電子光子モンテカルロ輸送計算コードEGS5

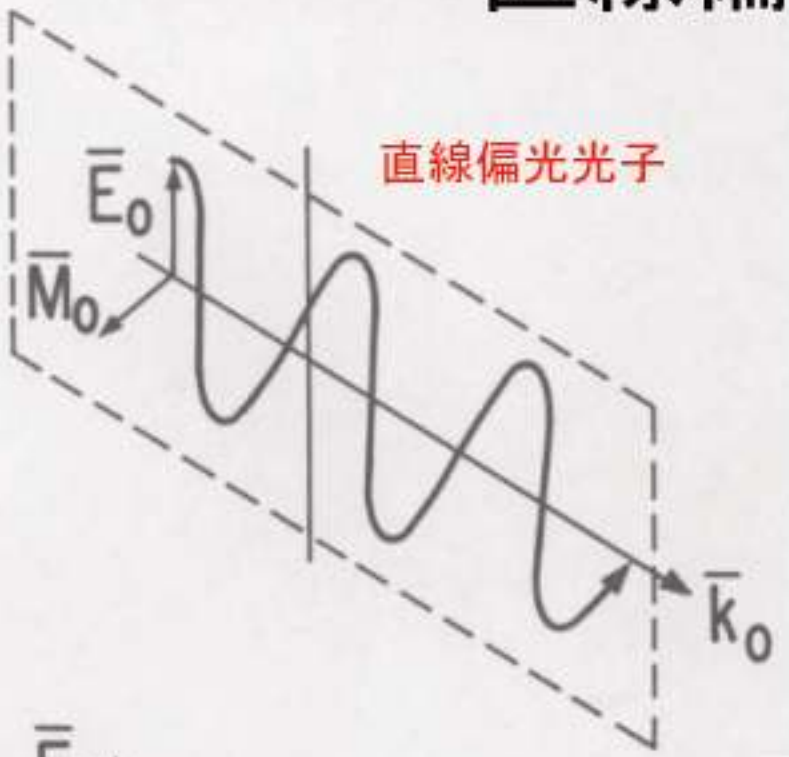
波戸 芳仁 (KEK)

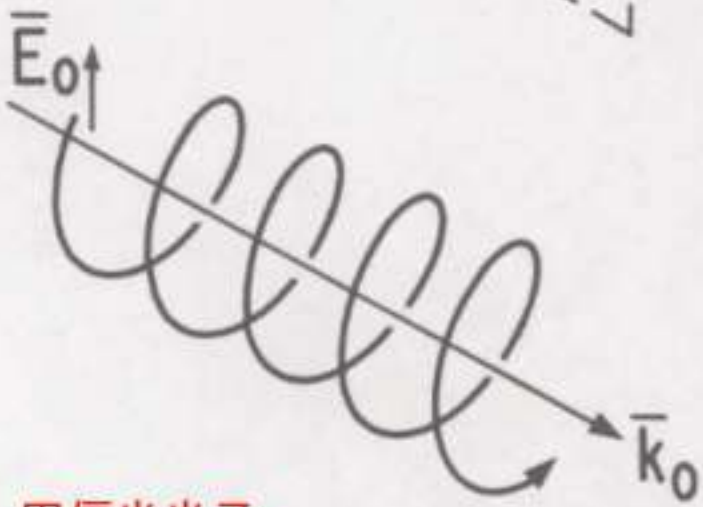
EGS5の光子輸送物理モデル

1. 光子散乱
   1. 直線偏光光子散乱
   2. コンプトン散乱におけるドップラー広がりと束縛
   3. レイリー散乱における干渉効果
2. 光子吸収と励起原子の緩和
   1. 蛍光X線 (10 K-X 線, 20 L-X 線)
   2. オージェ電子 (K, L 殻)
   3. 化合物/混合物からのX線とオージェ電子
      - 副殻光電効果断面積
3. 電子対生成・光電効果
   1. PHOTX データベースの使用

直線偏光光子の散乱

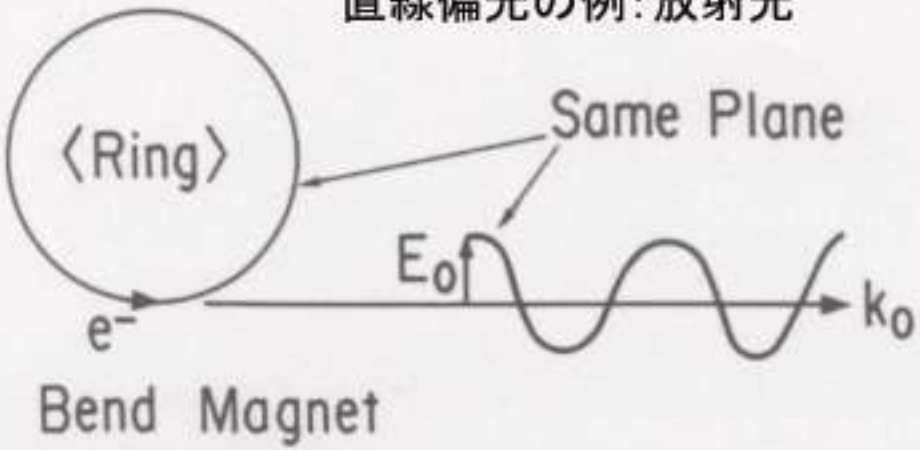
直線偏光と円偏光



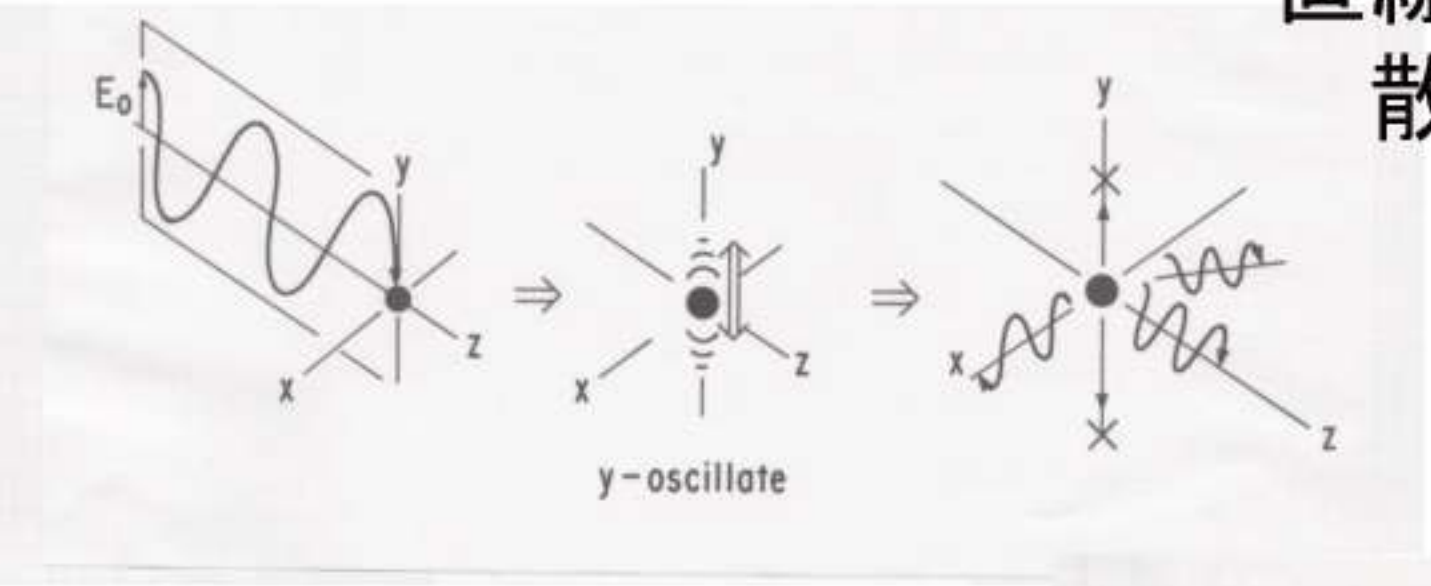


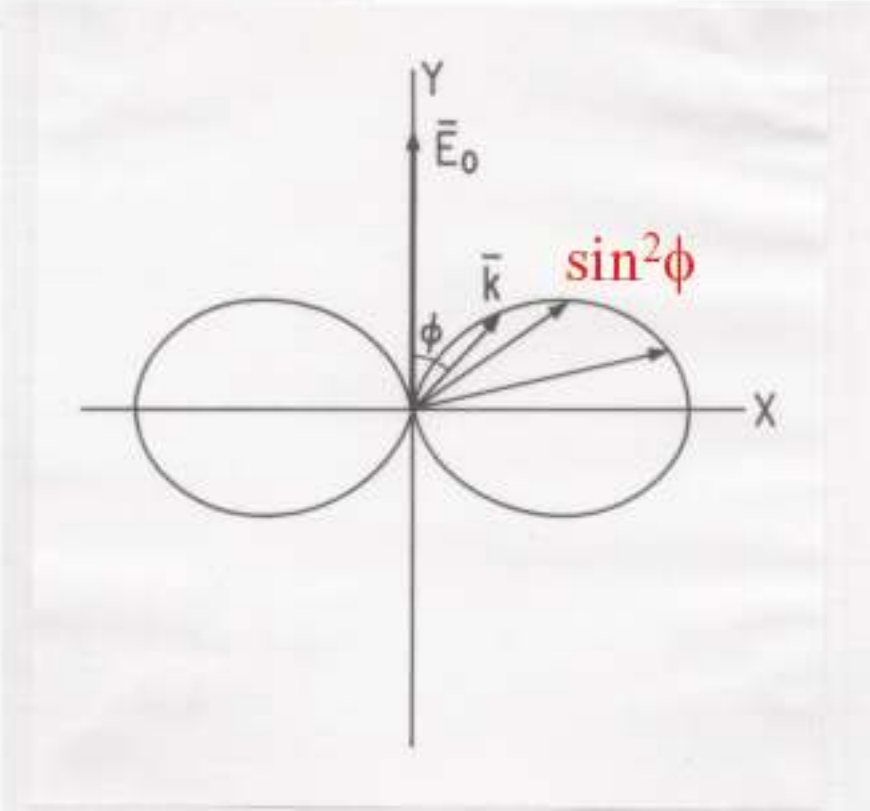
円偏光光子

直線偏光の例：放射光



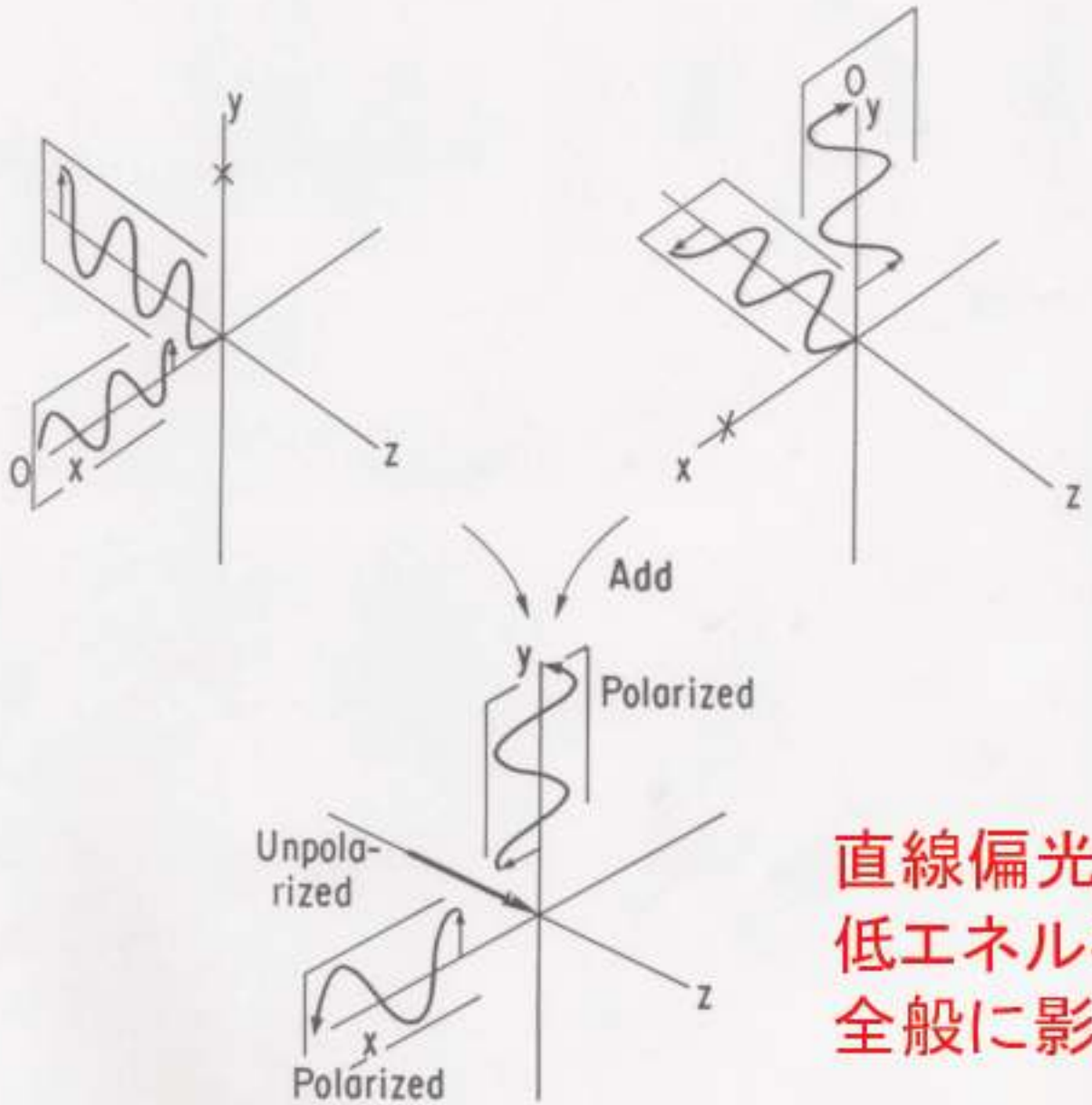
直線偏光光子散乱強度





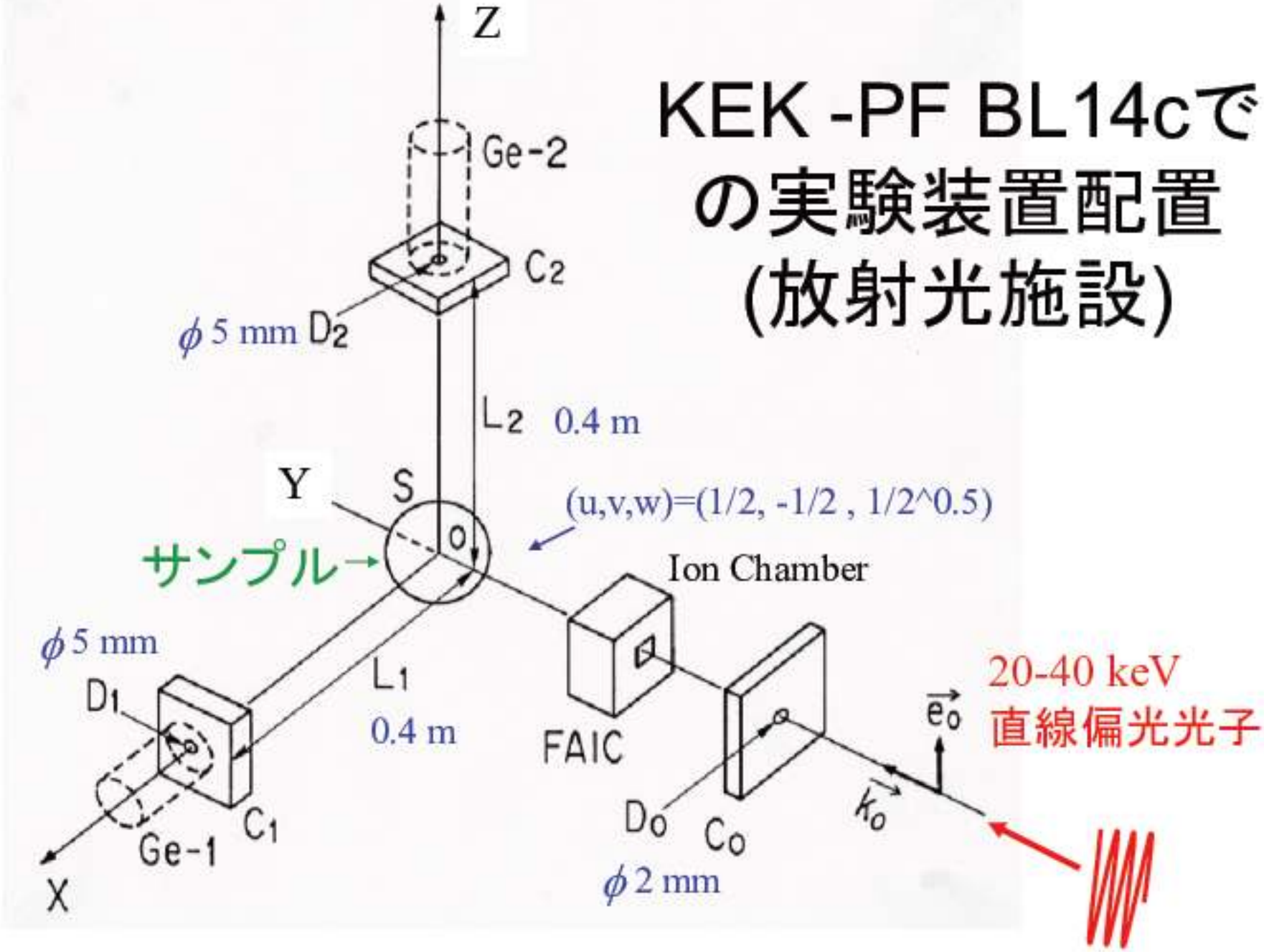
方位角依存
(θ=90°)

散乱における直線偏光の発生

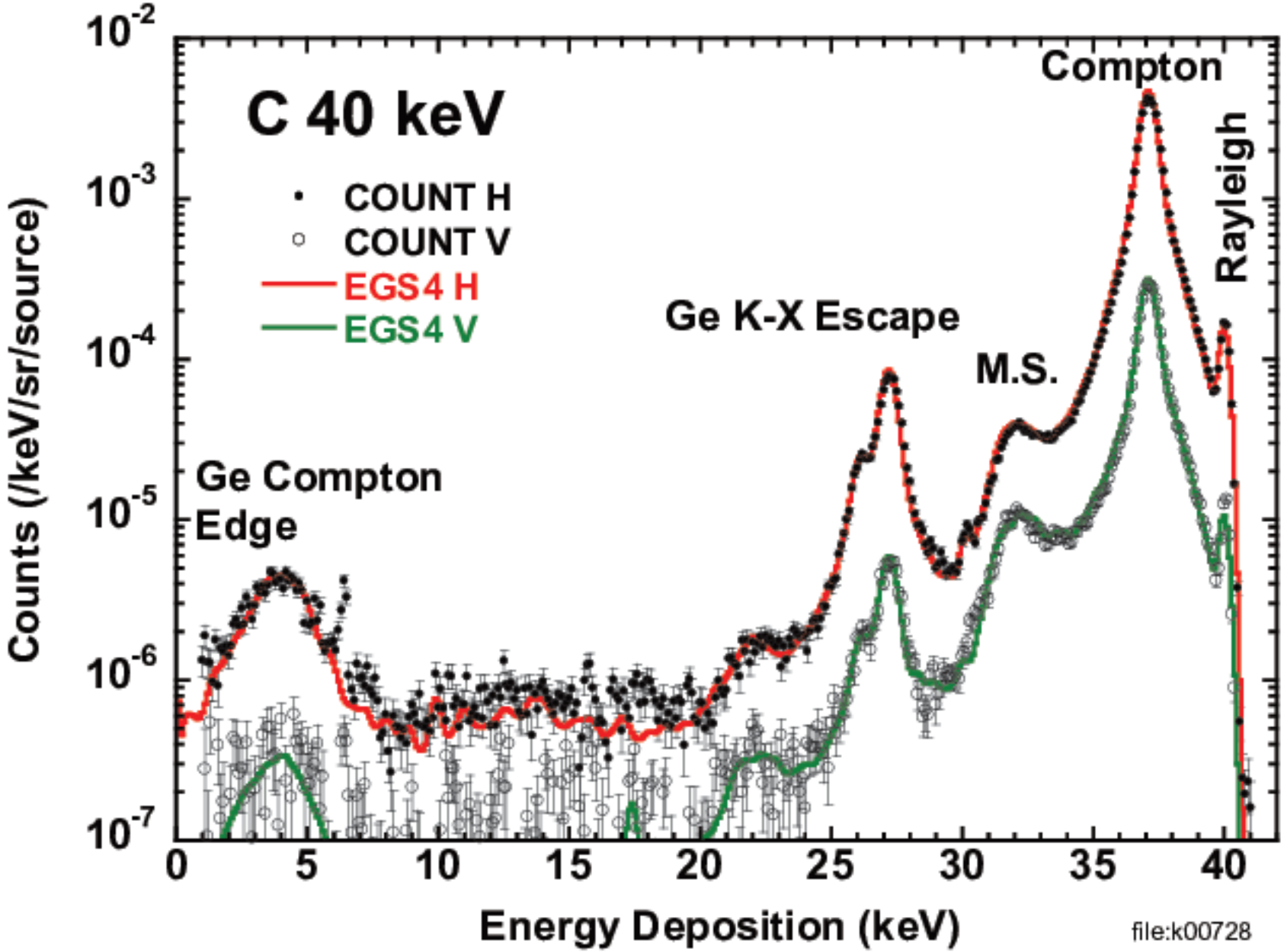


直線偏光光子の散乱は
低エネルギー光子輸送
全般に影響する。

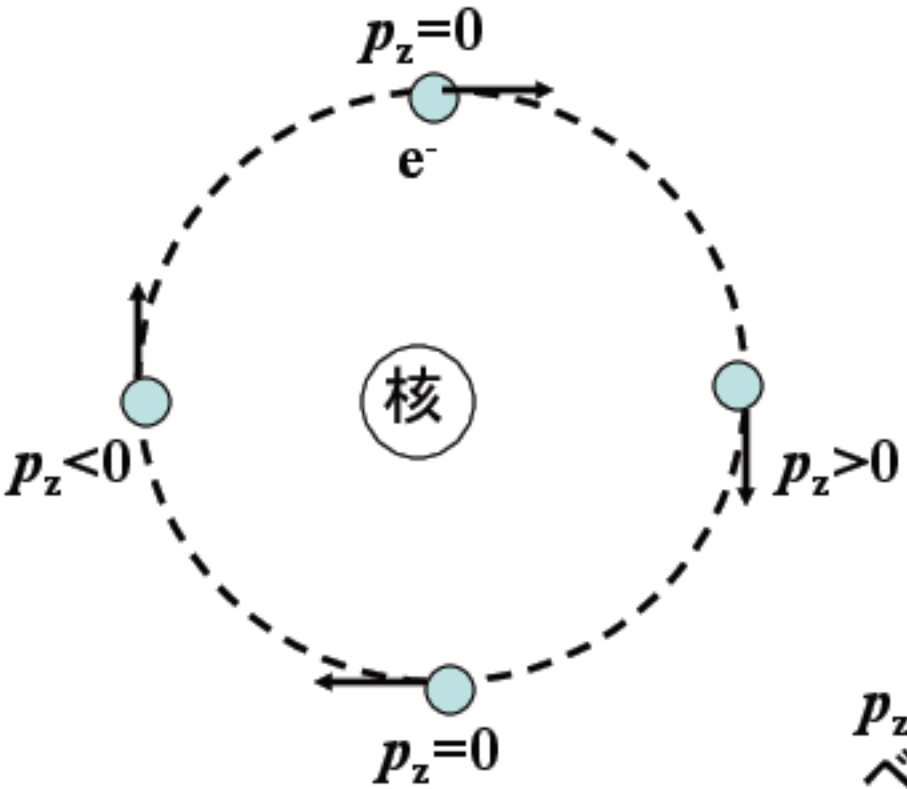
KEK -PF BL14cでの実験装置配置(放射光施設)



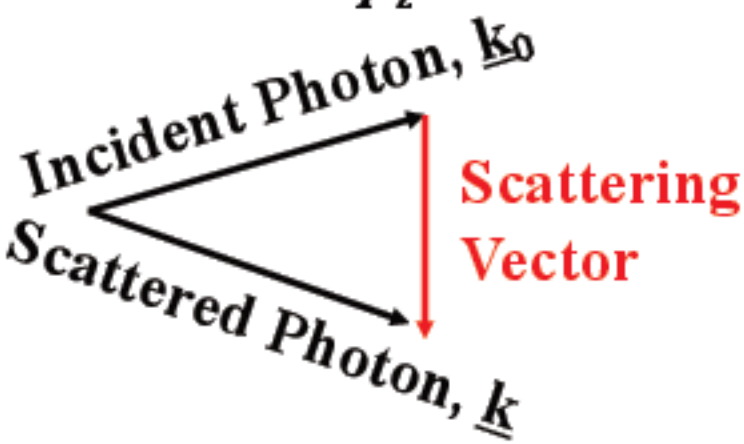
C, 40 keV (EGS4+LP+DB=EGS5)



古典論的モデルによるドップラー広がり

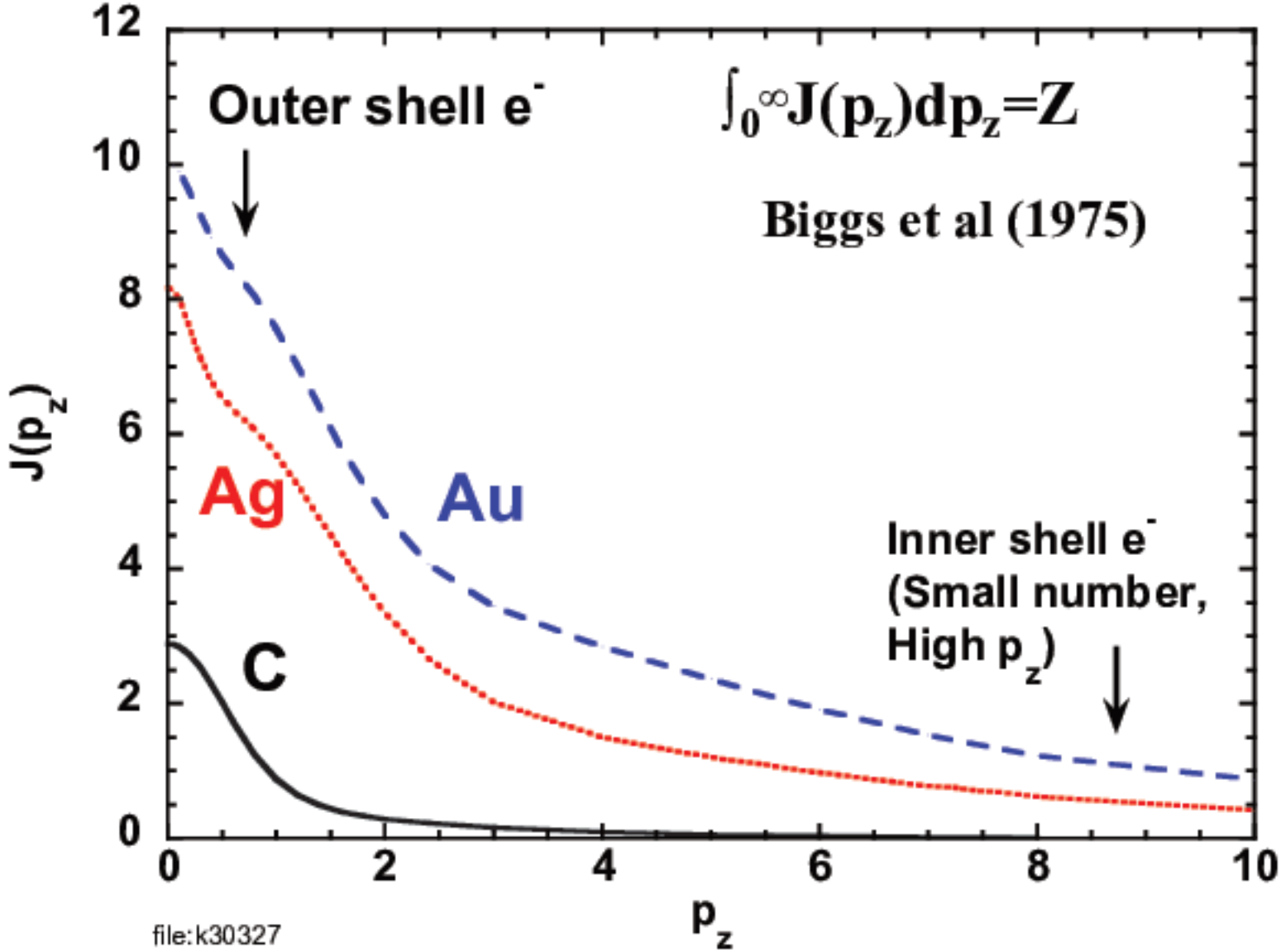


$p_z=0 \rightarrow k=k_c$
$p_z>0 \rightarrow k>k_c$
$p_z<0 \rightarrow k<k_c$

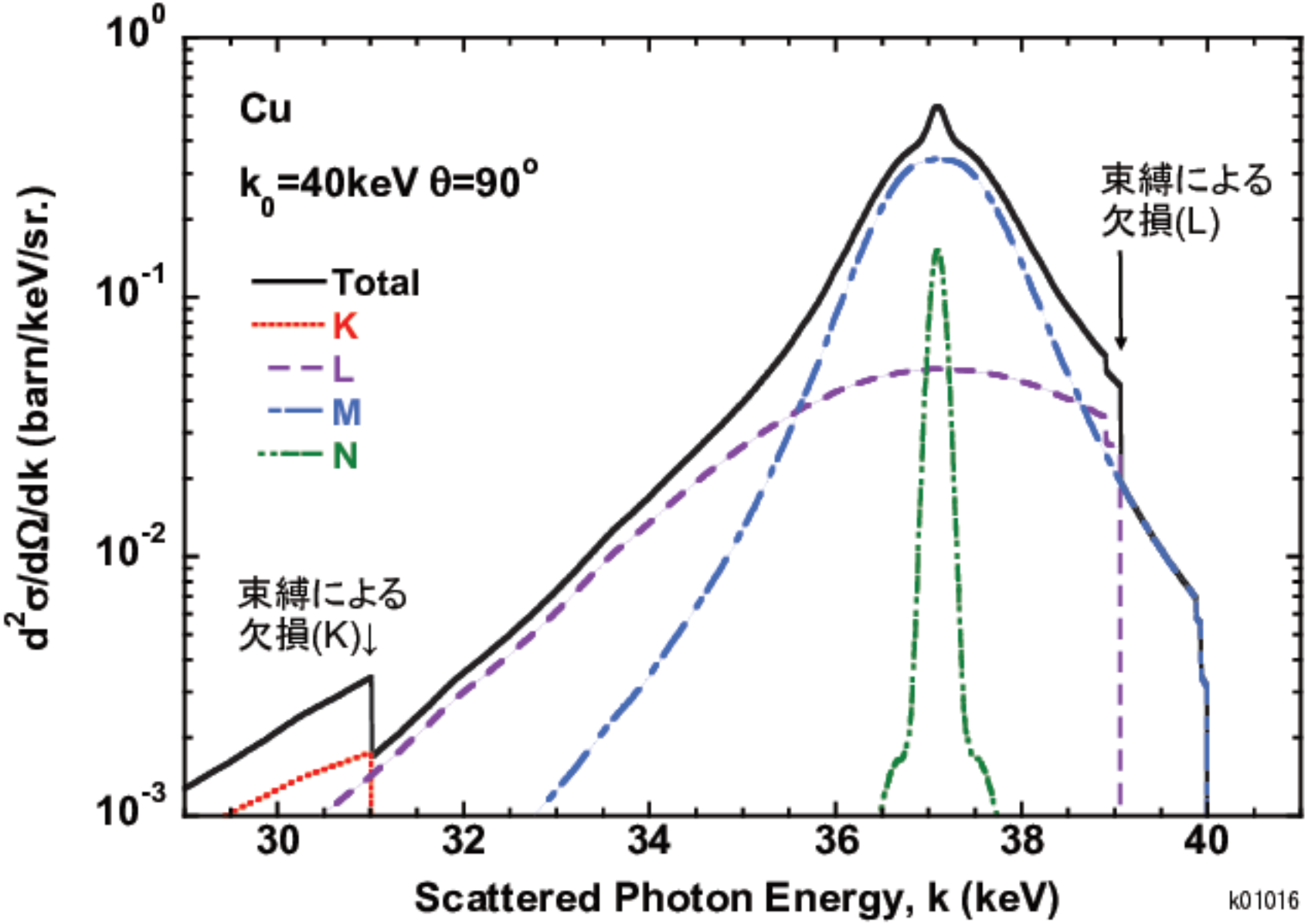


p_z: 電子運動量の光子散乱ベクトルへの射影
k: 散乱光子エネルギー
k_c: 静止した電子によるコンプトン散乱光子エネルギー

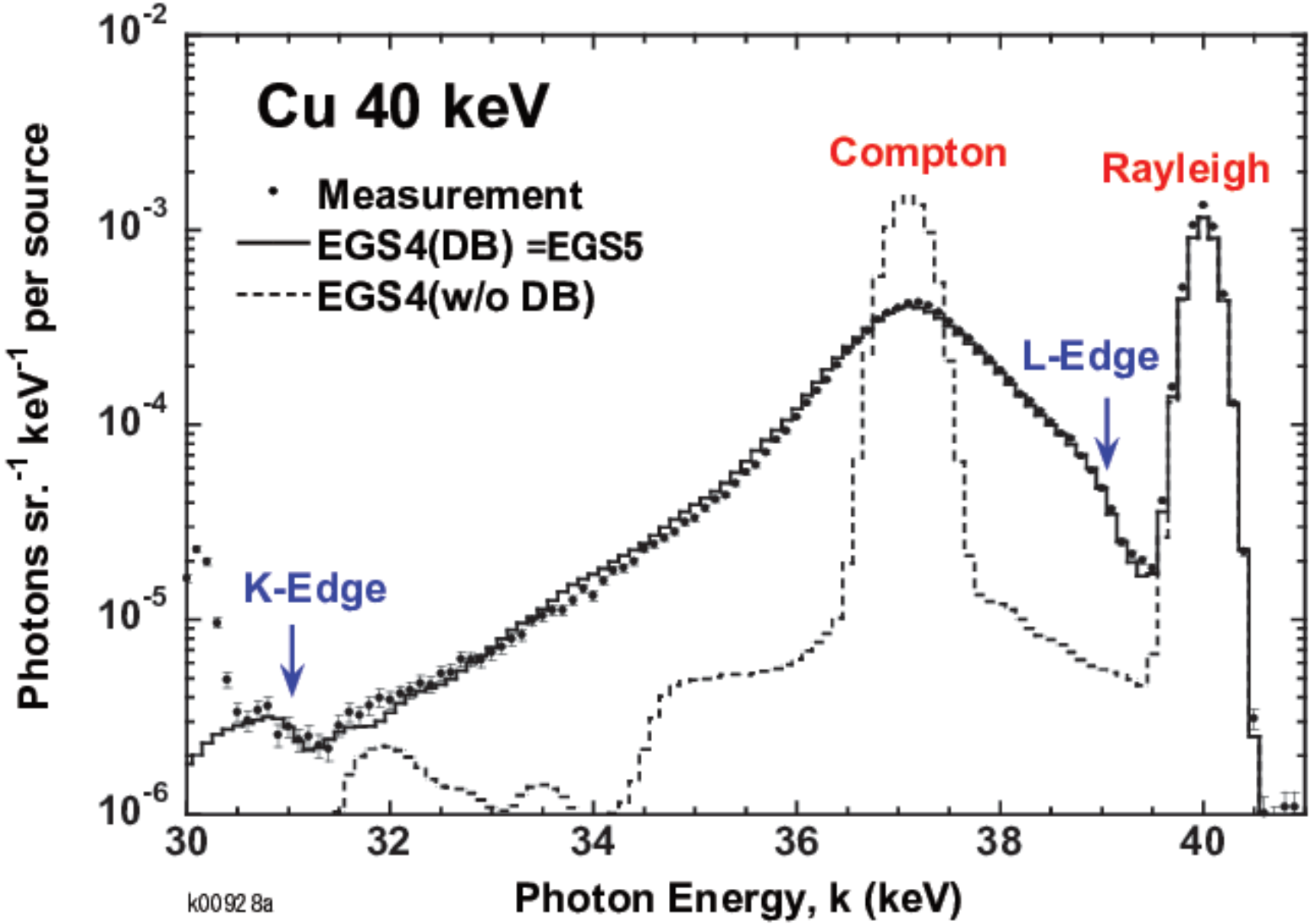
コンプトンプロファイルの例



コンプトン散乱の２重微分断面積

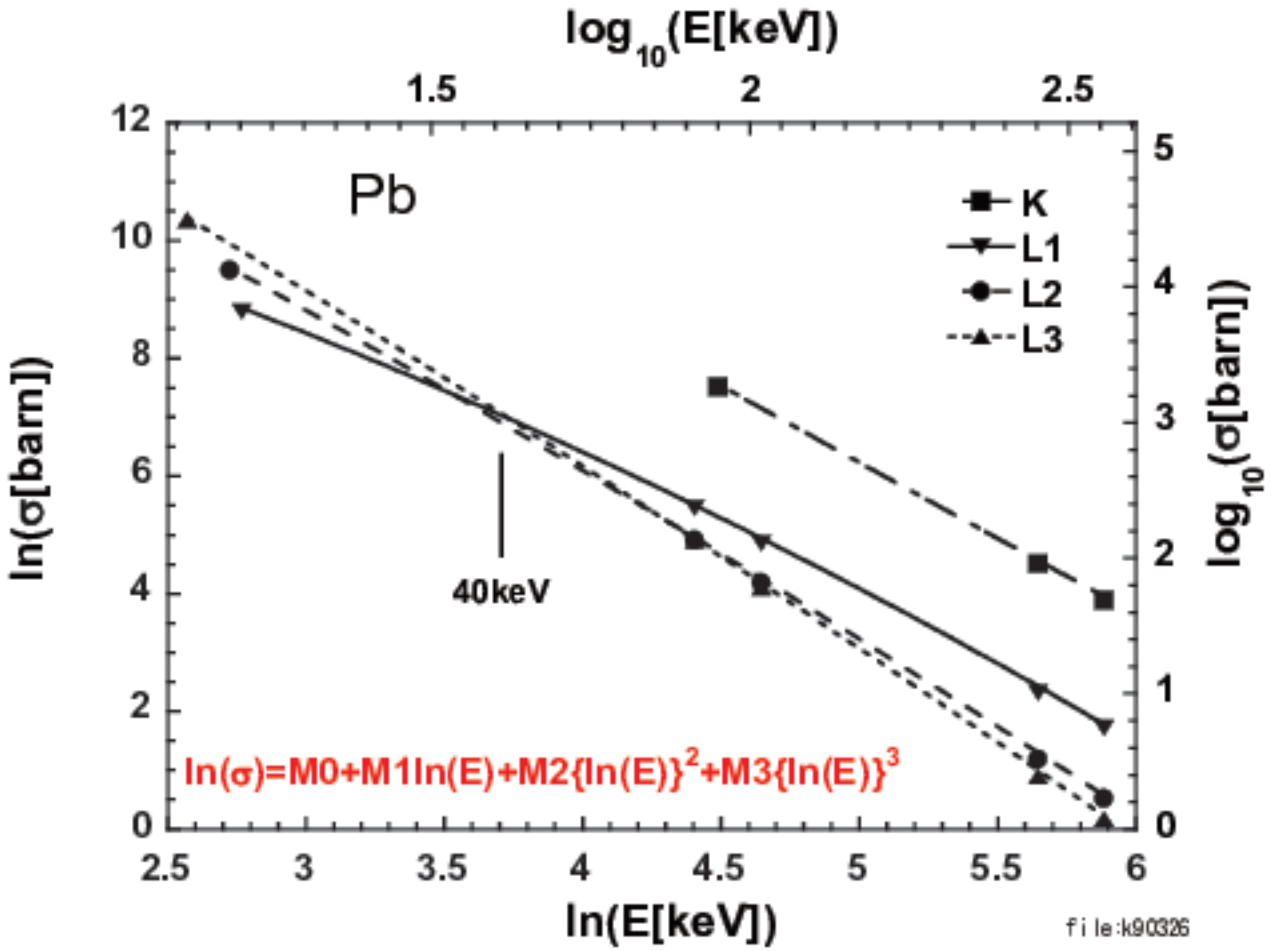


Cu,40 keV(EGS4+LP+DB=EGS5)

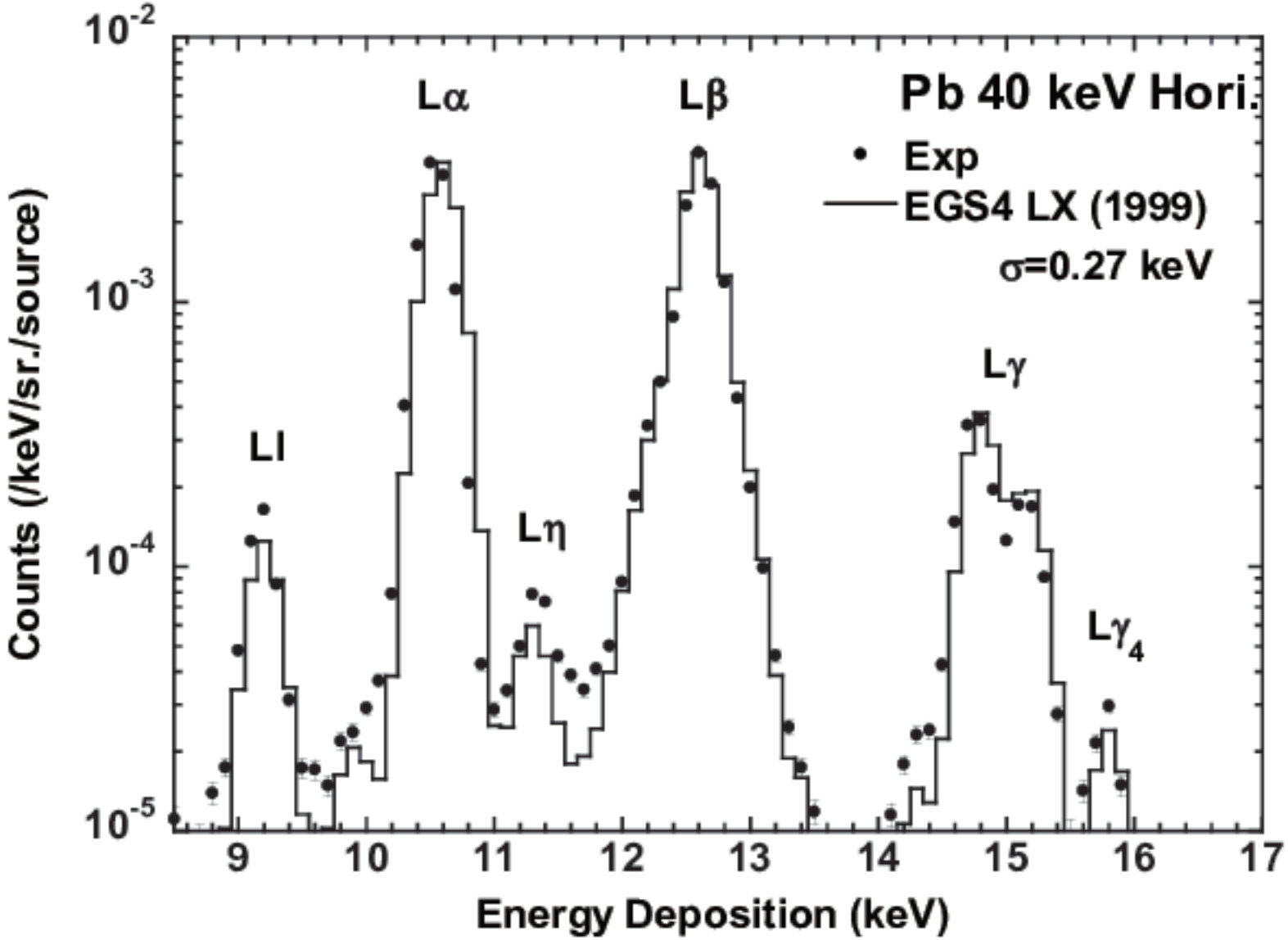


L-X線を計算のための副殻光電断面積の扱い

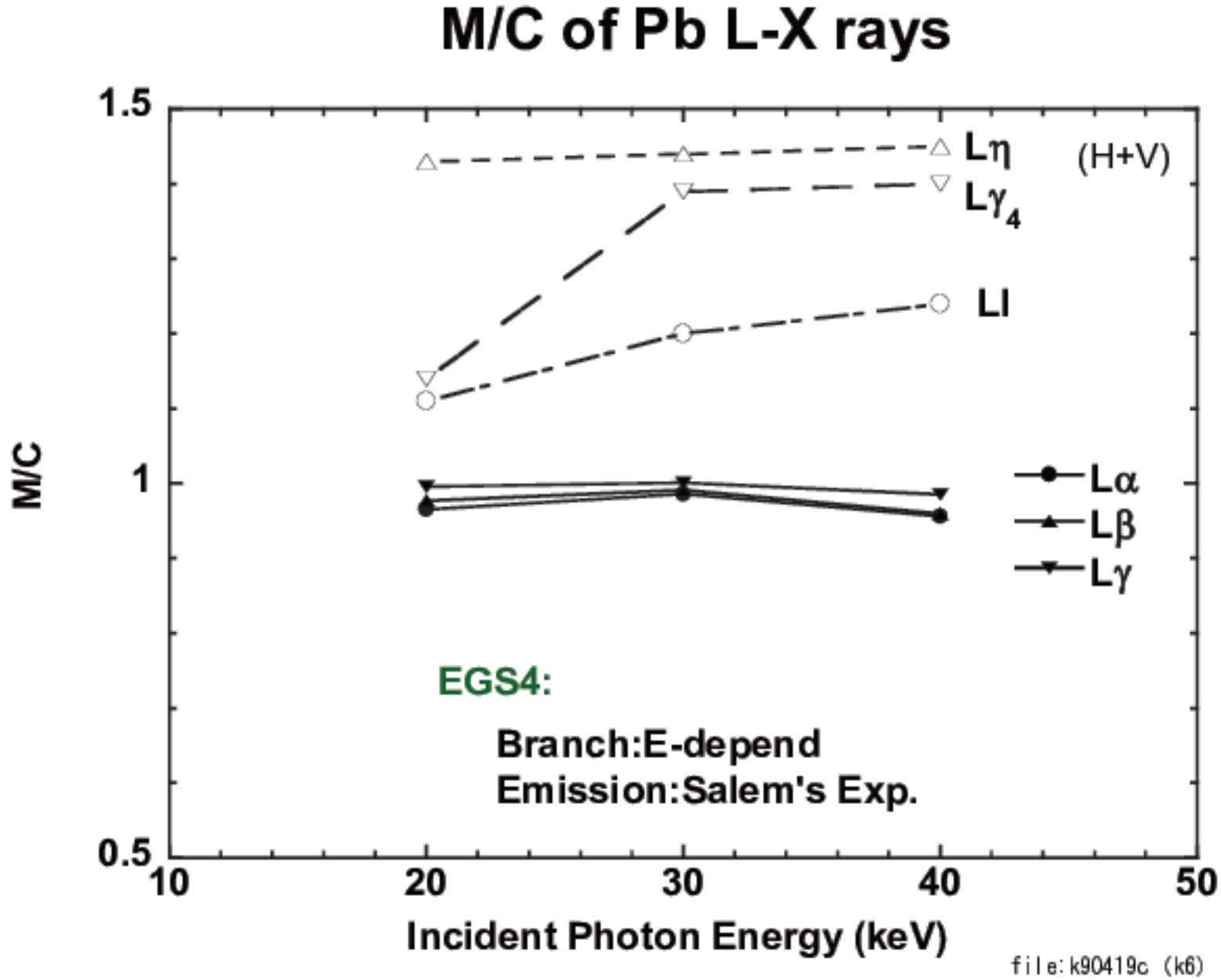
K, L1, L2, L3, 他副殻の断面積のlog-logフィット
→化合物中の各元素の光電断面積の区別
→化合物からのX線とオージェ電子発生



鉛のＬＸ線スペクトルの測定と計算の比較



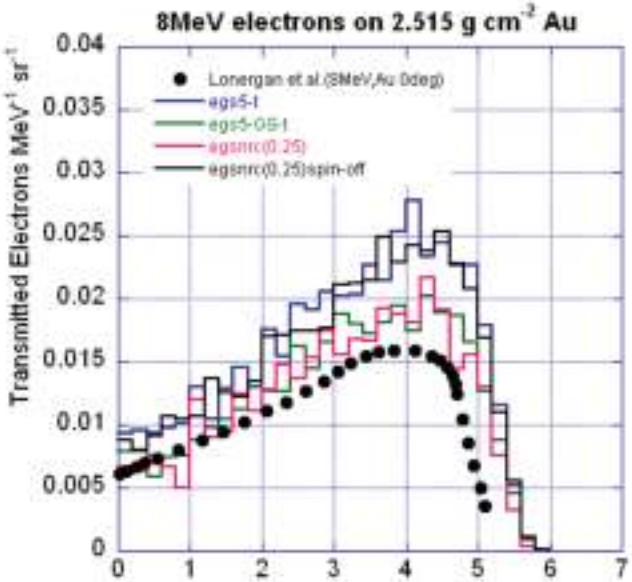
鉛のＬＸ線強度のM/C

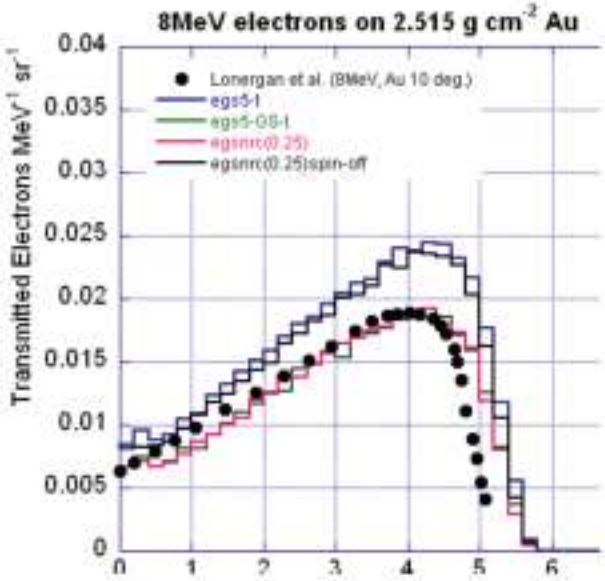

M/C of Pb L-X rays
1.5
1
0.5
M/C
10
20
30
40
50
Incident Photon Energy (keV)
Lη
(H+V)
Lγ4
Ll
Lα
Lβ
Lγ
EGS4:
Branch:E-depend
Emission:Salem's Exp.
file:k90419c (k6)

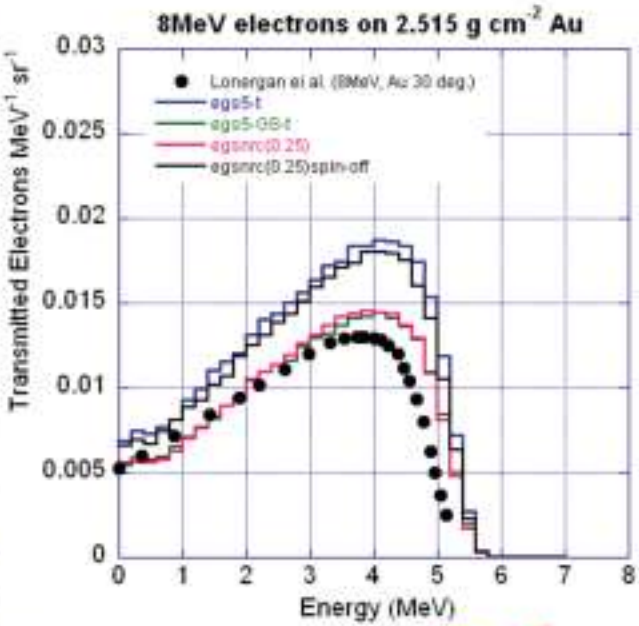
EGS5の電子輸送物理モデル

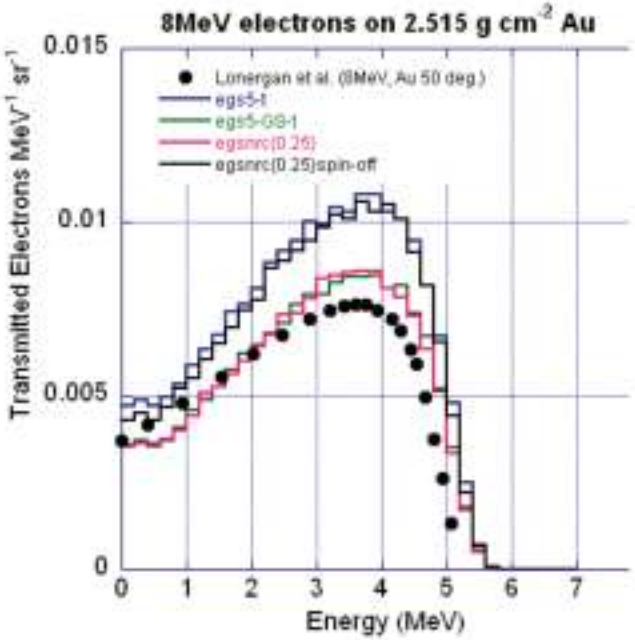
1. 原子核による電子の散乱
   1. Rutherford散乱(原子核の電場のみ考慮, スピンを無視)
   2. Mott散乱(原子核のスピンの影響を考慮)
2. 多重散乱の計算方法
   1. Moliere理論: 散乱角を換算角(E,Z,t非依存)で扱う…簡便
   2. Goudsmit-Saunderson理論 (散乱断面積をルジャンドル展開)
3. 電子輸送の実装方法
   1. 多重散乱ヒンジ
   2. エネルギー損失ヒンジ
   3. 特性長さ
4. その他
   1. 電子-電子衝突におけるK-X線発生(電子衝突電離)
   2. 制動放射におけるLPM効果と誘電抑制

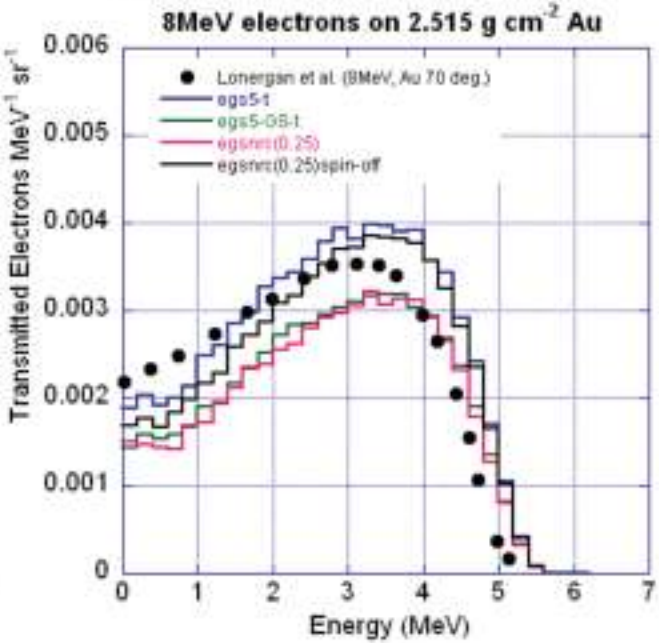
電子輸送ベンチマーク例:平板透過・角度微分エネルギースペクトル

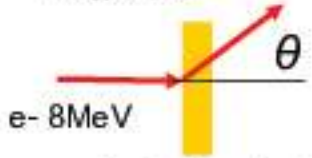








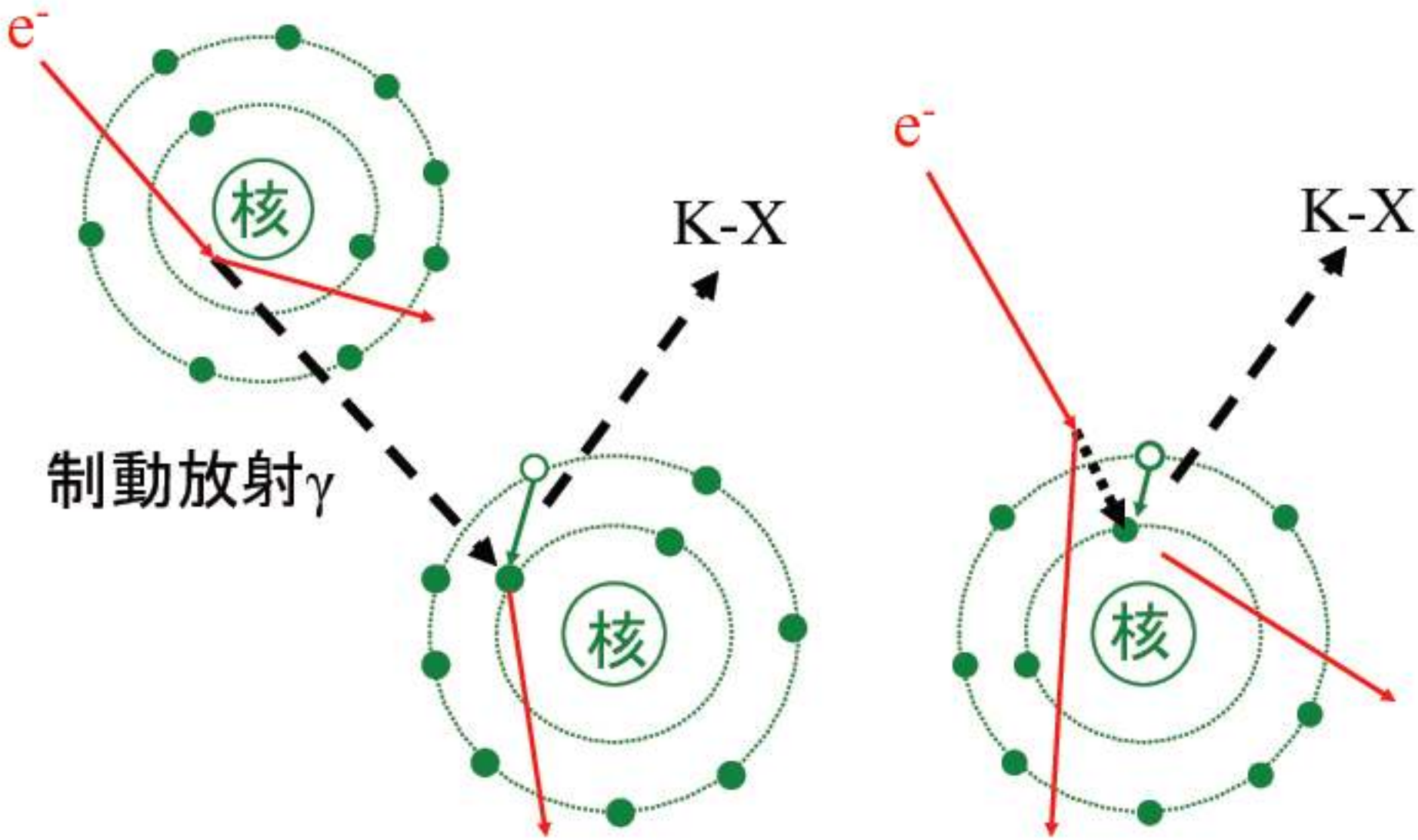




Au 2.515g/cm3

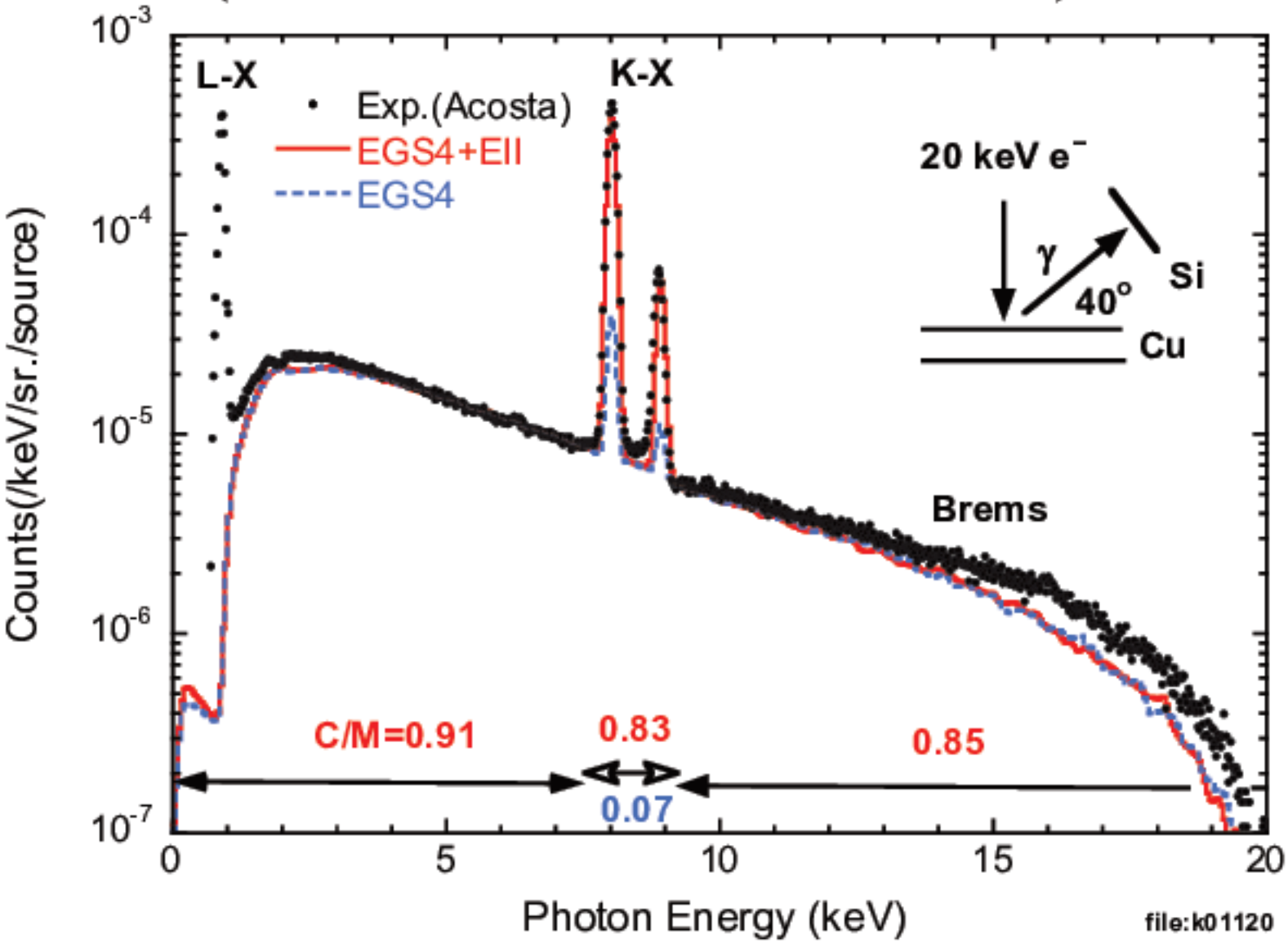
	多重散乱	スピン
egs5	Moliere	Off (Rutherford)
egs5-GS	GS	On (Mott)
egsnrc	GS	On
egsnrc spin-off	GS	Off

