

# PHITS ver.3.34の概要

PHITS開発チーム一同

2024/04

## 最近の更新履歴

2023年04月：PHITS 3.31をRISTに登録

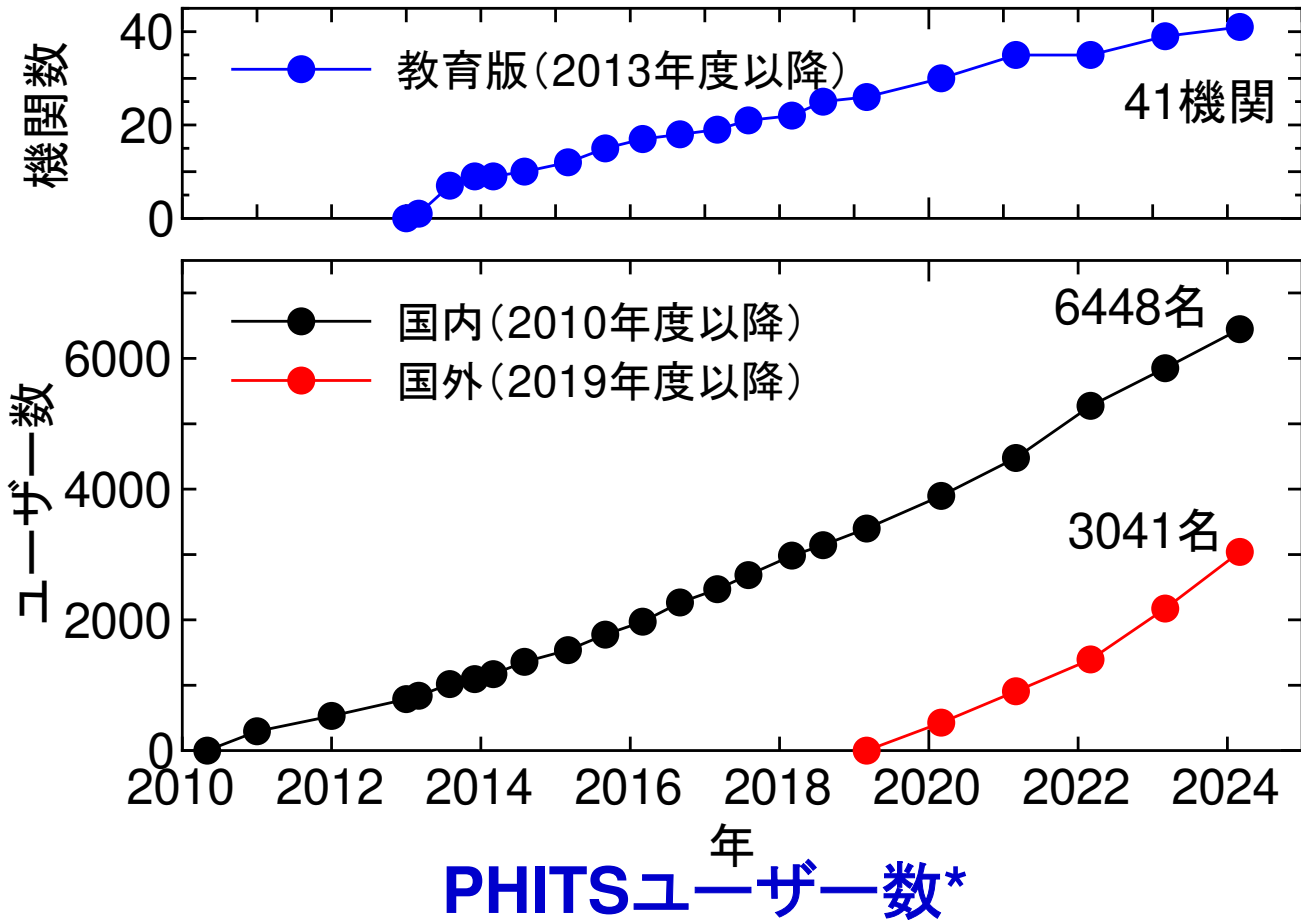
2023年09月：OECD/NEAデータベースにPHITS 3.33に登録

2023年12月：PHITS公式引用文献を更新\*

2024年04月：PHITS 3.34をRIST、OECD/NEA DBに登録

\*T. Sato et al., Recent improvements of the Particle and Heavy Ion Transport code System - PHITS version 3.33, J. Nucl. Sci. Technol. 61, 127-135 (2024)

