

PHITS開発の現状と今後の予定

佐藤 達彦（原子力機構）
on behalf of
PHITS開発チーム

発表内容

- 旧versionからの改良点
- δ 線生成とマイクロジメトリ機能
- 今後の開発予定
 - まとめ

PHITS2.24Lから2.30Lへの改良点

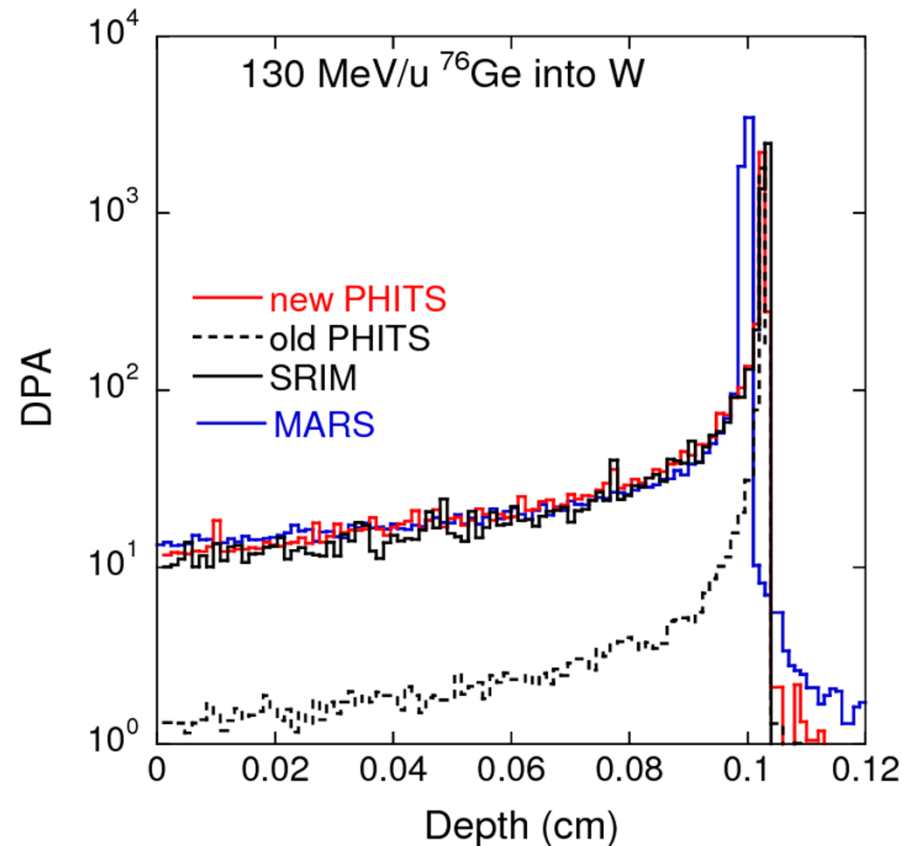
- DPA (Displacement Per Atom)計算方法の改良
- Multiplierセクションの追加
- 光子-原子相互作用データライブラリの整備
- 奨励設定ファイルの整備
- ノックアウト電子(δ 線)生成機能の追加
- 並列計算用Dumpモードの整備
- Mac用binaryの作成
- Fortran90対応(gfortranなど)
- マニュアルの改訂
- バグ修正

DPA計算方法の改良

DPAは放射線照射による材料損傷の指標

従来:核反応による損傷のみ考慮

改良後:クーロン散乱による損傷も考慮



重イオン照射に対するDPA計算精度が向上

詳細は次の
岩元さん発表

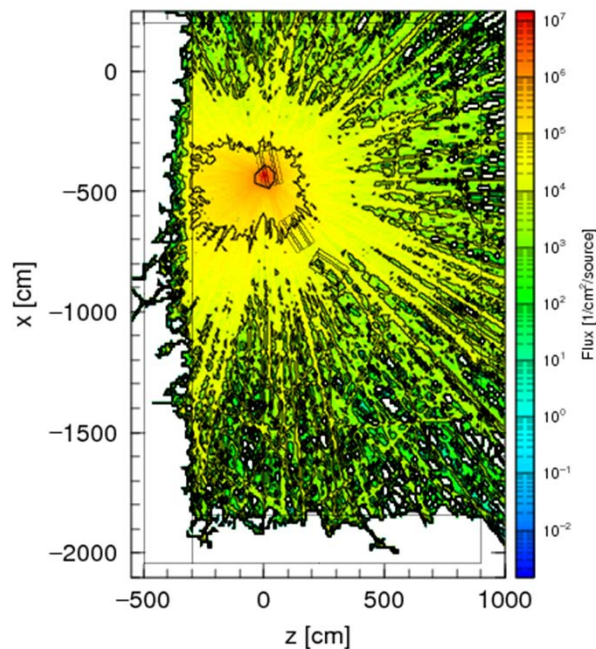
Multiplierセクションの追加

Multiplier機能とは？

[T-Track]の結果を特定の関数(線量換算係数など)で重み付けして出力する機能

従来: 内蔵関数(線量換算係数, カーマファクターなど)のみ

2.30L: [Multiplier]セクションで定義する任意の関数



Multiplier機能を使って
計算した被ばく線量分布

Multiplierセクションを使えば...