電子衝突イオン化とは？

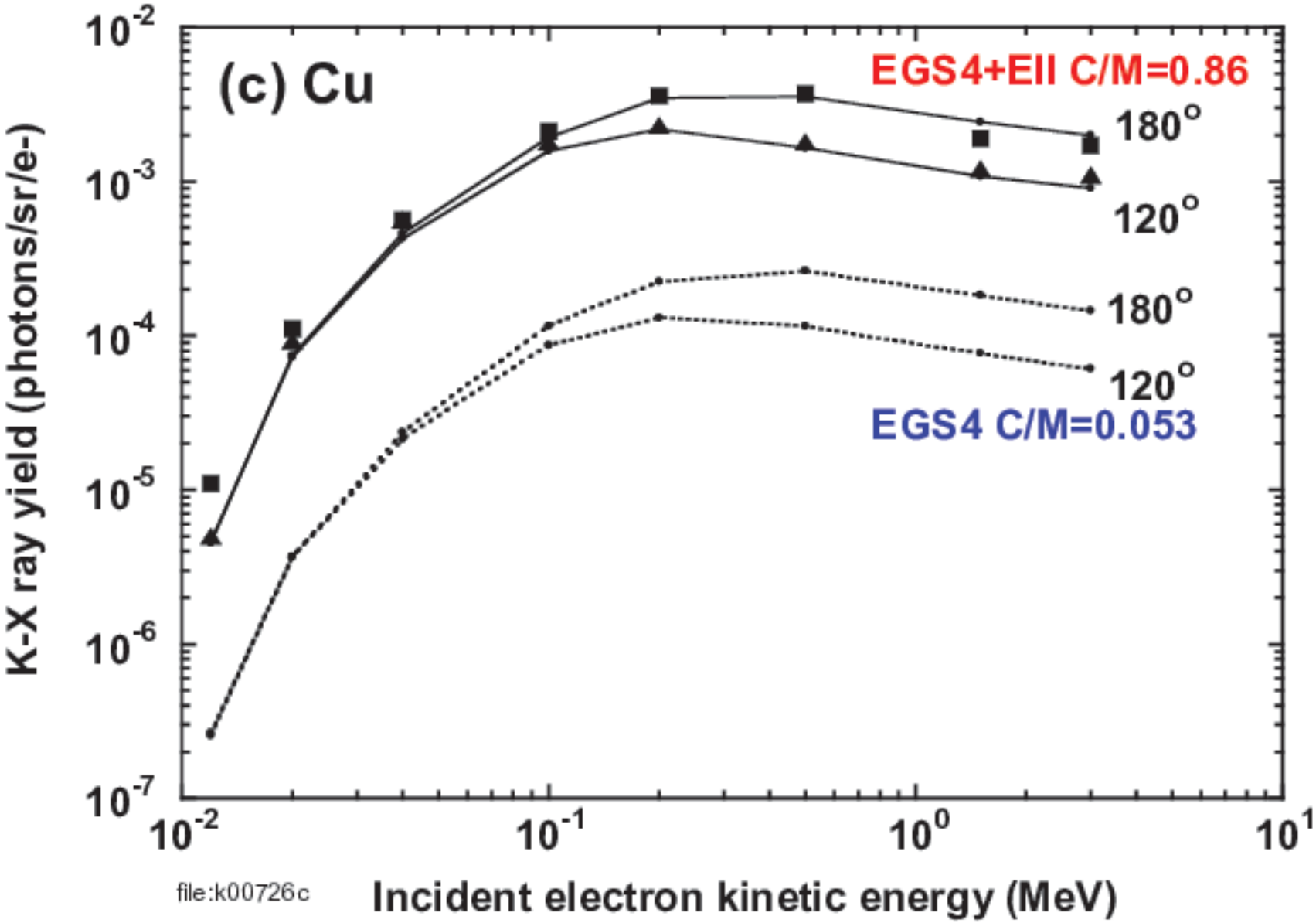


制動放射 →光電効果　　電子衝突イオン化

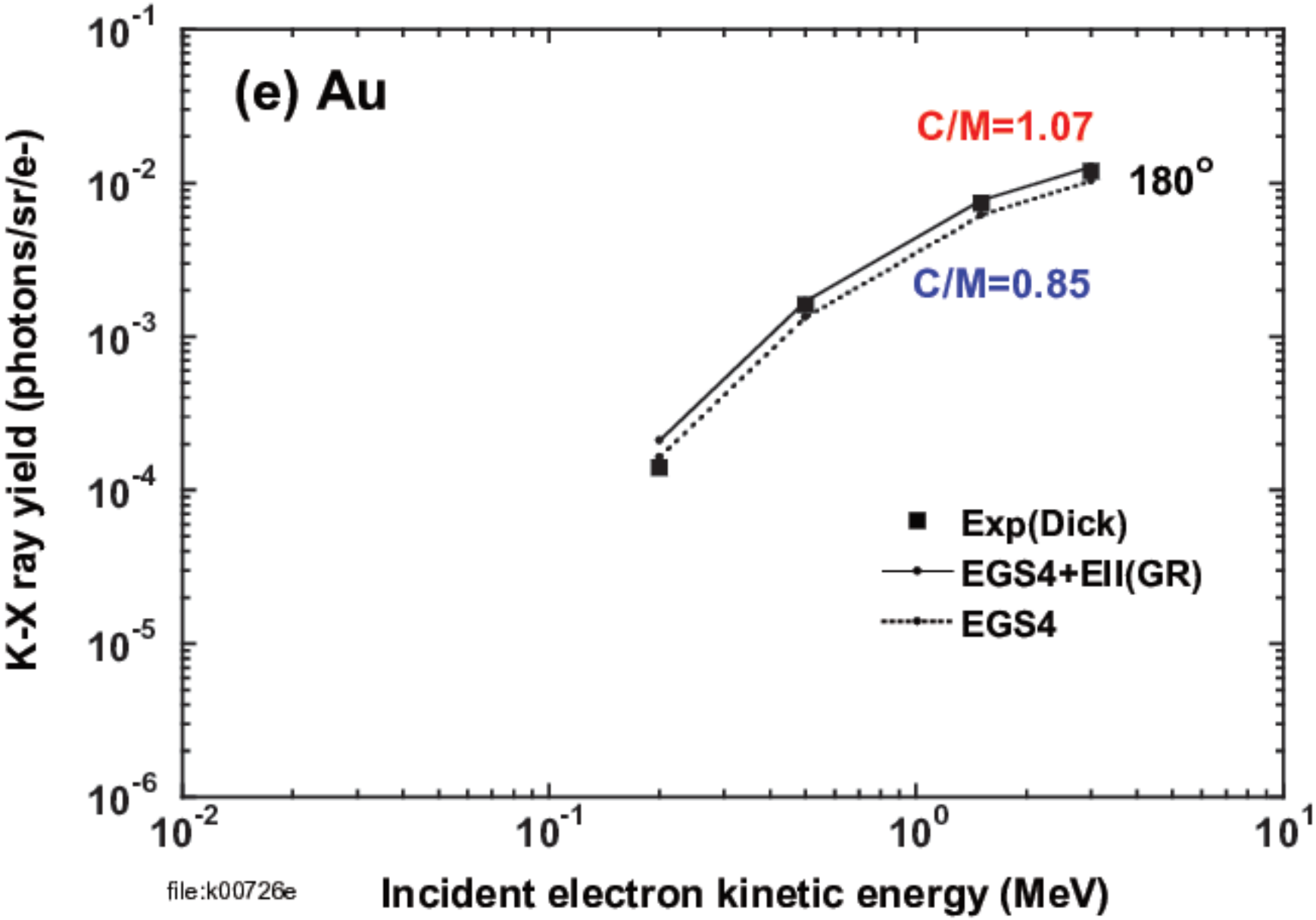
銅ターゲットからの光子スペクトル (K X線および制動放射)



CuのK X線収率

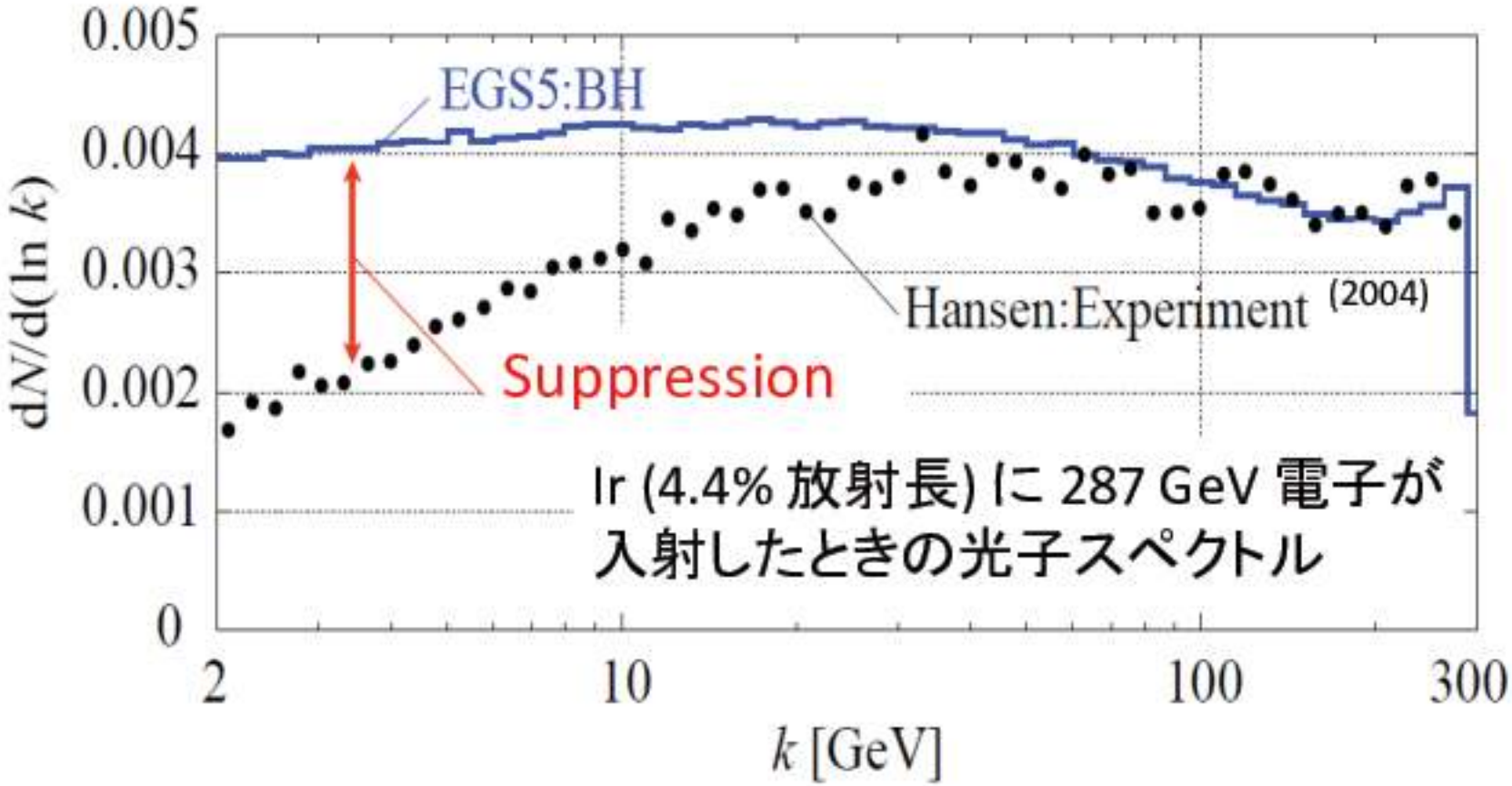

(c) Cu
EGS4+EII C/M=0.86
180°
120°
180°
120°
EGS4 C/M=0.053
K-X ray yield (photons/sr/e-)
Incident electron kinetic energy (MeV)
file:k00726c

AuのK X線収率

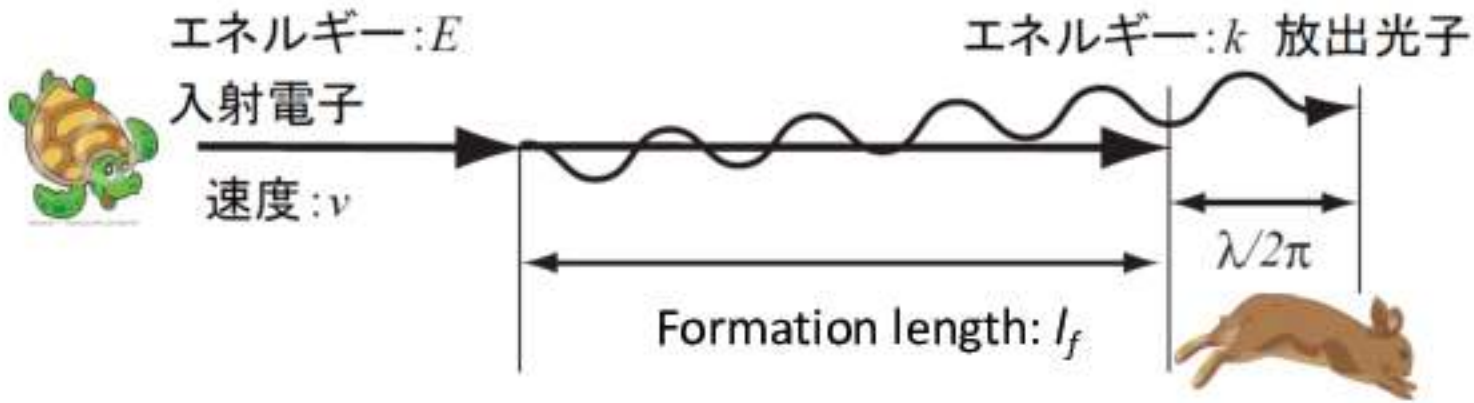

(e) Au
C/M=1.07
180°
C/M=0.85
Exp(Dick)
EGS4+EII(GR)
EGS4
K-X ray yield (photons/sr/e-)
Incident electron kinetic energy (MeV)
file:k00726e

LPM 効果と誘電抑制の組み込み

- 制動放射には、通常Bethe-Heitler (BH) 断面積を使用
- BH 断面積はLandau- Pomenranchuk- Migdal (LPM) 効果と 誘電効果のために数10 GeV 以上で抑制。



制動放射の形成長さ



「制動放射過程が終了するのは、電子と光子が空間的にはっきりと分離したとき [光子が一馬身リードした時]。もし電子の速さが光速に近ければ、この距離 (formation length l_f) は[意外に]長い。」(Ter-Mikaelian(53))

光子と電子が空間的に分離するまでの時間

$$\frac{l_f}{v} = \left(l_f + \frac{\lambda}{2\pi}\right)\frac{1}{c} \xrightarrow[E \gg mc^2]{} l_f = \frac{2\hbar E^2}{m^2 c^3 k}$$

λ: 波長
c: 光速
m: 電子の静止質量
$\hbar$:換算プランク常数

例. 25 GeV 電子からの1 MeV光子放出, l_f =1 mm

制動放射は l_f に渡って空間的に広がった現象
その間に光子、電子の相互作用が起これば抑制される

LPM と誘電による制動放射の抑制

- LPM 効果による抑制
  - Landau, Pomeranchuk (53), Migdal (56) は、電子が形成長さ l_f を進む間のクーロン散乱による抑制を指摘
  - $\frac{dN}{dk} \sim {}^{1}/_{k}$ (BH) $\longrightarrow$ $\frac{dN}{dk} \sim 1/\sqrt{k}$

- 誘電効果による抑制

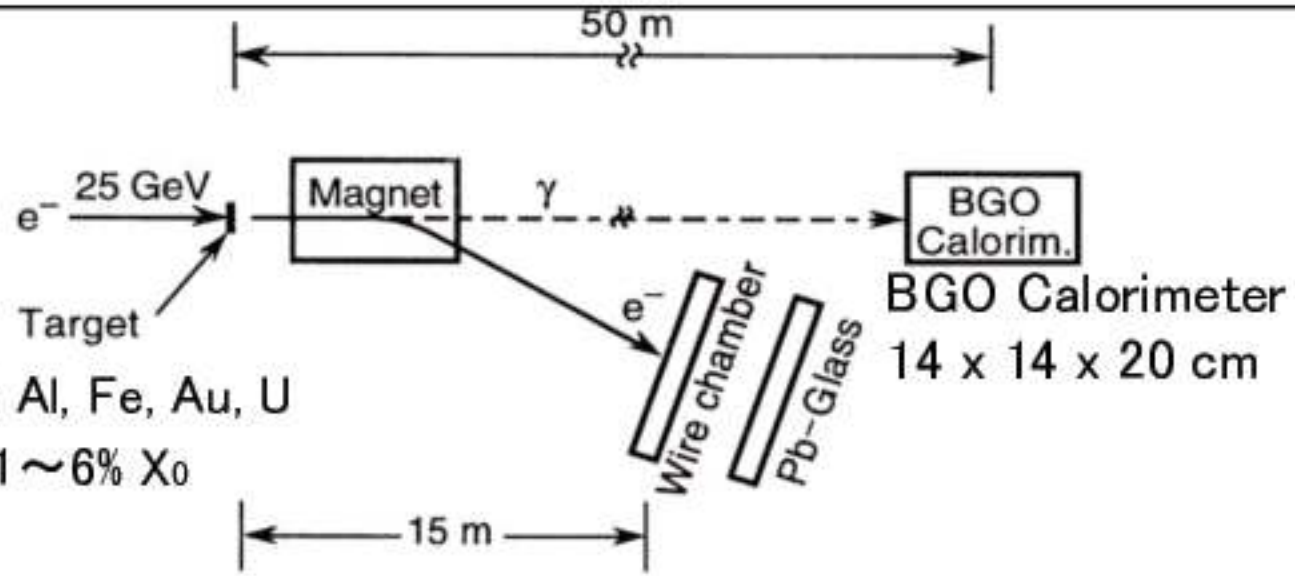
  - Ter-Mikaelian (53) :
    - 物質の誘電的な性質のために物質中での光子運動量は変化する。例えば、可視光の物質中での速度は、波長に依存して変化。X線、γ線でもわずかに変化
    - l_fの増大などにより制動放射が抑制される
  - $\frac{dN}{dk} \sim {}^{1}/_{k}$ (BH) $\longrightarrow$ $\frac{dN}{dk} \sim k$
  - 赤外発散はこのために全ての制動放射で抑制される
  - チェレンコフ放射にも関連

測定との比較

Anthony(97)

SLAC

8 GeV
25 GeV e−

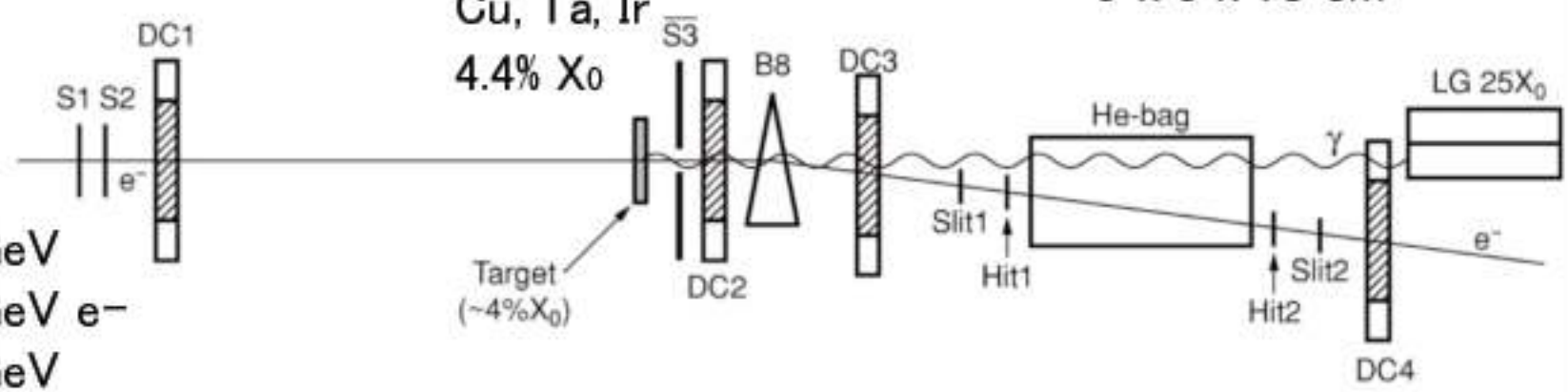


Hansen et al(2004)

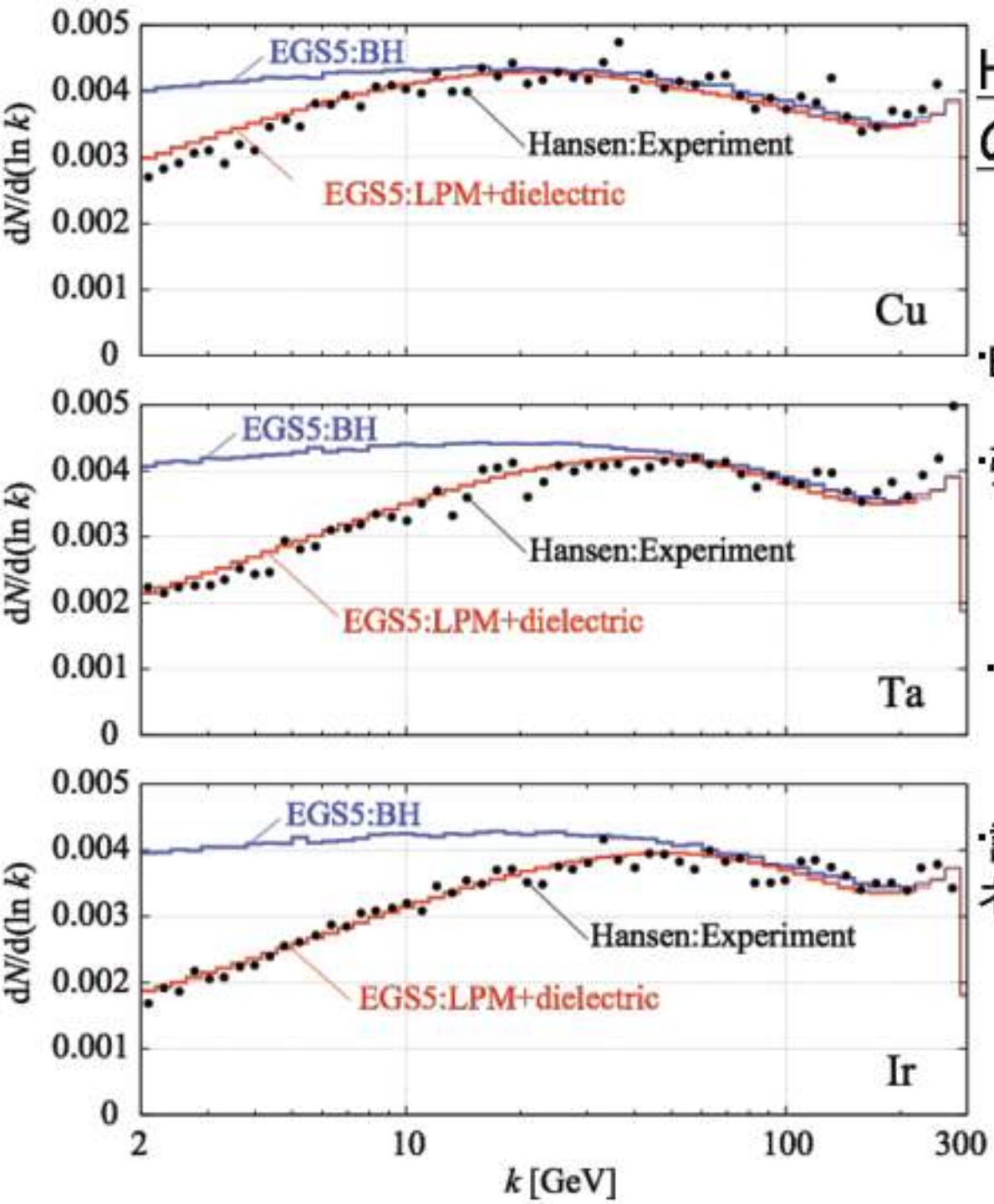
CERN

Lead grass calorimeter
9 x 9 x 78 cm

Cu, Ta, Ir
4.4% X0



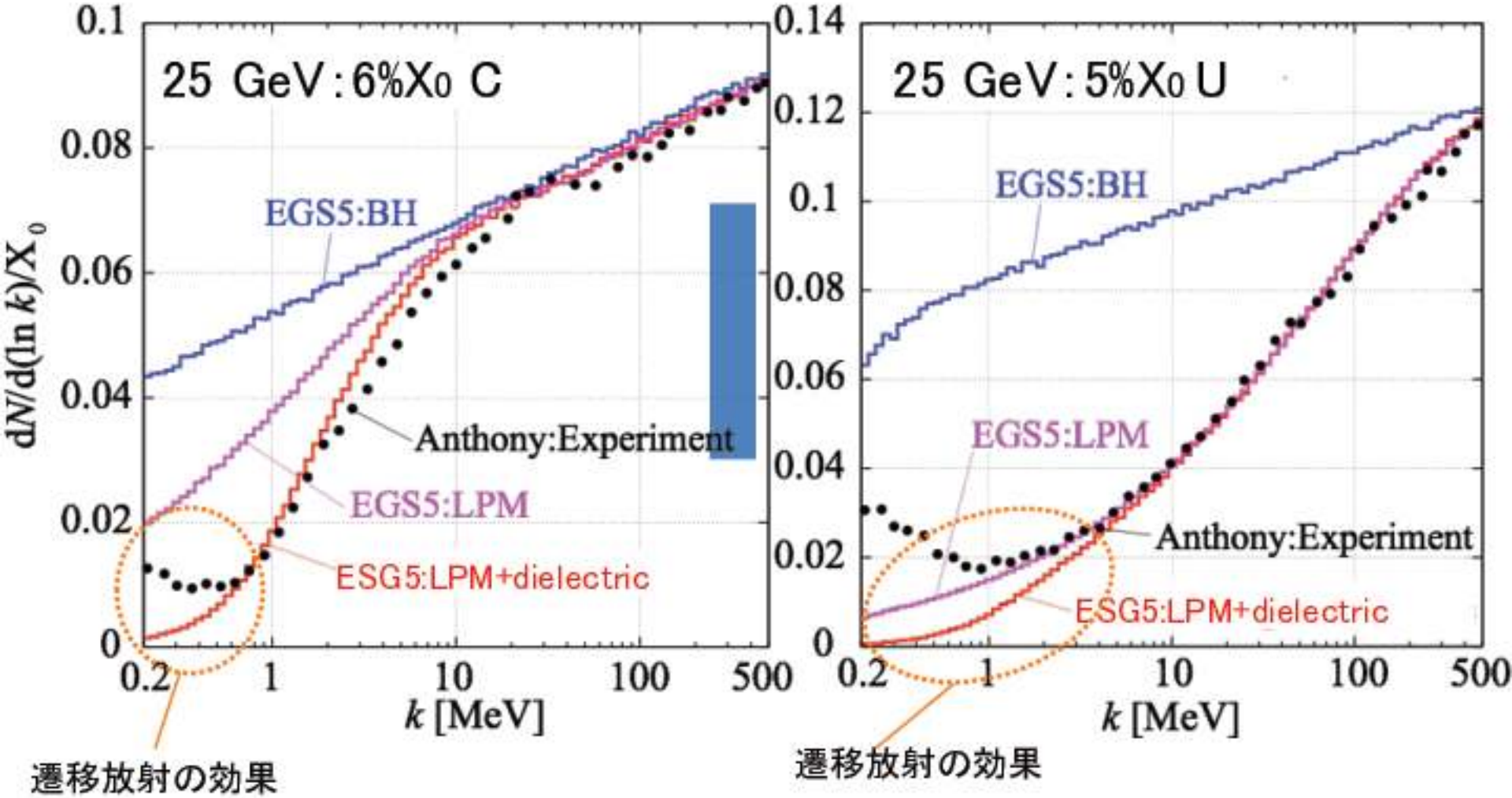
149 GeV
207 GeV e−
287 GeV



Hansen等 (287 GeV)との比較

- EGS5:LPM 実験と一致
- 強度の差 <10%
  (=22% for BH)
- LPM は高Zで顕著
- 誘電効果による抑制は、このエネルギー領域では見えない

Anthony等(25 GeV)との比較



EGS5:LPM+誘電効果を考慮すると実験と一致
強度の差 < 15%
誘電効果による抑制は低Z標的で明白

Kirihara et al, NIMB **268** 2426 (2010).

EGS5, PHITS, Geant4の対応

現象	コンプトン/レイリー散乱	コンプトン散乱	光電効果	電子-原子核散乱	電子-電子散乱	制動放射
詳しい扱い	直線偏光散乱	ドップラー広がり	緩和過程(L-X線など)	Mott断面積 GS 多重散乱	電子衝突電離	LPM, 誘電抑制
EGS5	○	○	○	○	○	○
PHITS	X	○	○	○	○	X
Geant4	○*	○	○	○	○	○

* Mizuno 2005: We note that the way of sampling the polarization vector is identical with that of EGS4 with polarized photon scattering as described in Ref. [26];

付録：最近のコードの変更

- http://rcwww.kek.jp/research/egs/egs5_source/egs5-log-J.txt 和文
- http://rcwww.kek.jp/research/egs/egs5_source/egs5-log.txt 英文

2024.8.19 egs5-1.0.7 (egs5.231025)
o include/egs5_edge.f nepm(MXEPERMED) -> nepm(MXMED)と修正
o egs5_block_data_atom data NEPM/MXEPERMED*1/ -> data NEPM/MXMED*1/
o egs5_mscatを修正
 i) if(ik1.gt.NK1) -> if(ik1.ge.NK1)
 ii) egs5_mscatを修正-ii GS使用時のTVAL errorを防ぐため (231025-1425)
o egs5_uphiを修正. costhe.eq.0.d0の場合に u(np)=usav; v(np)=vsav

2024.10.10 egs5-1.0.8 (egs5.241010)
o pegs/esteplim.f 60-140 MeVのGlitch trapを30-300 MeVに拡張
 目的：2番目以降の物質が化合物の場合に、150MeV付近でesteplimの不正値を抑制
o pegs/g1e.f 表の値と解析式の切り替えを129.99MeV->100 MeVに変更
 目的：2番目以降の物質が化合物の場合に,100MeV付近でg1eの不正値を抑制するため
o data/scslib/ eeldx96.tab-eeldx99.tab, peldx96.tab-peldx99.tabを追加
 目的：Z=96-99の物質を使用可能にする
o 物質中の元素数の最大値をMXELの値で制御できるように修正
 - 変更ファイル；include/egs5_h.f, pegscommons/mixdat.f, mxdatc.f
  pegs/pegs5.f, elinit.f, egs/edgbin.f

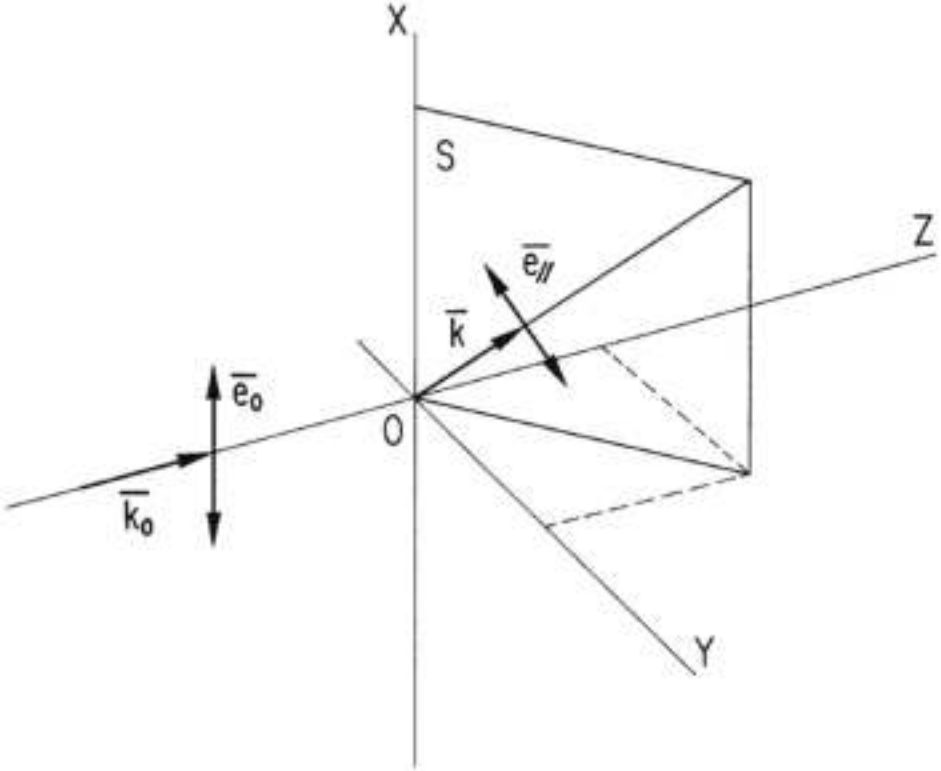
Back Up

keV領域での光子、電子と物質の相互作用

放出 / 入射	光子	電子
光子	レイリー † コンプトン† * 特性X線(K,L,M)	光電子(K,L,M) † コンプトン反跳電子† * オージェ電子(K,L,M)
電子	制動放射(LPM&) 特性X線(K)	ラザフォード散乱 Mott散乱# δ線

黒字:EGS4, 赤字:EGS5
†:直線偏光、*:ドップラー広がり
#緑字:EGS5@MeV領域
&紫字:EGS5@GeV-TeV領域

散乱光子の偏光ベクトル



平面S：e_0とkを含む面
$e_{//}$：平面S内にあり、kに垂直な方向の単位ベクトル
$e_{\perp}$：平面Sとkに垂直な方向の単位ベクトル

散乱光子の偏光ベクトルはe//とe⊥のどちらかをサンプリングする
（$e_{//}$と$e_{\perp}$の間はサンプリングしない）

Gean4-DNA / MPEXS-DNAによる マイクロドジメトリの動向

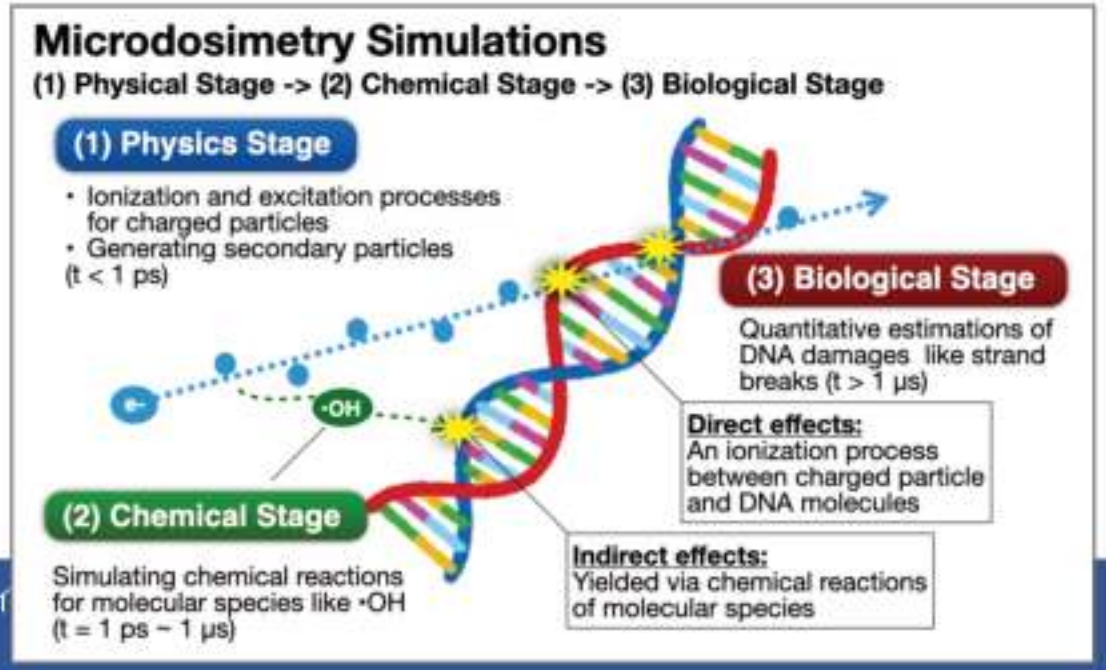
2025年5月15日(木)
第2回 EGS5-Geant4-PHITS 合同研究会

KEK / 計算科学センター
岡田 勝吾 (shogo.okada@kek.jp)

マイクロドジメトリ・シミュレーション

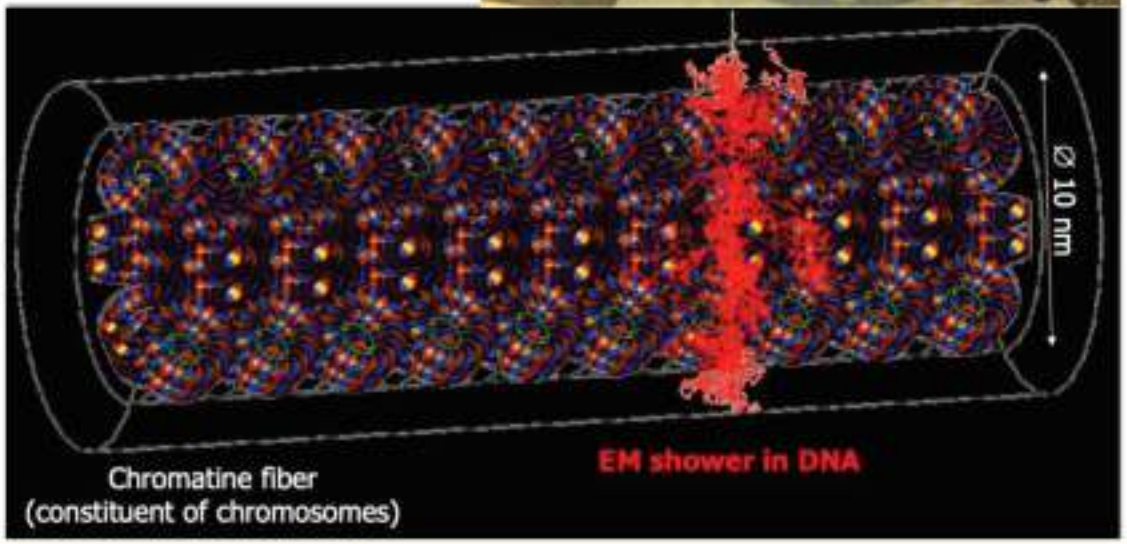
- **放射線による細胞への生物学的影響**
  - DNA損傷が起因となり突然変異、細胞死、腫瘍への形質転換などが生じる
    - 鎖切断 (直接作用と間接作用)、塩基損傷
      - 修復されるもの / そうでないもの
      - 高LET放射線と低LET放射線での違い
  - 微小領域でのエネルギー損失/活性種分布とDNA損傷/修復との相関を実験的観測は難しく、マイクロドジメトリ・シミュレーションが一つの有効手段

- **マイクロドジメトリ・シミュレーション**
  - 荷電粒子と活性種の物理/化学反応の素過程をモンテカルロ法で追跡
    - **物理過程**
      - エネルギー損失分布の計算
    - **化学過程**
      - 活性種の拡散 / 化学反応
    - **生物学過程**
      - DNA損傷 / 修復の定量的評価



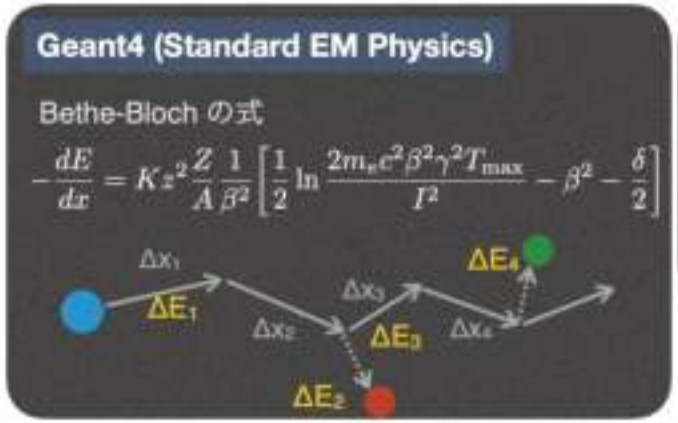
Geant4-DNAプロジェクト

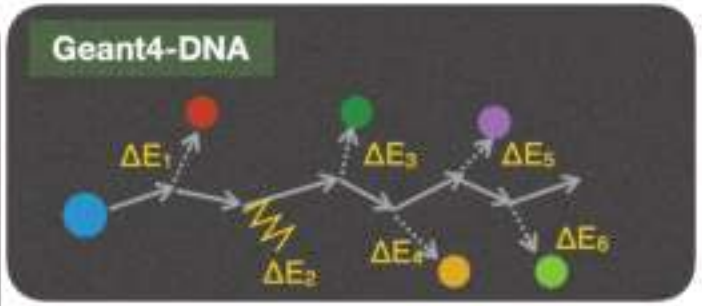
- **Geant4のマイクロドジメトリへの拡張**
  - ボルド大学LP2iが中心となって開発
    - KEK-CRCも参画
  - 物理 / 化学 / 生物学過程のマルチスケール・シミュレーション
    - 低エネルギー領域 (< meV) の電磁相互作用
    - 水の放射線分解種の拡散 / 化学反応過程
      - SBS法 / IRT法
    - 細胞の放射線影響の定量解析
      - DNAの鎖切断 / 塩基損傷 / 修復
      - 細胞核などのジオメトリ構造の記述も可能
        - DNAの螺旋構造、タンパク質の構造
  - プロジェクトの目標
    - 放射線治療の機序の理解
      - 例: FLASH効果
    - 低線量被爆の環境下における人への影響
      - 例: 宇宙飛行士



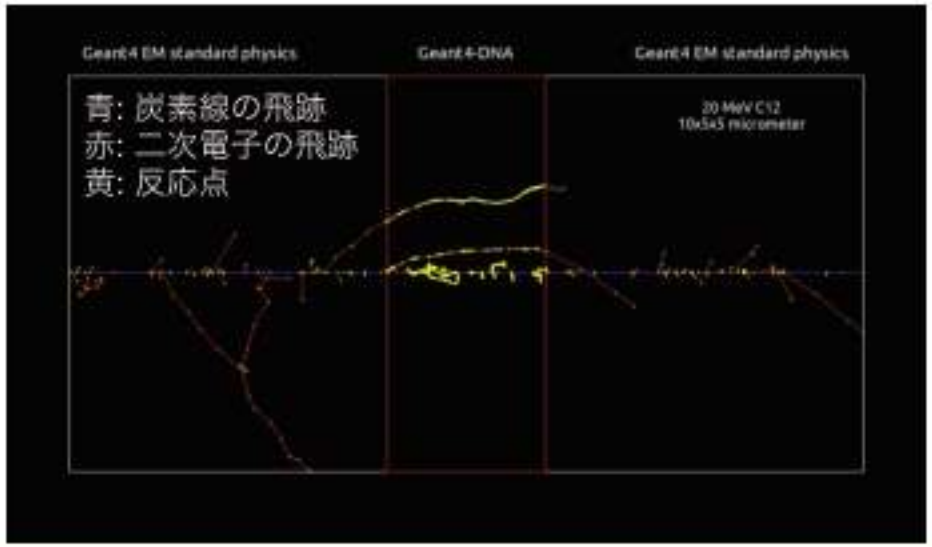
エネルギー損失過程の比較 (G4 vs G4-DNA)

- **Geant4の標準的な電磁相互作用**
  - 連続過程と離散過程で扱う
    - 連続過程
      - 粒子の飛跡が閾値よりも小さい場合
      - Bethe-Blochの式からステップごとのエネルギー損失量を計算
      - 二次電子は生成しない
    - 離散過程
      - 粒子の飛跡が閾値よりも大きい場合
      - 二次電子を生成する





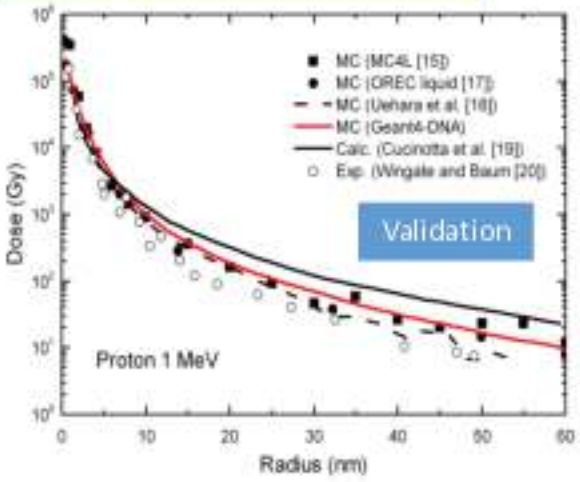
- **Geant4-DNAの場合**
  - 離散過程で扱う
    - DNA損傷の位置決定のため、細胞核内の詳細なエネルギー損失分布を計算
    - 大量の低エネルギーの二次粒子/活性種が発生する
      - 一つの初期粒子につき数千個から数万個程度
      - 高速化の取り組み (MPEXS-DNA) ➔ 後述



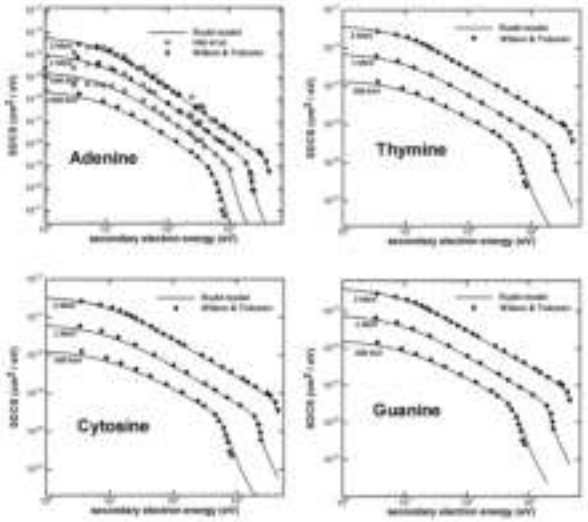
Geant4-DNAの物理反応モデル

- **水等価物質**
  - meV までの電磁相互作用を扱える
    - 物理反応: 弾性散乱、励起、電離、…
    - 対象粒子: 電子、光子、各種イオン
- **生体組織との物理反応モデル**
  - DNA構成成分の断面積データ
    - テトラヒドロフラン(THF)、リン酸トリメチル(TMP)、ピリミジン塩基(PY)、プリン塩基(PU)
    - 対象粒子:
      - 電子 (12 eV – 1 keV、弾性散乱、励起、電離)
      - 陽子 (70 keV – 10 MeV, 電離のみ)
    - DOI: 10.1016/j.radphyschem.2016.09.027
  - DNA塩基の断面積データ
    - アデニン、グアニン、シトシン、チミン
    - 陽子の電離反応 (1 keV – 100 GeV)
    - DOI: 10.1063/1.4990293
- **High-Z 物質 (金ナノ粒子)**
  - 金ナノ粒子による放射線増感作用の定量解析
  - 10 eV までの電子と金との電磁相互作用を実装
    - DOI: 10.1063/1.4972191

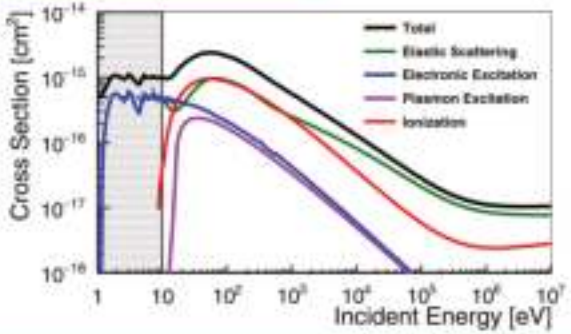
DOI: 10.1016/j.nimb.2014.04.025

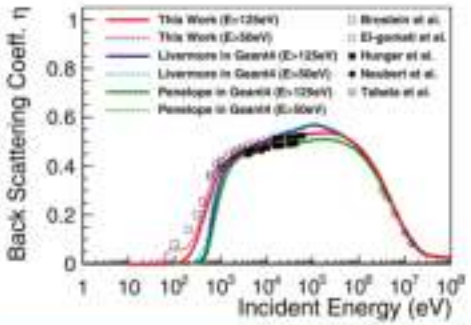


DOI: 10.1063/1.4990293



DOI: 10.1063/1.4972191 (産総研の坂田洞察さんの仕事)

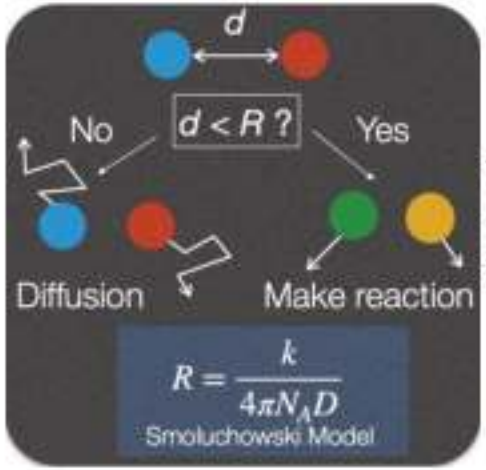




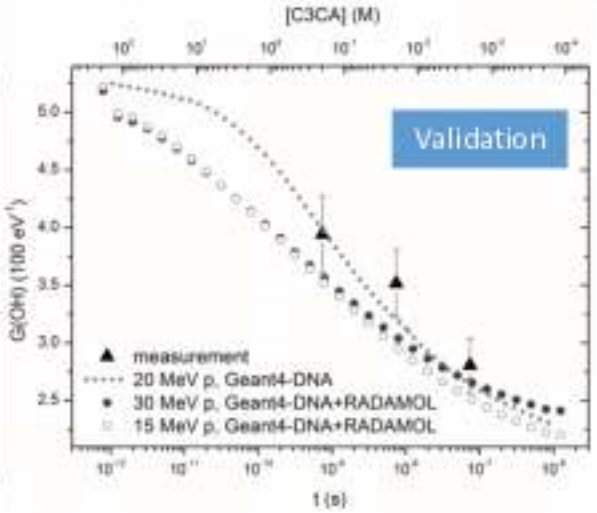
水の放射線分解種の化学反応過程

- **物理化学過程 (< 1 ps)**
  - 励起 / 電離した水分子 (H_2O^*, H_2O^-/H_2O^+) の解離崩壊
    - 水和電子やOHラジカルの生成
- **化学過程 (1 ps ~ 1 us)**
  - **SBS (Step-By-Step) 法**
    - DOI: 10.1016/j.jcp.2014.06.011
    - 分子種間の距離が反応半径未満だと反応したと判定
      - Smoluchowskiモデルにも基づいている
    - 分子種はランダムな方向に拡散
      - 時間ステップ長は動的に調整する
      - 時間はかかるが、各分子種の進んだ経路が決まる
  - **IRT (Independent Reaction Time) 法**
    - DOI: 10.1002/mp.14490
    - 分子種とその近傍の分子種との反応時刻を衝突確率に基づいて計算
      - 反応リストを作成して、反応時刻の早い順に処理を進める
        - 生成物があるとリスト更新する
      - 計算は速いけれど、各分子種の位置は決まらない

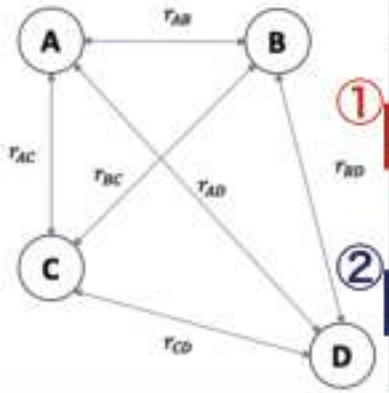
SBS法



DOI: 10.1007/s00411-015-0605-6



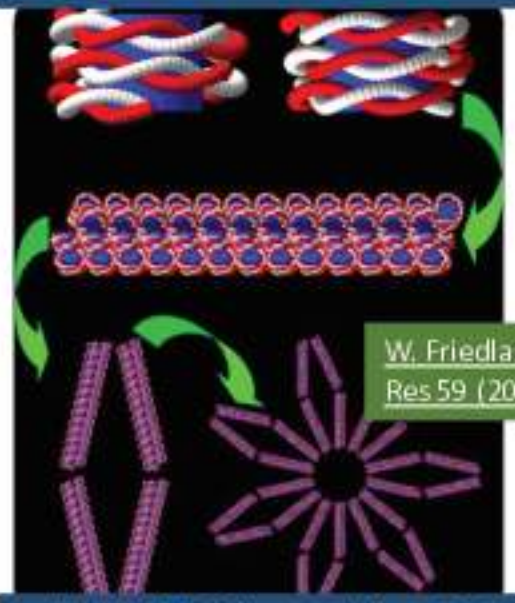
IRT法



Reaction	Time (ps)	Order of reactions
A+B	63	X
A+C	3	1
A+D	111	X
B+C	192	X
B+D	15	2
C+D	90	X

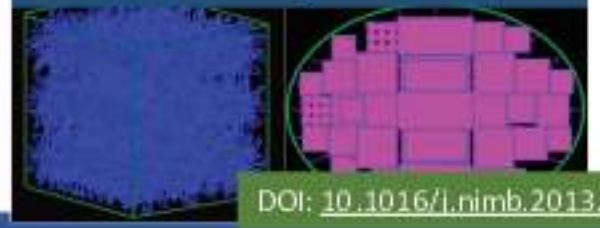
Geant4-DNAの細胞核等のモデリング

ヒストン ➔ クロマチン繊維のモデリング

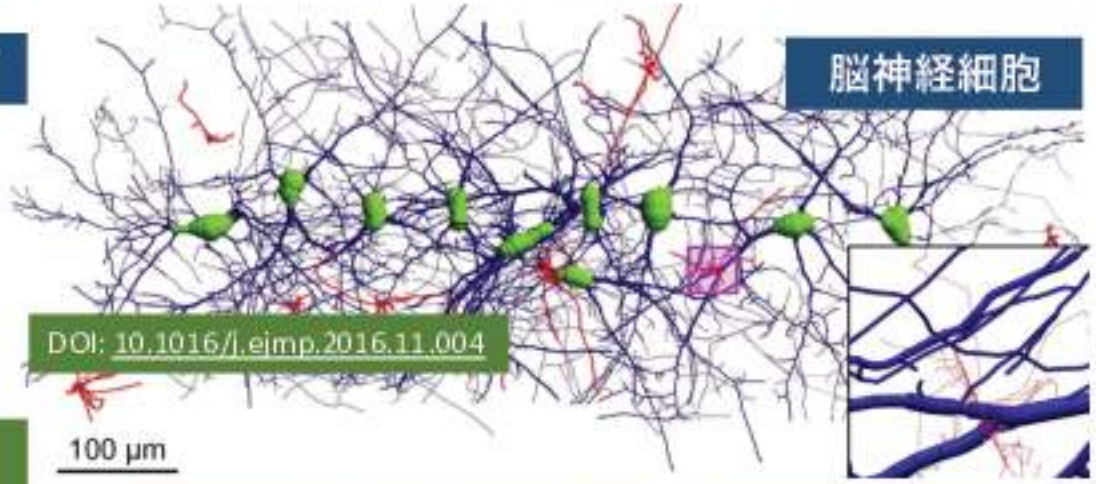


W. Friedland et al, Rad. Res 59 (2003), 401-410

線維芽細胞のジオメトリ
(総計6Gbpの塩基対)



DOI: 10.1016/j.nimb.2013.01.009



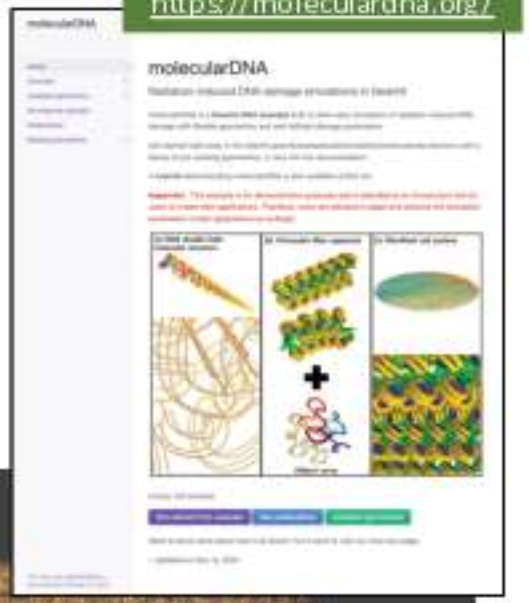
脳神経細胞

DOI: 10.1016/j.ejmp.2016.11.004

100 μm

タンパク質/アミノ酸

https://moleculardna.org/

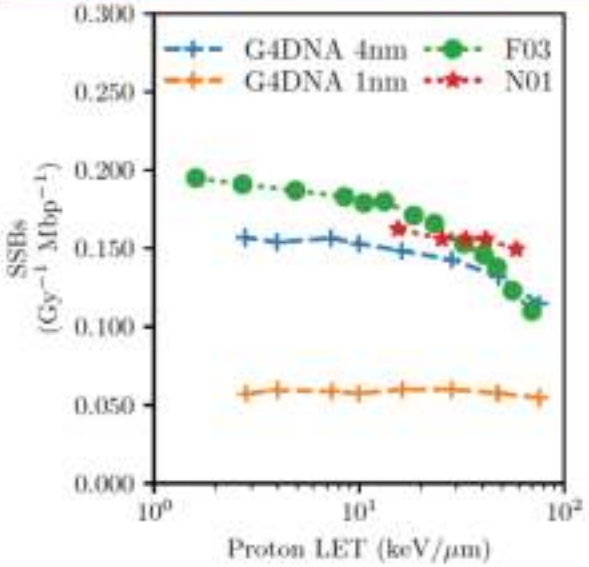


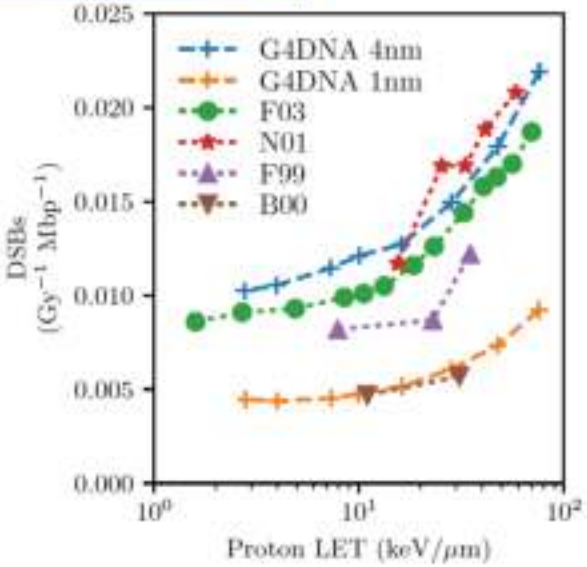
バクテリア

DOI: 10.1016/j.ejmp.2018.02.011 / 10.1016/j.ejmp.2017.12.008

放射線による生物学的影響の定量解析

DOI: 10.1016/j.ejmp.2018.02.011 / 10.1016/j.ejmp.2017.12.008



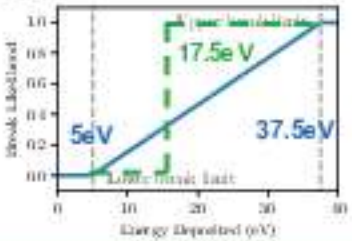


直接効果: $E_{loss} > E_{thr}$

間接効果: ·OH + DNA -> SSB

(P_{OH} = 40 ~ 80%)

→ 一重鎖切断 (SSB)



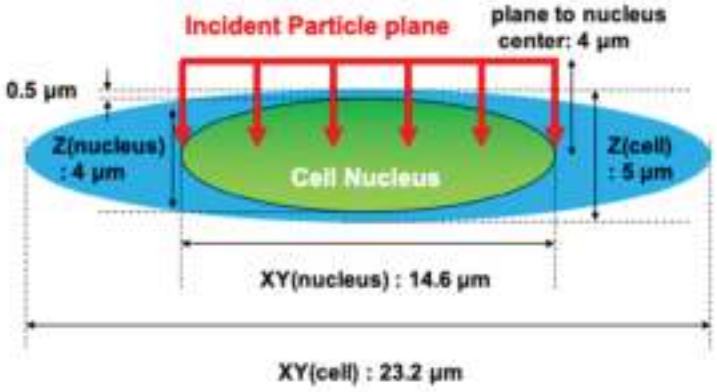
10塩基対以内

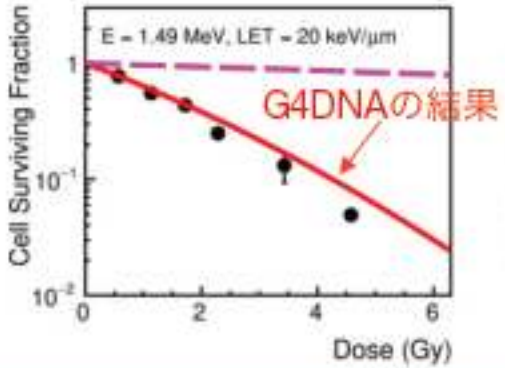
→ 二重鎖切断 (DSB)

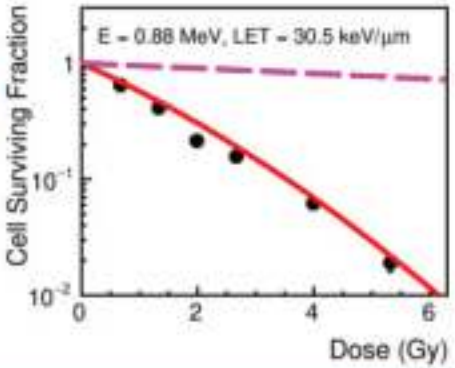
DOI: 10.1016/j.ejmp.2022.11.012

DNA損傷と修復を考慮した細胞生存率の定量解析

(産総研の坂田洞察さんの仕事)



