PHITS ver.3.20の概要

PHITS開発チーム一同

2020/03

最近の更新履歴

2017年12月 : PHITS 3.02をRISTに登録

2018年08月 : PHITS 3.08を講習会で配布開始

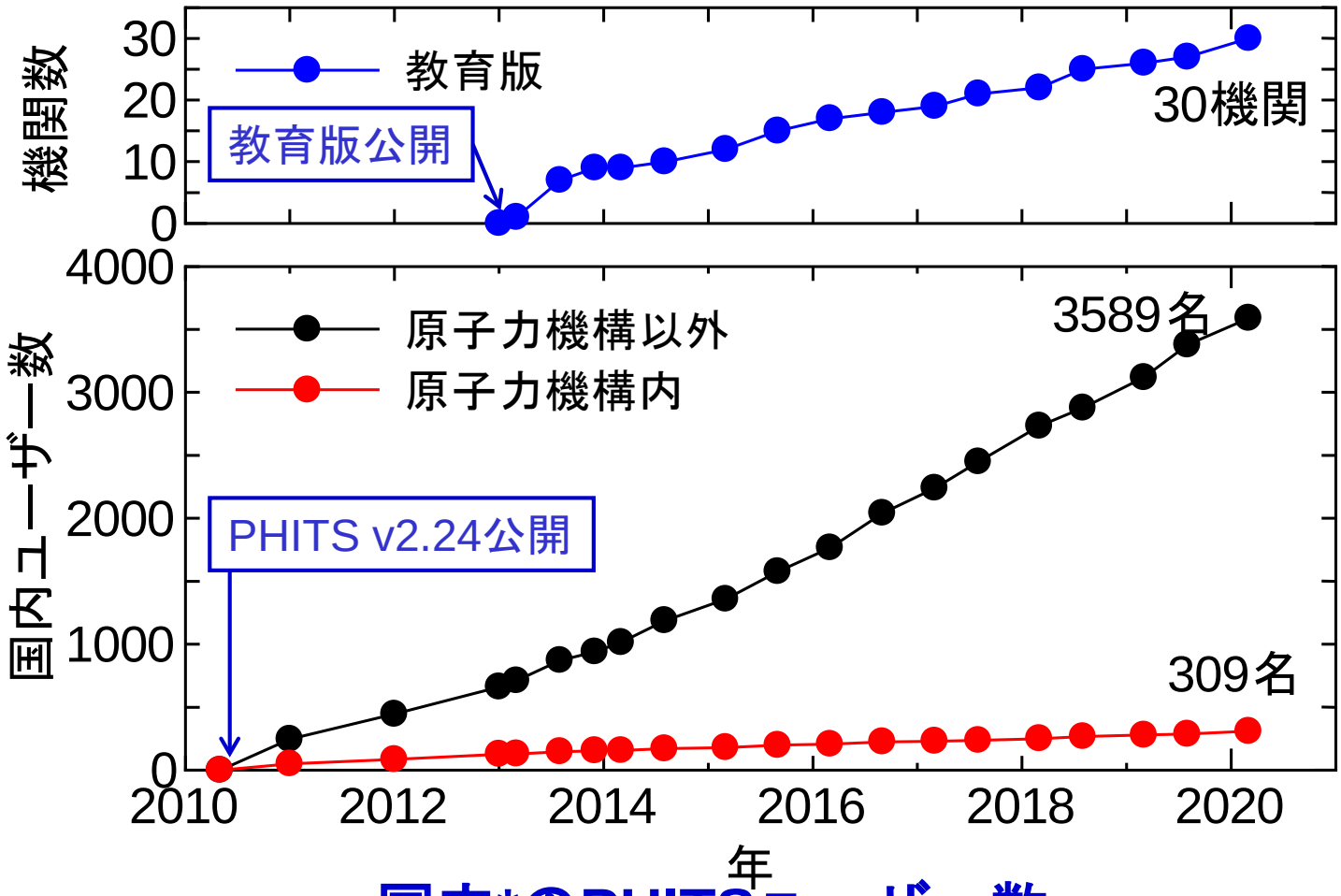
2019年03月 : PHITS 3.10をRISTに登録

2019年04月 : 輸出管理規定を変更し海外へ直接配布開始

2019年11月 : PHITS 3.17を講習会で配布開始

2020年04月 : PHITS 3.20をRISTに登録

国内ユーザー数の変化

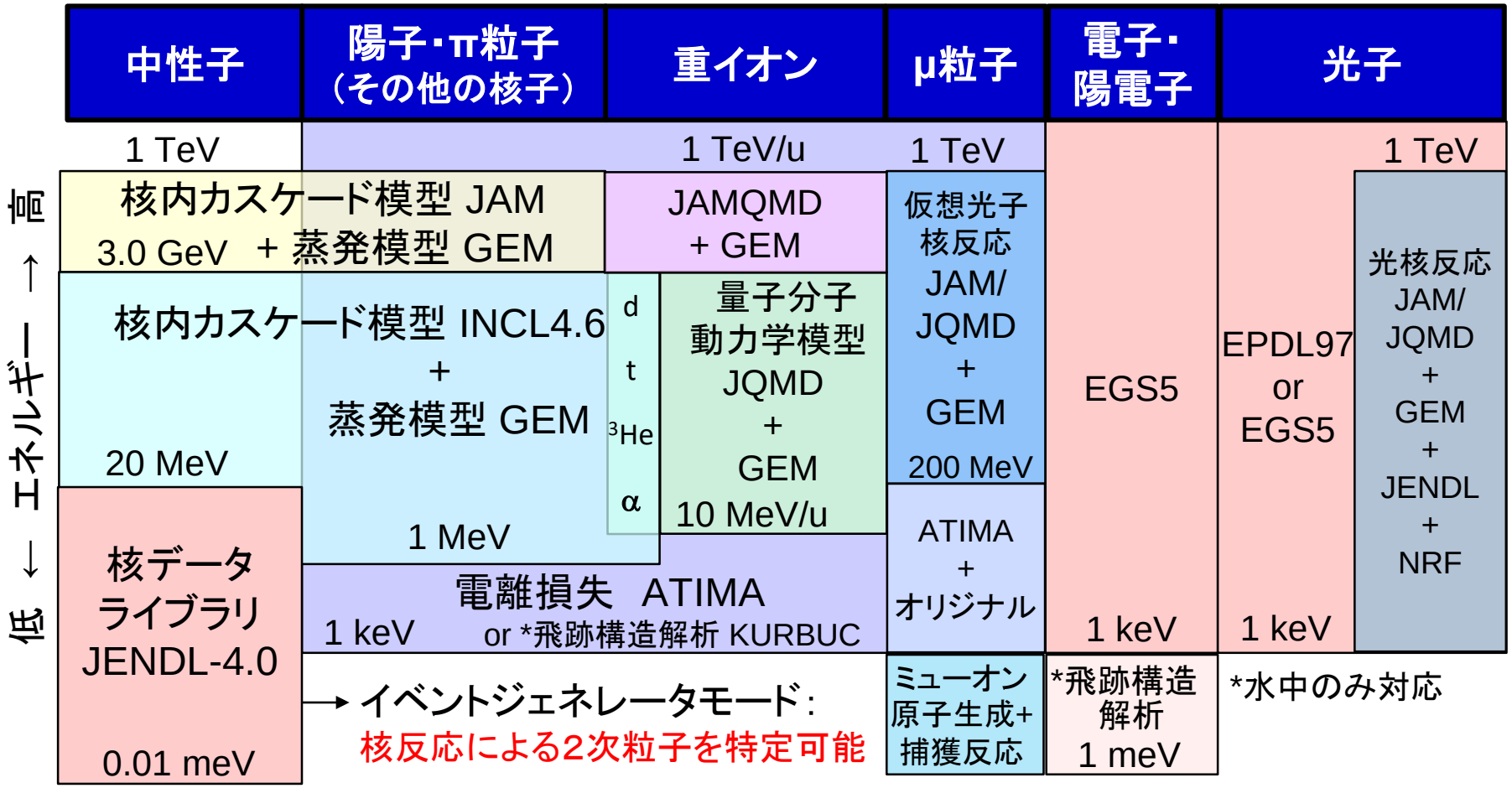


国内*のPHITSユーザー数

国内で約3,600名！！

*PHITS講習会に参加，もしくはRISTを通してPHITSを入手した人数

物理モデル（奨励設定）



PHITS3.20に組み込まれた物理モデルとその適用エネルギー範囲

- ✓ 陽子（E<300MeV）及び炭素イオン（E<10MeV/n）に対する飛跡構造解析を追加
- ✓ （書かれてはいないが）光子によるミューオン生成モデルを追加

最近の改良点①：PHITS3.17

2019年10月から配布開始

PHITS3.10からの主な変更点（担当者）

- ✓ 飛跡構造解析モードとユーザー定義タリーを組み合わせたDNA損傷推定モデルの開発（松谷）
- ✓ 面線源（s-type=26）の導入（仁井田）*
- ✓ 統計誤差のバッチ変化を可視化する機能の導入（仁井田）*
- ✓ マルチソース毎にカウンターを設定する機能を追加（佐藤）
- ✓ [t-dchain]で核変換による親核の減少を考慮可能とした（仁井田・松田・佐藤）
- ✓ RI線源機能で光子線源から消滅γ線を除くオプションを導入（松田・佐藤）