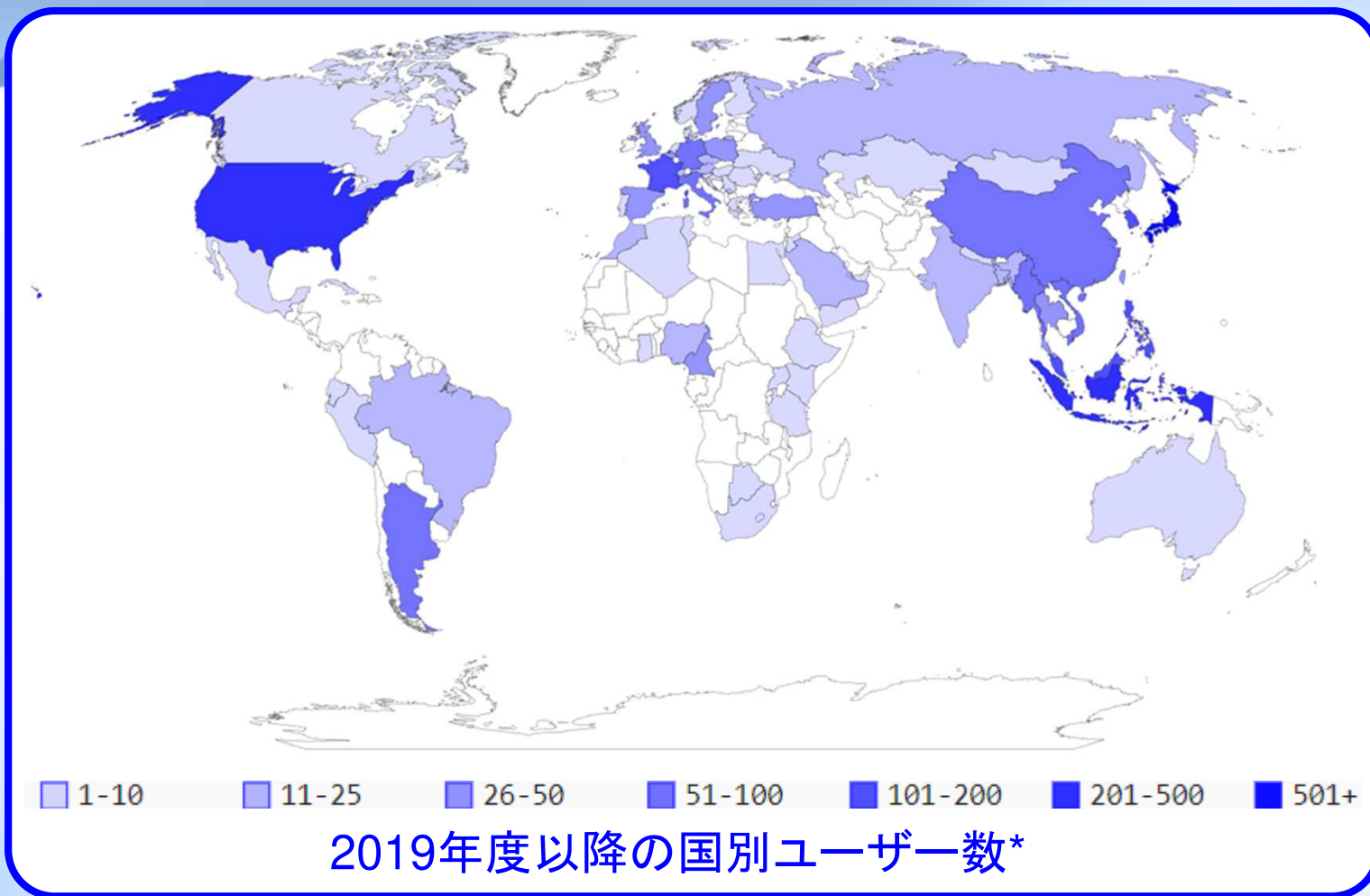
# PHITSユーザー数の変化



9,000名突破！！

\*国内:PHITS講習会に参加,もしくはRISTを通してPHITSを入手した人数  
国外:2019年度以降に原子力機構より直接入手した人数

# 国別ユーザー数（2019年度以降）



\*2024年3月04日時点、所属機関の国でカウント

5年間で76ヶ国から5,890名が新規ユーザー登録！

[https://phits.jaea.go.jp/usermap/PHITS\\_map\\_userbase.html](https://phits.jaea.go.jp/usermap/PHITS_map_userbase.html)

## Top 10 countries

Country	#users
Japan	2873
Indonesia	410
United States	333
South Korea	249
Philippines	211
China	165
France	148
Argentina	129
Spain	114
Malaysia	113

# PHITSに組み込まれた物理モデル（奨励設定）

	中性子	陽子	原子核	$\mu$ 粒子	電子	光子	
	1 TeV		1 TeV/n	1 TeV		1 TeV	
エネルギー ↑ ↓ 低	JAM + GEM 3.0 GeV		JAMQMD + GEM	JAM/ JQMD + GEM	EGS5, ETS or ETSART	EPDL97 or EGS5	JAM/ JQMD + GEM
	INCL4.6 + GEM 200 MeV		t <sup>3</sup> He $\alpha$ JQMD + GEM	200 MeV			JENDL + NRF
	20 MeV		d 10 MeV/n	ATIMA + Original Model	1 keV	1 keV	
	JENDL-4 or JENDL-5 0.01 meV		1 MeV	1 keV	1 keV	1 keV	
			ATIMA or KURBUC / ITSART		*JQMD + GEM	ETS or ETSART 1 meV	
		*負ミューオンのみ(捕獲反応)					

赤: 原子核反応モデルもしくはライブラリ

青: 原子反応モデルもしくはライブラリ

灰色でハイライトしたモデルやライブラリは、初期設定では利用されない

JENDL-5が利用できる場合はその利用を奨励するように変更(ただしデフォルトでは限定核種のみ)

# 最近の改良点①

## PHITS3.31からの主な変更点(担当者)

- ✓ 拡張された統計指標出力機能の開発(橋本)
- ✓ 飛跡構造解析結果から化学反応を模擬するコード(PHITS-Chem)の開発(松谷)
- ✓ 任意物質に対する電子飛跡構造解析モードETSARTの導入(平田)
- ✓ [weight window]と[t-wwg]の改良(佐藤、仁井田)
- ✓ 厚いターゲット及び荷電粒子ライブラリを用いた[forced collisions]の導入(佐藤)<sup>\*1)</sup>
- ✓ 荷電粒子に対するAdjointモードの導入(佐藤)
- ✓ JENDL-5自動ダウンロード・セットアッププログラムの整備(執行、佐藤)<sup>\*2)</sup>
- ✓ PHITS入力ファイル作成専用エディタ(PHITS-Pad)β版の組込(橋本)<sup>\*3)</sup>
- ✓ PHIG-3Dへの4次元(x,y,z,t)飛跡可視化機能の追加(坂木)<sup>\*4)</sup>

1. (一財)RISTの協力により実施
2. アドバンスソフト株式会社の協力により実施
3. 原子力機構・計算科学センターの協力により実施
4. 海上技術安全研究所の大西世紀博士の協力により実施