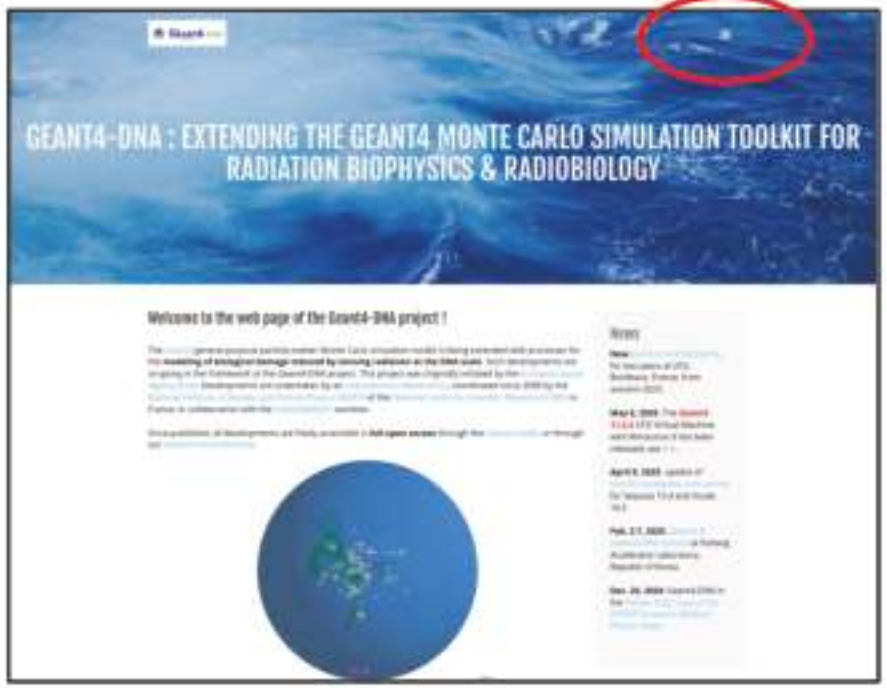




Geant4-DNAの情報

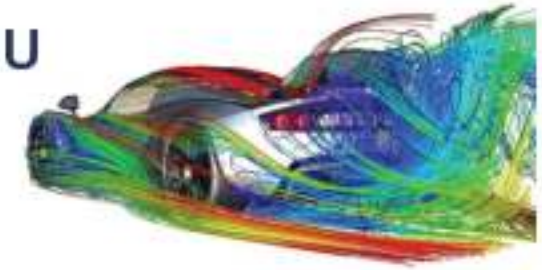
- **Geant4-DNAプロジェクト公式ページ**
  - http://geant4-dna.org/
    - 論文、Exampleコードの情報、講習会資料、仮想マシン、…
- **Geant4-DNA Reference Papers**
  - H. N. Tran, et al., "Review of chemical models and applications in Geant4-DNA: Report from the ESA BioRad III Project"
    - DOI: 10.1002/mp.17256
  - S. Incerti, et al., "Geant4-DNA example applications for track structure simulations in liquid water: a report from the Geant4-DNA Project"
    - DOI: 10.1002/mp.13048
  - M. A. Bernal, et al., "Track structure modeling in liquid water: A review of the Geant4-DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit"
    - DOI: 10.1016/j.ejmp.2015.10.087
  - S. Incerti, et al., "Comparison of Geant4 very low energy cross section models with experimental data in water"
    - DOI: 10.1118/1.3476457
  - S. Incerti, et al., "The Geant4-DNA project"
    - DOI: 10.1142/S1793962310000122

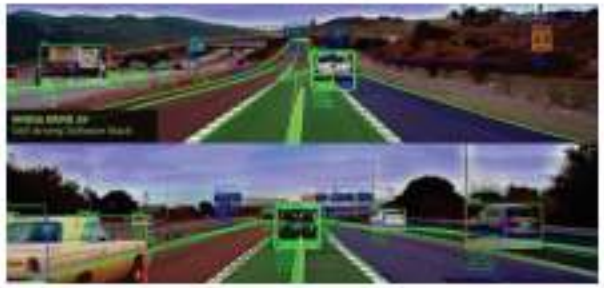
各種情報はこちらから

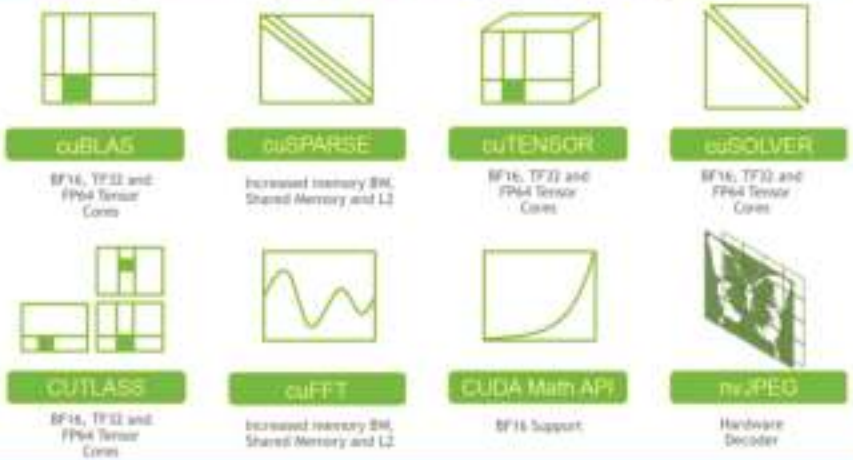


GPGPU: GPUによる汎用計算

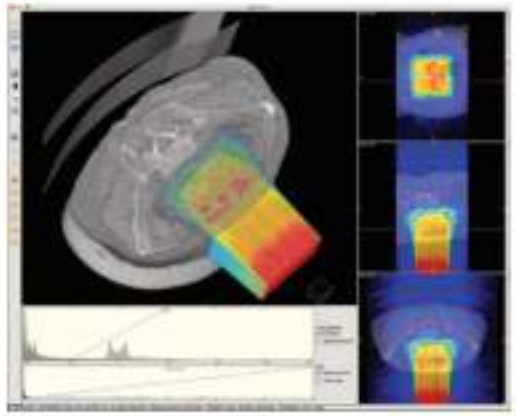
- **GPU: Graphical Processing Unit**
  - グラフィックス用の超並列デバイス
    - GPU: +16,000 コア
    - CPU: ~100 コア
- **GPGPU: General-Purpose computing on GPU**
  - 科学技術計算などの汎用計算をGPUで加速
    - AI (深層学習)
    - 有限要素法シミュレーション
    - 分子動力学
    - 多体系問題
    - …
- **CUDA**
  - NVIDIA製GPUのためのGPUプログラミング言語
    - C/C++の拡張言語
  - デバッガー、プロファイラー、各種APIなどを提供
    - うまく活用すればアプリが高速化する





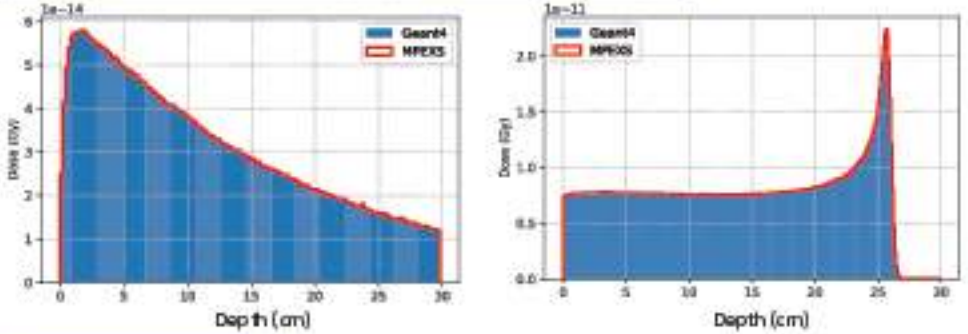


GPUによるGeant4の高速化



- **MPEXSプロジェクト**
  - NVIDIA製のGPUで動作する放射線モンテカルロ・コード
  - **Geant4の物理の知見を再利用**
    - 1 GeV 以下の電磁 / ハドロン / 中性子反応をCUDA言語で再実装
    - 反応断面積データなどをGPU計算に最適化
  - 超並列計算で線量計算を加速
    - X線治療の線量計算において、GPU1基でCPU1,000コア相当の性能を実現
  - R&Dは完了しており、今は応用研究の段階
    - 最新バージョンはMPEXS2.1
    - 非公開コード

深部線量分布: 6MV X線(左)、20 MeV 陽子線 (右)



ベンチマーク結果

EPS Score (Events/msec)

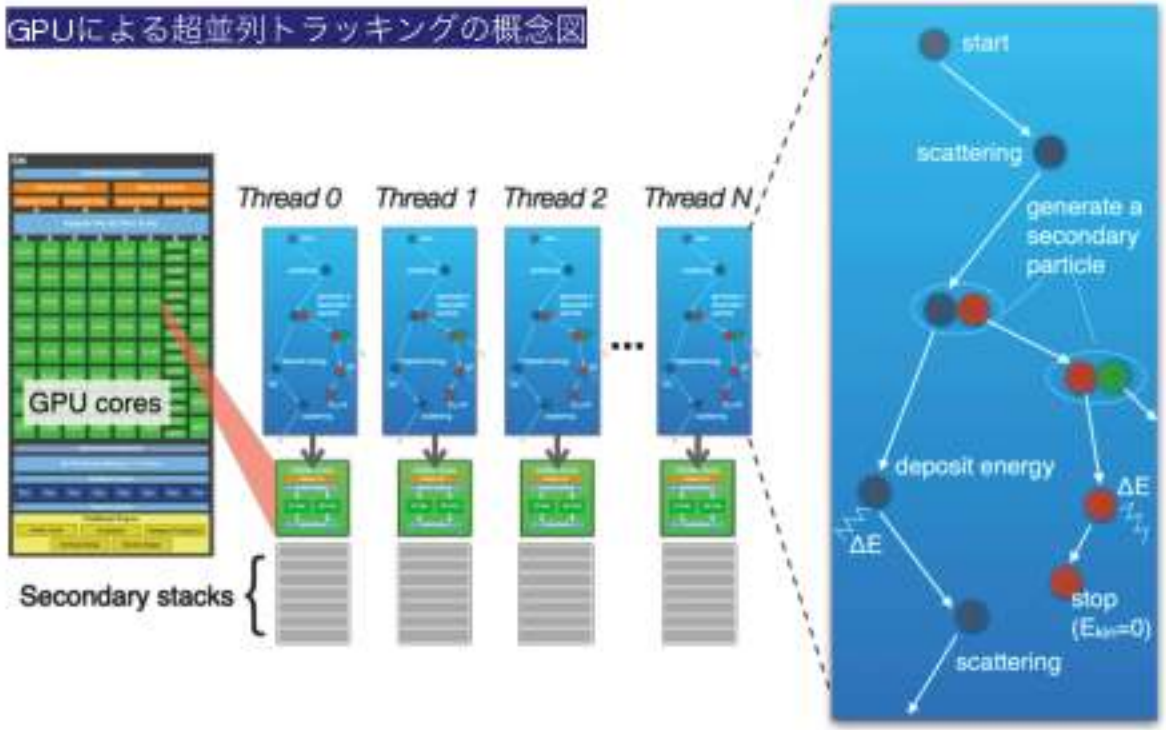
	Electron 20 MeV	X-ray 6 MV	X-ray 18 MV	Proton 20 MeV
Geant4 (10.7)	2.9	6.2	5.6	6.3
MPEXS2.1	2423.7	5817.5	4600.8	227.1
Speedup	x832	x931	x822	x36

- CPU: Intel Xeon Gold 6326 (Ice Lake)
- GPU: NVIDIA RTX 6000 Ada Generation

MPEXSにおける超並列トラッキング

- **数十万粒子をGPUスレッドに展開して同時にトラッキング**
  - 個々の粒子は統計学的に独立
  - GPUスレッドが保持する情報
    - 粒子情報: $(\vec{x}, \vec{p}, E, k)$, $k \in (\gamma, e^-, e^+)$
    - 2次粒子スタック
  - 初期粒子 → 二次粒子の順に、スタックが空になるまで、GPUスレッドは処理を継続する

GPUによる超並列トラッキングの概念図



GPUによるマイクロドジメトリの高速化

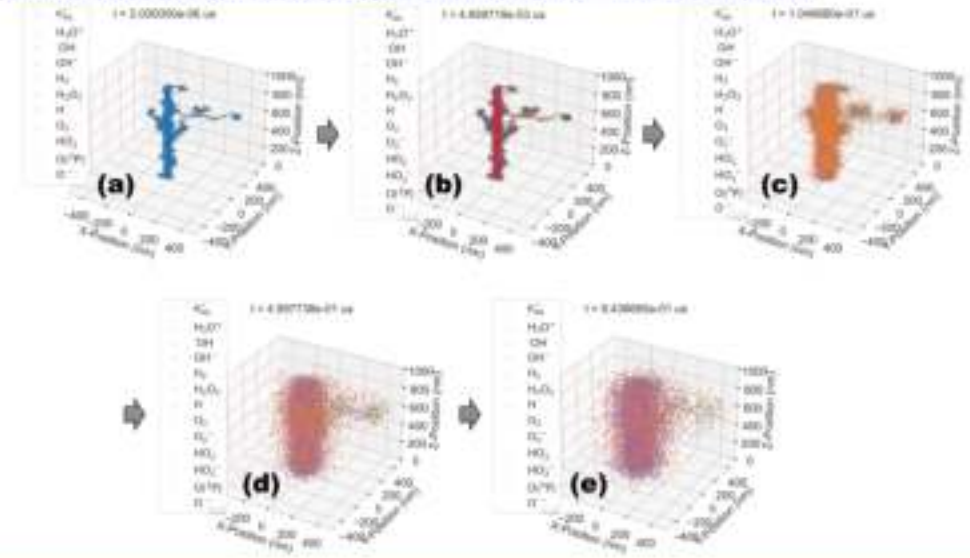
■ Geant4-DNAの高速化

- DNA分子のどこで損傷したか解像度をあげるため、1イベントにつき数万個以上の二次電子や活性種を追跡していく
- 従来のCPU計算だと何日も時間を要するのでGPUで高速化したい

■ MPEXS-DNA

- MPEXSシリーズのマイクロドジメトリへの拡張
- Geant4-DNAをGPUで加速
  - **Geant4 10.7 Patch-4 の物理過程と化学過程 (SBS法) をCUDAで移植**
  - G4DNAの水等価物質が扱える
  - DNA損傷/修復モデルは未実装

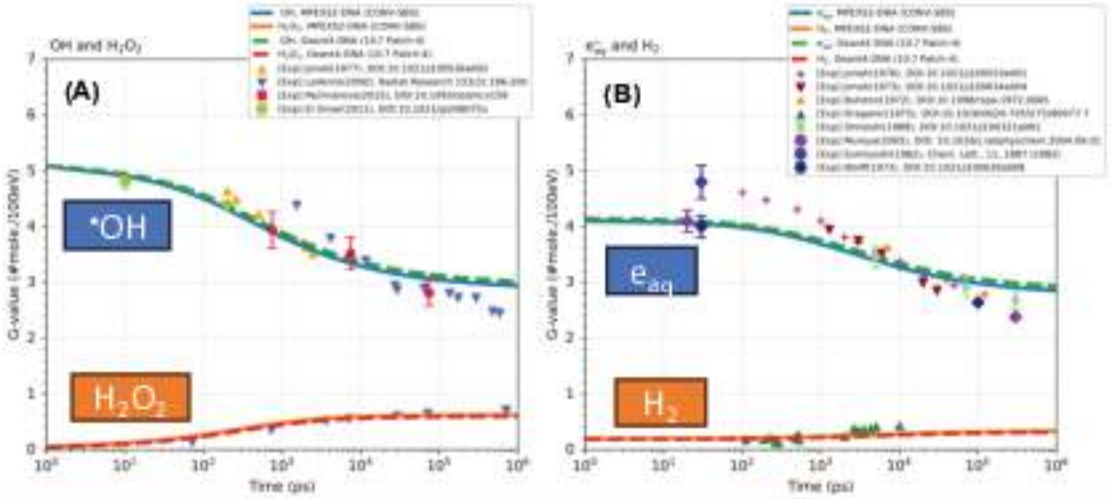
5 MeV/u の炭素線照射時の活性種の拡散・化学反応過程



MPEXS-DNAのベンチマーク結果

- **750 keV 電子照射の水の放射線分解シミュレーション**
  - OHラジカルや水和電子のG値の実験値を再現
  - GPU1基でCPU7,600コア分の計算速度を達成
    - CPU1コアで4日の計算が1分以内で完了

Comparison plots of G-value time profiles for •OH, e_{aq}, H_2 and H_2O_2 between MPEXS2-DNA and Geant4-DNA/measured data
(Solid lines: MPEXS2-DNA, dashed lines: Geant4-DNA, the others: measured data)



MEDICAL PHYSICS
The International Journal of Medical Physics Research and Practice
DOI: 10.1002/mp.13370
Research Article · Open Access
MPEXS-DNA, a new GPU-based Monte Carlo simulator for track structures and radiation chemistry at subcellular scale
Shogo Okada, Koichi Murakami, Sébastien Incerti, Katsuya Amako, Takashi Sasaki
First published: 28 December 2018 | https://doi.org/10.1002/mp.13370 | Citations: 16

Awared "TOP DOWNLOADED PAPER 2018-2019"
in AAMP Medical Physics (Wiley)

	Geant4-DNA 10.7.4	MPEXS2.1-DNA
Throughput (#histories / min.)	5.69	43564.97
Speedup Factor (MPEXS2.1 / Geant4)	-	**x7,656**

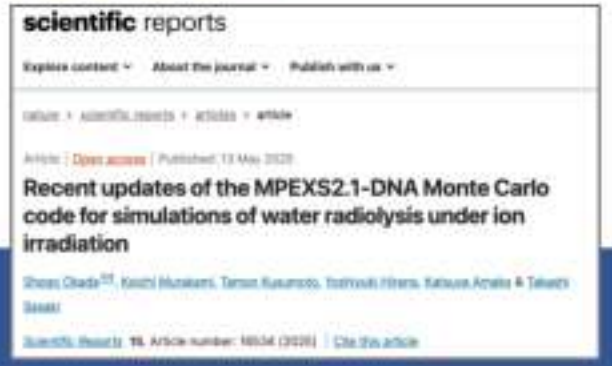
Benchmark hardware:
- CPU: Intel Xeon Gold 6326 (Ice Lake)
- GPU: NVIDIA RTX 6000 Ada Generation

MPEXS-DNAの最近の動向

- **イオン照射シミュレーションのための拡張**
  - **化学反応モデルの拡張**
    - 既存モデルで考慮していない化学反応:
      - 活性酸素種 (ROS): $O^{\cdot-}$, O_2, $O_2^{\cdot-}$, $HO_2^{\cdot}$, HO_2^-
      - ラジカルスカベンジャーなどの溶存分子種
    - RITRACKSコードを参考に**代替SBSモデル**を実装
      - I. Plante (DOI: 10.1007/s00411-011-0367-8)
      - 上記の考慮外の化学反応が扱える
  - **多重電離の実装**
    - 高LET放射線 (例: 炭素線) では、多重電離を介したROS の生成が無視できない
    - 過去の研究を参考に多重電離を実装した
      - J. Meesungnoen et. al (DOI: 10.1021/jp058037z)
      - B. Gervais et. al (DOI: 10.1016/j.radphyschem.2005.09.015)

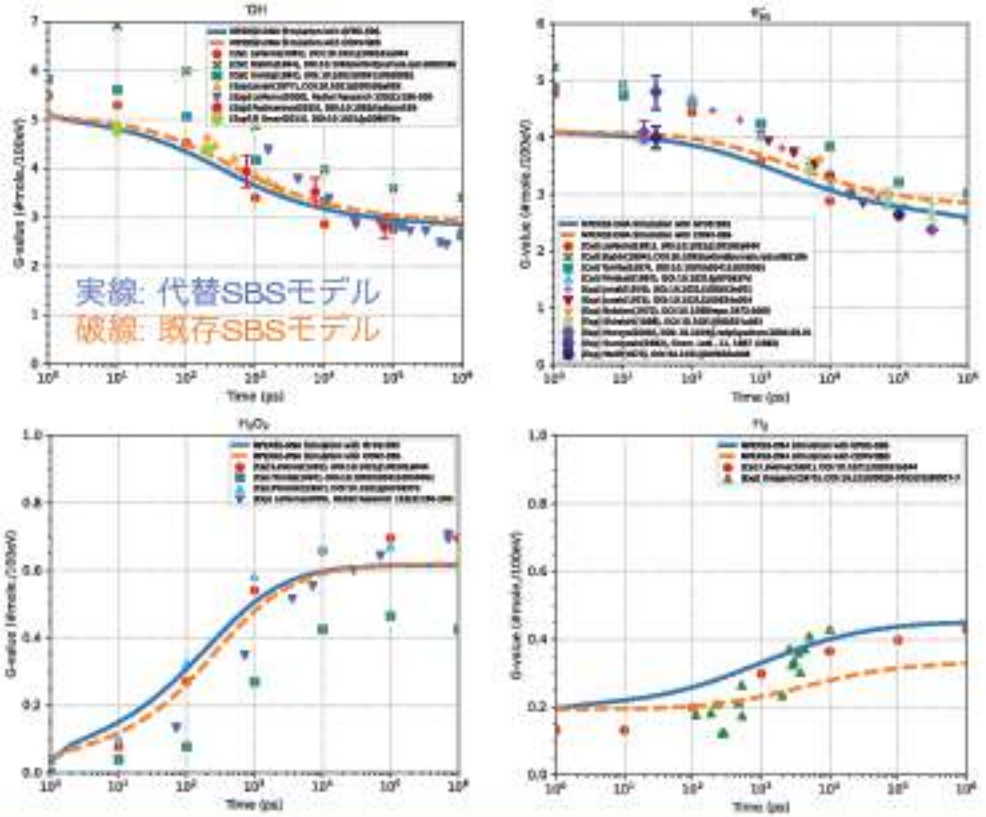
- **高線量率照射シミュレーション基盤の開発**
  - 計算科学的アプローチでFLASH効果の機序の理解を深めることが目的
  - KEKとQSTの共同研究

- **イオン照射向けの機能拡張については、論文が出版されました**
  - S. Okada et al., "Recent updates of the MPEXS2.1-DNA Monte Carlo code for simulations of water radiolysis under ion irradiation"
  - DOI: 10.1038/s41598-025-00875-w

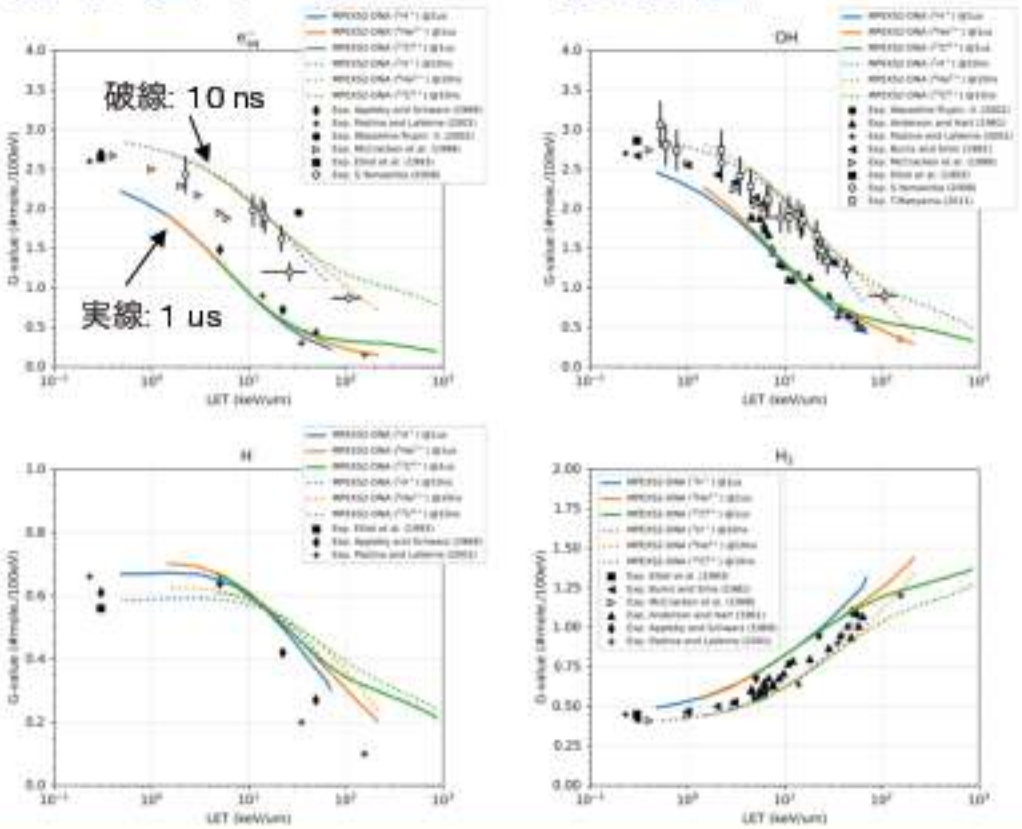


イオン照射シミュレーションの検証 (1)

- 電子照射における分子種のG値の時間依存性



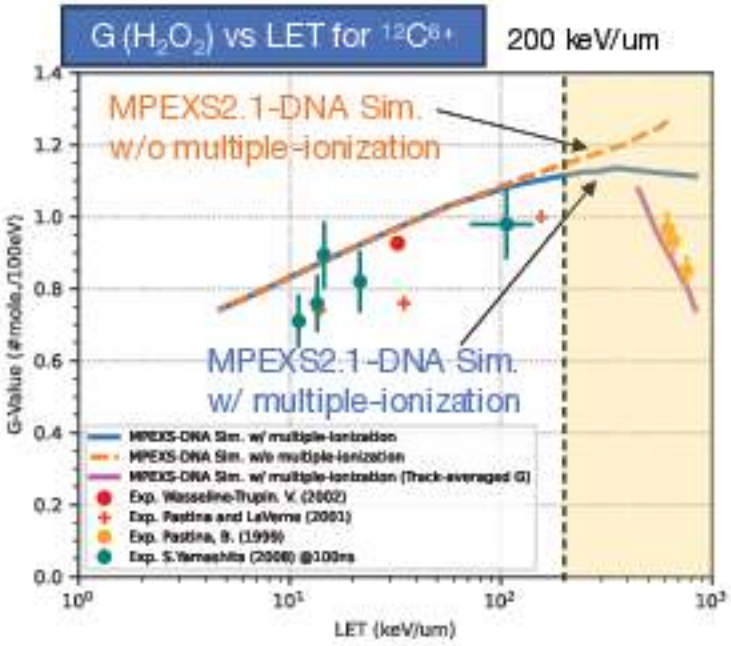
- $^{1}H^{+}$, $^{2}He^{4+}$, $^{12}C^{6+}$ イオン照射時の分子種のG値のLET依存性



イオン照射シミュレーションの検証 (2)

■ 多重電離の検証

- 炭素線照射時の過酸化水素のG値のLET依存性
  - 過酸化水素の生成過程
    - $^{\cdot}OH + {}^{\cdot}OH \rightarrow H_2O_2$
  - 多重電離由来のROS生成でOHラジカルの消費増
    - $^{\cdot}OH + O(^3P) \rightarrow HO_2^{\cdot}$
    - $^{\cdot}OH + HO_2^{\cdot} \rightarrow O_2$
  - 200 keV/um を境に $G(H_2O_2)$ は減少に転じる
    - 実験値の傾向と一致



■ 計算時間の短縮化

- 既存モデルよりも10倍程度の計算速度の高速化
  - 既存モデルは時間ステップ幅を動的に調整
  - 改良モデルは対数でステップ幅を固定

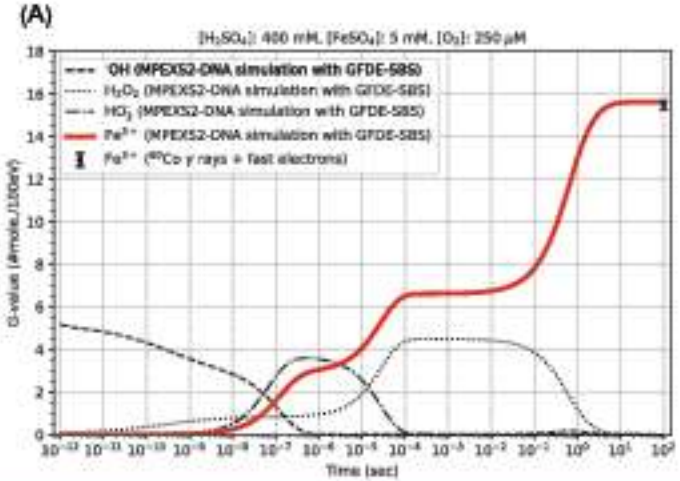
		#Time Steps	HPS Score
$^4He^{2+}$ 20 MeV	GFDE-SBS	240 steps	685 histories/sec
	CONV-SBS	23,744 steps	50 histories/sec
	Performance Gain		**x13.9**

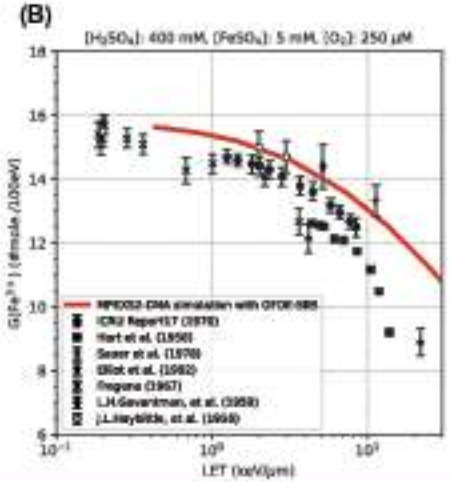
イオン照射シミュレーションの検証 (3)

■ Fricke線量計

- □ Fricke 水溶液に100 MeVの陽子線を照射
  - ■ $[H_2SO_4]$ = 0.4 M, $[FeSO_4]$ = 5 mM, $[O_2]$ = 0.25 mM
  - ■ 溶質の化学反応は擬1次反応として扱う
- □ Fe^{3+}イオンのG値の時間依存性とLET依存性を実験値と比較
  - ■ $G(Fe^{3+})$ ~ 15.6 (MPEXS-DNA @ 100 s)
  - ■ $G(Fe^{3+})$ = 15.6 ± 0.2 (ICRUの報告値)

$$
\begin{cases}
{}^{\cdot}OH + Fe^{2+} \rightarrow \boxed{Fe^{3+}} + OH^- \\
H^{\cdot} + O_2 \rightarrow HO_2^{\cdot} \\
HO_2^{\cdot} + Fe^{2+} \rightarrow H_2O_2 + \boxed{Fe^{3+}} \\
H_2O_2 + Fe^{2+} \rightarrow \boxed{Fe^{3+}} + {}^{\cdot}OH + OH^-
\end{cases}
$$





MPEXS-DNAによる応用研究

■ 高線量率照射 (UHDR) シミュレーション基盤の開発

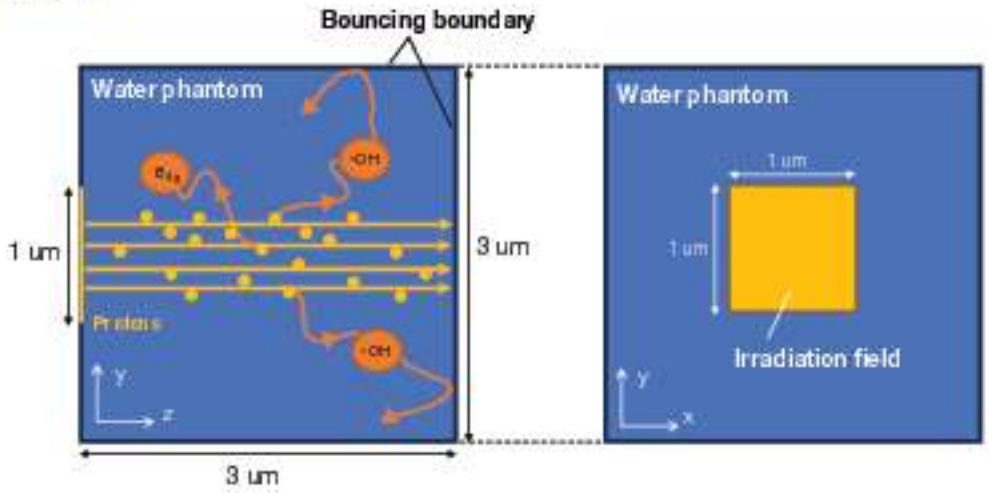
- □ KEKとQSTとの共同研究
- □ UHDR照射条件での水の放射線分解種の動態解析
  - ■ FLASH効果の機序の理解を深めることが目的

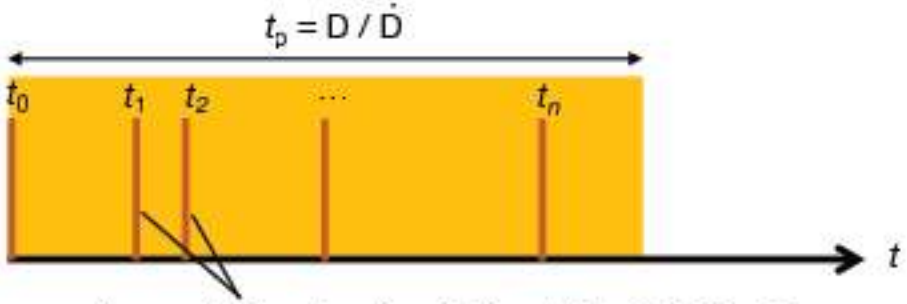
■ シミュレーション・セットアップ

- □ 水ファントム: 3 x 3 x 3 um^3
  - ■ 境界面は反射条件を課す
- □ 溶存酸素濃度: $P(O_2)$ = 25% (~240 uM)

■ 55 MeV 陽子線の連続照射

- □ 総線量: D = 0.1 Gy
- □ 線量率: $\dot{D}$ = 0.02 – 500 Gy/s
  - ■ Dと$\dot{D}$から照射継続時間 t_p が決定
  - ■ 照射時刻は [1 ps, t_p] の範囲で一様乱数でサンプリング
  - ■ 最初の陽子照射から1,000秒までをシミュレート





An event of proton irradiation. t_i (i = 0, 1, 2, …) is sampled within [1 ps, t_p] using uniform random numbers.

高線量率照射シミュレーション

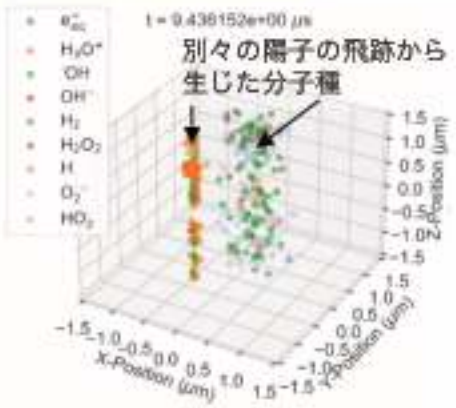
■ 溶存酸素濃度の変化

- □ UHDR条件下の酸素濃度変化率は小さい
  - ■ **実験: $\Delta P(O_2) = -0.1\%/Gy$**
    - □ Kusumoto et al., DOI: 10.1667/RADE-23-00244.1
  - ■ **シミュレーション: $\Delta P(O_2) = -0.14\%/Gy$**
    - □ 酸素枯渇に必要な線量は約250 Gyで、FLASH実験の線量値 (10 – 40 Gy) より高い
    - □ 実際は酸素枯渇は起きてない？

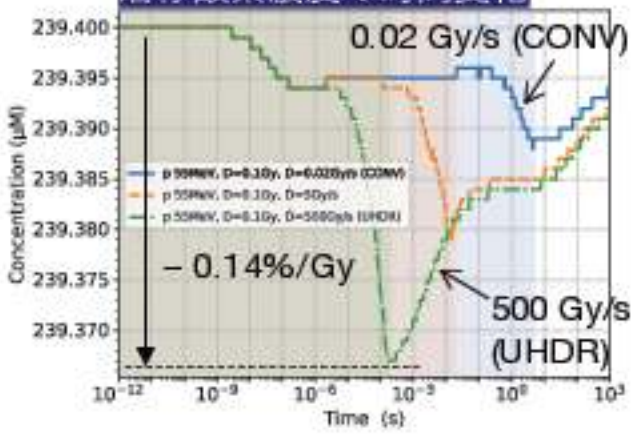
■ OHラジカルの収率の線量率依存性

- □ 線量率増大に伴い·OHの収率は下がる
  - ■ 1本の陽子の飛跡から生成された·OHが、近くの別の飛跡からの·OHと反応しやすく、活性酸素種の数が減る
  - ■ DNA分子の間接効果や塩基損傷が減り、これがUHDR照射で正常細胞を守る一因？

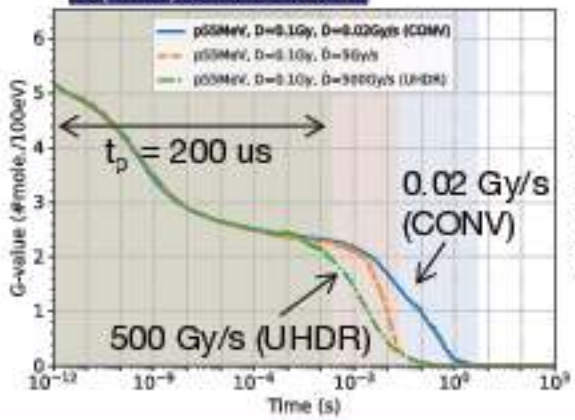
陽子線の連続照射



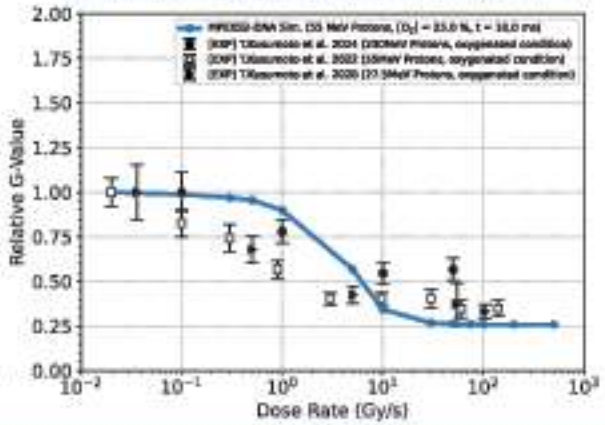
溶存酸素濃度の時間変化



G(·OH)の時間変化



G(·OH)@10msの線量率依存性



まとめ

- **Geant4-DNA**
  - Geant4のマイクロドジメトリへの拡張パッケージ
    - 放射線による細胞の生物学的影響の定量解析が可能
    - オープンソース・ソフトウェア
- **MPEXS-DNA**
  - マイクロドジメトリ用のGPUモンテカルロコード
    - Geant4-DNA ver. 10.7 Patch-4 をベースとしている
    - 非公開コード
  - 水の放射線分解のシミュレーションをGPUで短時間で実行できる
    - 現状、生物学的効果のモデル実装はしていない
  - 今後の展望
    - 高LET放射線 (例: 炭素線) による酸素効果の定量評価
    - 他の線種でのUHDR照射における水の放射線分解種の動態解析
      - FLASH効果の機序の理解

Gean4-DNA / MPEXS-DNAによる マイクロドジメトリの動向

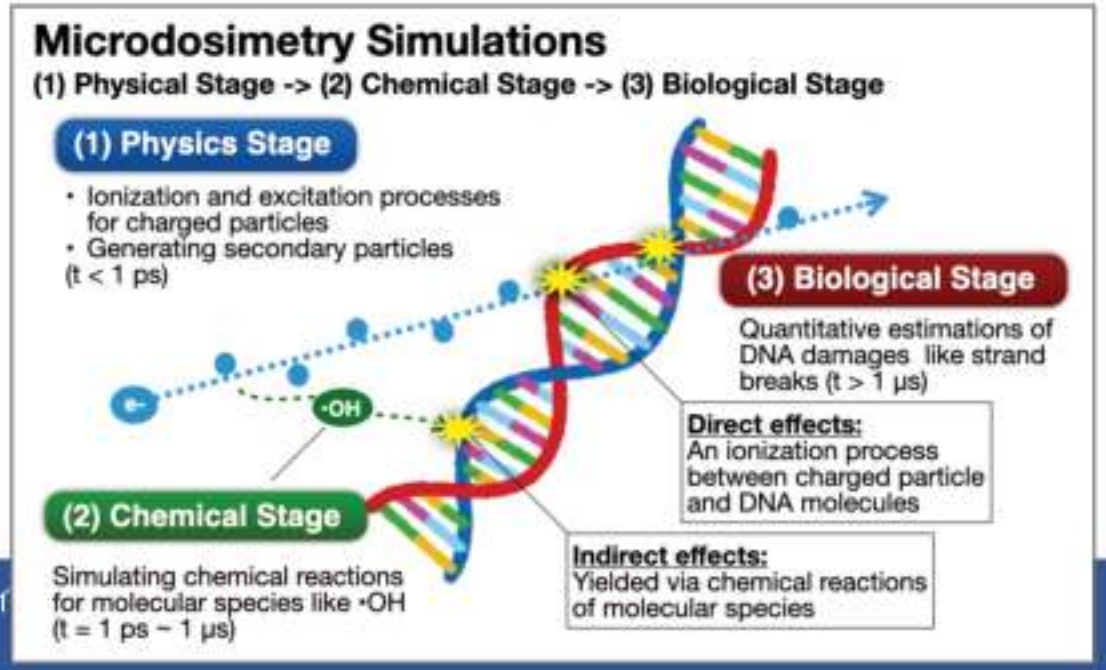
2025年5月15日(木)
第2回 EGS5-Geant4-PHITS 合同研究会

KEK / 計算科学センター
岡田 勝吾 (shogo.okada@kek.jp)

マイクロドジメトリ・シミュレーション

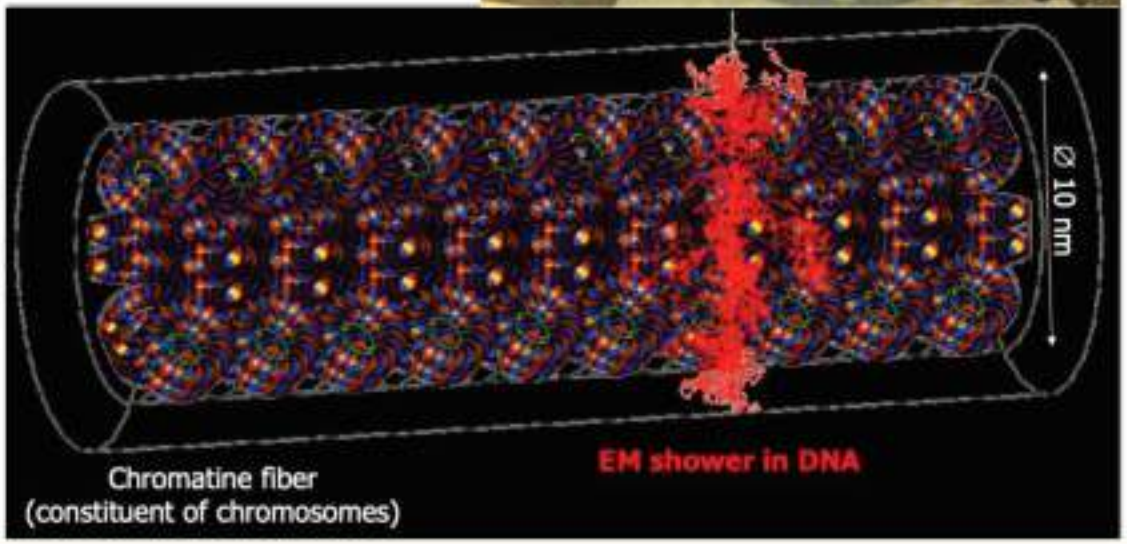
- **放射線による細胞への生物学的影響**
  - DNA損傷が起因となり突然変異、細胞死、腫瘍への形質転換などが生じる
    - 鎖切断 (直接作用と間接作用)、塩基損傷
      - 修復されるもの / そうでないもの
      - 高LET放射線と低LET放射線での違い
  - 微小領域でのエネルギー損失/活性種分布とDNA損傷/修復との相関を実験的観測は難しく、マイクロドジメトリ・シミュレーションが一つの有効手段

- **マイクロドジメトリ・シミュレーション**
  - 荷電粒子と活性種の物理/化学反応の素過程をモンテカルロ法で追跡
    - **物理過程**
      - エネルギー損失分布の計算
    - **化学過程**
      - 活性種の拡散 / 化学反応
    - **生物学過程**
      - DNA損傷 / 修復の定量的評価



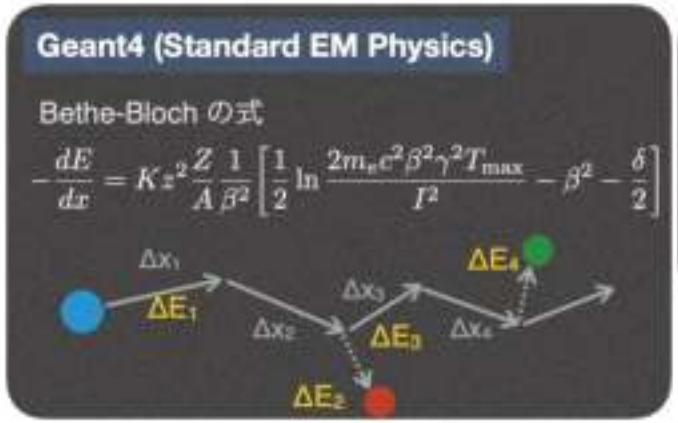
Geant4-DNAプロジェクト

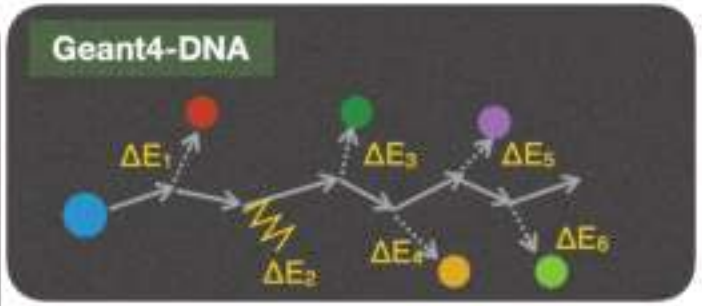
- **Geant4のマイクロドジメトリへの拡張**
  - ボルド大学LP2iが中心となって開発
    - KEK-CRCも参画
  - 物理 / 化学 / 生物学過程のマルチスケール・シミュレーション
    - 低エネルギー領域 (< meV) の電磁相互作用
    - 水の放射線分解種の拡散 / 化学反応過程
      - SBS法 / IRT法
    - 細胞の放射線影響の定量解析
      - DNAの鎖切断 / 塩基損傷 / 修復
      - 細胞核などのジオメトリ構造の記述も可能
        - DNAの螺旋構造、タンパク質の構造
  - プロジェクトの目標
    - 放射線治療の機序の理解
      - 例: FLASH効果
    - 低線量被爆の環境下における人への影響
      - 例: 宇宙飛行士



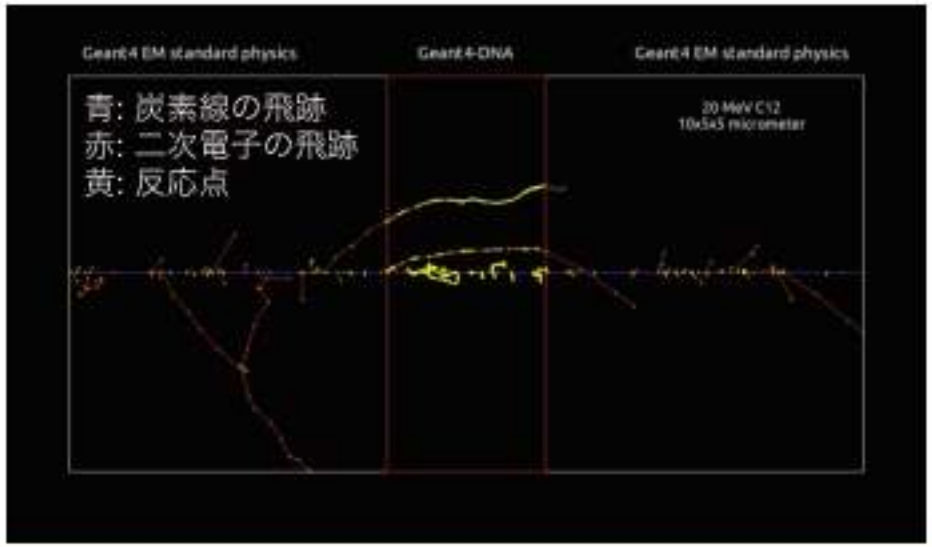
エネルギー損失過程の比較 (G4 vs G4-DNA)

- **Geant4の標準的な電磁相互作用**
  - 連続過程と離散過程で扱う
    - 連続過程
      - 粒子の飛跡が閾値よりも小さい場合
      - Bethe-Blochの式からステップごとのエネルギー損失量を計算
      - 二次電子は生成しない
    - 離散過程
      - 粒子の飛跡が閾値よりも大きい場合
      - 二次電子を生成する





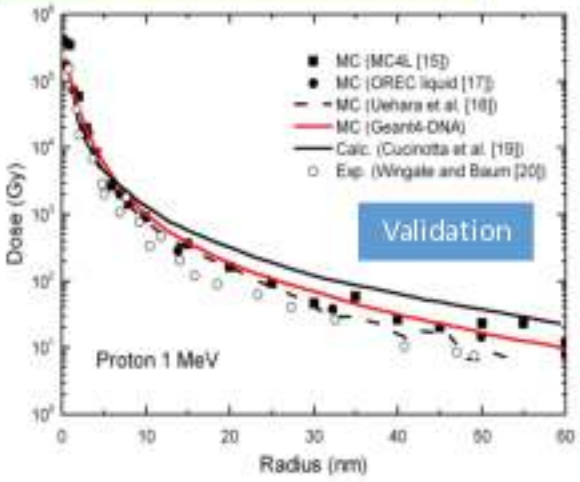
- **Geant4-DNAの場合**
  - 離散過程で扱う
    - DNA損傷の位置決定のため、細胞核内の詳細なエネルギー損失分布を計算
    - 大量の低エネルギーの二次粒子/活性種が発生する
      - 一つの初期粒子につき数千個から数万個程度
      - 高速化の取り組み (MPEXS-DNA) ➔ 後述



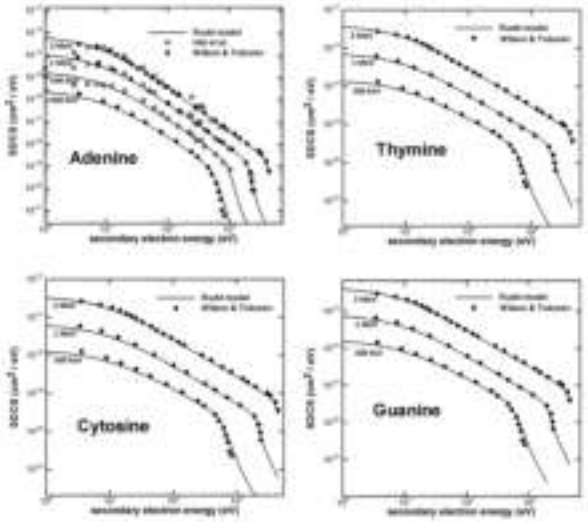
Geant4-DNAの物理反応モデル

- **水等価物質**
  - meV までの電磁相互作用を扱える
    - 物理反応: 弾性散乱、励起、電離、…
    - 対象粒子: 電子、光子、各種イオン
- **生体組織との物理反応モデル**
  - DNA構成成分の断面積データ
    - テトラヒドロフラン(THF)、リン酸トリメチル(TMP)、ピリミジン塩基(PY)、プリン塩基(PU)
    - 対象粒子:
      - 電子 (12 eV – 1 keV、弾性散乱、励起、電離)
      - 陽子 (70 keV – 10 MeV, 電離のみ)
    - DOI: 10.1016/j.radphyschem.2016.09.027
  - DNA塩基の断面積データ
    - アデニン、グアニン、シトシン、チミン
    - 陽子の電離反応 (1 keV – 100 GeV)
    - DOI: 10.1063/1.4990293
- **High-Z 物質 (金ナノ粒子)**
  - 金ナノ粒子による放射線増感作用の定量解析
  - 10 eV までの電子と金との電磁相互作用を実装
    - DOI: 10.1063/1.4972191

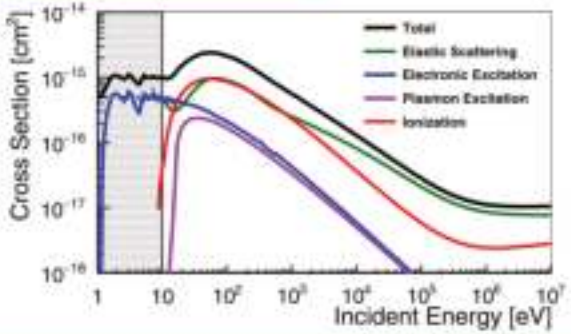
DOI: 10.1016/j.nimb.2014.04.025

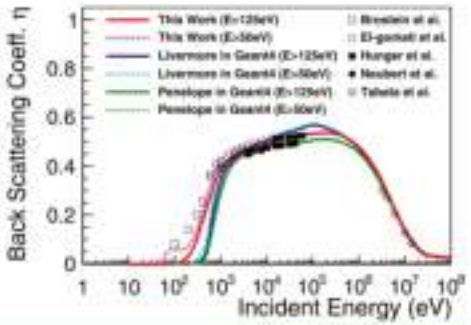


DOI: 10.1063/1.4990293



DOI: 10.1063/1.4972191 (産総研の坂田洞察さんの仕事)

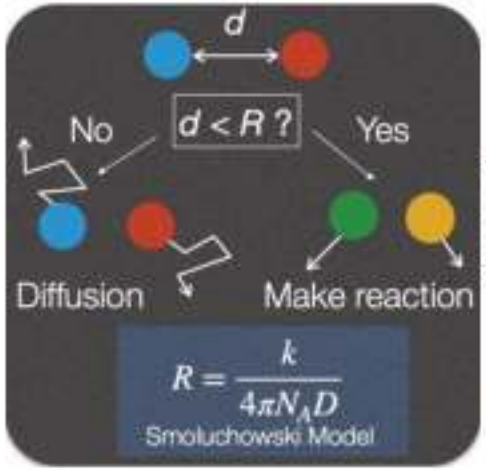




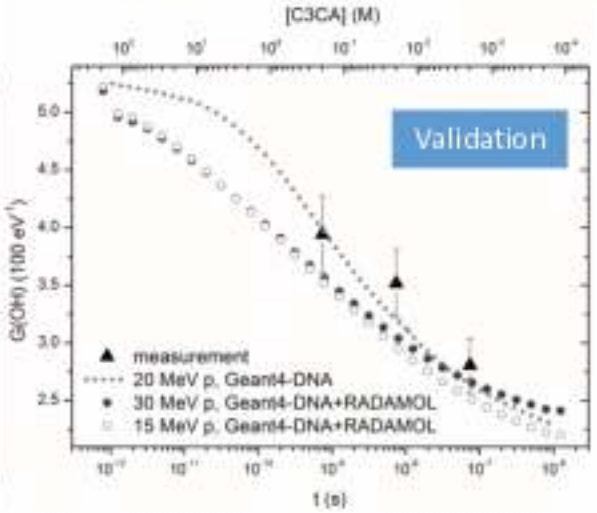
水の放射線分解種の化学反応過程

- **物理化学過程 (< 1 ps)**
  - 励起 / 電離した水分子 (H_2O^*, H_2O^-/H_2O^+) の解離崩壊
    - 水和電子やOHラジカルの生成
- **化学過程 (1 ps ~ 1 us)**
  - **SBS (Step-By-Step) 法**
    - DOI: 10.1016/j.jcp.2014.06.011
    - 分子種間の距離が反応半径未満だと反応したと判定
      - Smoluchowskiモデルにも基づいている
    - 分子種はランダムな方向に拡散
      - 時間ステップ長は動的に調整する
      - 時間はかかるが、各分子種の進んだ経路が決まる
  - **IRT (Independent Reaction Time) 法**
    - DOI: 10.1002/mp.14490
    - 分子種とその近傍の分子種との反応時刻を衝突確率に基づいて計算
      - 反応リストを作成して、反応時刻の早い順に処理を進める
        - 生成物があるとリスト更新する
      - 計算は速いけれど、各分子種の位置は決まらない

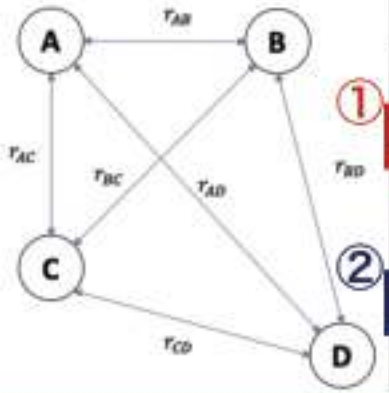
SBS法



DOI: 10.1007/s00411-015-0605-6



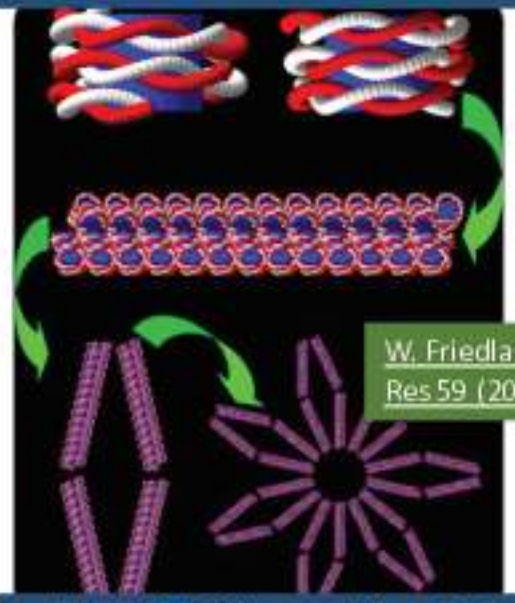
IRT法



Reaction	Time (ps)	Order of reactions
A+B	63	X
A+C	3	1
A+D	111	X
B+C	192	X
B+D	15	2
C+D	90	X

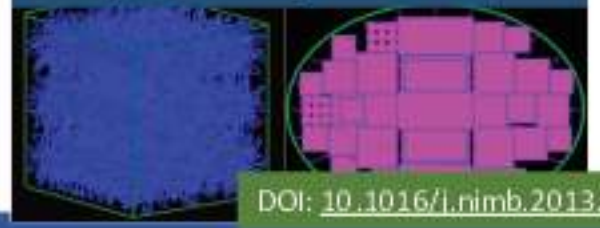
Geant4-DNAの細胞核等のモデリング

ヒストン ➔ クロマチン繊維のモデリング

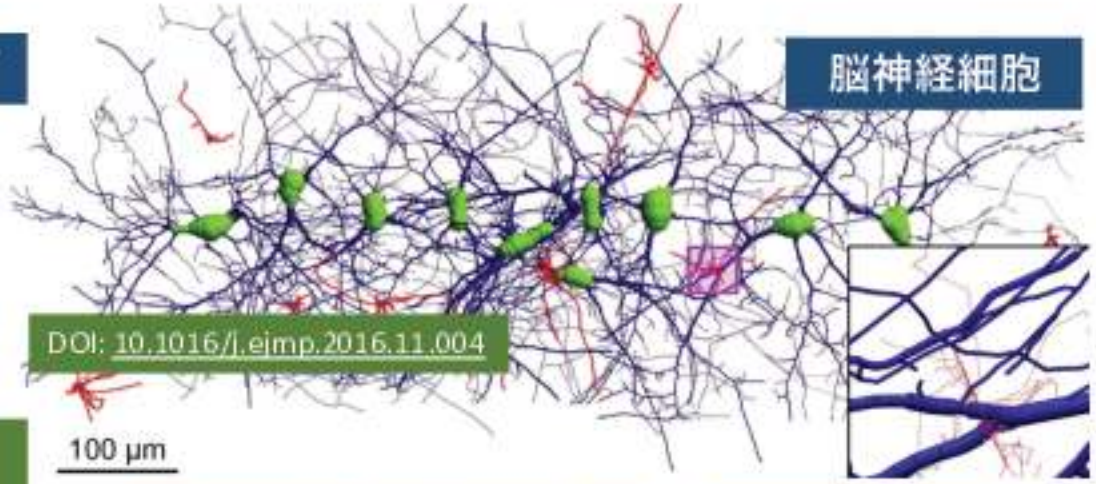


W. Friedland et al, Rad. Res 59 (2003), 401-410

線維芽細胞のジオメトリ
(総計6Gbpの塩基対)



DOI: 10.1016/j.nimb.2013.01.009



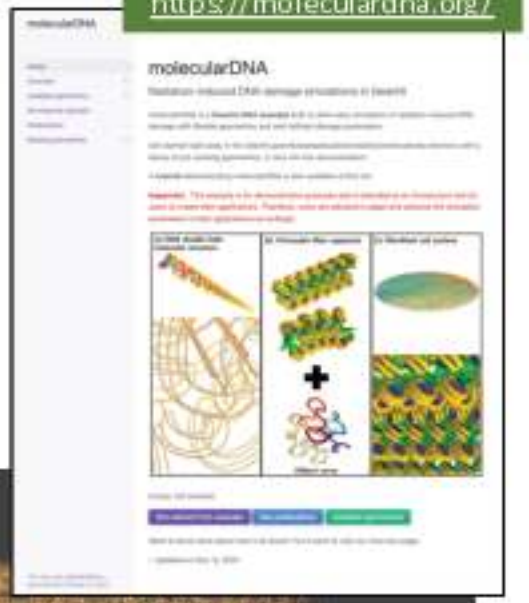
脳神経細胞

DOI: 10.1016/j.ejmp.2016.11.004

100 μm

タンパク質/アミノ酸

https://moleculardna.org/

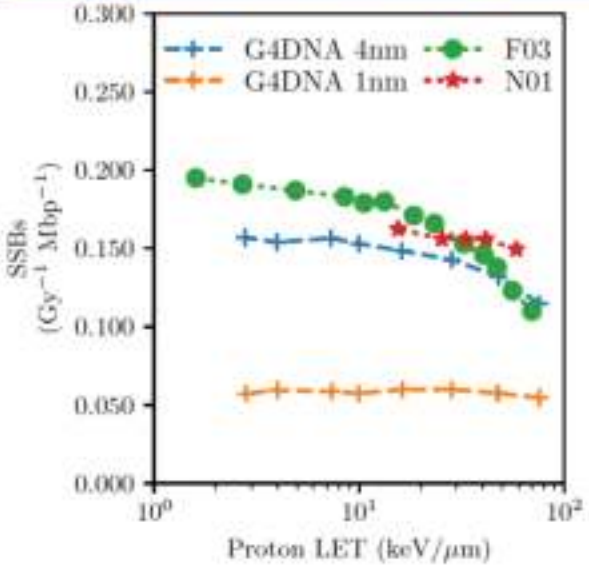


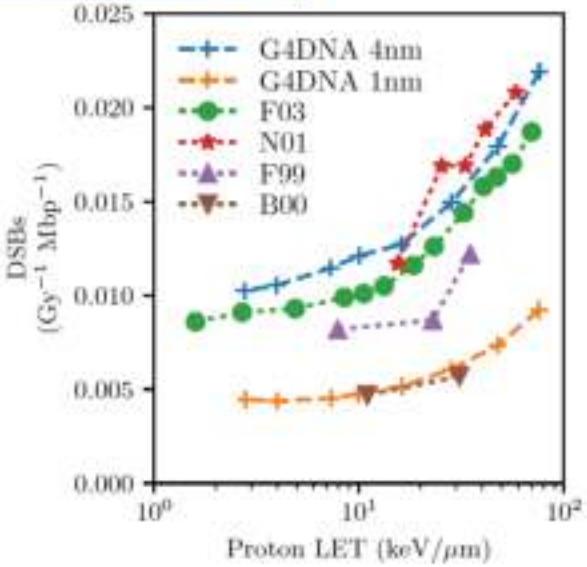
バクテリア

DOI: 10.1016/j.ejmp.2018.02.011 / 10.1016/j.ejmp.2017.12.008

放射線による生物学的影響の定量解析

DOI: 10.1016/j.ejmp.2018.02.011 / 10.1016/j.ejmp.2017.12.008



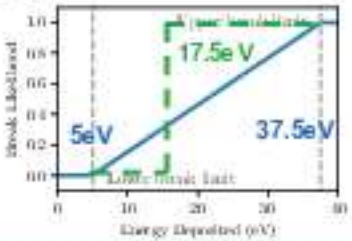


直接効果: $E_{loss} > E_{thr}$

間接効果: ·OH + DNA -> SSB

(P_{OH} = 40 ~ 80%)

