



PHITS ver.3.37の概要

PHITS開発チーム一同

2026/08

最近の更新履歴

2024年04月 : PHITS 3.34をRIST、OECD/NEA DBに登録
2025年04月 : PHITS 3.35をRIST、OECD/NEA DBに登録
2026年04月 : PHITS 3.36をRIST、OECD/NEA DBに登録
2026年07月 : AIエージェント自律実行方法をarXivにて公開*
2026年09月 : PHITS 3.37をRIST、OECD/NEA DBに登録

AIエージェントによる自律実行対応版をプレス発表とともに緊急リリース！

*T. Sato et al., Toward AI-Agent-Driven Particle Transport Simulations: Implementation of AI-Assisted Workflows for PHITS, arXiv:2607.11309. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2607.11309>

最近の改良点

- ✓ AIエージェントによる自律実行機能を導入
- ✓ [t-wwwg]にweight window (WW) 自動更新機能を導入
- ✓ [expand hash-all] セクションを導入し、#allで差し引く領域数が多い場合に対応
- ✓ 既定物質を用いた[material]定義方法を導入
- ✓ [counter], [t-product], [t-interact]で識別番号を用いた反応指定方法を導入
- ✓ PHITS-Chemの改良: 温度依存性の考慮
- ✓ [t-dchain]で放射化断面積とフルエンスから誘導放射能を計算する機能を開発
- ✓ PHITS-Pad、NotePad++、VS CodeなどのPHITS語サポート機能を完成
- ✓ recommendation, lecture, sample, utilityのフォルダ構造を整理
- ✓ DCHAIN-PHITS, ANGEL, PHIG-3Dのマニュアルをhtml化

赤字項目の詳細は本資料に記載

AIエージェントによる自律実行機能の導入

Codex、Claude Code, Antigravity, GitHub CopilotなどのAIエージェントを使えば自然言語(日本語)による指示でPHITSの入力ファイル作成から計算実行、結果解析、条件変更までを反復的行えるようになります。



本格的に利用するには、利用するAIサービスの有料プランへの加入が必要となりますが、無料プランでも一定範囲で利用できますのでぜひお試しください。設定方法は[phits/workbench/README-jp.docx](https://phits.workbench/README-jp.docx)を、具体的な使用方法は[phits/lecture/advanced/AI-agent](https://phits.lecture/advanced/AI-agent)をご参照ください。

詳細は <https://arxiv.org/abs/2607.11309> 参照

[t-wwg]にweight window (WW) 自動更新機能を導入

従来方法

- ✓ [t-wwg]を設定して1回PHITSを実行
- ✓ [t-wwg]の結果を取り込んで複数回PHITSを実行し、WWを最適化
- ✓ 最適化したWWを用いて本計算を実行

