

PHITSコードの公開と開発の現状

Review of the recent development and release of the PHITS code

日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究部門
環境・放射線科学ユニット 放射線防護研究グループ
佐藤 達彦

粒子・重イオン挙動解析コードPHITSは、2010年5月に公開されて以降、原子力分野のみならず工学・医学・理学の多様な分野で幅広く利用されている。本稿では、PHITSの公開と開発の現状について解説する。

1 はじめに

PHITS(Particle and Heavy Ion Transport code System) は、NMTC/JAM [1]を基に開発された、任意形状の3次元体系内における放射線挙動を解析可能な国産の汎用モンテカルロ計算コードである。原子力分野で重要となる低エネルギー中性子や光子、医療分野や宇宙開発分野で重要となる高エネルギー陽子や重イオンなど、幅広いエネ

ルギー範囲を持つ様々な放射線に適用可能なため、工学・医学・理学の多様な分野で幅広く利用されている。PHITSに組み込まれている計算モデルとその適用放射線の種類及びエネルギーを図1にまとめる。各モデルの詳細やPHITSの概要は、マニュアル [2]、レビュー論文 [3]、ホームページ [4] などに記載されておりそちらをご参照いただくとし、本稿では、PHITSの公開と開発の現状に

	中性子	その他の核子 (陽子・ π など)	重イオン	μ 粒子	電子・ 陽電子	光子
↑ エネルギー ↓ 低	200 GeV 核内カスケード模型 JAM 3.5 GeV + 蒸発模型 GEM		100 GeV/n 量子分子 動力学模型 JQMD + 蒸発模型 GEM			100 GeV 核データ ライブラリ (option)
	核内カスケード模型 Bertini + 蒸発模型 GEM				1 GeV 核データ ライブラリ (option)	20 MeV 光核反応 GEM
	20 MeV 核データ ライブラリ JENDL-4.0	1 MeV	10 MeV/n 電離損失 SPAR or ATIMA			
	10 ⁻⁶ eV	1 keV			1 keV	1 keV

図1 PHITSに組み込まれている計算モデルとその適用放射線の種類及びエネルギー。モデルや切り替えエネルギーは、PHITSのインプットファイルで変更が可能。

ついて解説する。

2 PHITS公開の現状

PHITSは、ユーザー登録制の公開コードで、国内のユーザーに対しては、2010年5月より高度情報科学技術研究機構（以下、RIST）の原子力コードセンター [5] を通じて無償で配布している（ただし、手数料12,810円が必要）。一方、海外のユーザーに対しては、2011年2月よりOECD/NEA Data Bank [6] を通じて配布している。現在、公開しているバージョンは2.24Lで、その中には、ソースプログラム、Windows用の実行ファイル、中性子用核データライブラリJENDL-4.0 [7] などが含まれている。原則、ユーザーごとの登録が必要であり、ユーザーの所属が変更になった場合は、その旨をPHITS事務局 (phits-office@jaea.go.jp) に報告いただくようお願いしている。

また、国内のユーザーに対しては、原子力コードセンターを介さずとも、PHITS講習会に参加していただくことにより手数料も無料で配布している。講習会は、年1回日本原子力研究開発機構（以下、原子力機構）で開催する定期講習会と、大学や研究所等からの依頼に基づきPHITS開発チームから講師を派遣する出張講習会がある。出張講習会は随時受け付けているので、大学など複数人でPHITSを利用する場合は、ぜひご利用いただきたい。講習会では、通常のPHITSパッケージに加えて、GUIを用いてPHITSを起動するWindowsアプリケーションPHITS Stationも配布している。

公開版PHITSは、今後、約半年に1度の頻度で更新する予定であり、登録ユーザーには、各人の希望に応じてPHITS実行形式やソースプログラムの差分ファイルが送られる。それらの情報は、随時、PHITSメーリングリストやホームページを介して発信する予定である。

3 PHITS開発の現状

PHITSの開発は、現在、原子力機構、RIST及び高エネルギー加速器研究機構（以下、KEK）が協力して実施している。原子力機構は、主に、核反応モデルの改良、ベンチマーク計算、生物影響や物質損傷への応用機能の追加などを担当するとともに、定期講習会・研究会の開催やユーザー情報管理など普及に係わる業務のとりまとめも行っている。RISTは、新機能の追加やユーザー要望対応などコーディングに関して中心的な役割を果たしている。KEKは、電磁カスケード輸送計算コードEGS5 [8] との統合を担当している。また、今年度からは、九州大学及びスウェーデン・チャルマース工科大学 (Chalmers University of Technology) が原子力機構と協力してPHITSの核反応モデル改良やベンチマーク実験などを実施する予定である。