→ 一重鎖切断 (SSB)



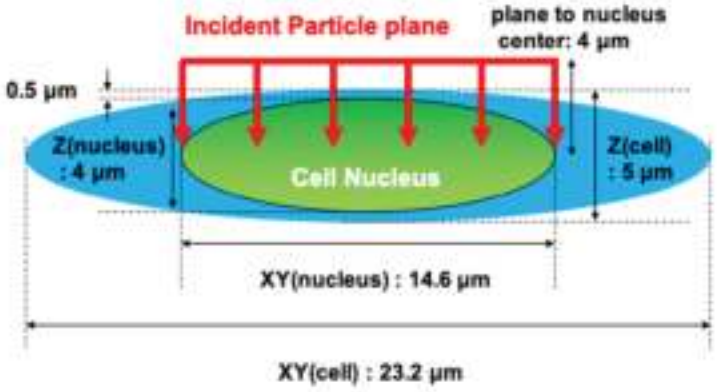
10塩基対以内

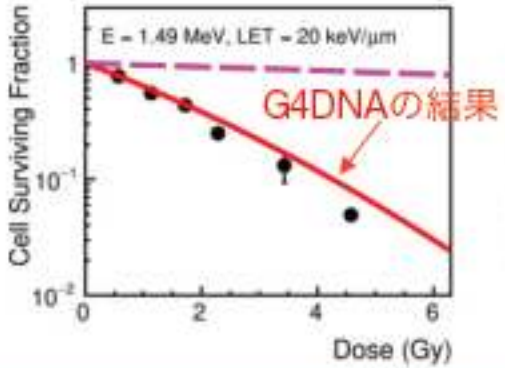
→ 二重鎖切断 (DSB)

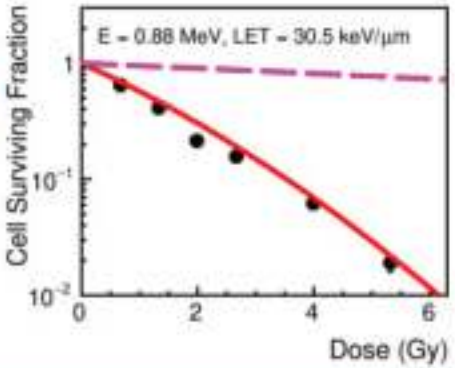
DOI: 10.1016/j.ejmp.2022.11.012

DNA損傷と修復を考慮した細胞生存率の定量解析

(産総研の坂田洞察さんの仕事)



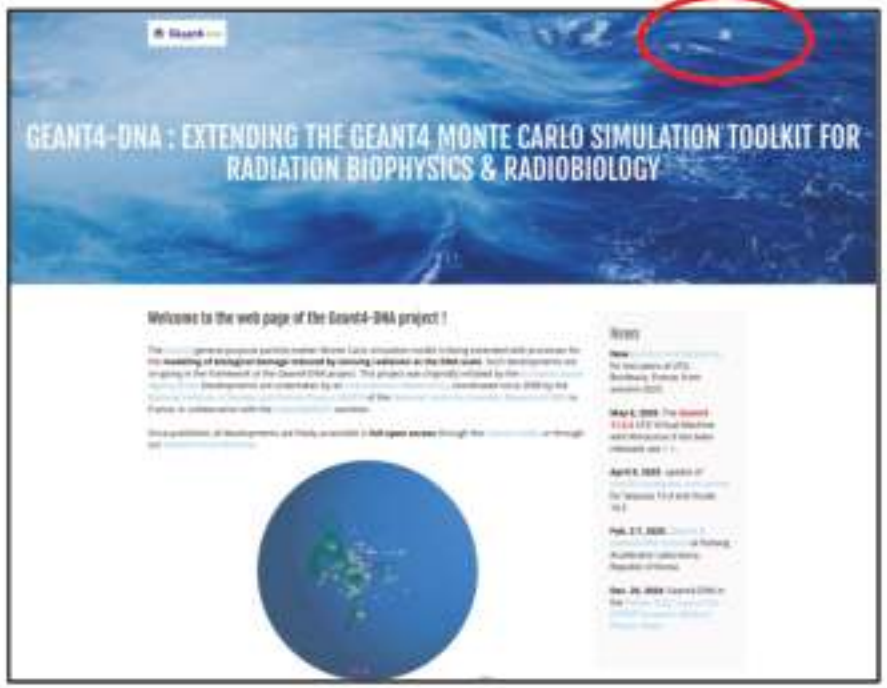




Geant4-DNAの情報

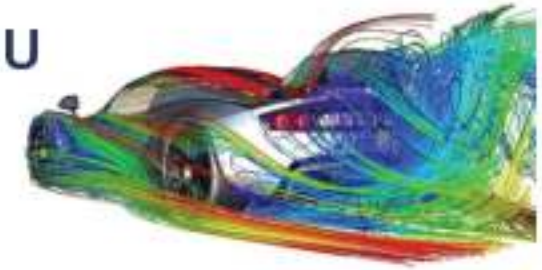
- **Geant4-DNAプロジェクト公式ページ**
  - http://geant4-dna.org/
    - 論文、Exampleコードの情報、講習会資料、仮想マシン、…
- **Geant4-DNA Reference Papers**
  - H. N. Tran, et al., "Review of chemical models and applications in Geant4-DNA: Report from the ESA BioRad III Project"
    - DOI: 10.1002/mp.17256
  - S. Incerti, et al., "Geant4-DNA example applications for track structure simulations in liquid water: a report from the Geant4-DNA Project"
    - DOI: 10.1002/mp.13048
  - M. A. Bernal, et al., "Track structure modeling in liquid water: A review of the Geant4-DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit"
    - DOI: 10.1016/j.ejmp.2015.10.087
  - S. Incerti, et al., "Comparison of Geant4 very low energy cross section models with experimental data in water"
    - DOI: 10.1118/1.3476457
  - S. Incerti, et al., "The Geant4-DNA project"
    - DOI: 10.1142/S1793962310000122

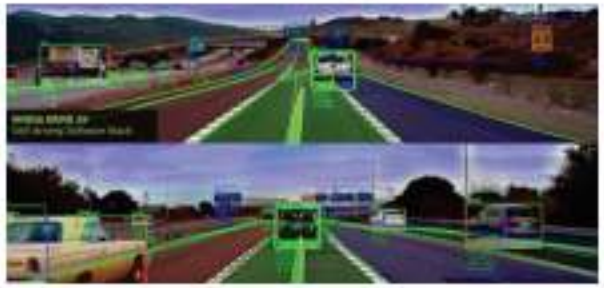
各種情報はこちらから

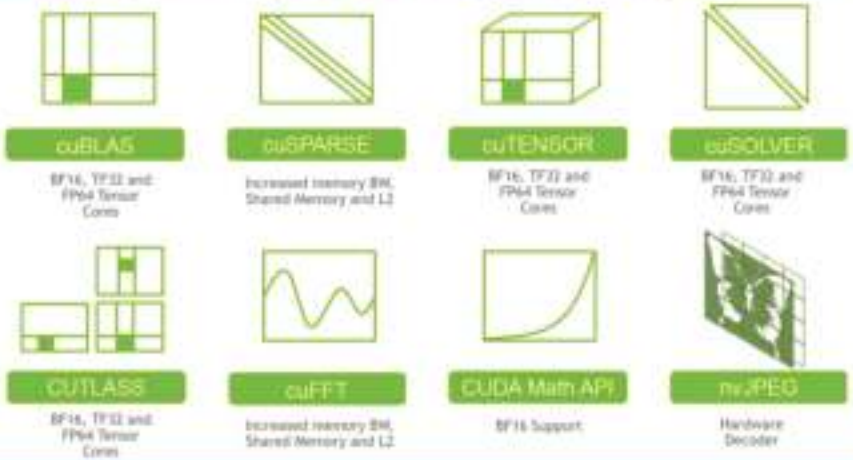


GPGPU: GPUによる汎用計算

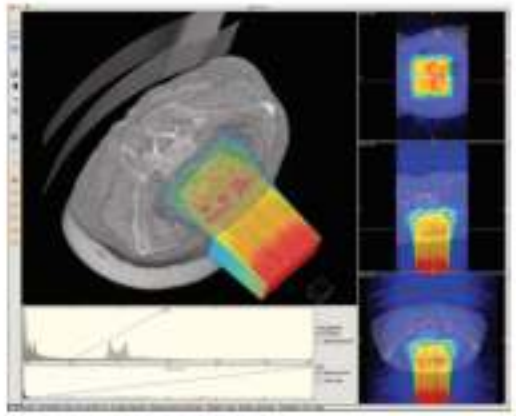
- **GPU: Graphical Processing Unit**
  - グラフィックス用の超並列デバイス
    - GPU: +16,000 コア
    - CPU: ~100 コア
- **GPGPU: General-Purpose computing on GPU**
  - 科学技術計算などの汎用計算をGPUで加速
    - AI (深層学習)
    - 有限要素法シミュレーション
    - 分子動力学
    - 多体系問題
    - …
- **CUDA**
  - NVIDIA製GPUのためのGPUプログラミング言語
    - C/C++の拡張言語
  - デバッガー、プロファイラー、各種APIなどを提供
    - うまく活用すればアプリが高速化する





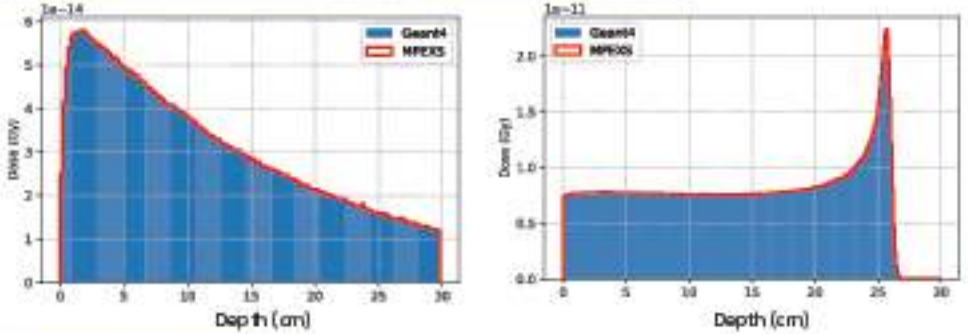


GPUによるGeant4の高速化



- **MPEXSプロジェクト**
  - NVIDIA製のGPUで動作する放射線モンテカルロ・コード
  - **Geant4の物理の知見を再利用**
    - 1 GeV 以下の電磁 / ハドロン / 中性子反応をCUDA言語で再実装
    - 反応断面積データなどをGPU計算に最適化
  - 超並列計算で線量計算を加速
    - X線治療の線量計算において、GPU1基でCPU1,000コア相当の性能を実現
  - R&Dは完了しており、今は応用研究の段階
    - 最新バージョンはMPEXS2.1
    - 非公開コード

深部線量分布: 6MV X線(左)、20 MeV 陽子線 (右)



ベンチマーク結果

EPS Score (Events/msec)

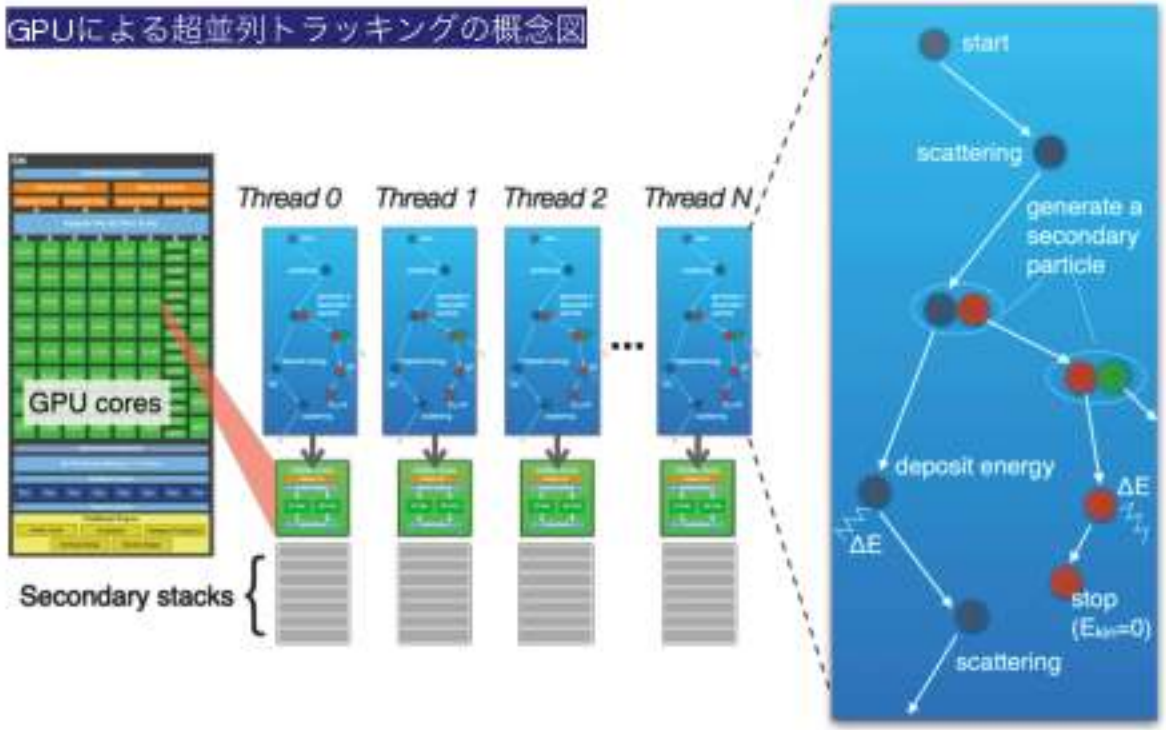
	Electron 20 MeV	X-ray 6 MV	X-ray 18 MV	Proton 20 MeV
Geant4 (10.7)	2.9	6.2	5.6	6.3
MPEXS2.1	2423.7	5817.5	4600.8	227.1
Speedup	x832	x931	x822	x36

- CPU: Intel Xeon Gold 6326 (Ice Lake)
- GPU: NVIDIA RTX 6000 Ada Generation

MPEXSにおける超並列トラッキング

- **数十万粒子をGPUスレッドに展開して同時にトラッキング**
  - 個々の粒子は統計学的に独立
  - GPUスレッドが保持する情報
    - 粒子情報: $(\vec{x}, \vec{p}, E, k)$, $k \in (\gamma, e^-, e^+)$
    - 2次粒子スタック
  - 初期粒子 → 二次粒子の順に、スタックが空になるまで、GPUスレッドは処理を継続する

GPUによる超並列トラッキングの概念図



GPUによるマイクロドジメトリの高速化

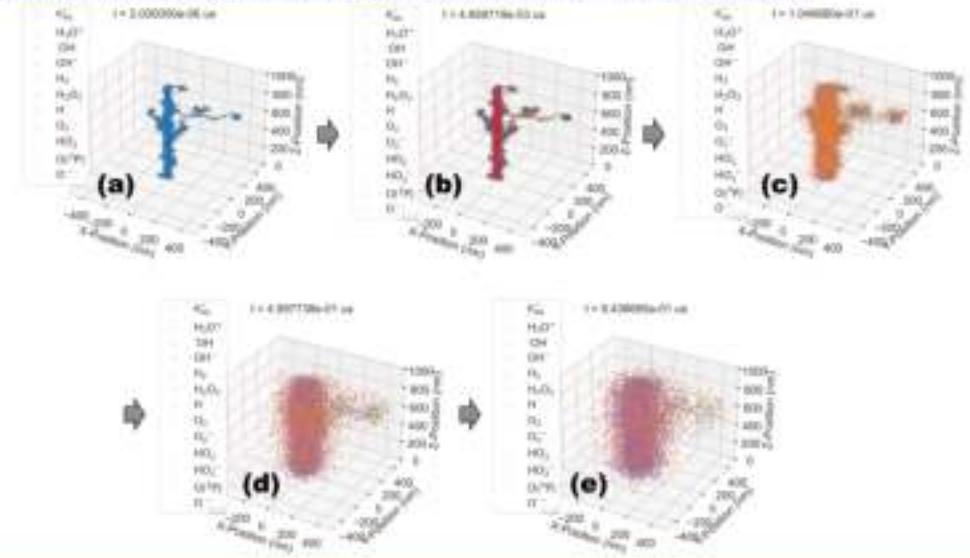
■ Geant4-DNAの高速化

- DNA分子のどこで損傷したか解像度をあげるため、1イベントにつき数万個以上の二次電子や活性種を追跡していく
- 従来のCPU計算だと何日も時間を要するのでGPUで高速化したい

■ MPEXS-DNA

- MPEXSシリーズのマイクロドジメトリへの拡張
- Geant4-DNAをGPUで加速
  - **Geant4 10.7 Patch-4 の物理過程と化学過程 (SBS法) をCUDAで移植**
  - G4DNAの水等価物質が扱える
  - DNA損傷/修復モデルは未実装

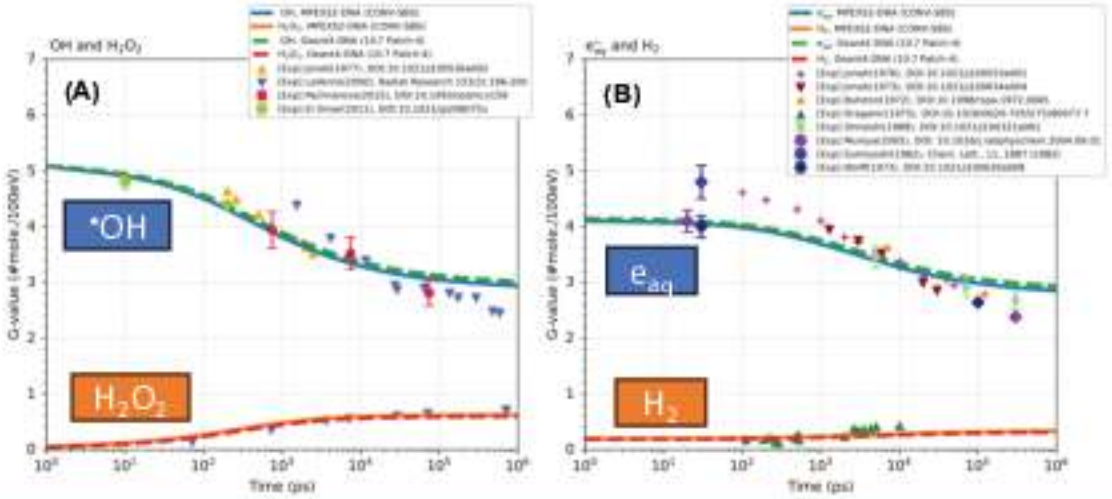
5 MeV/u の炭素線照射時の活性種の拡散・化学反応過程



MPEXS-DNAのベンチマーク結果

- **750 keV 電子照射の水の放射線分解シミュレーション**
  - OHラジカルや水和電子のG値の実験値を再現
  - GPU1基でCPU7,600コア分の計算速度を達成
    - CPU1コアで4日の計算が1分以内で完了

Comparison plots of G-value time profiles for •OH, e_{aq}, H_2 and H_2O_2 between MPEXS2-DNA and Geant4-DNA/measured data
(Solid lines: MPEXS2-DNA, dashed lines: Geant4-DNA, the others: measured data)



MEDICAL PHYSICS
The International Journal of Medical Physics Research and Practice
DOI: 10.1002/mp.13370
Research Article · Open Access
MPEXS-DNA, a new GPU-based Monte Carlo simulator for track structures and radiation chemistry at subcellular scale
Shogo Okada, Koichi Murakami, Sébastien Incerti, Katsuya Amako, Takashi Sasaki
First published: 28 December 2018 | https://doi.org/10.1002/mp.13370 | Citations: 16

Awared "TOP DOWNLOADED PAPER 2018-2019"
in AAMP Medical Physics (Wiley)

	Geant4-DNA 10.7.4	MPEXS2.1-DNA
Throughput (#histories / min.)	5.69	43564.97
Speedup Factor (MPEXS2.1 / Geant4)	-	**x7,656**

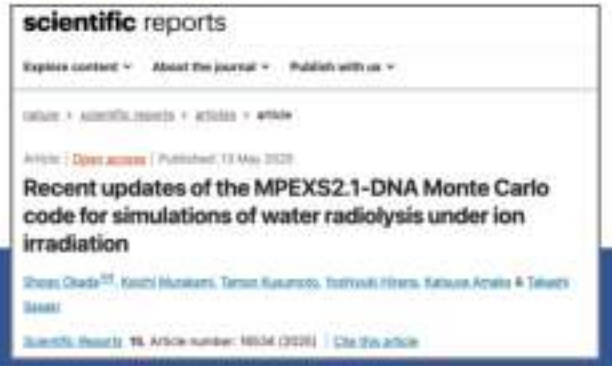
Benchmark hardware:
- CPU: Intel Xeon Gold 6326 (Ice Lake)
- GPU: NVIDIA RTX 6000 Ada Generation

MPEXS-DNAの最近の動向

- **イオン照射シミュレーションのための拡張**
  - **化学反応モデルの拡張**
    - 既存モデルで考慮していない化学反応:
      - 活性酸素種 (ROS): $O^{\cdot-}$, O_2, $O_2^{\cdot-}$, $HO_2^{\cdot}$, HO_2^-
      - ラジカルスカベンジャーなどの溶存分子種
    - RITRACKSコードを参考に**代替SBSモデル**を実装
      - I. Plante (DOI: 10.1007/s00411-011-0367-8)
      - 上記の考慮外の化学反応が扱える
  - **多重電離の実装**
    - 高LET放射線 (例: 炭素線) では、多重電離を介したROS の生成が無視できない
    - 過去の研究を参考に多重電離を実装した
      - J. Meesungnoen et. al (DOI: 10.1021/jp058037z)
      - B. Gervais et. al (DOI: 10.1016/j.radphyschem.2005.09.015)

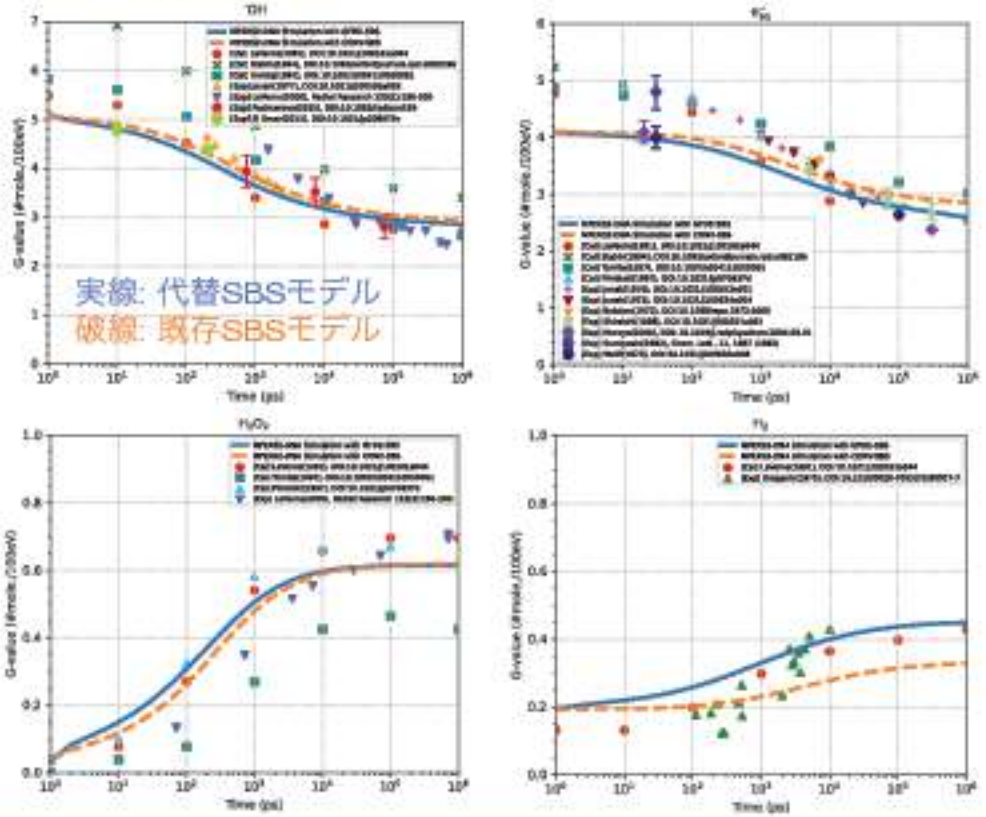
- **高線量率照射シミュレーション基盤の開発**
  - 計算科学的アプローチでFLASH効果の機序の理解を深めることが目的
  - KEKとQSTの共同研究

- **イオン照射向けの機能拡張については、論文が出版されました**
  - S. Okada et al., "Recent updates of the MPEXS2.1-DNA Monte Carlo code for simulations of water radiolysis under ion irradiation"
  - DOI: 10.1038/s41598-025-00875-w

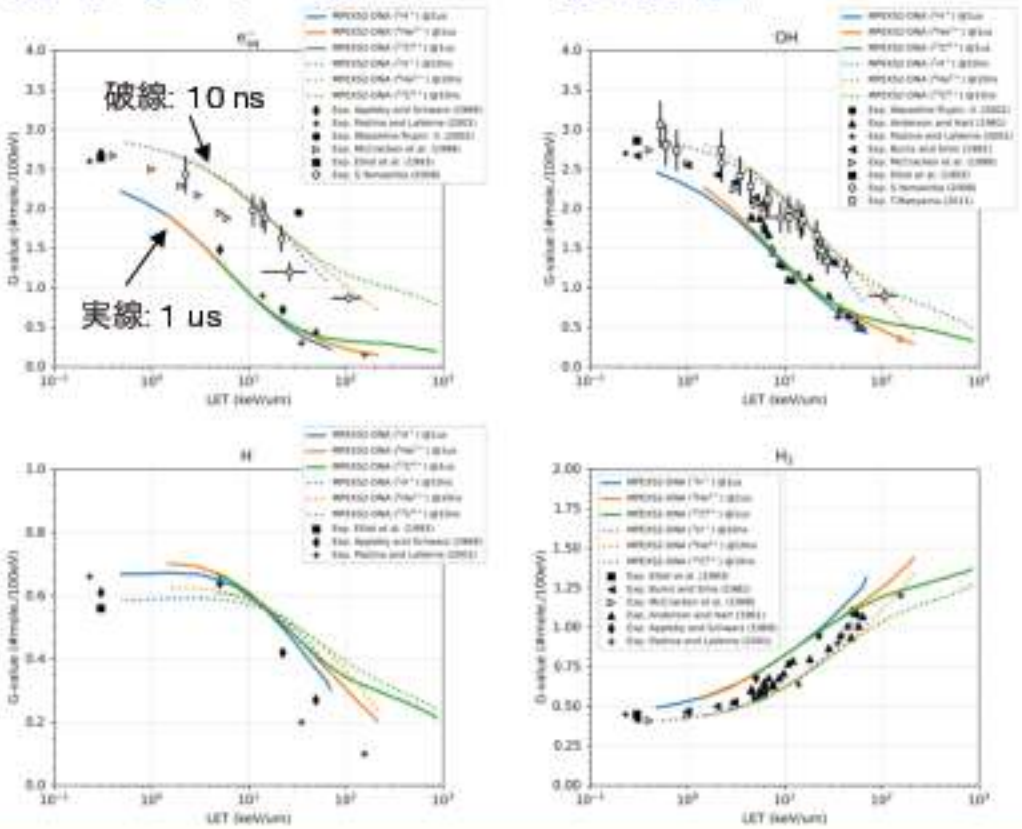


イオン照射シミュレーションの検証 (1)

- 電子照射における分子種のG値の時間依存性



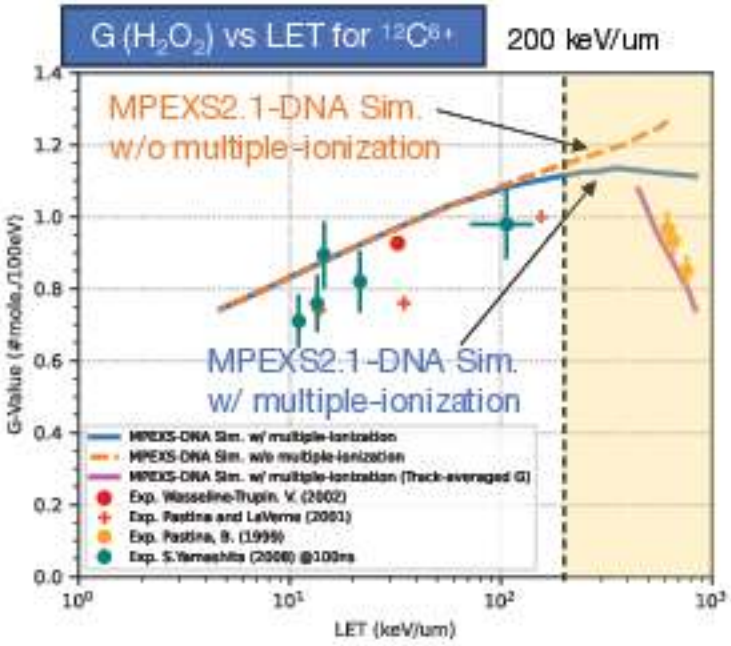
- $^{1}H^{+}$, $^{2}He^{4+}$, $^{12}C^{6+}$ イオン照射時の分子種のG値のLET依存性



イオン照射シミュレーションの検証 (2)

■ 多重電離の検証

- 炭素線照射時の過酸化水素のG値のLET依存性
  - 過酸化水素の生成過程
    - $^{\cdot}OH + {}^{\cdot}OH \rightarrow H_2O_2$
  - 多重電離由来のROS生成でOHラジカルの消費増
    - $^{\cdot}OH + O(^3P) \rightarrow HO_2^{\cdot}$
    - $^{\cdot}OH + HO_2^{\cdot} \rightarrow O_2$
  - 200 keV/um を境に $G(H_2O_2)$ は減少に転じる
    - 実験値の傾向と一致



■ 計算時間の短縮化

- 既存モデルよりも10倍程度の計算速度の高速化
  - 既存モデルは時間ステップ幅を動的に調整
  - 改良モデルは対数でステップ幅を固定

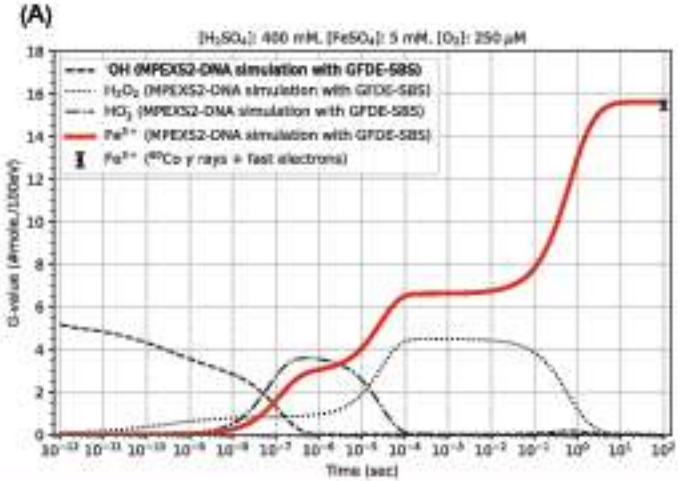
		#Time Steps	HPS Score
$^4He^{2+}$ 20 MeV	GFDE-SBS	240 steps	685 histories/sec
	CONV-SBS	23,744 steps	50 histories/sec
	Performance Gain		**x13.9**

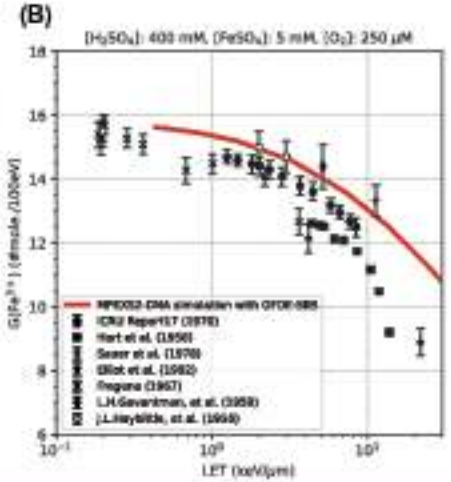
イオン照射シミュレーションの検証 (3)

■ Fricke線量計

- □ Fricke 水溶液に100 MeVの陽子線を照射
  - ■ $[H_2SO_4]$ = 0.4 M, $[FeSO_4]$ = 5 mM, $[O_2]$ = 0.25 mM
  - ■ 溶質の化学反応は擬1次反応として扱う
- □ Fe^{3+}イオンのG値の時間依存性とLET依存性を実験値と比較
  - ■ $G(Fe^{3+})$ ~ 15.6 (MPEXS-DNA @ 100 s)
  - ■ $G(Fe^{3+})$ = 15.6 ± 0.2 (ICRUの報告値)

$$
\begin{cases}
{}^{\cdot}OH + Fe^{2+} \rightarrow \boxed{Fe^{3+}} + OH^- \\
H^{\cdot} + O_2 \rightarrow HO_2^{\cdot} \\
HO_2^{\cdot} + Fe^{2+} \rightarrow H_2O_2 + \boxed{Fe^{3+}} \\
H_2O_2 + Fe^{2+} \rightarrow \boxed{Fe^{3+}} + {}^{\cdot}OH + OH^-
\end{cases}
$$





MPEXS-DNAによる応用研究

■ 高線量率照射 (UHDR) シミュレーション基盤の開発

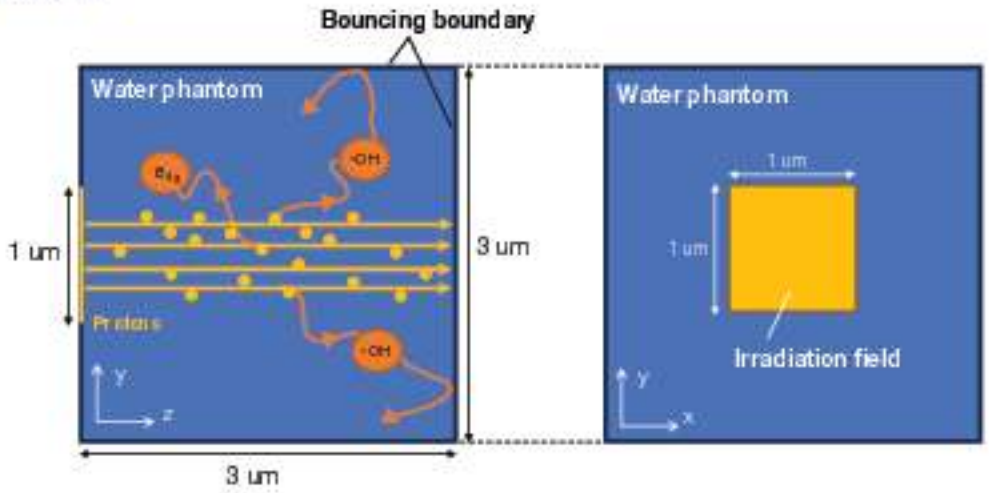
- □ KEKとQSTとの共同研究
- □ UHDR照射条件での水の放射線分解種の動態解析
  - ■ FLASH効果の機序の理解を深めることが目的

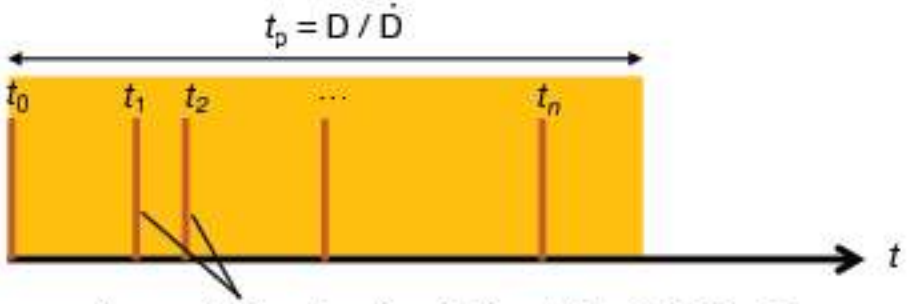
■ シミュレーション・セットアップ

- □ 水ファントム: 3 x 3 x 3 um^3
  - ■ 境界面は反射条件を課す
- □ 溶存酸素濃度: $P(O_2)$ = 25% (~240 uM)

■ 55 MeV 陽子線の連続照射

- □ 総線量: D = 0.1 Gy
- □ 線量率: $\dot{D}$ = 0.02 – 500 Gy/s
  - ■ Dと$\dot{D}$から照射継続時間 t_p が決定
  - ■ 照射時刻は [1 ps, t_p] の範囲で一様乱数でサンプリング
  - ■ 最初の陽子照射から1,000秒までをシミュレート





An event of proton irradiation. t_i (i = 0, 1, 2, …) is sampled within [1 ps, t_p] using uniform random numbers.

高線量率照射シミュレーション

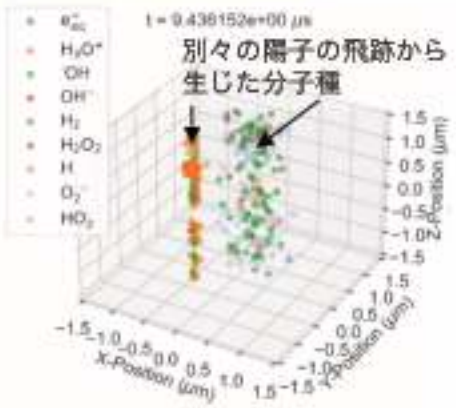
■ 溶存酸素濃度の変化

- □ UHDR条件下の酸素濃度変化率は小さい
  - ■ **実験: $\Delta P(O_2) = -0.1\%/Gy$**
    - □ Kusumoto et al., DOI: 10.1667/RADE-23-00244.1
  - ■ **シミュレーション: $\Delta P(O_2) = -0.14\%/Gy$**
    - □ 酸素枯渇に必要な線量は約250 Gyで、FLASH実験の線量値 (10 – 40 Gy) より高い
    - □ 実際は酸素枯渇は起きてない？

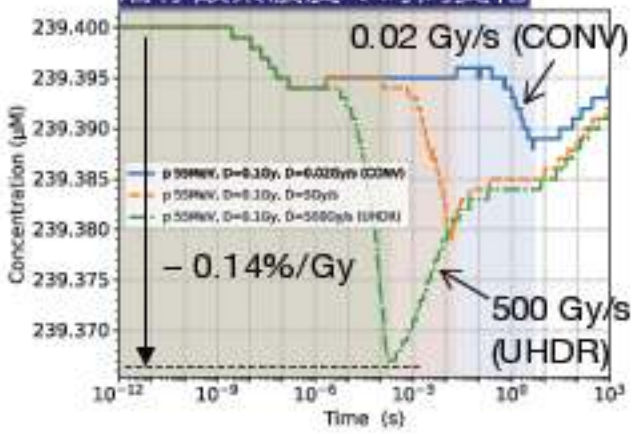
■ OHラジカルの収率の線量率依存性

- □ 線量率増大に伴い·OHの収率は下がる
  - ■ 1本の陽子の飛跡から生成された·OHが、近くの別の飛跡からの·OHと反応しやすく、活性酸素種の数が減る
  - ■ DNA分子の間接効果や塩基損傷が減り、これがUHDR照射で正常細胞を守る一因？

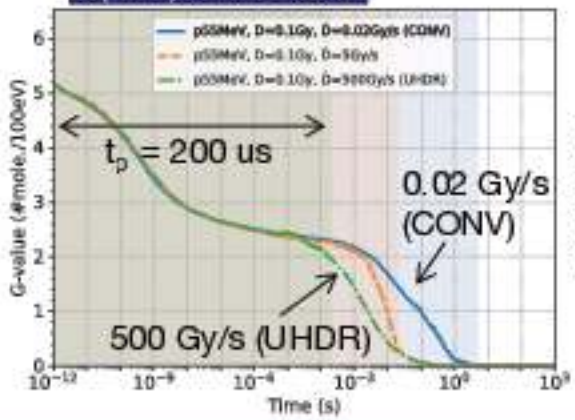
陽子線の連続照射



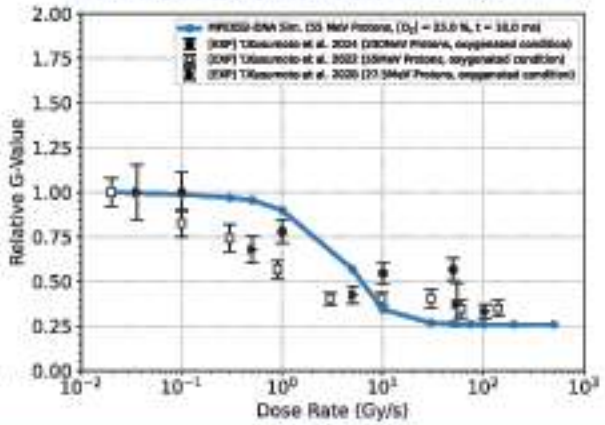
溶存酸素濃度の時間変化



G(·OH)の時間変化



G(·OH)@10msの線量率依存性



まとめ

- **Geant4-DNA**
  - Geant4のマイクロドジメトリへの拡張パッケージ
    - 放射線による細胞の生物学的影響の定量解析が可能
    - オープンソース・ソフトウェア
- **MPEXS-DNA**
  - マイクロドジメトリ用のGPUモンテカルロコード
    - Geant4-DNA ver. 10.7 Patch-4 をベースとしている
    - 非公開コード
  - 水の放射線分解のシミュレーションをGPUで短時間で実行できる
    - 現状、生物学的効果のモデル実装はしていない
  - 今後の展望
    - 高LET放射線 (例: 炭素線) による酸素効果の定量評価
    - 他の線種でのUHDR照射における水の放射線分解種の動態解析
      - FLASH効果の機序の理解

PHITSの動向と最新版 (ver.3.34 & 3.35) の特徴

佐藤達彦 on behalf of the PHITS development team

第2回 EGS5-Geant4-PHITS合同研究会@KEK on 2025/05/15

最近の更新履歴

2023年09月 : OECD/NEAデータバンクにPHITS 3.33を登録

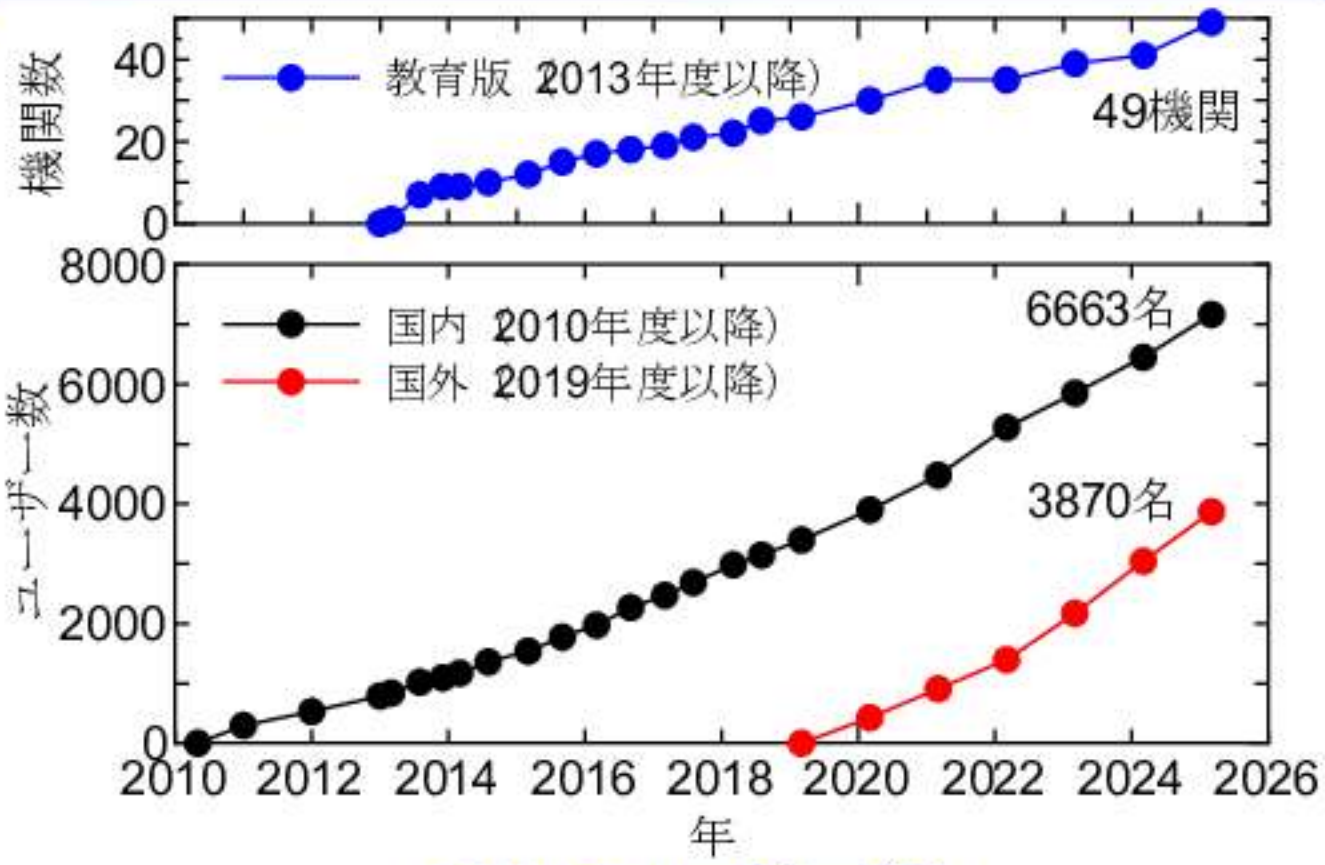
2023年12月 : PHITS公式引用文献を更新*

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

*T. Sato et al., Recent improvements of the Particle and Heavy Ion Transport code System - PHITS version 3.33, J. Nucl. Sci. Technol. 61, 127-135 (2024)

PHITSユーザー数の変化

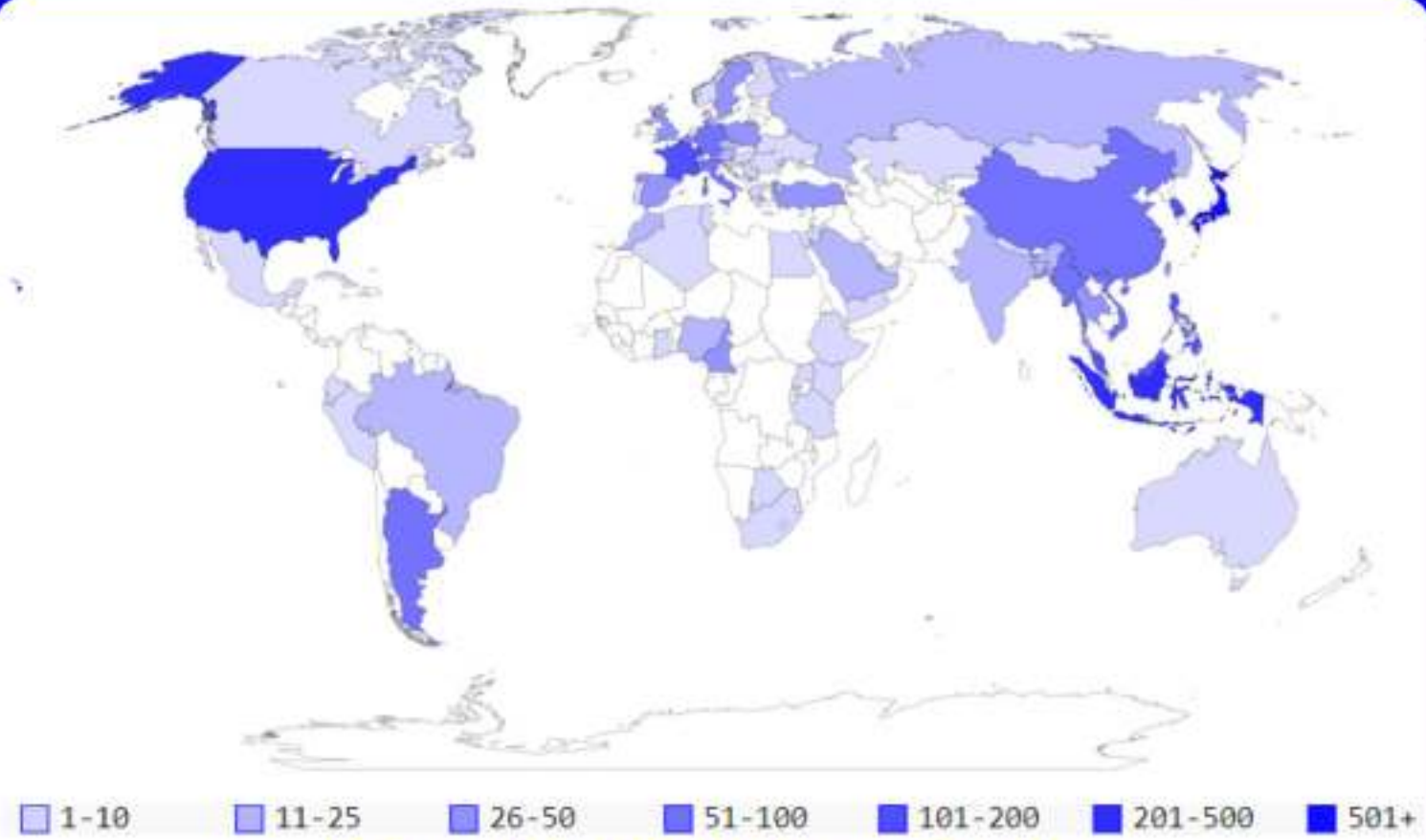


PHITSユーザー数*

10,000名突破！！

*国内：PHITS講習会に参加，もしくはRISTを通してPHITSを入手した人数
国外：2019年度以降に入手した人数（OECD/NEAデータバンク経由含む）

国別ユーザー数（2019年度以降）



2019年度以降の国別ユーザー数*

*2025年3月26日時点、所属機関の国でカウント

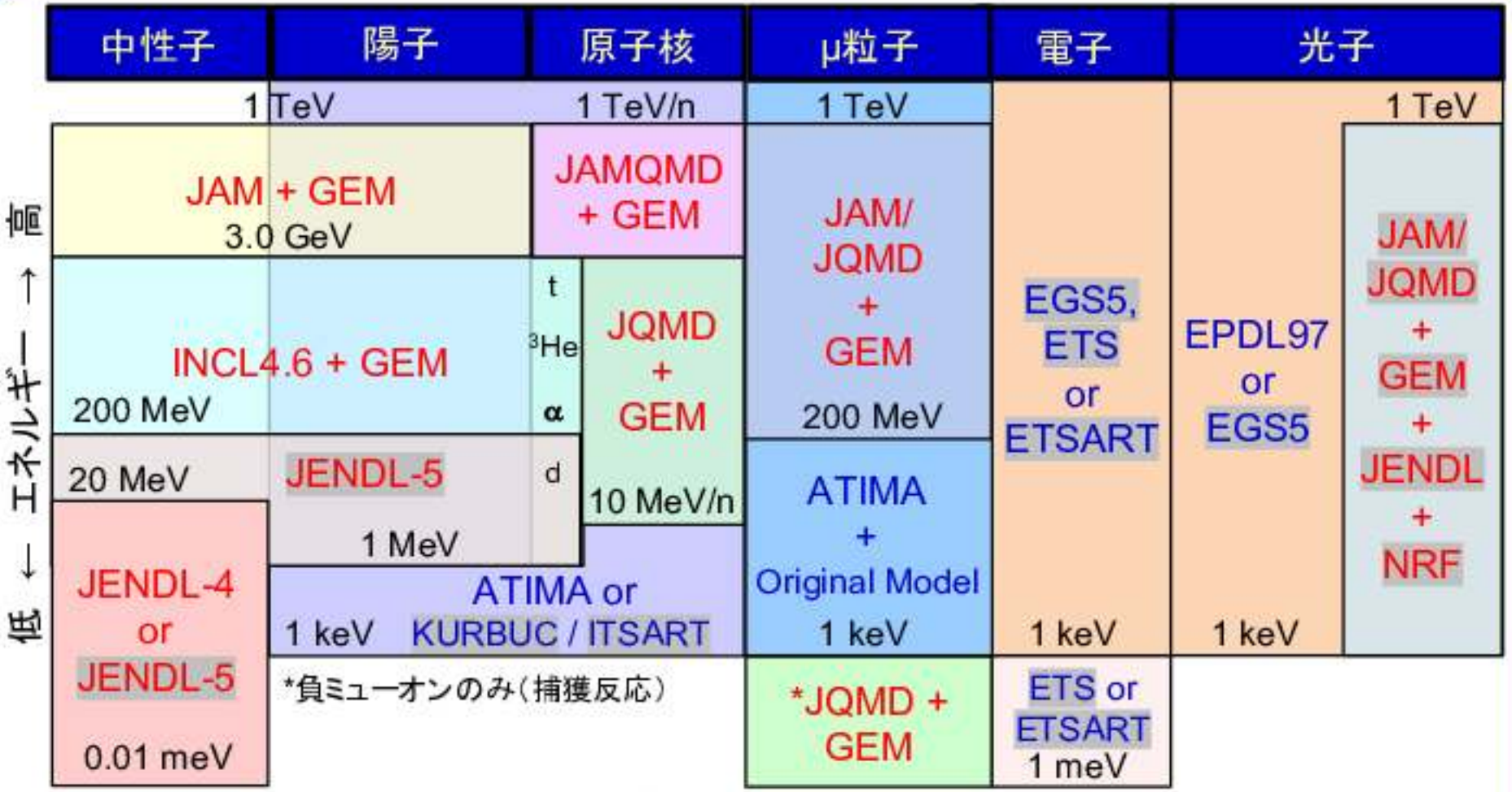
Top 10 countries

Country	#users
Japan	3573
Indonesia	586
United States	426
South Korea	335
Philippines	266
China	197
France	183
Spain	157
Malaysia	153
Argentina	136

6年間で78ヶ国から7,407名が新規ユーザー登録！

https://phits.jaea.go.jp/usermap/PHITS_map_userbase.html

PHITSに組み込まれた物理モデル（奨励設定）



赤: 原子核反応モデルもしくはライブラリ　　青: 原子反応モデルもしくはライブラリ

灰色でハイライトしたモデルやライブラリは、初期設定では利用されない

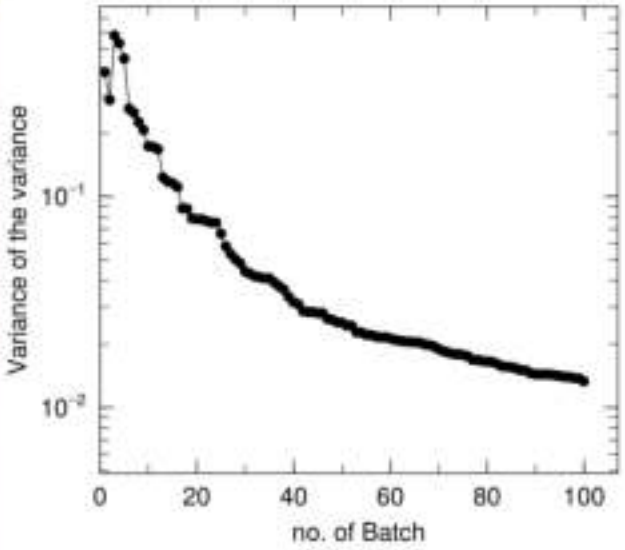
JENDL-5が利用できる場合はその利用を奨励するように変更（ただしデフォルトでは限定核種のみ）

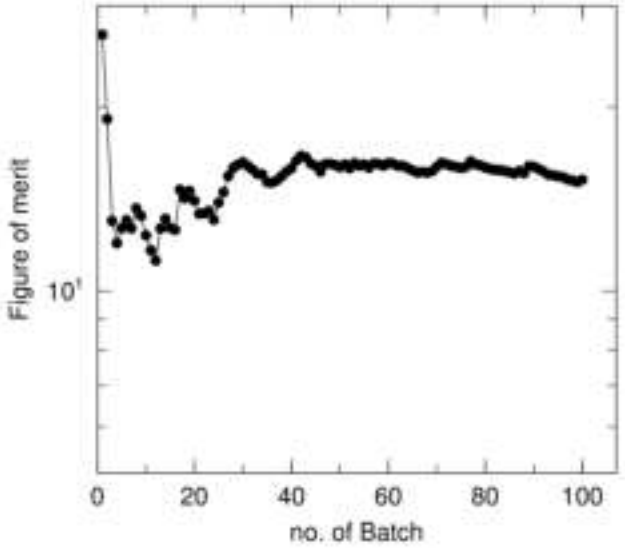
PHITS3.34での主な改良点

- ✓ 拡張された統計指標出力機能の開発
- ✓ 任意物質に対する電子飛跡構造解析モードETSARTの導入（平田）
- ✓ 厚いターゲット及び荷電粒子ライブラリを用いた[forced collisions]の導入
- ✓ 荷電粒子に対するAdjointモードの導入
- ✓ JENDL-5自動ダウンロード・セットアッププログラムの整備
- ✓ PHITS入力ファイル作成専用エディタ（PHITS-Pad）β版の組込
- ✓ PHIG-3Dへの4次元(x,y,z,t)飛跡可視化機能の追加

拡張された統計指標出力機能

- ✓ タリー結果に関する新たな統計指標：分散の分散(VOV: variance of variance)、性能指数(FOM: figure of merit)、確率密度分布の出力
- ✓ 統計指標の収束状況を確認するstatistical check sheetの出力





VOV（左）とFOM（右）の全ヒストリー数に対する推移

- 統計誤差のばらつきを表すVOVは1/*N*で減少
- 時間に対する計算効率を表すFOMは一定値に収束

Statistical check sheet at batch 100

no. = 1, reg = 11

Quantity	Output	Value	Desired	Pass
Mean	Current value	7.8418E-07	Constant	yes
Mean	History dep. (rel. slope)	-0.0162	= 0.00	
Relative error	Current value	0.0769	< 0.05	no
Relative error	History dep. (p in N^p)	-0.5053	= -0.50	yes
Variance of the variance	Current value	0.0133	< 0.10	yes
Variance of the variance	History dep. (p in N^p)	-1.0189	= -1.00	yes
Figure of Merit	Current value	1.5221E+01	Constant	yes
Figure of Merit	History dep. (rel. slope)	-0.0169	= 0.00	

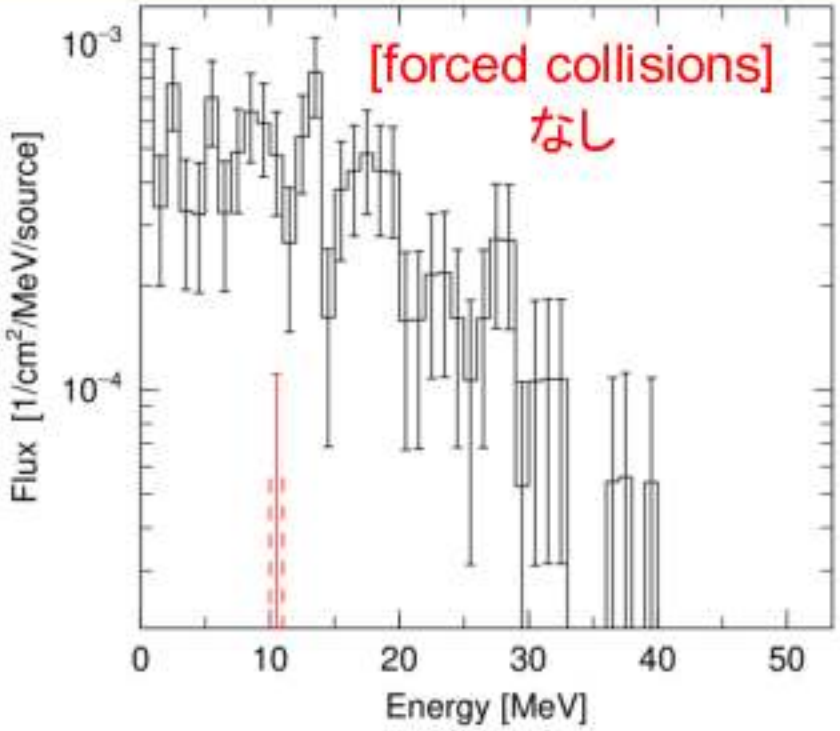
Statistical check sheet

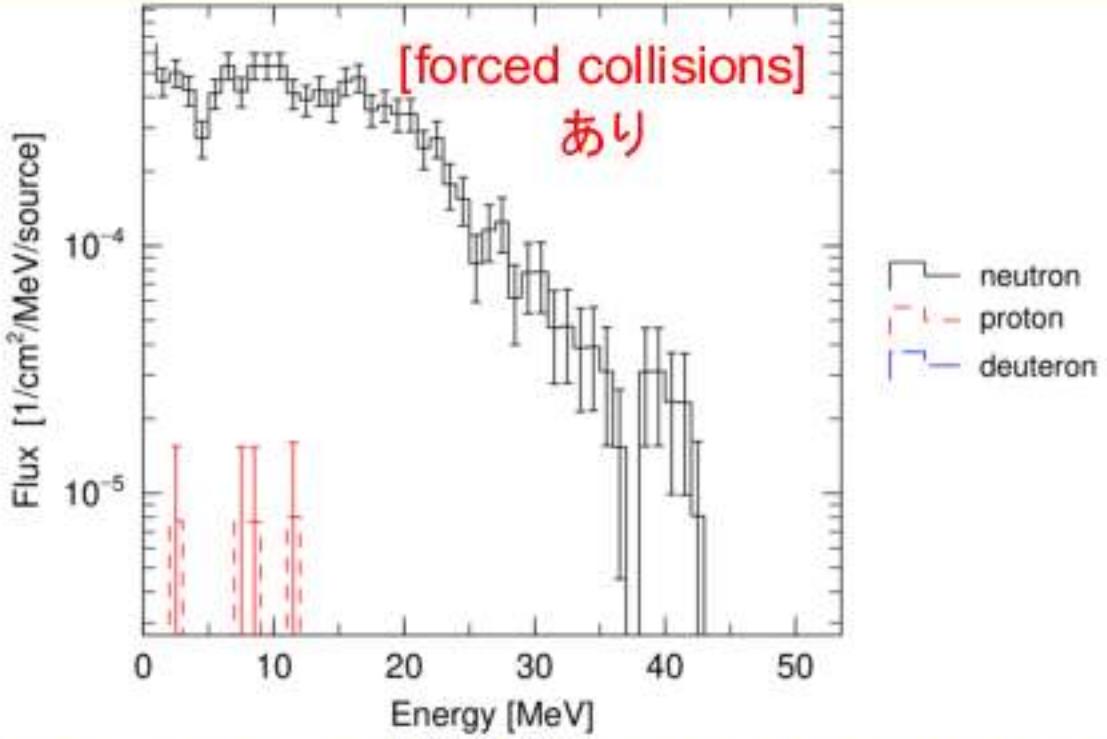
詳細はマニュアル6.10参照(入力ファイルはphits/sample/itall3)　本開発は原子力規制庁からRISTへの委託事業により実施

厚いターゲットに対する荷電粒子の[forced collisions]

- ✓ ターゲットを50等分*し、分割した各領域での核反応発生頻度をあらかじめ計算
- ✓ その確率に従って反応ポイントを決定し、核データもしくは核反応モデルを使って反応を再現