- 中性子・光子以外の被ばく線量を直接計算できる
- 自分の検出器の応答(計数率)を直接計算できる
- 特殊なカーマファクター(骨の応答関数)などを考慮することができる

光子-原子相互作用データライブラリの整備

ライブラリの作成

基礎データ

The Livermore Evaluated Photon Data Library (EPDL97)

ENDF-6 format

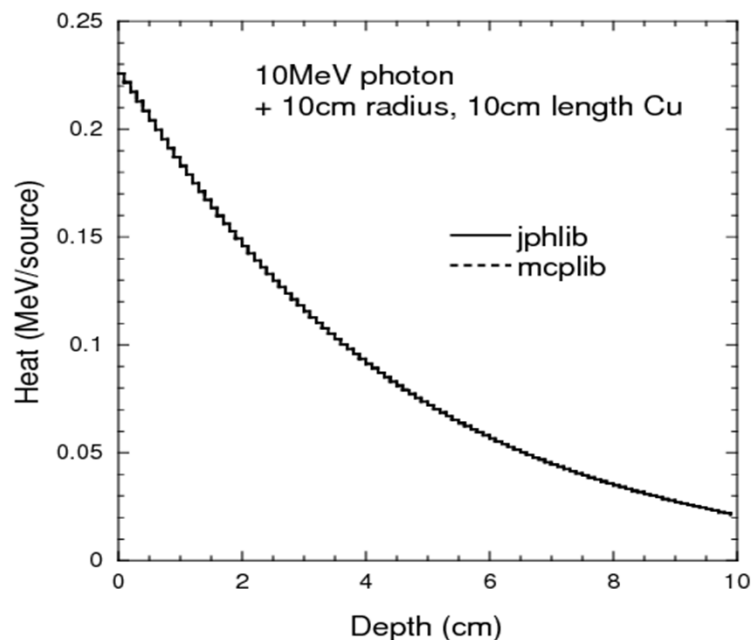
JENDL-4.0

ENDF/B-VI

ACE format

jphlib01

mcplib04



jphlib01とmcplib04を使って計算した10MeV光子のHeat深さ分布

奨励設定ファイルの整備

目的

「PHITSの結果は選ぶオプションによって大きく変わるが、自分の計算に最適なオプションが分からない」という疑問を解決するため

- 検出器応答関数計算 (DetectorResponse.inp)
イベント毎の付与エネルギー確率分布をイベントジェネレータモードを用いて解析
- 遮へい計算 (Shielding.inp)
中性子・光子のみを輸送して、被ばく線量を[T-track]とMultiplierを用いて計算
- 粒子線治療線量評価 (ParticleTherapy.inp)
線量や線量当量, LETやy分布の評価など生物学的効果を考慮するための計算
- 光子線治療線量評価 (PhotonTherapy.inp)
中性子・光子のみ輸送して, カーマ近似より吸収線量を計算
- 半導体ソフトウェア発生率評価 (SemiConductor.inp)
微小空間における付与エネルギー確率分布を, δ 線生成を考慮して計算
- 原子核反応断面積計算 (NuclearReaction.inp)
リング状検出器を用いて二重微分断面積を計算
- SimpleGEO読み込み計算 (SimpleGEO.inp)
幾何形状作成可視化ソフトウェアSimpleGEOとのデータやりとりのサンプル

発表内容

- 旧versionからの改良点
- **δ線生成とマイクロジメトリ機能**
- 今後の開発予定
 - まとめ

MCシミュレーションによるエネルギー付与計算手法

放射線照射による細胞致死率や半導体ソフトウェア発生率の評価には、ミクロな領域におけるエネルギー付与の空間分布・確率密度分布が重要

Track Structure Simulation (PHITSでは不可)

荷電粒子が引き起こす電離・励起をイベント毎に解析。計算時間膨大(10^6 倍)
空間分解能*: 約1nm

Condensed History Method (電子の輸送計算)

いくつかの電離・励起をまとめて1つのイベントとして解析
空間分解能*: 約 $2\mu\text{m}$

Continuous Slowing Down Approximation (荷電粒子の輸送計算)

阻止能を使って飛程から付与エネルギーを計算
空間分解能*: 約 $10\mu\text{m}$ **δ 線によるエネルギー付与の空間的分散に起因**

Kerma Approximation (EGモードを使わない中性子・光子の輸送計算)

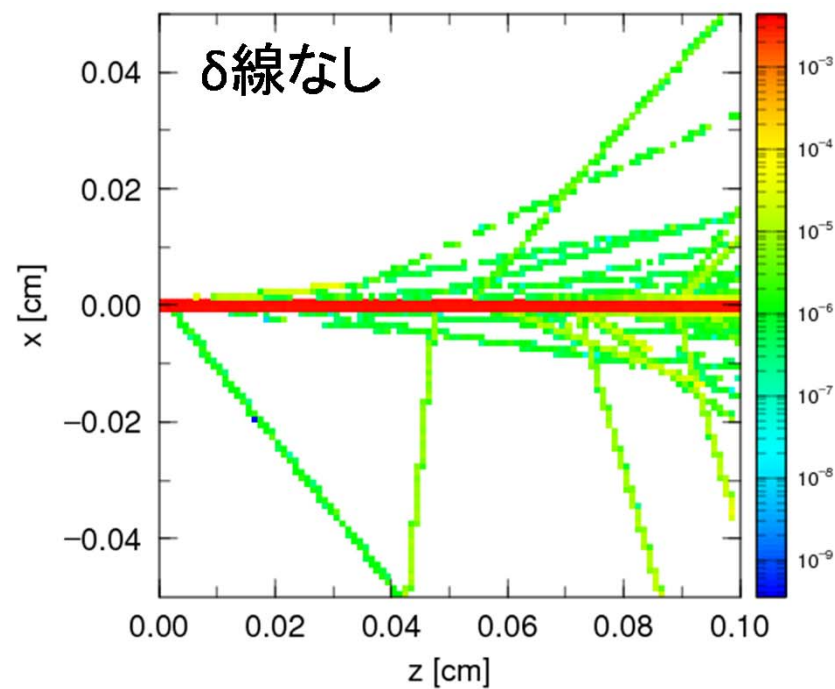
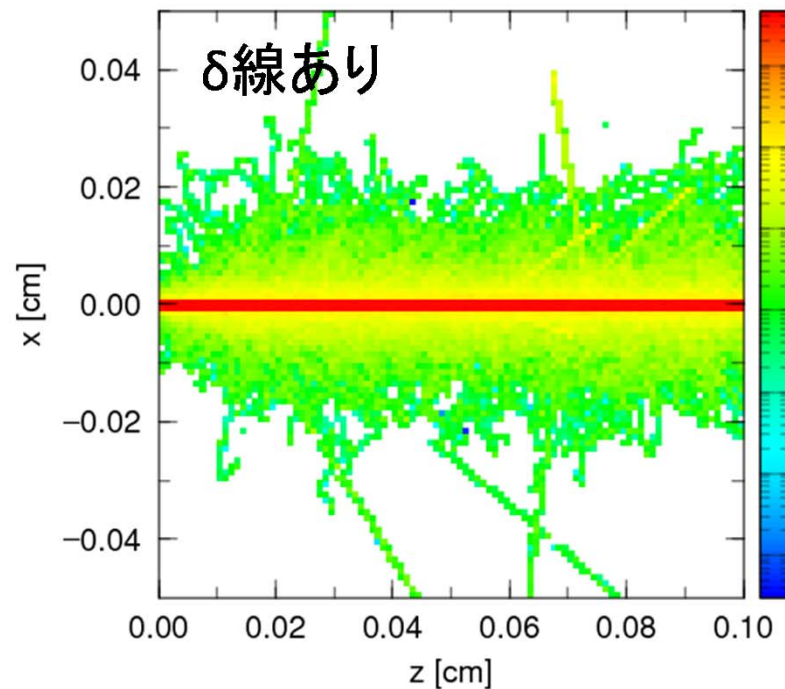
カーマ近似を使って中性子や光子の飛程から付与エネルギーを計算
空間分解能*: 約0.1mm以上

