

PEGS5の入力データ

2012年6月19日
KEK 波戸、平山

PEGS5入力ファイルの例(sampl5.inpの一部)

```
ELEM
  &INP /
FE-RAYLEIGH          FE
FE
ENER
&INP AE=1.5,AP=0.100,UE=2000.0,UP=2000.0 &END
TEST
  &INP /
PWLF
  &INP /
DECK
  &INP /
```

PEGS5入力ファイルの例(sampl5.inpの一部)

```
ELEM  
&INP /  
FE-RAYLEIGH          FE  
FE  
ENER  
&INP AE=1.5,AP=0.100,UE=2000.0,UP=2000.0 &END  
TEST  
&INP /  
PWLF  
&INP /  
DECK  
&INP /
```

元素組成等指定部分

エネルギー範囲
指定部分

定型部分
(通常変更せず)

元素組成等指定部分

5種類の例で説明

	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		空気

鉄：単体・固体

単体
(左詰)

&INP / : オプション入力部
「変数名=値」の書式で入力

ELEM

&INP /

FE

FE

FE

元素記号
(左詰)

物質の名称 (ユーザーコード
で使用。左詰24文字以内)

密度効果Flag #
(31文字目から書く)

- # : 密度効果表 (表2.3) に列挙された物質を指定する
- Sternheimer-Seltzer-Bergerの式 (高精度)
 - 省略時 : Sternheimer-Peierlsの一般式 (中精度)

Xe ガス: 単体・気体

1気圧での密度 (g/cm³)

“GASP=Gas 圧力”は、
「物質を気体として指定」

```
ELEM
```

```
&INP RHO=5.89E-3, GASP=1.0 /
```

```
XENON-GAS-STP
```

```
XE-GAS
```

```
XE
```

気体の問題点: 密度が圧力に比例。圧力が温度に比例。



RHOとGASPは共通の温度(0°C, 20°Cなど) に対する値を入力。
参考: 標準状態(STP)=0°C, 1気圧・自然状態(NTP)=20°C, 1気圧

アクリル(PMMA): 化合物・固体

化合物
(左詰)

元素の数

密度 (g/cm³)

原子の数の比

COMP

&INP NE=3, RHO=1.19, PZ=5.0, 8.0, 2.0 /

PMMA

C H O

元素記号
(A2,1X)
2文字1空白
or
1文字2空白

同じ順番！

鉛ガラス: 混合物・固体

混合物
(左詰)

元素の数

密度 (g/cm³)

元素の質量比

MIXT

&INP NE=5, RHO=3.61, RHOZ=41.8, 21.0, 29.0, 5.0, 2.2 /

LEAD GLASS

PB SI O K NA

元素記号

(A2,1X)

2文字1空白

or

1文字2空白

同じ順番！

<化合物と混合物の使い分け>

原子の数の比で指定したい→化合物

元素の質量比で指定したい→混合物

空気 (20 °C, 1気圧): 混合物・気体

0°C 1気圧での密度 (g/cm³)

20°C、1気圧を0°Cにした
場合の気圧

MIXT

&INP NE=3, RHO=1.2929E-3, GASP=0.93174,

RHOZ=0.75575,0.23143,0.01282 /

AIR-20C

AIR-GAS

N O AR

同じ順番！

2文字1空白

or

1文字2空白

N=78%は容積比
であり、間違い

RHO=1.205E-3, GASP=1.0でも可

エネルギー範囲指定部分

ENER

&INP AE=1.5, AP=0.100, UE=2000.0, UP=2000.0 /

	光子	電子
上限	UP	UE
下限	AP	AE

MeV単位

電子のエネルギーは
静止質量を含む

- 入射エネルギー-EIとの関連
 - 光子入射
 - $AP \leq EI \leq UP, EI \neq UP$
 - $AE \leq EI+RM \leq UE$
 - 電子入射
 - $AE \leq EI \leq UE, EI \neq UE$
 - $AP \leq EI-RM \leq UP$
 - 陽電子入射(電子入射の条件に追加)
 - $AP \leq EI+RM \leq UP$
- AEとAP, UEとUPの通常の設定
 - $AE-AP=RM, UE-UP=RM$

[EOF]の位置に関連するエラー集

- DECK
&INP /END
[EOF]

[EOF]が最終行にある場合：
正常動作

EOF:
ファイルの終わりを示す記号

- DECK
&INP /END [EOF]

egs5job.out: PEGS5-call comes next

pgs5job.pgs5lst: Stopped in pgs5 because namelist/INP/ data was missing.