## 最近の改良点②

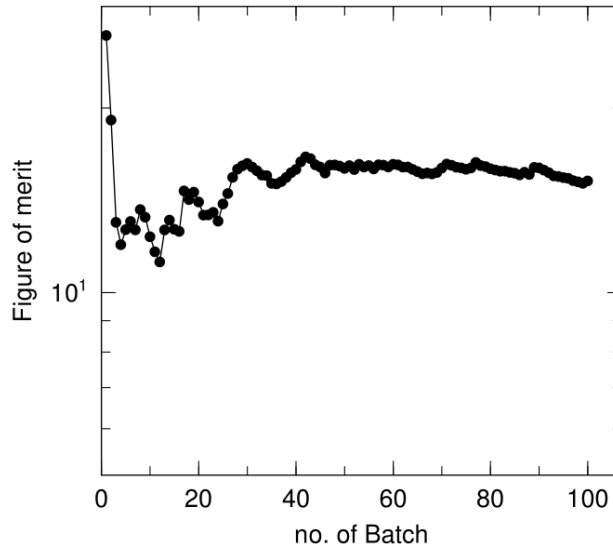
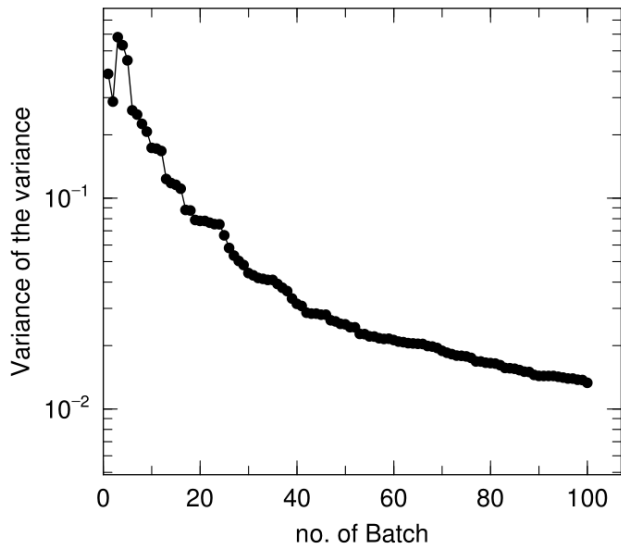
### PHITS3.31からの主な変更点(担当者)

- ✓ 一部核種に対するJENDL-5の組込(JENDL-4.0/HEからの入替)(佐藤)\*1)
- ✓ 各タリーやicntl = 1モードでmultiplierの値を出力する機能の導入(佐藤)\*2)
- ✓ Windows用インストーラの更新(佐藤)\*3)
- ✓ タリー結果の最大値を指定値に規格化するモードの導入(小川)\*4)
- ✓ [t-deposit2]で検出器分解能を考慮する機能の追加(佐藤)
- ✓ meta-stableに対する中性子核データライブラリ読み込み機能の追加(橋本)
- ✓ 任意イオン・物質に対する飛跡構造解析モードITSARTのアルゴリズムを改良(小川)
- ✓ [t-deposit]に[multiplier]で定義したLET任意関数で重みづけする機能を追加(佐藤、平田)
- ✓ [User Defined Interaction]と[User Defined Particle]を導入(坂木)
- ✓ [t-interact]の飛跡構造解析モードにおける反応カテゴリを整理(小川、甲斐、平田、佐藤)

1. 原子力機構・今野力博士、多田健一博士、中山梓介博士、岩本信之博士の協力により実施
2. (一財)RISTの協力により実施
3. アドバンスソフト株式会社の協力により実施
4. 原子力機構・計算科学センターの協力により実施

# 拡張された統計指標出力機能

- ✓ タリー結果に関する新たな統計指標: 分散の分散 (VOV: variance of variance)、性能指数 (FOM: figure of merit)、確率密度分布の出力
- ✓ 統計指標の収束状況を確認する statistical check sheet の出力



## VOV(左)とFOM(右)の全ヒストリー数に対する推移

- 統計誤差のばらつきを表すVOVは $1/N$ で減少
- 時間に対する計算効率を表すFOMは一定値に収束

## Statistical check sheet at batch 100

no. = 1, reg = 11

Quantity	Output	Value	Desired	Pass
Mean	Current value	7.8418E-07	Constant	yes
Mean	History dep. (rel. slope)	-0.0162	= 0.00	
Relative error	Current value	0.0769	< 0.05	no
Relative error	History dep. (p in N <sup>p</sup> )	-0.5053	= -0.50	yes
Variance of the variance	Current value	0.0133	< 0.10	yes
Variance of the variance	History dep. (p in N <sup>p</sup> )	-1.0189	= -1.00	yes
Figure of Merit	Current value	1.5221E+01	Constant	yes
Figure of Merit	History dep. (rel. slope)	-0.0169	= 0.00	

## Statistical check sheet

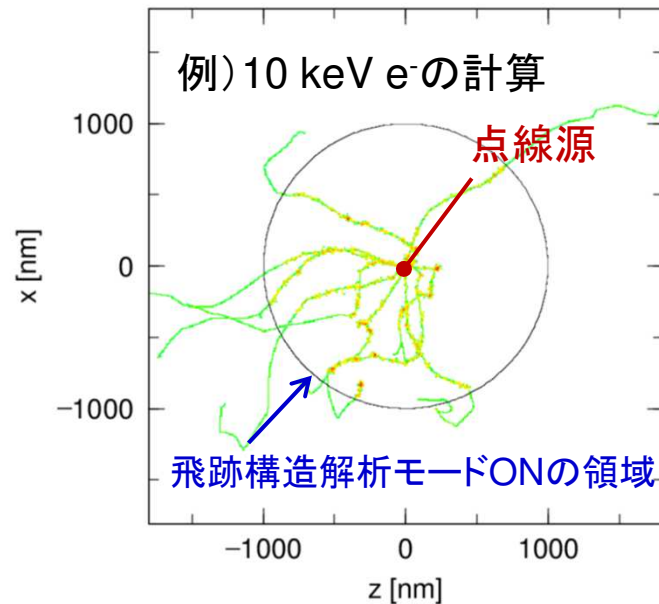


# PHITS専用ケミカルコードの開発

- ✓ 飛跡構造解析モードとユーザー定義タリーを利用して生成されるG値の推定
- ✓ 13種類の化学種の拡散・反応の推定、OHスカベンジャーの考慮も可能
- ※ 化学種の種類:  $\cdot\text{OH}$ ,  $e_{\text{aq}}^-$ ,  $\cdot\text{H}$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{O}_2^-$ ,  $\text{HO}_2^-$ ,  $\cdot\text{O}$ ,  $\text{O}^-$

[飛跡構造解析モード(PHITS-ETS mode)]