*分割数は[parameters]セクションで定義するnfcsegにより変更可能





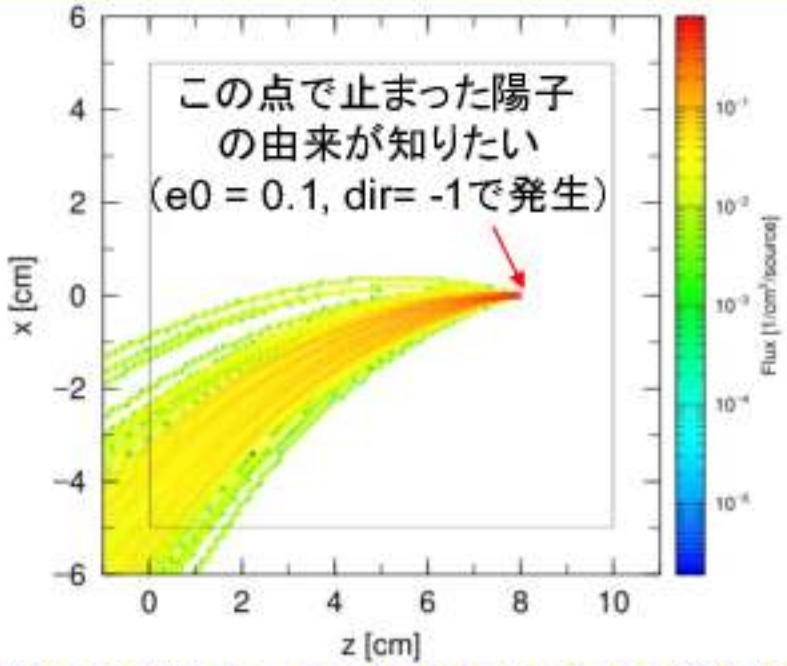
20MeV/nの重陽子をフルストップBeターゲット(0.9cm)に照射したときの放出粒子フルエンス

phits/recommendation/neutronsource参照

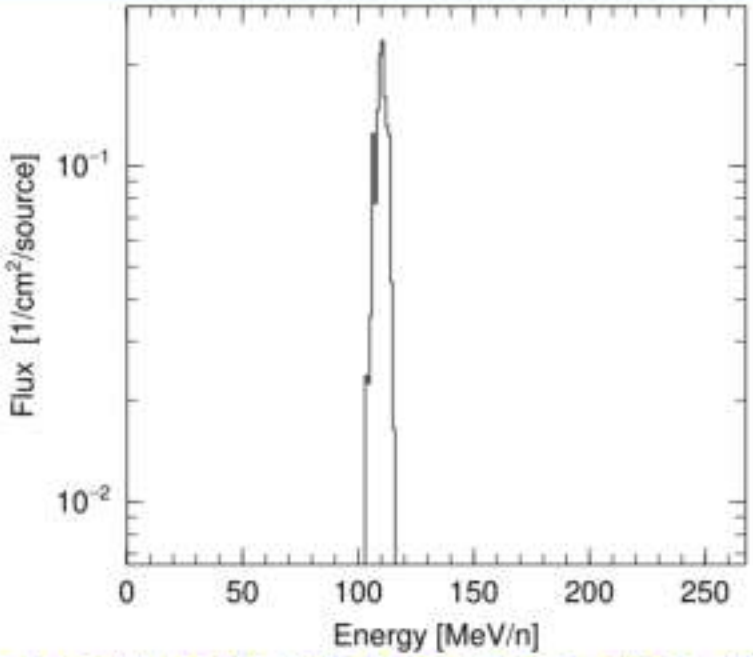
荷電粒子に対するAdjointモードの導入

Adjointモードとは？

- 時間反転させた粒子輸送計算
- タリーしたい場所から線源を発生させてAdjointモードで輸送すると、その粒子の由来が分かる
- 従来は光子に対してのみ適用可能だったが荷電粒子にも対応させた
- ただし、阻止能と磁場の影響のみ考慮し、核反応は考慮しない



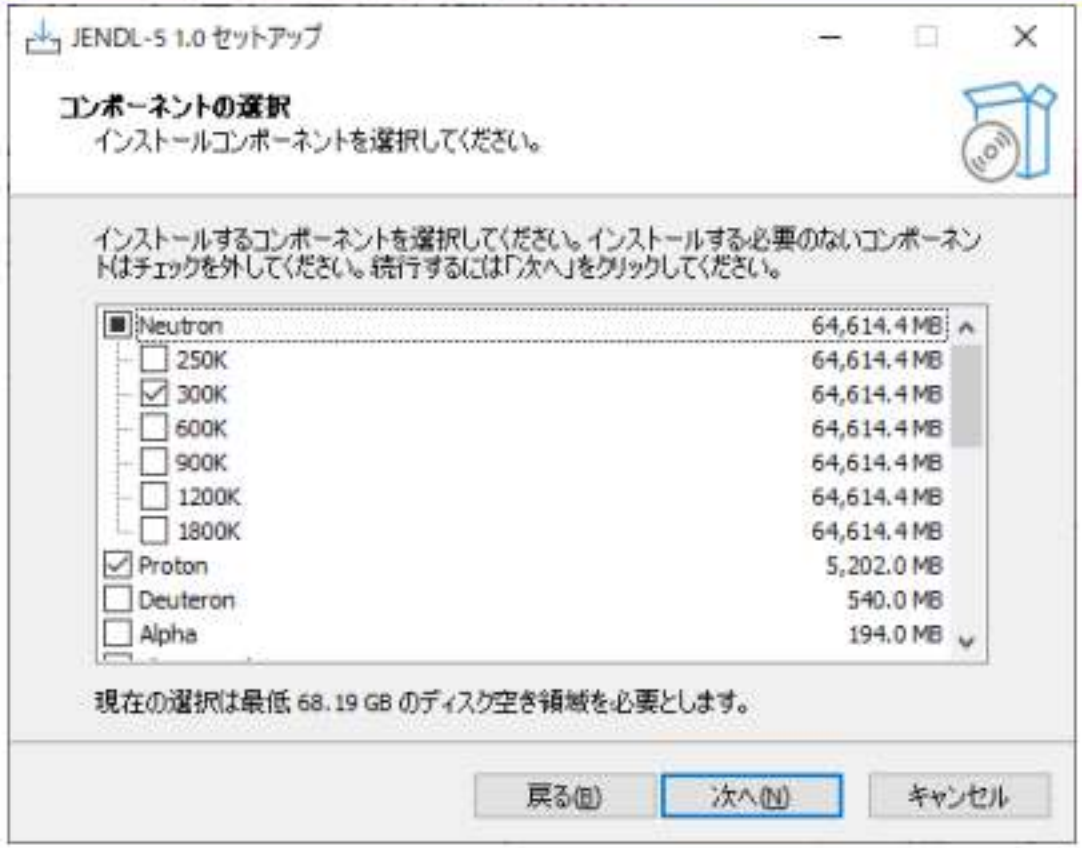
磁場の掛かった水中での陽子逆飛跡



水中の外に出るときの陽子エネルギー分布

詳細は /phits/utility/adjoint/charged参照

JENDL-5自動ダウンロード・セットアッププログラムの整備



ライブラリ選択画面（Windows用）

セットアップ手順

1. インストールしたいライブラリ*を選択
2. 選択したライブラリを自動でダウンロードして展開
3. ダウンロードしたフォルダ内にあるアドレスファイル(xsdir)情報をPHITS用アドレスファイル（通常はdata/xsdir.jnd）に追加**
4. 物質の天然元素展開機能をJENDL-5準拠にする

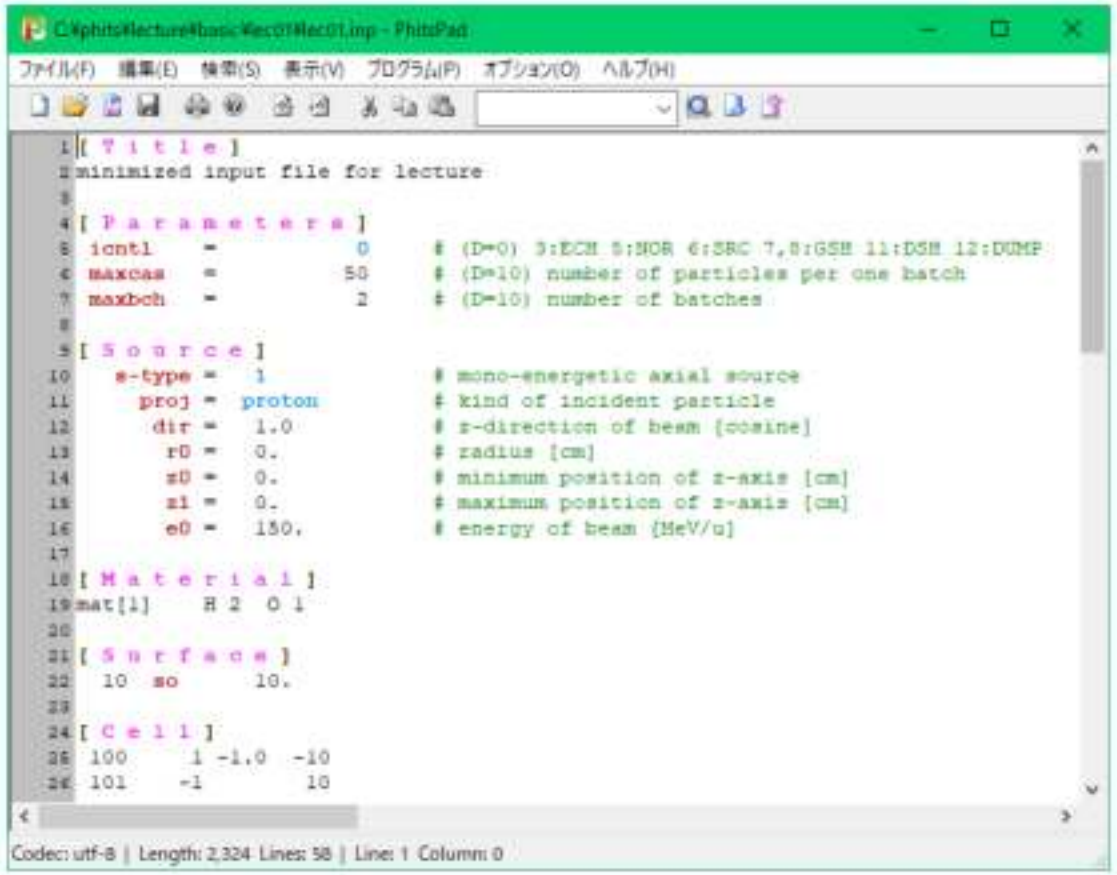
*中性子（温度別）、陽子、重陽子、α粒子、光原子、光核反応、熱中性子散乱則（物質別）が選択可能

**最後にダウンロードしたライブラリが優先して使われるようになるので、温度別中性子ライブラリを選択した場合は注意が必要

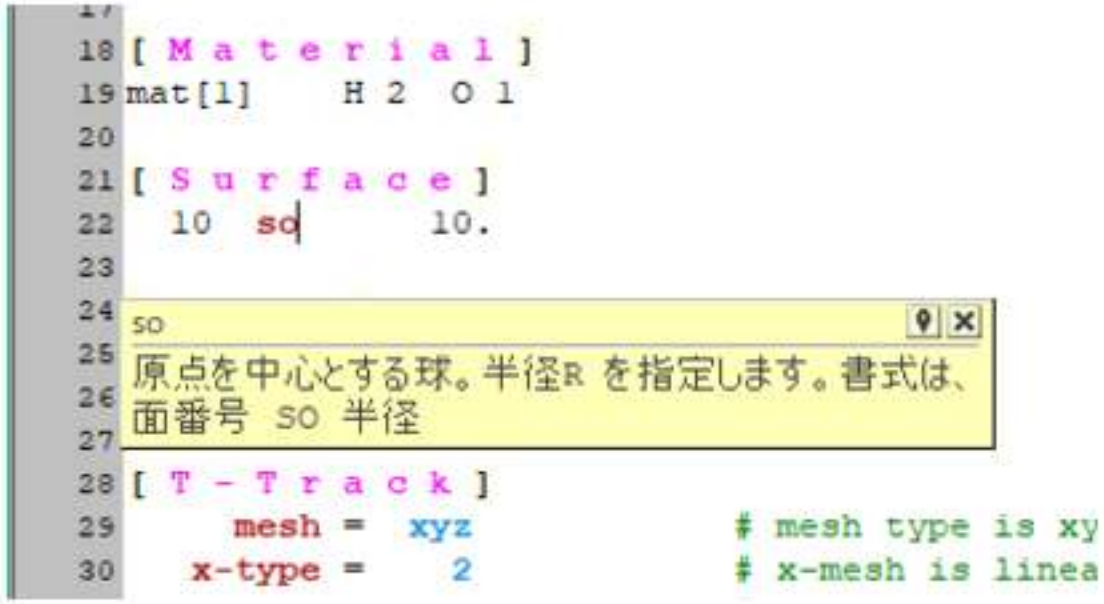
プログラムは、phits/XSフォルダ格納

PHITS用テキストエディタPHITS-Pad

- ✓ PHITS固有のパラメータや入力値を色で強調表示
- ✓ 入力ファイルの作成をサポートするヒント表示機能



PHITS-Padウインドウ



ヒントの表示
（ウインドウはドラッグで移動可能）

詳細はphits/phitspad/manual参照

PHIG-3Dを用いた４次元(x,y,z,t)粒子飛跡の描画

1. [t-4Dtrack] セクションで粒子の飛跡ファイルを生成
2. 飛跡ファイルを PHIG-3D で描画。静止画と動画を作成可能

セクションの記入例

```
[t-4Dtrack]
file = track.out
```

So Simple!!

PHITS3.35での主な改良点

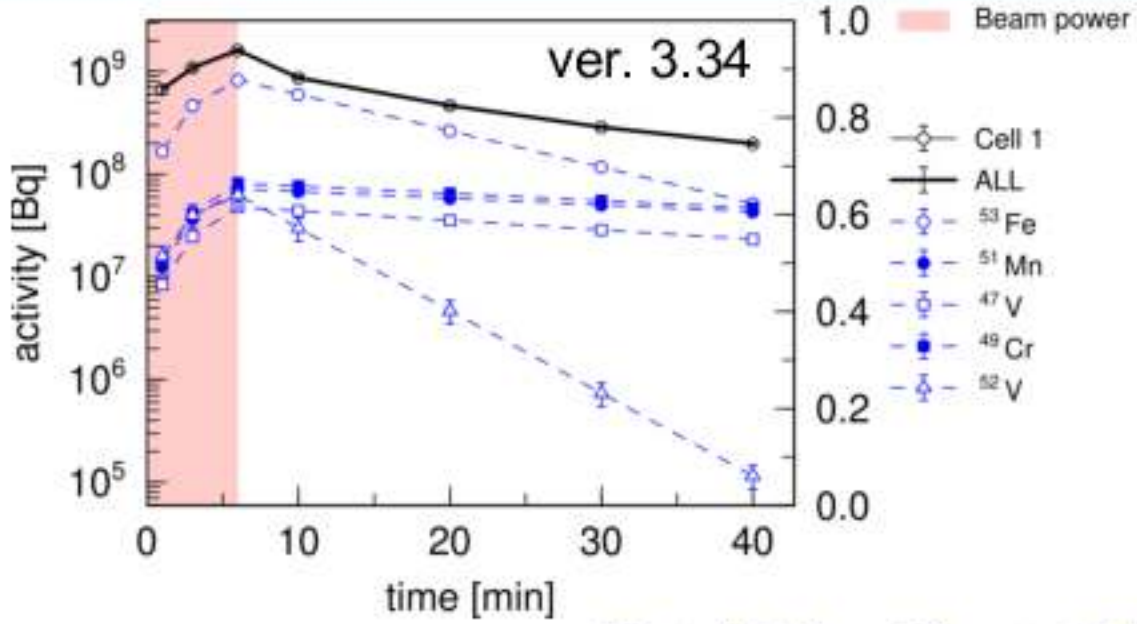
- ✓ JENDL-5放射化断面積をDCHAIN及びndata形式で整備
- ✓ [t-wwg]に粒子誘導機能と低エネルギー・アンバイアス法を導入
- ✓ [cell]セクションに#allコマンドを導入
- ✓ PHIG-3Dにxyzメッシュタリー読込機能とPolygon Boolean法による描画機能を導入
- ✓ 化学コードをイオン飛跡構造解析にも適用可能なように改良（松谷）
- ✓ AmBe線源などα線を用いた中性子源を再現するサンプルを追加（小川）
- ✓ RT-PHITSを用いた核医学線量評価機能の拡張

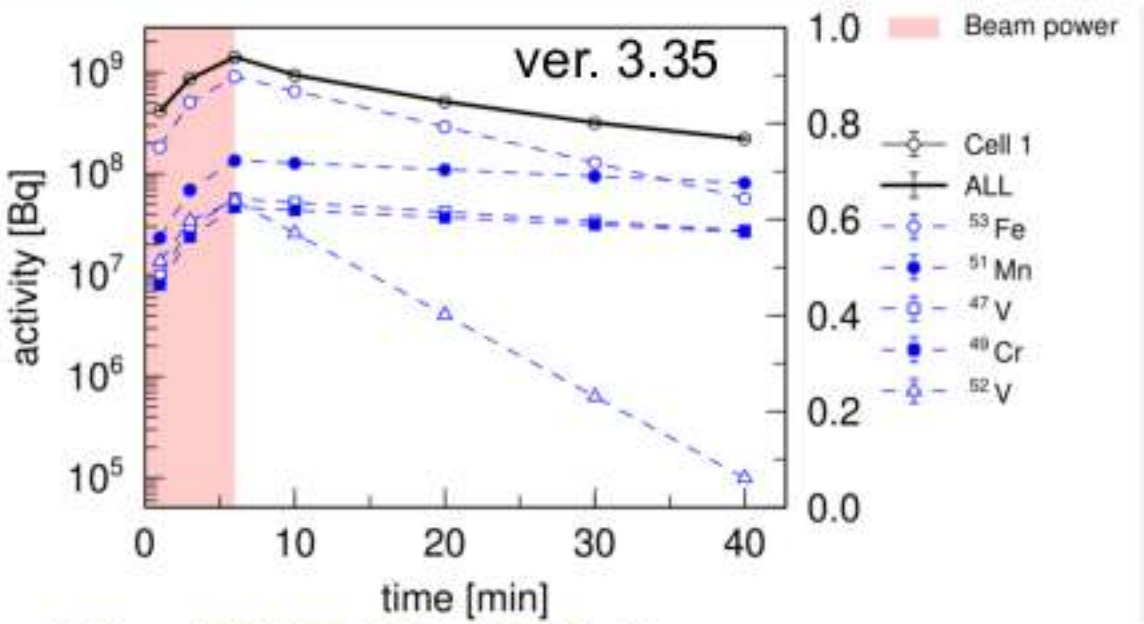
JENDL-5放射化断面積の組込

誘導放射能計算に対する奨励設定

Version	20MeV以下の中性子	JENDL-5が整備された粒子*	その他の粒子
3.34以前	JENDL/AD-2017（DCHAIN形式）	INCLやJQMDなどの核反応モデル	
3.35以降	JENDL-5（DCHAIN形式）	JENDL-5（ndata形式）	核反応モデル

*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 < 150MeV)





150MeV陽子を鉄ターゲットに照射した際の誘導放射能時間変化

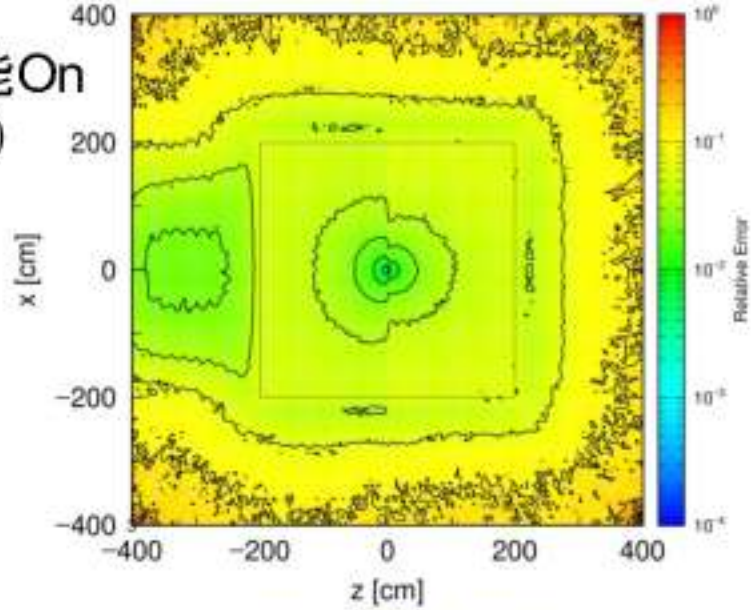
陽子や高エネルギー中性子入射に対して計算精度の向上が期待できる(ただし、それほど大きな差がない場合が多い)

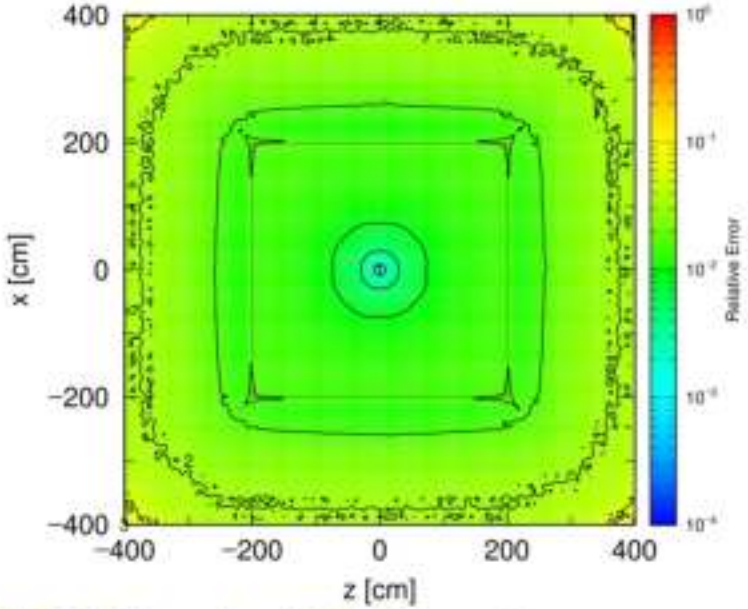
Weight Window Generator [t-wwg]の改良

新機能

- ✓ ヒストリーカウンタを使った粒子誘導機能の導入
- ✓ 低エネルギー粒子のweight window下限値を強制的に高くする低エネルギー・アンバイアス法の導入
- ✓ weight windowの下限値を適切に設定することにより粒子の無限増殖を防ぐ機能の導入

粒子誘導機能On
（左側に誘導）





粒子誘導機能Off

粒子誘導機能On/Offによる遮蔽計算の相対誤差の違い

*T. Sato et al. Nucl. Instr. Meth. B 557, 165535 (2024)

分散低減法に関する講習会資料を全面改訂（phits/lecture/advanced/variance-reduction）

[cell]セクションへの#allコマンドの導入

#allコマンドとは?

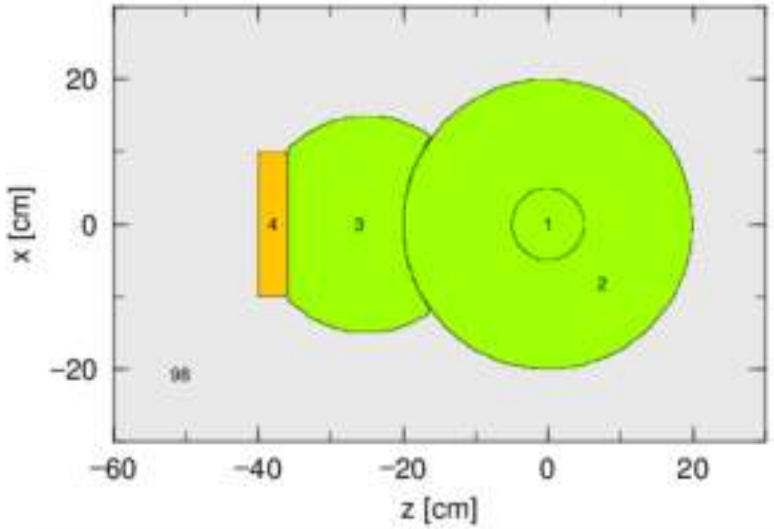
定義された全ての領域*を自動的に除く演算子。何もない領域(空気や真空)を定義するのに便利

*外部ボイドや他のuniverseに定義された領域は除く

```
[Cell]
 1   1 -1.0  -1          $ Target
 2   1 -1.0  -2  1       $ Big ball
 3   1 -1.0  -3  2   #4  $ Small ball
 4   2 -2.7  -11 21 -22  $ Al plate
98   0   #1 #2 #3 #4  -999  $ Void
99  -1              999  $ Outer region
```

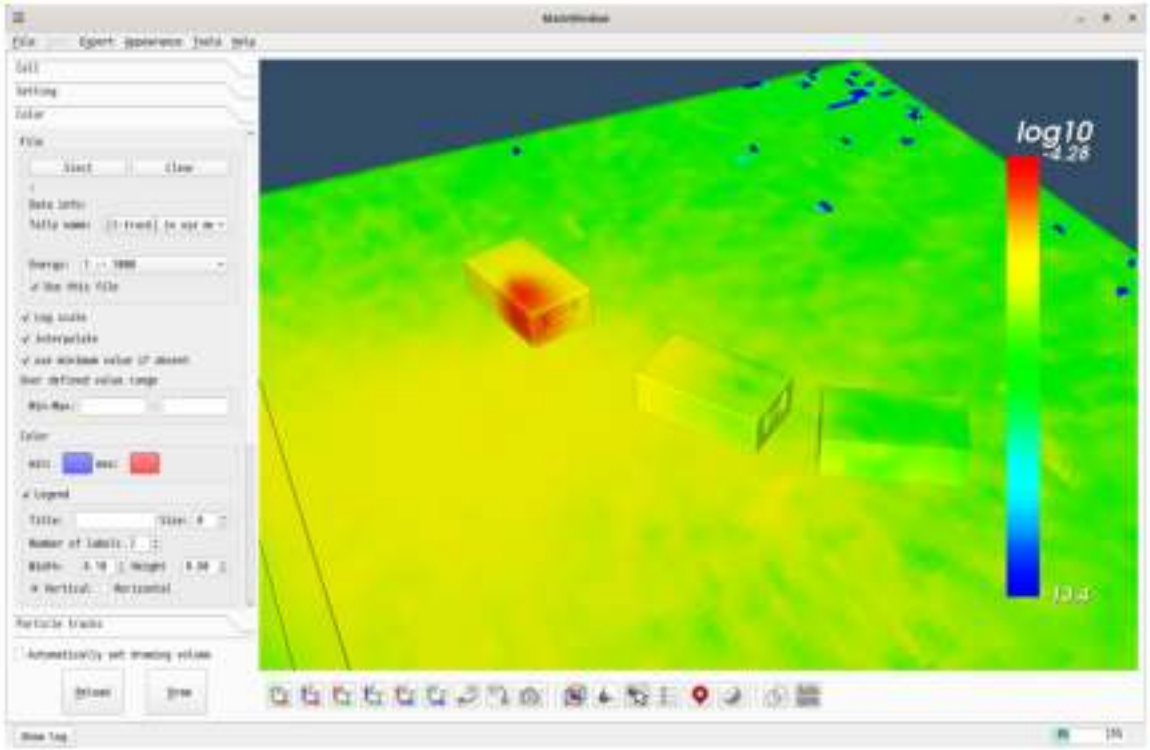
```
[Cell]
 1   1 -1.0  -1          $ Target
 2   1 -1.0  -2  1       $ Big ball
 3   1 -1.0  -3  2   #4  $ Small ball
 4   2 -2.7  -11 21 -22  $ Al plate
98   0       #all  -999  $ Void
99  -1              999  $ Outer region
```

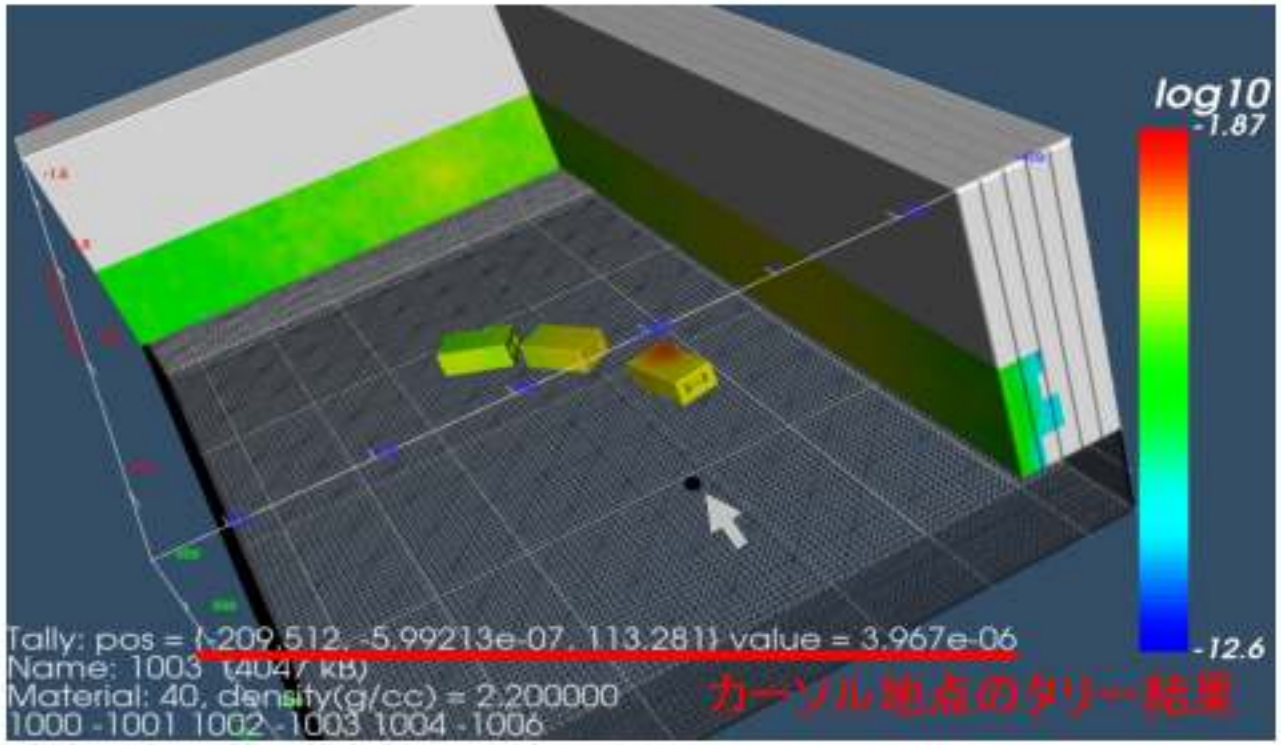
snowman.inp



- ✓ 二重定義を簡単に回避できて便利！
- ✓ ただし、領域数の多い体系で使うと計算時間の遅延やメモリ不足エラーを起こす可能性があるので注意

PHIG-3Dの改良



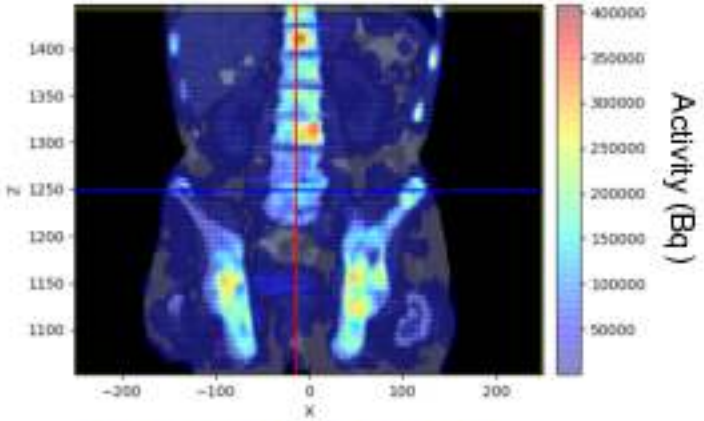


phits/recommendation/shieldingの計算結果をPHIG-3Dで表示

- ✓ 物質の表面や特定の断面におけるxyzメッシュタリー結果を読み込んでカラーマップで表示
- ✓ マウスでクリックすることにより、任意地点におけるタリー結果の数値を知ることができる
- ✓ Polygon Boolean法による描画機能導入により消費メモリも削減（ただし球面のある領域を除く）

海上技術安全研究所の大西世紀博士の協力により実施

RT-PHITSの核医学線量評価機能の拡張



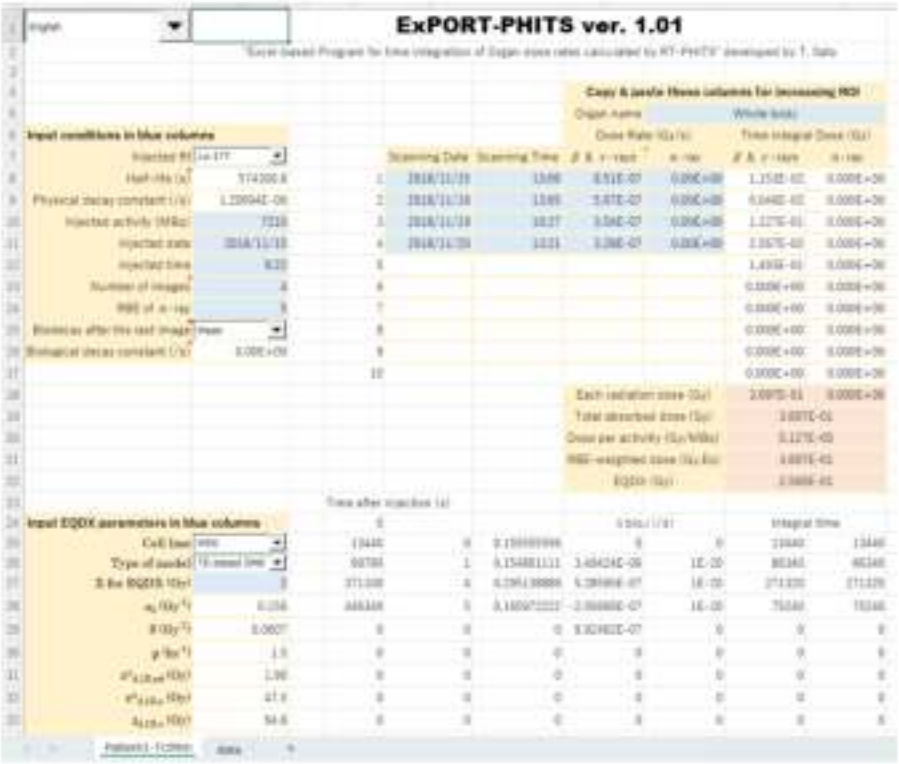
SPECT/CT image

CT2PHITS
PET2PHITS

人体内線量率マップ

PHITS2DICOM
ROI2PHITS

各臓器/腫瘍の線量率



ExPORT-PHITS
(Excel-based Program for Integration of Organ dose rates calculated by RT-PHITS)

SPECT/CT画像から臓器/腫瘍線量やその生物影響の大きさ(EQDX)を簡単に導出可能

See phits/RT-PHITS/ExPORT-PHITS.xlsx & T. Sato et al. *EJNMMI Phys.* (2025)) DOI: 10.1186/s40658-025-00743-6

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

◆核データ親和性の向上

- ✓ JENDL-5.0を用いた吸収線量計算（20MeV以下の中性子は可）

◆ユーザー支援機能の拡充

- ✓ PHITS-Padの改良（ヘルプ・入力補助機能の拡充）
- ✓ HDFフォーマットを介したCADジオメトリの変換

◆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

NanoTerasuにおける PHITSを用いた 遮蔽設計及びその検証

松田洋樹*(1)、竹内章博(1)、萩原雅之(1)、早川勢也(1)、糸賀俊朗(2)
(1) QST、(2) JASRI

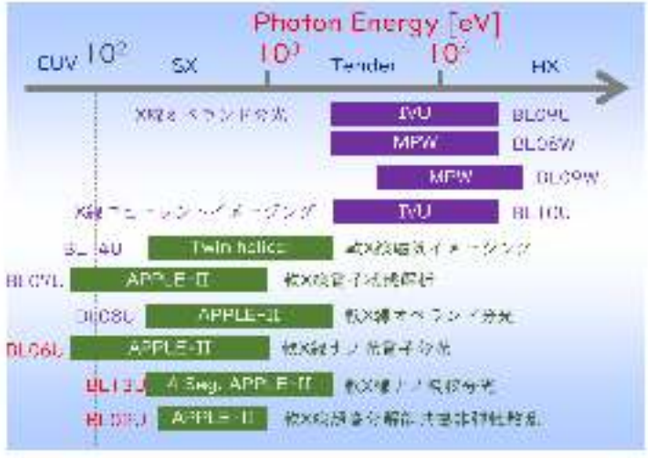
目次

1. NanoTerasuの紹介

2024年4月から、東北大学青葉山新キャンパス（宮城県仙台市）において
軟X線向け3GeV高輝度放射光施設**NanoTerasu（ナノテラス）**の運転が行われてる

パラメータ

加速器エネルギー	3 GeV
蓄積電流	400 mA（設計）
セル数	16
リング周長	349 m
エミッタンス	1.14 nmrad
最大ビームライン数	28
年間最大運転時間	6,000 時間（目標）



2025年現在
✓ 10ビームライン稼働中
3本：共用
7本：コアリション

1. NanoTerasuの紹介

- 放射光利用の普及・拡大のさらなる推進
  - 産業分野でのさらなる利活用
  - 学際領域を含む新規ユーザーの開拓

「放射線業務従事者*登録」が産業利用・新規利用の障害
※放射線管理区域内において放射線発生装置の取扱いに従事する者

国内放射光施設の実験ホール（管理区域）でこれまでユーザーの被ばくなし
① 管理（健康診断、被ばく線量）のコスト
② 登録に要する手間や時間的コスト
③ 学生の実習や実験参加などの機会の喪失

NanoTerasuにおける放射線管理方針
ユーザーが放射線従事者でなくても可能な限り放射光実験に参加できること

実験ホールの非管理区域化

参考：世界の放射光施設の現状

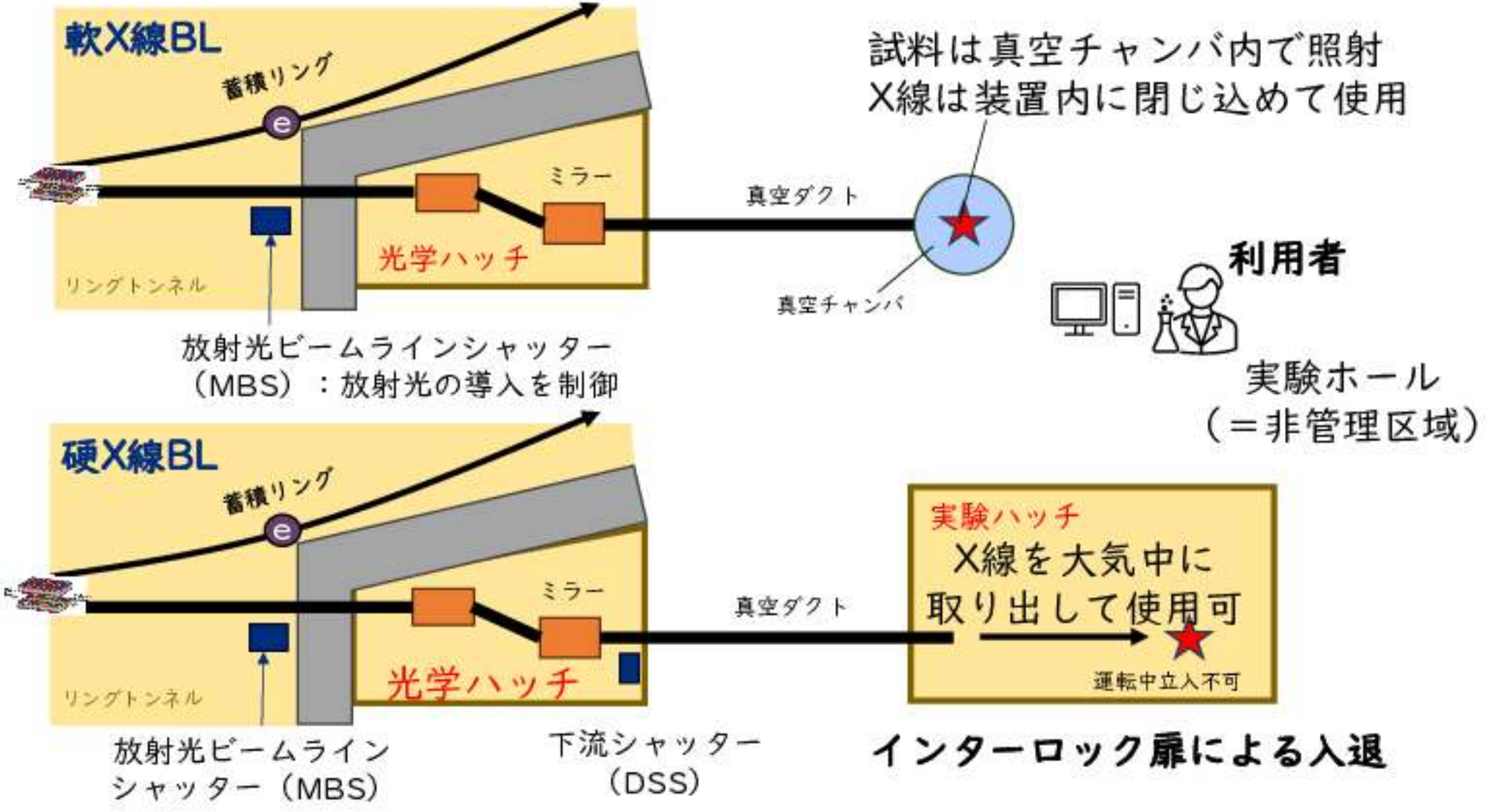
	実験ホール	実験参加に 放射線業務従事者登録
海外	非管理区域が大多数	不要が大多数
国内	管理区域 ※NanoTerasuは除く	必要 ※取扱等業務従事者でも参加可能

経験式の結果と比較し矛盾がないことを確認しつつ遮蔽設計を進めた

✓ 経験式が適用できない場所・条件
✓ 経験式では見逃す隙間からの漏洩確認

PHITS無くしては設計できなかった

放射光ビームライン（軟X線BL：6、硬X線BL：4）



2. 検証

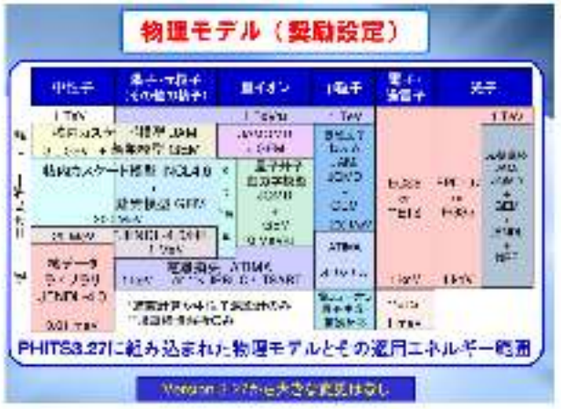
2. 検証

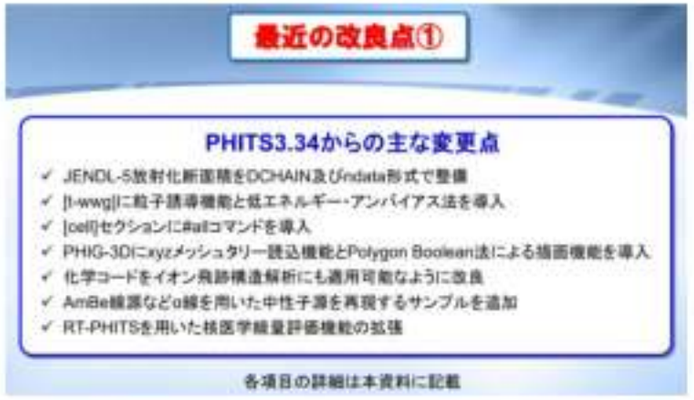
比較するPHITSバージョン

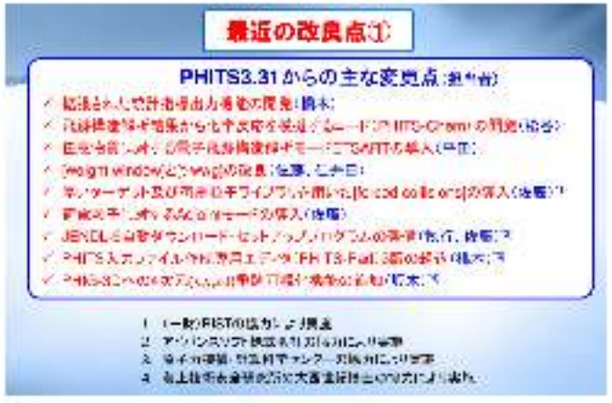
- ✓ 3.31（2023年4月リリース）
- ✓ 3.35（2025年4月リリース）

相違点（本検証に関わりのある個所）

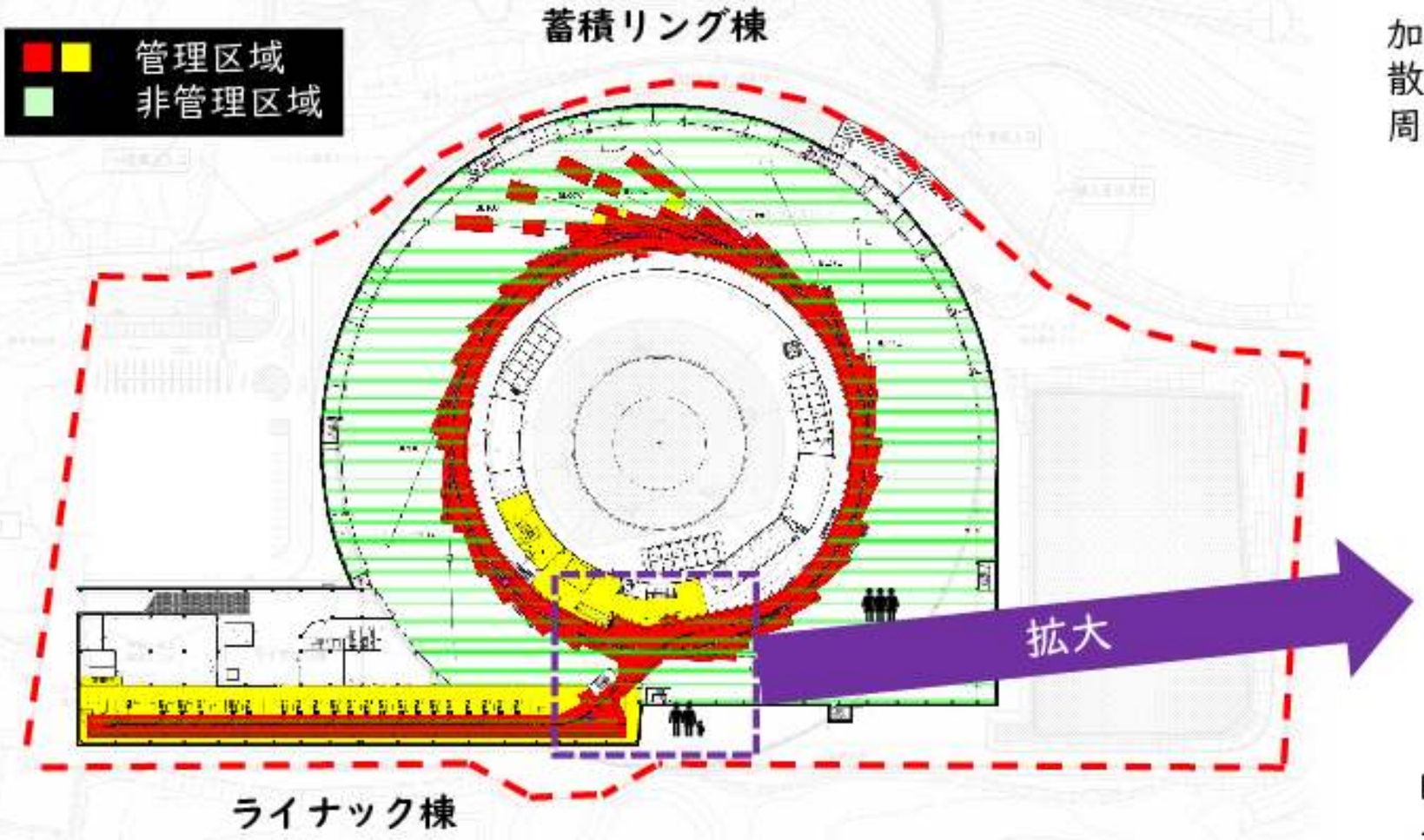
- ◆ JENDL-4 v.s. JENDL-5
- ◆ EGSの1物質中の元素数制限撤廃
- ◆ 電磁場中での電子挙動に関する不具合解消
- ◆ その他細かいバグ等







2.A) 散乱体周辺（遮蔽なし）の線量 - 実験

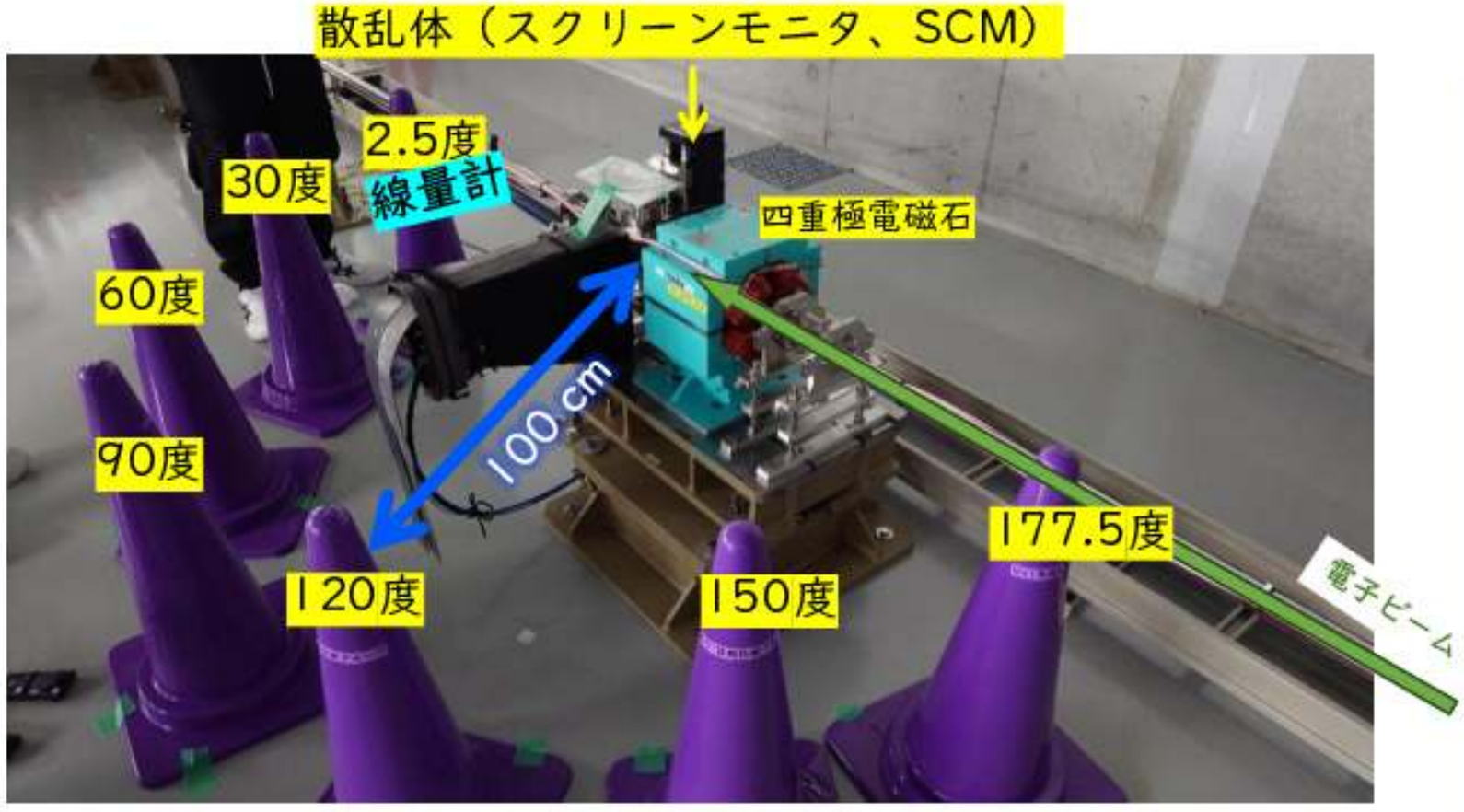


加速器スタディ時間を利用し、
散乱体への電子ビーム照射時の
周辺線量の測定を行った

A) 散乱体周辺の線量（遮蔽なし）
B) 散乱体周辺の線量（コンクリ遮蔽あり）

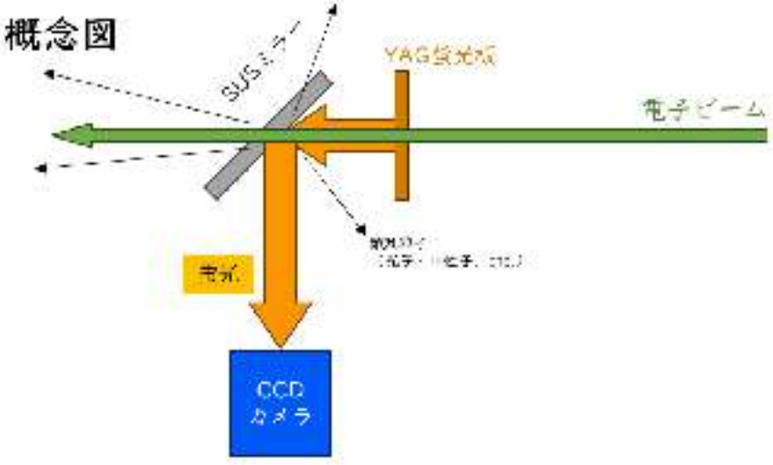
Beam Transport（BT）部
→ライナックで加速した3 GeV電子を
蓄積リングまで輸送する部

2.A) 散乱体周辺（遮蔽なし）の線量 - 実験



SCMとは？

概念図



電子ビームが蛍光板を通過した際に生じる蛍光を取り出し、CCDカメラで撮影・解析し、位置・大きさ・エネルギー等ビームプロファイルを計測する装置

蛍光を取り出すSUSミラーが主たる散乱体

- ✓ SCM周りに積算線量計  を100 cm離して設置
  - ✓ 垂直方向に1個設置（SCM直上と呼ぶ）
- ✓ 角度: 2.5, 30, 60, 90, 120, 150, 177.5度
- ✓ 0.15 nC/秒, 約1.6時間連続照射

2.A) 散乱体周辺（遮蔽なし）の線量 - 計算

※光学系（レンズ、CCDカメラ、遮光板）は無視
※架台は無視
※コンクリート製加速器トンネルは無視

PHITS計算条件

- PHITS 3.31 または3.35
- JENDL-4 またはJENDL-5
- negs=1
- PHITS推奨モデル使用
  - PHITS内蔵の光核反応モデル (JAM/JQMD+GEM+JENDL+NRF)
  - INCL4.6+GEM
  - JAM+GEM
  - EGS5
- 電子を輸送
- E=3 GeV
- 0.1 nC/s
- ペンシルビーム
- 2DCADに基いたジオメトリ

フラックスから線量への変換方法は？

① Multiplierを定義する
- 中性子
  - ISO8529-3
- 光子
  - 内蔵値（ID=-114） JAERI-1345

② エネルギービン幅を積算線量計のエネルギー範囲に設定する
- 熱中性子
  - 0.025 eV - 0.5 eV
- 高速中性子
  - 24 keV - 15 MeV
- X・γ線
  - 10 keV - 10 MeV

2.A) 散乱体周辺（遮蔽なし）の線量 - 結果

C（計算値）とE（実験値）の比 C/E を計算

PHITS3.31

設置角度	C/E X・γ	C/E 熱中性子	C/E 高速中性子
2.5	0.42	0	1.05
30	0.10	M	0.88
60	0.08	M	0.78
90	0.09	M	0.48
120	0.11	M	0.38
150	0.09	M	0.20
177.5	0.01	M	0.05
SCM直上	0.03	M	0.15

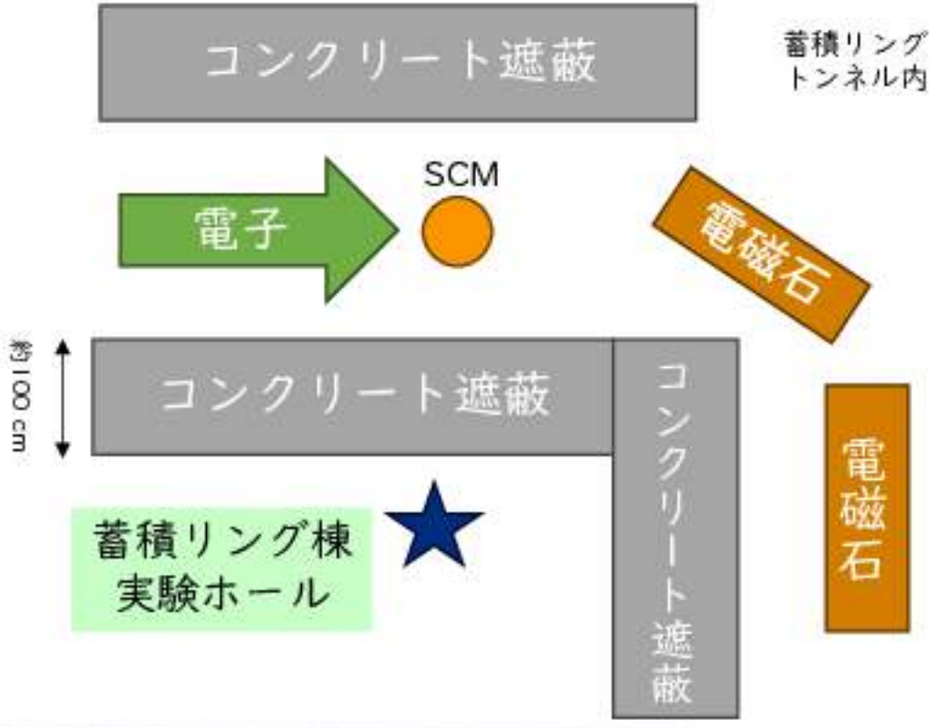
M:最小検出限界値未満
（X・γ=0.1 mSv、熱・高速中性子=0.1 mSv）

PHITS3.35

設置角度	C/E X・γ	C/E 熱中性子	C/E 高速中性子
2.5	0.42	0	1.07
30	0.10	M	0.91
60	0.08	M	0.83
90	0.09	M	0.51
120	0.11	M	0.38
150	0.09	M	0.22
177.5	0.01	M	0.06
SCM直上	0.03	M	0.15

- ✓ バージョンによる違いは見られない
- ✓ 前方方向の高速中性子線量の一致はよい
  - ✓ 一方、後方方向は過小評価

2.B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量 - 実験・計算



散乱体と測定点の間にコンクリート遮蔽壁（100 cm厚）を設ける。
照射中の実測線量とPHITS計算値を比較する。

使用した線量計

- ◆ NaIサーベイメータ（NHC6）
- ◆ レムカウンタ（NSN2）

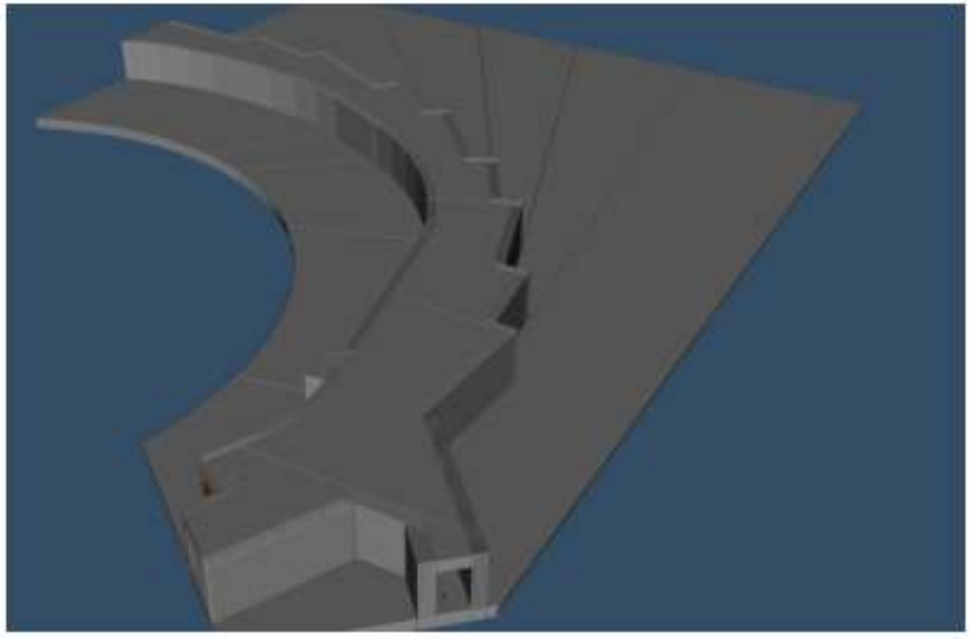
実験条件

- ■ 0.11 nC/秒, 繰り返し1Hz

PHITS計算条件

- ■ 散乱体周辺（遮蔽なし）と同じ

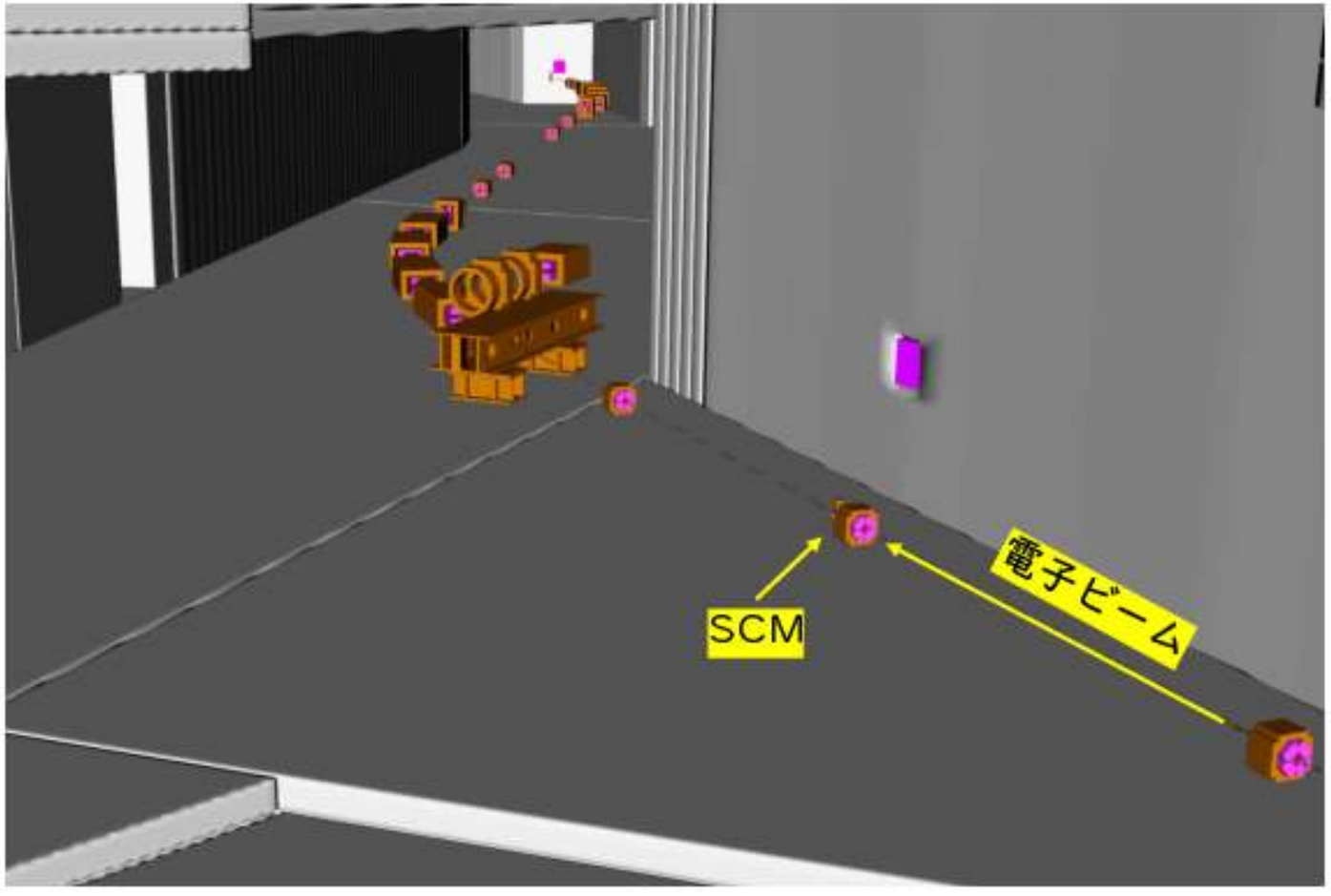
2.B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量 - ジオメトリ



