

PHITS と DCHAIN の接続計算の例題

1. 概要

残留放射能の計算は、加速器の遮へい設計や粒子線治療の医療従事者の2次被ばくなどを評価する際に必要である。そのためには、残留放射能の時間発展（照射時間とその強度及び冷却域間を考慮した残留放射能量等の推移）を踏まえて評価する必要がある。そこで、PHITS の計算結果から DCHAIN の入力ファイルを自動的に出力する [T-Dchain] タリーが導入された。また、DCHAIN のソースと実行ファイル及びデータライブラリを PHITS のパッケージに実装した。これらを用いることで、PHITS を用いた残留放射能の時間発展の計算が簡便になった。

本例題では、PHITS と DCHAIN の接続計算の方法について説明する。

2. 接続計算の流れ

PHITS と DCHAIN の接続計算の概要を図1に示す。

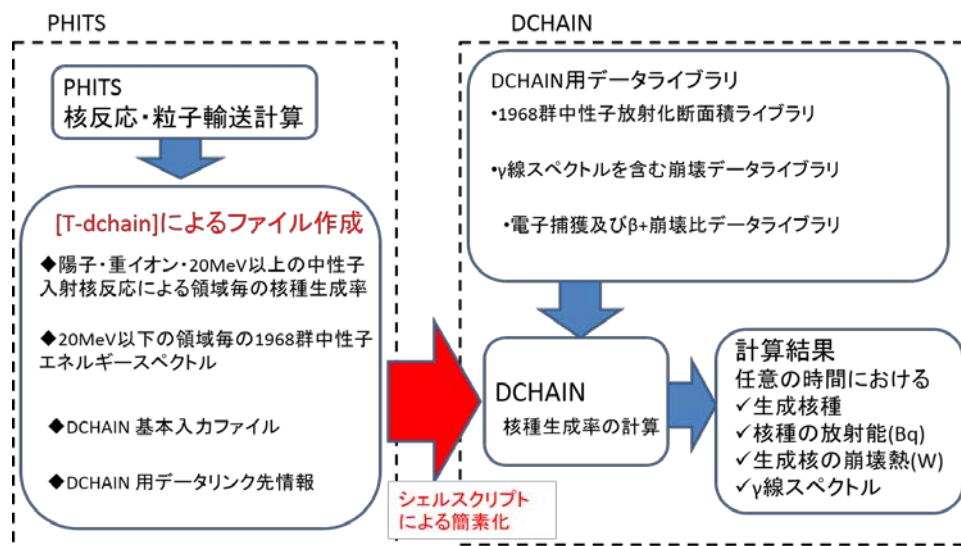


図1 PHITS と DCHAIN の接続計算の流れ

PHITS は、1968 群の中性子エネルギースペクトル、核種生成率、DCHAIN 用の基本入力ファイルを自動で作成し、DCHAIN は、任意の時間における生成核種の放射能、崩壊熱、γ線スペクトルの出力結果を含むファイルを作成する。PHITS から DCHAIN までの実行の手順を以下に示す。

- ① PHITS 入力ファイル[T-Dchain]タリーの作成：マニュアルを参照。
- ② PHITS の実行 → DCHAIN の入力ファイルが作成される
- ③ 作成されたファイルを用いた DCHAIN の実行

DCHAIN の実行方法

Windows: DCHAIN 基本入力ファイルを右クリック→送る→「DCHAIN」

Mac: dchain 入力ファイル(150MeVH2O.out)を DCHAIN のアイコンにドラッグ・アンド・ドロップで持っていく。

Linux: シェルスクリプト「dchain.sh」を利用する。

13 行目 Path1 に dchain 実行ファイルのパス、14 行目 Path2 に angel.sh のパスを記載する。以下のコマンドを用いて、「dchain.sh」に実行権限を与え、シェルスクリプトを実行する。

```
>chmod u+x dchain.sh
```

```
>./dchain.sh 150MeVH2O.out
```