δ線生成機能の追加

δ線とは？

荷電粒子が飛跡に沿ってノックアウトする比較的高いエネルギーの電子
低エネルギー電子ほど数が多く、最大エネルギーは荷電粒子の1/500程度

領域毎にしきい値を決め、それ以上のエネルギーを持つδ線のみPHITSで輸送させる

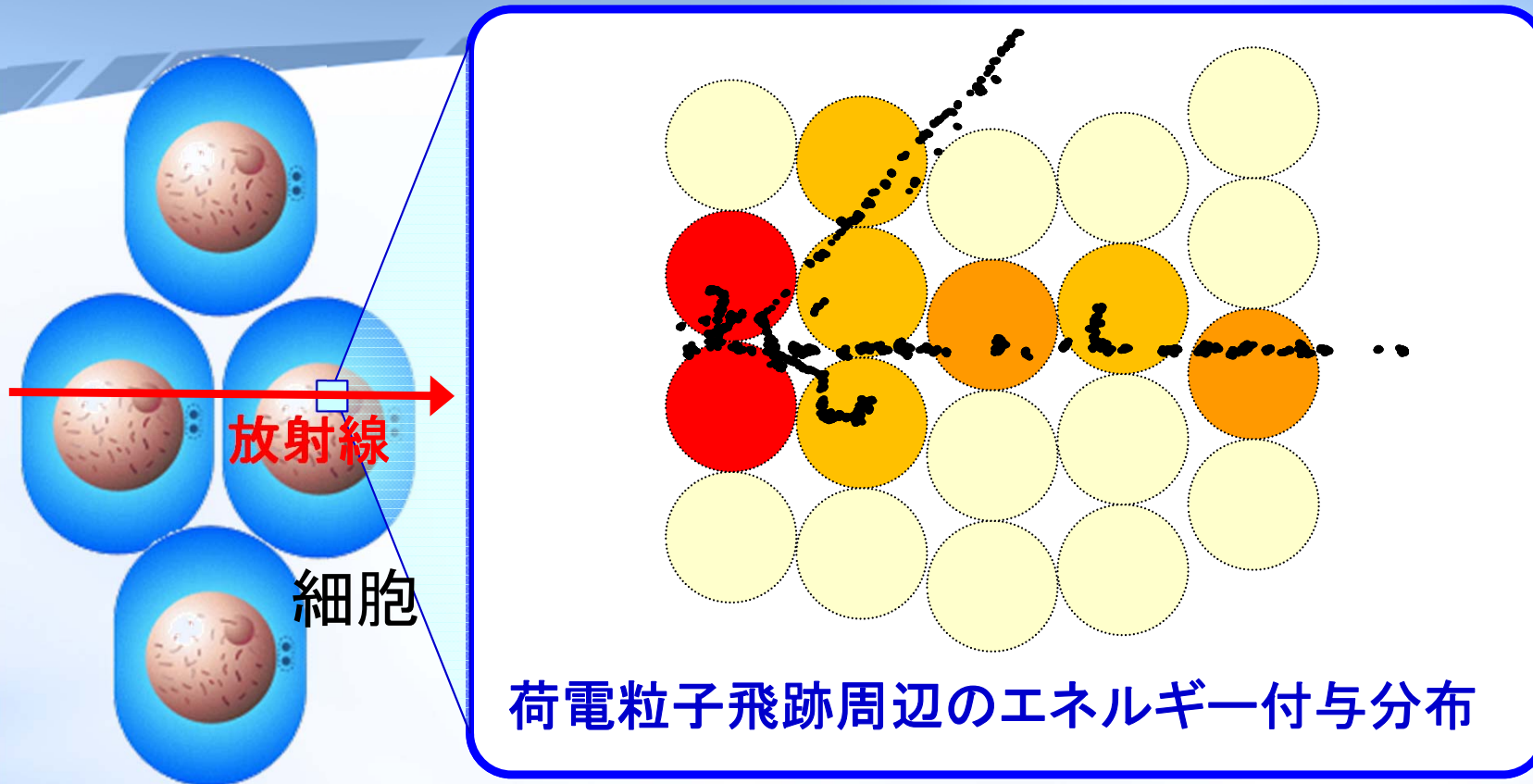


立方体の水中 (1mm^3) に 100MeV 陽子が入射したときのエネルギー付与分布

CSDA近似を使いながら空間分解能約 $2\mu\text{m}$ を達成！

応用例：津田さん

空間分解能の更なる向上



- DNA損傷や細胞致死率は、 $1\mu\text{m}$ より小さいターゲット内での付与エネルギーが重要
- ターゲットが小さくなると付与エネルギーの確率密度分布の分散が大きくなる
→ 平均値だけでは議論できない！
- DNAや細胞は似たような構造の繰り返しなので、位置情報まで特定する必要はない

