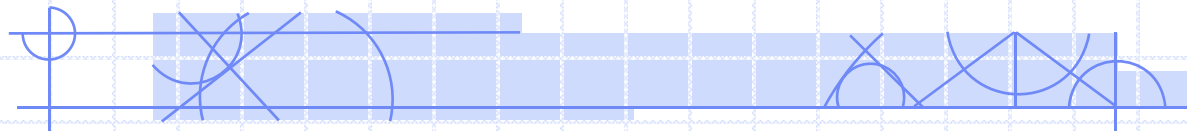


物質データの扱い方

EGS5(STEP 1, 2, 3), PEGS5



棕本 宜学



大阪大学大学院 医学系研究科 医用物理工学講座

使用コード：

ucnaicgv.f ucnaicgv.inp ucnaicgv.data

Index

- 始めに ... Page3
- PEGS5 ... Page7
- EGS5 ... Page17
 - STEP 1 ... Page18
 - STEP 2 ... Page19
 - STEP 3 ... Page21
- 終わりに ... Page22
- 実習課題 ... Page23
- 参考エラー集 ... Page25

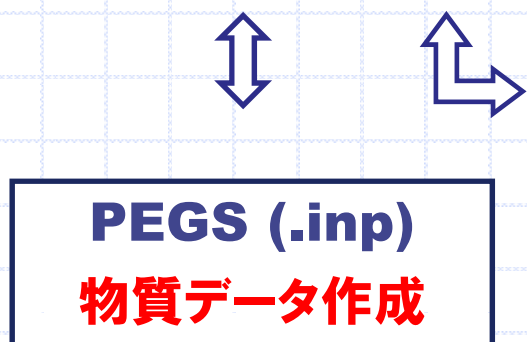
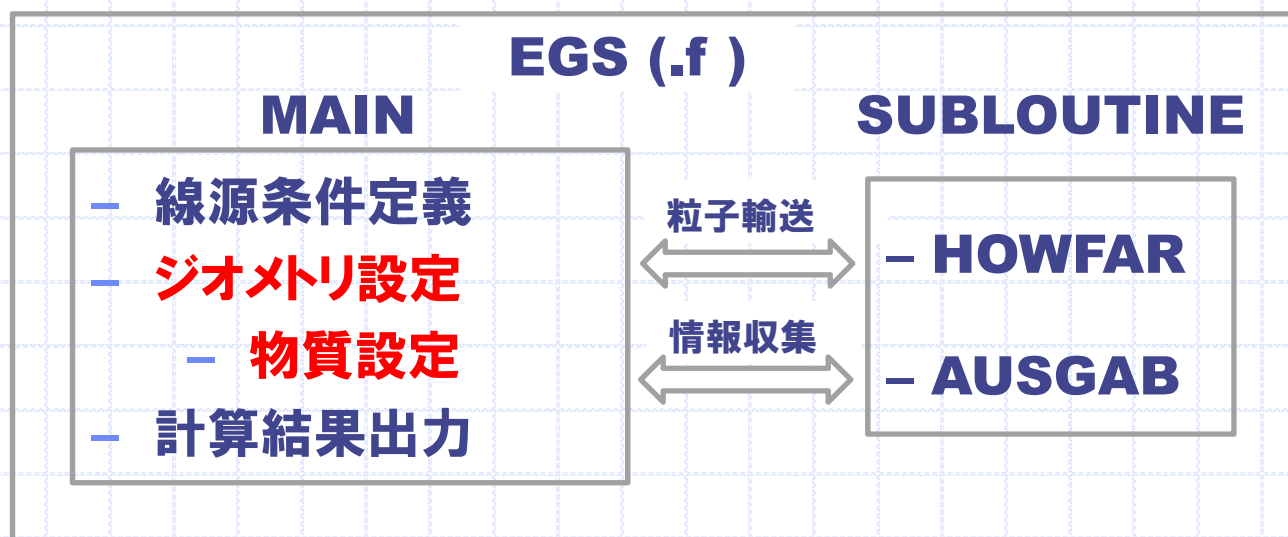
始めに

