

PHITS開発の現状

PHITS開発チーム一同

2015/03/30

発表内容

1. PHITS最近の動向
2. 最新版PHITSの特徴
3. まとめ&今後の予定

最近の更新履歴

2013年11月 : PHITS 2.64更新パッチファイル公開

2014年1月 : PHITS 2.64 国内公開(RIST登録)

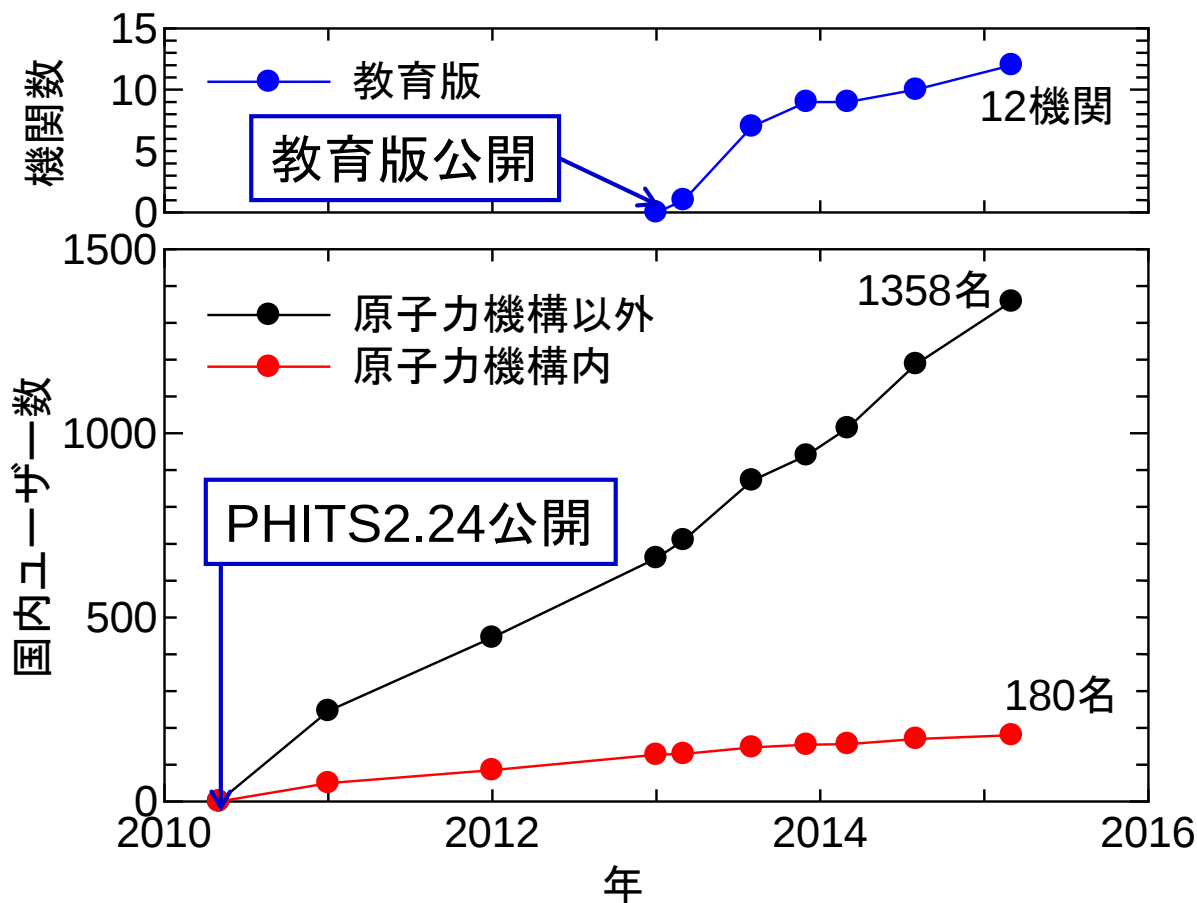
2014年3月 : PHITS 2.64 海外公開(OECD/NEA Databank登録)

2014年8月 : PHITS 2.70(EGS実装版)の講習会での配布を開始

2015年3月 : PHITS 2.76更新パッチファイル公開

2015年4月 : PHITS 2.76 RIST登録(予定)

ユーザー数の変化



国内*のPHITSユーザー数

平成26年度で368名で増え，国内で1,500名突破！！

*PHITS講習会に参加，もしくはRISTを通してPHITSを入手した人数

発表内容

1. PHITS最近の動向
2. 最新版PHITSの特徴
3. まとめ&今後の予定

PHITS2.70

平成26年の定期講習会で配布開始

PHITS2.64からの主な変更点(担当者)

- ◆ 光核反応モデルの組込 ($E > 1\text{GeV}$) (野田・安部)
- ◆ DWBA(歪曲波ボルン近似)の導入(橋本)
- ◆ ミューオン核反応モデルの組込(安部・野田)
- ◆ Gy単位出力オプションの追加(古田)
- ◆ 円錐形状線源への対応(仁井田)
- ◆ 領域エラーチェック機能の開発と導入(仁井田・佐藤)
- ◆ イベントジェネレータモードVer.2の開発と組込(小川)
- ◆ 標準出力(phits.out)とエラー出力の改訂(仁井田・佐藤)
- ◆ Dumpを使った再開始計算機能の追加(橋本)
- ◆ R-JQMDモデルの導入(小川・仁井田)
- ◆ 検出器分解能考慮オプションの導入(佐藤)
- ◆ EGS5の組込(一部機能未対応)(岩瀬・仁井田)

PHITS2.76

平成27年3月に更新パッチ公開

PHITS2.70からの主な変更点(担当者)

- ◆ EGS5のスレッド並列化(佐藤・岩瀬)
- ◆ ミューオン捕獲反応モデルの組込(安部)
- ◆ Sum tally機能の追加(橋本)
- ◆ DCHAIN-SP2014の導入(甲斐・松田・岩元)
- ◆ Kurotamaモデルの改良(Sihver・橋本)
- ◆ 核準位データ(trxcrd.dat)のソース組み込み(小川)
- ◆ 角度分散を調整するパラメータの導入(佐藤・岩元)
- ◆ Phase Space File変換プログラムPSFC4PHITSの開発(古田・橋本)