Linux の場合は、DCHAIN の実行ファイルを作成する必要がある。実行ファイルは、`¥phits¥dchain-sp¥src` フォルダにある「Makefile」を使って作成する。その際、「Makefile」の 8~28 行目にあるパラメータをマシン環境やコンパイラに合わせて変更する。

DCHAIN の出力ファイル

- *.lst : インプットエコー及び DCHAIN 計算のサマリーファイル
- *.act : 領域及び指定した出力時間毎の放射能、崩壊熱、線量寄与指数及び誘導放射能に基づくガンマ線スペクトルの出力ファイル
- *.yld : 照射・冷却終了時の領域毎の核種生成量出力ファイル
- *.gsd : 領域及び指定した出力時間毎の誘導放射能に基づくガンマ線スペクトルを MCNP/MCNPX 用線源入力形式 (SDEF カード) に変換した出力ファイル
- *.gso : 領域及び指定した出力時間毎の誘導放射能に基づくガンマ線スペクトルの起源核種とその寄与割合 (%) の出力ファイル
- *.alr : 指定した出力時間毎の全領域での放射能及び崩壊熱の出力ファイル (最大 30 核種)
 - ・*.pht : 領域及び指定した出力時間毎の誘導放射能に基づくガンマ線スペクトルを PHITS 用線源入力形式 (Source セクション) に変換した出力ファイル
- *.ang : 指定した出力時間に対する領域毎の放射能、崩壊熱、線量寄与指数の出力ファイル (ANGEL による eps 作成用出力ファイル)

*. dcs : 指定した領域と計算時間ステップ(照射/冷却と出力時間の組み合わせ)毎の核種、核種の変化量に寄与する崩壊系列スキームの出力ファイル

3. 例題 dchain.inp の解説

「dchain.inp」は、150MeV の陽子を水ブロックに入射したときに生成する放射能と γ 線スペクトルの時間発展を計算するための PHITS 用入力ファイルである。その使用について以下に示す。

3.1 PHITS の実行

まず、PHITS において「dchain.inp」を実行する。このファイルには、陽子と中性子の挙動を把握するための[T-Track]タリーが用意されている。図2に、計算による陽子と中性子の飛跡を示す。