*原子力規制庁のサポートにより実施

最近の改良点②：PHITS3.20

2020年4月から配布開始

PHITS3.17からの主な変更点（担当者）

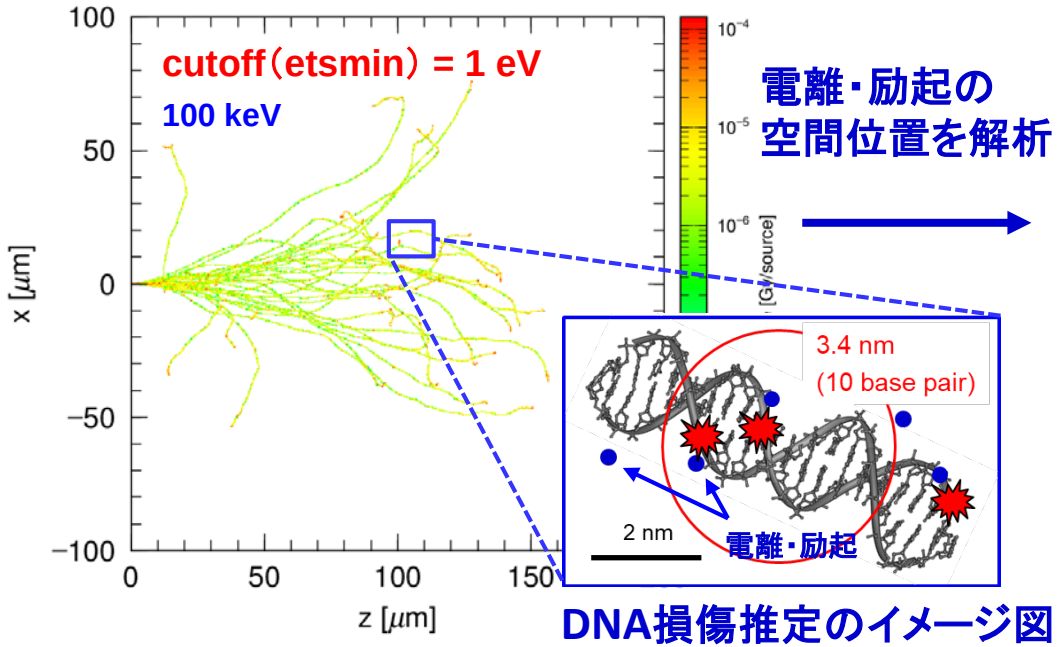
◆阻止能読込機能の導入（佐藤）*1)
◆繰り返し核反応機能[Repeated Collisions]の開発（仁井田）*2)
◆Xorshift64方式に基づく新しい疑似乱数生成法の導入（橋本）
◆陽子及び炭素イオンに対する飛跡構造解析モードの開発（甲斐・松谷）*3)
◆パラメータ自動変更による分散分析機能の開発（橋本）
◆光子によるミューオン対生成反応モデルの実装（安部）*4)
◆DCHAINの高度化とライブラリの拡充（Ratliff・松田）*5)
◆電場マップ読込機能の導入（佐藤）*6)
◆[frag data]に群データで断面積を与える機能を追加（橋本）

*1) （株）ナイスの協力により実施
*2) 原子力機構・核変換システム開発Gr岩元大樹博士の協力により実施
*3) Hooshang Nikjoo教授及びThiansin Liamsuwan博士の協力により実施
*4) 高エネルギー加速器研究機構　坂木泰仁博士の協力により実施
*5) 原子力機構・炉物理標準コード研究Gr今野力研究主幹の協力により実施
*6) （株）アドバンストソフトの協力により実施

DNA損傷推定モデルの開発

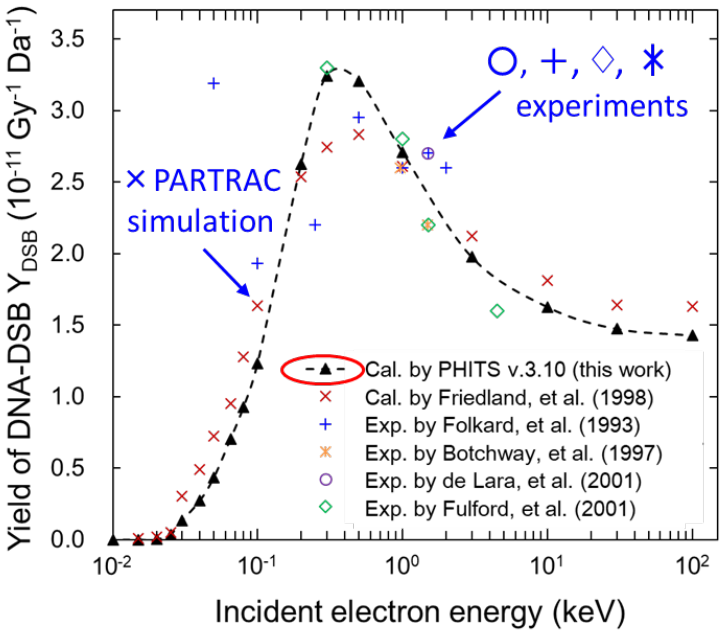
✓ 飛跡構造解析モードとユーザー定義タリーを利用してDNA損傷数を推定
✓ 電離と励起の空間情報を出力し、それを解析して主鎖切断収量を出力
※ 推定可能なDNA損傷の種類: DNA一本鎖切断・DNA二本鎖切断

[etsmodeによる相互作用の出力]



