

ユーザーコードの書き方

平山 英夫、波戸 芳仁

KEK, 高エネルギー加速器研究機構

ユーザーコード

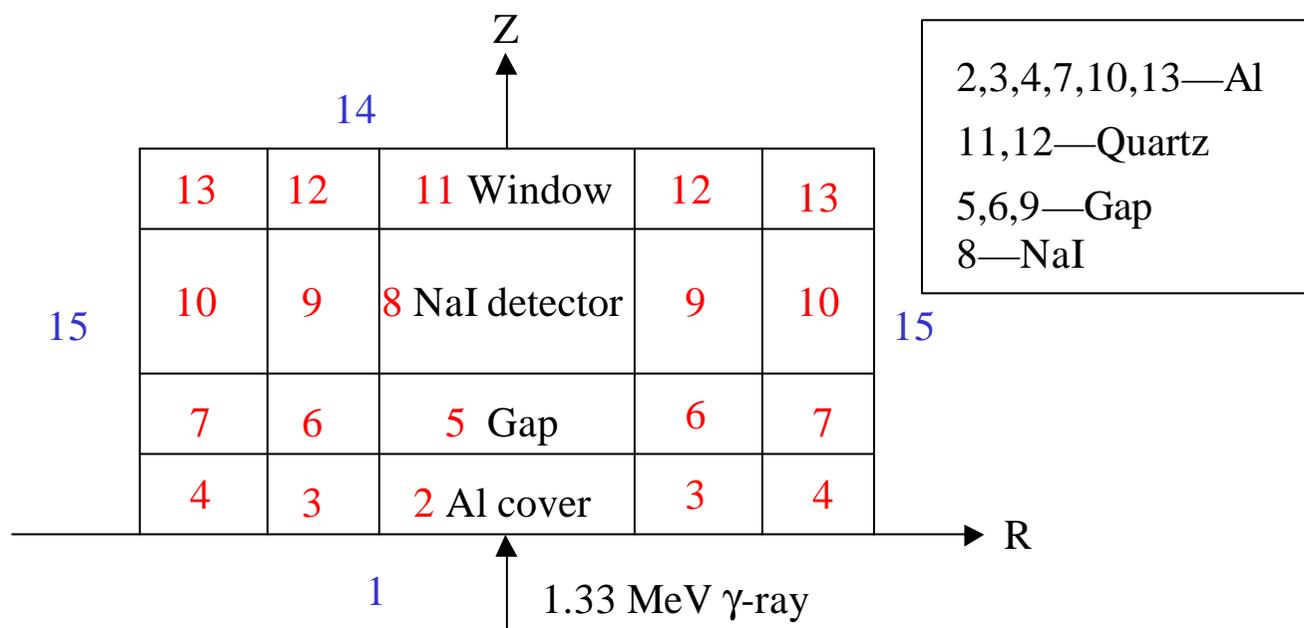
- 初心者が、ユーザーコードを書くのは容易ではない。
- 同じ様な形状で、似た問題を扱っているユーザーコードを自分の問題様に変えるやり方の方が良い。
- KEKからは、様々なサンプルユーザーコードを提供している。
- `ucnai3.mor` を例にして、ユーザーコードの基本構成を説明する。

KEKから配布しているサンプルユーザーコード

- ucna1.mor, ucna2.mor, ucna3.mor, ucna4.mor
 - 様々な形状のNaI(Tl) 検出器のレスポンス計算(PRESTA使用せず)
- ucna1p.mor, ucna2p.mor, ucna3p.mor, ucna4p.mor
 - 様々な形状のNaI(Tl) 検出器のレスポンス計算(PRESTA使用)
- ucedep.mor
 - 平板に平行電子ビームが垂直に入射した場合の、吸収エネルギーの計算 (PRESTA使用)
- ucbfsp.mor
 - 点等方線源に対する 線再生係数の計算(PRESTA使用)
- ucarray.mor, ucarrayp.mor
 - 円筒平板形状のNaI(Tl) 検出器が複数ある場合のレスポンス計算(PRESTA使用しない場合と、使用の場合)
- ucge.mor
 - Ge検出器の回りにCsI検出器がある形状でのGe検出器のレスポンス計算 (PRESTA使用)
- uccal.mor
 - サンプリングカロリメータのエネルギー分解能の計算(PRESTA使用)

ucnai3.mor

- 円筒—平板形状でのNaI検出器のレスポンス計算



Step 1

- Step 1 には、下記の項目を書く
 - Over-ride EGS4 macros
 - Non EGS4 macros
 - COMMON と DIMENSION
 - 物質データの定義
 - 使用するファイルの指定 – open statements