- 本講義では、**PEGS5**を用いた物質データの作成法、**EGS5**の**STEP 1, 2, 3**を中心に**KEK**から配布される**PEGS5**用入力ファイル**ucnaicgv.inp**、サンプルユーザーコード**ucnaicgv.f**を用いて、具体的なコードの書き方を学習する。

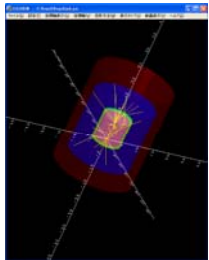
EGS5の概要

- **EGS5ユーザーコード**
 - 変数の宣言(**STEP 1**)
 - 物質の定義(**STEP 2**)
 - シミュレーション精度の決定(**STEP 3**)
 - 線源の定義(**STEP 4, SHOWER**)
 - 取得する情報の定義(**AUSGAB**)
 - 粒子移送の定義(**HOWFAR**)
- シミュレーション体系の定義(**CGview**)
- 物質データの作成(**PEGS5**)

EGSの概略図



CGview
物質番号設定

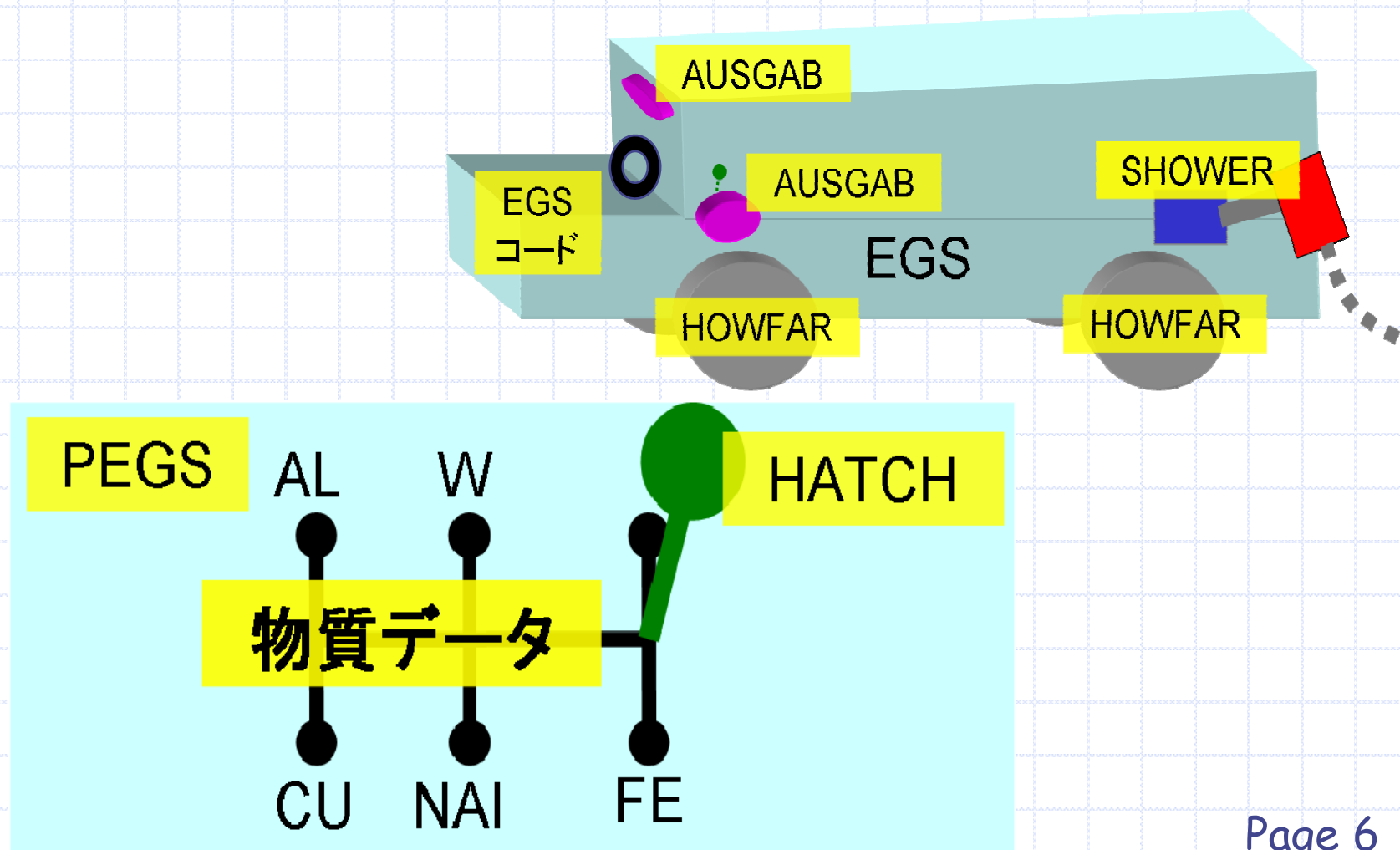


領域情報:

領域番号	物質番号	1	2	3
Z0001	1	+1		
Z0002	0	+2	-1	
Z0003	2	+3	-2	-4
Z0004	3	+4		
Z0005	4	+5	-3	
Z0006	0	+6	-5	

ファイルを開く ファイルに保存

EGS, PEGSのイメージ



PEGS5

- **PEGS5: Preprocessor for EGS5
(EGS5の前処理プログラム)**
- **各物質の反応断面積, 分岐比, 散乱係数等を計算**
 - 理論式及び実験式(オプションで選択)
 - テーブル形式で出力(EGS5計算で利用)
- **EGS5計算の前に実行**
 - **PEGS5が実行された後EGS5の計算が開始**

PEGS5用入力ファイル

- 入力データファイル (*.inp) の作成
- 作成法は, 元素, 化合物, 混合物(混合気体) の3種類に大別される



ELEM

物質名, 元素の種類
エネルギー範囲