蓄積リング棟
リングトンネル・実験ホール

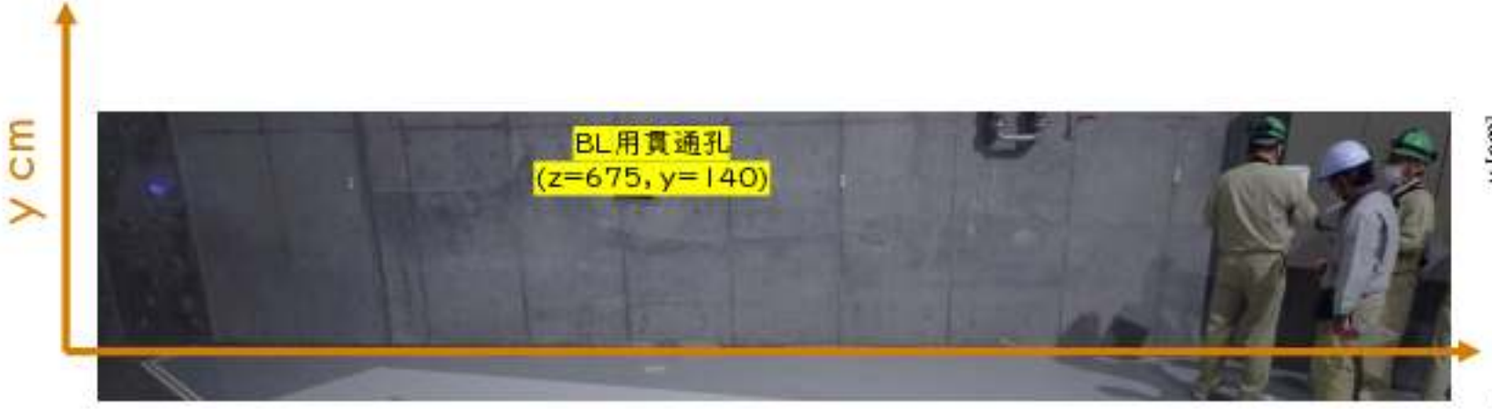
phig3d 2024.04.04以降で
描画領域の自動推定に失敗するようになりました…
→universe構造を用いた構造故、複雑すぎるのかもしれません

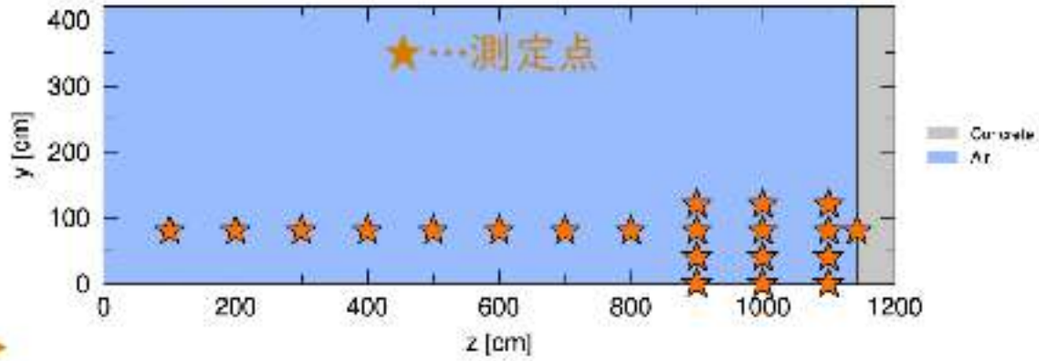
phig3d 2023.04.06では動作します。



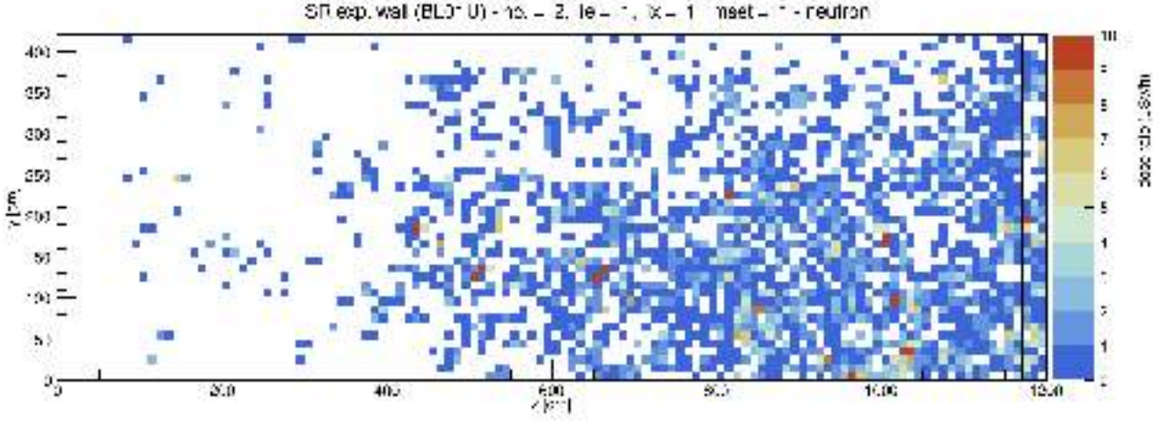
蓄積リング棟
リングトンネル内部

2.B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量 - 結果（実験ホール）

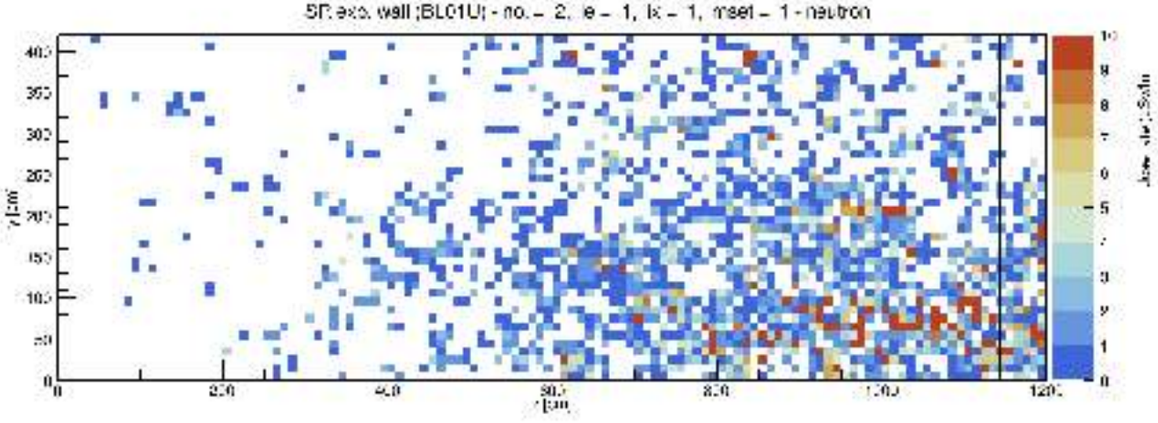




PHITS3.31



PHITS3.35



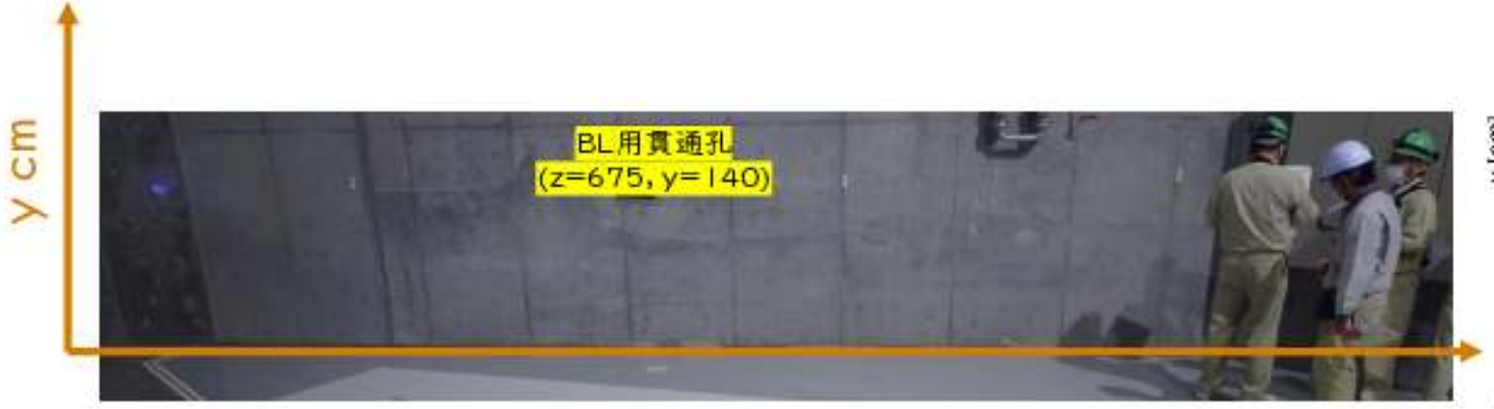
平均のC/E = 2.4

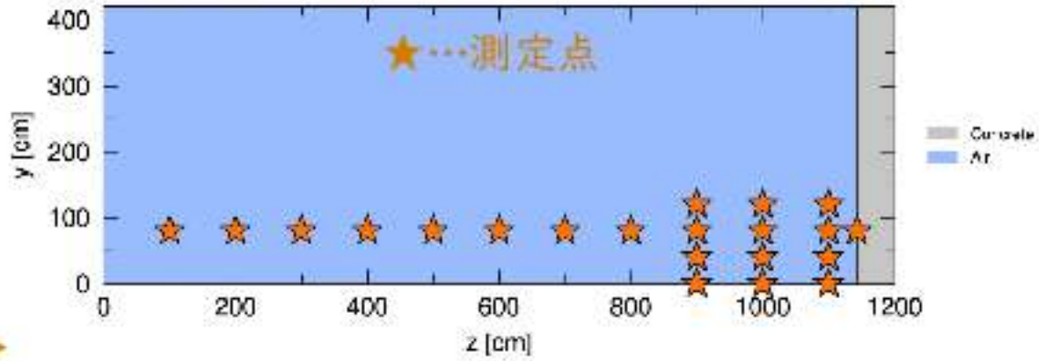
中性子線量分布

平均のC/E = 6.8

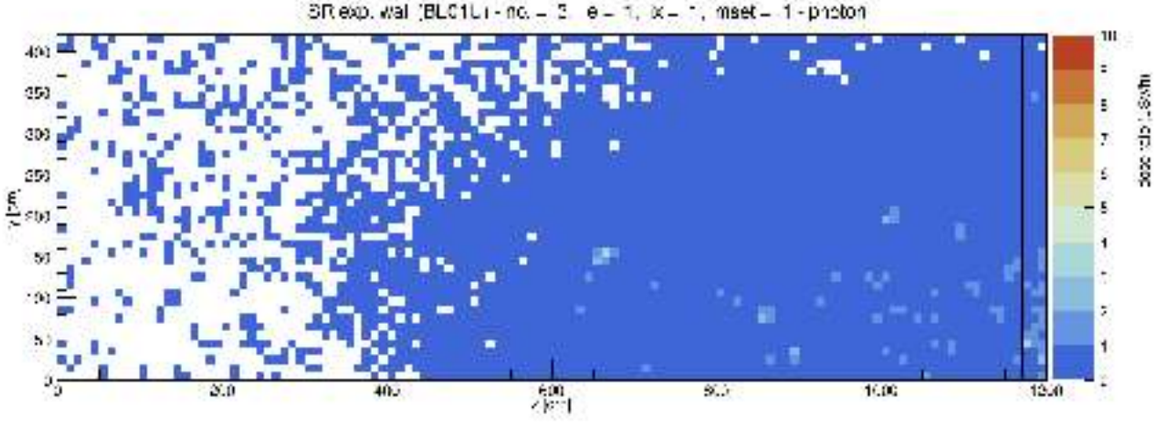
- ✓ 統計が十分ではなく誤差が大きい
- ✓ PHITS3.35では計算値がより大きい

2.B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量 - 結果（実験ホール）



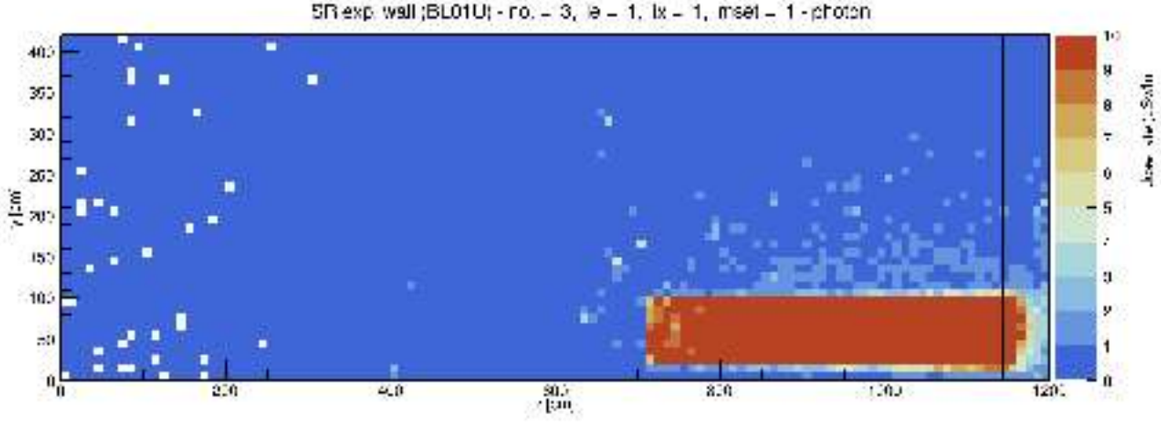


PHITS3.31



平均のC/E = 4.6

PHITS3.35



平均のC/E = 116

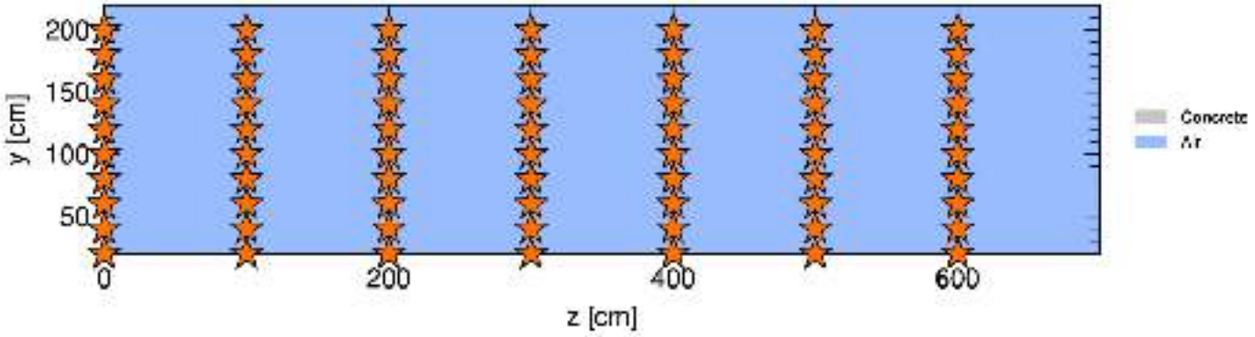
光子線量分布

- ✓ 統計が十分ではなく誤差が大きい
- ✓ PHITS3.35では不可解な結果が得られた

2.B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量 - 結果（内周通路）

散乱体前方方向の遮蔽壁

★…測定点



偏向電磁石
→電子ビームが曲がるように磁場を設定した

2.B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量 - 結果（内周通路）

NanoTerasu QST

C/E（光子）

γ y¥x	0	100	200	300	400	500	600
180	5.1	16.5	12.9	13.4	19.5	110.0	53.0
160	6.8	8.1	18.6	15.8	16.9	55.5	62.0
140	6.5	5.6	18.7	18.3	20.5	34.7	42.0
120	5.3	5.6	6.1	19.1	16.0	18.3	20.0
100	5.5	2.3	1.5	4.1	41.5	16.0	13.0
80	4.7	2.2	1.4	4.0	6.2	18.3	13.0
60	5.2	2.1	1.6	5.9	6.1	19.7	19.0
40	4.2	2.1	1.6	4.7	7.2	12.5	15.0
20	6.4	2.5	1.8	4.1	8.1	10.3	14.0
0	3.1	7.2	1.7	16.5	7.6	7.0	7.0

C/E（中性子）

n y¥x	0	100	200	300	400	500	600
180	1.8	3.6	5.3	2.3	9.2	3.8	1.8
160	1.5	8.9	3.2	5.4	2.8	1.8	1.0
140	0.6	7.7	2.7	4.0	1.7	2.7	6.7
120	1.6	7.9	2.2	2.8	5.4	2.5	4.0
100	5.4	1.3	2.2	3.9	2.8	5.7	1.7
80	0.4	0.9	2.2	3.0	2.0	0.0	2.5
60	0.5	0.8	3.0	3.4	1.5	4.3	2.9
40	0.9	1.3	1.9	3.8	2.2	9.1	0.0
20	1.1	1.5	1.4	2.1	3.4	20.0	0.0
0	0.9	0.7	0.8	2.6	2.3	0.0	0.0

高さ cm

横 cm

PHITS3.31

C/E（光子）

γ y¥x	0	100	200	300	400	500	600
180	8.8	20.3	16.1	15.5	25.2	122.0	64.0
160	10.0	9.7	22.5	18.5	19.1	75.0	77.0
140	7.1	7.2	22.0	19.8	21.5	40.0	57.0
120	5.7	5.4	5.2	17.1	14.8	25.3	31.0
100	5.1	2.1	1.1	3.1	30.5	14.3	19.0
80	6.4	1.7	0.9	3.2	4.8	18.7	15.0
60	4.8	1.7	1.1	5.8	6.1	25.0	15.0
40	4.6	1.6	1.0	4.3	6.3	14.3	10.0
20	4.8	1.9	1.3	3.0	6.1	9.0	13.0
0	4.2	6.3	1.6	12.9	6.2	10.8	11.0

C/E（中性子）

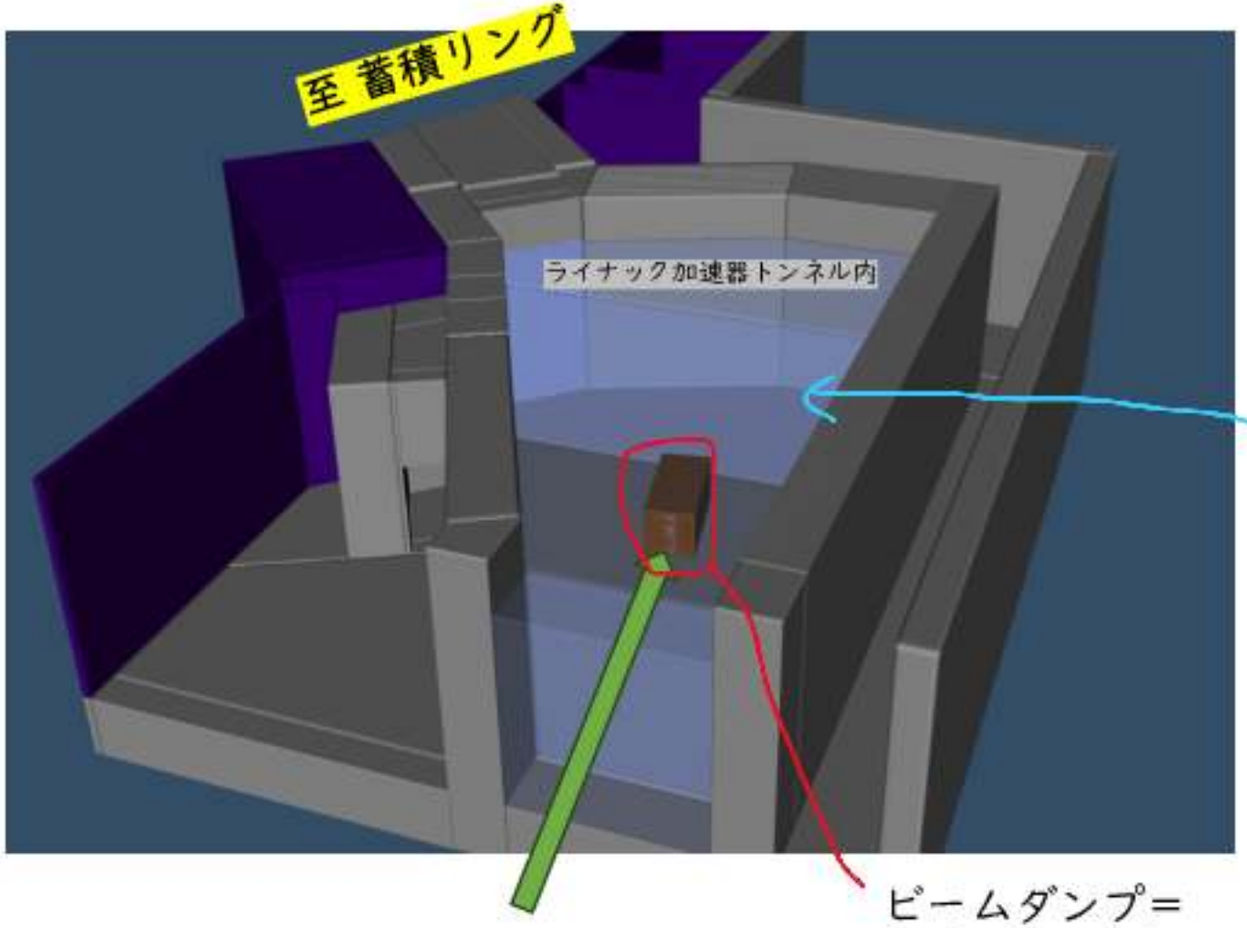
n y¥x	0	100	200	300	400	500	600
180	1.5	3.9	5.6	2.9	13.1	1.5	5.5
160	1.3	3.7	6.1	5.4	3.9	0.9	5.0
140	14.8	2.6	0.8	3.1	2.2	11.8	0.0
120	1.7	3.0	0.1	1.5	1.2	0.0	1.0
100	2.9	1.8	1.1	2.4	1.6	0.0	0.0
80	4.8	0.9	1.0	3.4	2.5	0.0	10.0
60	1.8	0.2	1.3	5.5	2.3	0.0	8.6
40	0.3	0.8	2.7	2.2	0.7	2.7	1.1
20	0.3	1.4	1.1	1.8	1.1	4.3	1.7
0	15.2	1.2	1.5	0.8	0.0	0.0	14.3

PHITS3.35

- ✓ 前方方向では光子・中性子ともに比較的良好なC/Eが得られた
- ✓ PHITS3.35ではよりC/Eが1に近づいた

2.C) 電子ビームダンプ周辺空気の放射化

ライナックビーム調整時、電子ビームの損失に伴い中性子が発生する。
この中性子によりライナック遮蔽トンネル内の空気が放射化する。



照射条件

- 電子ビーム：1.8 W, 3 GeV, 1Hz繰り返し
- Ar-41放射能濃度が飽和する程度（48時間）照射

※実際の運転においてダンプへの照射時間は、数秒～数分を数回繰り返す程度

空気（水色）の放射化を評価し、
（N=78.03%, O=21.03%, Ar=0.94%）

経験式による計算結果と比較する
※IAEA Technical Reports Series No.188

2.C) 電子ビームダンプ周辺空気の放射化

N-13, O-15の放射能濃度計算式

$$C_{air} = \frac{A_S \times P \times X_m}{V} \qquad (7\text{-}1)$$

式(7-1)の各パラメータは以下の通りである。

C_{air} ：空気中誘導放射性濃度(Bq・cm^{-3})
A_S ：単位距離に生成される単位出力あたりの飽和放射能（Bq・m^{-1}・kW^{-1}）
P ：電子ビーム損失出力（kW）
X_m ：空気中を制動放射線が通過する距離（m）
V ：容積(cm^3)

Ar-41の放射能濃度計算式

$$C_{Ar} = \phi \times \sigma \times M \qquad (7\text{-}5)$$

式(7-5)の各パラメータは以下の通りである。

C_{Ar} ：^{41}Arの飽和放射能濃度（Bq・cm^{-3}）
ϕ ：熱中性子の発生量（neutrons・cm^{-2}・s^{-1}）
σ ：^{40}Arの熱中性子捕獲断面積（cm^2）
M ：空気中の^{40}Ar原子数密度（cm^{-3}）

仮定
- 入射ビーム1.8 Wが100%損失する
- ライナックトンネル体積=2.2e9 cm^3

↓

- 各パラメータを入れて計算

↓

核種	空気中濃度限度 (Bq/cm^3)	飽和放射能濃度 (Bq/cm^3)
N-13	0.2	1.3×10^{-3}
O-15	0.2	1.4×10^{-4}
Ar-41	0.1	1.4×10^{-5}

得られた飽和放射能濃度

2.C) 電子ビームダンプ周辺空気の放射化

放射能濃度 Bq/cm^3

核種	IAEA TRS No.188	v3.31	v3.35
N-13	1.3e-3	3.6e-6	-
O-15	1.4e-4	-	-
Ar-41	1.4e-5	2.3e-4	2.0e-4

- Ar-41放射能濃度はPHITSバージョンによる変化はない
  - 核データ間で差は見られない
- 生成核種が異なる
  - v3.31：H-3, Be-7, Be-11, C-10, C-11, C-14, N-13, Ar-41
  - v3.35：N-13, Ar-37, Ar-41

□ 1293 keVのガンマ線をゲルマニウム検出器で測定し定量

3. まとめ

- ✓ NanoTerasuの遮蔽設計は、経験式とPHITS計算を比較し合いながら行っている
- ✓ PHITS3.31とPHITS3.35で行った計算結果を比較した
- ✓ NanoTerasuで行った線量測定結果とも比較した

A) 散乱体周辺（遮蔽なし）の線量

- ◆ バージョンによる違いは見られない
- ◆ 前方方向の中性子線量の一致はよい
- ◆ 後方方向は過小評価
- ◆ 光子はあらゆる角度において過小評価

B) 散乱体周辺（遮蔽あり）の線量

- ◆ PHITS3.35で若干の改善が見られた
- ◆ PHITS3.31と著しく異なる箇所が見つかった
  - ◆ 原因不明・調査中
- ◆ phig3dの描画領域の自動推定に失敗するバージョンが存在する

C) 電子ビームダンプ周辺空気の放射化

- ◆ バージョンによる違いはあまり見られない
  - ◆ JENDL-4とJENDL-5の違いが主たる要因
- ◆ PHITS3.31で生成されたN-13等はPHITS3.35では生成されない

今後

- ☐ B)の調査：簡単な体系で計算を行う
- ☐ 他計算結果との比較：放射光BLの遮蔽計算　等
- ☐ 鉛（遮蔽体）や鉄（加速器構造体）の放射化計算・実測との比較
  - ☐ 空気では違いが見られないが、鉛や鉄では違いが見られる可能性がある

参考

1. NanoTerasu蓄積リング入射部付近における追加遮蔽の検討3, 2025年原子力学会春の年会
2. NanoTerasu蓄積リング入射部付近における追加遮蔽の検討2, 2024年原子力学会秋の大会
3. NanoTerasu蓄積リング入射部付近における追加遮蔽の検討, 2024年原子力学会春の年会
4. NanoTerasuにおける電子ビームダンプからの中性子測定, 2023年原子力学会秋の大会
5. Shielding design for 3 GeV next generation synchrotron radiation facility, 2021年核データ研究会

第2回 EGS5-Geant4-PHITS合同研究会

原子力第一船 むつ の遮蔽効果確認実験に係る *PHITS* によるベンチマーク解析

簡易遮蔽計算コードレビューWG

松田 規宏、延原 文祥、平尾 好弘

もくじ

- 簡易遮蔽計算コードレビューWG の活動
  POKER（点減衰核積分法）
- ベンチマーク実験の概要
- PHITS による解析結果
  [Counter] 機能 を用いた解析
- まとめ

WG の活動

- 日本原子力学会　放射線工学部会
「簡易遮蔽計算コードレビューWG」　（第１期）
（簡易遮蔽解析コードレビューWG），2016.01～
  - 第３期, 2020.02～　（連携）
放射線安全規制研究戦略的推進事業
「ICRP 2007年勧告等を踏まえた遮蔽安全評価法の適切な見直しに関する研究」
➡ POKER
  - 第４期, 2023.05～
（添付図書）
「原子力第一船むつ遮蔽透過実験ベンチマーク解析」

POKER の紹介

（国産の簡易遮蔽計算コード!!）

POKER 光子 (ガンマ線) の簡易遮蔽計算コード

Shielding Dose Calculation Code with Point Kernel Techniques

最新のICRP勧告とデータに基づく光子の遮蔽計算

- 最新の線量換算係数、同位体放射線データ、30MeVまでの光子・原子相互作用データ

放射線施設の遮蔽計算と許可申請・届出を行う人のために

- 原子力規制庁の規制研究を通じた監修
  放射線安全規制研究戦略的推進事業費（ICRP2007年勧告等を踏まえた遮蔽安全評価法の適切な見直しに関する研究）

純国産100%

- 日本原子力学会放射線工学部会簡易遮蔽計算WG
  国立研究開発法人のガチ遮蔽研究者
  原子力・放射線施設の遮蔽設計・申請を担う遮蔽実務家
  遮蔽計算を熟知した本職プログラマー

POKER Community　PointKernel.com

ベンチマーク解析（PHITS）

- Benchmark study of particle and heavy-ion transport code system using shielding integral benchmark archive and database for accelerator-shielding experiments, J. Nucl. Sci. Technol. 59 (2022).
- その他（ J-PARC、HSS06※、核内カスケード※※、Inter-comparison ）@ SATIF

※ HSS06 : Hadronic Shower Simulation Workshop, 2006
http://conferences.fnal.gov/hss06/

※※ Benchmark of Spallation Models（IAEA）
https://www-nds.iaea.org/spallations/

ベンチマーク解析を行う上で

- 計算体系を詳細かつ正確に造る！

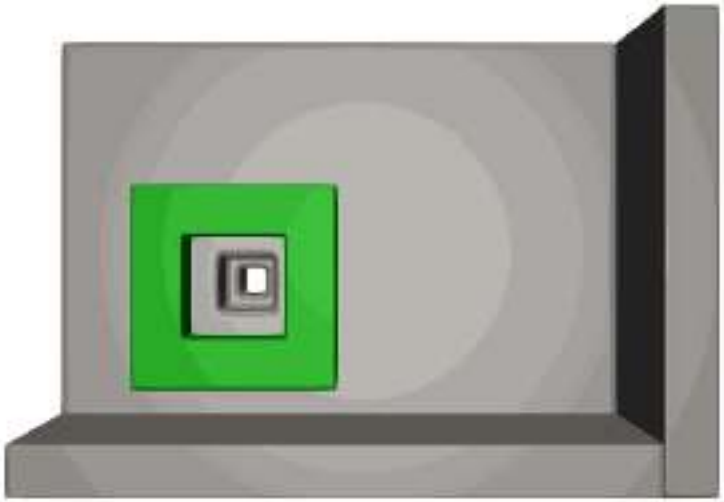
  PHITS によるシミュレーションとは、
  ヴァーチャルな世界 に実験体系を構築し、
  体系内での放射線の振る舞いを観察する。

- “if” が実現できる世界 を堪能しましょう。

  ➡ [Counter] 機能 を用いた解析

コンクリート透過実験

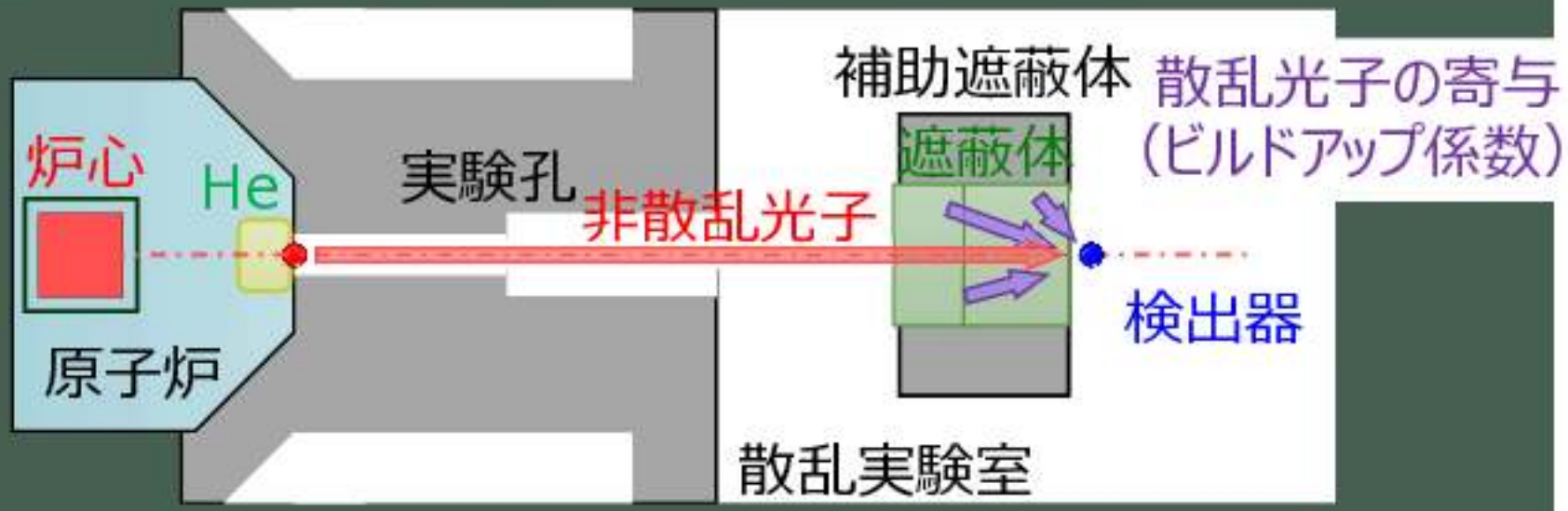
JRR-4 散乱実験設備



（再現した範囲）

実験体系（POKER/PHITS用）

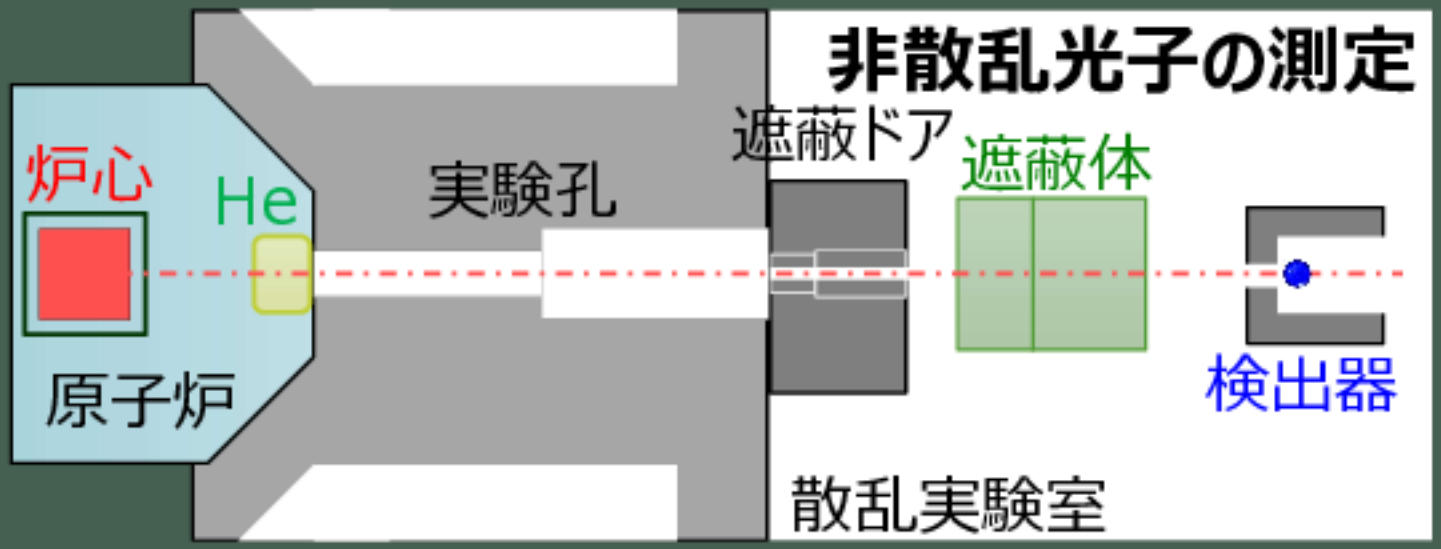
- 実験体系（JRR-4 散乱実験設備）



- 線源要素：
  炉心、ヘリウムタンク、ボラル板、<u>実験孔</u>
- 遮蔽体： 普通コンクリート / 重コンクリート

実験体系（PHITS用）

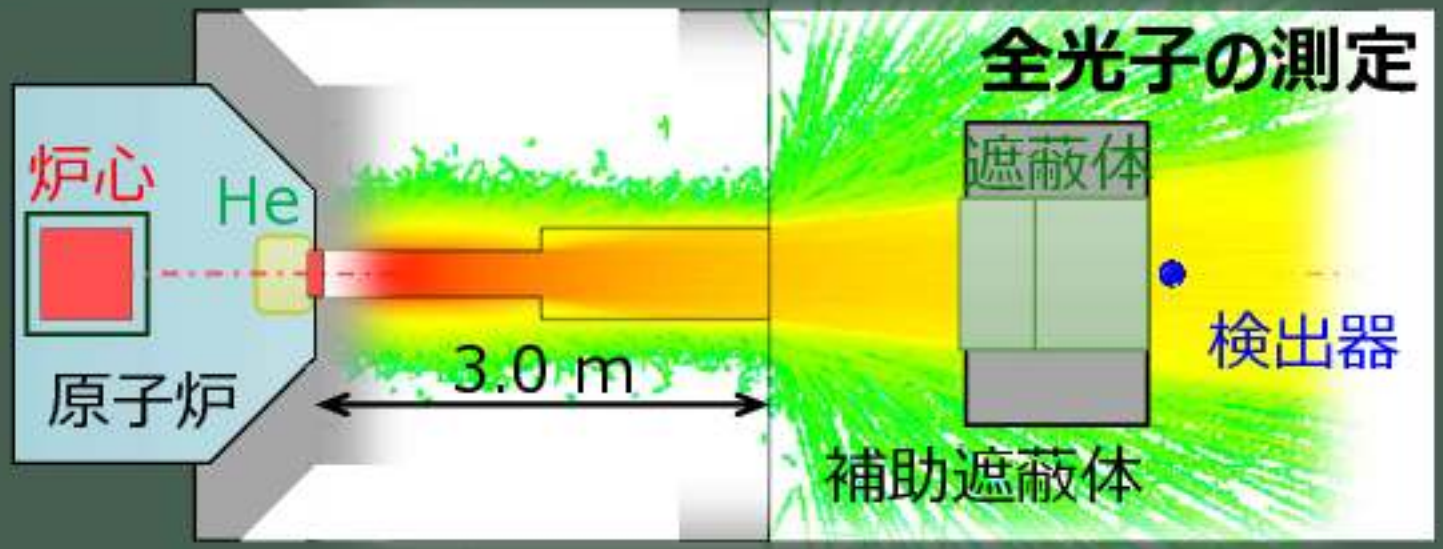
- 実験体系（JRR-4 散乱実験設備）



- 線源要素：
  炉心、ヘリウムタンク、ボラル板、遮蔽ドア
- 遮蔽体： 普通コンクリート / 重コンクリート

線源（実験孔）の設定

- 実験体系（JRR-4 散乱実験設備）



- 線源の 位置・放出角度：
  炉心 → 実験孔の炉心側、<u>±20度</u>

モンテカルロ法らしさ を 失わないように！

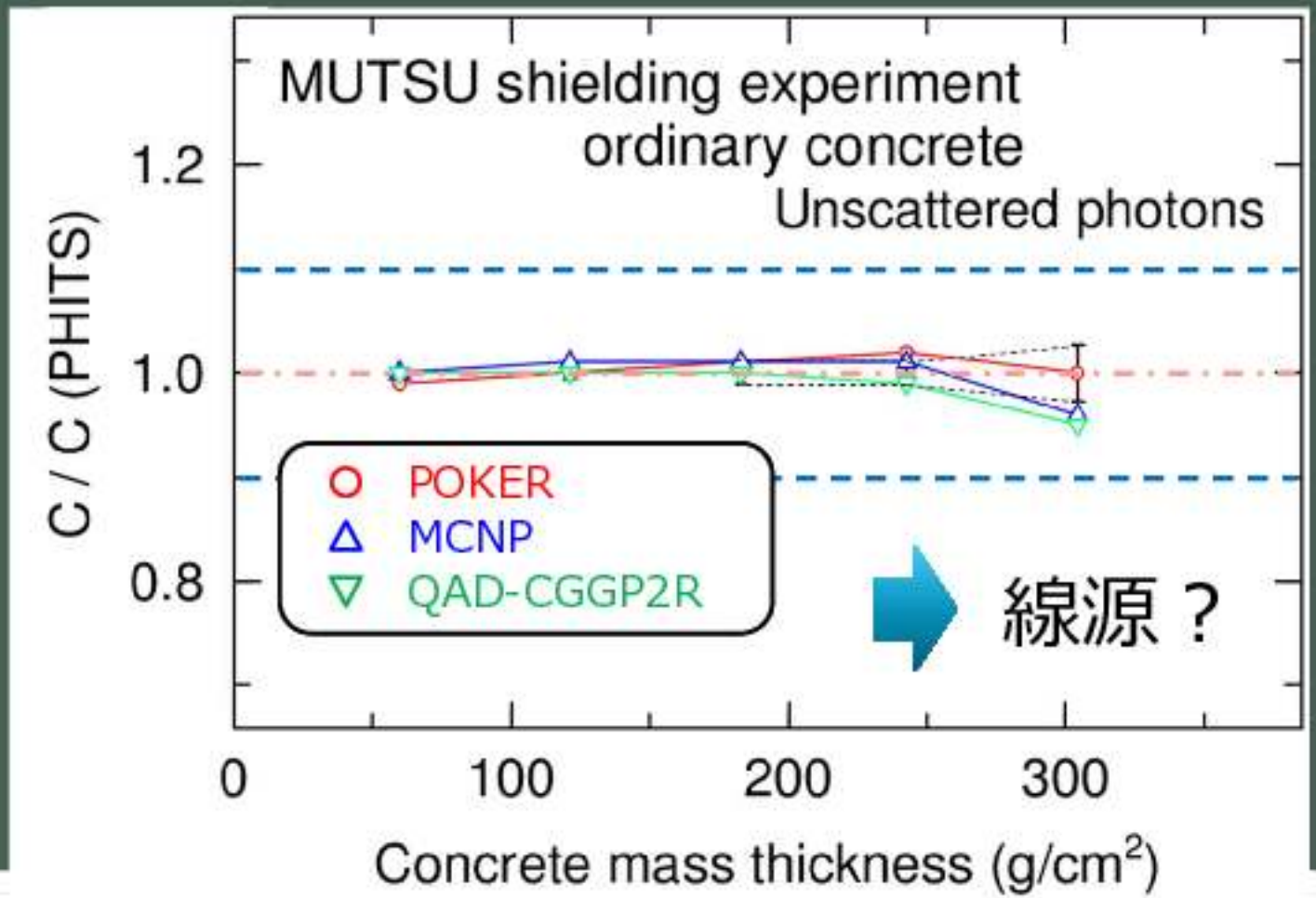
計算結果（C/M）

- 全光子（散乱光子込み）
  PHITS による計算結果(C) は、測定結果(M) に対して 10%以内 でよく一致した。（重コン 100 cm を除く。）
- 一方で、非散乱光子 は、・・・

		測定結果（M）		PHITS 3.20（C）		C/M	
	厚さ (cm)	非散乱光子 Unscattered	全光子 / Total photons	非散乱光子 Unscattered	全光子 / Total photons	非散乱光子 Unscattered	全光子 / Total photons
遮蔽体：無	0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.00	1.00
遮蔽体：普通コンクリート	25.2	1.06E-01	2.39E-01	1.18E-01	2.36E-01	1.11	0.99
	50.1	1.48E-02	4.56E-02	1.62E-02	4.42E-02	1.10	0.97
	75.3	2.13E-03	9.19E-03	2.57E-03	8.24E-03	1.21	0.90
	100.5	3.43E-04	1.81E-03	4.65E-04	1.68E-03	1.35	0.93
	125.4	5.70E-05	3.78E-04	8.71E-05	3.40E-04	1.53	0.90
遮蔽体：重コンクリート	25	3.52E-02	9.26E-02	3.94E-02	9.68E-02	1.12	1.05
	50	2.17E-03	7.64E-03	2.25E-03	7.74E-03	1.04	1.01
	75.1	1.33E-04	6.82E-04	1.42E-04	6.24E-04	1.07	0.91
	100.1	7.11E-06	6.04E-05	1.01E-05	5.09E-05	1.42	0.84

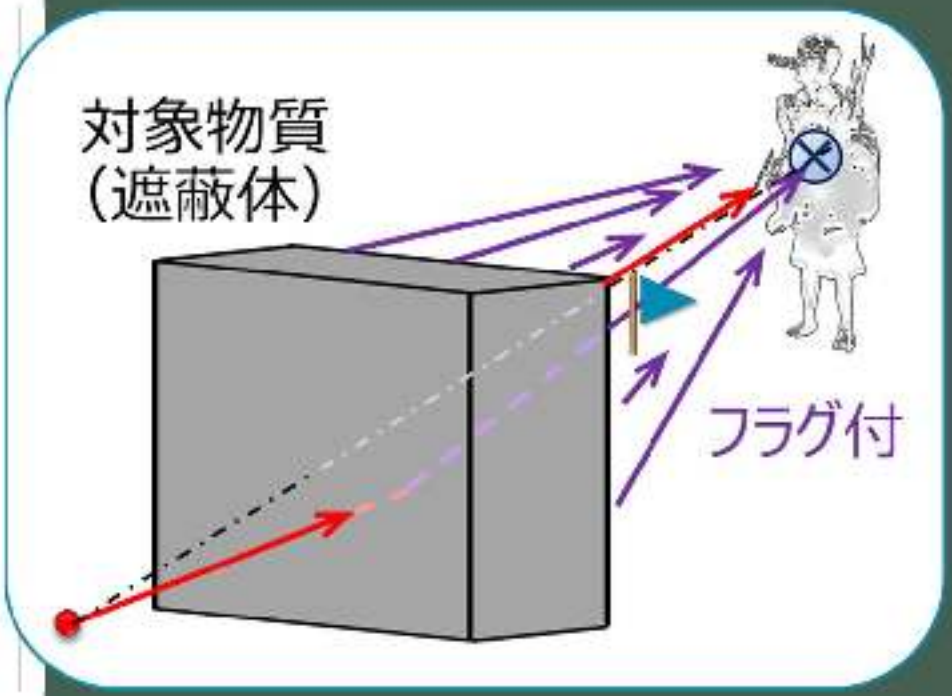
計算結果（C/C）

- 非散乱光子 は、計算コード間(C/C) でよく一致した。



[Counter] 機能 を用いた解析

- フラグ を立てて、観察対象の放射線 を弁別（散乱 / 非散乱 光子）



解析 と同時に、
ビルドアップ係数 も試算

厚さ (cm)	普通/重 コンクリート	
0	1.07	1.07
25	2.16	2.64
50	2.91	3.86
75	3.54	4.67
100	4.02	5.70
125	4.49	---

まとめ

- 簡易遮蔽計算コードレビューWG の活動の一環として、光子の「コンクリート透過実験」を対象としたベンチマーク解析を実施した。
  （この報告書は、近日公開予定です。）
- 普通コンクリートの遮蔽体 に対する ***PHITs*** の計算結果は、測定結果をよく再現した。(±10%)
- ***PHITs*** の 妥当性検証（Validation）は、これまでも数多く行われてきているが、今後も皆さまのご協力をお願いします。

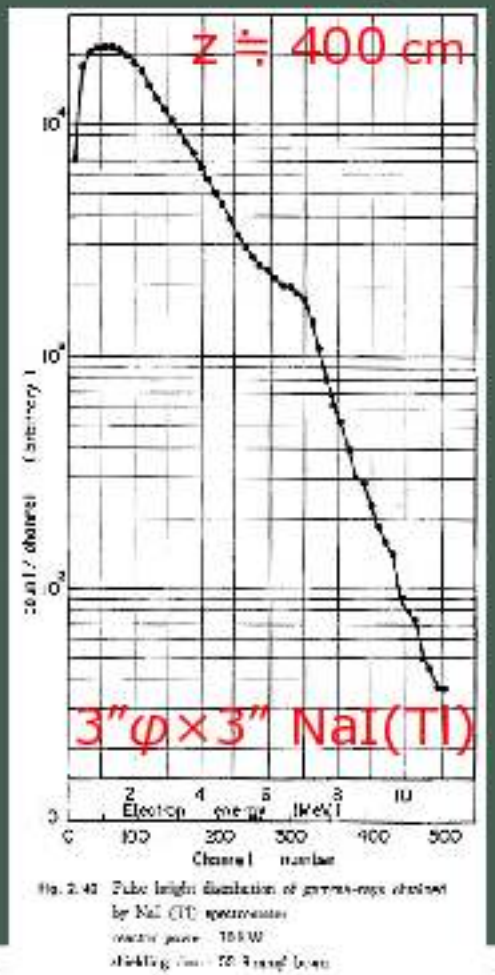
おしまい

ご清聴ありがとうございました。

補足資料

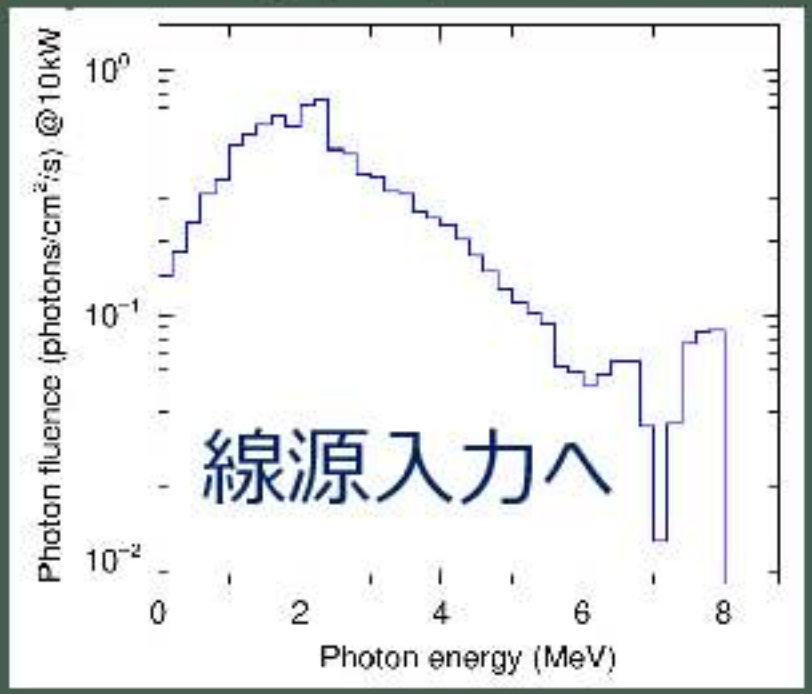
光子のエネルギースペクトル

- Pulse height distribution



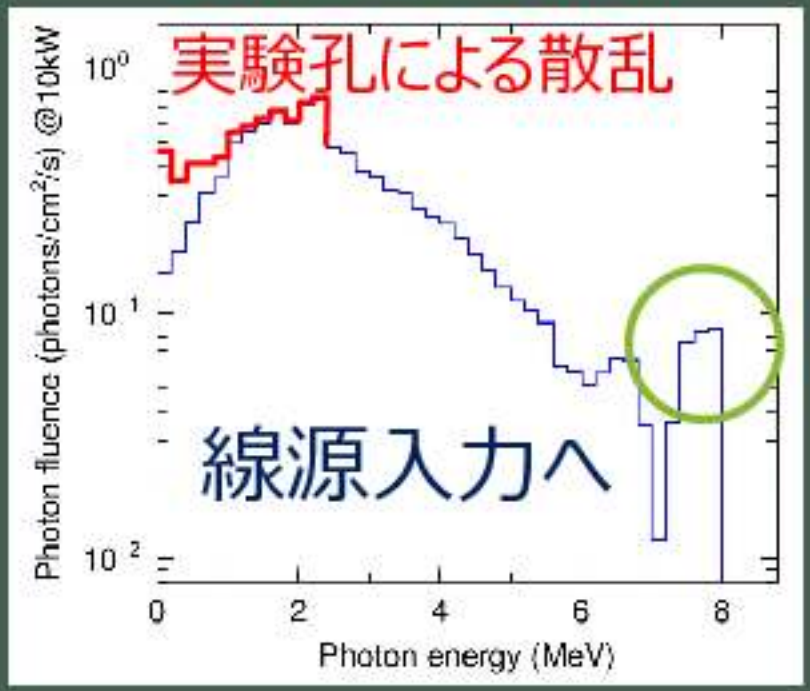
逆マトリクス法 で変換

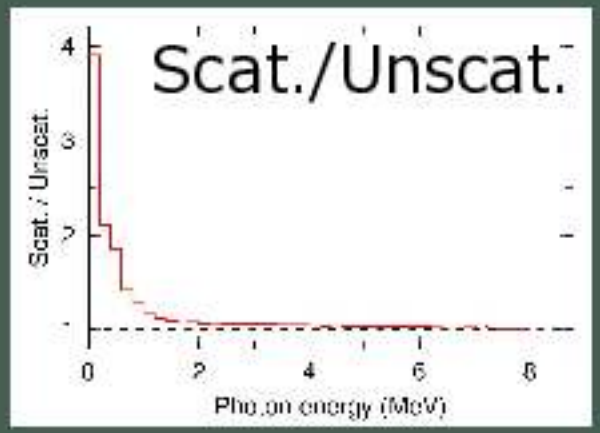
Energy spectrum



線源に関する課題

- Energy spectrum



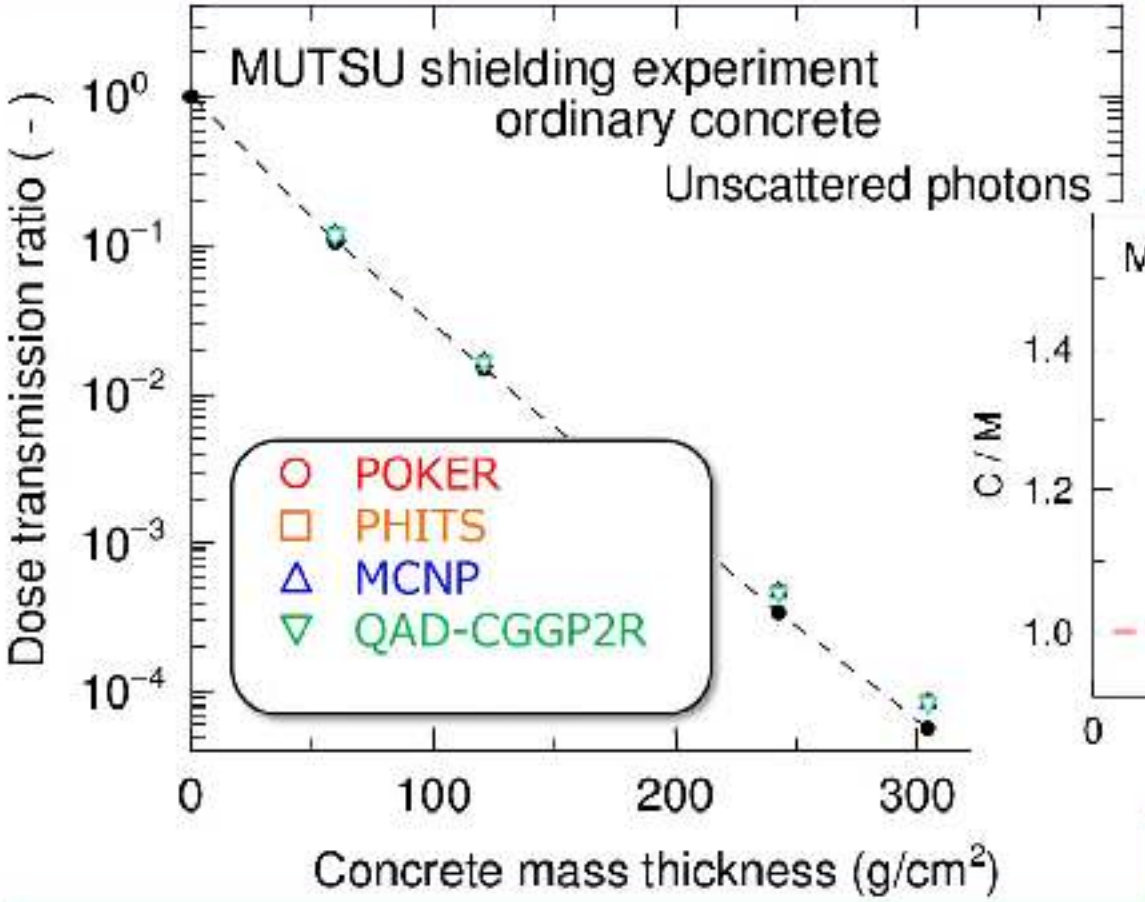


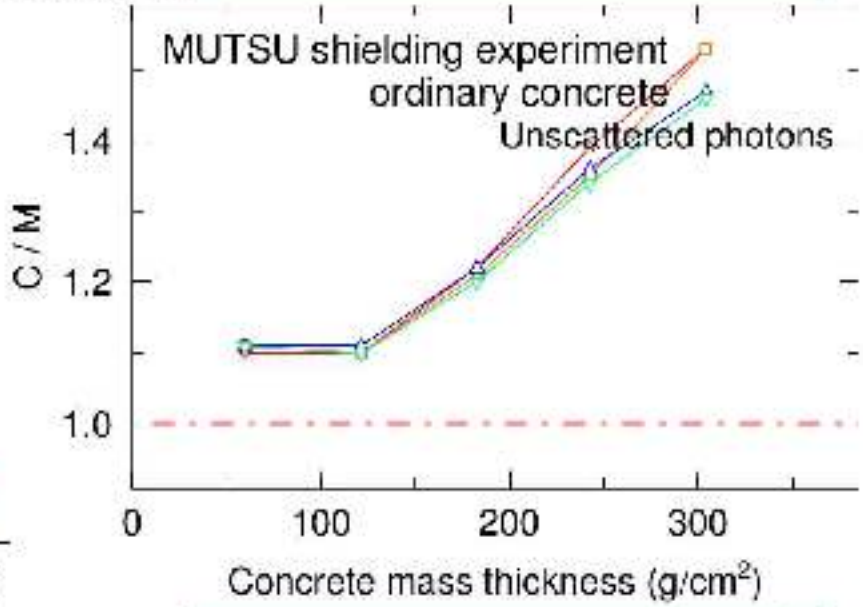
鉄の捕獲ガンマ線？
（6 MeV付近や7.6 MeV）

ただし、
燃料： U-Al 合金（Al）
反射体： 黒鉛（Al）
制御板： ボロン入り
ステンレス鋼

計算結果 ALL（C/M）

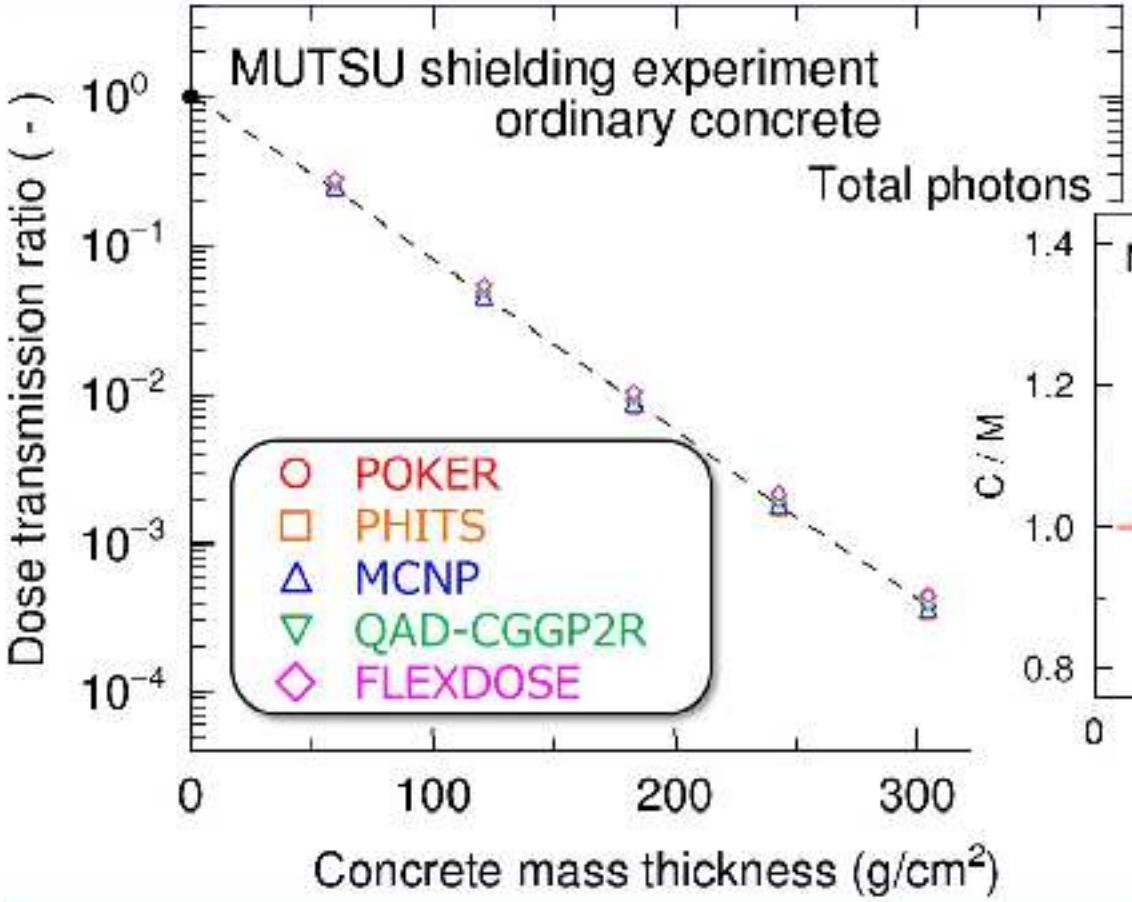
- 非散乱光子 は、遮蔽体の厚さ により差異が拡大

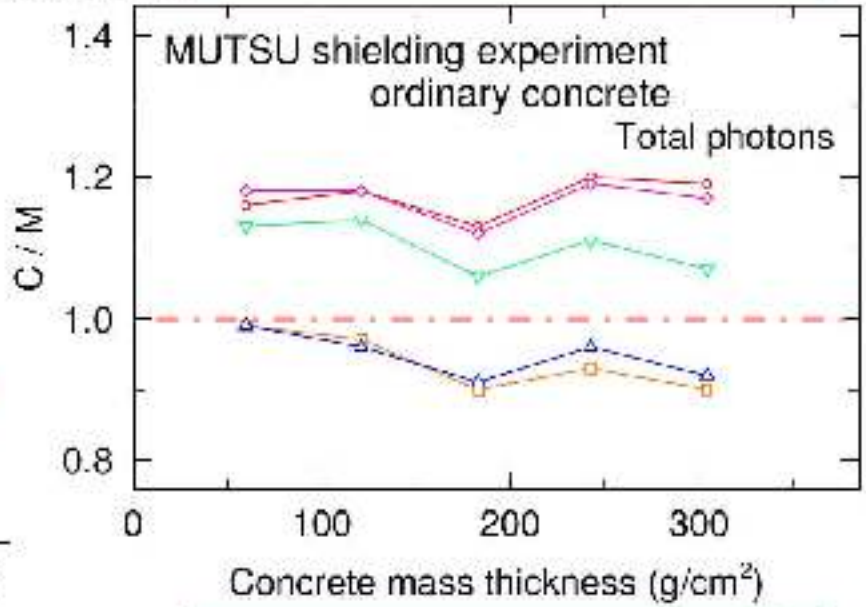




計算結果 ALL（C/M）

- 全光子 は、遮蔽体の厚さ に関わらずほぼ一様の差異





パルス中性子ビームの実験とシミュレーション

原かおる　（KEK）

核データ測定研究やイメージング技術開発、物質材料ナノ構造研究をそれぞれ目的としたパルス中性子ビーム実験と、それらのデータ解析に用いたPHITSやEGS5の利用例を紹介する。実験値はJ-PARC MLFにて取得した。

（以前に発表した内容も含みます）

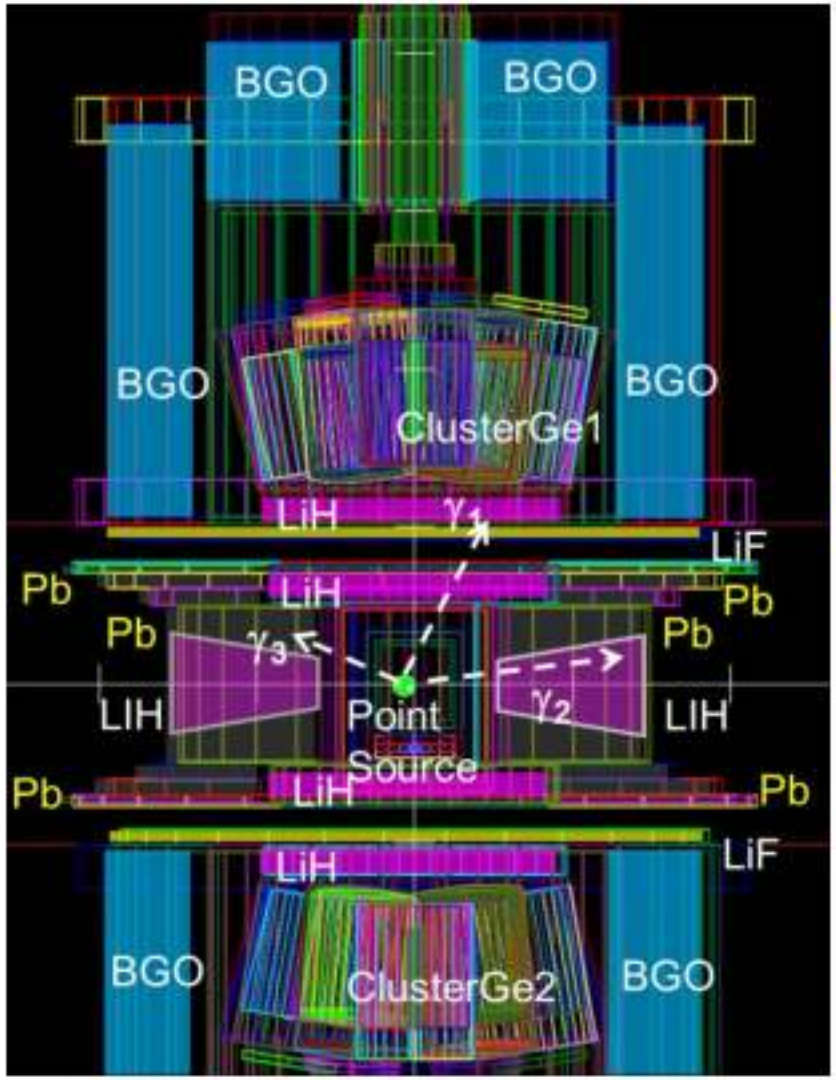
(1) J-PARC MLF BL04 (ANNRI)

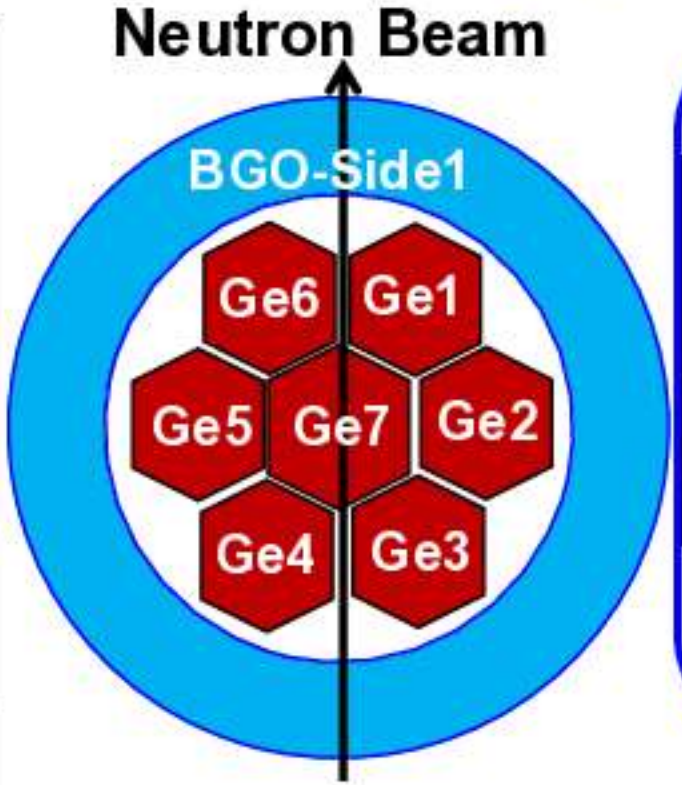
Geスペクトロメータ

関連論文等

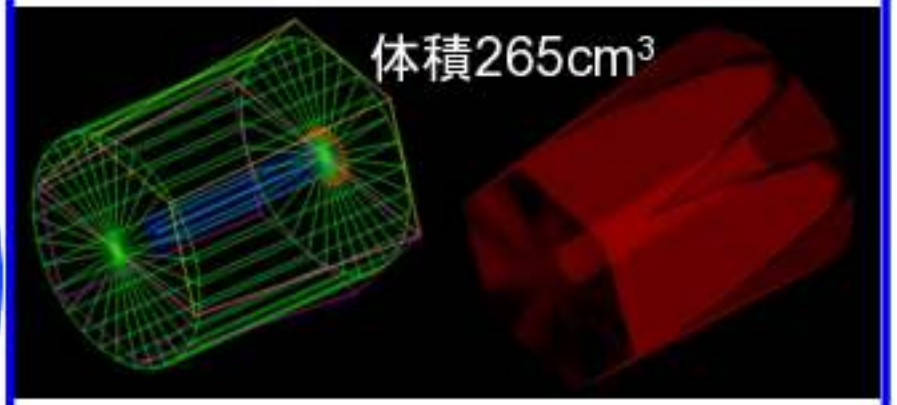
[1] K.Y. Hara, S. Goko, H. Harada, K. Hirose, A. Kimura, T. Kin, F. Kitatani, M. Koizumi, S. Nakamura, Y. Toh, M. Igashira, T. Katabuchi, K. Kino, Y. Kiyanagi, and J. Hori, "Response function for the measurement of (n,γ) reactions with the ANNRI-cluster Ge detectors at J-PARC", **JAEA-Conf 2014-002** (2014) 88.