%C80

!NEWCONDITIONAL;

"-----"

"Select random number generator: **0=RAN6 1=RANMAR** "

"RANMAR is a Lagged-Fibonacci Method pseudo random number generator"

"devised by George Marsaglia and Arif Zaman. "

"-----"

REPLACE {\$RNGEN} WITH {**0**}

"STEP 1. USER-OVER-RIDE-OF-EGS-MACROS"

```

REPLACE {$RANDOMSET#;} WITH {
  {SETR B=$RNGEN}
  [IF] {COPY B}=0 [
    IXX=IXX*663608941;{P1}=IXX*0.23283064E-09;IF(IXX.LT.0){P1}={P1}+1.0;
    IF(IXX.EQ.IXXST) [OUTPUT;(' WARNING !/
    ' Same random number will be produced.'/
    ' It is better to use RANNMAR random number generator.')]
  ]
  [IF] {COPY B}=1 [
    {P1}=URNDM(IXX)-URNDM(JXX); IF({P1}.LT.0.) {P1}={P1}+1.;
    URNDM(IXX) = {P1};
    IXX=IXX-1; IF(IXX.EQ.0) IXX=97;
    JXX=JXX-1; IF(JXX.EQ.0) JXX=97;
    CRNDM=CRNDM-CDRNDM; IF(CRNDM.LT.0.) CRNDM=CRNDM+CMRNDM;
    {P1}={P1}-CRNDM; IF({P1}.LT.0.) {P1}={P1}+1.;
  ]
}

```

```
"-----"
"  PLACE COMPILER DEPENDENT SUBROUTINE CALL HERE      "
"-----"
" Select Fortran Compiler.                             "
" Lahey Fortran = 1                                   "
" Microsoft Fortran = 2                               "
" Other PC = 3 (default)                             "
" g77 on Windows = 4                                 "
" Sun UNIX Workstation and Linux = 5                 "
" Other UNIX Workstation =6                           "
"-----"
REPLACE {$COMPILER} WITH {3}
"-----"
```

```
"-----"
"Macro to define OPEN STATEMENT for Cross-section data.      "
"                      (UNIX or PC).                          "
"-----"

REPLACE {$OPEN;} WITH {
  {SETR B=$COMPILER}
  [IF] {COPY B}<5 [OPEN(12,FILE='mortjob.xse',status='old');
    OPEN(6,FILE='mortjob.out',status='new');
    OPEN(8,FILE='mortjob.dum',status='new');]
  [ELSE]      [OPEN(12,FILE='mortjob.xsec',status='old');
    OPEN(6,FILE='mortjob.output',status='new');
    OPEN(8,FILE='mortjob.dummy',status='new');]
}
```

[Non EGS4 macros]

"COMMON to define variables to score at AUSGAB"

"DEPE:deposited energy inside the detector"

"DELTAE:energy bin width in MeV"

"SPG:Gamma spectrum, SPE:Electron spectrum, SPP:Positron spectrum"

REPLACE {;COMIN/TOTALS/;} WITH

{;COMMON/TOTALS/DEPE,DELTAE,SPG(\$NDET,\$NEBIN),SPE(\$NDET,\$NEBIN),
SPP(\$NDET,\$NEBIN);}

"COMMON of print-out parameter"

REPLACE {;COMIN/LINES/;} WITH

{;COMMON/LINES/NLINES,NWRITE,NCOUNT,ILINES;}

"COMMON of geometry related parameter"

REPLACE {;COMIN/PASSIT/;} WITH

{;COMMON/PASSIT/NREG,NPLAN,NCYL,IRZ;}

[\$PARAMETER statements]

PARAMETER \$MXPLNS=5; "NUMBER OF PLANE"

PARAMETER \$MXCYLS=3; "NUMBER OF CYLINDER"

PARAMETER \$NCASES=5000; "MAXIMUM NUMBER OF CASES"

PARAMETER \$NBATCH=50; "Number of batch"

PARAMETER \$NEBIN=50; "Number of energy bin"

PARAMETER \$NDET=1; "Number of detector "

[COMIN and DIMENSION]