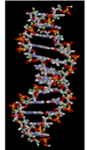
巨視的な領域における微視的な付与エネルギーの確率密度分布さえ計算できれば良い

[T-SED]タリーの導入

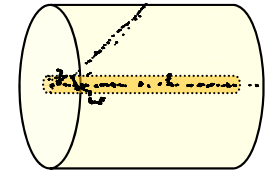
Tally for Specific Energy Distribution [T- SED]

微視的な領域における付与エネルギー-Specific Energy* (通称z) もしくは Lineal Energy** (通称y) の確率密度分布を, Track Structure Simulationを介することなく短時間で計算するPHITSオリジナルのタリー

導入方法



① Track Structure Simulation code TRACEL***を用いていくつかの荷電粒子飛跡周辺のy分布を計算

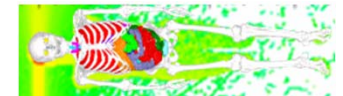


必要な情報だけ抽出

② 全ての荷電粒子飛跡周辺のy分布を, その電荷, 質量, エネルギー, LETから計算可能な数学モデルを構築

計算時間短縮(1/10⁶)

③ PHITSを用いて人体内のy分布を短時間で計算可能

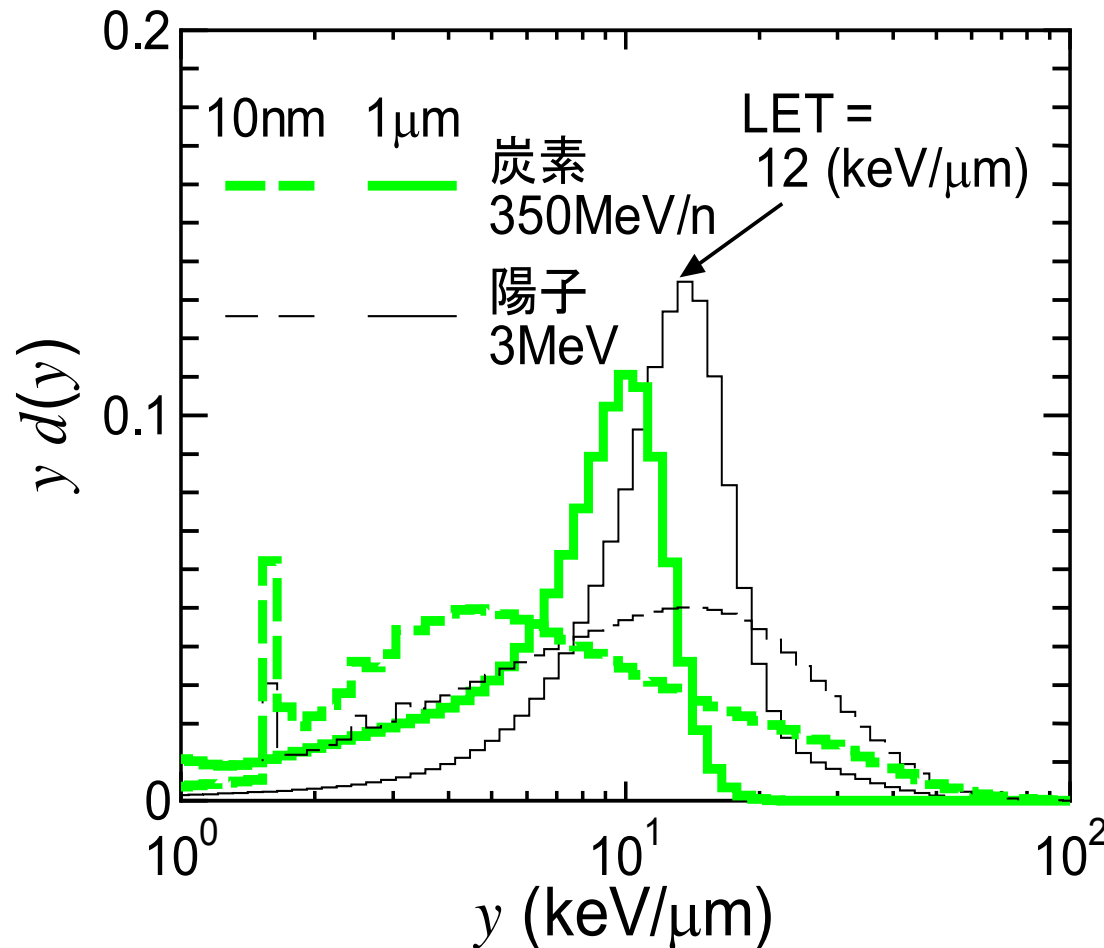


* $z \text{ (Gy)} = \varepsilon / m$

** $y \text{ (keV}/\mu\text{m)} = \varepsilon / l$

***Courtesy of Dr. R. Watanabe, JAEA

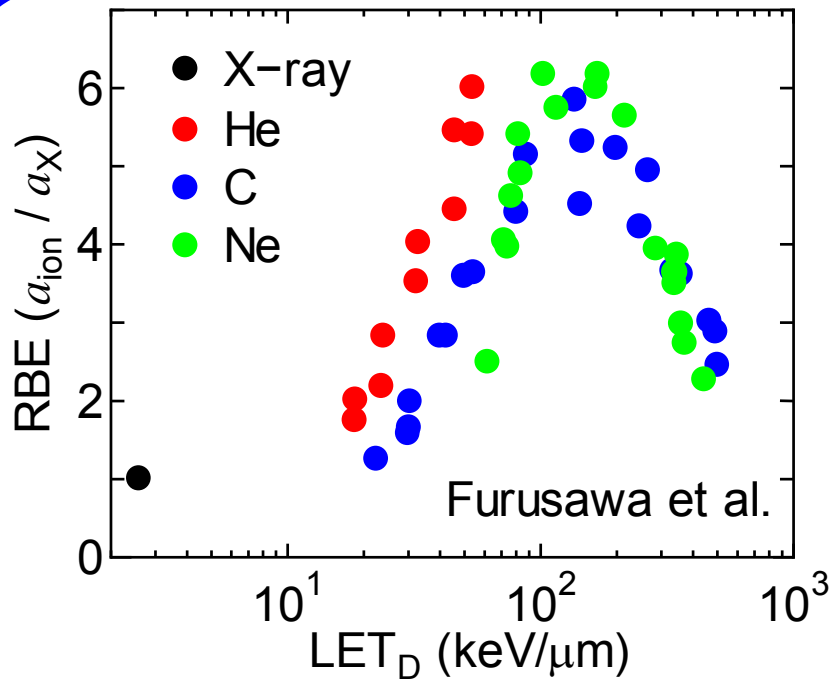
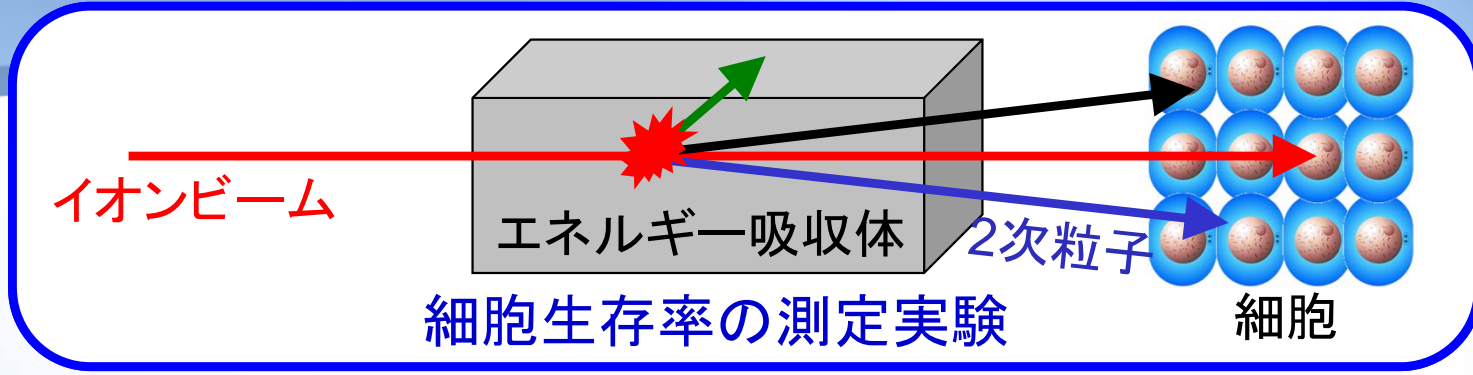
[T-SED] タリーの結果



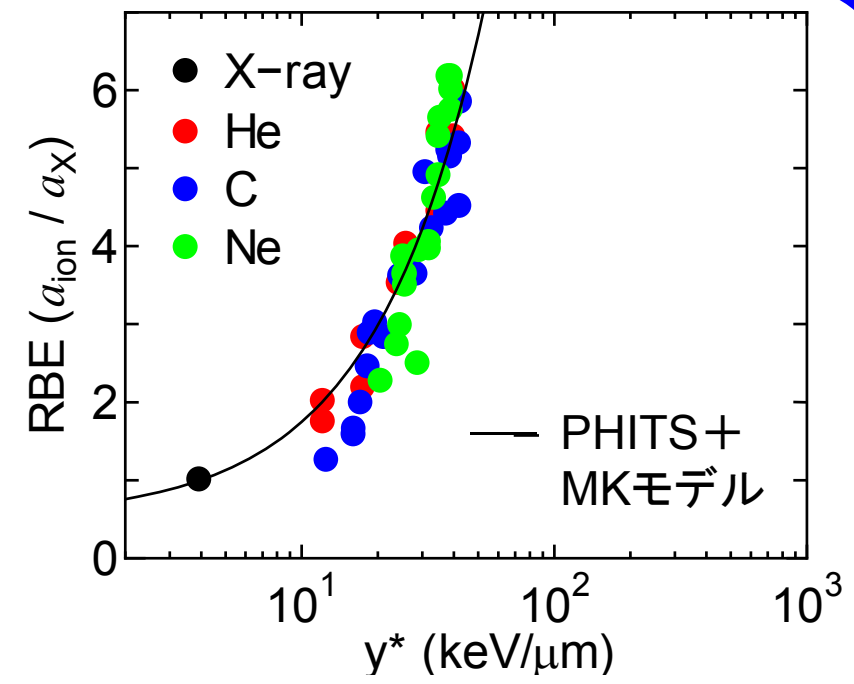
同じLETを持つ粒子(3MeV陽子と350MeV/n炭素イオン)の飛跡周辺にある直径10nmもしくは1 μ mの球に対するy分布

- 同じLETでも高エネルギー放射線の方が電離密度が低い → δ 線による発散
- ターゲットが小さくなると分布の分散が大きくなる → 平均値(LET)だけでは議論不可