DNA損傷推定のイメージ図

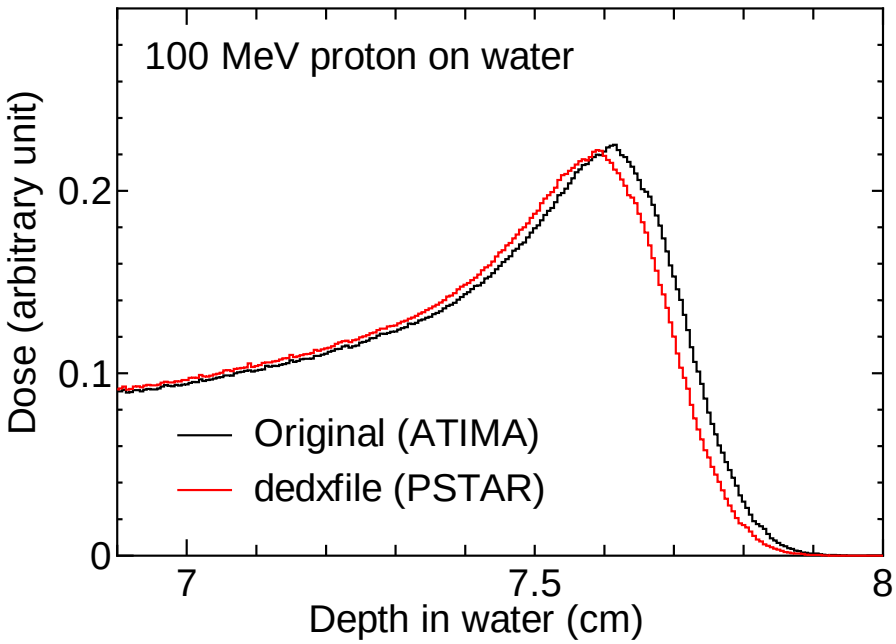
[DNA主鎖切断収率の推定]



シンプルな推定モデルで実験値や他コードの結果をよく再現することが可能

See phits/utility/usrtally/DNAdamage & Y. Matsuya et al., J. App. Phys. 126, 124701 (2019)

阻止能読込機能の開発



従来手法（ATIMA）と外部データ（PSTAR）で計算した100MeV陽子の水中での付与エネルギー深さ分布

（ブラッグピーク付近を拡大）

機能の概要

- ✓ 外部データベースから阻止能を読み込む機能を実装
- ✓ PSTAR及びASTAR*で計算した様々な物質に対する陽子及びα粒子の阻止能データベースをdata/dedxに格納
- ✓ [material]セクションで阻止能データベースのファイル名をdedxfileパラメータで指定

インプットの例

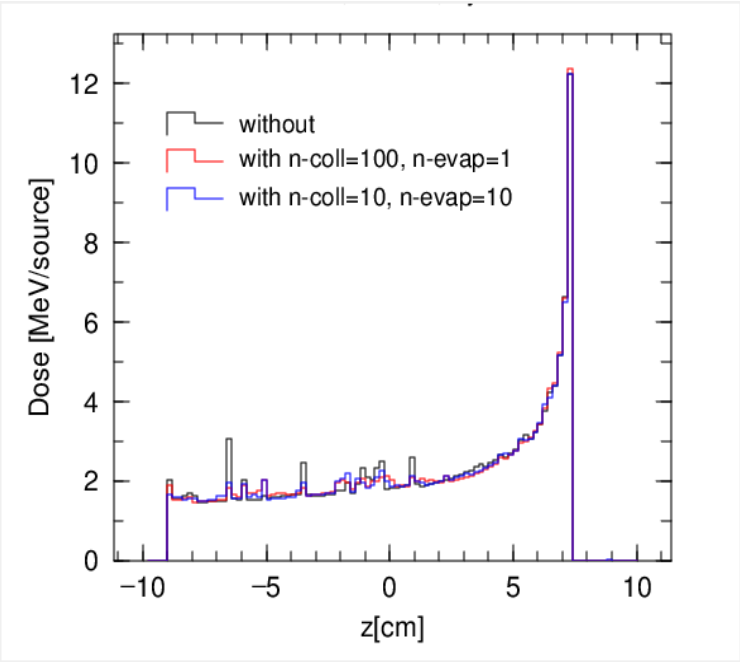
```
[material]
  m1   H  2.0   O  1.0
  dedxfile = water_liquid.txt
```

ICRU90で定義された阻止能などを直接利用することが可能

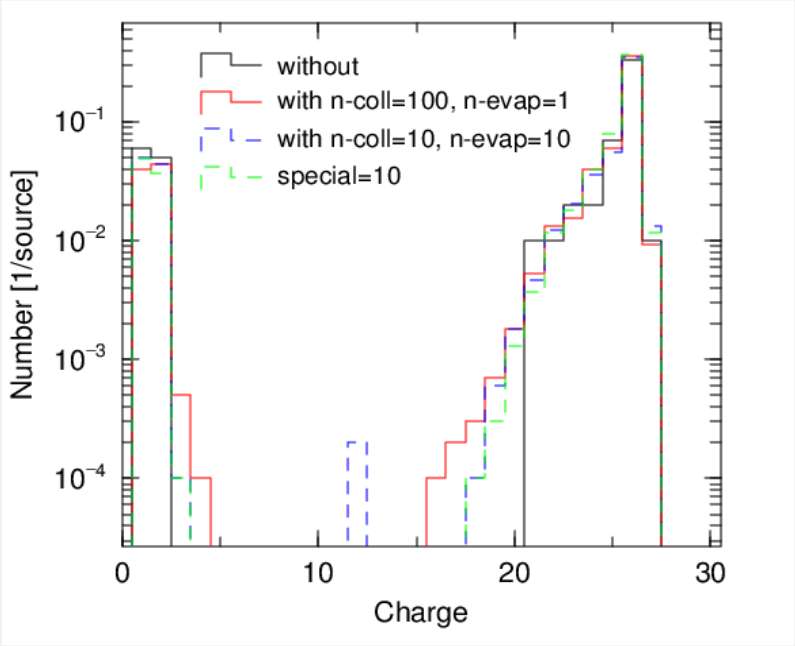
* https://www.nist.gov/pml/stopping-power-range-tables-electrons-protons-and-helium-ions