PHITS2.76に組み込まれた物理モデル

	中性子	陽子・ π 粒子 (その他の核子)	重イオン	μ 粒子	電子・ 陽電子	光子
エネルギー ↑	200 GeV		100 GeV/n	100 GeV	100 GeV	100 GeV
	核内カスケード模型 JAM 3.0 GeV + 蒸発模型 GEM		量子分子 動力学模型 JQMD + 蒸発模型 GEM	仮想光子 核反応 JAM/ JQMD + GEM	原子 データ ライブラリ EEDL / ITS3.0 / EPDL97	原子 データ ライブラリ JENDL- 4.0 / EPDL97
	核内カスケード模型 INCL4.6 + 蒸発模型 GEM	d t ^3He α	10 MeV/n	200 MeV	or	or
エネルギー ↓	核データ ライブラリ JENDL-4.0	1 MeV	電離損失 SPAR or ATIMA		EGS5	EGS5
	10 ⁻⁵ eV	1 keV			1 keV	1 keV

→ イベントジェネレータモード ver. 2:

核反応による全ての2次粒子情報を核データより決定

PHITSに組み込まれた物理モデルとその適用エネルギー範囲*

*モデル及びその適用エネルギー範囲は入力ファイルにて変更可能

EGS5の組み込み

電磁カスケード計算専用コードEGS5*の輸送アルゴリズムをPHITSに組み込んだ

使い方

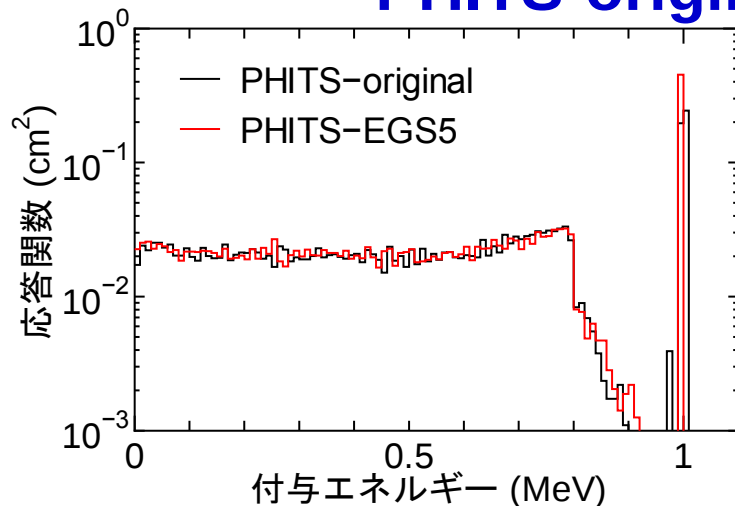
[parameters]セクションで以下を指定

- **negs** = 1
- **file(20)** = EGSライブラリ格納フォルダ
(デフォルトはc:/phits/XS/egs)

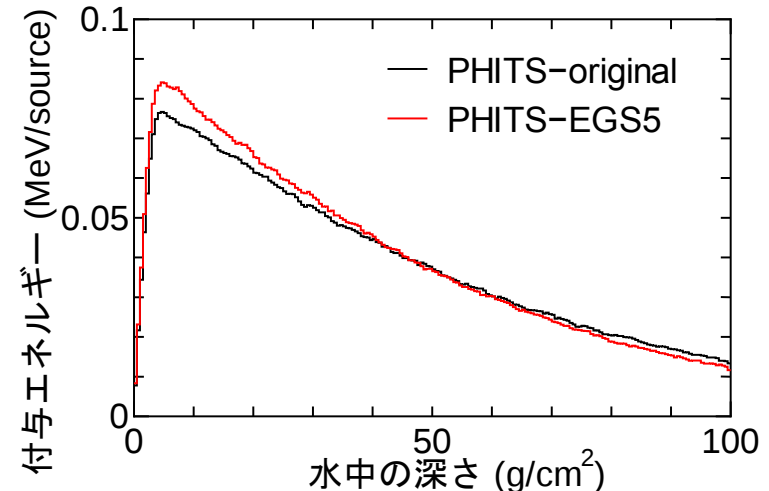
注意点

- 定義できる物質数の制限値が100
- 巨大なタリーや体系などを使うとメモリオーバーになる可能性がある
- [t-track]や[t-cross]で電子・陽電子フラックスがガタガタする。