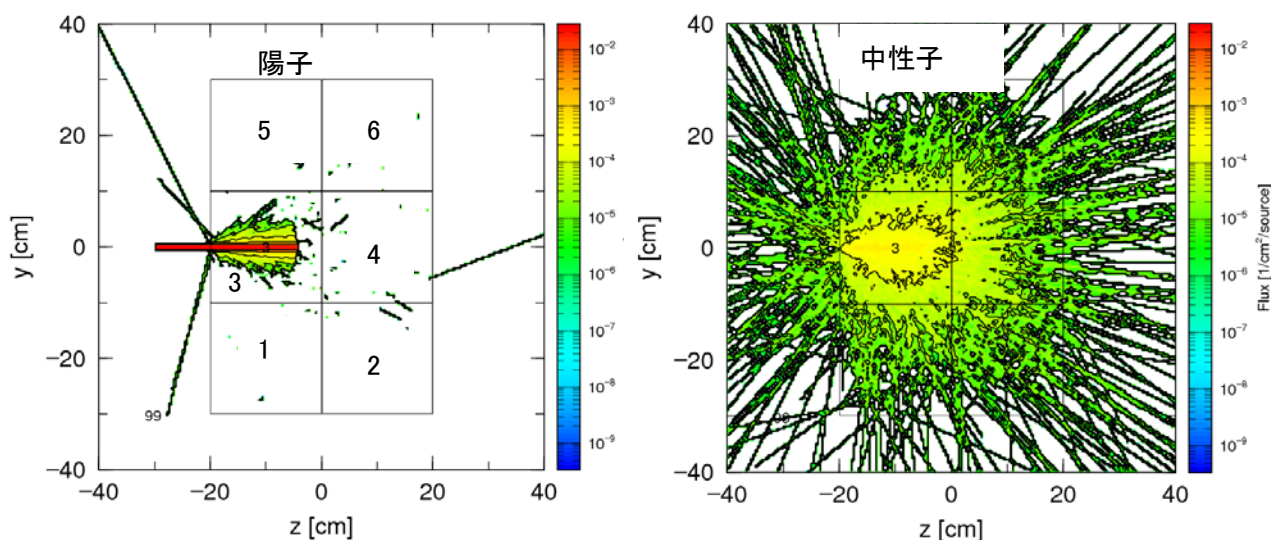


図2 “dchain.inp”の[T-Dchain]による陽子（左）と中性子（右）の飛跡

陽子ビームは、領域3の約15cm深さで止まると共に、多くの中性子を生成する。生成された中性子は、他の領域を通過し、核反応を起こして多くの核種を生成する。「dchain.inp」の[T-Dchain]タリーを以下に示す。

[T - D C H A I N]

\$ must section for DCHAIN

title = 150MeV proton into water

mesh = reg ←region メッシュ

reg = 1 2 3 4 5 6 ←セル番号

file = 150pH2O.out ←DCHAIN の基本入力ファイル

timeevo = 2 ←照射・冷却時間ステップの数

6.0 m 1.0 ←6 分照射

50.0 m 0.0 ←50 分冷却

outtime = 7 ←出力時間の数

1.0 m ←照射開始から 1 分後

3.0 m ←照射開始から 3 分後

6.0 m ←照射開始から 6 分後

10.0 m ←照射開始から 10 分後

20.0 m ←照射開始から 20 分後

30.0 m ←照射開始から 30 分後

40.0 m ←照射開始から 40 分後

\$ beam current (nA)

set:c1[100.0] ←ビーム電流 100nA

\$ beam power (source/sec)

set:c2[c1 * 1.0e-9 / (1.602177e-19)] ←強度(陽子数/秒)に変換

amp = c2 ←強度(陽子数/秒)

図3に、例題の照射・冷却時間ステップと計算結果出力時間の関係を示す。

PHITS の実行により、以下の DCHAIN の入力ファイルができる。

- DCHAIN 基本入力ファイル：「150pH2O.out」
- 20MeV 以下の 1968 群のエネルギー構造を持つ中性子フラックス：「150pH2O.dtrk」
- 核反応による生成核種の収率：「150pH2O.dylld」
- 核種生成収率の統計誤差：「150pH2O_err.dylld」
- DCHAIN 用データフォルダ名が書かれたファイル：「dch_link.out」

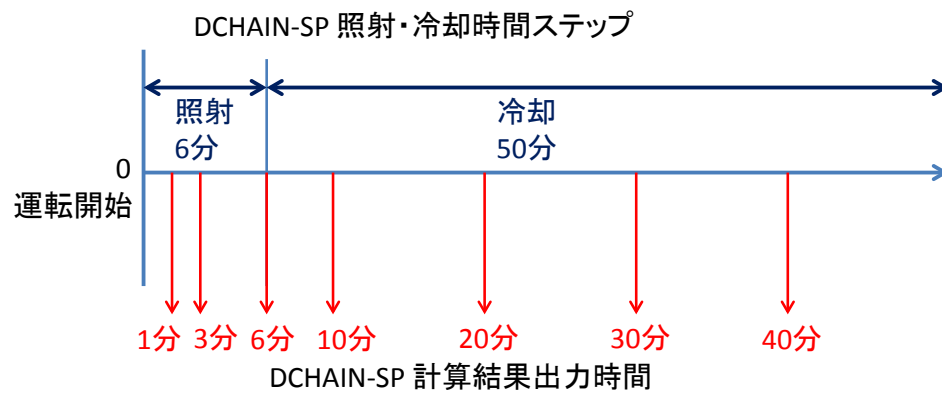


図3 [T-Dchain]で定義した時間構造

3.2 DCHAIN の実行

DCHAIN において、「150pH2O.out」を実行すると 1 0 個のファイルが出力される。本例題では、「150pH2O.act」に含まれる全放射能(Bq/cc)、代表的な生成核種、 γ 線スペクトルの時間発展の情報についてまとめる。