COMP

ELEM + 密度
組成(原子数の比)



MIXT

ELEM + 密度
組成(質量の比)
Gas 圧力

参考: `egs5/userdir¥ucnaicgv.inp`, `ucshield.inp`
`egs5/extra_ucodes¥ucpegs¥ucpegs.inp`

PEGS5用 入力ファイル例

- 全て半角大文字
 - 元素記号(**NA**, ~~Na~~)
- 適切なスペース, 改行
(**[EOF]**の位置に注意)
- 物質名は 30文字
(スペースを含む)
- 元素記号は 3文字
(スペースを含む)

```

COMP↓
&INP NE=2, RHO=3. 67, PZ=1, 1 IRAYL=1 /END↓
NAI
NA I↓
ENER↓
&INP AE=0. 521, AP=0. 0100, UE=2. 511, UP=2. 0 /END↓
PWLF↓
&INP /END↓
DECK↓
&INP /END↓
ELEM↓
&INP IRAYL=1 /END↓
AL
AL↓
ENER↓
&INP AE=0. 521, AP=0. 010, UE=2. 511, UP=2. 0 /END↓
PWLF↓
&INP /END↓
DECK↓
&INP /END↓
COMP↓
&INP NE=2, RHO=2. 20, PZ=1, 2, IRAYL=1 /END↓
QUARTZ
SI 0↓
ENER↓
&INP AE=0. 521, AP=0. 0100, UE=2. 511, UP=2. 0 /END↓
PWLF↓
&INP /END↓
DECK↓
&INP /END↓
MIXT↓
&INP NE=3, RHO= 1. 2929E-03, RHOZ= 0. 755, 0. 232, 0. 013,
GASP=0. 93174, IRAYL=1 /END↓
AIR-AT-NTP
N O AR↓
ENER↓
&INP AE=0. 521, AP=0. 010, UE=2. 511, UP=2. 0 /END↓
PWLF↓
&INP /END↓
DECK↓
&INP /END↓
[EOF]
  