PHITS-originalとPHITS-EGS5の比較



1MeV光子入射に対するNaIの応答関数



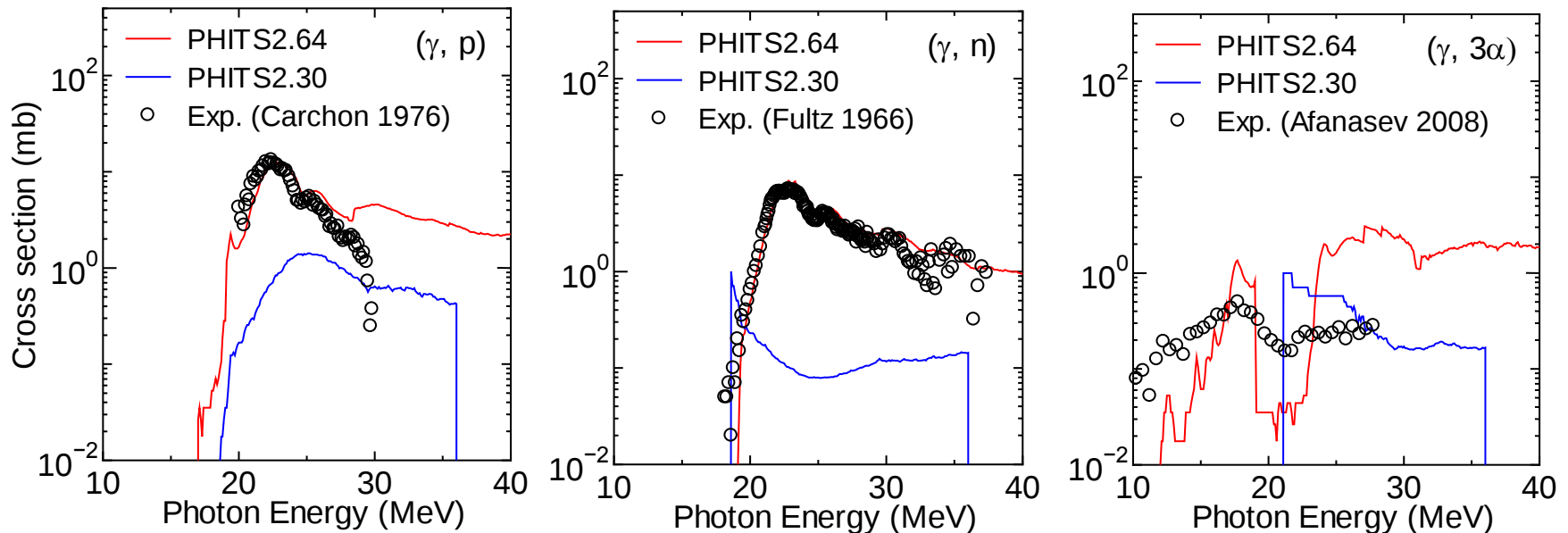
10MeV光子入射に対する水中の線量深度分布

*H. Hirayama et al., SLAC-R-730 (2005) and KEK Report 2005-8 (2005)

光核反応モデルの改良

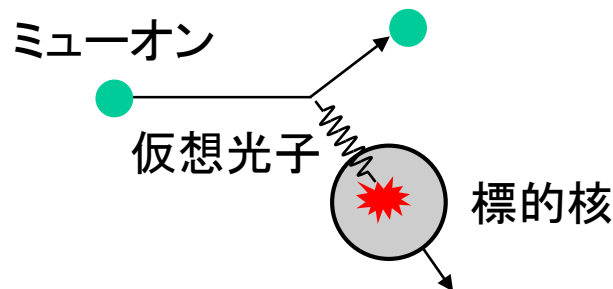
改良点

- ◆ 巨大共鳴におけるアイソスピン選択性を考慮
- ◆ 準重陽子共鳴反応 ($E_\gamma < 150 \text{ MeV}$) をJQMDに組み込み
- ◆ 核子共鳴反応 (Δ, N^* など, $E_\gamma < 2 \text{ GeV}$) をJQMDに組み込み
- ◆ 非共鳴反応 (ストリング生成, $E_\gamma > 2 \text{ GeV}$) をJAMに組み込み

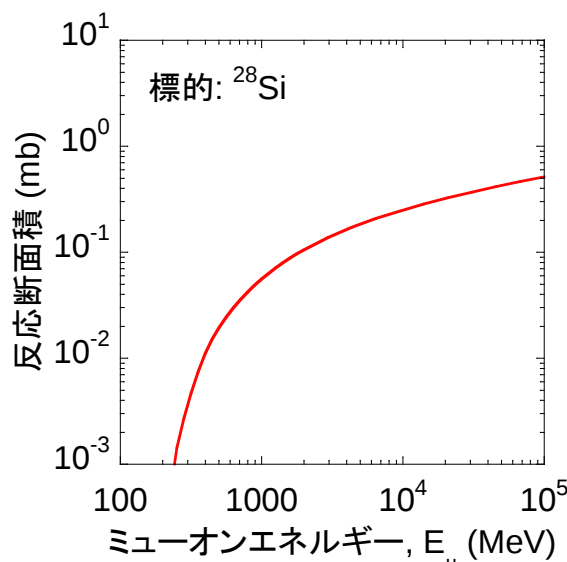


改良前後のPHITSで計算した $C(\gamma, p)$, $C(\gamma, n)$, $C(\gamma, 3\alpha)$ 反応断面積

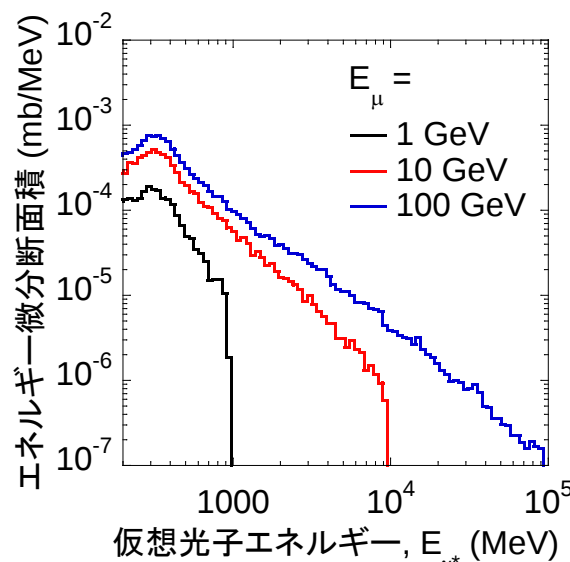
ミューオン核反応モデルの組込



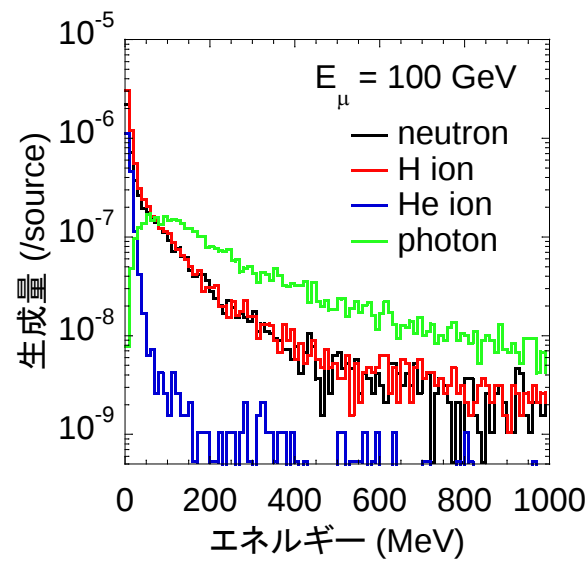
- ◆ 荷電粒子は仮想光子を介して相互作用
- ◆ 仮想光子のエネルギーおよび運動量をサンプリングした後、光核反応モデルを用いて仮想光子と標的核の相互作用を計算