仮計算で最適なWWを得るためのヒストリ数
や実行回数はユーザーの経験に依存

新手法

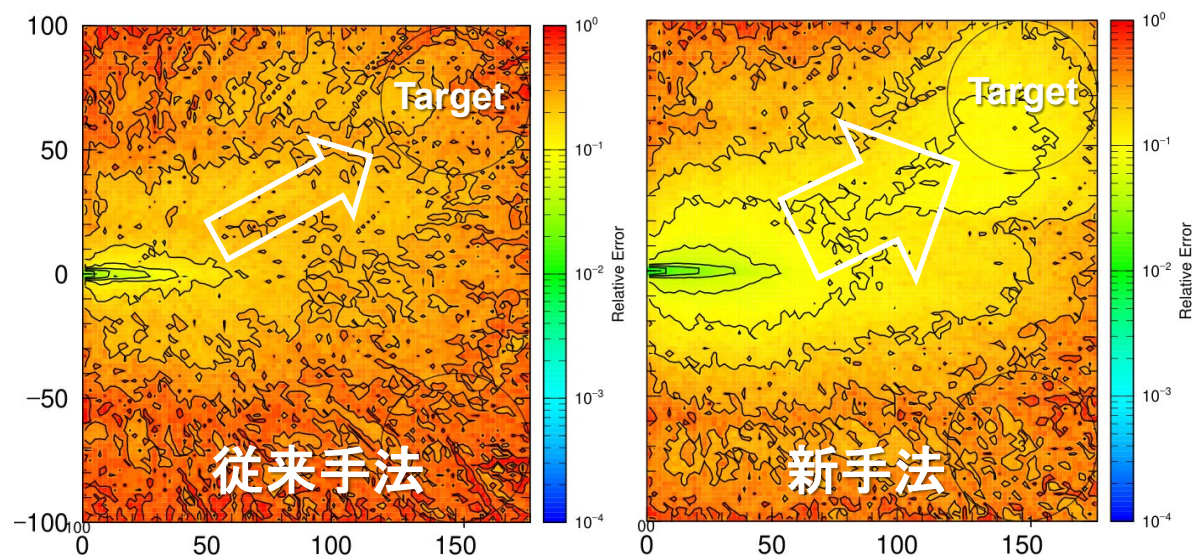
- ✓ [t-wwg]を設定して1回PHITSを実行
- ✓ 最適化されたWWを用いて本計算を実行