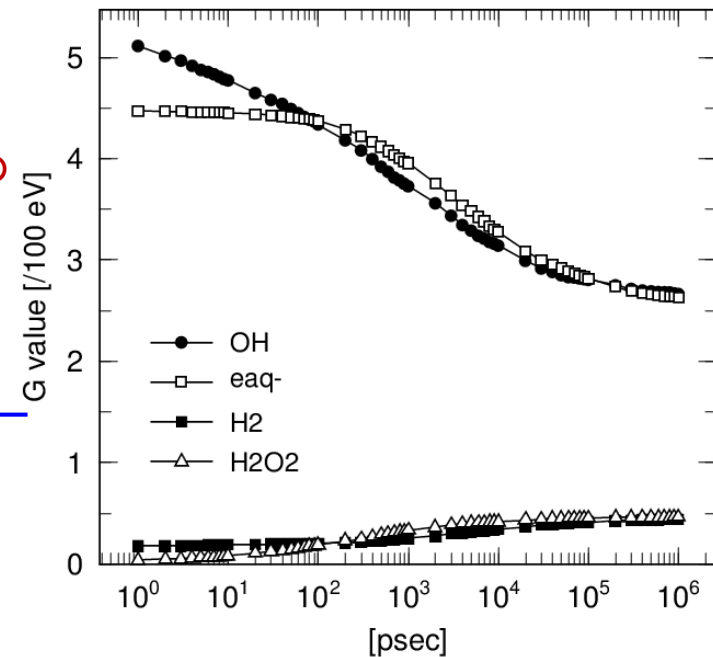
電離・励起等の相互作用を出力



$\text{OH}\cdot$ ,  $e_{\text{aq}}^-$ ,  $\cdot\text{H}$ など  
13種類の化学生成物の  
生成・拡散・反応を考慮

→  
 $\cdot\text{OH}$ スカベンジャー  
(Tris, DMSO)の  
考慮も可能

[ケミカルコード(PHITS-Chem code)]

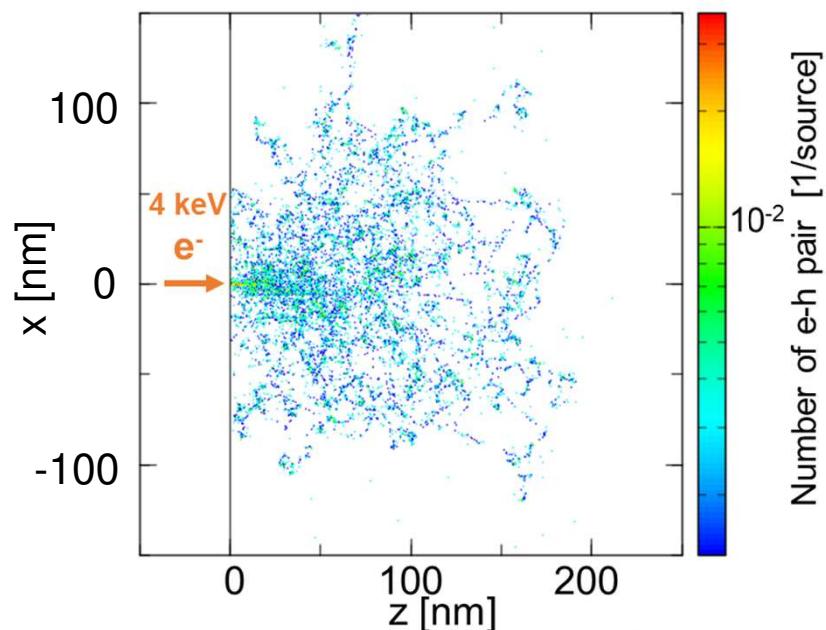


実験値や他コードの結果を再現するPHITS専用化学コードの開発に成功！

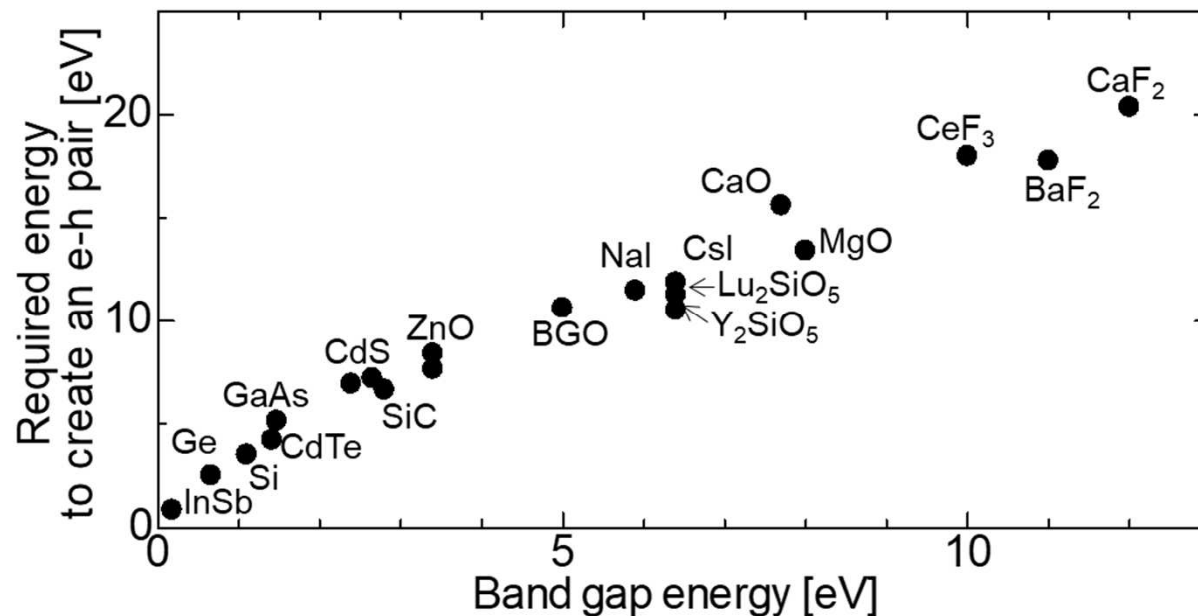
See phits/utility/usrtally/ChemCode & Y. Matsuya et al. *Phys. Med. Biol.* 69, 035005 (2024)

# 任意物質に対する電子線飛跡構造解析モード (ETSART)

- ✓ ETSARTは任意の物質中における電子の挙動を数eV程度の低エネルギーまで追跡する機能 (ver3.34では固体を対象としたモデルのみ実装)
- ✓ バンドギャップをインプットパラメータすることで固体中の電子励起を模擬する