全核反応断面積



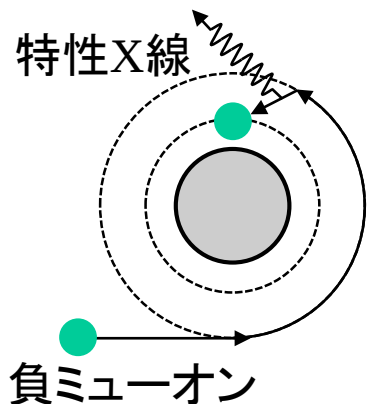
仮想光子放出断面積



2次粒子生成断面積

(μ , ^{28}Si) 反応に対するシミュレーション結果

負ミューオン捕獲反応モデルの組込



崩壊:

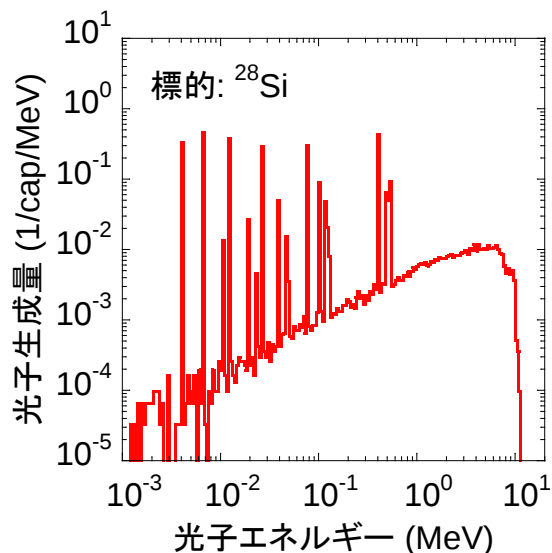
$$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$$

原子核捕獲:

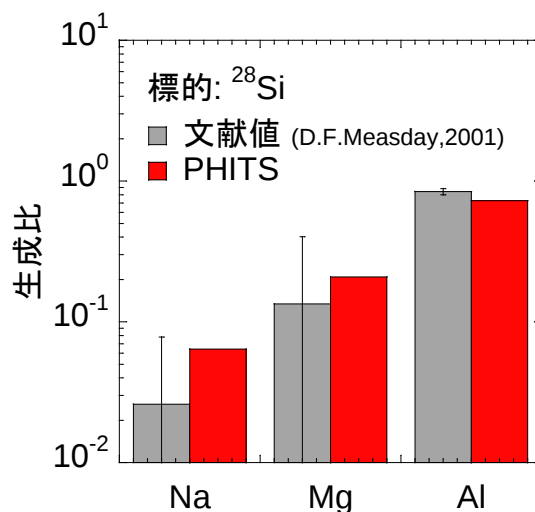
$$\mu^- + p \rightarrow \nu_\mu + n$$

◆減速された負ミューオンは原子に束縛され、1s軌道への遷移過程で特性X線が放出

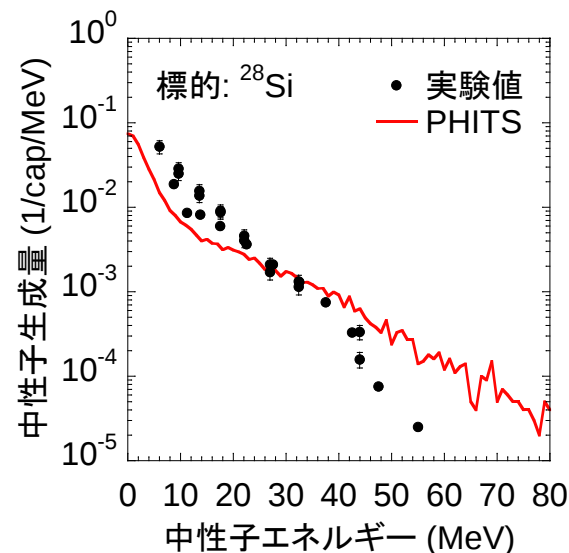
◆その後、負ミューオンは軌道上で崩壊 or 原子核捕獲



光子生成断面積



重イオン生成比

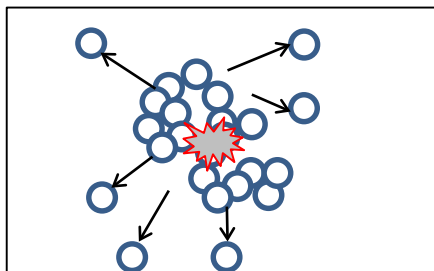


中性子生成断面積

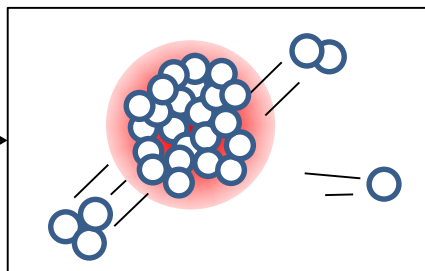
脱励起モデルEBITEMの導入

ENSDF-Based Isomeric Transition and isomEr production Model

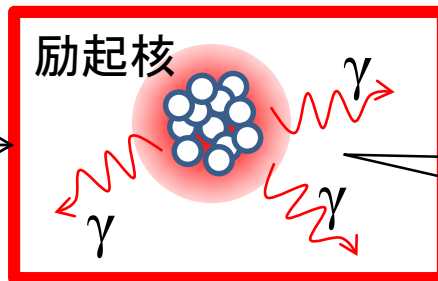
核反応(INCL, JQMD...)