仮計算でバッチ毎にWWを更新し、結果が安定したら自動的に計算を打ち切る機能を導入

粒子誘導機能の改良

従来手法: ターゲットに到達した粒子がある場合、そのヒストリーの**全ての飛跡**を強調

新手法: ターゲットに到達した粒子がある場合、その飛跡を逆解析して**親粒子のみの飛跡**を強調



より明確に粒子誘導できるようになった

[expand hash-all] セクションの導入

[expand hash-all]セクションとは？

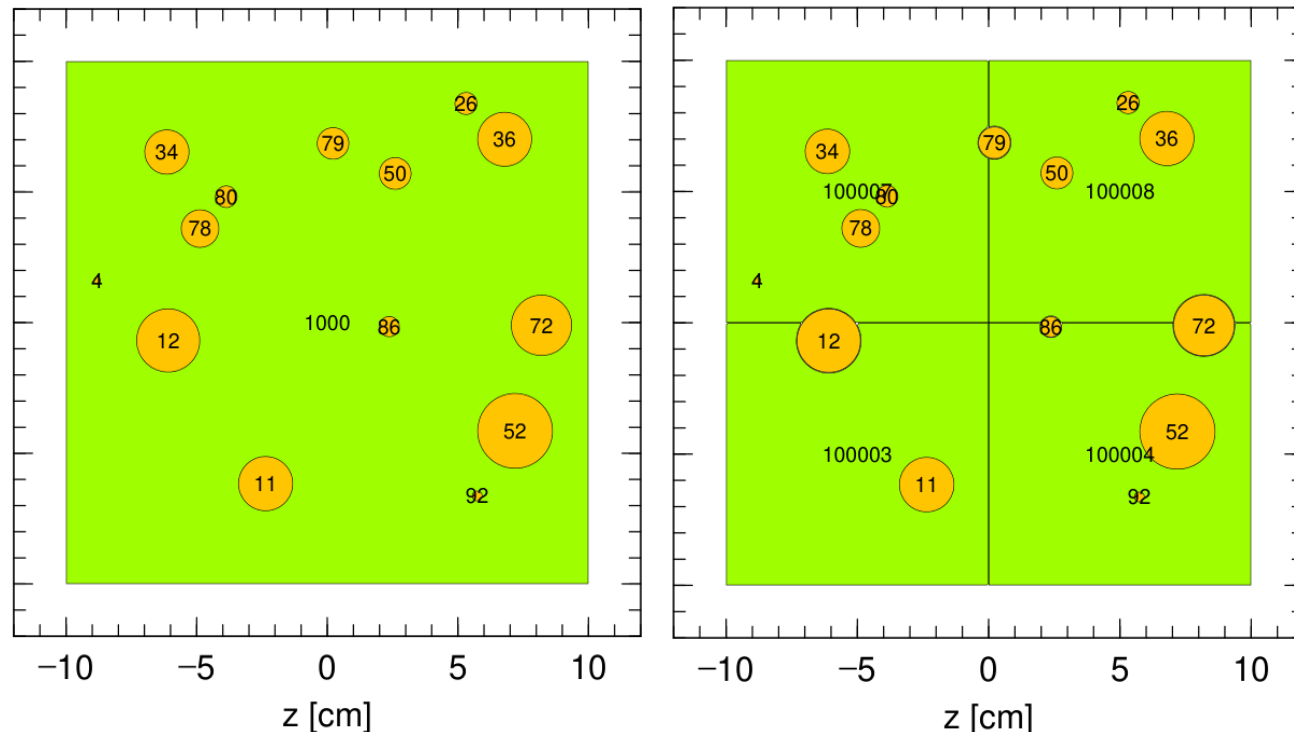
#allを含むセルを自動で分割してから展開する前処理機能

どんなときに使えばいいの？

#allで差し引くセルの数が多かったり複雑だったりしてメモリ不足や計算時間遅延を起こす場合

どうやって使うの？

1. [expand hash-all]セクションを定義し、icntl=18としてPHITSを実行 → 各領域のBounding boxを計算し、その情報から#allを展開した[cell]や[surface]が出力
2. 出力ファイルをinflコマンドで読込、#allを定義した領域をコメントアウトしてPHITSを実行



水中にランダムに水蒸気が100個ある体系に対して#allを使った場合(左)と[expand hash-all]で展開した場合(右)の結果

phits/sample/misc/expand_hash-all参照

既定物質（Pre-defined Material）の導入

既定物質を用いた新しい物質定義方法

- ✓ [material]において、dataフォルダにあるpredefined_material.datから既定物質*を選択して定義