繰り返し核反応機能[Repeated Collisions]の開発

- ✓ [Repeated Collisions] セクションの導入 → [t-yield]のspecialと同等
- ✓ 核反応が発生した場合、核反応計算のみを繰り返し行うことにより統計を上げる
- ✓ カスケード過程と蒸発過程、それぞれの繰返し回数を指定可能



付与エネルギー計算



核反応生成核種の収率計算

核反応チャンネルに確率は小さいが生成物の影響が大きいチャンネル（核分裂など）があるときに有効

原子力機構・核変換システム開発Gr岩元大樹博士の協力により実施

新しい擬似乱数生成法の導入

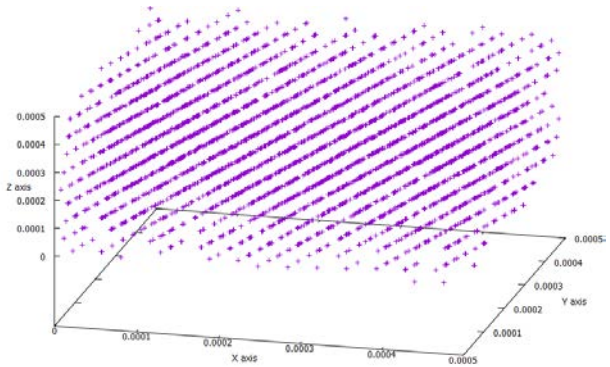
モンテカルロ計算用擬似乱数生成法としてxorshift64を導入

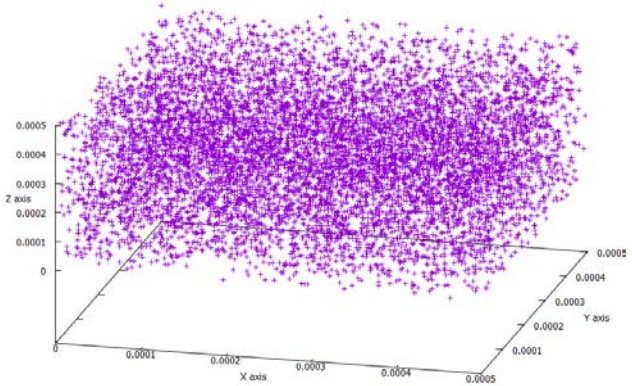
（従来）線形合同法

- 漸化式$X_{n+1}=A*X_n \bmod M$
- 2^{46}周期
- 多次元で規則的に分布（実質的には問題なし）

（新規）xorshift64

- 排他的論理和+ビットシフト
  $X_{n+1}=(I+L_a)(I+R_b)(I+L_c)X_n$
- 2^{64}-1周期
- ビット演算なので高速



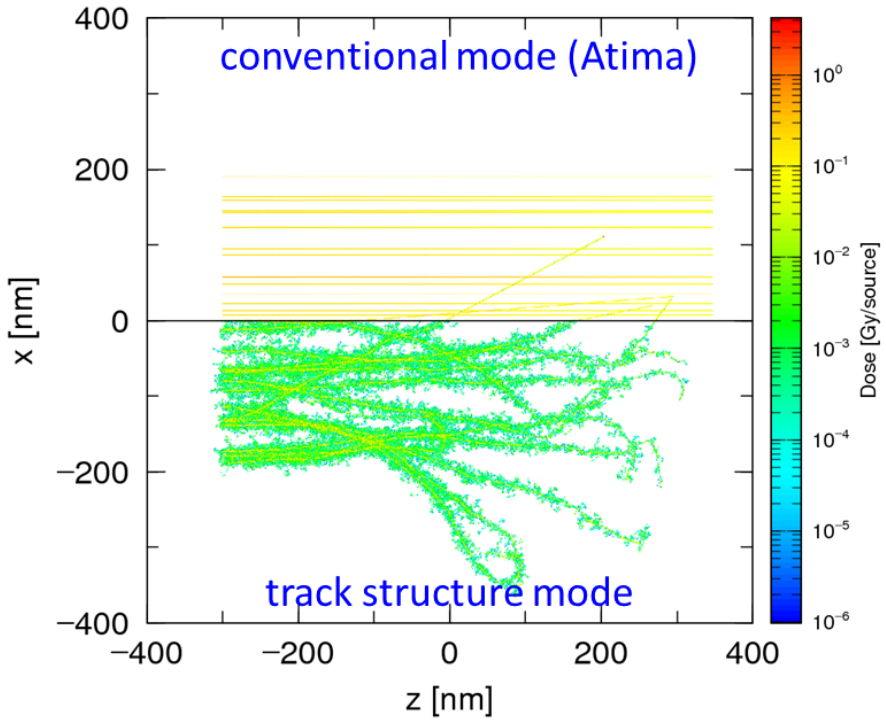


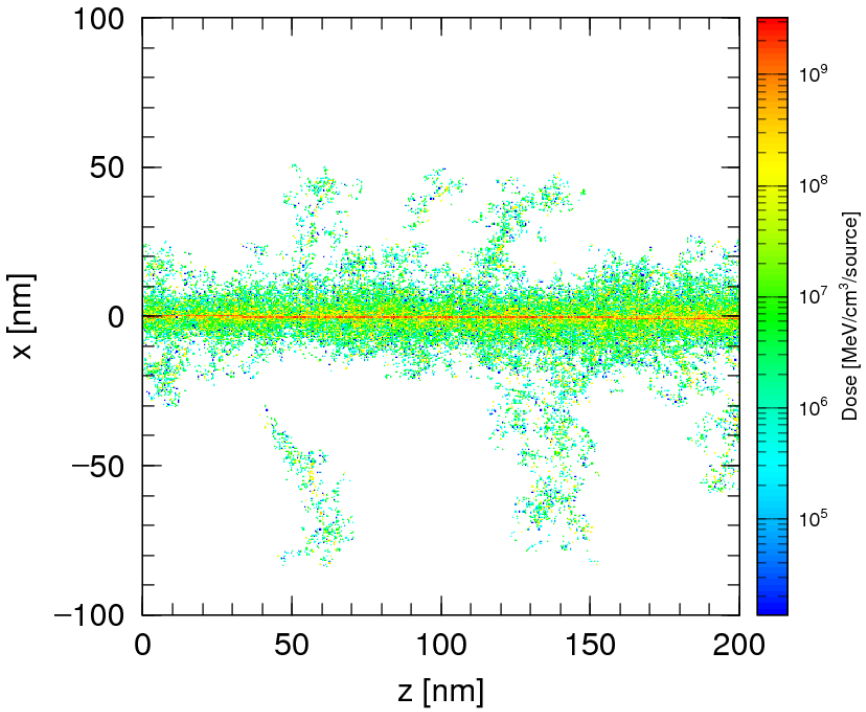
発生する乱数r_iにより$(x,y,z)=(r_1,r_2,r_3),(r_2,r_3,r_4),\ldots$と割り当て、微小区間$[0<x,y,z<10^{-5}]$の粗密度を比較した結果：左図（線形合同法の結果）に規則性