残留核形成(GEM)

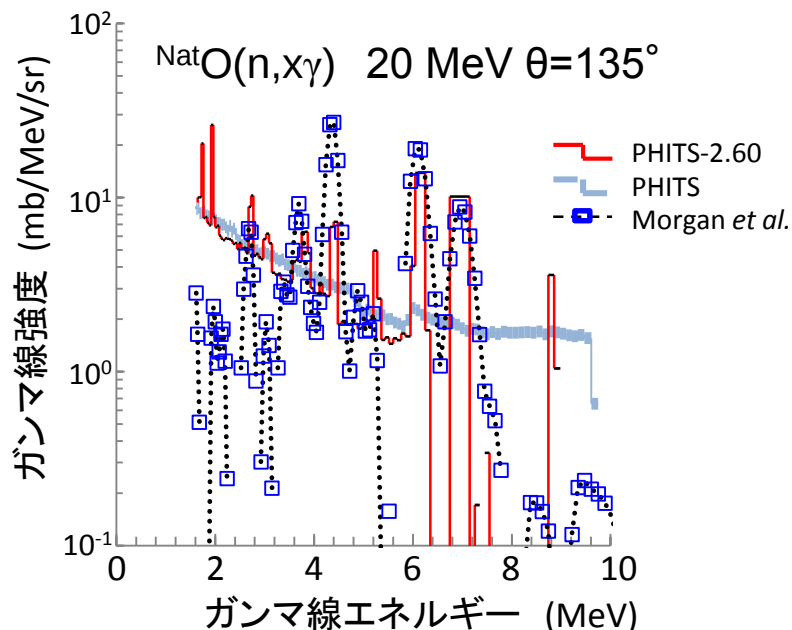


γ 脱励起(EBITEM)



ここを改良

即発 γ 線スペクトルを高精度化



準安定状態(アイソマー)を考慮

核反応後のアイソマーへの分岐比

反応	300 MeV $^{56}\text{Fe}(p,x)X$		630 MeV $^{186}\text{W}(p,x)X$	
生成核	44mSc	52mMn	174mLu	184mRe
実験*	0.48 ± 0.18	0.41 ± 0.30	0.44 ± 0.12	0.21 ± 0.04
PHITS	0.48	0.41	0.42	0.17

*Yu. E. Titarenko et al, 2008; S.A Karamian et al., 2004

T.Ogawa et al., NIM B, 325, 35-42 (2014)

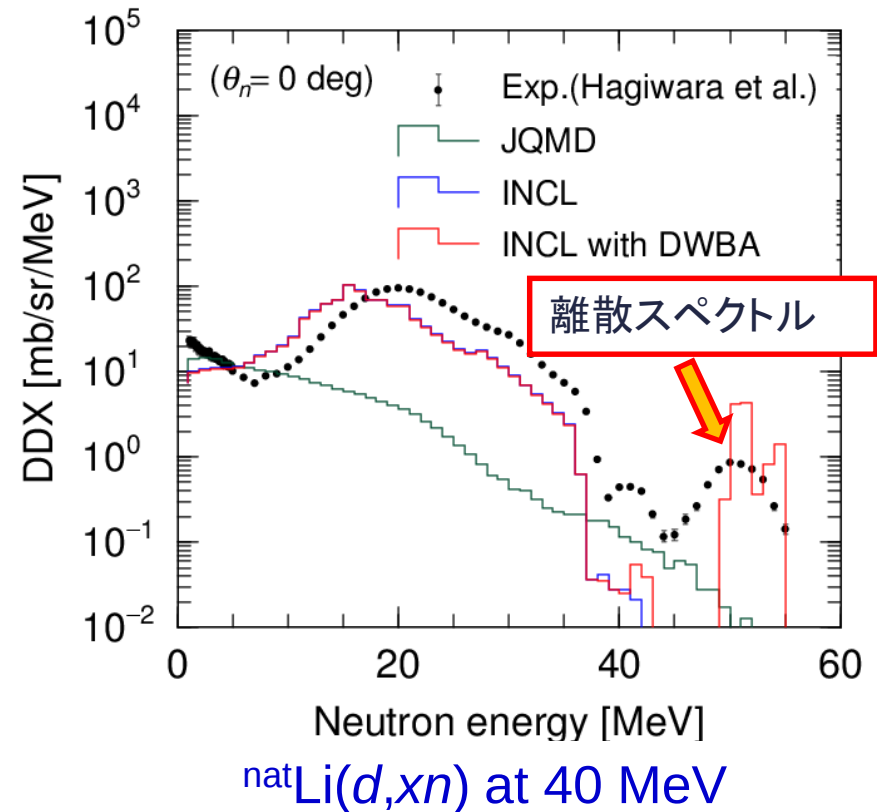
DWBAの導入

導入の流れ

(p,Li)など軽核の核反応は、中性子源の設計など工学応用目的で重要

核内カスケードモデルでは、殻構造を無視しているため**離散スペクトルを再現できない**

歪曲波ボルン近似(DWBA)に基づく量子力学的な計算結果と核内カスケードモデルを組み合わせることにより、軽核の核反応を再現



現在は(p, ^7Li), (p, ^9Be), (d, $^{6,7}\text{Li}$), (d, ^9Be), (d, $^{12,13}\text{C}$)反応のみ対応

Event Generator Mode Ver.2の開発

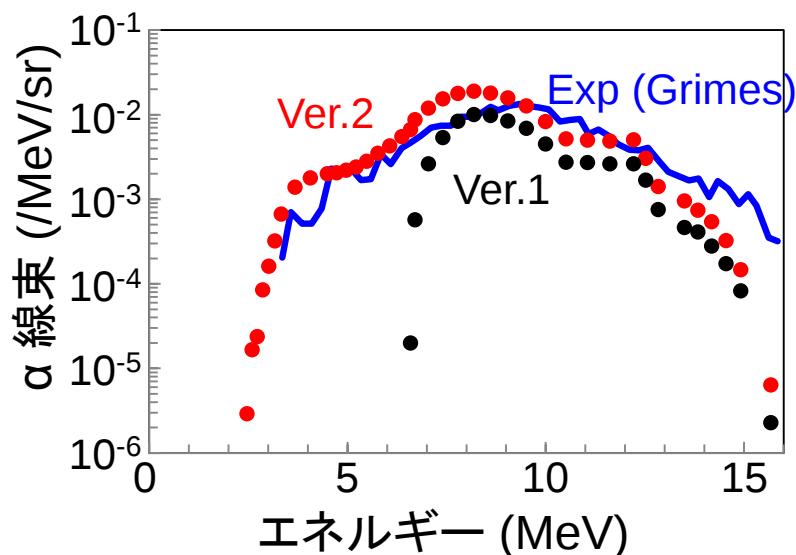
【EG mode】20MeV以下の中性子による反応に適用でき、エネルギー・運動量保存、残留核生成を考慮する。
⇒中性子カーマ、残留核計算等に必要