- ✓ 各既定物質のAlias名を@で挟んで定義（例：m1 @WATER@）
- ✓ [cell]では、Alias名を%で挟んで定義し、密度は0.0と設定（例：1 %WATER% 0.0 -1）

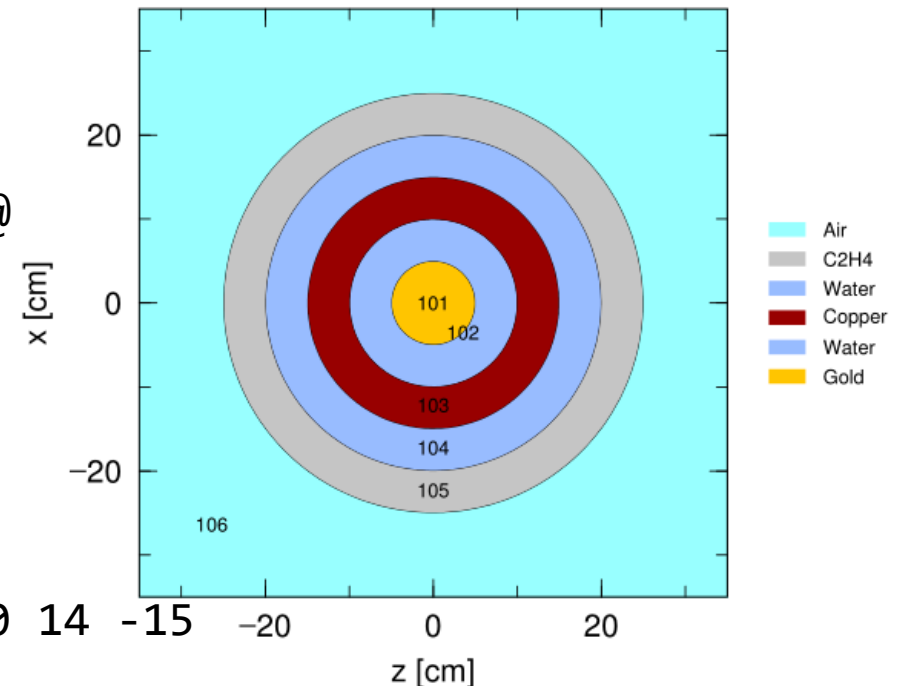
```
[ Material ]  
mat[1] Au 1  
mat[2] H 2 0 1  
mat[3] Cu 1  
mat[5] C 2 H 4  
mat[6] N 8 0 2
```

```
[ Cell ]  
100 -1 10  
101 1 -19.32 -11  
102 2 -1.00 11 -12  
103 3 -8.93 12 -13  
104 2 -1.00 13 -14  
105 5 -0.90 14 -15  
106 6 -0.0012 15 -10
```



```
[ Material ]  
mat[1] @GOLD@  
mat[2] @WATER@  
mat[3] @COPPER@  
mat[5] @POLYETHYLENE(0.94)@  
mat[6] @AIR_DRY@
```

```
[ Cell ]  
100 -1 10  
101 %GOLD% 0 -11  
102 %WATER% 0 11 -12  
103 %COPPER% 0 12 -13  
104 %WATER% 0 13 -14  
105 %POLYETHYLENE(0.94)% 0 14 -15  
106 %AIR_DRY% 0 15 -10
```