```

低エネルギー光子輸送関連のフラッグ

- **すべて=0で無視（既定値）**
- **IBOUND =1 (束縛電子コンプトン断面積)**
- **INCOH=1 (束縛コンプトン散乱角度分布)**
- **ICPROF=-3 (ドップラー広がり)**
- **IMPACT=1 (K殻電子衝突電離)**

**EGS5で使用するためには、
PEGS5で考慮しておくことが必要
他の多くのオプション、機能については
[pegs_user_manual.pdf](#)（pp20-21,28）を参照**

単体（例: Pb）

ELEM

**&INP IRAYL=1, IBOUND=1, INCOH=1,
ICPROF=-3, IMPACT=1 &END**

- **‘ELEM’**: Element（単体）の指定
- **‘IAPRIM’**: 輻射阻止能のICRU-37への規格化（既定値で考慮）
- **‘IRAYL’**: レイリー散乱（規定値では省略，1で考慮）
- **‘IBOUND’**- **‘IMPACT’**:
低エネルギー光子関連フラッグ

単体（例: Pb）

PB PB PB
30 文字

- ‘PB’(1つ目): EGS5で使用する物質データの名称
(任意: 30文字で入力し, 前24文字をEGS5で使用)
- ‘PB’(2つ目): 密度効果に関する変数を指定
SSB係数(Sternheimer-Seltzer-Berger係数)
- ‘PB’(3つ目): 作成する物質データの元素記号

SSB係数 :

[egs5/doc/slac730.pdf](https://egs5.slac.stanford.edu/doc/slac730.pdf) (pp78-83, Table 2.3) Page 12

単体（例: Pb）

ENER

**&INP AE=0.521, UE=20.511,
AP=0.01, UP=20.0 &END**

- **物質データを作成するエネルギー範囲(MeV)**
 - 電子のカットオフエネルギー(下限値**AE**, 上限値**UE**)
 - 光子のカットオフエネルギー(下限値**AP**, 上限値**UP**)
- 電子のカットオフエネルギーは静止質量を含む**

化合物（例：アクリル樹脂）

COMP

&INP NE=3,RHO=1.19,PZ=5.,8.,2.,

- **‘COMP’**: Compound（化合物）の指定
- **‘NE’**: 化合物中の元素の種類の数
- **‘RHO’**: 密度（g/cm³）
- **‘PZ’**: 化合物中の原子数の比

PMMA

C H O

PMMA

- **‘C H O ’**: 元素記号をPZと同じ順番で入力
(A2,1X)書式

混合物（例：空気20°C, 1気圧）

MIXT

- ‘MIXT’: Mixture（混合物）の指定

RHOZ = 0.755, 0.232, 0.013,

- ‘RHOZ’: 混合物中の質量比（≠体積比）

RHO=1.2929E-03, GASP=0.93174

RHO=1.2050E-03, GASP=1.0

- RHOかGASPを温度で補正
- 気体の場合
 - ‘GASP’ (gas pressure)
$$= 1.0 \times 273 / (273 + 20) = 0.93174$$

PEGS5用入力ファイル例

	単体	化合物	混合物
固体、液体	鉄	アクリル	鉛ガラス
気体	Xe ガス	CO ₂ , H ₂	空気

KEK 波戸芳仁先生，平山英夫先生：
[egs5/doc/pegs5j.pdf](#)

EGS5

- 扱う物質に合わせてEGS5のサンプルユーザーコード内の該当箇所を変更
- 物質データを変更した際変更する箇所
 - STEP 1: 変数の宣言
 - STEP 2: 物質の定義
 - STEP 3: シミュレーション精度の決定

STEP 1 変数の宣言

- EGS5での変数の宣言

- COMMON変数

AUSGABやHAWFARなどと共通の変数

```
117 | common/totals/                                ! Variables to score↓
118 | * depe, deltae, spec(3, 50), maxpict↓
119 | real*8 depe, deltae, spec↓
120 | integer maxpict↓
```