[EOF]が/ENDと同じ行にある場合：異常終了

- DECK
&INP /END
(空白行)
[EOF]

[EOF]の前に空白行がある場合：
異常終了

- <空白> [EOF]

[EOF]が最終行にあるものの、[EOF]のまえに空白などがある場合：
異常終了

CALL オプション

ELEM

&INP /

PB

PB

CALL

&INP XP(1)=49.99 /

GMFP

フィッティング前の量を出力
するオプション

49.99 MeV 光子に対する
鉛の平均自由行程を出力

<出力>

OPT=CALL

FUNCTIONCALL: 1.95522 = GMFP OF 49.99

放射長単位

低エネルギー光子輸送関連のフラッグ

- IRAYL=1 (レイリー散乱断面積)
- 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=1-6 (K殻電子衝突電離)
- すべて、0で無視(既定値)

他の多くのオプション、機能については
[pegs_user_manual.pdf](#) を参照

pegs5の初歩的な練習問題

- uc_examin.f を egs5run を用いて走らせよ。egs5job.out の各列の数値のエネルギー依存を説明せよ。(グラフ化を推奨)
- uc_examin.inpの2行目のIMPACT=1,の後に IUNRST=2を追加し、非制限全阻止能を出力せよ。それを文献値(例えば、NISTのestarと比較せよ。)

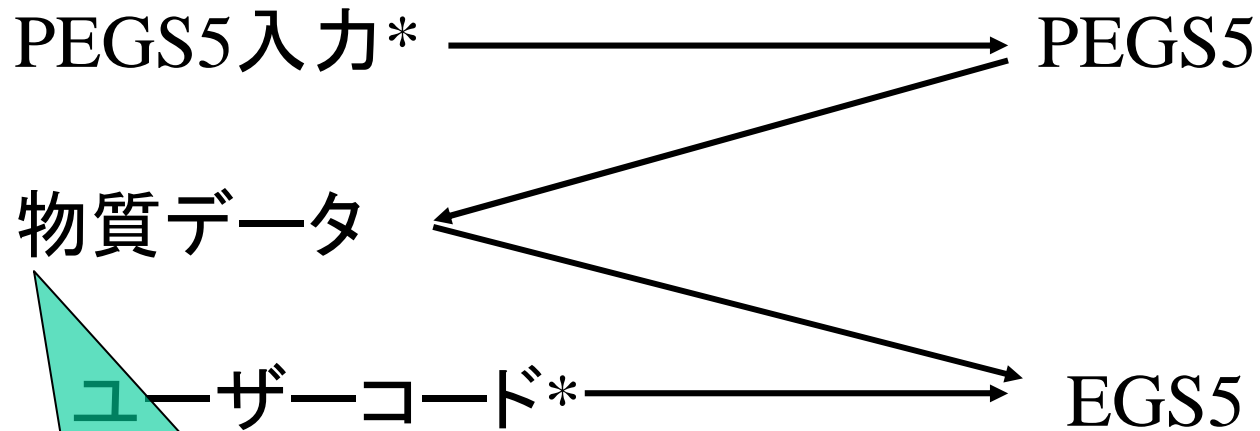
pegs5の中級練習問題

- Feに対する pegs5 入力ファイルを作成し、uc_examin.f を走らせよ。元の uc_examin.inp と比べて何が変わったか?
- 水に対する pegs5 入力ファイルを作成し、uc_examin.f を走らせよ。外部の参考書などの数値と比較するなどして数値の妥当性を検討せよ。

uc_examin.fを変更なしに走らせる場合の入力

- Material Identifier: AL<Enter>
- Title after: <Enter>
- Electron and photons (0), only electrons (1) or photons (2): 0<Enter>
- Include Rayleigh (coherent) scattering (1) or not (0): 1<Enter>
- Tables (0) or individual energies (1) : 0<Enter>
- Output terminal (0), disk file (1), terminal&plot (2), disk&plot (3) : 0<Enter>
- 結果はegs5job.outに出力される。

PEGS5入力とユーザーコードの関係



* egs5runで指定

計算がうまく実行されない場合には、これが作成されているかどうかを調べる。数100行以上作成されていればOK。空白または数行なら失敗。

改訂記録

- 22JUL2004 EGS5用記述
- 05AUG2005 charDに対応してEFRACはオプション化
- 2006-05-01 EFRACを削除。空気組成の誤った比率(容積比)の例を追加。
- 2006-06-21 Efrac廃止を追加。練習問題を追加。[EOF]の位置に関連するエラーを追加
- 2008-08-01 efracに関する記述を削除。
- 2009-03-09 EOFの位置に関連するエラーを1個追加
- 2009-07-28 uc_examin.fの入力を追加
- 2009-7-29 「pegs5の初歩的な問題」を改訂
- 2010-7-21 吹き出し記号を利用して記述を簡略化
- 2012-6-19 空気の説明文で、RHO=1.0 → GASP=1.0と訂正

以下は予備のスライド

CO₂ ガス(20 °C, 1気圧) : 化合物・気体

COMP

&INP NE=2, RHO=1.977E-3, **GASP=0.93174**, PZ=1.,2. /

CO2-20C

CO2-GAS

C O

- **GASP: 0.93174 atm (=273°C/293°C).**
- この圧力は、20°C、1気圧のガスを体積一定のまま0°Cに冷却したときに得られる。
- CO2-GAS : 密度効果表でのCO₂ガスの名称

H₂ Gas (STP): 化合物, 気体

COMP

&INP NE=2, RHO=8.99E-5, GASP=1.0, PZ=1.,1. /

H2-GAS-STP

H2-GAS

H H

- 単元素の分子気体 (例. H₂) は化合物として扱う
- NE=1 はエラーになる
- H2-GAS (31 列目): 密度効果表での水素ガスの名称