EGS5とANNRI-Geスペクトロメータ





Ge結晶の形状定義



- 円錐台＋六角錐＋電極など
- EGS5のCGで多面体ARB利用

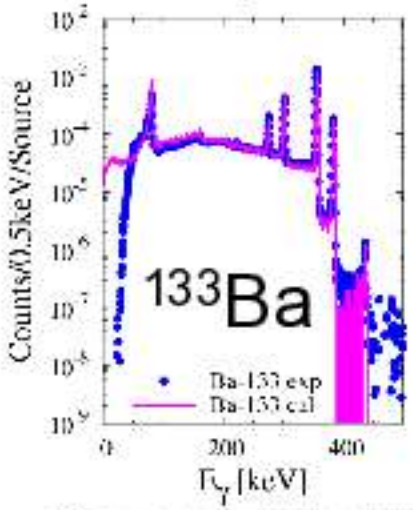
- クラスターGe検出器（7結晶）×2
- BGO検出器
- 中性子・γ線遮蔽材など

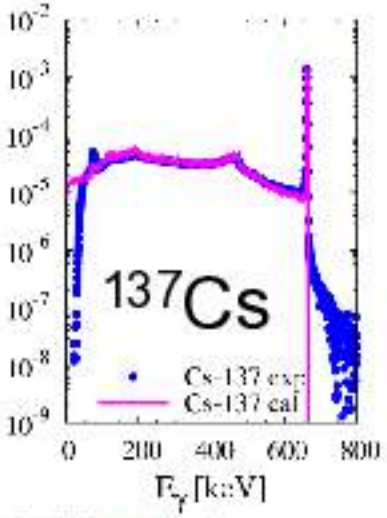
（このセットアップは過去のもので、現状とは異なります）

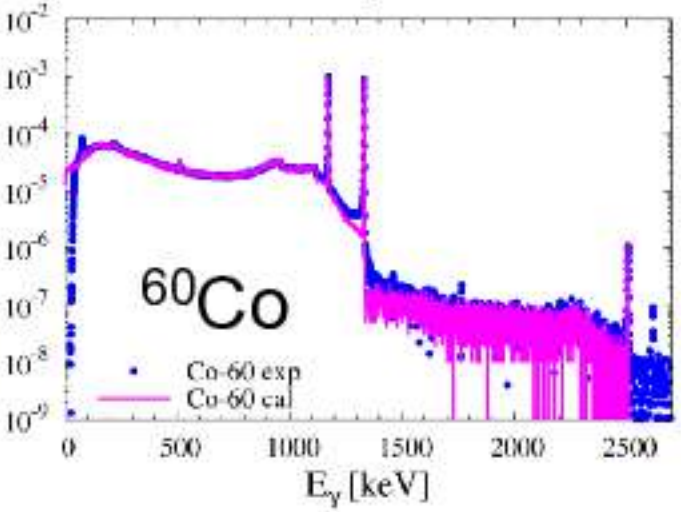
ガンマ線のパルス波高スペクトル

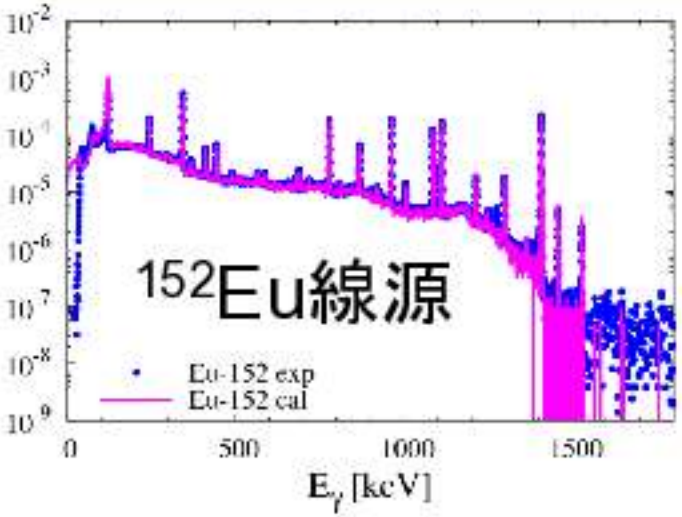
ENSDF情報を元に
カスケードγ線を線源定義

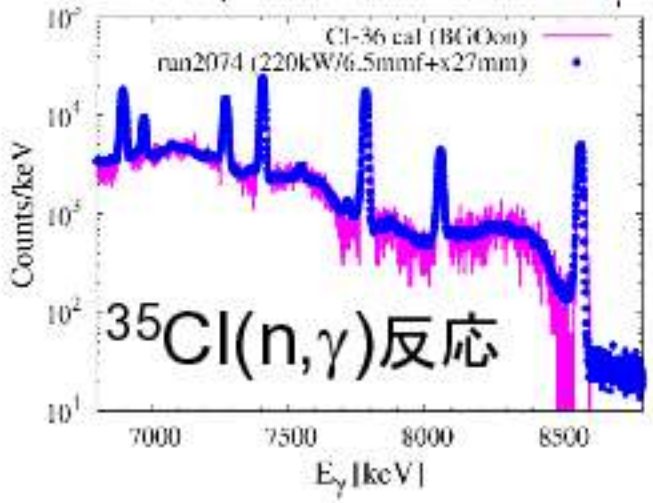
標準γ線源＋中性子捕獲反応による即発γ線

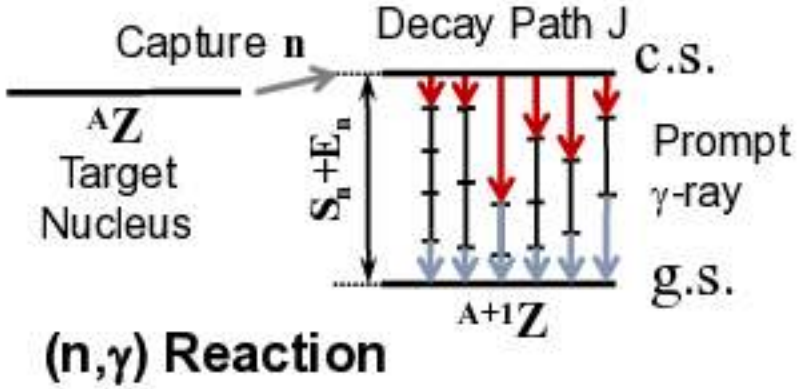






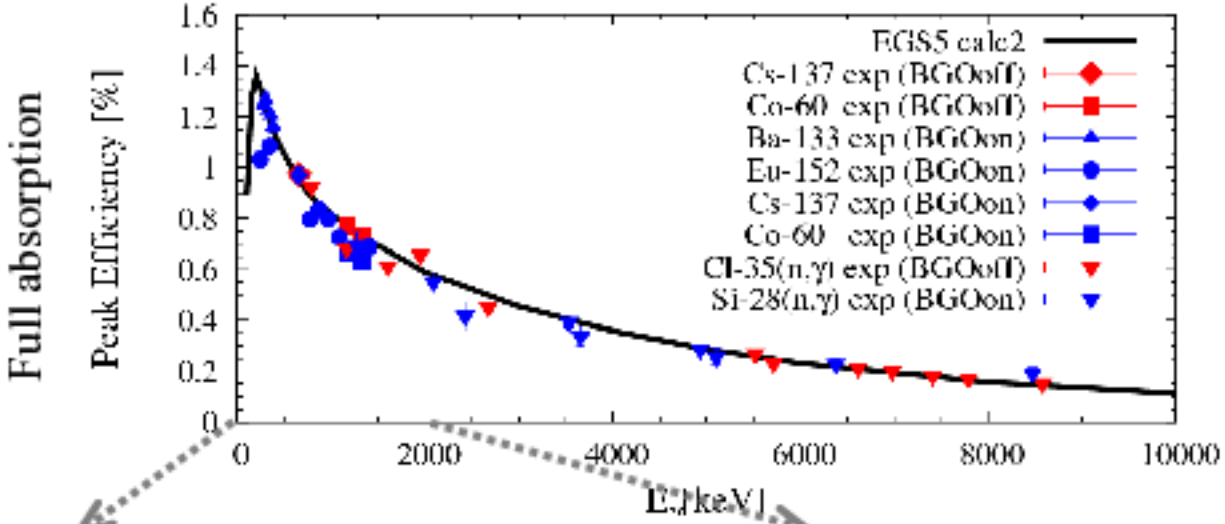


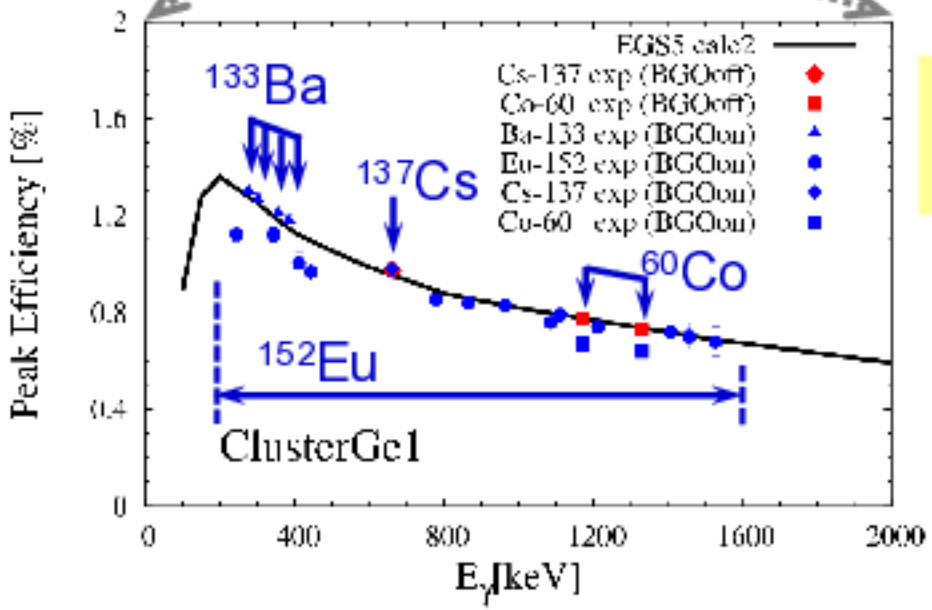




CulsterGe1 + BGO-ONの場合
計算でのCompton suppress BGOしきい値は300 keVに設定

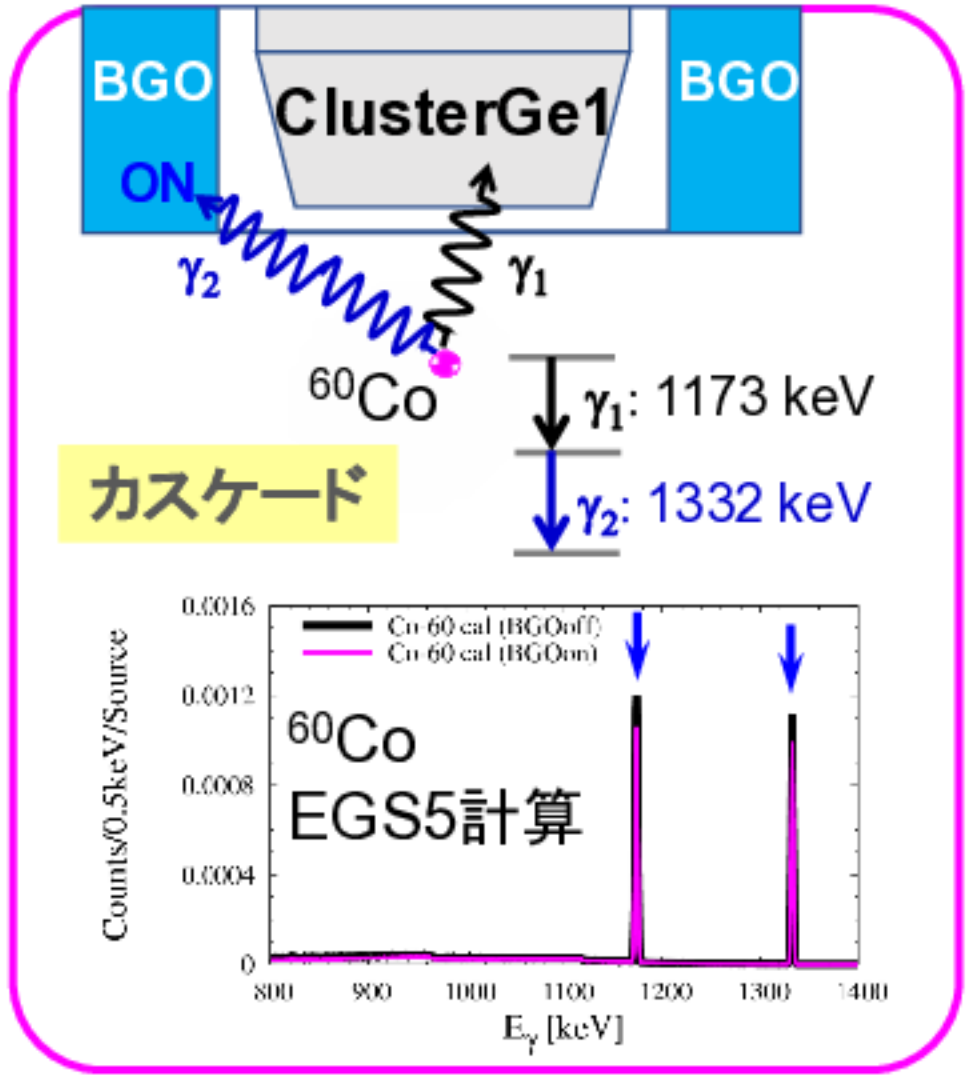
ピーク検出効率のエネルギー依存性





Exp: BGO-OFF
Exp: BGO-ON

利用目的に依るがCompton suppressionは考慮が必要



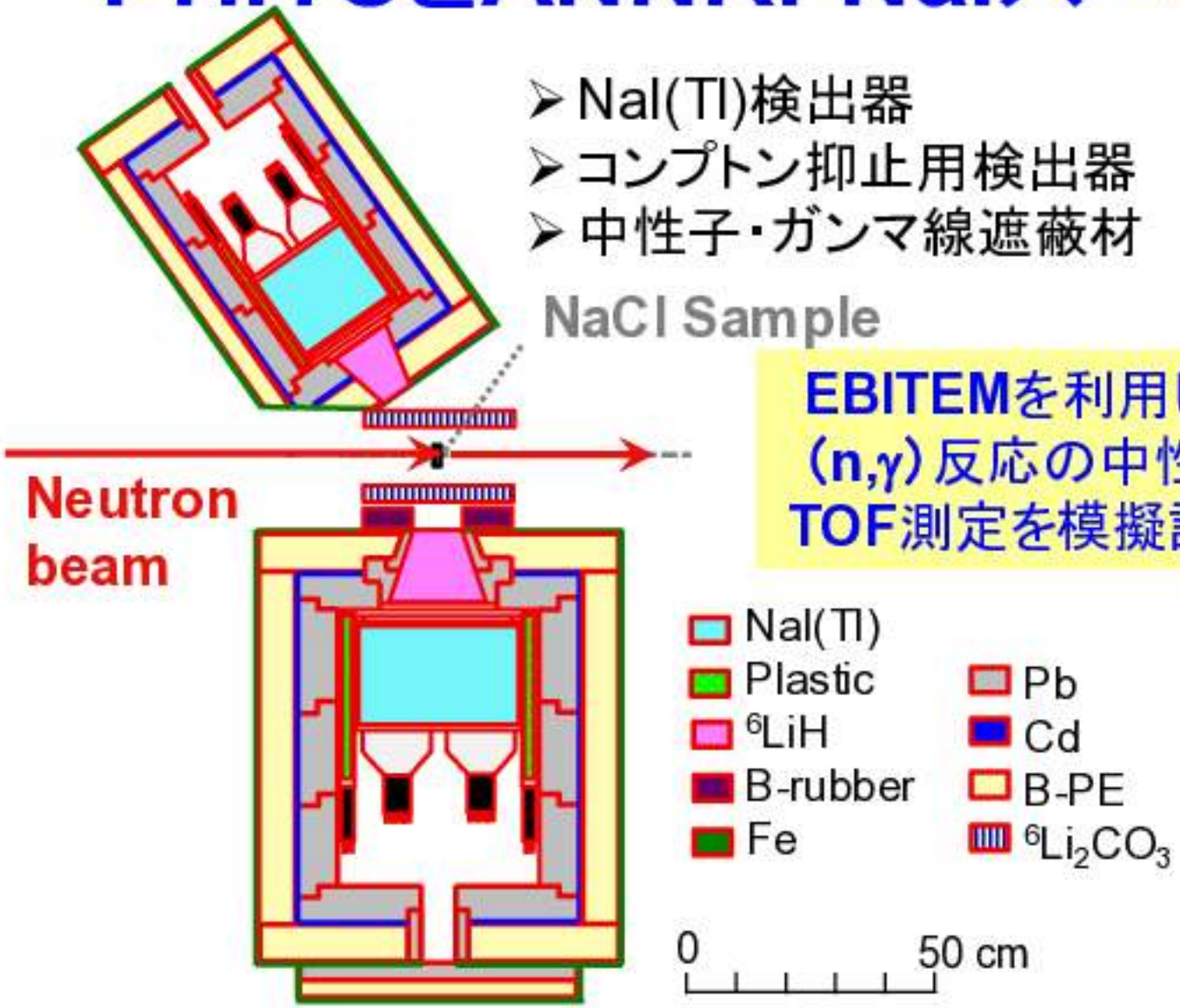
(2) J-PARC MLF BL04 (ANNRI)

NaIスペクトロメータ

関連論文等

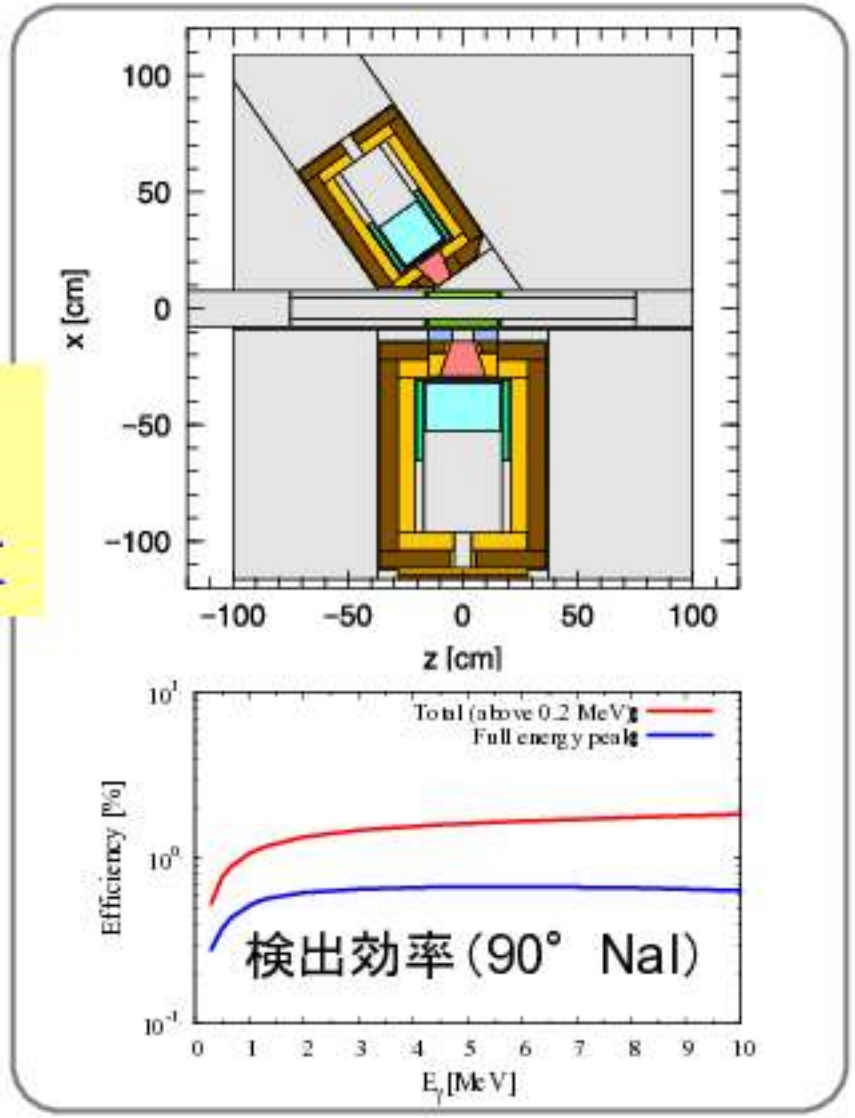
[2] K.Y. Hara, N. Fujii, T. Kamiyama, Y. Narita, H. Sato, S. Nakamura, and Y. Toh, “Measurement and simulation of the neutron capture reaction using NaCl samples”, **JAEA-Conf 2017-001** (2017) 169.
[3] N. Iwamoto, S. Nakamura, A. Kimura, T. Katabuchi, G. Rovira, K.Y. Hara, and O. Iwamoto, “Evaluation of gamma-ray strength function based on measured gamma-ray pulse-height spectra in time-of-flight neutron capture experiments”, EPJ Web Conferences **239** (2020) 17016.

PHITSとANNRI-NaIスペクトロメータ



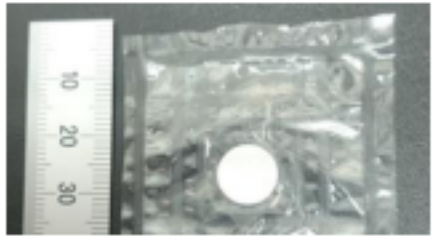
- NaI(Tl)検出器
- コンプトン抑止用検出器
- 中性子・ガンマ線遮蔽材

EBITEMを利用して（n,γ）反応の中性子TOF測定を模擬計算

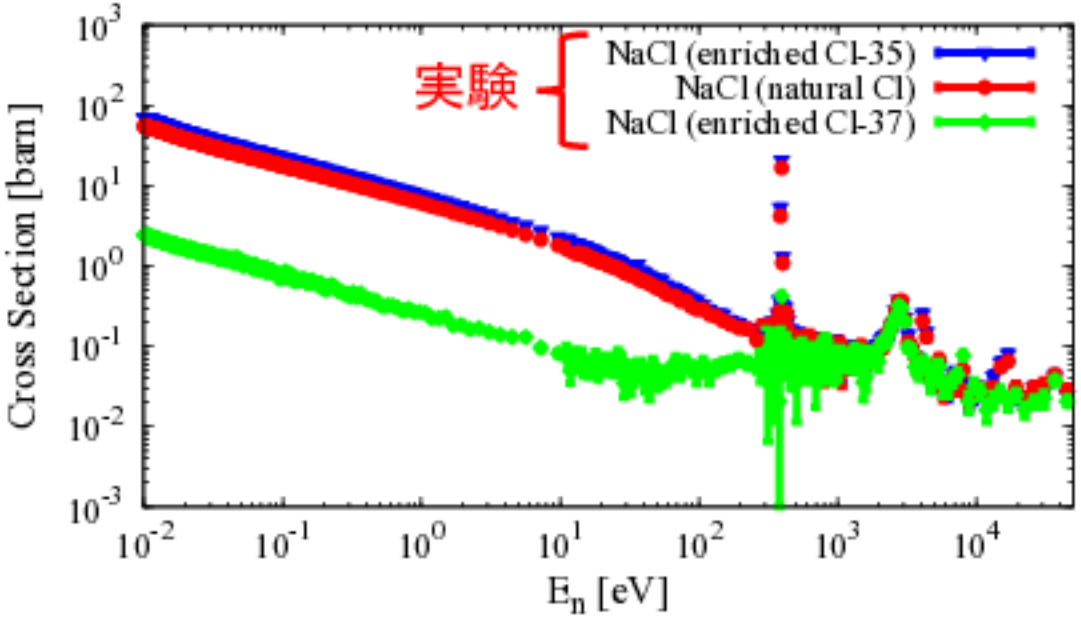


^{35}Cl(n,γ)^{36}Cl反応の中性子捕獲断面積測定

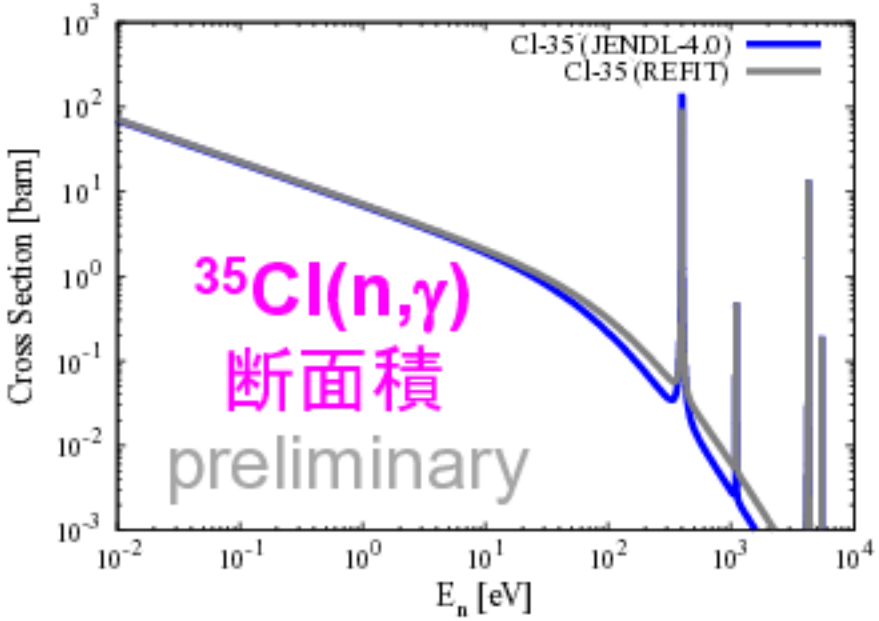
異なるCl同位体組成のNaCl試料



- 99% ^{35}Cl濃縮同位体試料
- Cl自然同位体試料
  (^{23}Na 100%, ^{35,37}Cl 76, 24%)
- 98% ^{37}Cl濃縮同位体試料

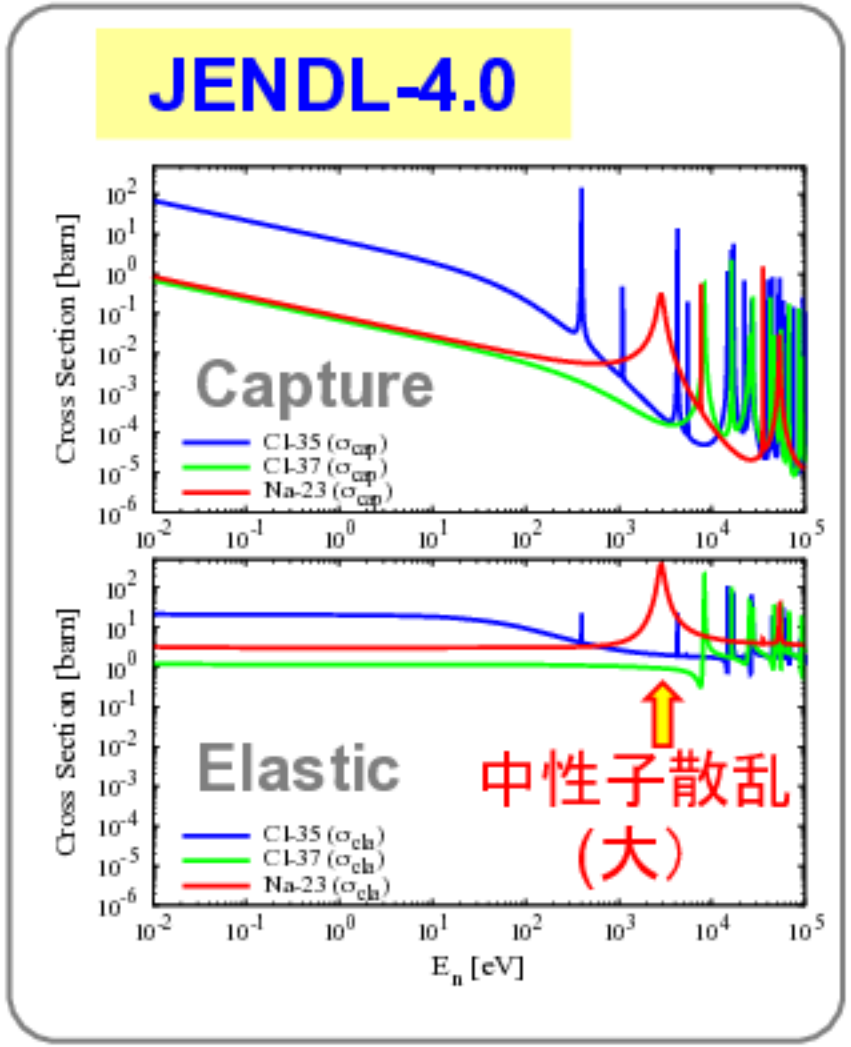


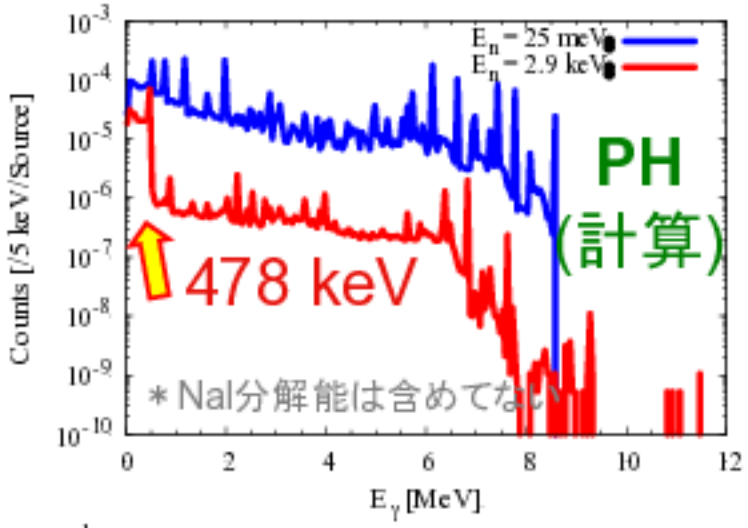
長寿命放射性核種^{36}Cl
（半減期30万年）



NaCl試料には3核種（^{35,37}Cl, ^{23}Na）が含まれるので、中性子共鳴解析コードREFITを用いて実験データをフィット

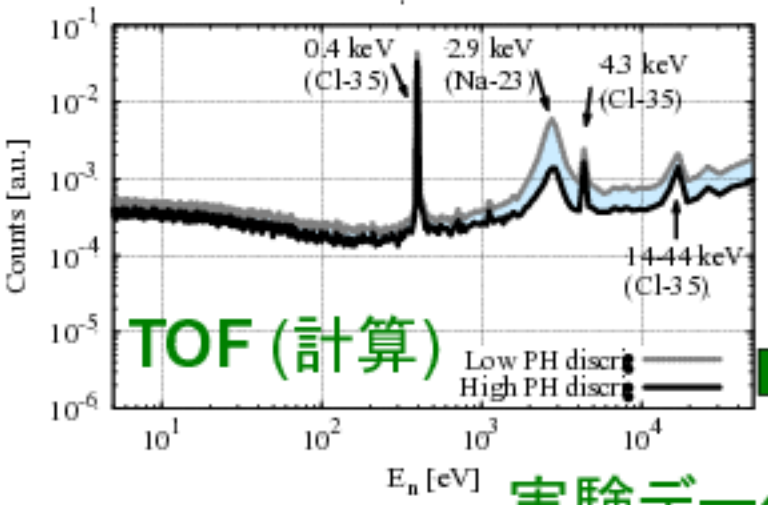
試料の中性子散乱に起因するガンマ線BG

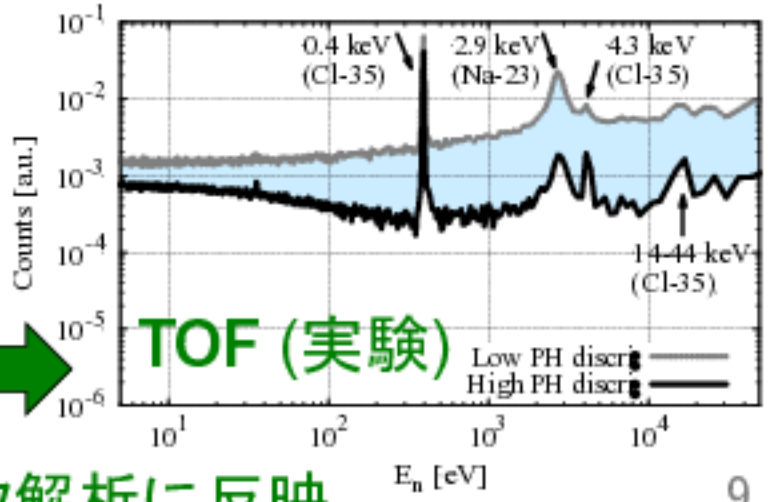




入射中性子エネルギー
E_n~3keVの時、$^{10}B(n,\alpha)$
由来のガンマ線が顕著

- 遮蔽材中の^{10}Bが散乱中性子を捕獲することに起因したBG γ線
- PHディスクリ値高く設定でBG減





実験データ解析に反映

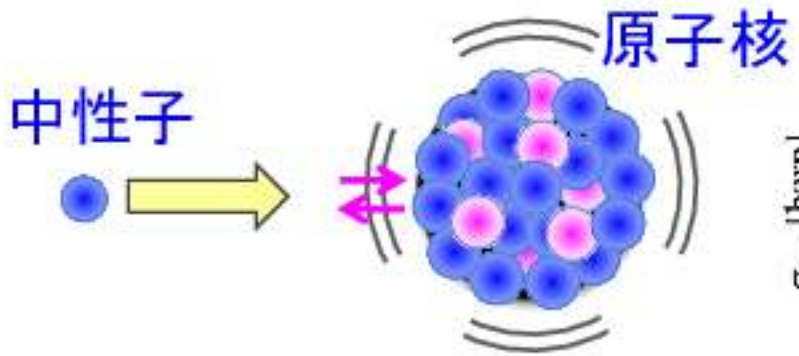
(3) J-PARC MLF BL10 (NOBORU)

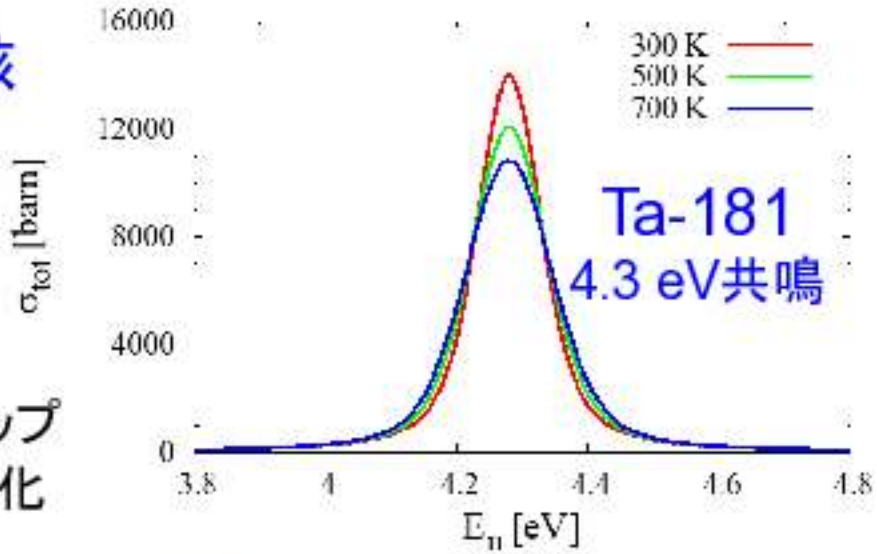
関連論文等

[4] K.Y. Hara, M. Asako, T. Kai, H. Sato, and T. Kamiyama, “Neutron transmission measurement and simulation of Ta-181 for neutron resonance thermometry”, 2019 IEEE NSS/MIC Conference Record (DOI: 10.1109/NSS/MIC42101.2019.9059878).

中性子共鳴吸収分光法の温度イメージング

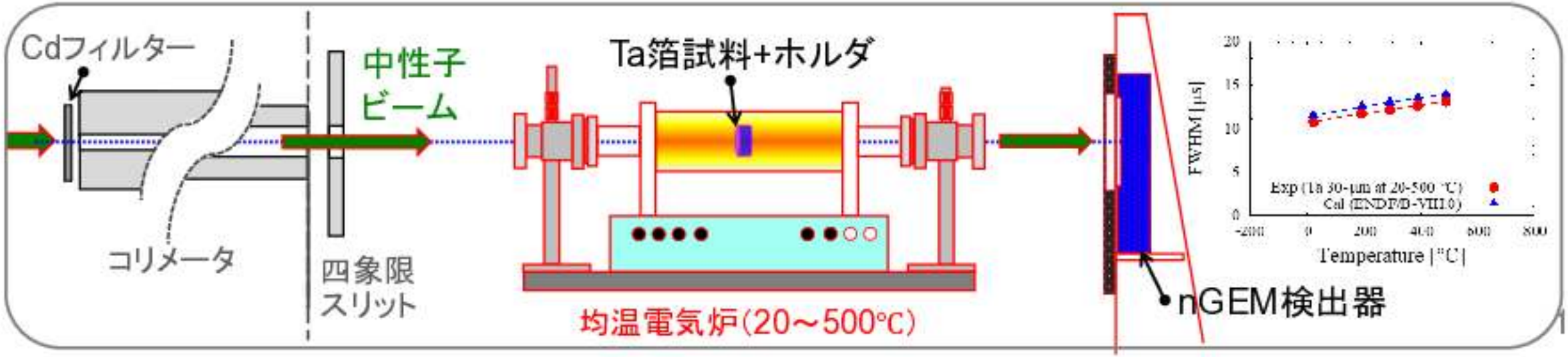
- イメージング技術開発
- Ta-181箔の中性子透過測定





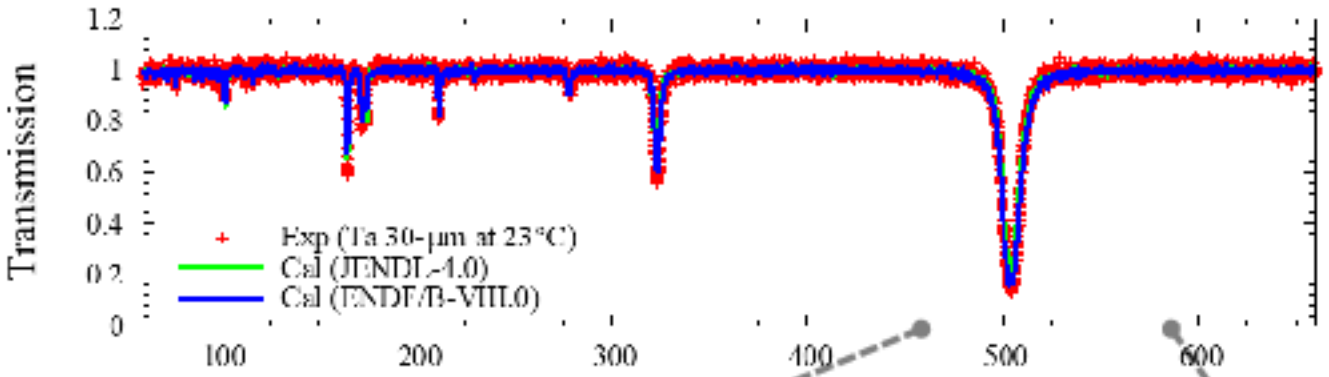
BL10

温度→原子核の熱振動に起因するドップラー効果→中性子共鳴吸収の線幅変化

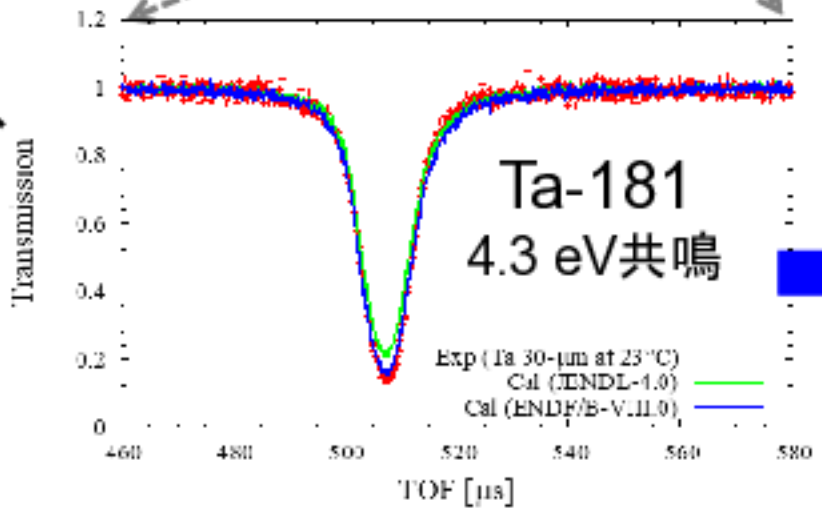


PHITSと^{181}Taの中性子透過TOFスペクトル

30 μm厚のTa箔試料（室温）

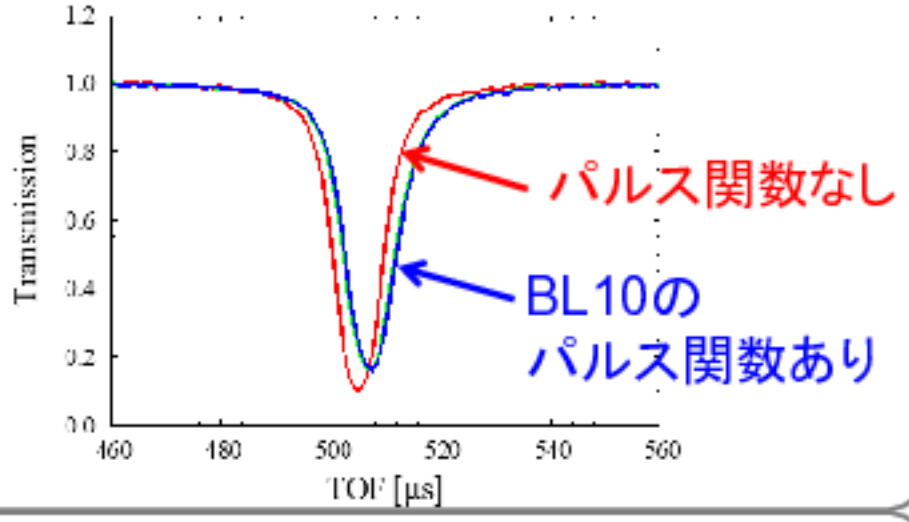


実験値と計算値を比較した結果、JENDL-4.0よりENDF/B-VIII.0を利用した計算の方が合ってる



Sourceの中性子放出時間分布
t-type = 100

RIST仁井田さんに御協力いただきました



JENDL-5　核データの再評価

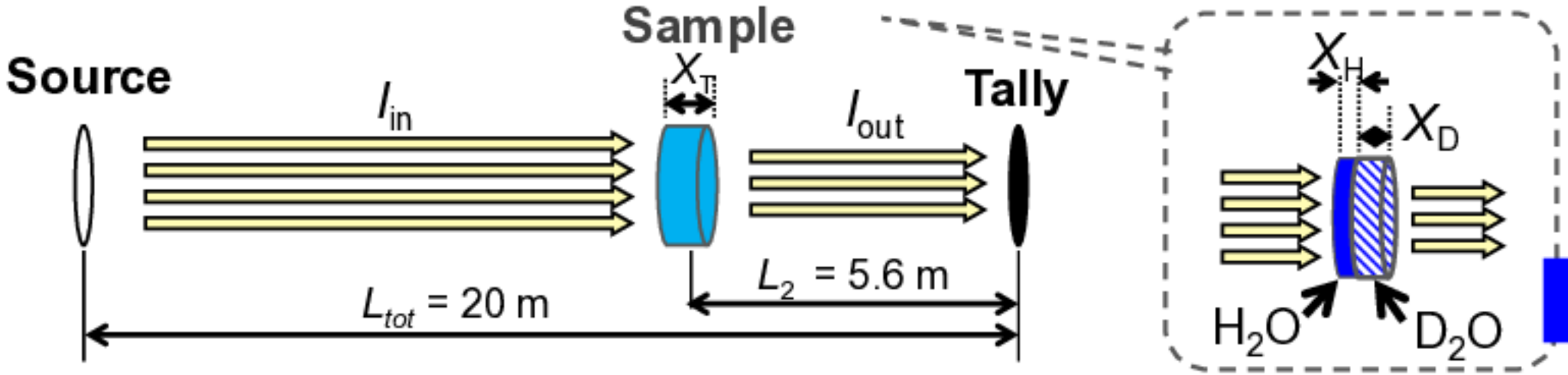
ANNRIでのTa-181の中性子捕獲反応断面積と全断面積測定
S. Endo *et al.*, NSE**198** (2023) 786.

(4) J-PARC MLF BL15 (TAIKAN)

関連論文等

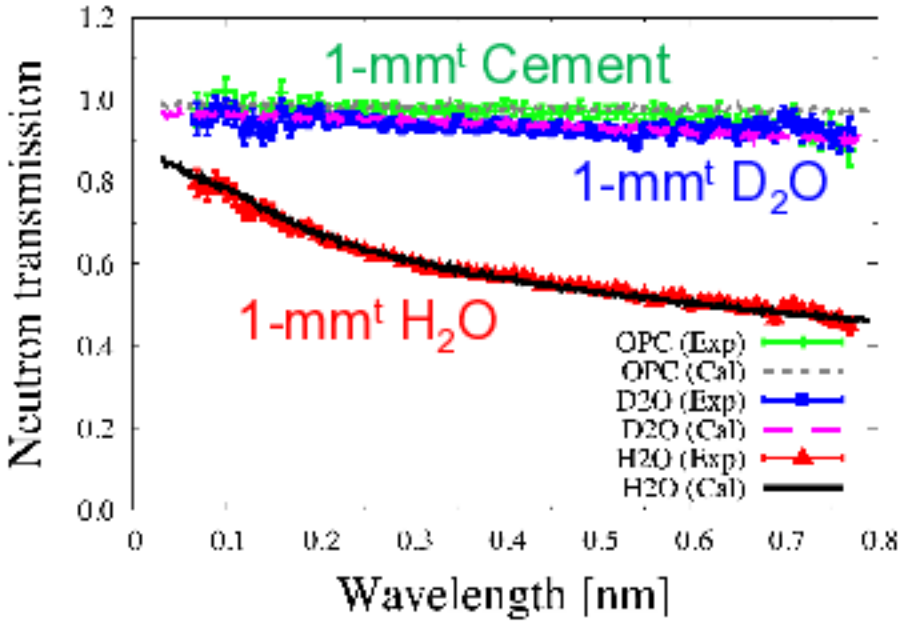
[5] K.Y. Hara, M. Ohnuma, Y. Yoda, and K. Hiroi, “Small-angle neutron scattering and neutron transmission of hardened cement paste”, **JAEA-Conf 2024-002** (2024) 174.
[6] K.Y. Hara, M. Ohnuma, Y. Yoda, and K. Hiroi, “SANS experiments using cement pastes in TAIKAN and data analysis for subtracting incoherent scattering components”, the 4th J-PARC symposium 2024, October 14-18, 2024, Mito, Ibaraki, Japan.

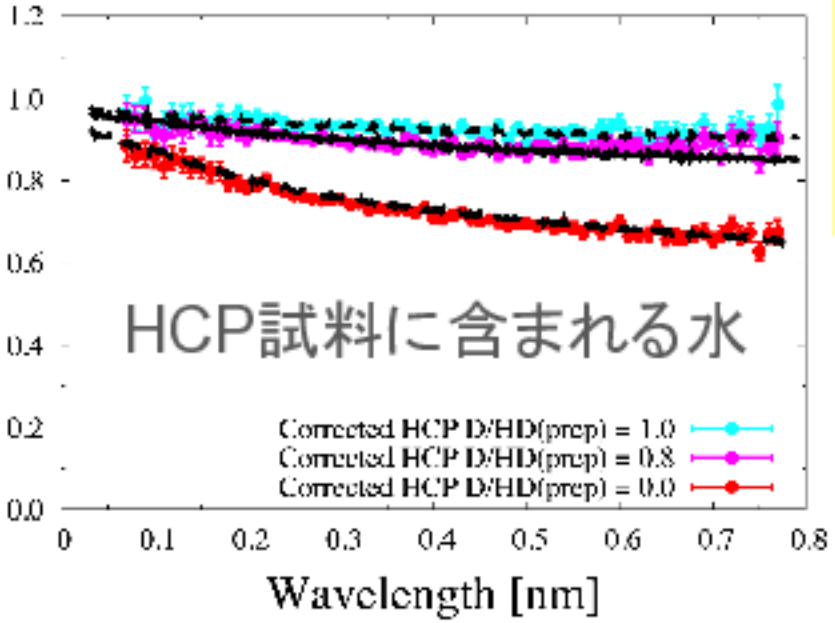
PHITSと水・セメントの中性子透過TOFスペクトル



20℃
JENDL-5
$S_{\alpha\beta}$

N_t 密度



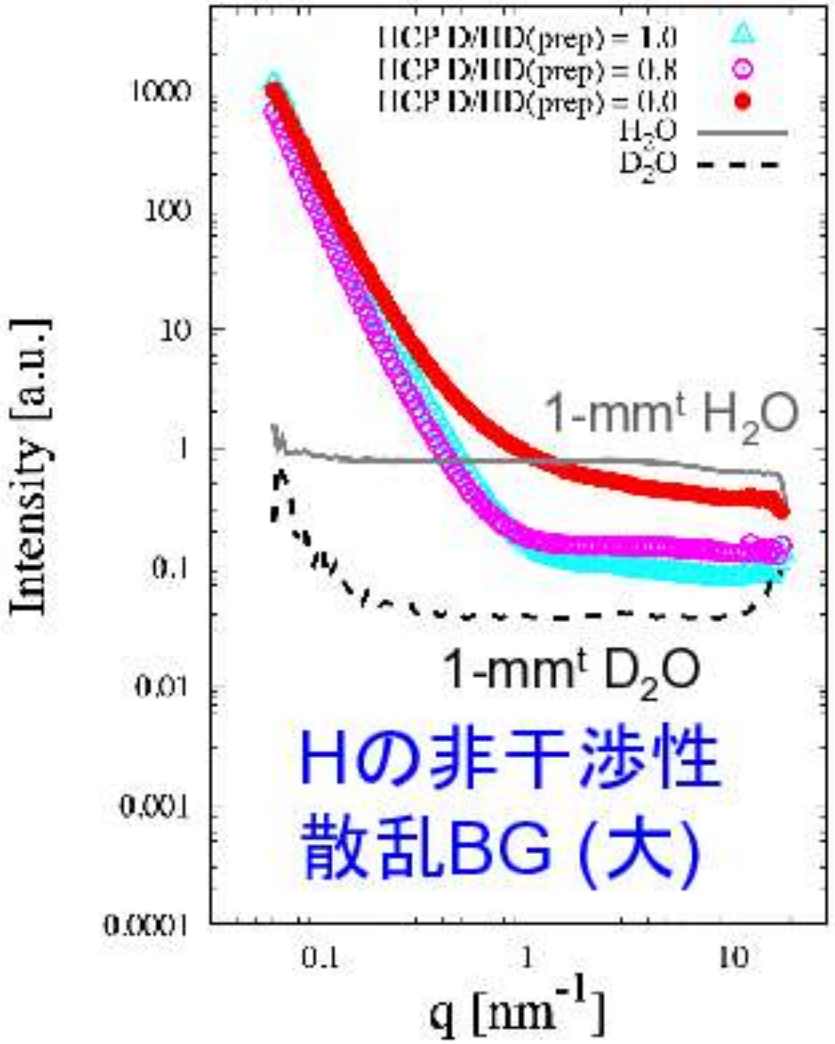


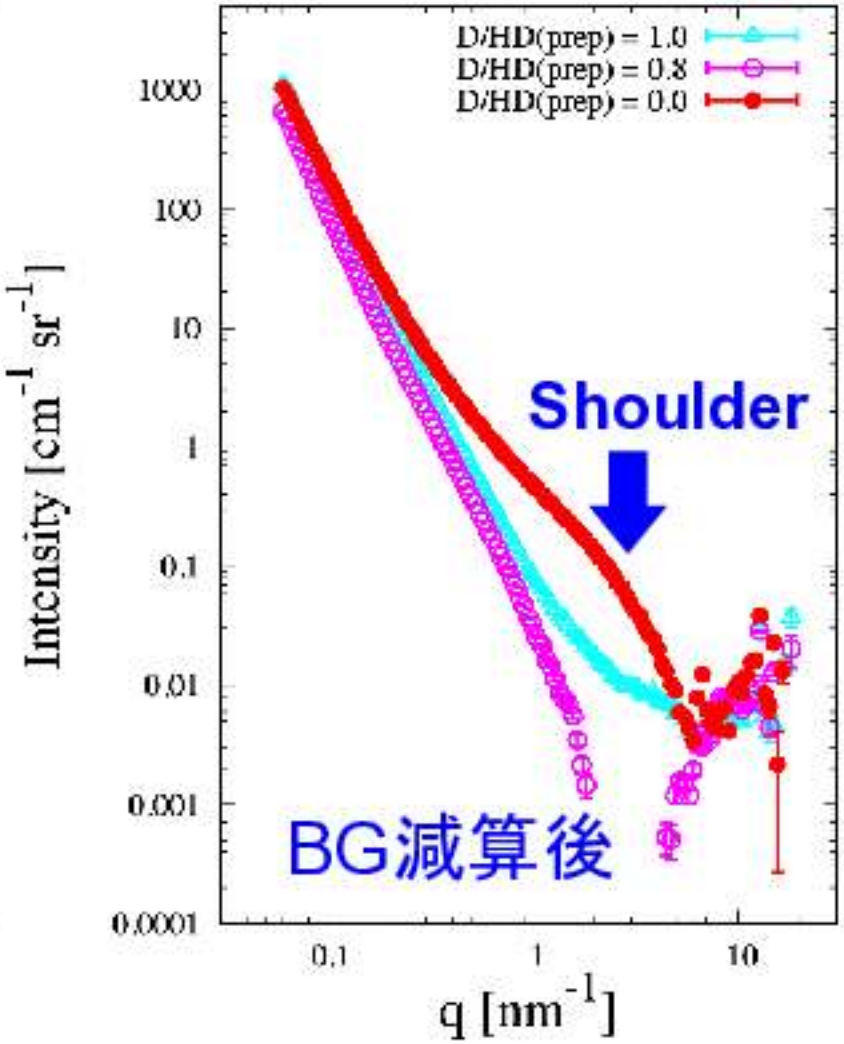
D/HD

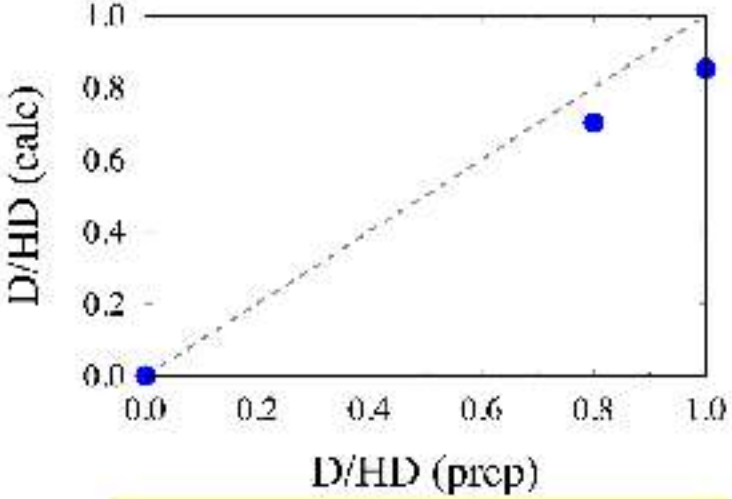
混合水の水素同位体における重水素の個数割合

硬化セメントペースト（HCP）～1 mm^t

中性子小角散乱(SANS)プロファイル



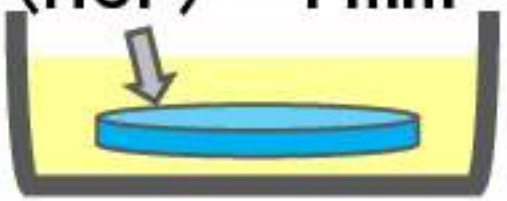




D/HD

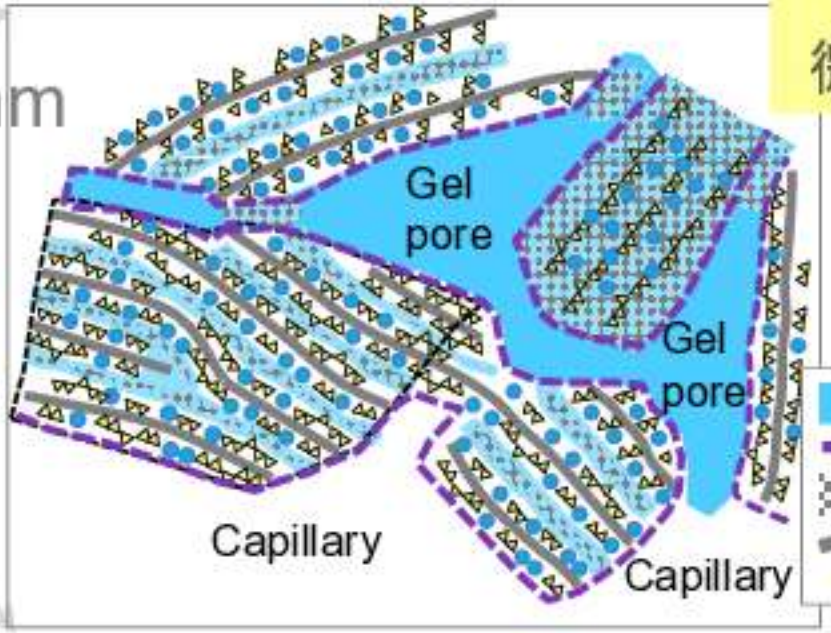
混合水の水素同位体における重水素の個数割合

硬化セメントペースト（HCP）～1 mm^t



セメントペーストのナノ構造

～10 nm



C-S-Hゲルの微細構造モデル

Ref: M.B. Pinson, PR App 3 (2015) 064009

ケイ酸カルシウム水和物 **C-S-H:** $(CaO)_n(SiO_2)(H_2O)_m$ ⟷ 圧縮強度

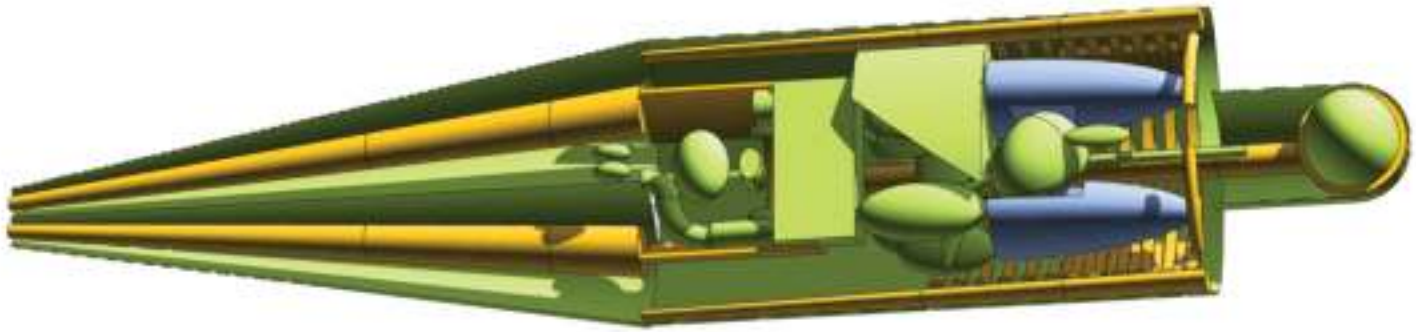
q ～ 3 nm^{-1} 領域の**SANS**プロファイル上に観測された**Shoulder**は、約1 nmサイズのナノ構造である。
そのナノ構造（散乱体）は何か? **SAXS/SANS**比を解析する。

PHITSによる大型加速器施設計算モデル作成のTips

仁井田浩二
(一財)高度情報科学技術研究機構

2005 status of PHITS

PHITS *ver.1.793* and **ANGEL** *ver.4.31*
have been released from JAERI.