- 物質の数に合わせて変数を変更

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

24文字の物質名の変数(配列)を4個用意

STEP 2 物質の定義

- PEGSで作成した物質データをEGSに読み込む
- 変更箇所

nmed: 物質の数=4

medarr: 24文字の物質名（スペースを含む）

medarr(n): CGviewの物質番号（0は真空）

EGS

```
164 |
165 | Step 2: pegas-call ↓
166 | -----
167 | ↓
168 | -----
169 | Define media before calling PEGS5 ↓
170 | -----
171 | ↓
172 | nmed=4 ↓
178 | medarr (1) = ' NAI ' ↓
179 | medarr (2) = ' AL ' ↓
180 | medarr (3) = ' QUARTZ ' ↓
181 | medarr (4) = ' AIR-AT-NTP ' ↓
```

PEGS

```
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 ↓
```

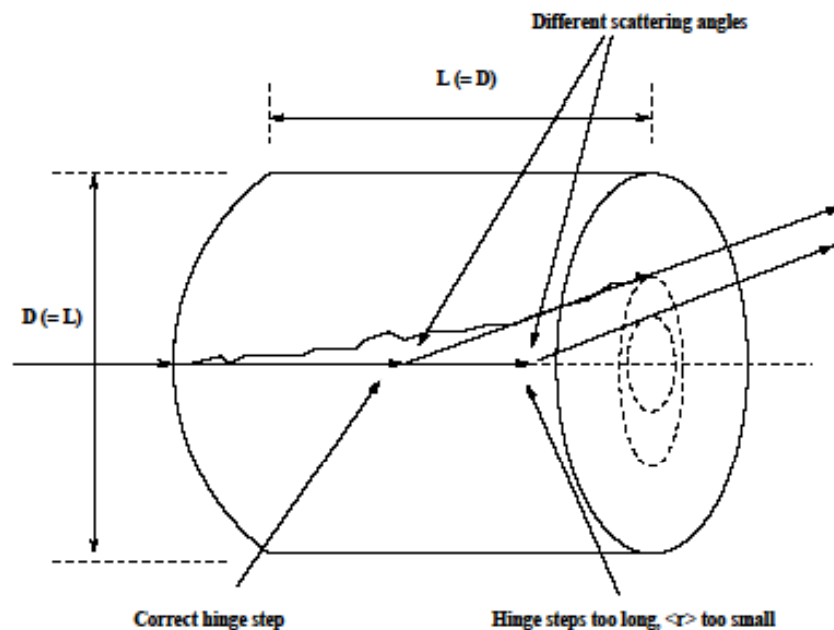
CGview

領域情報:

領域番号	物質番号	1	2	3
Z0001	1	+1		
Z0002	0	+2	-1	
Z0003	2	+3	-2	-4
Z0004	3	+4		
Z0005	4	+5	-3	
Z0006	0	+6	-5	

STEP 2 物質の定義

- **Characteristic Dimensions(chard)の設定**
 - 物質毎に多重散乱時のStep-Sizeを入力
 - その物質が使用される領域の最小径を入力



物質毎に設定

189	chard (1) = 7. 62d0
190	chard (2) = 0. 1d0↓
191	chard (3) = 0. 5d0↓
192	chard (4) = 5. 0d0↓

Figure 2.16: Schematic illustrating the modified “broomstick” problem as used in EGS5.

STEP 3 シミュレーション精度の決定

- 領域毎にEGS5でのシミュレーション精度を決定
 - エネルギーのカットオフ, 物理現象のオプション
- PEGS5, EGS5両方で各オプションの考慮が必要
- シミュレーション全体で考慮するオプション
物質毎, 領域毎に定義するオプションがある

```
239 | ! Set option except vacuum region↓
240 |   do i=1, nreg-1↓
241 |     if (med(i).ne.0) then↓
242 |       iphter(i) = 1      ! Switches for PE-angle sampling↓
243 |       iedgfl(i) = 1      ! K & L-edge fluorescence↓
244 |       iauger(i) = 0      ! K & L-Auger↓
245 |       iraylr(i) = 0      ! Rayleigh scattering↓
246 |       lpolar(i) = 0      ! Linearly-polarized photon scattering↓
247 |       incohr(i) = 0      ! S/Z rejection↓
248 |       iprofr(i) = 0      ! Doppler broadening↓
249 |       impacr(i) = 0      ! Electron impact ionization↓
250 |     end if↓
251 |   end do↓
```