新旧の定義方法を用いたタマネギ体系 ([phits/lecture/basic/lec03/onion.inp](https://phits.jp/lecture/basic/lec03/onion.inp))

*データベースには、Flairに既定物質として定義されていた641物質に加えて日米3種類のコンクリートを登録

PHITS-Chemの改良: 温度依存性の考慮

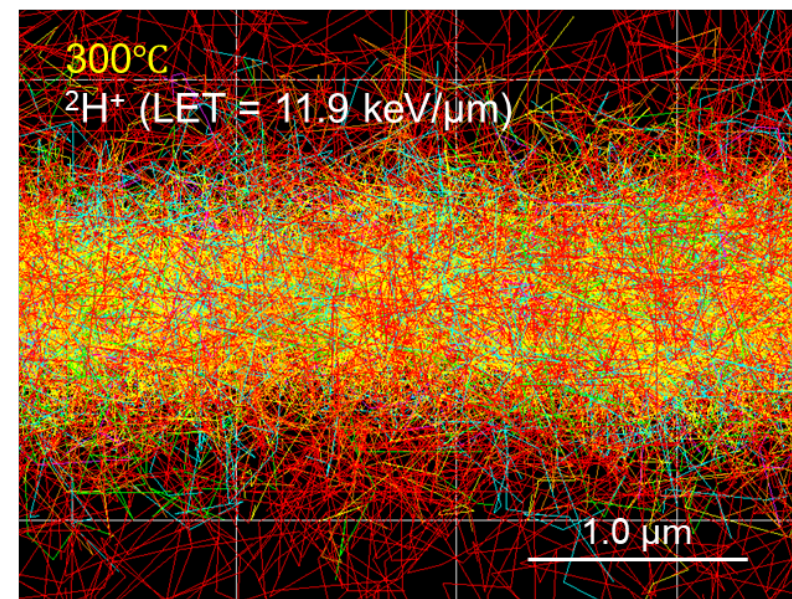
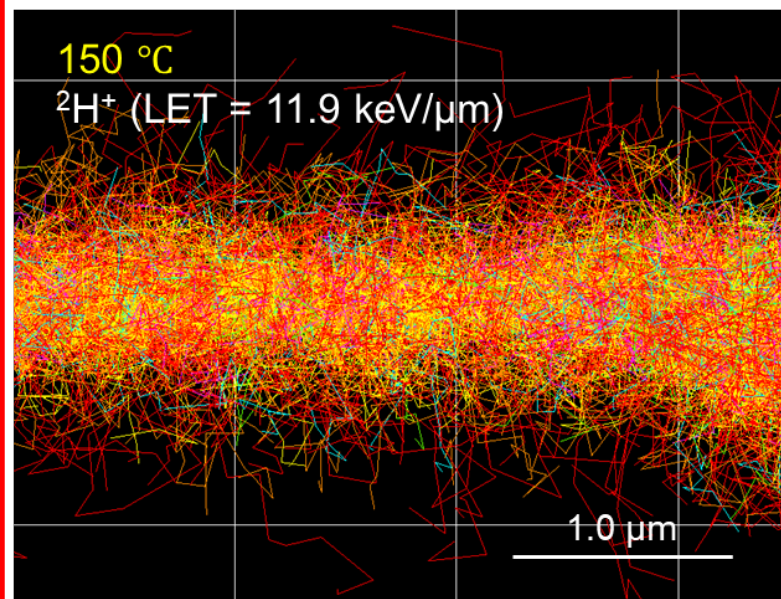
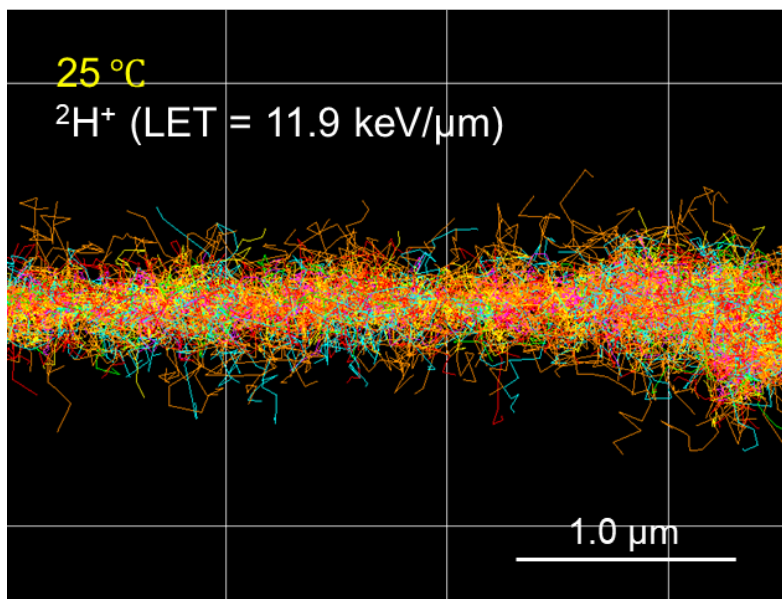
新機能

- ✓ 液相水中における水の分解生成物の拡散係数および化学反応速度係数の温度依存性を新たに整備
- ✓ PHITS-Chemに拡散係数および化学反応速度係数の温度依存性を導入し、従来の25°Cに固定されていた計算条件を0~350°Cの温度範囲へ拡張

従来の温度(室温25°Cに限定)

NEW

0~350°Cの温度範囲へ拡張!