図2に、現在進行しているPHITS開発項目の今後の見通しを示す。この図は、あくまで予定であり、全ての開発項目がこの計画通りには進まない可能性があることにご留意いただきたい。以下、各開発項目に関して、その現状と今後の展望を解説する。

3.1 核反応モデルの改良

核反応モデルは、放射線挙動解析計算コードの「肝」とも言うべき部分であり、この精度が計算コード全体の優劣を決定すると言っても過言ではない。PHITSは、量子分子動力学模型に基づいて全ての核子間相互作用を解析する核反応モデルJQMD [9] や、核内カスケード模型に基づいて数GeV以上の共鳴状態を丁寧に再現する核反応モデルJAM [10] を世界に先駆けて導入したため、重イオン入射や高エネルギー核子入射核反応に対する計算精度は良い。一方、数10MeVから数GeVの核子入射に対しては、古いタイプの核内カスケード模型Bertiniに改良を加えたモデル

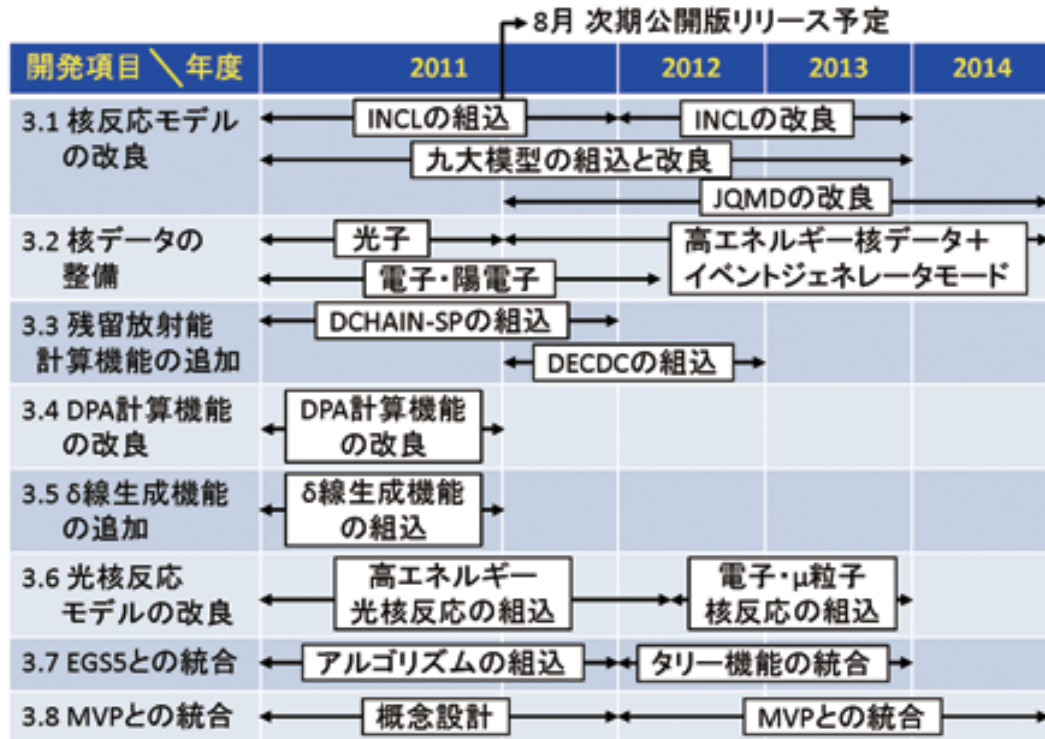


図2 現在進行しているPHITS開発項目の今後の見通し。全ての開発項目がこの計画通りには進まない可能性があることにご留意いただきたい。

[11] を初期設定として採用しているため、その計算精度は最新のモデルと比較してあまり良くないことが報告されている [12]。

そこで、その中間領域エネルギーに対する最新の核内カスケードモデルをPHITSに導入する計画が進められている。その計画では、2つのモデルの導入が独立して進められており、1つはLiege大学が中心となって開発しているINCL [13] で、もう1つは九州大学で開発しているモデル [14] である。どちらも、近年注目されているコアレスセンスモデルを組み込んでおり、従来のカスケードモデルでは全く再現できなかった高エネルギーフラグメント生成を再現することができる。また、JQMDについても、高エネルギーフラグメント生成が考慮できるよう、九州大学と原子力機構でその改良を検討中である。ただし、これらの改良は、計算条件によってはその精度の低下を招く恐れもあるので、改良版の公開までには、まだ年単位での時間を要するもの