終わりに

- **EGS5では、計算時間短縮のために規定値では物理現象を単純化して考慮している場合がある。**
- **シミュレーションするエネルギー帯、体系、必要とする精度によって考慮すべき物理現象が異なるため、適切なオプション選択が必要である。**

実習課題

- ① 外枠の物質をアルミニウム(AL)からアクリル樹脂(PMMA)に変更.
- ② ドップラー広がりを考慮するように, EGS5ユーザーコード, PEGS5用入力ファイルを変更.

使用ファイル:

C:¥egs5¥userdir¥ucnaicgv.f, ucnaicgv.inp

実習課題のヒント

- ① **STEP 2で物質名を24文字にすることを注意。
アクリル樹脂はucshield.inpに存在。**
- ② **ドップラー広がり “Doppler broadening”
を考慮する場合、同時に束縛電子コンプトン
断面積、束縛コンプトン散乱角度分布も考慮
する必要がある。（本資料, p10）
（egs5/doc/pegs_user_manual.pdf, p28）
（egs5/doc/egs5_user_manual.pdf, p16）**

参考エラー集

- **EGS5では、PEGS5で物質データが作成された後、EGS5の計算が始まる。**
- **エラーを基に計算がどこまで流れたかを把握し、PEGS, CGview, EGSの間違っている箇所を修正する。**

確認ファイル：

egs5/userdir/pgs5job.pegs5lst, egs5job.out

参考エラー集

• PEGS5での物質データ作成が成功

```
pgs5job.pgs5lst - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
0 10 20 30 40 50 60
1 1 Pgs5 listing file↓
2 (with nrcc modifications, Jan 13, 1988) ↓
3 ↓
4 This version reads units 8 and 9 in free format↓
6565 9. 99965E-01 2. 64265E-05 9. 99965E-01 2. 64265E-05↓
6566 After DECK. ISSB, AFACT, CBAR, SK, X0, X1, IEV= 0 0. 0000E+00
6567 ↓
6568 ↓
6569 ↓
6570 End of file read - exit from pgs5↓
6571 1↓
6572 [EOF]
```

参考エラー集

- EGS5での物質データ読み込みが成功



- PEGS5での物質データ作成が失敗



参考エラー集

- 元素の種類の数（NE）を誤った

```
pgs5job.pgs5lst - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
5313 -----
5314 Medium=AIR-AT-NTP , Sternheimer ID=AIR-GAS
5315 -----
5316 ↓
5317 Atomic symbols are: N O AR ↓
5318 Not an atomic symbol for an element with Z LE 100↓
5319 Bad atomic symbol.... job aborted. ↓
5320 [EOF]
```

NE=4 (≠3)