[T-SED]の応用例①：細胞生存率の評価



再解析



LET_Dとy*の関数として表したHSG細胞生存率に対するRBE

LET_D: 線量平均LET値 y*: 高電離密度領域におけるOverkill効果を補正した線量平均y値

任意の放射線場において、イオン種の違いまで考慮した高精度RBE評価が可能

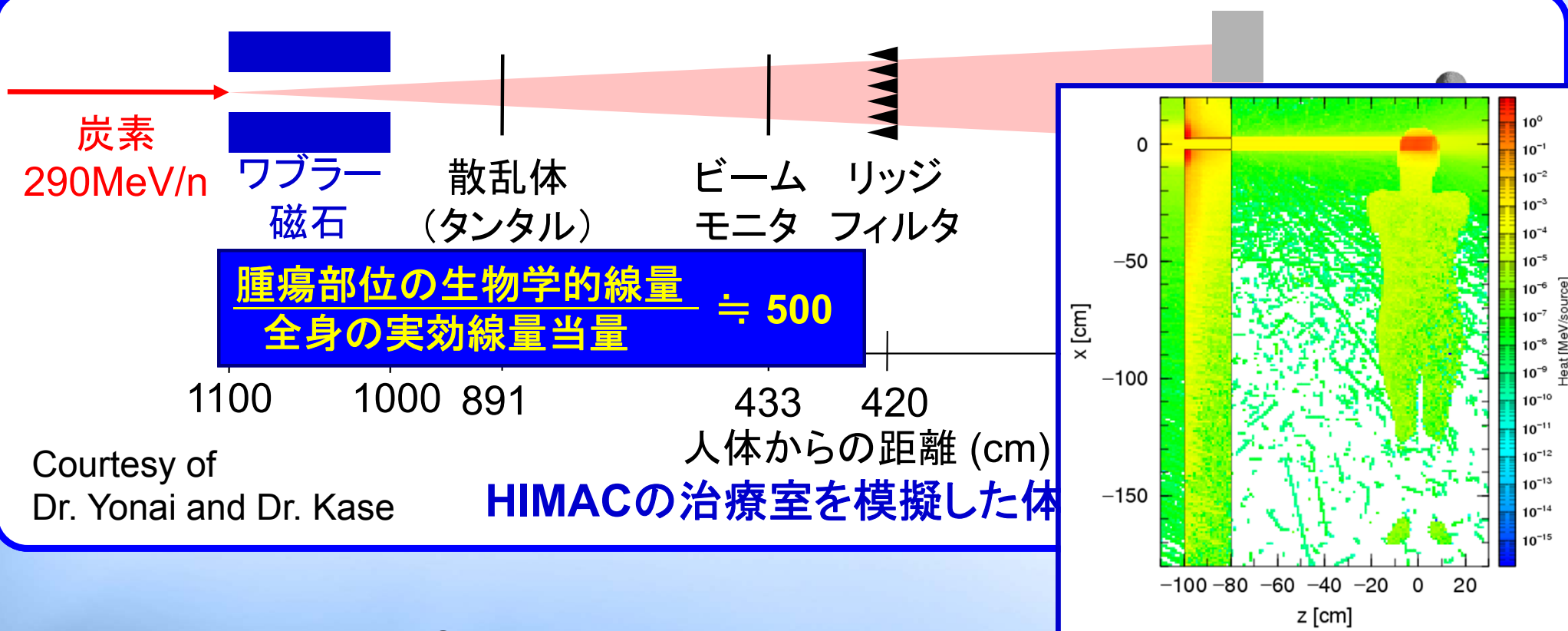
[T-SED]の応用例②：粒子線治療計画

現在の生物学的線量評価モデル (RBE指標: LET or 放射線の種類)

- 特定の放射線に対するRBEのみ計算可能 → 陽子線・炭素線治療などイオン種限定

PHITSを用いた生物学的線量評価モデル (RBE指標: y)

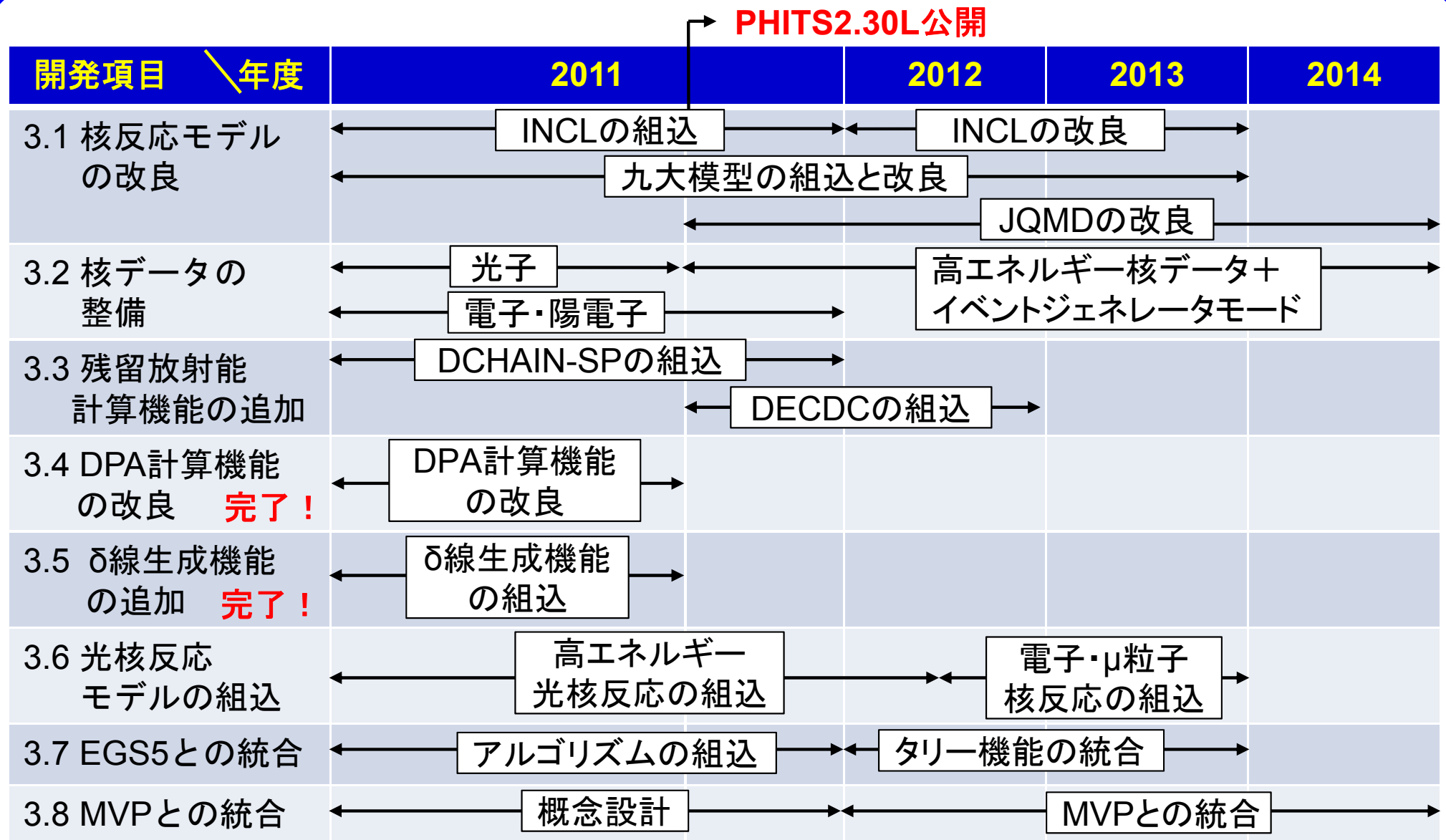
- 任意の放射線に対するRBEが計算可能 → 全ての放射線治療に汎用的に適用可能
- 確率的影響のリスク指標となる線量当量も計算可能 → 2次発がんのリスク評価