と思われる。

3.2 核データライブラリ(ACE形式)の整備

上記核反応モデルは、いずれも原子核を核子の集合体として扱うため、原子核全体との散乱や吸収が問題となる20MeV以下の中性子入射核反応を模擬することはできない。したがって、20MeV以下の中性子の挙動を解析するためには、各核種の散乱断面積などをまとめた評価済核データライブラリを利用する必要がある。また、PHITSを用いて電子や光子の挙動を解析する際にも、同様の核データライブラリが不可欠となる。

中性子に対する核データライブラリとして、原子力機構が中心となって整備しているJENDLや米国が整備しているENDFなどがあり、それらの数値データはWebサイトより自由にダウンロードすることができる。しかし、それらのデータは重心系で表現されており、核データライブラリをPHITSで使うため

には、それを実験室系に対する形式（通称「ACE形式」）に変換する必要がある。ACE形式での核データライブラリはWeb上では公開されておらず、現在配布しているPHITS（バージョン2.24L）には、ACE形式に変換した中性子用核データライブラリJENDL-4.0 [6] がパッケージされている。一方、光子・電子に対するライブラリは含まれておらず、PHITSで光子・電子の挙動を解析するためには、ユーザーがMCNP用ライブラリに含まれるmcplib04（光子用）やe103（電子・陽電子用）などを別途入手する必要がある。ただし、この方針ではユーザーに余計な負担を強いてしまうため、2011年8月にリリース予定の次期公開版には、JENDL-4.0を基に作成したACE形式の光子用ライブラリを組み込む予定である。また、電子用ライブラリに関して、現在、その整備を進めており、1年以内の公開を目指している。

一方、入射エネルギーが20MeV以上であっても、ターゲットが軽い核種の場合は、核構造などの影響が顕著となるため核反応モデルが機能しない。PHITSでは、遮へい設計で重要となるいくつかの軽核に対しては独自のモデル [15] を用いて精度よく核反応を模擬することができるが、汎用的な計算の場合は、原子力機構などで開発されているJENDL高エネルギーファイル [16] や米国で開発されているLA150 [17] などが有用となる。ACE形式に変換した2007年版JENDL高エネルギーファイルはRISTより入手可能であるが、最新版の入手に関しては、原子力機構核データ評価研究グループに直接お問い合わせいただきたい。なお、これら高エネルギー核データライブラリを用いた場合、PHITSの特徴の1つであるイベントジェネレータモードを使用することができない。これは、核データが抱える本質的な問題であり、現在、その問題を解決可能な新たなイベントジェネレータモードの概念設計を行っているが、核反応モデ

ルの改良と同じく、その開発には年単位での時間を要するものと思われる。

3.3 残留放射能計算機能の追加

原子炉や加速器の放射線設計では、作業環境における被ばく線量のみならず、ターゲットや遮へい体など、施設の放射化量を評価する必要がある。その際、核崩壊に伴う放射化量の時間変化を評価する必要があるが、現在のPHITSは、照射直後の放射化量のみ計算可能で、その減衰を評価することはできない。そこで、放射能の時間変化を計算可能なソフトウェアDCHAIN-SP [18] と最新の核崩壊データベースDECDC [19] をPHITSに組み込み、放射化量の時間変化を直接計算できるようにPHITSを改良中である。

3.4 DPA計算機能の改良

PHITSには、放射線による材料損傷の指標となるDPA (Damage per atom、1原子当たりのはじき出し数) を計算する機能がある。しかし、従来のPHITSに組み込まれていたDPA計算機能は、クーロン散乱によるはじき出しを正確に考慮できなかったため、重イオ

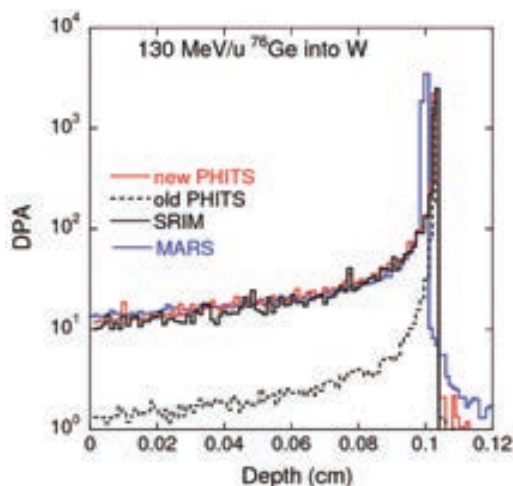


図3 DPA計算手法改良前後のPHITS、SRIM及びMARSで計算した130MeV/nのGeイオン入射に対するタンゲステンターゲット内でのDPA深さ分布。

ン照射により引き起こされるダメージを極端に過小評価してしまう傾向にあった。そこで、クーロン散乱の効果を適切に考慮できるようPHITSを改良し、重イオン照射に対しても適切にDPAを計算できるようにした [20]。例として、改良前後のPHITSで計算した重イオン入射に対するDPAの深さ分布を図3に示す。図より、改良後のPHITSの方が、改良前のPHITSよりも遙かに大きいDPAを与え、他のコード (SRIM [21]、MARS [22]) の結果とよく一致することが分かる。この改良は既に完了しており、改良したDPA計算機能は次期公開版に組み込まれる予定である。

