

サンプルユーザーコード

ucnaicgv

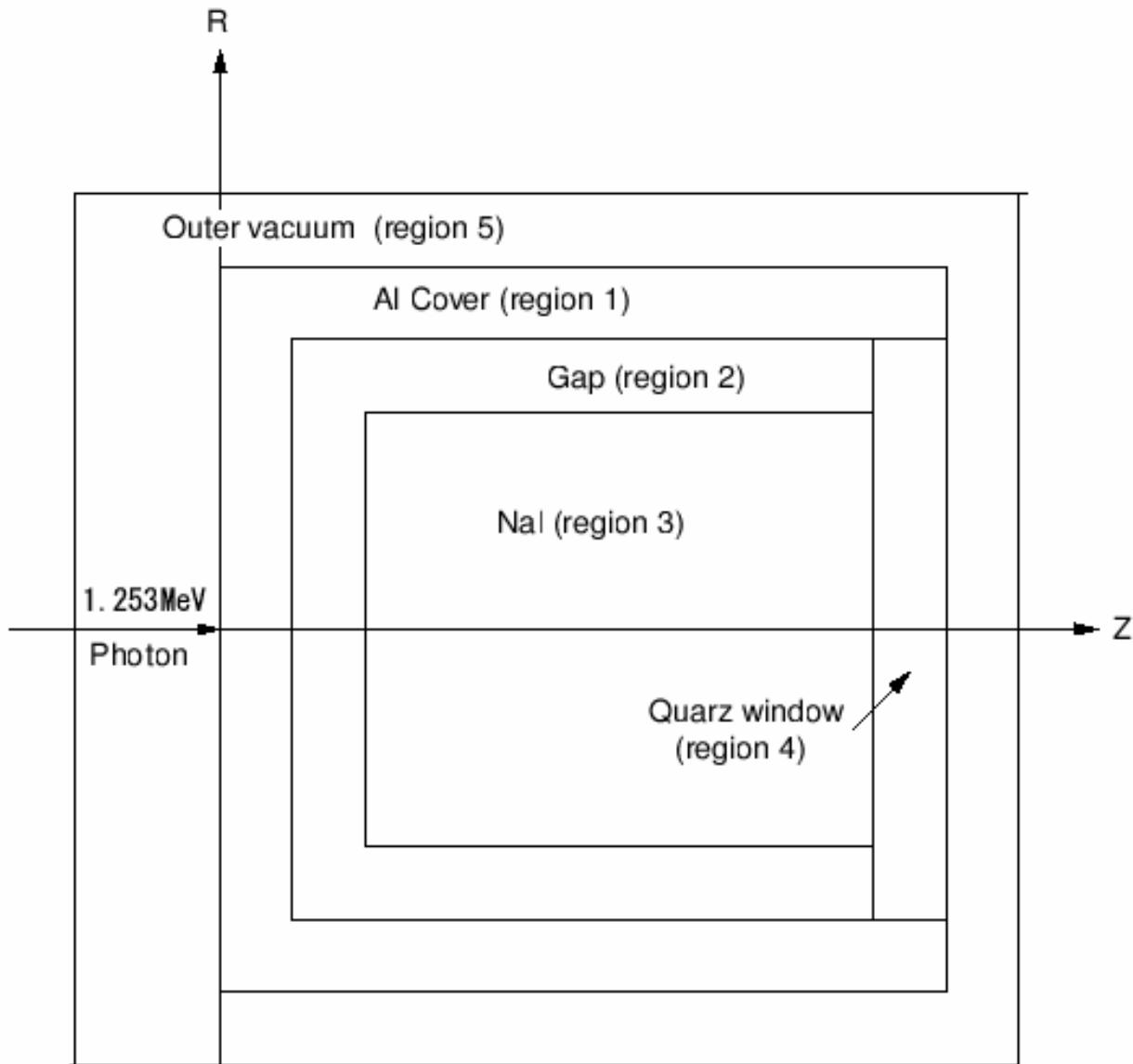
平山 英夫、波戸 芳仁
KEK, 高エネルギー加速器研究機構

テキスト: naicgv.pdf,
egs5_user_manual.pdf

ユーザーコードで利用可能な変数、
オプションについては
egs5_user_manualを参照

ucnaicgv.f

- 計算課題:NaI検出器のレスポンス計算
- 形状:CG形状(RCC:円筒)
- 1.253MeV γ 線のペンシルビーム
- 出力
 - 飛跡 (CGView):egs5job.pic
 - 計算結果:egs5job.out