「150pH2O.act」の1～11行目を以下に示す。

```
<-><-><-><-><-><-><-><-><->
<-><->    no.      1   regionwise calculation data        <-><->
<-><->    region label : DUMMY01                               <-><->

<-><-><-><-><-><-><-><-><-><-><-><-><-><-><->

beam current .....    1.0000E-04 [mA]           ←線源の強度 100nA
beam energy .....     3.0000E+00 [GeV]          ←計算に影響ないので無視
beam power .....       3.0000E-04 [MW]          ←計算に影響ないので無視
neutron flux .....     1.2198E+07 [n/cm**2/s]   ←100nA 時の中性子強度
region volume .....    8.0000E+03 [cm**3]       ←領域の体積
irradiation time ..         6 [m]
region number .....      1   (in nmtc yield file)
```

12～108 行目に、領域 1 の計算開始 1 分後における DCHAIN 計算結果（生成核種、 γ 線スペクトル、放射能、崩壊熱など）が表示される。109 行目以降に、異なる時間及び領域の情報が同様に表示される。

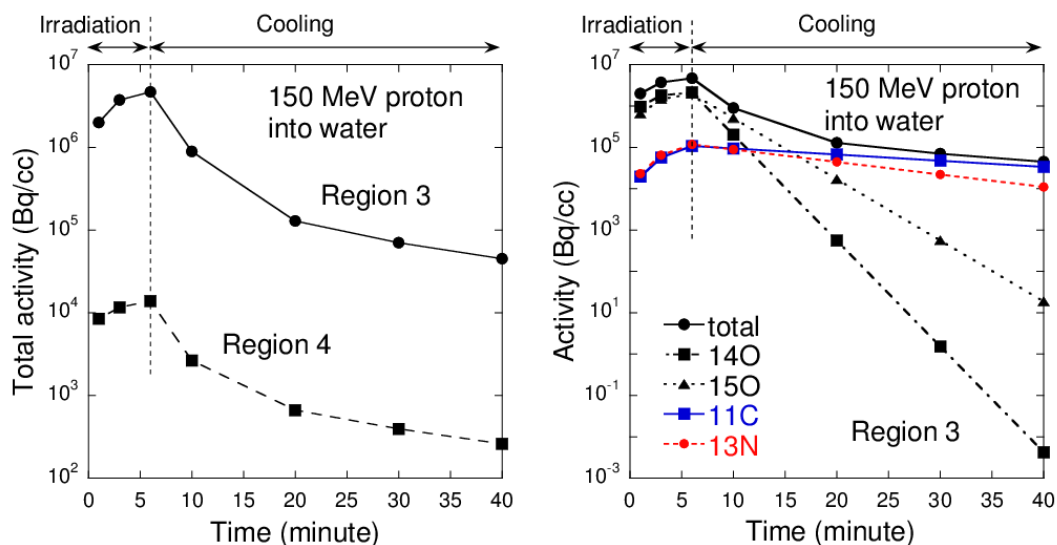


図4 “150pH₂O.act”から得られた領域3と4における全放射能の時間発展（左図）と領域3における生成核種の放射能の時間発展（右図）

3. 3 計算結果

図4の左図は領域3と4の全放射能の時間発展を、右図は領域3の代表的な生成核種の放射能の時間発展をそれぞれ示す。ビーム照射開始から6分間は放射能が増加するが、照射を停止した後は、各放射性核種の半減期に従って指数関数的に減衰する。陽子ビームが入射する領域3は、領域4に比べて2ケタほど放射能が高いことが分かる。また照射中は、¹⁴Oと¹⁵Oの放射能の割合は高いが、冷却中は¹¹Cと¹³Nの割合が高くなる。

図5に、6分後と30分後の γ 線のエネルギースペクトルを示す。6分後に多くの高エネルギー γ 線が生成される一方で、30分後には511keVと低エネルギー γ 線が生成される。