発表内容

- 旧versionからの改良点
- δ 線生成とマイクロジメトリ機能
 - 今後の開発予定
 - まとめ

今後の開発予定



残留放射能計算機能の追加

PHITS 次期version

PHITS 2.30

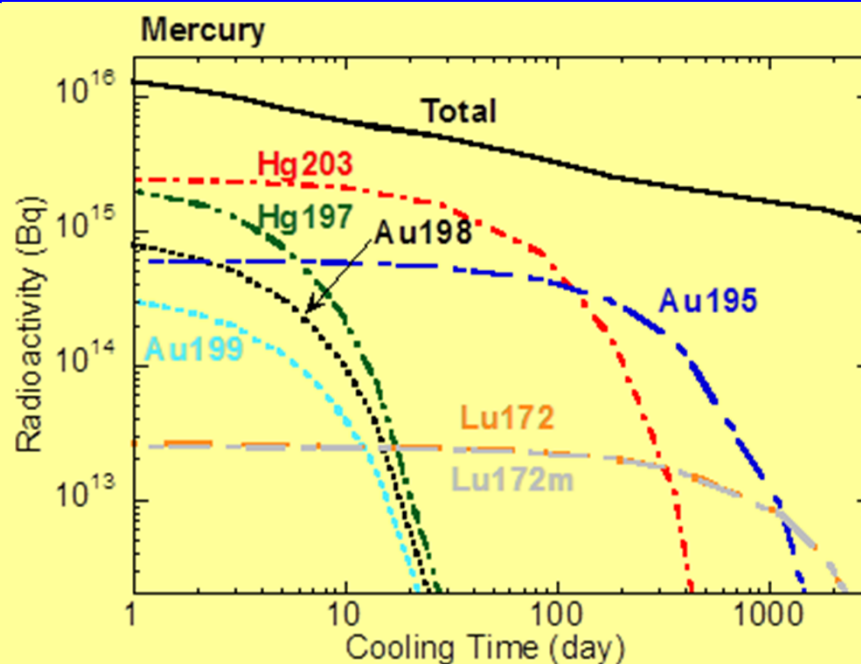
[T - Yield] タリーにより照射直後の残留核収率を計算

DCHAIN-SP

残留放射能の時間変化を計算

DECDC

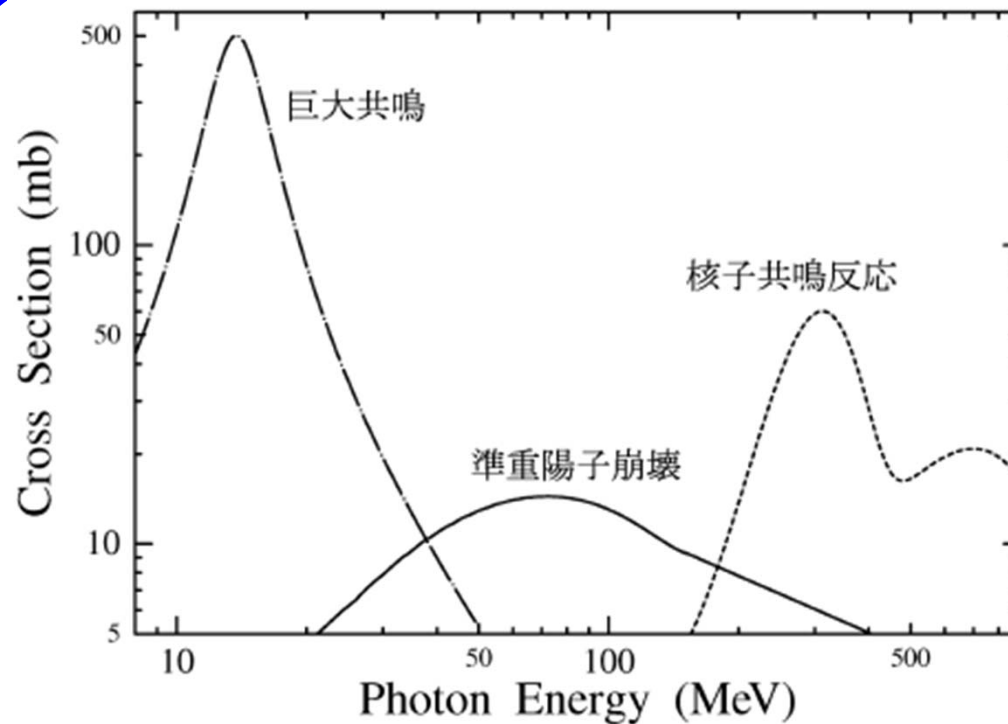
核崩壊データベース



J-PARC水銀ターゲット中の残留放射能の時間変化

Courtesy of
Dr. Kai (JAEA)

光核反応モデルの組込



光核反応断面積の例

組込

光核反応のメカニズム

- 巨大共鳴: 原子核全体との共鳴 (蒸発モデル)
- × 準重陽子共鳴: 原子核内にある仮想的な重陽子と共鳴 (中性子・陽子放出)
- × 核子共鳴: 原子核内にある特定の核子と共鳴 (π 生成)