Step 1:Initialization

- egs5及びpegs5で使われているcommonは、それぞれincludeディレクトリー及びpegscommonsディレクトリーのファイルを ”include”文で取り込む
- 著者から提供されたジオメトリー関係などのユーザーコードのみで使用されるcommonは、auxcommonsディレクトリーのファイルをinclude文で取り込む

配列の大きさの指定

- commonで使用されている変数の配列の大きさは、parameter文で指定
 - egs5で使用されているcommonの変数は、include/egs5_h.f
 - ユーザーコードでのみ使用されるcommonの変数は、auxcommns/aux_h.f
- commonと同じようにinclude文により取り込まれる。
- 配列の大きさを変更する場合は、parameter文の変数を変更する

```
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'
```

egs5 common に含まれる変数をメ
インプログラム等のプログラム単
位で使用する場合は、include文で
当該commonを指定

```
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'
```

ジオメトリー関係等ユーザーコード
のみで使用されるcommon

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

CG関係のcommonで、CGを使用する場合には常に必要(変更無し)

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

include/egs5_h.f 内

```
! Maximum number of different media (excluding vacuum)
```

```
integer MXMED  
parameter (MXMED = 4)
```

物質の数を増やしたい場合には、この数値を変更する。

include/egs5_misc.f 内

```
common/MISC/
```

```
* rhor(MXREG), dunit,  
* med(MXREG),iraylr(MXREG),Ipolar(MXREG),incohr(MXREG),  
* iprofr(MXREG),impacr(MXREG),  
* kmpi,kmpo,noscat
```

```
! Miscellaneous COMMON
```

```
real*8
```

```
* rhor,dunit
```

```
integer
```

```
* med,iraylr,Ipolar,incohr,iprofr,impacr,kmpi,kmpo,noscat
```

common/totals/	! Variables to score	このユーザーコード固有の common
* depe,deltae,spg(1,50),spe(1,50),spp(1,50),nreg real*8 depe,deltae,spg,spe,spp integer nreg		
 real*8	! Local variables	main programで使用 する倍精度の実数
* availke,avpe,avph,avspe,avspg,avspp,avte,ekin,etot, * descii2,pef,rnnow,sigpe,sigph,sigspe,sigspg,sigspp, * sigte,tef,totke,wtin,wtsum		
 real*8		
* ph(50),phpb(50,50),spgp(1,50,50),sppb(1,50,50), * spppb(1,50,50),pefpb(50),tefpb(50)		

real ! Local variables
* elow,eup,rdet,rtcov,rtgap,tcov,tdet,tgap main programで使用する単精度の実数

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

integer main programで使用する整数
* i,icases,idin,ie,imed,ireg,isam,isot,
* j,k,n,nbatch,ncaspb,nd,ndet,nlist,nofbat

Open文

- ユーザーコードから、pegsを実行するのに伴い、ユニット7-26は、pegsで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。
- 飛跡情報を出力するplotxyz.fのユニットは、9から39に変更

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

Step 2:pegs5-call

- 物質データ及び各物質のcharacteristic distanceを設定した後で、pegs5をcallする。

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

- pegs5で作成する物質データの名前。pegs5の入力データ(ユニット24から読み込み)と対応
-
-
-

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

各物質のcharacteristic distance
当該物質のリージョンで中、最も小さいサイズを指定

```
chard(1) = 7.62d0 ! optional, but recommended to invoke  
chard(2) = 0.1d0 ! automatic step-size control  
chard(3) = 0.5d0  
chard(4) = 5.0d0
```

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')
```

RCC	1	0.00	0.0	0.0	0.00	0.0	NaIの領域(円筒)を定義するためのbody
		7.62	3.81				
RCC	2	0.00	0.0	-0.5	0.00	0.0	空隙に内包される領域(円筒)を定義するためのbody
		8.12	4.31				
RCC	3	0.00	0.0	-0.6	0.00	0.0	Alカバーに内包される領域(円筒)を定義するためのbody
		8.72	4.41				
RCC	4	0.00	0.0	7.62	0.00	0.0	フォトマルの窓ガラス領域(円筒)を定義するためのbody
		0.5	4.31				
RCC	5	0.00	0.0	-5.6	0.00	0.0	空気の領域(円筒)を定義するためのbody
		18.72	9.41				
RCC	6	0.0	0.0	-10.0	0.0	0.0	体系全体を覆うbody
		30.0	12.0				

END

Z1	+1	NaI		
Z2	+2	-1	空隙	
Z3	+3	-2	-4	アルミニウム
Z4	+4			窓ガラス
Z5	+5	-3		空気
Z6	+6	-5		計算終了の領域

END

1 0 2 3 4 0

nreg=izonin

! Read material for each refion from egs5job.data

read(4,*) (med(i),i=1,nreg) 各リージョンへの物質割り当てデータ読み込み

! Set option except vacuum region

オプションの設定

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

iraylr(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

リージョン毎に設定できるオプション

ecut, pcut	カットオフエネルギー (全エネルギー)
iphter	光電子の角度分布のサンプリング
iedgfl	K & L-特性X線の発生
iauger	K & L-オージェ電子の発生
iraylr	レイリー散乱
lpolar	光子散乱での直線偏光
incohr	S/Z rejection
iprofr	ドップラー広がり
impacr	電子衝突電離

乱数(ranlux乱数)