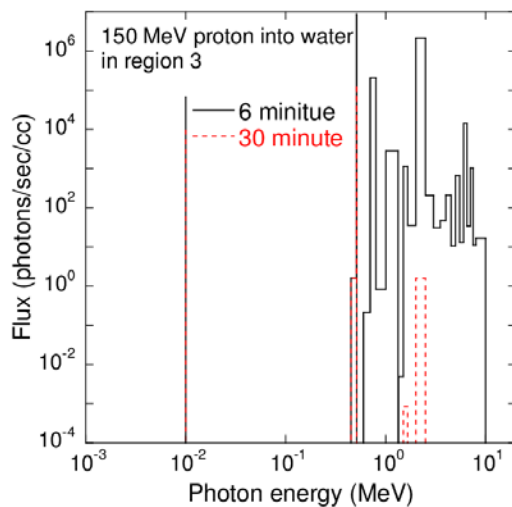


図5 照射開始から6分後及び30分後の γ 線スペクトル

図 6 に、指定した出力時間に対する領域毎の放射能、崩壊熱、線量寄与指数の出力ファイル”150pH2O.act”の、eps 出力ファイル”150pH2O.eps”を示す。ここで、DUMMY の番号は、[T-dchain]タリーの” reg=” で指定した region の順番に対応する。