;COMIN/DEBUG,BOUNDS,BREMPR,CYLDTA,EDGE,ELECIN,ETALY1,LINES,MEDIA,
MISC,NTALY1,PASSIT,PLADTA,RANDOM,STACK,THRESH,TOTALS,UPHIOT,USEFUL,USER/;
DIMENSION PH(\$NEBIN),PHPB(\$NEBIN,\$NBATCH);
DIMENSION SPGPB(\$NDET,\$NEBIN,\$NBATCH),SPEPB(\$NDET,\$NEBIN,\$NBATCH),
SPPP(\$NDET,\$NEBIN,\$NBATCH);
DIMENSION PEFPB(\$NBATCH),TEFPB(\$NBATCH);

[ユーザーコードで使用する物質の指定]

- 物質名は、24 文字で指定する。
- MADARR の最初の引く数は、24 でなければならない。
- 2番目の引く数は、ユーザーコードで使用する物質の数。

```
$TYPE MEDARR(24,3);
```

```
DATA MEDARR/$S'NAI-XRAY-IAPRIM',9*' ' ,
```

```
    $$'AL-IAPRIM',15*' ' ,
```

```
    $$'QUARTZ-IAPRIM',11*' ' /;
```

テキストと異なっている



Step 2

- SUBROUTINE AUSGAB で使用する変数を、ジオメトリーに関する情報と共に定義する。

- **NMED**: User Codeで使用する物質数
- **NREG**: リージョンの数
- **MED(I)**: 物質番号
- **ECUT(I), PCUT(I)**: EGS4カットオフエネルギー
- **IEDGFL(I)**: 53:原子番号、Produce X rays
0: X-ray are not produced

リージョン毎に定義する必要がある

KEK Extensionでは、1

KEKでの拡張(特性X線)

- 化合物、混合物の特性X線
 - 従来は、1つの元素で代表(原子番号を指定)
 - 拡張では、構成している全ての元素からの特性X線を発生
- 光子エネルギー依存のsub-shell 断面積の導入
- Auger電子の組み込み(実験での検証必要)

KEKでの拡張(Electron Impact Ionization)

- このユーザーコードでは、必要ないが、低エネルギー電子からの光子生成では重要
- EIIを適用するには
 - COMINにEIICOMを加える
 - EIIを適用したいリージョンに対して使用する断面積いよりIMPACR(I)を設定する
 - 詳細は、KEK Internal 2000-4を参照
- 散乱における偏光効果、ドップラー広がり
 - 詳細は、KEK Internal 2000-4を参照

```
NMED=3; "NUMBER OF MEDIA"
```

```
DO J=1,NMED [
```

```
DO I=1,24 [MEDIA(I,J)=MEDARR(I,J);]
```

```
NPLAN=$MXPLNS; "NUMBER OF PLANES"
```

```
NCYL=$MXCYLS; "NUMBER OF CYLINDER"
```

```
NREG=(NPLAN-1)*NCYL+3; "NUMBER OF REGIONS (INCLUDING OUTSIDE VACUUM"
```

```
"          REGION)          "
```

```
IRZ=NREG-3;
```

Ucna3p.morのHOWFARによる円筒－平板形状の扱い上必要

"SET MEDIUM INDEX FOR EACH REGION"

/MED(1),MED(NREG-1),MED(NREG)/=0; "VACUUM REGIONS"

/MED(2),MED(3),MED(4),MED(7),MED(10),MED(13)/=2;

" Al region"

MED(8)=1; "NaI(Tl) detector region"

/MED(11),MED(12)/=3; "Quartz region"

/ECUT(2),ECUT(3),ECUT(4),ECUT(7),ECUT(8),ECUT(10)/=0.561;

/ECUT(11),ECUT(12)/=0.561;

/MED(5),MED(6),MED(9)/=0; "Vacuum region inside case"

IEDGFL(8)=53; "53:Atomic number of I. Produce X rays"

" 0:X rays are not produced"

AE,AP とECUT, PCUTの違い

- AE とAP は、PEGS4 でカットオフエネルギーとして使用
- AEより小さなエネルギーの二次電子を生成する電子あるいは陽電子の散乱及びAPより小さなエネルギーの光子を生成する制動輻射は、連続減衰過程に含まれる。
- ECUT とPCUT は、ユーザーコードで定義される。
- もし、電子や陽電子のエネルギーがECUTより小さくなったり、光子のエネルギーがPCUTより小さくなった場合には、その粒子の全運動エネルギーが、その場所で付与される。
- ECUT とPCUT が各リージョンに割り当てられない場合は、AEとAPがECUT及びPCUTとして割り当てられる。