SiO<sub>2</sub>における電子正孔対分布

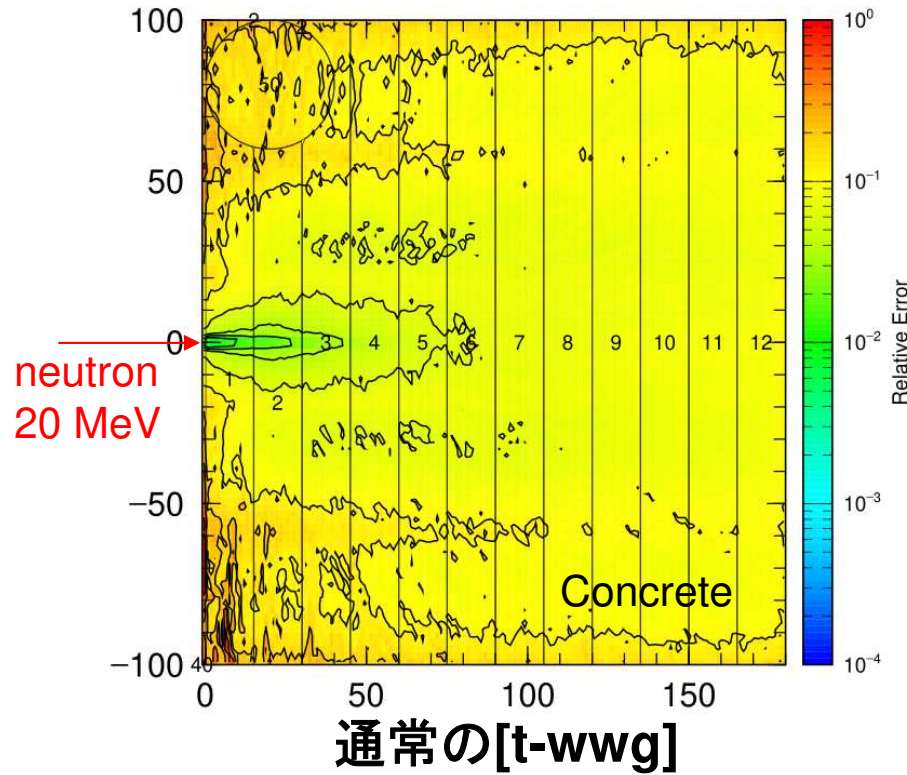


半導体や蛍光体の $\epsilon$ 値

ナノメートルオーダーの電子正孔対の生成分布(左図)や、検出器の応答評価に重要な電子正孔対の生成に必要なエネルギー( $\epsilon$ 値)のシミュレーションが可能(右図)

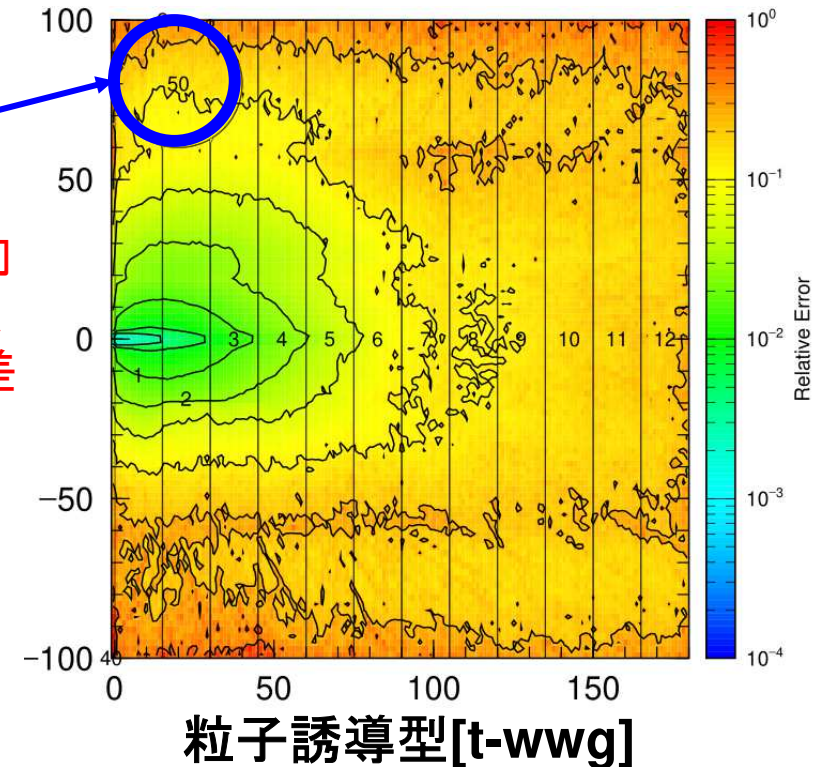
# [weight window]と[t-wwg]の改良

- ✓ ヒストリーカウンターを用いた粒子誘導型[t-wwg]の導入
- ✓ 粒子の無限増殖が発生しないよう分割を抑制するパラメータmaxbnwを導入\*
- ✓ xyzメッシュの最大・最小値が整数で定義されていた場合に自動で微調整する機能を導入