- ✓ xorshift64がデフォルト(3.18以降)。従来法は[parameters]でnrandgen=0。
- ✓ 初期乱数を変更する場合は rseed=正or負の実数。
- ✓ 開始時間に依存した初期乱数を使用する場合はitimrand=1。

陽子及び炭素イオンに対する飛跡構造解析モード

飛跡構造解析コードKURBUCを導入





従来手法（上）と飛跡構造解析モード（下）で計算した30keV陽子の飛跡

1MeV/n炭素イオンの飛跡

- ✓ tsmaxパラメータを定義することにより起動
- ✓ 水中の陽子（E < 300 MeV）及び炭素イオン（E < 10 MeV/n）のみ対応
- ✓ 著作権の関係上、ソースコードは非公開 →コンパイル時に注意が必要

Hooshang Nikjoo教授及びThiansin Liamsuwan博士の協力により実施

パラメータ自動変更による分散分析機能の開発

分散分析に基づいた系統的不確かさ評価機能の導入

PHITSの入力情報の誤差が計算結果に与える影響を評価できる。

$$u_{\mathrm{tot}}^2 = u_{\mathrm{syst}}^2 + \underbrace{\frac{1}{N} u_{\mathrm{stat}}^2}_{\text{統計誤差}}$$

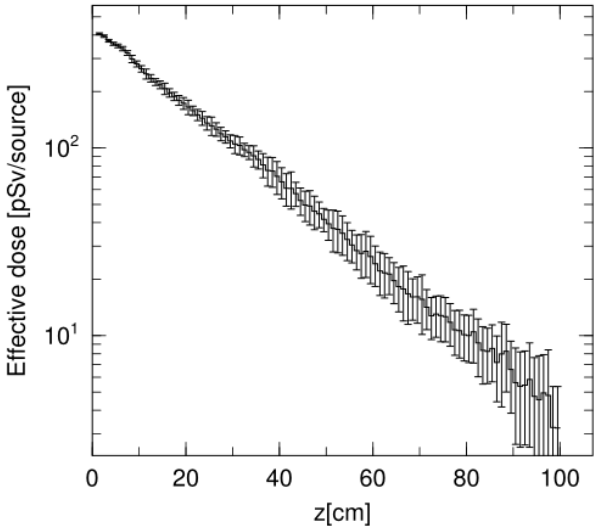
全不確かさ

系統的不確かさ

1. 誤差をもつ入力情報をユーザー定義定数ciで指定したインプットを用意(icntl=16)
2. ciの変化量を指定したスクリプト用インプットを用意
3. スクリプトautorunの実行により、分析結果用タリーファイルに全不確かさ、系統的不確かさ、統計誤差をアウトプット