Step 3

- SUBROUTINE HATCH をCALLし、ユーザーコードで使用する物質データを物質データファイルから読み込む。
- 使用する物質データに関するデータを出力する。
 - 例えば、名前、密度、放射長、AE、AP、UE、UE
- 物質名や、カットオフエネルギーは、プログラムを調べるのに有益な情報である
- 非常に多くのリージョンがある場合には、物質の割り当てが正しく行われているかどうかを調べるのに必要なデータのみを出力する

CALL HATCH;

"OUTPUT VARIOUS QUANTITIES ASSOCIATED WITH THE MEDIA"

OUTPUT; ('1QUANTITIES ASSOCIATED WITH EACH MEDIA:',//);

DO J=1,NMED [

OUTPUT (MEDIA(I,J),I=1,24); (/ ,1X,24A1);

OUTPUT RHO(J),RLC(J); (5X,' RHO=',G15.7,' G/CM**3 RLC=',
G15.7,' CM');

OUTPUT AE(J),UE(J); (5X,' AE=',G15.7,' MEV UE=',G15.7,' MEV');

OUTPUT AP(J),UP(J); (5X,' AP=',G15.7,' MEV UP=',G15.7,' MEV');

]

OUTPUT;('/ INFORMATION OF MEDIUM AND CUT-OFF FOR EACH REGION'//);

DO I=1,NREG [

IF(MED(I).EQ.0) [OUTPUT I,ECUT(I),PCUT(I);

(' MEDIUM(',I3,')=VACUUM',18X,'ECUT=',G10.5,' MEV, PCUT=',G10.5,' MEV');

]

ELSE [OUTPUT I,(MEDIA(II,MED(I)),II=1,24),ECUT(I),PCUT(I);

(' MEDIUM(',I3,')=',24A1,'ECUT=',G10.5,' MEV, PCUT=',G10.5,' MEV');]

]

Step 4

- ジオメトリーに関するデータを割り当てる
- 平板の場合
 - 個々の平板毎に、位置座標(PCOORD)と垂直ベクトル(PNORM)を定義する
 - 意味については、後の講義で説明
- 円筒の場合
 - 円筒毎に、半径 (CYRAD)と半径の自乗(CYRAD2) を定義する
- ジオメトリーのチェックのためには、定義した値を出力しておく方が良い

Step 5

- SUBROUTINE ECNSV1 及び NTALLY を使用する場合には、それらを初期化する

```
CALL ECNSV1(0,NREG,TOTKE);" INITIALIZE ESUM ARRAY FOR ENERGY"  
"  
"          CONSERVATION CALCULATION."  
"  
"          NREG=NUMBER OF REGIONS"  
"  
"          TOTKE=TOTAL KE (DUMMY VARIABLE HERE)"  
"  
"          (MUST BE REAL*8)"  
  
CALL NTALLY(0,NREG);
```

- AUSGABで使用する変数の初期化

```
NCOUNT=0; "PARTICLE HISTORY COUNTER"
```

```
ILINES=0; "INITIALIZE LINE-OUTPUT COUNTER"
```

```
DEPE=0.D0; "ZERO THE ENERGY DEPOSITION AT SCINTILATOR"
```

```
/PEF,TEF/=0.0; "Zero the efficiency"
```

```
DO J=1,$NEBIN [PH(J)=0.0;] "Zero the pulse-height"
```

```
DO ND=1,$NDET [
```

```
DO J=1,$NEBIN [
```

```
/SPG(ND,J),SPE(ND,J),SPP(ND,J)/=0.0; "Zero the spectrum"
```

```
]]
```

- NCOUNT と ILINES は、中間結果の出力を制御する変数

Step 6

- 入射粒子のパラメータを定義
 - **IQI**: 粒子の種類 **EI**:全エネルギー、**XI, YI, ZI** :入射位置
 - **UI,VI,WI**:方向余弦、**IRI**:入射リージョン
 - **WTI**:入射粒子の重み (普通は =1)
- 上記に加えて下記の変数を定義する
 - **IDINC=-1**: 入射粒子である事を示す変数
 - **IXXST**:種乱数 (for SLAC RAN6)
 - **NWRITE, NLINES**:中間結果の出力条件
 - **NBATCH**:バッチに分割して計算する場合のバッチ数
 - **NCASES, NCASPB**:ヒストリー数とバッチ当たりのヒストリー数