この領域にヒストリー  
カウンターを設定

粒子が誘導され上方向  
の誤差が小さくなるが、  
他の領域では逆に誤差  
が大きくなる

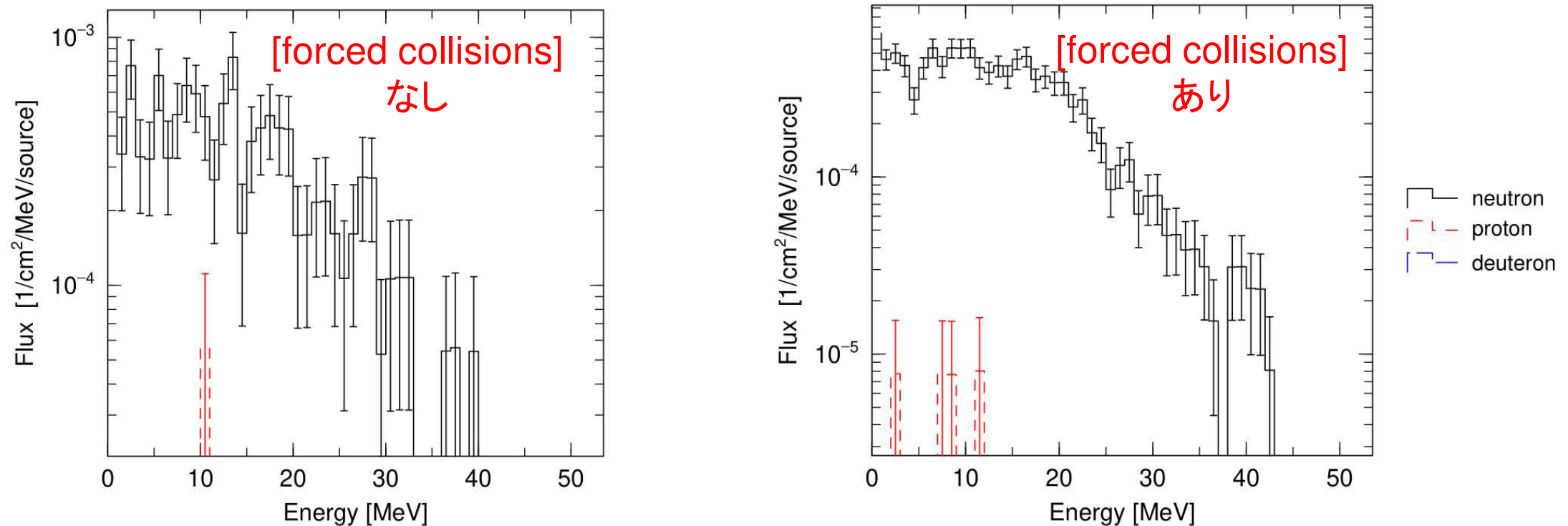


異なる[t-wwg]を使って作成した[weight window]を使って同じ時間で計算した実効線量の相対誤差

# 厚いターゲットに対する荷電粒子の[forced collisions]

- ✓ ターゲットを50等分\*し、分割した各領域での核反応発生頻度をあらかじめ計算
- ✓ その確率に従って反応ポイントを決め、核データもしくは核反応モデルを使って反応を再現

\*分割数は[parameters]セクションで定義するnfcsegにより変更可能

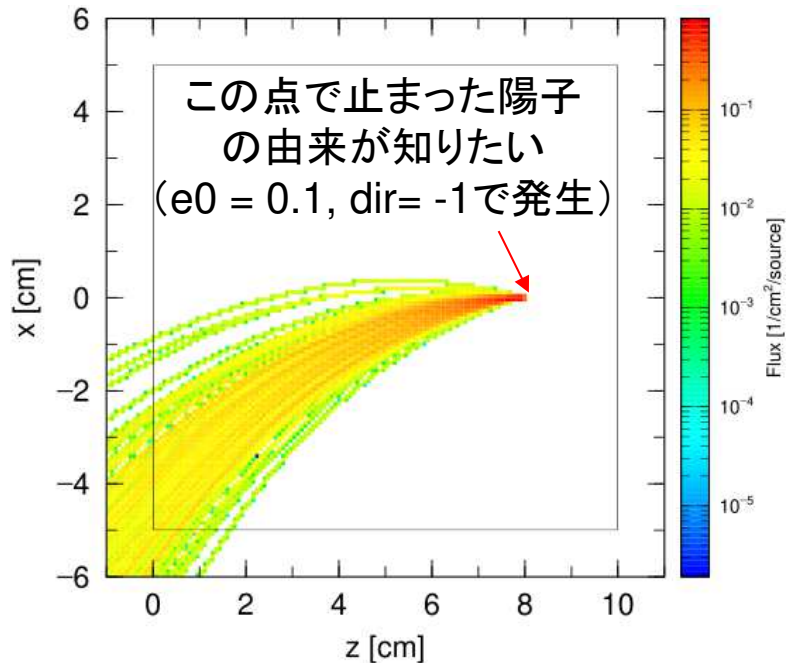


20MeV/nの重陽子をフルストップBeターゲット(0.9cm)に照射したときの放出粒子フルエンス  
phits/recommendation/neutronsources参照

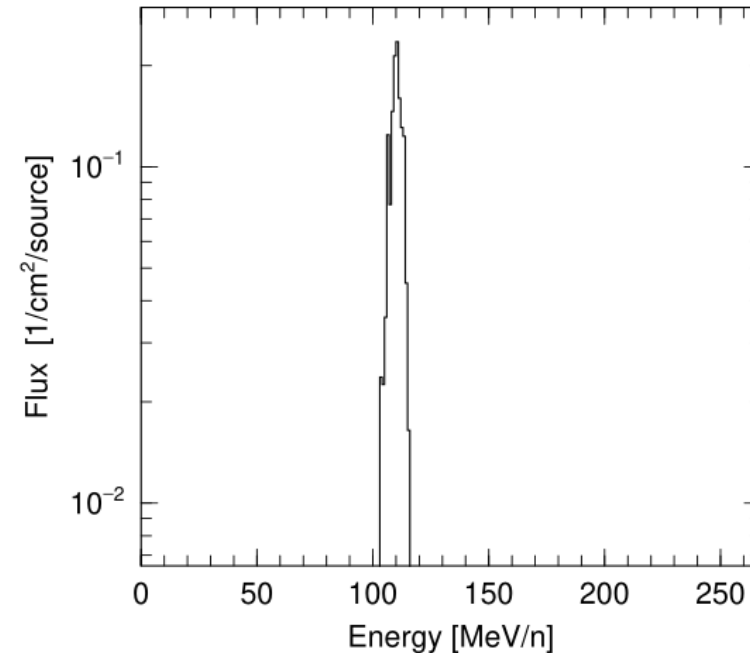
# 荷電粒子に対するAdjointモードの導入

## Adjointモードとは？

- 時間反転させた粒子輸送計算
- タリーしたい場所から線源を発生させてAdjointモードで輸送すると、その粒子の由来が分かる
- 従来は光子に対してのみ適用可能だったが荷電粒子にも対応させた
- ただし、阻止能と磁場の影響のみ考慮し、核反応は考慮しない