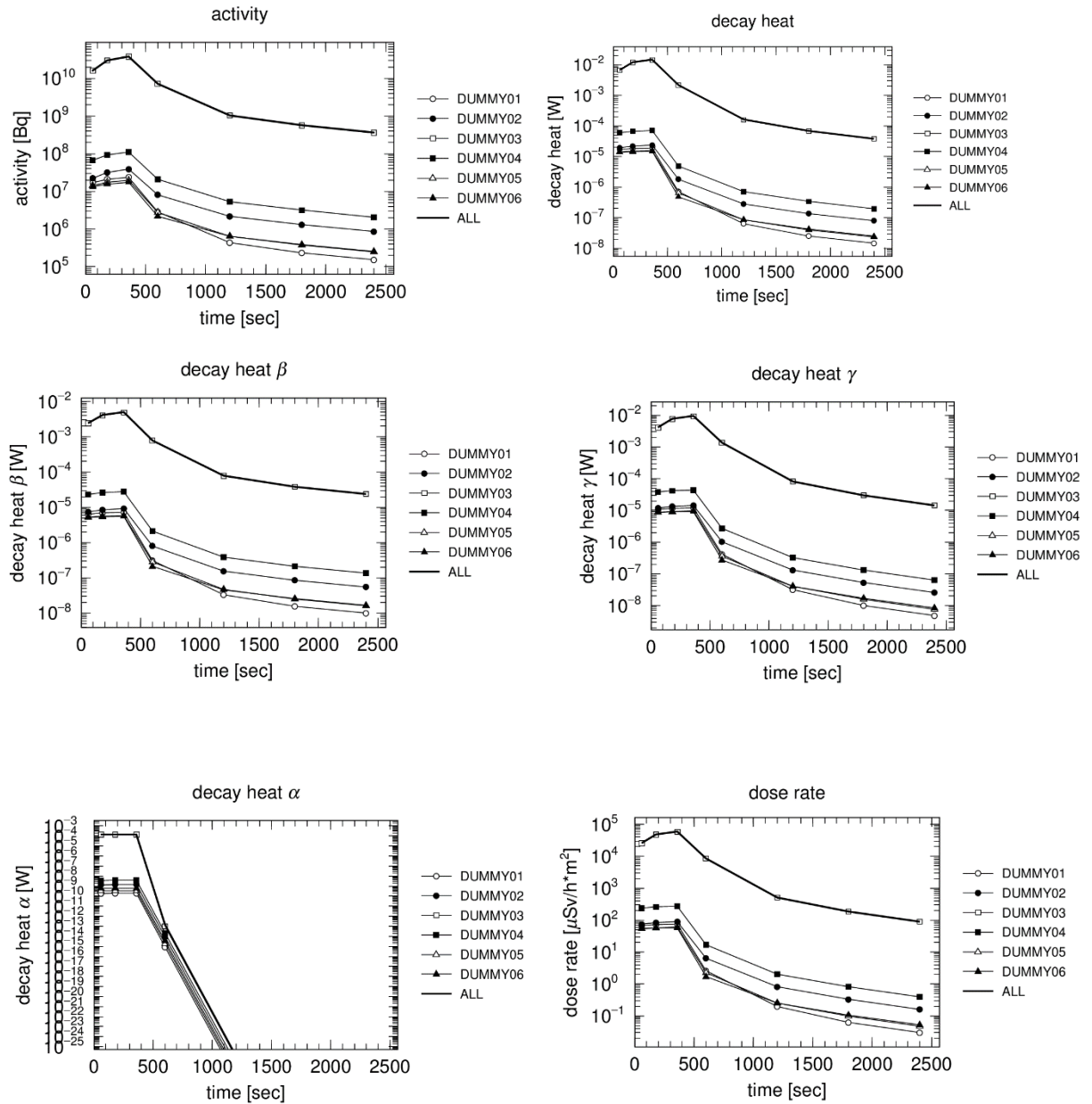


図 6 指定した出力時間に対する領域毎の放射能、崩壊熱、線量寄与指数の出力ファイル”150pH2O.act”の ANGEL による eps 出力

3. 4 DCHAIN の再計算

照射・冷却時間ステップ、出力時間、線源強度、計算に用いるデータライブラリ等を変更する場合は、DCHAIN 基本入力ファイル「150pH2O.out」の該当する場所を変更して、DCHAIN のみを実行する。手順を以下に示す。

①DCHAIN 基本入力ファイル「150pH2O.out」の変更：DCHAIN マニュアルを参照。

②DCHAIN の実行 関連する「150pH2O.out」のパラメータを以下に示す。

```
htitle = 150MeV proton into water
! --- control parameters ---
  imode =      2
  jmode =      2
! --- calculation parameters ---
  idivs =      50
  ichain =     100
  itdecs =      0
  itdecn =      0
  isomtr =      2
  ifisyd =      0
  ifisye =      0
! --- data library parameters ---
  inxslib =      2
  idcylib =      5
! --- output parameters ---
  iyild =      2
  iggrp =      3
  ibetap =      1
  acmin = 1.0000E-20
  istabl =      0
  igsdef =      1
  igsorg =      1
  iwrtchn =      1
  chrlvth = -1.0000E+00
  iwrchdt =      0
  iwrchss =      0
! --- Proton beam current and neutron flux ---
  amp = 1.0000E-04
  ebeam = 3.0000E+00
  prodnp = 1.0000E+00
```

中性子反応断面積ライブラリの指定

mA 単位に変換された線源強度

! --- irradiation time ---

itstep = 2 照射・冷却時間ステップ数
6.0000E+00 m 1.0000E+00
5.0000E+01 m 0.0000E+00 照射・冷却時間ステップ

例) 強度: 100nA→10nA
相対強度: 1.0 → 0.1

! --- output time ---

itout = 7 計算結果出力時間数
1.0000E+00 m
3.0000E+00 m
6.0000E+00 m
1.0000E+01 m
2.0000E+01 m
3.0000E+01 m
4.0000E+01 m

計算結果出力時間

! --- irradiation condition ---

inmtcf = 1
! ffnmtcf = 1.0
itdchout = 1
hhnmtcf = 150pH2O.dyld
iertdcho = 1
henmtcf = 150pH2O_err.dyld

全中性子数照射強度

領域の体積

iregon = 6

!1)HRGCMM 2)IREGS 3)ITGNCLS 4)FLUXS 5)HNFLUXS 6)VOLUMES

DUMMY01	1	2	1.2198E+07	n.flux_01	8.0000E+03
H-1	6.6893E-02				
O-16	3.3447E-02				

!1)HRGCMM 2)IREGS 3)ITGNCLS 4)FLUXS 5)HNFLUXS 6)VOLUMES

DUMMY02	2	2	8.4922E+06	n.flux_02	8.0000E+03
H-1	6.6893E-02				
O-16	3.3447E-02				

.....