従来対応 (n,γ) , (n,n) , (n,n')

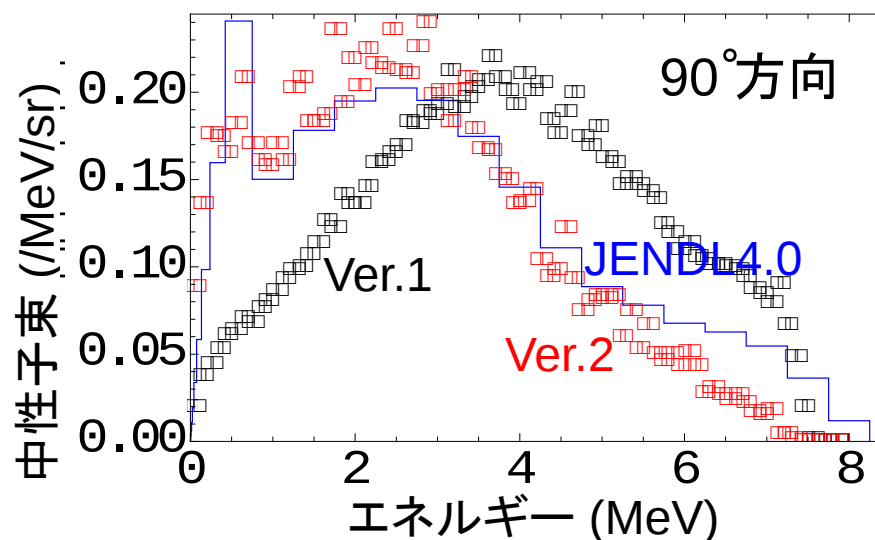
新しく対応 $(n,2\sim 4n)$, (n,p) , (n,a) ,
 (n,t) , (n,np) , (n,na) ...

⇒従来は反応モデルを用いて近似

二次粒子スペクトルの再現性が改善



14MeV中性子入射 $^{60}\text{Ni}(n,X\alpha)^*$



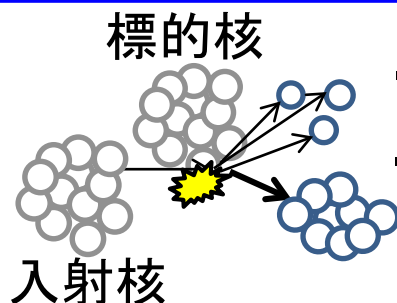
20MeV中性子入射 $^{14}\text{N}(n,2n)$

重イオン核反応モデルR-JQMDの導入

Relativistic Jaeri Quantum Molecular Dynamics Model

【R-JQMD】

核-核衝突のモデル
JQMDの改良版



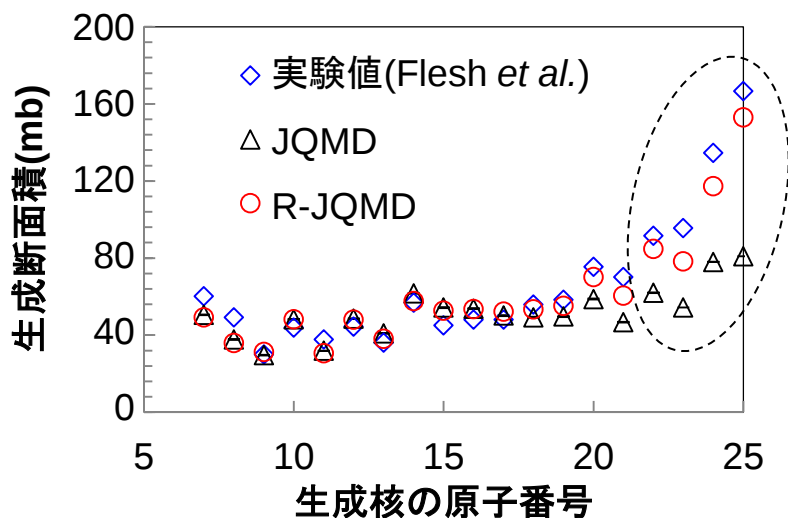
...中性子: JQMDでよく再現

...破碎片: 要改善

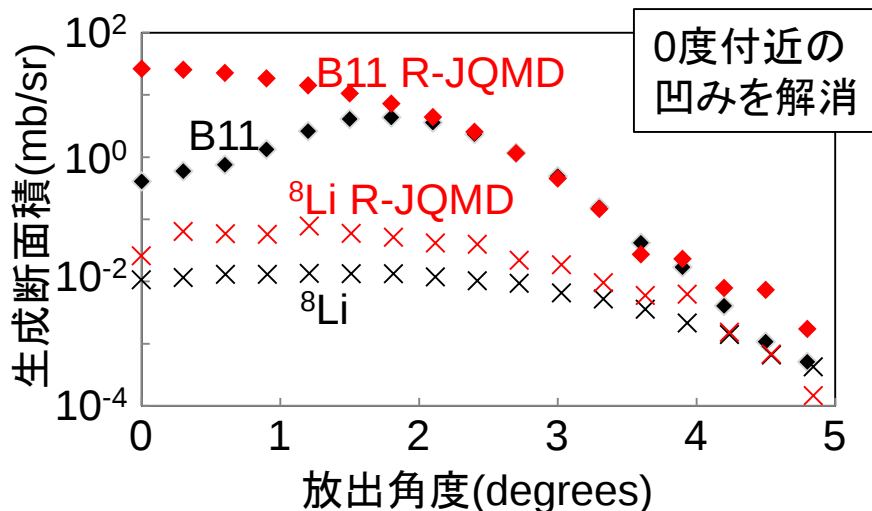
少し欠ける反応
前方成分

を過小評価

破碎片生成断面積の再現性が改善



700MeV/u ^{12}C 入射 $^{12}\text{C}(\text{NatFe}, \text{X})$



400MeV/u ^{12}C 入射 $^{12}\text{C}(\text{NatC}, \text{X})$

ジオメトリチェック機能

従来の確認方法

- **未定義領域**: 実際に粒子輸送計算を行い, Lost Particleの位置から推定
- **多重定義領域**: 確認方法なし

導入したジオメトリチェック機能

使い方:

ジオメトリ2次元描画機能を使う
([t-gshow]もしくはicntl = 8)

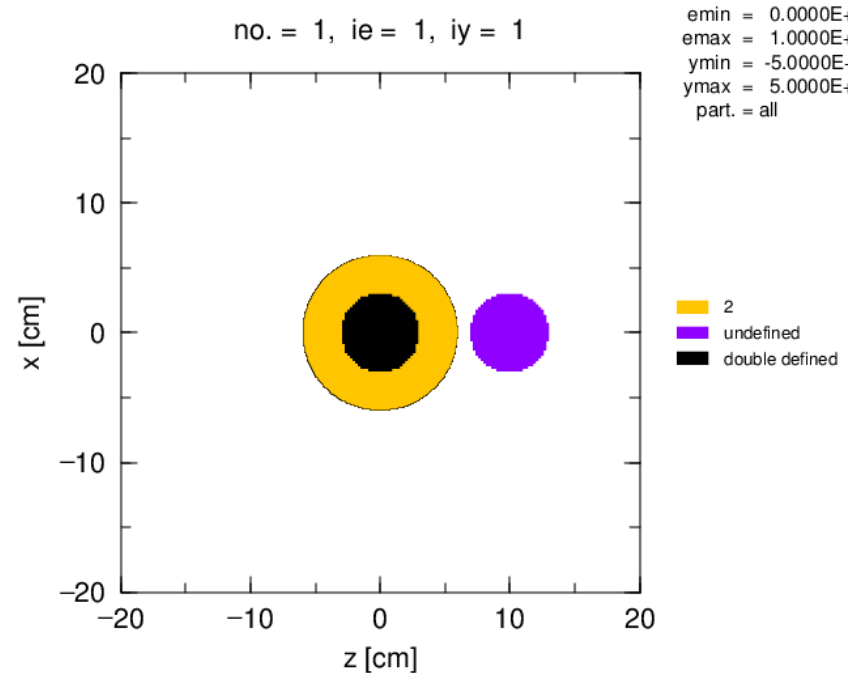
出力:

- 多重定義領域がある場合は黒,
未定義領域は紫で表示
- 領域エラーの座標を*.errファイルに出力

注意点:

- xyzメッシュの格子点でしか確認しない → 小さいエラー領域は見落とす可能性がある

使用例



*.errファイル

Errors of cell definition in EPS Page No. = 1

Overlapped Cell IDs x, y, z coordinates

(Cells 0 0 indicate undifined region)

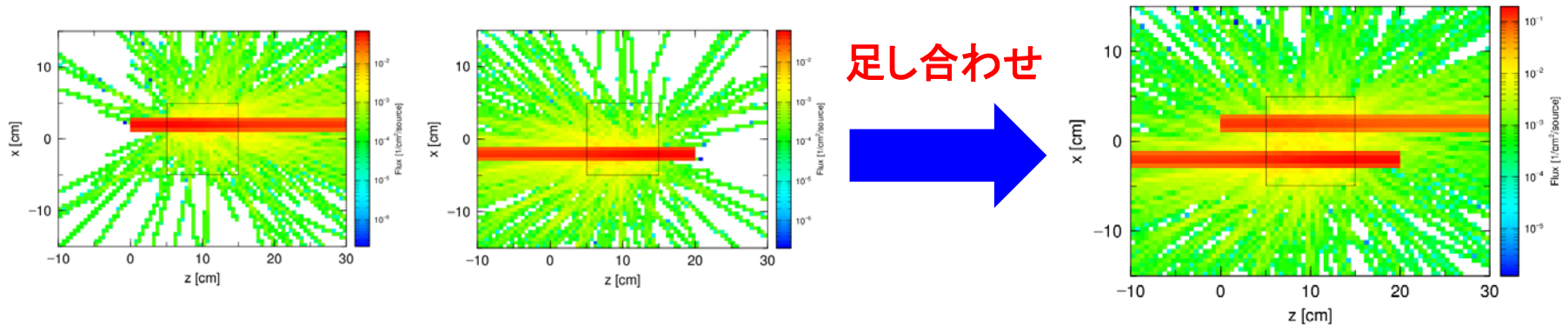
2	1	-2.827861E+00	1.234568E-11	-8.079602E-01
2	1	-2.827861E+00	1.234568E-11	-6.059701E-01
2	1	-2.827861E+00	1.234568E-11	-4.039801E-01

...

Sumtally機能

複数のタリー結果を足し合わせることができる

- ヒストリー数を考慮して足し合わせる(手動並列計算)
- 任意の重み付けをして足し合わせる(加重平均計算)



左から照射した結果と右から照射した結果を重み付けして足し合わせた結果

使い方(マニュアル5.8節参照)

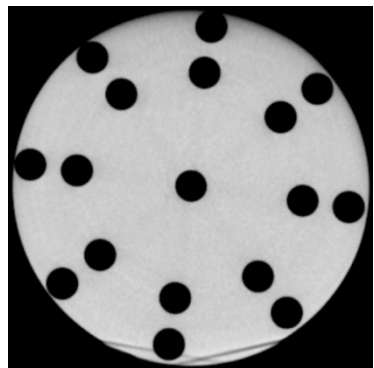
1. 足しあわせたい複数のタリー結果のファイルを用意する
 2. タリー結果の条件(mesh, axis, partなど)が書かれたタリーセクションにおいて、sumtallyサブセクションを設定する
 3. [parameters]セクションにおいてicntl=13とする
- * ただし、バージョン2.76で本機能を利用できるのは[t-track]と[t-deposit]のみ([t-deposit]のoutput=depositは不可)です。