$IQI=0$; "INCIDENT PARTICLE"

$EI=1.33 + ABS(IQI)*PRM$; "TOTAL ENERGY OF PARTICLE (MEV) "

$AVAILE=EI + IQI*PRM$; "AVAILABLE K.E. (MEV) (MUST BE REAL*8)"

$EKIN=AVAILE$;

$DELTA E=0.05$; "Energy bin of response"

$XI=0.0$; $YI=0.0$; $ZI=0.0$; "STARTING COORDINATES (CM)"

$UI=0.0$; $VI=0.0$; $WI=1.0$; "INCIDENT DIRECTION COSINES"

$IRI=2$; "ENTRANCE REGION DEFINITION"

$WTI=1.0$; "WEIGHT FACTOR OF UNITY"

$IDINC=-1$; "AN IDENTIFIER (LIKE IARG) TO MARK INCIDENT PARTICLES"

IXXST=17847465;

IXX=IXXST; "INITIALIZED RANDOM NUMBER WITH STARTING SEED"

\$RNG-INITIALIZATION;

Initialization if RANMAR
random number generator
are selected

NWRITE=10; "NUMBER OF INCIDENT CASES TO PRINT OUT"

NCASES=\$NCASES; "MAXIMUM NUMBER OF INCIDENT CASES TO RUN"

NBATCH=\$NBATCH; "NUMBER OF BATCH"

NCASPB=NCASES/NBATCH; "NUMBER OF CASES PER BATCH"

NOFBAT=0; "NUMBER OF BATCH FINISHED"

NLINES=15; "NUMBER OF LINES TO PRINT OUT"

Step 7

- 線源条件 **IQI, EI, XI, YI, ZI, UI, VI, WI, IRI, WTI** を付加して “SUBROUTINE SHOWRR” をCALLする
- ヒストリー毎に、線源の条件が異なる場合には、線源の条件を決定するルーチンを “CALL SHOWER” の前に挿入しておく必要がある

```
DO NOFBAT=1,NBATCH [ "BATCH-LOOP"
```

```
DO I=1,NCASPB ["START OF SHOWER CALL LOOP OF EACH BATCH"
```

```
IF(NCOUNT.LE.NWRITE.AND.ILINES.LE.NLINES) [
```

```
  OUTPUT EI,XI,YI,ZI,UI,VI,WI,
```

```
  IQI,IRI,IDINC; (7G15.7,3I5);
```

```
  ILINES=ILINES+1;]
```

```
CALL SHOWER(IQI,EI,XI,YI,ZI,UI,VI,WI,IRI,WTI);
```

← 線源のサンプリングルーチンが必要な場合には、この場所に挿入

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
- 誤差を評価するのに便利な 2つの方法がある
- MCNPで使用している方法
 - 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

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

$$s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \approx \overline{x^2} - (\bar{x})^2; (\overline{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2) \quad \text{Variance associated with distribution of } x_i$$

$$s_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{N} s^2 \approx \frac{1}{N} [\overline{x^2} - \bar{x}^2] \quad \text{Variance associated with distribution of } \bar{x}$$

$$R = \frac{s_{\bar{x}}}{\bar{x}} \approx \left[\frac{1}{N} \left(\frac{\overline{x^2}}{\bar{x}^2} - 1 \right) \right]^{1/2} \quad \text{Statistical error}$$

MORSE-CGで使用している方法

- 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
- “ N ” ヒストリーを、それぞれ N/n ヒストリーの n 個のバッチに分割する
- 各バッチ毎に得られた値を x_j とする

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_j \quad \text{Mean value of } x_j$$

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x})^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_j^2 - \bar{x}^2) \quad \text{Variance associated with distribution of } x_j$$

$$s_{\bar{x}}^2 = \frac{s_x^2}{n} \quad \text{Standard variance of the mean}$$

$$FSD = \frac{s_{\bar{x}}}{\bar{x}} \quad \text{Fractional standard deviation}$$

ucnai3.mor で使用している誤差評価の方法

- MORSE-CG で使用している方法により **FSD** を求める
- ヒストリー数 (NCASES) を、NBATCH このバッチに分割する
 - バッチ毎のヒストリー数 : NCASPB(=NCASES/NBATCH)
- 検出器中の吸収エネルギーから求められるレスポンス、ピーク及び全検出効率は、ヒストリー毎に計算する