■ $\cdot\text{OH}$ ■ e_{aq}^- ■ $\text{H}\cdot$ ■ H_3O^+ ■ H_2 ■ H_2O_2

Y. Matsuya et al. Sci. Rep. 16, 21477 (2026)

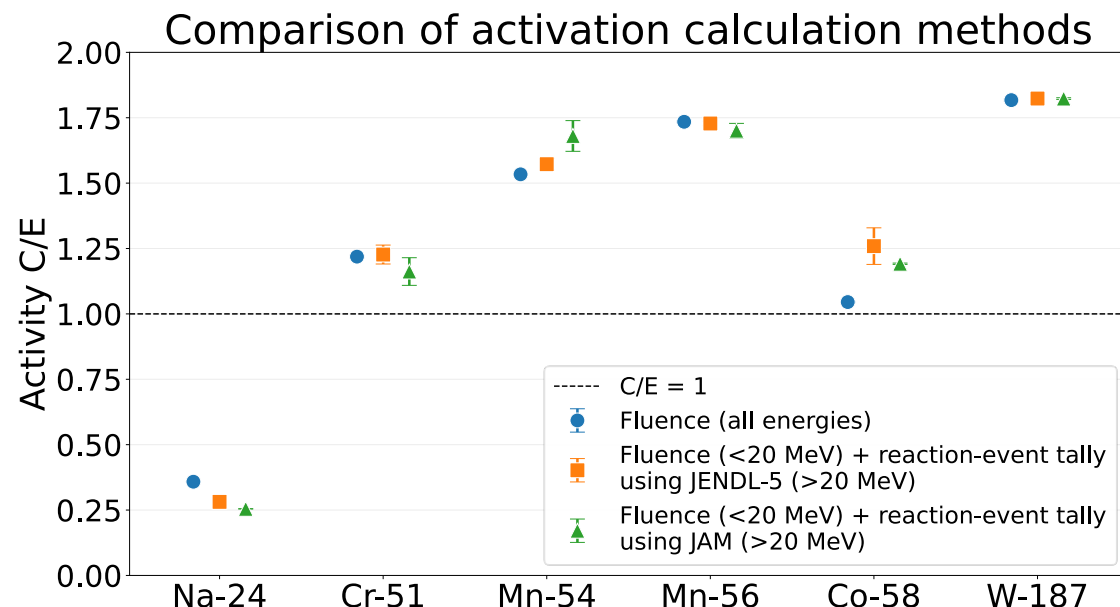
[t-dchain]で放射化断面積とフルエンスから誘導放射能を計算する機能を開発

[t-dchain]にidylmodeパラメーターを追加

反応イベント発生時のみ生成量をタリーする従来手法と比べ、フルエンスで計算するので統計精度向上。

計算手法	20MeV以下の中性子	JENDL-5が整備された粒子*	その他の粒子
idylmode=0(従来法)	JENDL-5 (フルエンス)	JENDL-5 (反応イベント)	核反応モデル
idylmode=1(新手法)	JENDL-5 (フルエンス)		考慮されない

*中性子 ($20 < E < 200$ MeV), 陽子 ($E < 200$ MeV), 重陽子 ($E < 100$ MeV/n), α 粒子 ($E < 3.75$ MeV/n), 光子 ($E < 150$ MeV)



同じヒストリー数で計算した統計誤差:
従来法の平均3% → 新手法の平均0.2%
統計精度が大幅に向上

67 MeV陽子をD₂O標的に照射して生成した二次中性子によるEurofer-97の放射化計算

主なバグ修正

- ✓ nucdata = 0 で電子断面積データを読み込む際に、EXS配列の長さ不足により異常終了する不具合
- ✓ [t-wwg]で20を超えるエネルギー群を定義した際に、自動生成される定数名が正しく出力されない不具合 (c100以降のパラメータを使うように変更)
- ✓ Linux及びmacOSで多数または長いファイル名の *.out ファイルが存在すると、autorun.sh が引数過多により異常終了する不具合
- ✓ MPI環境で itimrand = 1 を指定しても、初期乱数が計算開始時刻に応じて変化しない不具合
- ✓ [t-deposit2]において、不要な配列初期化とヒストリごとの配列割り付けにより計算時間が大幅に増加する不具合
- ✓ OpenMP環境で ihistout による進捗情報が昇順に出力されない不具合
- ✓ dump線源を読み込む際、シングル版、OpenMP版、MPI版で結果が変わる不具合

詳細はマニュアル「1.1 最近の改良点」を参照

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

◆ユーザー支援機能の拡充

- ✓ 様々なタリー出力のHDF5フォーマット化
- ✓ CADからPHITS体系への簡易変換機能
- ✓ AIエージェントを用いたPHIG-3Dの操作

◆計算精度の向上

- ✓ JQMD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