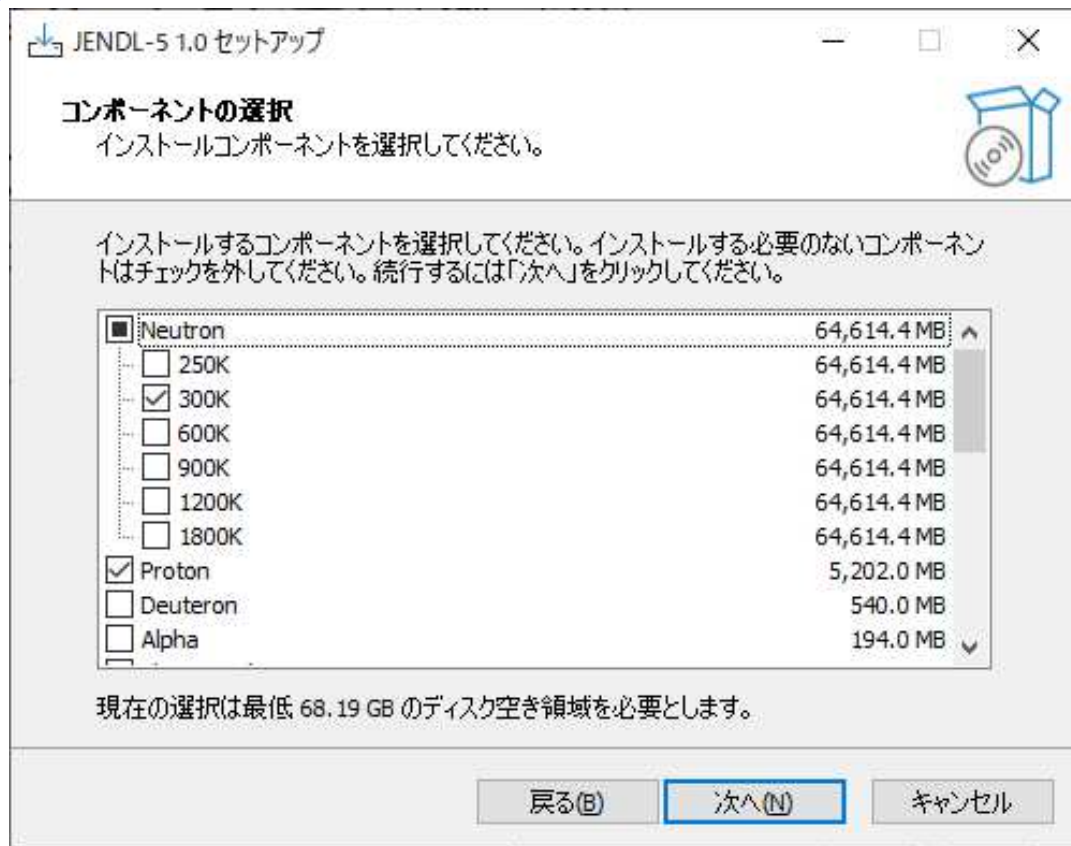


磁場の掛かった水中での陽子逆飛跡



水中の外に出るときの陽子エネルギー分布

# JENDL-5自動ダウンロード・セットアッププログラムの整備



ライブラリ選択画面 (Windows用)

## セットアップ手順

1. インストールしたいライブラリ\*を選択
2. 選択したライブラリを自動でダウンロードして展開
3. ダウンロードしたフォルダ内にあるアドレスファイル(xmdir)情報をPHITS用アドレスファイル(通常はdata/xmdir.jnd)に追加\*\*
4. 物質の天然元素展開機能をJENDL-5準拠にする

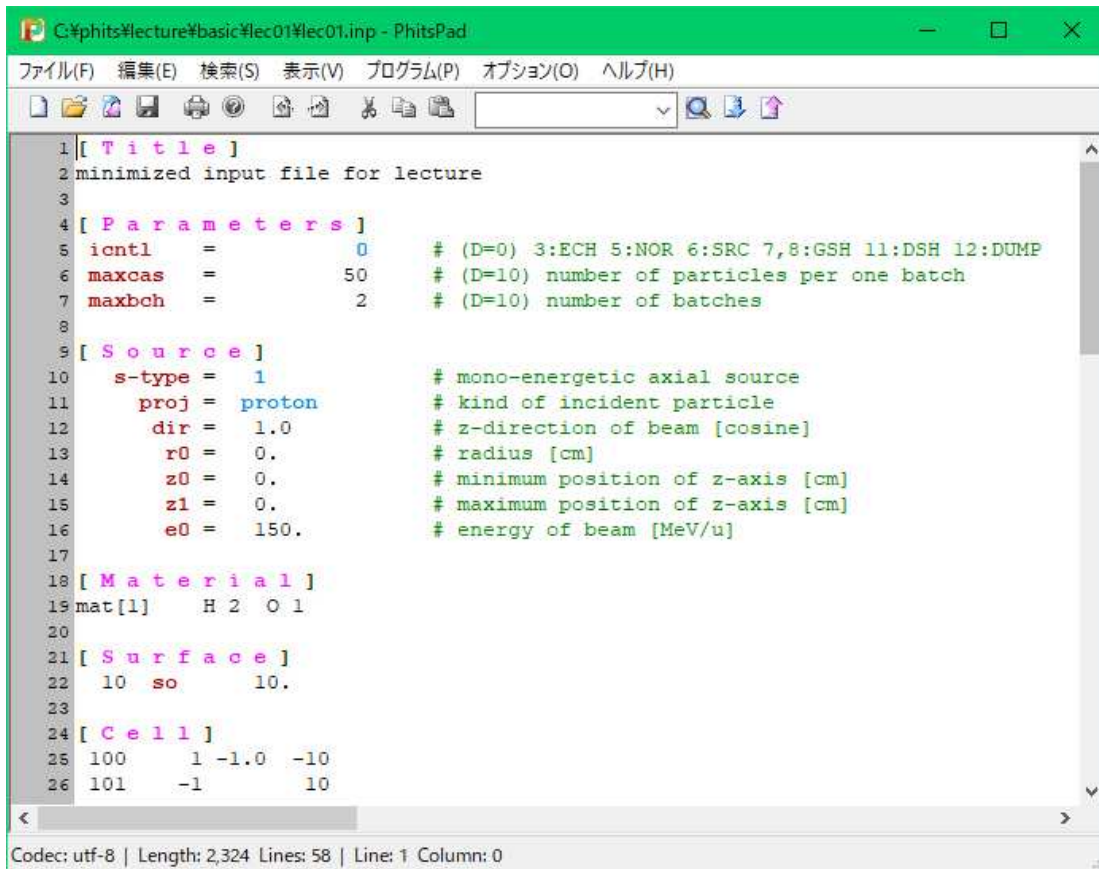
\*中性子(温度別)、陽子、重陽子、 $\alpha$ 粒子、光原子、光核反応、熱中性子散乱則(物質別)が選択可能