仮想光子を介する電子・ミュオン核反応モデルに発展させる

発表内容

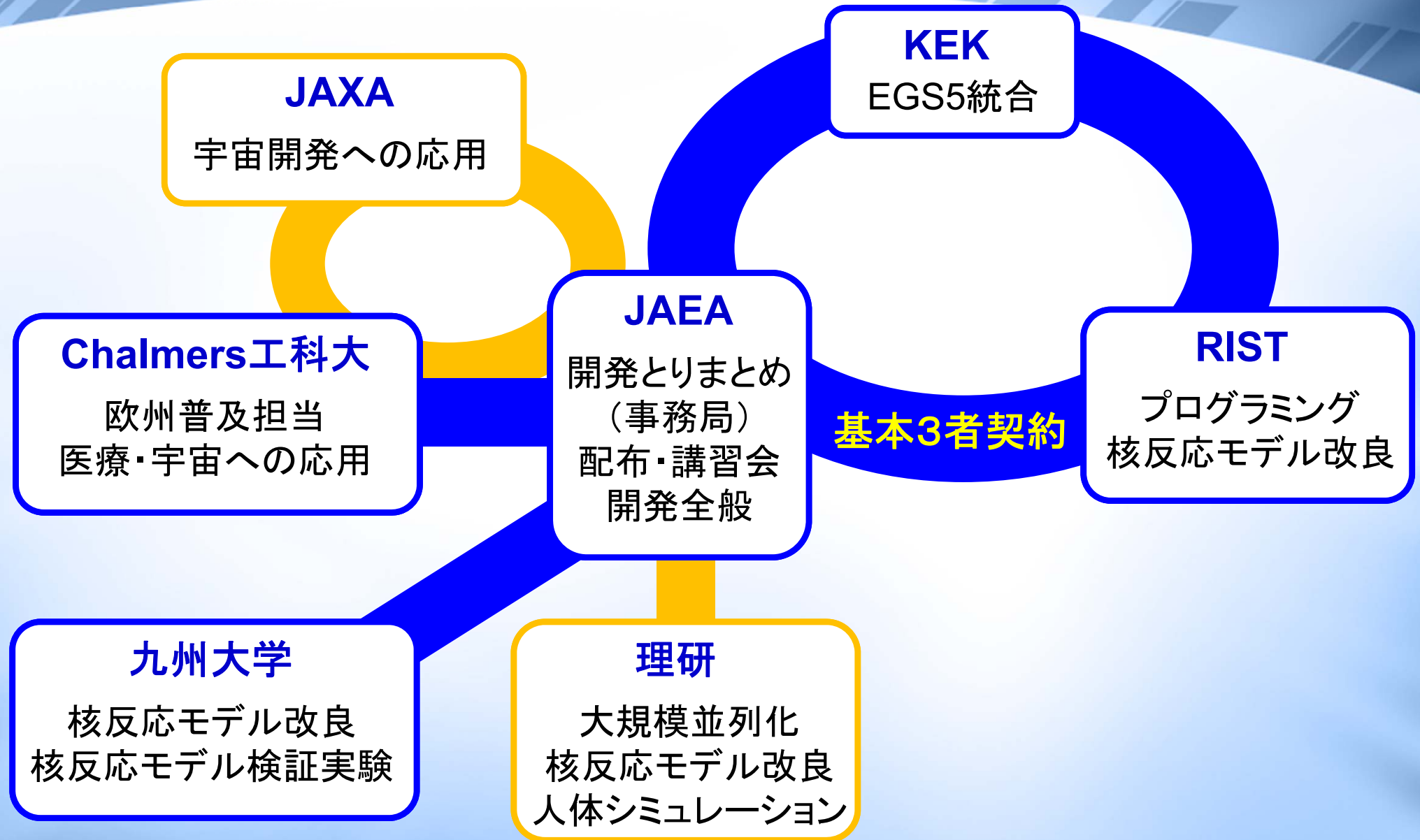
- 旧versionからの改良点
- δ 線生成とマイクロジメトリ機能
- 今後の開発予定
 - **まとめ**

まとめ

- ◆ 様々な改良を加えたPHITS 2.30Lを本講習会にて公開
- ◆ ML登録ユーザーには、来週中にパッチファイルをE-mailにて配布
- ◆ 今後は、半年に1度程度の頻度で更新版を配布
(ただしML登録ユーザーのみ)
- ◆ 来年3月公開予定の次期versionには、INCLモデル, DCHAIN-SP, 電子・陽電子ライブラリ, EGS5(一部機能のみ)が組み込まれる予定

(希望的推測)

PHITS開発体制



PHITS開発チーム

- ◆ 仁井田浩二 (RIST): 主プログラマー, 核反応モデル改良
- ◆ 松田規弘 (JAEA): 講習会・HP担当, DCHAIN-SP組込
- ◆ 橋本慎太郎 (JAEA): マニュアル担当, 核反応モデル改良
- ◆ 岩元洋介 (JAEA): ML担当, DPA計算機能改良, 核反応モデル検証実験
- ◆ 岩瀬広 (KEK): EGS5組込
- ◆ 佐藤達彦 (JAEA): 開発とりまとめ, マイクロドジメトリ機能改良
- ◆ 中島宏 (JAEA): J-PARC遮へい評価, 核反応モデル検証実験
- ◆ 坂本幸夫 (JAEA): ユーザー管理
- ◆ 深堀智生 (JAEA): 核データライブラリ整備
- ◆ 千葉敏 (JAEA): 核反応モデル改良
- ◆ Lembit Sihver (Chalmers, Sweden): 欧州普及担当, 医療・宇宙への応用

将来の開発者(ポスドク)

- ◆ 野田秀作 (JAEA): 光核反応モデル改良
- ◆ 太田周也 (JAEA): 核反応モデル改良
- ◆ ???? (JAEA): 核反応モデル検証実験(現在募集中!)

総合討論

- ◆ 新たな機能追加の要望 (D-CHAIN, EGS5, 軽核反応(d,d), (p, Li)など)
- ◆ 配布・更新方法, 講習会に関する要望 (EGSとの合同開催?)
- ◆ HP・マニュアルに関する要望
- ◆ ユーザーコミュニティ醸成の方法
- ◆ 開発チームへの要望 (開発に貢献したい!)