

PEGS4を用いた 物質データ作成(実習2)

安永将恭, 辻井克友, 山本 時裕
大阪大学大学院医学系研究科
医用物理工学講座

課題

課題1: PEGS4のサンプル入力ファイルを使用してFeの物質データを作成する。

・サンプル入力ファイルを利用して以下の物質データを作成する。

課題2: 単体 (W)

課題3: 化合物 (NaI)

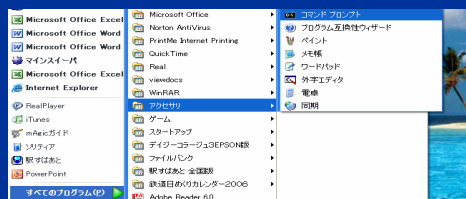
課題4: 混合物・気体 (AIR、20、1気圧)

Feの物質データ作成

注) Windows 版の場合。

・コマンドプロンプトを開く。

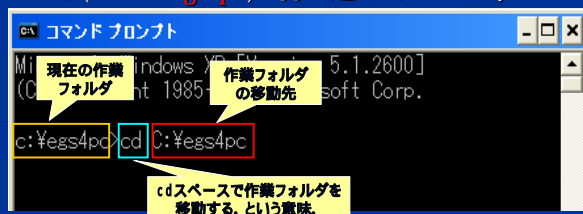
アクセサリ コマンドプロンプト



Feの物質データ作成

・コマンドプロンプトの作業フォルダをegs4フォルダに移動する。

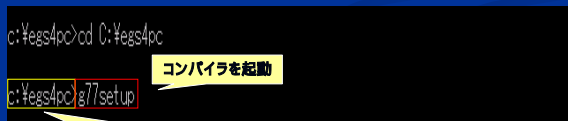
・例: Cドライブのフォルダegs4pcに移動する時は (cd C:\egs4pc) と打ち込んでENTER。



Feの物質データ作成

・作業用フォルダがegs4pcに移動したことを確認後コンパイラを起動する。コマンドプロンプトに (g77setup) と打ち込んでENTER。

(注) g77コンパイラを使用している場合。

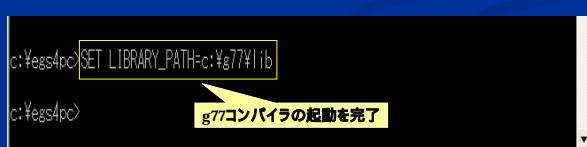


作業フォルダがegs4pcに移動した事を確認する

Feの物質データ作成

・コマンドプロンプトの最後に次の様な表示が出ればコンパイラの起動成功。

EGS4、PEGS4が使用可能になる。



Feの物質データ作成

- 鉄(Fe)の入力ファイルSAMPL4.INPを使って鉄(Fe)の物質データを作成する。
- コマンドプロンプトに **スペース** (pegs4run sampl4.inp XXXXX.dat) (注)Windowsの場合

スペース

入力ファイル名

出力ファイル名。XXXXの部分には任意の名前。 .datの部分は常に同じ。

と打ち込んでENTER。成功すると、次のようなコメントが出る。

```
c:\%egs4pc>pegs4run sampl4.inp Fe.dat
1個のファイルをコピーしました。
c:\%egs4pc>
```

入力したコマンド

Feの物質データ作成

- 物質データの作成に成功するとegs4pcフォルダの中にXXXXX.datが出力されている。(他にも関係するファイルが出力される)
- 出力されたファイルの中身を確認する。

```
Fe.dat - 実行中
ファイル(E) 編集(B) 形式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
MEDIUM=FE-RAVLEIGH STERNICID=FE
ELEM,RHO= 7.8600E+00,NE= 1, IUNRST=0, EPSTEL=0, IAPRIM=0
ASYM=FE,Z=26,AA= 55.847,PZ= 1.00000E+00,RHOZ= 5.58470E+01
1.76084E+00 1.50000E+00 1.00000E-01 2.00000E+04 2.00000E+04
0 124 0 150 0 0 0 1 0
9.99980E-01 -2.31305E-01 5.30791E-02 9.95470E-01 -2.48276E-01
9.52000E-01 1.00024E+00 -1.96260E-01 3.78355E-02 1.01556E+00
-2.53286E-01 9.52000E-01 1.00038E+00 -1.76202E-01 2.73510E-02
1.02591E+00 -2.55868E-01 9.52000E-01 9.98980E-01 -2.33838E-01
5.36132E-02 9.95425E-01 -2.50774E-01 9.52000E-01 1.00024E+00
-1.98275E-01 3.82240E-02 1.01572E+00 -2.55887E-01 9.52000E-01
1.00038E+00 -1.80051E-01 2.76348E-02 1.02618E+00 -2.55825E-01
```

課題2: Wの物質データを作成

- サンプル入力ファイルをもとにして作成。
- 実習ではEGS4フォルダの中にある鉄(Fe)のサンプル入力ファイルSAMPL4.INPを使用する。
- SAMPL4.INPをEGS4フォルダの中にコピーし、適当な名前をつける(例: W.INP等)。

.INPの部分は
変更しない

課題2: Wの物質データを作成

- 入力ファイル(~.INP)を作成したら、コマンドプロンプトで物質データを作成し、出力内容を確認する。
- コマンドプロンプトでエラーメッセージが出た、もしくは正常な出力ファイルが出力されなかった場合
入力ファイルの内容を確認する。
コマンドプロンプトの入力を確認する。

課題2: Wの物質データを作成 (解答例)

```
ELEM
&INP IAPRIM=1,IRAYL=1/
W-IAPRIM W
W
ENER
&INP AE=0.521,UE=10.0,AP=0.01,UP=10.0 /
TEST
&INP /
PWLF
&INP /
DECK
&INP /
```

- 課題と同様に課題、の物質データを作成する。
- 課題3: 化合物(NaI)
NaI: 密度3.667g/cm³ 原子数の比Na:I=1:1
- 課題4: 混合物・気体(AIR, 20、1気圧)
AIR: 密度1.2929E-3g/cm³
元素の質量比 N:O:Ar=0.75575:0.23143:0.01282
GASP (gas pressure) = 0.93174 (= 273/293)

課題3 : NaIの物質データを作成 (解答例)

```
COMP
&INP NE=2,RHO=3.667,PZ=1,1,IAPRIM=1,IRAYL=1/
NAI-IAPRIM      NaI
NA I
ENER
&INP AE=0.521,UE=10.0,AP=0.01,UP=10.0 /
TEST
&INP /
PWLF
&INP /
DECK
&INP /
```

課題4 : 混合物・気体 (AIR、20℃、1気圧) の物質データを作成 (解答例)

```
MIXT
&INP NE=3,RHO=1.2929E-3,GASP=0.93174,
RHOZ=0.75575,0.23143,0.01282,IAPRIM=1,IRAYL=1/
AIR-20C      AIR-GAS
N O AR
ENER
&INP AE=0.521,UE=10.0,AP=0.01,UP=10.0 /
TEST
&INP /
PWLF
&INP /
DECK
&INP /
```

物質データの結合

- ・EGS4で使用できる物質データファイルは1つ。
複数の物質データを使用したい場合はそれらをまとめてひとつにする必要がある。
- ・EGS4で使用する物質データファイルAAA.datを作成し、必要な物質データをcopy & pasteして結合した物質データを作成。