3.5 δ 線生成機能の追加

荷電粒子は、常に膨大な数の δ 線 (ノックアウト電子) をはじき飛ばしながら物質中を進行している。 δ 線のエネルギーは、最大でも荷電粒子エネルギーの1/1000程度でありそれほど大きくはないが、飛跡中心から離れた点にエネルギーを付与するため、微少な領域内でのエネルギー付与を計算する場合には、その挙動解析が必要となる。PHITSでは、マイクロドジメトリ機能 ([t-sed] タリー) を導入して微少空間内でのエネルギー付

与を計算可能としているが、[t-sed] タリーは、対象が無限媒質の水に限定されており、エネルギー付与の確率的な分布しか計算できない [23]。そこで、ある一定エネルギー以上の δ 線の発生を考慮できるようPHITSを改良し、エネルギー付与の空間的な分布をより精度よく計算可能とした。例として、 δ 線生成の有無による付与エネルギー分布の違いを図4に示す。この改良は既に完了しており、 δ 線生成機能は次期公開版に組み込まれる予定である。

3.6 光核反応モデルの改良

中性子や陽子だけでなく光子も核反応を引き起こすことができるが、現在のPHITSは、入射エネルギーが約20MeV以下で支配的となる巨大共鳴のみ考慮可能で、より高いエネルギーの光核反応を模擬することができない。そこで、準重陽子共鳴などより高いエネルギーの光子が引き起こす反応メカニズムをPHITSの核反応モデルに組み込む計画が進められている。また、電子やミュオンも、原子核の近傍で仮想光子を放出することにより間接的に核反応を引き起こすことがある。これらのメカニズムに関しても、光核反応モ

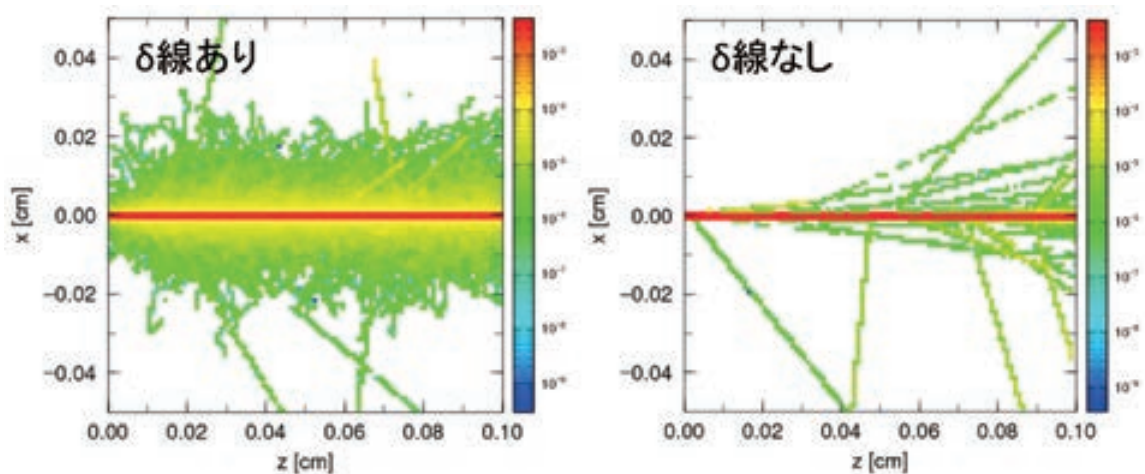


図4 立方体の水中 (1 mm³) に100MeV陽子が入射したときのエネルギー付与分布。 δ 線生成を考慮した結果 (左図) の方が、考慮しなかった結果 (右図) と比較して飛跡周辺に幅広くエネルギーを付与することが分かる。