```
!
! -----
! 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 rlxinit ! Initialize the Ranlux random-number generator
!
! =====
```

異なるiseed毎に、重複しない乱数を発生することが可能
並列計算の場合に有効

Step 4: 入射粒子のパラメーター設定

```
iqin=0      ! Incident charge - photons 粒子の種類(電荷)
ekein=1.253 ! Kinetic energy 粒子の運動エネルギー
xin=0.0     ! Incident at origin 位置
yin=0.0
zin=0.0
uin=0.0     ! Moving along z axis 方向
vin=0.0
win=1.0
irin=0      ! Starting region (0: Automatic search in CG) 入射粒子のリージョン
wtin=1.0    ! Weight = 1 since no variance reduction used

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
```

線源リージョンのサーチ

Step 5: hatch-call

- 電子・陽電子の全エネルギーの最大値を emaxe として設定し、hatch を call する
- 読み込んだ情報を確認するために、物質データ及び各リージョンの情報を出力する

emaxe = ekein + RM ! photon

線源粒子が光子の場合、近似的に線源光子のエネルギーに電子の静止エネルギーを加えた値を設定する

Step 6:Initialization-for-howfar

- ユーザーコードで使用する形状データを設定する
 - 平板、円筒、球などに関するデータ
- CGを使用しているこのユーザーコードでは、形状に関するデータは、cg入力データとしてstep 6以前に処理しているので、このstepで設定することはない

Step 7: Initialization-for-ausgab

- 計算で求める量の初期化、レスポンスのエネルギーBIN幅の設定等
- 計算するヒストリーフィル(ncases)と飛跡表示データを記録するヒストリーフィル(maxpict)を設定する

! Set histories

ncases=10000

! Set maximum number for pict

maxpict=50

Step 8: Shower-call

- ncases 回数 call shower を繰り返す。
- 各ヒストリー毎に、線源情報が異なる場合には、call shower の前に、線源情報(粒子の種類、エネルギー、位置、方向)を設定する。
- ヒストリー終了毎に、検出器中の吸収エネルギー等の分析を行う。

```
!
-----  
! Select incident energy  
!-----  
  
  eparte = 0.d0          ! Initialize some energy-balance  
  epartd = 0.d0          !      tallying parameters (SJW)  
  
  ekin = ekin  
  wtin = 1.0  
  
  wtsum = wtsum + wtin    ! Keep running sum of weights  
  etot = ekin + iabs(iqin)*RM ! Incident total energy (MeV)  
  availke = etot + iqin*RM   ! Available K.E. (MeV) in system  
  totke = totke + availke   ! Keep running sum of KE
```

このユーザーコードでは、単一エネルギーの光子($iqin=0$)なので、各ヒストリーで初期設定した同じ値を使用しているが、ヒストリー毎にエネルギーが異なる場合(分布している場合、複数の γ 線を放出する線源)には、 $ekin$ を決定するサンプリングルーチンが必要

egs5で使用するエネルギー(showerに引き渡すエネルギー)は、全エネルギーなので、 $etot$ を設定する。(電子・陽電子の場合は、運動エネルギーに電子の静止質量を加える。

! **Select incident angle**

ヒストリー毎に線源の方向が異なる場合には、こ
こに、線源の方向を決定するルーチンを挿入す
る。



=====
call shower (iqin,etot,xin,yin,zin,uin,vin,win,irinn,wtin)
=====

iqin, etot, xin, yin, zin, uin, vin, win, irinn, 及び wtin という条件で、
showerをスタートする。.