4つ目の元素を
読み込もうとして
エラー有り

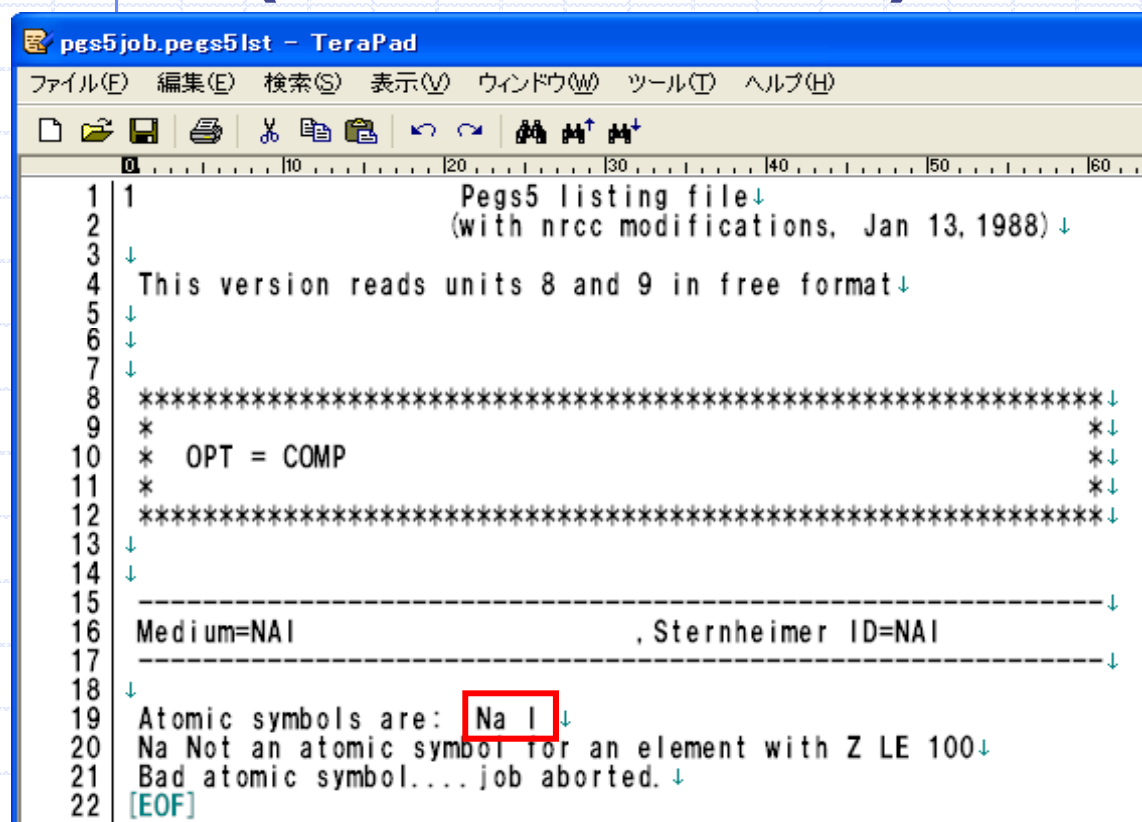
```
pgs5job.pgs5lst - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
5313 -----
5314 Medium=AIR-AT-NTP , Sternheimer ID=AIR-GAS
5315 -----
5316 ↓
5317 Atomic symbols are: N O
```

NE=2 (≠3)

物質2つのみで
物質データを作成
エラー無し

参考エラー集

- 元素記号に誤って小文字を使用
(NAをNaとした)



```
pegs5.job.pegs5.lst - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
1 1 Pegs5 listing file↓
2 (with nrcc modifications, Jan 13, 1988) ↓
3 ↓
4 This version reads units 8 and 9 in free format↓
5 ↓
6 ↓
7 ↓
8 *****↓
9 * OPT = COMP *↓
10 * *↓
11 * *↓
12 *****↓
13 ↓
14 ↓
15 -----↓
16 Medium=NAI , Sternheimer ID=NAI
17 -----↓
18 ↓
19 Atomic symbols are: Na I ↓
20 Na Not an atomic symbol for an element with Z LE 100↓
21 Bad atomic symbol.... job aborted. ↓
22 [EOF]
```

元素記号をうまく
読み込めていない

参考エラー集

- 物質データのエネルギーの上限値が入射粒子エネルギーのエネルギーより低い

```
ucnaicgv.inp - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
1 COMP↓
2 &INP NE=2, RHO=3. 67, PZ=1, 1 IRAYL=1 /END↓
3 NAI
4 NA I↓
5 ENER↓
6 &INP AE=0. 521, AP=0. 0100, UE=1. 511, UP=1. 0 /F

ucnaicgv.f - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
267 -----
268 Step 4: Determination-of-incident-particle-parameters↓
269 -----
270 Define initial variables for incident particle normally inc
271 on the slab↓
272 iqin=0 ! Incident particle charge - photons
273 ekein=1. 253 ! Incident particle kinetic energy↓

egs5job.out - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
170 Stopped in MAIN. (Incident kinetic energy + RM) > min(UE, UP+RM). ↓
171 [EOF]
```