デルの改良後、順次、PHITSに組み込んでいく予定である。

3.7 電磁カスケード輸送計算コードEGSとの統合

KEKが中心となって開発を進めているEGS5 [8] は、幅広いエネルギー範囲の光子・電子・陽電子の挙動を精度よく再現可能なため、国内外で最も利用されている電磁カスケード計算コードの1つである。一方、PHITSに組み込まれている電磁カスケード計算モデルは、3.2で説明したように核データライブラリを基本としており、その適用エネルギー範囲には限界がある(例えば、電子・陽電子に対しては1 GeVが上限)。そこで、EGS5とPHITSを統合する計画が、数年前より進められている。まずは、2つのコード体系を維持したままの統合を目指していたが、タリー結果の統合などに問題があったため、現在は、EGS5の電磁カスケード挙動解析エンジンをPHITSに組み込む方針でコーディングを進めている。

3.8 臨界計算が可能な計算コードMVPとの統合

原子炉の設計には臨界計算が不可欠となるが、現在のPHITSにはその機能は組み込まれていない。そこで、低エネルギー中性子・光子を対象とした臨界計算機能を有するモンテカルロ放射線挙動解析コードMVP [24] とPHITSを統合し、臨界計算も可能な国産の汎用モンテカルロ計算コードを開発する計画が進められている。現在、その概念設計を行っており、数年後の完成を目標としている。その詳細は、本誌別稿「原子力標準ソフトウェア開発グループの設立について」を参照いただきたい。

4 まとめ

PHITSは、昨年5月に公開して以降、国内

外で既に300名を超えるユーザーが登録し利用している。これは、ほぼ1日に1人のペースでPHITSユーザーが増えていることを意味しており、原子力コードとしては極めて異例のスピードである。この急激なユーザーの増加は、PHITSが原子力分野のみならず、医学や理学の幅広い分野で利用されているためであると考えられる。それに伴い、原子力分野の研究者を対象として書かれている現在のマニュアルの大幅な改訂など、新たな要望がPHITS事務局に数多く寄せられている。PHITS開発チームのマンパワーの限界から、それら全ての要望に対して早急に対応することはできないが、できるだけユーザーのニーズに合った改良をしていきたいと考えているので、改良の要望やバグ情報などがあれば、引き続き積極的にPHITS事務局まで連絡いただければお願いしたい。PHITS開発チーム一同、ユーザー満足度No.1コードを目指し、ユーザーとともにコードを成長させていきたいと考えているので、今後とも末永くPHITSの発展にご協力いただければ幸いです。

謝辞

本稿は、PHITS開発チームメンバーであるRISTの仁井田浩二氏、KEKの岩瀬広氏、原子力機構の松田規宏氏、岩元洋介氏、橋本慎太郎氏、野田秀作氏、太田周也氏、中島宏氏、坂本幸夫氏、深堀智生氏、千葉敏氏の成果や助言をもとに作成したものであり、ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] K. Niita et al., JAERI-Data/Code 2001-007 (2001)
- [2] K. Niita et al., JAEA-Data/Code 2010-022 (2010)
- [3] K. Niita et al., Prog. Nucl. Sci. Technol. 1, 1-6, (2011)

- [4] <http://phita.jaea.go.jp/>
- [5] <http://www.rist.or.jp/nucis/>
- [6] <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1857/>
- [7] K. Shibata et al., J. Nucl. Sci. Technol. 48, 1-30 (2011)
- [8] <http://rcwww.kek.jp/research/egs/>
- [9] K. Niita et al., Phys. Rev. C52, 2620 (1995)
- [10] Y. Nara et al., Phys. Rev. C61, 024901 (1990)
- [11] H. Takada et al., JAERI-Data/Code 98-005 (1998).
- [12] 岩瀬広, 核データニュース, 96, 9-17 (2010)
- [13] A. Boudard et al., Phys. Rev. C66, 044615 (2002)
- [14] H. Iwamoto et al., Prog. Nucl. Sci. Technol. 1, 65-68 (2011)
- [15] S. Furihata et al., JAERI-Conf 2001-006, 236-241 (2001)
- [16] T. Fukahori et al., J. Nucl. Sci. Technol. suppl. 2, 25-30 (2002)
- [17] S. G. Mashnik et al., LANL Report LA-UR-00-1067 (2000)
- [18] T. Kai et al., JAERI-Data/Code 2001-016 (2001)
- [19] A. Endo et al., JAERI 1347 (2005)
- [20] Y. Iwamoto et al., 4th high power targetry workshop, Malmo, Sweden, May 2-6 (2011)
- [21] <http://www.srim.org/>
- [22] <http://www-ap.fnal.gov/MARS/>
- [23] T. Sato et al., Radiat. Res. 171, 107-117 (2009)
- [24] Y. Nagaya et al., JAERI 1348 (2005)