvaltmp=atval(i)
            atval(i)=atval(j)
            atval(j)=atvaltmp
        endif
    enddo
enddo
itvlfg=0
tvalmn=tval
do jjj=1,itvalm
    if(tvalmn.gt.atval(jjj)) then
        tvalmn=atval(jjj)
    end if
    delhow=cgeps2
    tval0=atval(jjj)+delhow
    xidd=x_np+tval0*u_np
    yidd=y_np+tval0*v_np
    zidd=z_np+tval0*w_np
410 continue
if(x_np.ne.xidd.or.y_np.ne.yidd.or.z_np.ne.zidd) go to 420
    delhow=delhow*10.d0
    tval0=atval(jjj)+delhow
    xidd=x_np+tval0*u_np
    yidd=y_np+tval0*v_np
    zidd=z_np+tval0*w_np
    go to 410
420 continue
c
    write(*,*) 'srzone:3'
    call srzone(xidd,yidd,zidd,iq_np,ir_np,irnext)
    if((irnext.ne.ir_np.or.atval(jjj).ge.1.).and.
        & tval.gt.atval(jjj)) THEN
        tval=atval(jjj)
        irnear=irnext
        itvlfg=1
        goto 425
    end if
end do
425 continue

```

```

        if(itvlfg.eq.0) then
          tval0=cgmnst
          xidd=x_np+tval0*u_np
          yidd=y_np+tval0*v_np
          zidd=z_np+tval0*w_np
430      continue
          if(x_np.ne.xidd.or.y_np.ne.yidd.or.z_np.ne.zidd) go to 440
          tval0=tval0*10.d0
          xidd=x_np+tval0*u_np
          yidd=y_np+tval0*v_np
          zidd=z_np+tval0*w_np
          go to 430
440      continue
          if(tvalmn.gt.tval0) then
            tval=tvalmn
          else
            tval=tval0
          end if
          end if
          ihitcg=0
          if(tval.le.ustep) then
            ustep=tval
            ihitcg=1
          end if
          if(ihitcg.eq.1) THEN
            if(irnear.eq.0) THEN
              write(6,9200) iq(np),ir(np),x(np),y(np),z(np),
              &                           u(np),v(np),w(np),tval
9200 format(' TVAL ERROR : iq,ir,x,y,z,u,v,w,tval=',2I3,1P7E12.5)
            idisc=1
            itverr=itverr+1
            if(itverr.ge.100) then
              stop
            end if
            return
          end if
          irnew=irnear
          if(irnew.ne.ir_np) then
            call rsnxt(iq_np,ir_np,irnew)
          endif
        end if
        return
      end
!-----last line of subroutine howfar-----

```