\*\*最後にダウンロードしたライブラリが優先して使われるようになるので、温度別中性子ライブラリを選択した場合は注意が必要

プログラムは、phits/XSフォルダ格納

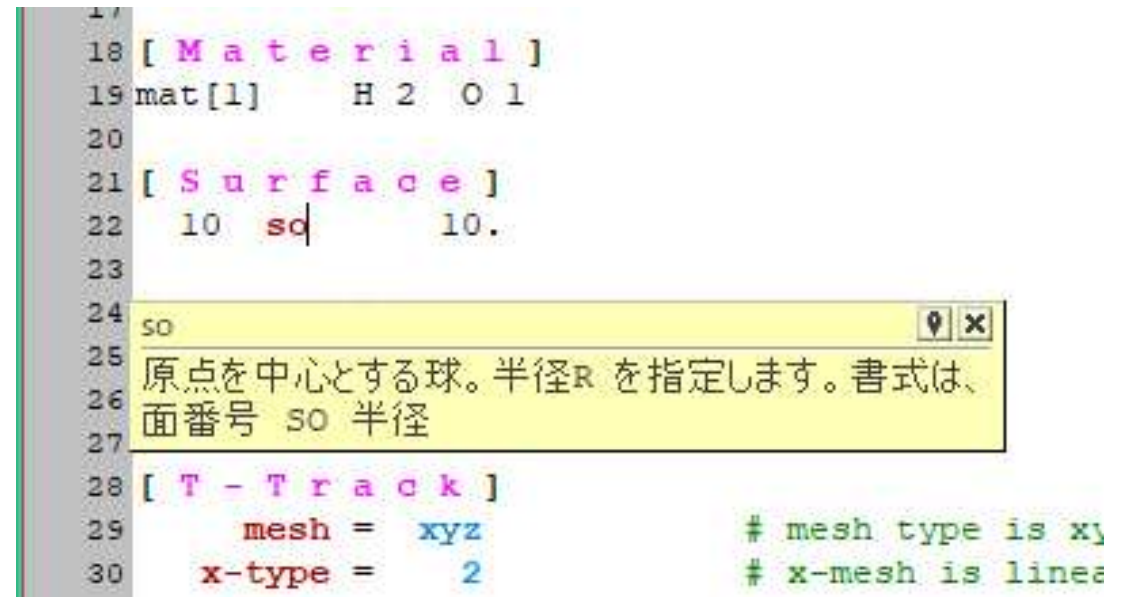
# PHITS用テキストエディタPHITS-Pad

- ✓ PHITS固有のパラメータや入力値を色で強調表示
- ✓ 入力ファイルの作成をサポートするヒント表示機能



```
C:\phits\lecture\basic\lec01\lec01.inp - PhitsPad
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) プログラム(P) オプション(O) ヘルプ(H)
1 [ Title ]
2 minimized input file for lecture
3
4 [ Parameters ]
5 icntl = 0 # (D=0) 3:ECH 5:NOR 6:SRC 7,8:GSH 11:DSH 12:DUMP
6 maxcas = 50 # (D=10) number of particles per one batch
7 maxbch = 2 # (D=10) number of batches
8
9 [ Source ]
10 s-type = 1 # mono-energetic axial source
11 proj = proton # kind of incident particle
12 dir = 1.0 # z-direction of beam [cosine]
13 r0 = 0. # radius [cm]
14 z0 = 0. # minimum position of z-axis [cm]
15 z1 = 0. # maximum position of z-axis [cm]
16 e0 = 150. # energy of beam [MeV/u]
17
18 [ Material ]
19 mat[1] H 2 O 1
20
21 [ Surface ]
22 10 so 10.
23
24 [ Cell ]
25 100 1 -1.0 -10
26 101 -1 10
```

PHITS-Padウィンドウ



```
18 [ Material ]
19 mat[1] H 2 O 1
20
21 [ Surface ]
22 10 so 10.
23
24 so
25 原点を中心とする球。半径R を指定します。書式は、
26 面番号 SO 半径
27
28 [ T - Track ]
29 mesh = xyz # mesh type is xyz
30 x-type = 2 # x-mesh is linear
```

ヒントの表示

(ウィンドウはドラッグで移動可能)

詳細は [phits/phitspad/manual](https://phits.jp/phitspad/manual) 参照

# PHIG-3Dを用いた4次元(x,y,z,t)粒子飛跡の描画

1. [ t-4Dtrack ] セクションで粒子の飛跡ファイルを生成
2. 飛跡ファイルを PHIG-3D で描画。静止画と動画を作成可能

PHIG-3D の飛跡表示画面  
(出力ファイルを読み込む)

飛跡の色や線幅を指定

陽子ビーム

フレーム数の指定  
静止画・動画の出力

- 陽子
- 中性子
- 光子
- 生成核種 etc.

セクションの記入例  
[t-4Dtrack]  
file = track.out

**So Simple!!**



# 今後の予定

## ◆飛跡構造解析モードの拡張

- ✓ 個別対応元素の拡充(生命・検出器・半導体材料など)
- ✓ 物質生命科学とのカップリングモジュールの改良

## ◆核データ親和性の向上

- ✓ JENDL-5.0を用いた吸収線量計算、イベントジェネレータの開発

## ◆ユーザー支援機能の拡充

- ✓ PHITS-Padの改良(ヘルプ・入力補助機能の拡充)
- ✓ RT-PHITSの改良

## ◆計算精度の向上

- ✓ JQMD ver. 2.0の高速化と高精度化
- ✓ 包括的V&Vと統計・系統誤差評価方法の拡張