例：コンクリート中の水の密度に誤差が含まれる場合
→[cell]において水の密度をc1で指定

100 MeV 中性子 ➡ コンクリート+水



コンクリートにおける実効線量の深さ分布（誤差棒：全不確かさ）

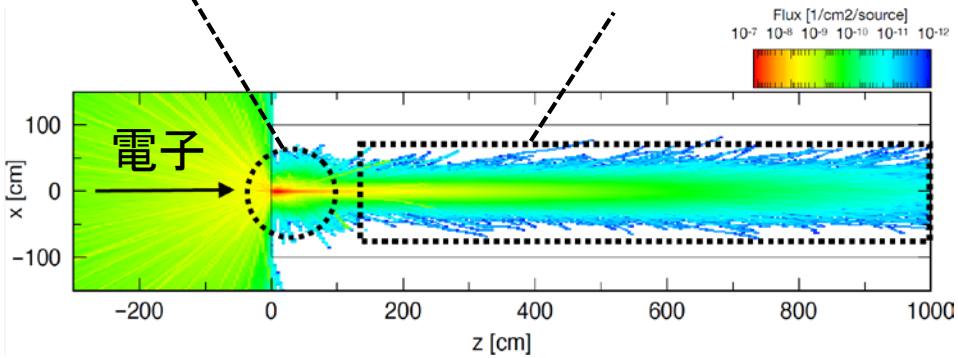
phits/utility/autorun; S. Hashimoto and T. Sato, J. Nucl. Sci. Technol. 56, 345 (2019)

光子によるミューオン対生成モデルの実装

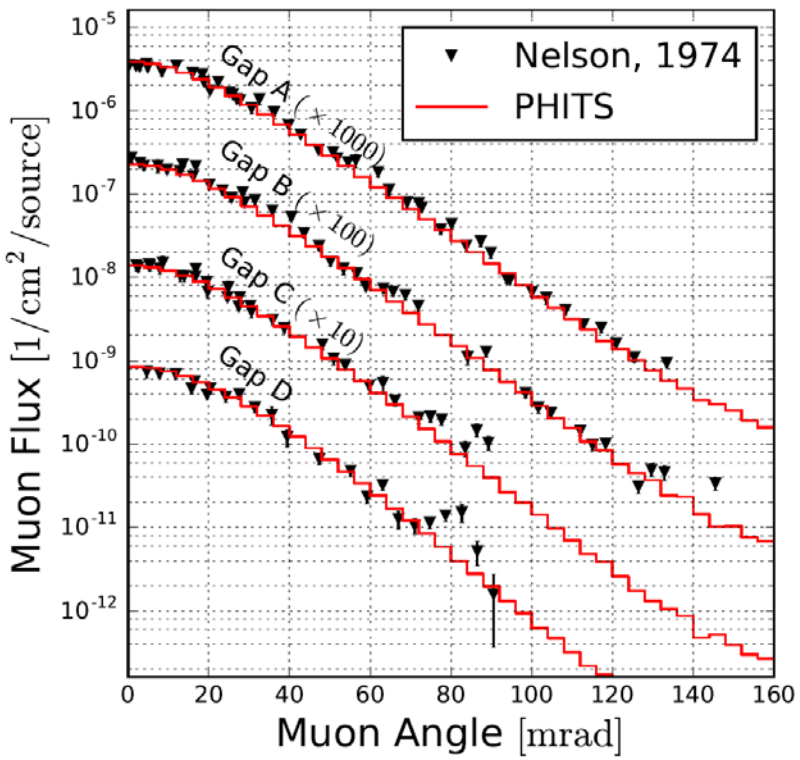
- ✓ [Parameters]セクションで igmuppd=1 とするとオン（デフォルトではオフ）。
- ✓ 遮蔽設計等で必要なターゲット後部のミューオン場が計算可能となった。

二次光子がミューオン対を生成

長区間のミューオン場が形成



鉄円柱セルへの18GeV電子照射によるミューオンフラックスの空間分布



18GeV電子ビームダンプ＋鉄遮蔽後部におけるミューオン角度分布

Ref.) W. R. Nelson et al., Nucl. Instr. Meth., **120**, 413 (1974).

ミューオンの生成数・角度分布ともに精度よく実験データを再現

高エネルギー研究開発機構（KEK） 坂木泰仁博士の協力により実施

DCHAINの高度化とライブラリ拡充

PHITS接続計算専用誘導放射能計算コード：DCHAIN-PHITS

- ✓ 様々な中性子放射化ライブラリや核崩壊データライブラリを追加
- ✓ PHITS計算の統計誤差を伝播した誘導放射能計算の誤差評価が可能
- ✓ 核反応による親核減少効果を考慮する機能を追加→ ver3.20よりデフォルト化