```
!
=====
call shower (iqin,etot,xin,yin,zin,uin,vin,win,irinn,wtin)
!
=====
```

```
if (depe .gt. 0.D0) then
    ie=depe/deltae + 1
    if (ie .gt. 50) ie = 50
    ph(ie)=ph(ie)+wtin
    tef=tef + wtin
    if(depe .ge. ekein*0.999) pef=pef +wtin
    depe = 0.D0
end if
```

ヒストリー毎の情報を処理する。この処理が必要かどうかは、問題に依存する。

このユーザーコードでは、検出器の効率とレスポンスを計算することを目的としているので、吸収エネルギーが0でない場合は、当該ヒストリーでの検出器中の吸収エネルギーからエネルギー番号を決め、その値を+1する。吸収エネルギーの値から、全検出効率を+1し、吸収エネルギーが入射粒子の運動エネルギーと見なされる場合にはピーク検出効率を+1する。

この計算では、エネルギー吸収をすると全て検出されるとして全検出効率に加えているが、あるエネルギー以上ののみを測定する結果との比較の場合には、ピーク検出効率と同じ様な判定が必要になる

Coincidence及びanti-coincidence

- 検出器間でcoincidenceやanti-coincidenceの計算を行う場合の、この例と同様にヒストリー終了毎に、処理を行う
 - Coincidenceの場合は、coincidenceをとる検出器の両方にエネルギー吸収があった場合にのみ主検出器の当該エネルギーBINの値を+1増やす
 - Anti-coincidenceの場合は、逆に、主検出器以外の検出器にエネルギー吸収がない場合にのみ主検出器の当該エネルギーBINの値を+1増やす

統計的な誤差評価

- x をモンテカルロ計算によって求める量とする。
- MCNPで使用している誤差を評価する方法
 - 計算は N 個の“入射”粒子について行われ、 x_i は、 i -番目のヒストリーの結果であるとする

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad x_i \text{ の平均値}$$

$$s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \approx \bar{x^2} - (\bar{x})^2; (\bar{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2) \quad x_i \text{ の分散}$$

$$s_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{N} s^2 \approx \frac{1}{N} [\bar{x^2} - \bar{x}^2] \quad \bar{x} \text{ の分散}$$

$$s_{\bar{x}} \approx \left[\frac{1}{N} (\bar{x^2} - \bar{x}^2) \right]^{1/2} \quad \text{標準偏差}$$

- ! 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

```

MCNPの方法で誤差を評価するために、
ヒストリー毎の計算すべき量とその自乗
の和を求める。

Step 9: Output-of-results

- 線源条件や、形状等の情報の出力
 - どの様な計算であるかを示すために出力
 - cgの場合は、形状をデータから直接示すことが容易でないので、必要な情報を設定して出力する
- ヒストリー毎に得られた求めたい量の和とその自乗和から、求めたい量の平均値と統計的な誤差を計算し、出力する

ピーク検出効率

```
!
-----  
! 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,' %')
```

ausgab の機能

- ausgab は、ユーザーが得たい情報を記録するサブルーチンである
- NaI検出器中の沈着エネルギーの記録

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

当該リージョンの物質番号(med(irl))が、1(NaI)の時、
検出器中のエネルギー付与を加算

ausgab の機能

- 検出器外部から、検出器に入射した各粒子のエネルギー情報の記録

```
! -----
! Score particle information if it enters from outside
! -----
```

```
if (irl .ne. irold .and. iarg .eq. 0) then ← 粒子の移動に伴い、リージョンが変わる
  if (iql .eq. 0) then      ! photon      =検出器の外から入射
    ie = e(np)/deltae +1
    if(ie .gt. 50) ie = 50
    spg(1,ie) = spg(1,ie) + wt(np)
  elseif (iql .eq. -1) then   ! electron
    ie = (e(np) - RM)/deltae +1
    if(ie .gt. 50) ie = 50
    spe(1,ie) = spe(1,ie) + wt(np)
  else                      ! positron
    ie = (e(np) - RM)/deltae +1
    if(ie .gt. 50) ie = 50
    spp(1,ie) = spp(1,ie) + wt(np)
  end if
end if
end if
```

howfarの役割

- howfar は、egs にジオメトリーに関する情報を伝えるサブルーチン
- howfar は、ustep の途中に、リージョン境界があるかどうかを調べる。ある場合には、
 - ustep を境界までの距離に置き換える
 - irnew を粒子が入っていくリージョン番号に設定する
- 粒子が、ユーザーが追跡を止めたいたい領域（例：体系外）に達したばあいには、idiscard フラグを1に設定する
- 使用するジオメトリールーティング毎に異なったhowfarとなる
 - cgを使用している場合は、このユーザーコードのhowfarを使用する

実習課題

- 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。
 - 線源を、Cs-137の単一エネルギー光子(0.662MeV)に変える。
 - 線源を、Co-60に変え、1.173MeVと1.333MeV光子を同じ確率で発生させる。
 - 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。
 - 1.253MeV線源で、検出器の有感領域の厚さを2倍する。
- 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。
- 実習課題3:空気電離箱の計算
 - 検出器を、摂氏20°C、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。
 - 空気のW値(33.97 eV/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。