医学物理計算用の補助プログラム

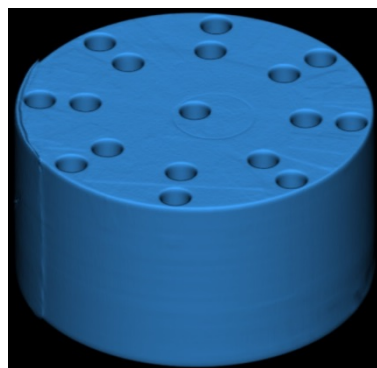
DICOM2PHITS

DICOM形式のイメージデータをPHITS入力形式に変換するプログラム

医療画像DICOM形式のデータ



1ファイル=1スライスデータ

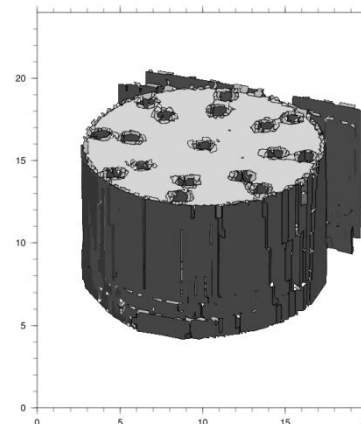


フォルダ全体のデータを3D表示

変換

入力情報

PHITS形式のボクセルデータ

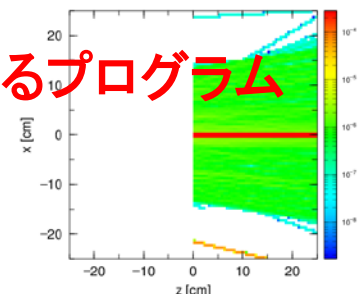


ボクセルの分解能と範囲・位置・方向, CT値から組織への変換テーブル

PSFC4PHITS

加速器線源情報Phase-Space FileをPHITS入力形式に変換するプログラム

- ✓ 加速器部分(上流)のシミュレーションを省略し、ビーム照射部分(下流)のみのシミュレーションが可能
- ✓ IAEAのNuclear Data Servicesから入手可能



誰でも簡単に医学物理計算が可能となった

DCAHIN-SP2014の導入

PHITSの出力から残留放射能の時間変化を計算するプログラム

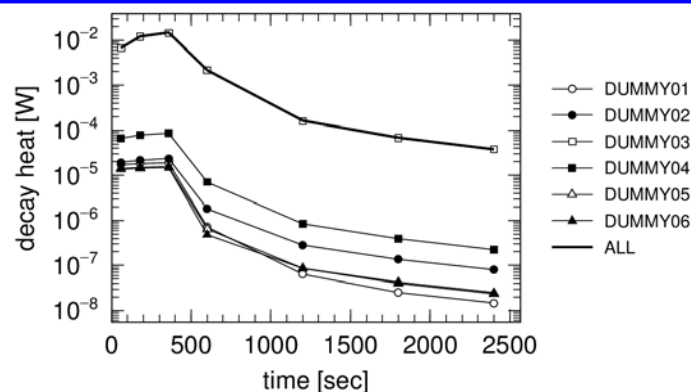
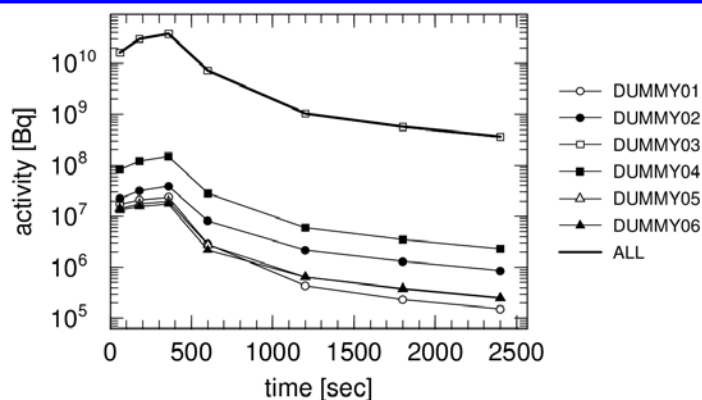
従来versionからの変更点

1. 高精度化

- ✓ 20MeV以下の中性子に対する残留核生成断面積ライブラリーを175群から1968群に変更)

2. PHITSとの親和性の向上

- ✓ 残留放射能の時間変化をANGEL形式で出力
- ✓ 残留放射能による γ 線生成スペクトルをPHITSの[source]セクション形式で出力 → 残留放射能による空間線量分布が計算可能



各タリ一領域における残留放射能(Bq)及び崩壊熱(W)の時間変化の計算例

発表内容

1. PHITS最近の動向
2. 最新版PHITSの特徴
3. まとめ & 今後の予定

まとめ

- ✓ PHITS v2.76への更新パッチファイルを公開
- ✓ EGS5やイベントジェネレータモードver2の導入により、いくつかの奨励設定が変更になっているので注意が必要
- ✓ RIST, OECD/NEA, RSICC登録版は、順次、更新予定

様々な新しい機能の導入やバグ修正が行われているため、引き続きPHITSを使う場合は、必ず更新してください。

今後の予定

◆核反応モデル改良

- ✓ 核共鳴蛍光散乱反応の組み込み
- ✓ JENDL高エネルギー核データファイルとのセット配布

◆新たな計算機能の追加

- ✓ ポリゴン形状の読み込み機能の開発
- ✓ R- θ -Zメッシュタリーの導入
- ✓ Adjoint計算モードの開発
- ✓ 低エネルギーへの拡張(空間分解能の向上)

◆ユーザー支援機能の拡充

- ✓ GUIの開発

お願い

- ✓ 更新にはML登録が必要ですので、最新版への更新をご希望の方は、PHITSホームページを参照の上、必ず登録してください
- ✓ バグを見つけた場合や、改良の要望がありましたら、PHITS事務局<phits-office@jaea.go.jp>までご連絡ください

更新情報は、PHITSホームページ及び
Facebookページにて随時お知らせします

[illegible]



PHITS

Phits ソフトウェア

タイムライン

現在, 224
👍 いいね!