ライブラリの拡充

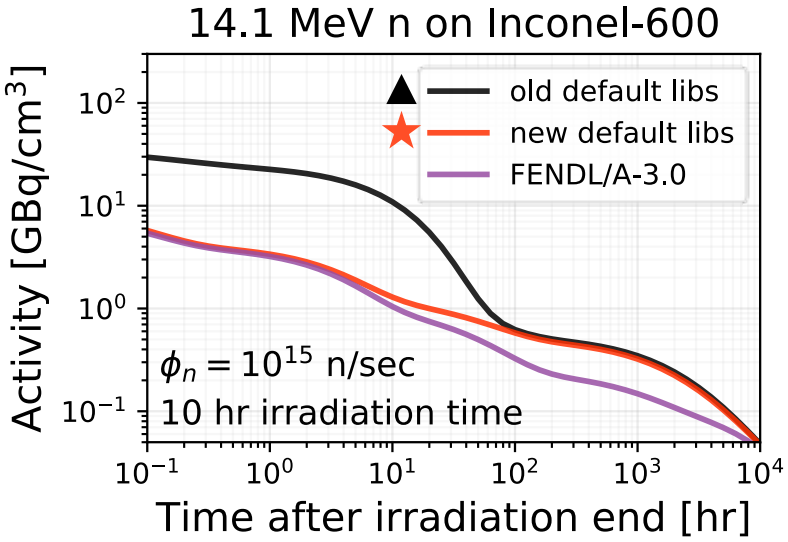
（JAEA・今野研究主幹の協力により実施）

▲	JEFF-3.1A	(2007)
★	JENDL/AD-2017	
★	JENDL-4.0	(2010)
★	ENDF/B-VIII.0	(2018)
	ENDF/B-VII.1	(2011)
★	JEFF-3.3	(2017)
★	FENDL/A-3.0	(2012)
	EAF-2010	
	BROND-3.1	(2016)
	CENDL-3.1	(2009)
	TENDL-2017	

← 中性子放射化ライブラリ

↓ 核崩壊データライブラリ

▲	1990年代に評価した独自の複合ライブラリ
	JENDL/DDF-2015
	ENDF/B-VIII.0 (2016)
★	JENDL + ENDF + '90s
	ENDF + JENDL + '90s



新旧ライブラリの比較

- ✓ 放射化ライブラリ指定パラメータ **inxslib** (+ **hnxslib**)
- ✓ 核崩壊データライブラリ指定パラメータ **idcylib**

バグ修正・仕様変更点①：PHITS3.17

2019年10月から配布開始

PHITS3.10からの主な仕様変更･バグ修正

◆電子･陽電子のLattice構造及び連続四面体構造中での不具合を修正
（上記不具合はversion 3.08 ～ 3.14で限定的に発生）

◆電子･陽電子の付与エネルギーを[t-deposit]で計算した場合の不具合を修正
（上記不具合はversion 3.13 ～ 3.16で限定的に発生）

◆π･μ･イオンの初期カットオフエネルギーを1MeVから1keVに変更

◆マルチソースの最大許容数を200から500に変更

◆水中での阻止能計算のためのイオン化ポテンシャル読込機能の修正

◆統計誤差打ち切り機能(stdcut)がMPI並列で動作しない不具合を修正

◆連続四面体体系がMPI並列で動作しない不具合を修正

バグ修正・仕様変更点②：PHITS3.20

2020年4月から配布開始

PHITS3.17からの主な仕様変更･バグ修正

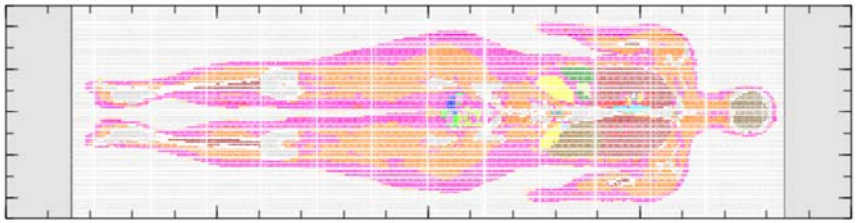
◆ATIMAへの入力エネルギー単位がMeV/uではなくMeV/nだった不具合を修正

◆Maxwellian分布を持つ線源（e-type=3 & 7)のスペクトル形状を修正

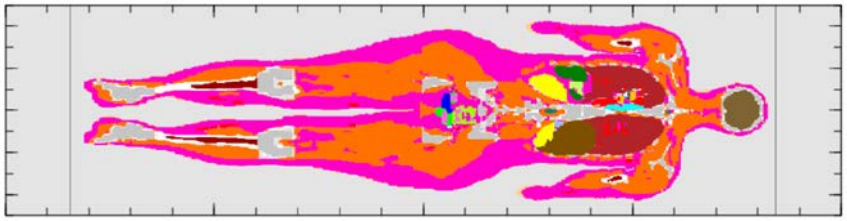
◆Latticeや連続四面体形状をgshowできれいに描画できるよう修正*

◆陽子の初期カットオフエネルギーを1MeVから1keVに変更

改良前後のPHITSで描画したICRP標準人体ボクセルファントム



PHITS 3.17



PHITS 3.20

*（株）ナイスの協力により実施

今後の予定

◆核データ親和性の向上

- ✓ JENDL-4.0/HE対応核種の拡充
- ✓ 最新形式の核データライブラリへの適応

◆新たな計算機能の追加

- ✓ 飛跡構造解析モードの拡張（イオン・ターゲット）
- ✓ DCHAINのxyzメッシュ対応、系統誤差出力機能

◆ユーザー支援機能の拡充

- ✓ 入力ファイル作成を支援する専用エディタの開発

◆計算精度の向上

- ✓ 最新の蒸発モデル・核分裂モデルの導入・改良