参考エラー集

- EGSにて物質の種類の数（nmed）を誤った

```
egs5job.out - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
41 PROGRAM STOPPED IN HATCH BECAUSE THE↓
42 FOLLOWING NAMES WERE NOT RECOGNIZED:↓
43 ↓
44
45 [EOF]
```

nmed=5 (≠4)

4つ目の元素を
読み込もうとして
エラー

```
egs5job.out - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
38 EGS SUCCESSFULLY 'HATCHED' FOR 3 MEDIA. ↓
128 medium( 5) = ecut=0.0000 MeV, pcut=0.0000 MeV↓
129 medium( 6)=vacuum↓
```

nmed=3 (≠4)

物質3つのみを読み込み、物質の存在しない領域が作成されて
粒子が止まる

参考エラー集

- EGSにて物質の名前（medarr）を誤った

181 | medarr(4) = 'AIR-GAS' ↓

MIXT ↓

&INP NE=3, RHO= 1. 2929E-03, RHOZ= 0. 755, 0. 232, 0. 013, ↓
GASP=0. 93174, IRAYL=1 /END ↓

○ AIR-AT-NTP

✗ AIR-GAS ↓

N O AR ↓

```
27 | Call hatch to get cross-section data ↓
28 | ↓
29 | HATCH-call comes next ↓
30 | ↓
31 | RAYLEIGH DATA AVAILABLE FOR MEDIUM 1 BUT OPTION NOT REQUESTED. ↓
32 | ↓
33 | RAYLEIGH DATA AVAILABLE FOR MEDIUM 2 BUT OPTION NOT REQUESTED. ↓
34 | ↓
35 | RAYLEIGH DATA AVAILABLE FOR MEDIUM 3 BUT OPTION NOT REQUESTED. ↓
36 | ↓
37 | END OF FILE ON UNIT 12 ↓
38 | ↓
39 | PROGRAM STOPPED IN HATCH BECAUSE THE ↓
40 | FOLLOWING NAMES WERE NOT RECOGNIZED: ↓
41 | ↓
42 | 'AIR-GAS'
43 | [EOF]
```

物質データを
読み込み失敗

参考エラー集

- オプションの設定を誤った

```
egs5job.out - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
0 10 20 30 40 50 60
27 Call hatch to get cross-section data↓
28 ↓
29 HATCH-call comes next↓
30 ↓
31 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 1↓
32 ↓
33 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 2↓
34 ↓
35 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 3↓
36 ↓
37 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 4↓
38 ↓
39 STOPPED IN HATCH: REQUESTED COMPTON PROFILE OPTION FOR MEDIUM 1↓
40 BUT CORRECT COMPTON PROFILE DATA NOT INCLUDED IN DATA CREATED↓
41 BY PEGS -- USE ICPROF=-3 IN PEGS. ↓
42 [EOF]
```

PEGSにてオプションの
設定を誤った

```
egs5job.out - TeraPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) ウィンドウ(W) ツール(T) ヘルプ(H)
[Icons]
0 10 20 30 40 50 60
27 Call hatch to get cross-section data↓
28 ↓
29 HATCH-call comes next↓
30 ↓
31 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 1↓
32 ↓
33 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 2↓
34 ↓
35 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 3↓
36 ↓
37 COMPTON PROFILE OPTION REQUESTED FOR MEDIUM NUMBER 4↓
38 ↓
39 STOPPED IN HATCH: REQUESTED COMPTON PROFILE OPTION FOR MEDIUM 1↓
40 BUT INCOHERENT DATA NOT REQUESTED IN USER CODE. ↓
41 THIS IS PHYSICALLY INCONSISTENT -- USE INCOHR(1)=1 WHEN IPROFR(1)=1.
42 [EOF]
```

EGSにてオプションの
設定を誤った