"If some energy is deposited inside detector add pulse-height"

"and efficiency"

```
IF(DEPE.GT.0.D0) [
```

```
IE=DEPE/DELTAE+1;
```

```
IF(IE.LE.$NEBIN) [PH(IE)=PH(IE)+WTI;]
```

```
IF(DEPE.GE.EI*0.999) [PEF=PEF+WTI;]
```

```
TEF=TEF+WTI;]
```

```
DEPE=0.D0;
```

•平均値 \bar{x} は、各バッチの終わりで計算する

```
"Calculate average value for this BATCH"
```

```
DO IE=1,$NEBIN [
```

```
  PHPB(IE,NOFBAT)=PH(IE)/NCASPB;
```

```
  PH(IE)=0.0;
```

```
]
```

```
PEFPB(NOFBAT)=PEF/NCASPB;
```

```
TEFPB(NOFBAT)=TEF/NCASPB;
```

```
/PEF,TEF/=0.0;
```

```
DO ND=1,$NDET [
```

```
  DO IE=1,$NEBIN [
```

```
    SPGPB(ND,IE,NOFBAT)=SPG(ND,IE)/NCASPB; "Gamma spectrum for this BATCH"
```

```
    SPEPB(ND,IE,NOFBAT)=SPE(ND,IE)/NCASPB; "Electron spectrum for this BATCH"
```

```
    SPPPB(ND,IE,NOFBAT)=SPP(ND,IE)/NCASPB; "Positron spectrum for this BATCH"
```

```
  /SPG(ND,IE),SPE(ND,IE),SPP(ND,IE)/=0.0;
```

```
]]
```

Step 8

- 得られた結果を解析し、出力する
- ジオメトリーや線源条件も出力する方が良い
- もし、ユーザコードで ECNSV1 や NTALLY を使用している場合は、これらのルーチンから得られる統計情報を出力する文も必要

"NEXT, CALL THE SUBROUTINE ECNSV1 TO WRITE-OUT THE ENERGY DEPOSITION"

"TOTALS---TO CHECK ENERGY CONSERVATION FOR ONE THING"

```
CALL ECNSV1(1,NREG,TOTKE);
```

```
CALL NTALLY(1,NREG);
```

AUSGABの機能

- AUAGAB 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
- ucnai3.mor では、NaI検出器中での沈着エネルギー、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を記録している

```
IRL=IR(NP); "SET LOCAL VARIABLE"
```

```
DPWT=WT(NP);
```

```
"KEEP TRACK OF THE ENERGY DEPOSITION---FOR CONSERVATION  
PURPOSES"
```

```
ESUM(IQ(NP)+2,IRL,IARG+1)=ESUM(IQ(NP)+2,IRL,IARG+1)+EDEP*DPWT;
```

```
NSUM(IQ(NP)+2,IRL,IARG+1)=NSUM(IQ(NP)+2,IRL,IARG+1) + 1;
```

```
IF(MED(IRL).EQ.1) ["particle is inside the detector"]
```

```
DEPE=DEPE+EDEP; "Add energy deposition"
```

粒子が外部から NaI 検出器に入射

PMの窓からの反射を含めない場合には、
IF((IRL.NE.IROLD.AND.IARG.EQ.0).AND.(IROLD.NE.11))

IF(IRL.NE.IROLD.AND.IARG.EQ.0) ["particle enters into detector"

IF(IQ(NP).EQ.0) ["photon"

IE=E(NP)/DELTAE+1;

IF(IE.LE.\$NEBIN) [SPG(1,IE)=SPG(1,IE)+DPWT;]]

ELSEIF(IQ(NP).EQ.-1) ["Electron"

IE=(E(NP)-RM)/DELTAE;

IF(IE.LE.\$NEBIN) [SPE(1,IE)=SPE(1,IE)+DPWT;]]

ELSE ["Positron"

IE=(E(NP)-RM)/DELTAE;

IF(IE.LE.\$NEBIN) [SPP(1,IE)=SPP(1,IE)+DPWT;]]

] "end of entering to detector"

] "end of inside detector"

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 の途中で、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領域 (例 :体系外)に達したばあいには、DISCARD フラグを 1 に設定する
- より詳細は、“**ジオメトリーの書き方**”の講義で説明