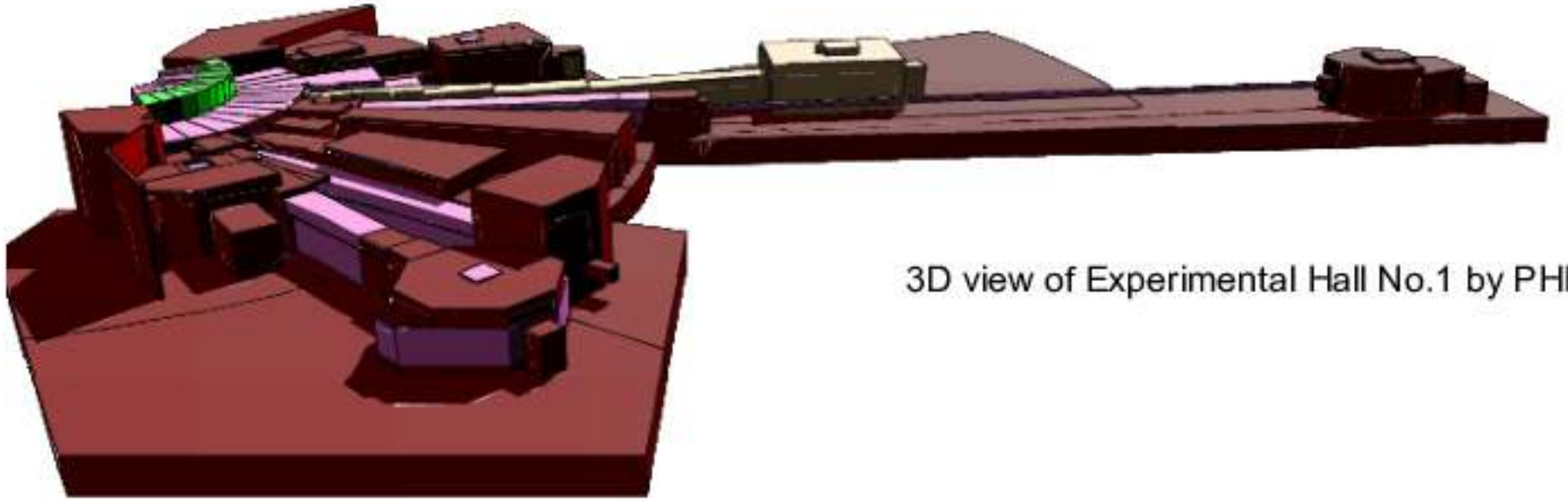
niita@tokai.rist.or.jp
RIST. Code Center: *http://www.rist.or.jp*

Contents

(1) PHITSコード開発の経緯

(2) PHITSのインターフェイス（入出力）の特徴

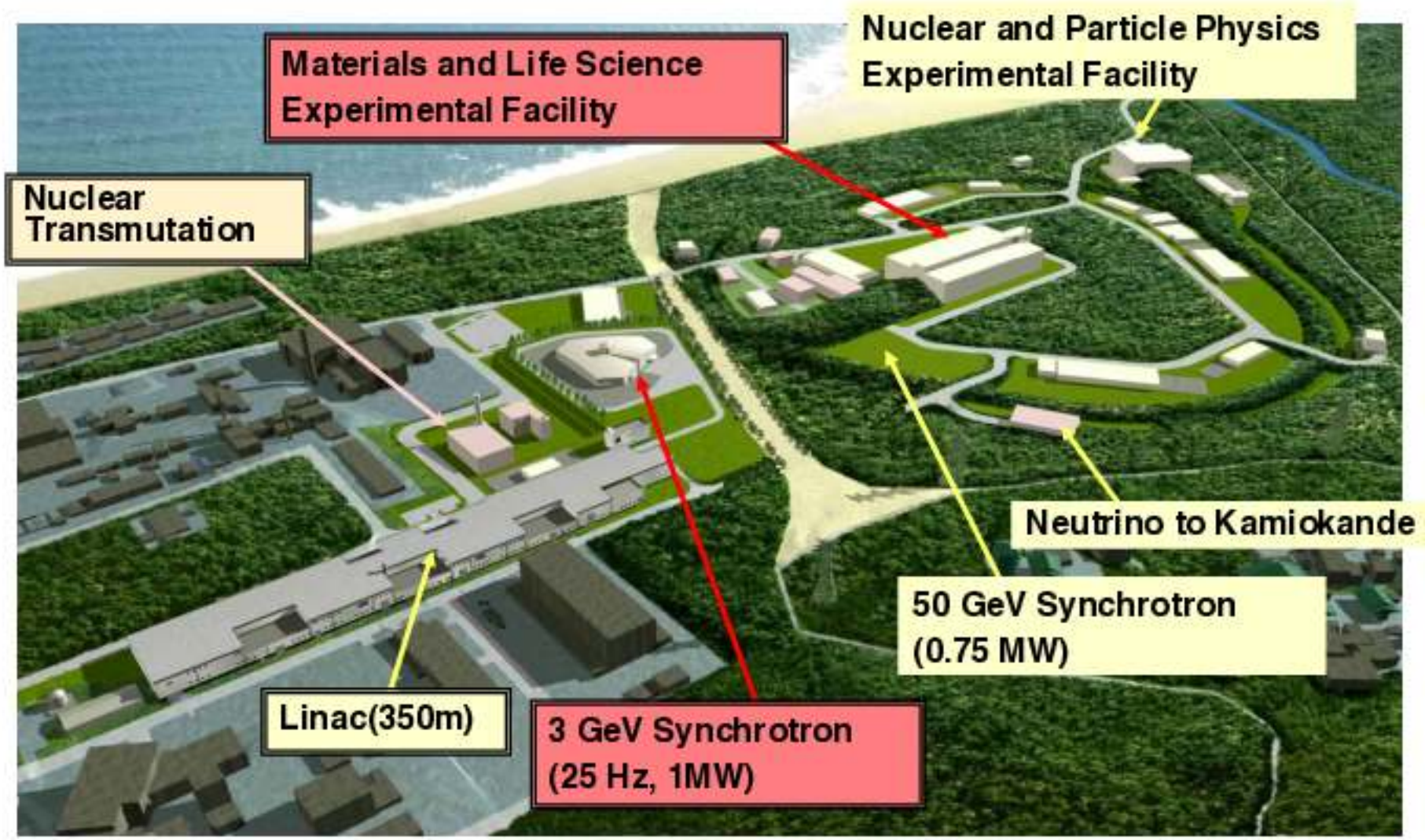
(3) 大型加速施設計算モデル作成のTips



3D view of Experimental Hall No.1 by PHITS

(1) PHITSコード開発の経緯

J-PARC/MLF の施設設計と遮蔽設計のための計算コードとして開発



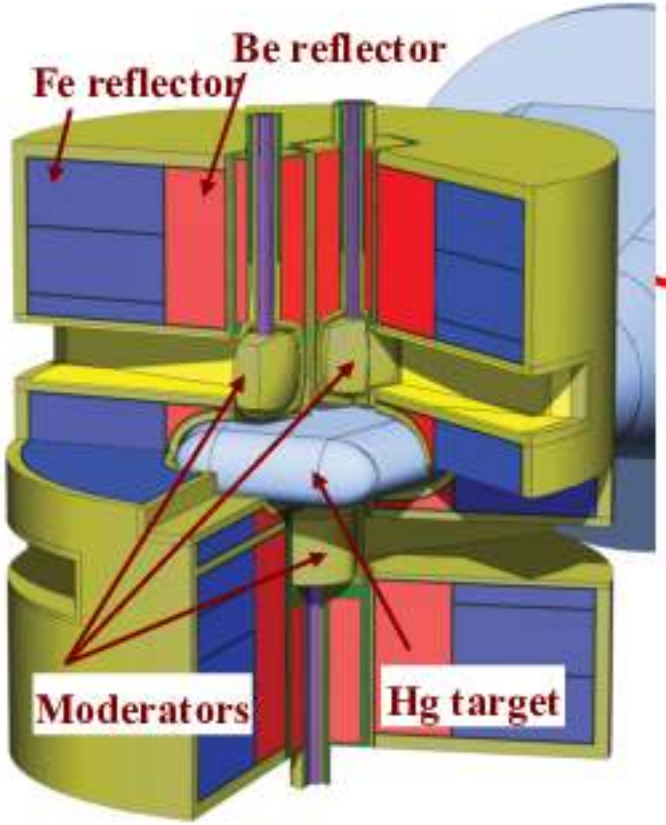
PHITSコード開発の経緯

1951 NMTC (ORNL) → 1983 NMTC/JAERI High Energy Fission → 1997 NMTC/JAERI97 CG geometry → 2001 NMTC/JAM JAM, GG → 2003 **PHITS** JQMD, MCNP

J-PARCに必要な核反応モデル
- ◆高エネルギー核反応
- ◆熱領域までの中性子反応

MCNP	核データを用いる 中性子 光子、電子	10^{-5} eV ~ 20 MeV 1 keV ~ 1 GeV
JAM	核内カスケードモデル ハドロン･原子核反応	20 MeV ~ 200GeV
JQMD	分子動力学モデル **原子核･原子核反応**	0 ~ 100 GeV/u

3D view of Target, Moderators, Reflectors model by PHITS



Material and Life Science Experimental Facility

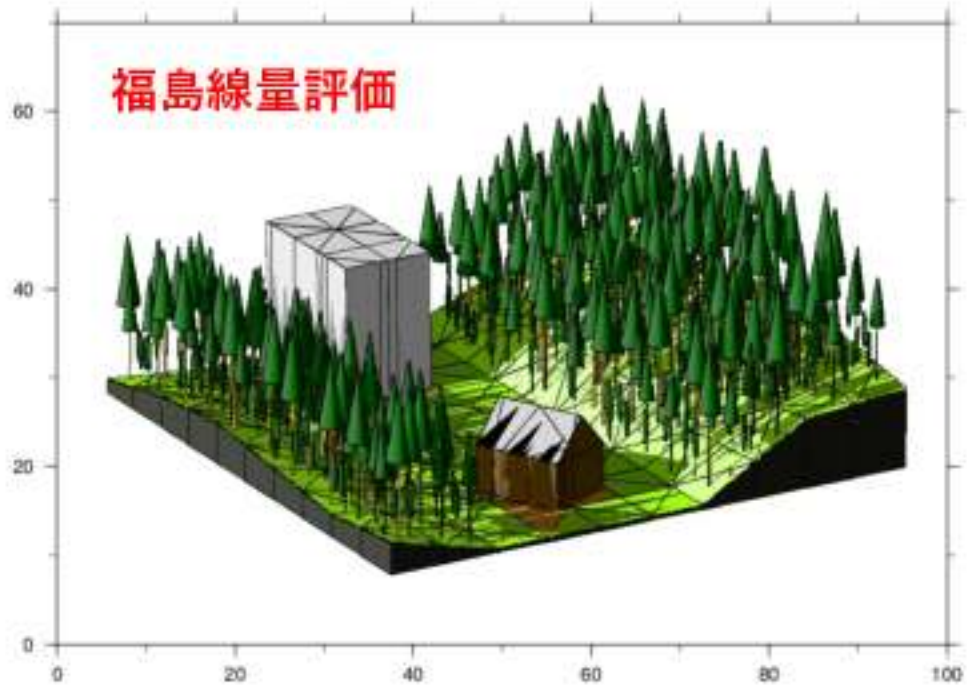
(2) PHITSのインターフェイス（入出力）の特徴

入力ファイル (テキストファイル)

1. 計算式、定数が使える
2. 入力ファイルで　他のファイルをインクルードできる

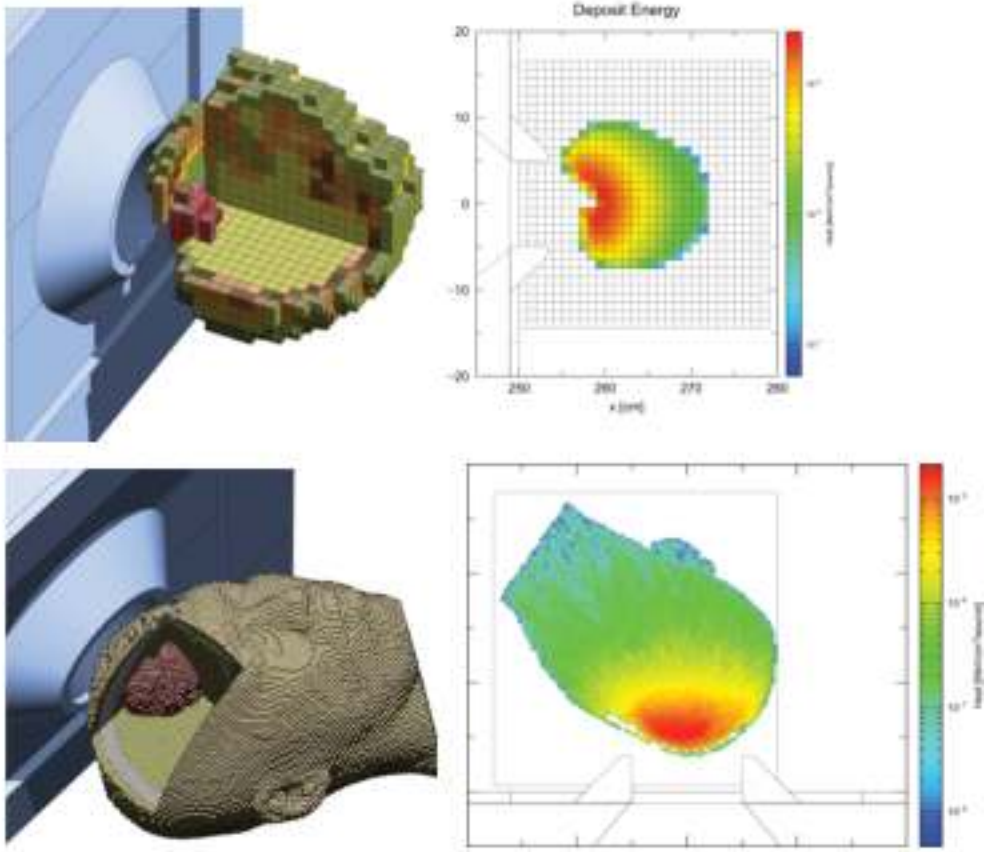
出力機能

1. 計算モデルの2次元、3次元表示ができる
2. 数値データと同時にグラフを出力できる
3. 計算途中でのデータとグラフが出力できる



JCDS for Treatment Planning of BNCT

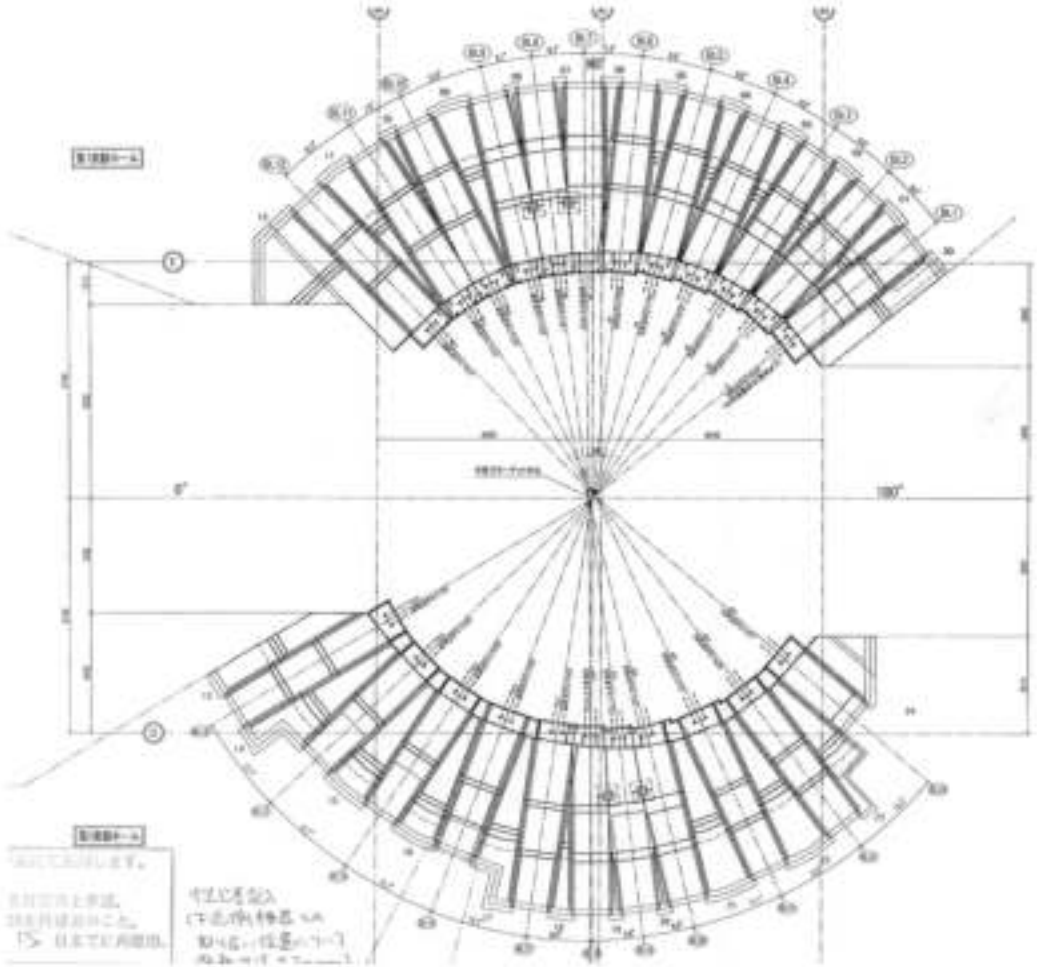
JAEA Computational Dosimetry System



(3) 大型加速施設計算モデル作成のTips

3.1 J-PARC/MLF 中性子ビームライン

Cad data (2004) of Bunker Shield of J-PARC/MLF.



Hall No.2 in 2008

MLF Hall #1 2014 January

2004年の段階で、以下のようなルールを作成した。

1）各ビームライン領域を、Universeで定義し、必要ない時は
前置き遮蔽体を除き真空とする。

2) 各ビームラインのUniverseの中では、z軸をビームラインとする
標準モデルとして構築する。

3) 各ビームラインのSurface番号、Cell番号は、それぞれの
割り振られた番号を用いる。
例えば、BL01は、10000～20000の番号を使い、
他のビームラインとオバーラップしないようにする。

4) 各ビームラインのモデルは、Universe、Transformを用いて、
回転移動し、簡単に設置、取り外しができるようにする。

5) 各ビームラインのソースデータは、Transformを用い、
また、簡単にon、off ができるようにする。

Tip.1 大きいパーツごとにUniverseを作成

Tip.2 Universe内は標準座標

Tip.3 UniverseをTransformで配置する

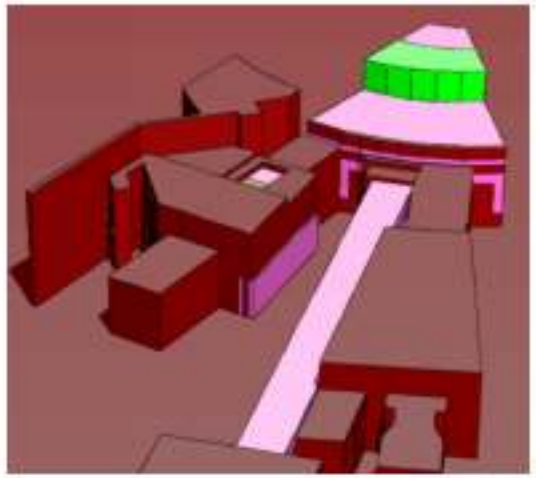
Tip.4 UniverseごとにSurface番号、Cell番号を
割り振る

Tip.5 Universeごと別ファイル、更に
cell, surface, source, transform, material
等は別ファイル

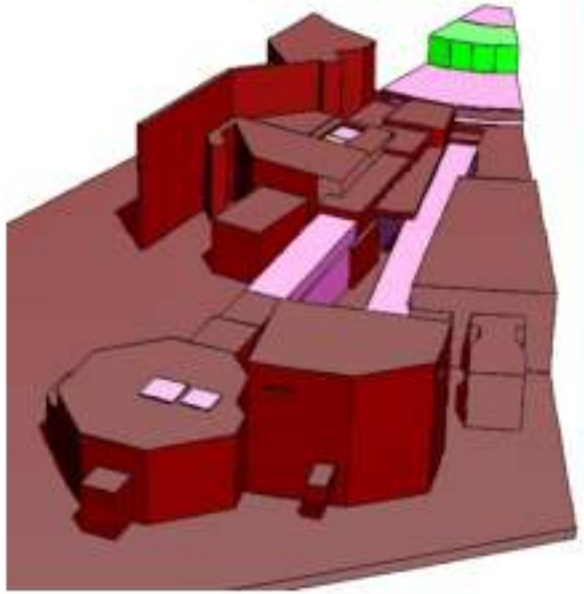
Tip.6 遮蔽体の厚さに関係する数値は定数と
式で表し、変更が一括でできるよう
にする。

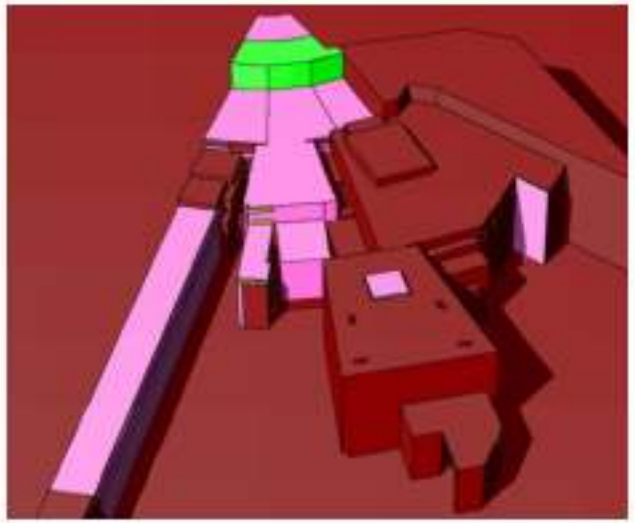
```
70324  py  220+c20
70325  py  220+c20+c21
70326  py  220+c20+c21+c22
70327  py  220+c20+c21+c22+c23
70328  py  220+c20+c21+c22+c23+c24
```

BL01, BL02, BL03, BL04



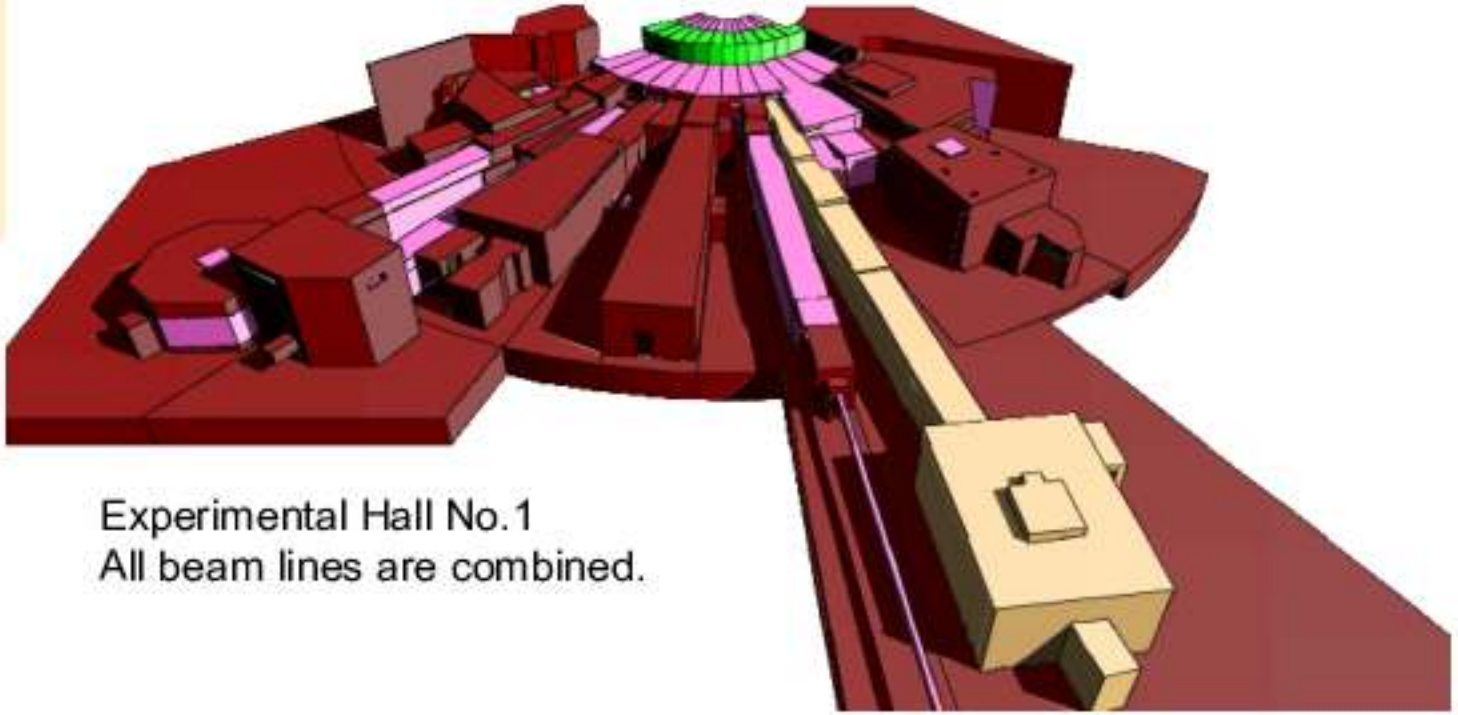
BL01, BL03, BL04





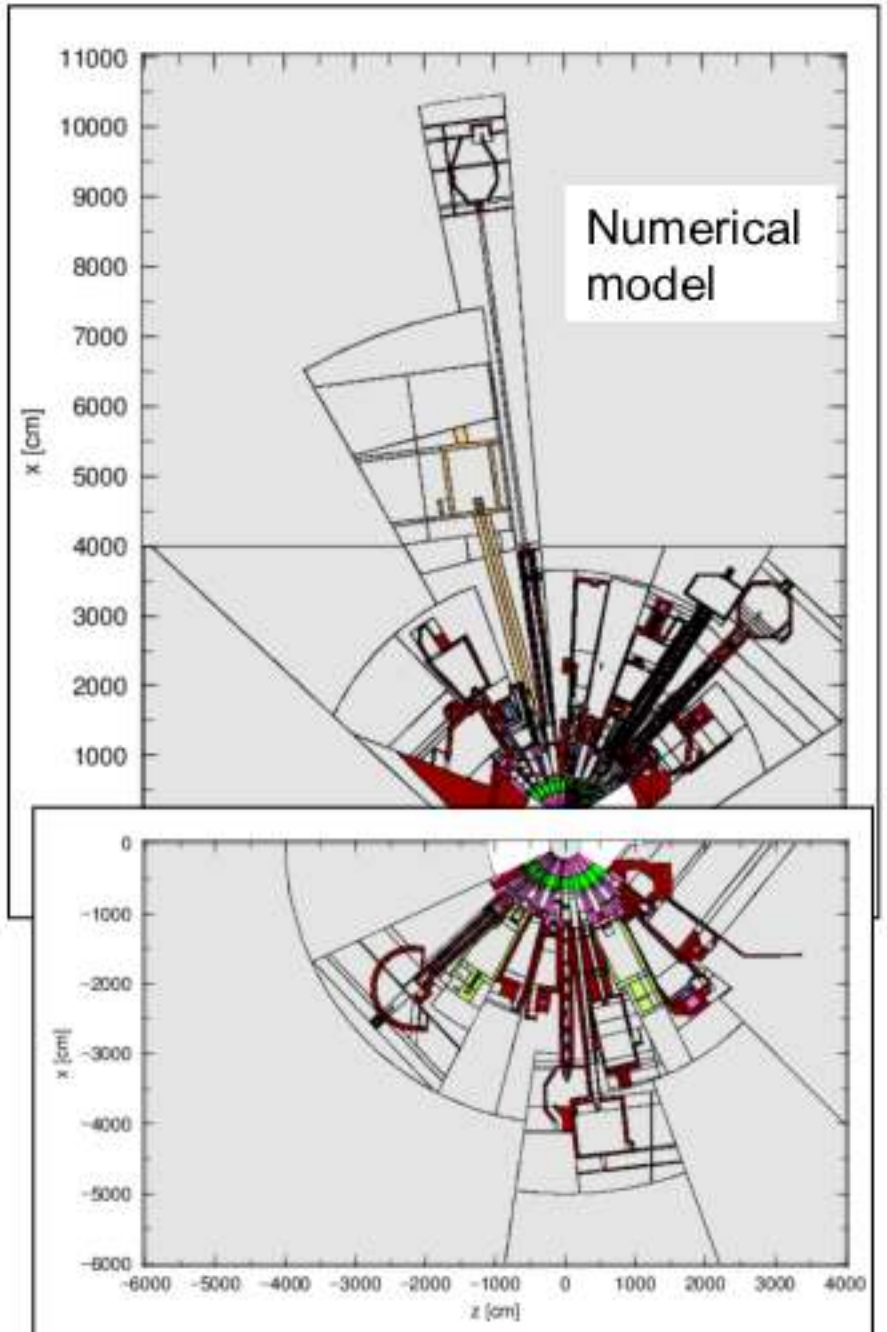
BL08, BL10, BL11, BL12

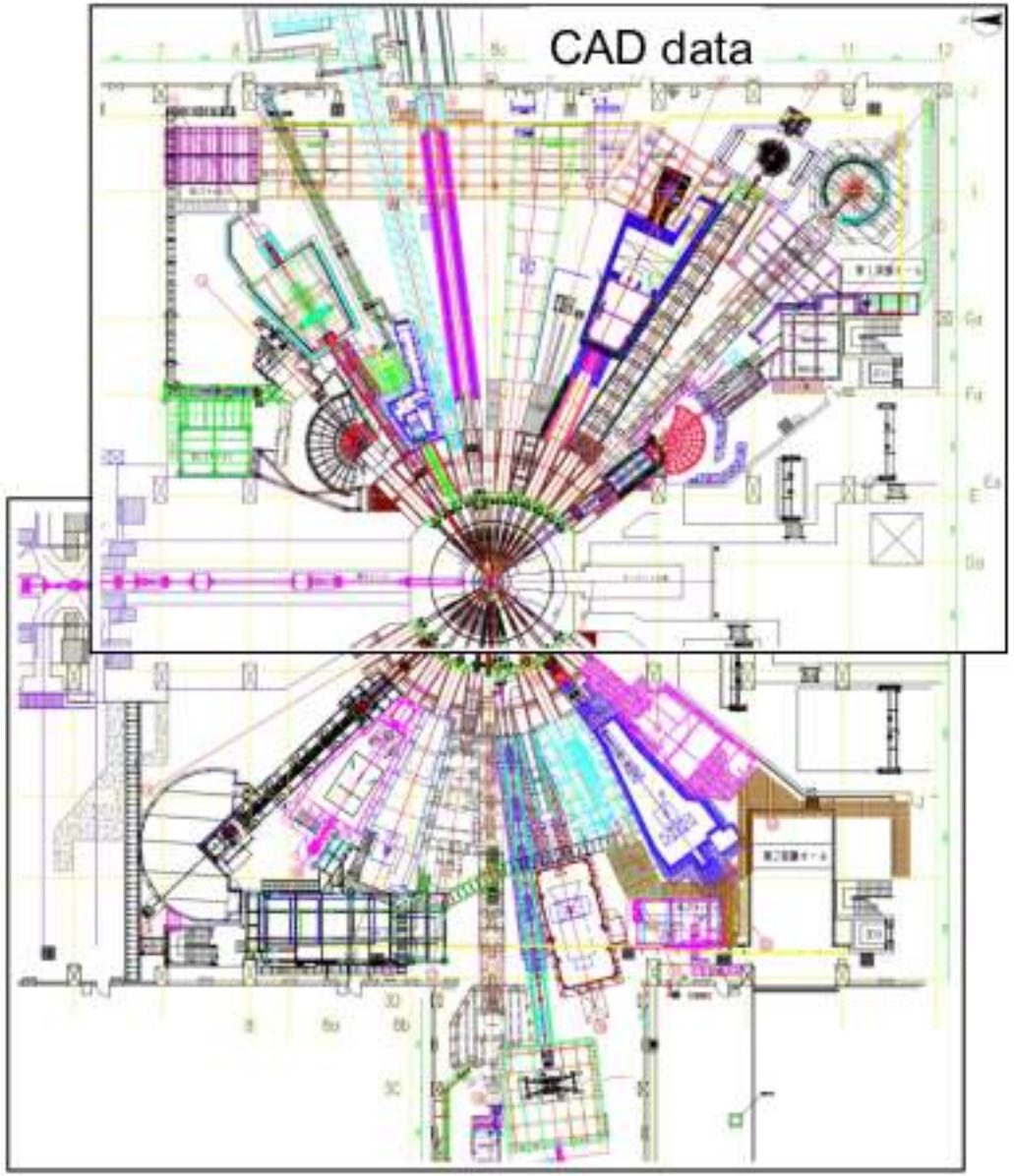
Each beam line can be combined and/or removed from whole model.



Experimental Hall No.1
All beam lines are combined.

2019 status of JSNS





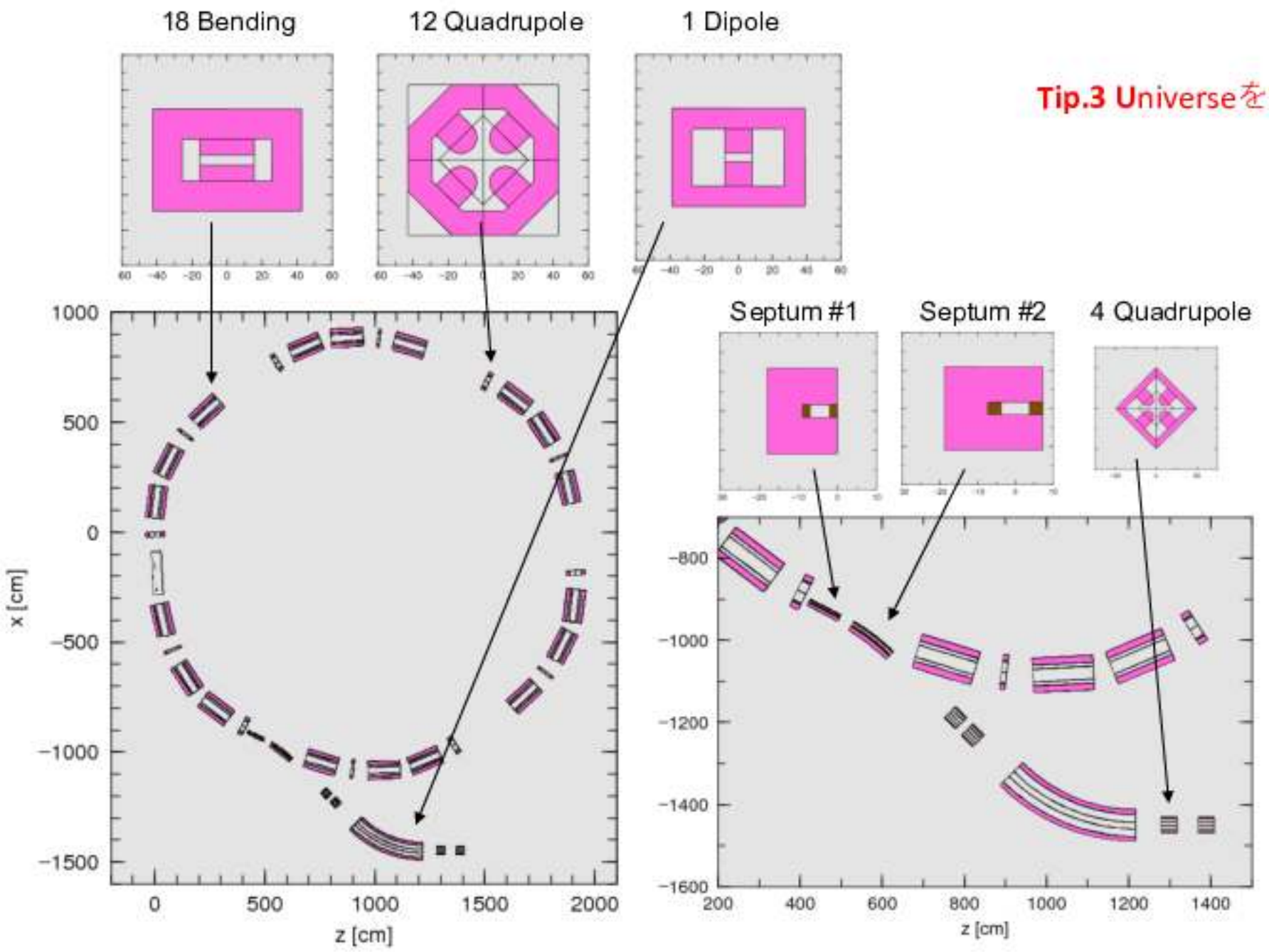
(3) 大型加速施設計算モデル作成のTips

3.2 粒子線治療施設(proton and carbon beam)

シミュレーションで考慮する構成材、部材

- Concrete building frame
- Shielding materials (Fe, …)
- Magnet yoke of accelerator
- Collimator, Shutter for beam line
- Isocenter （ water 35㎝Φ ）

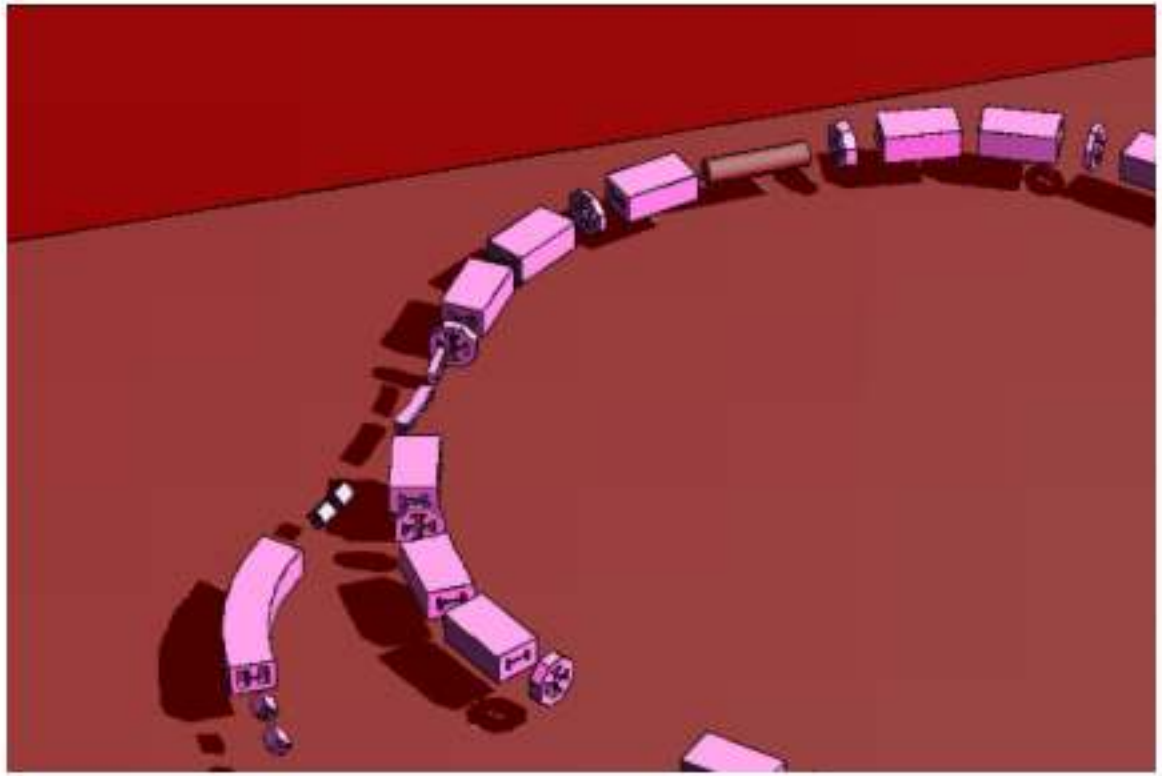
Tip.3 UniverseをTransformで配置する

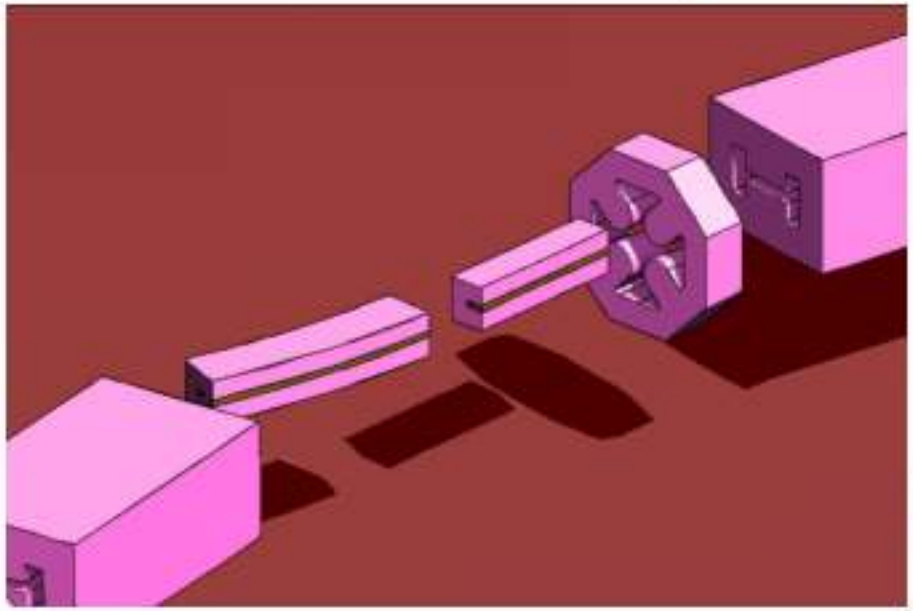


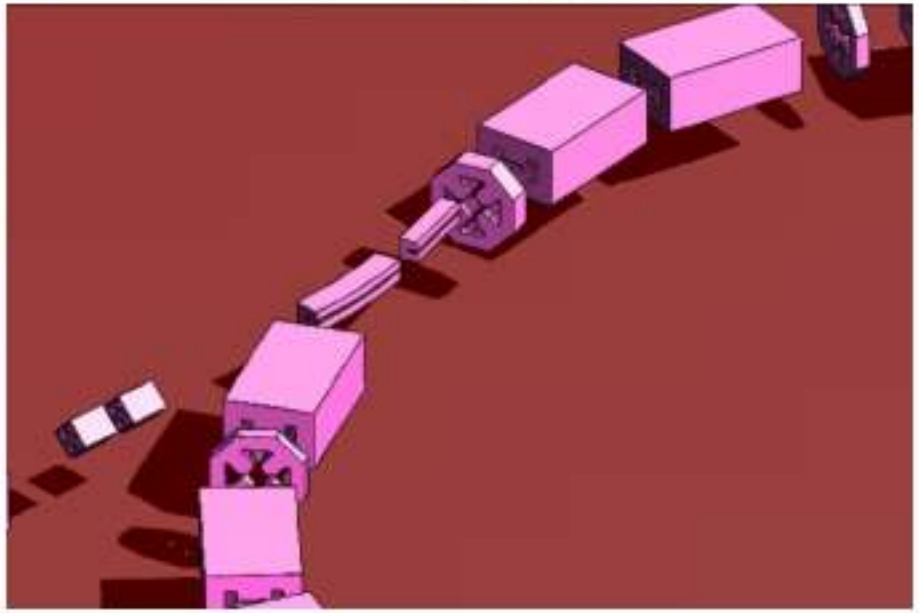
Tip.3 UniverseをTransformで配置する

18 Bending
12 Quadrupole
1 Dipole
4 Quadrupole

Septum #1
Septum #2

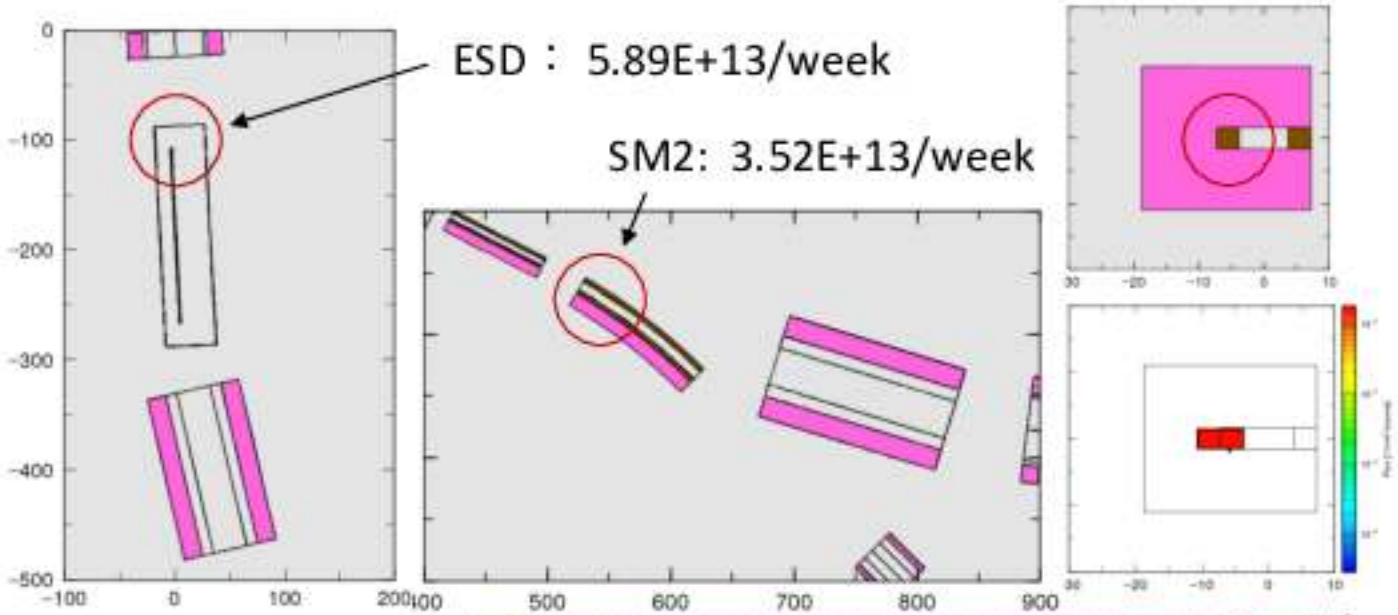


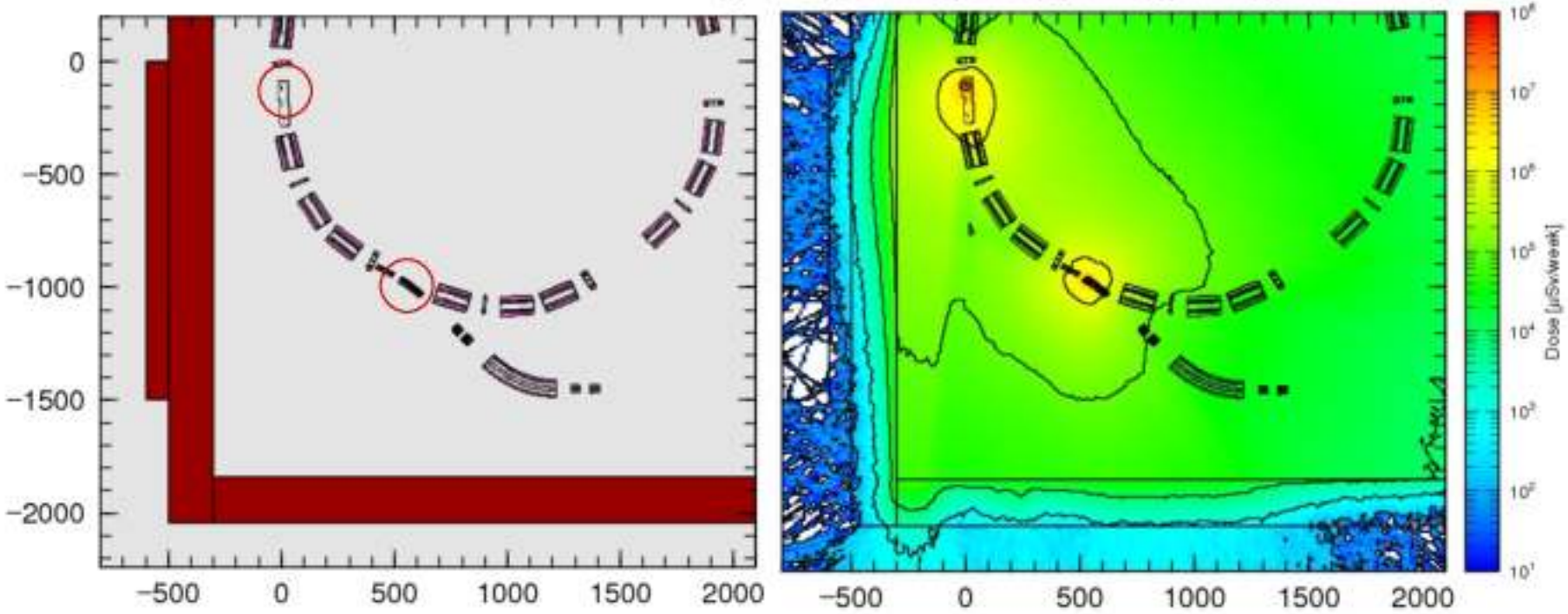




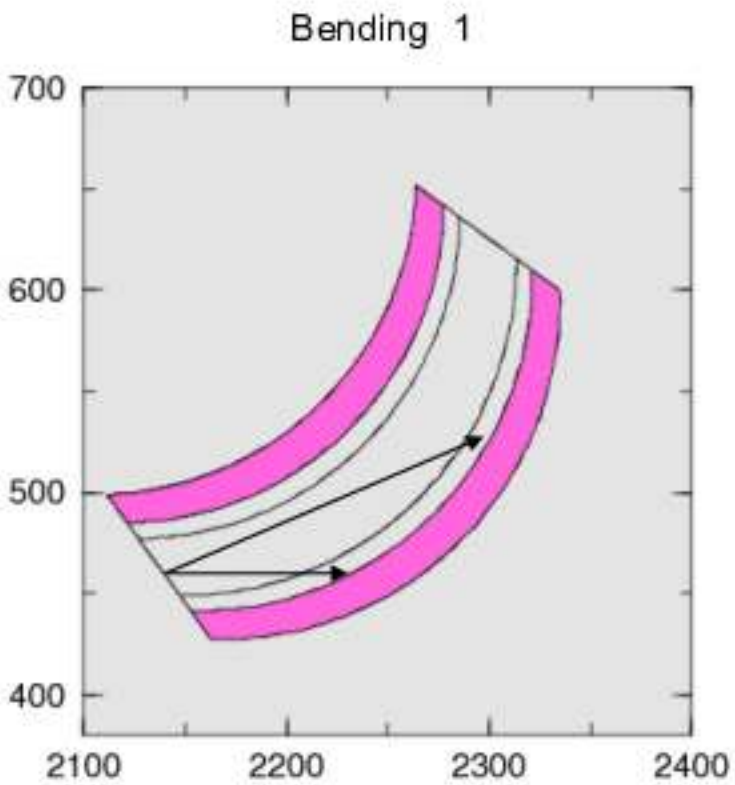
Beam loss

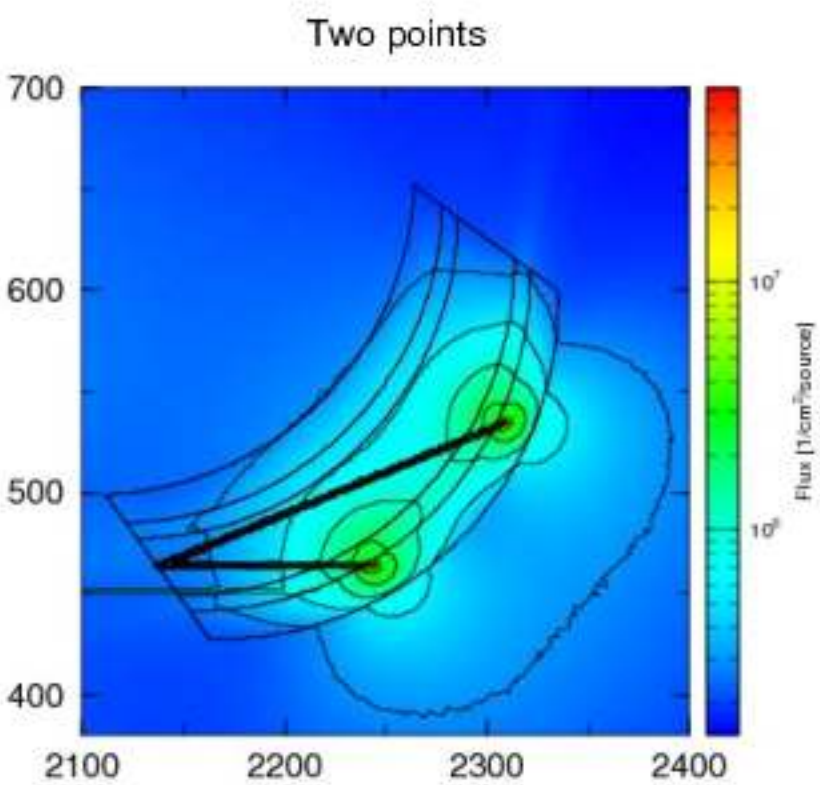
ESD： 5.89E+13/week
SM2: 3.52E+13/week





Calculation model for Loss points of Magnets



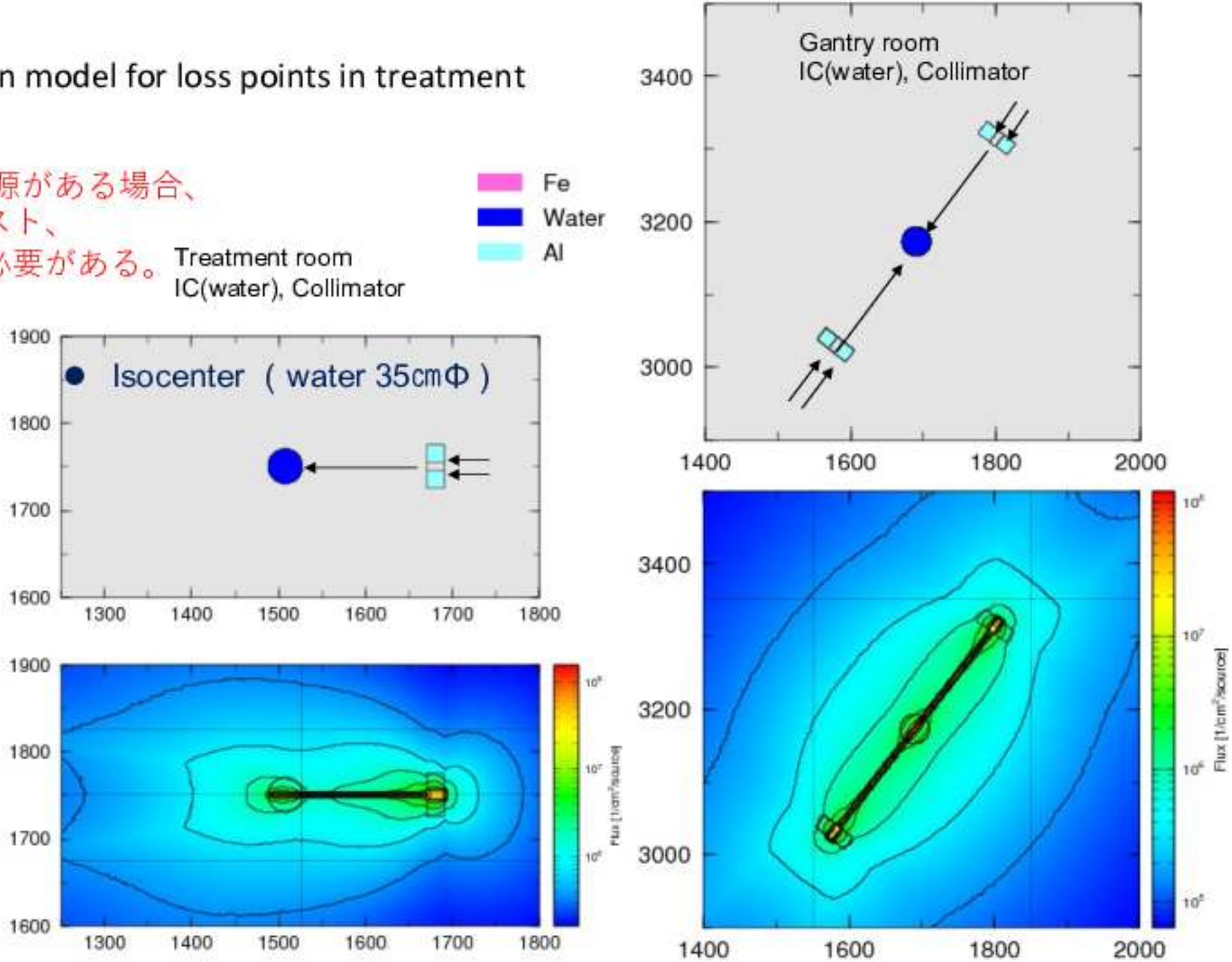


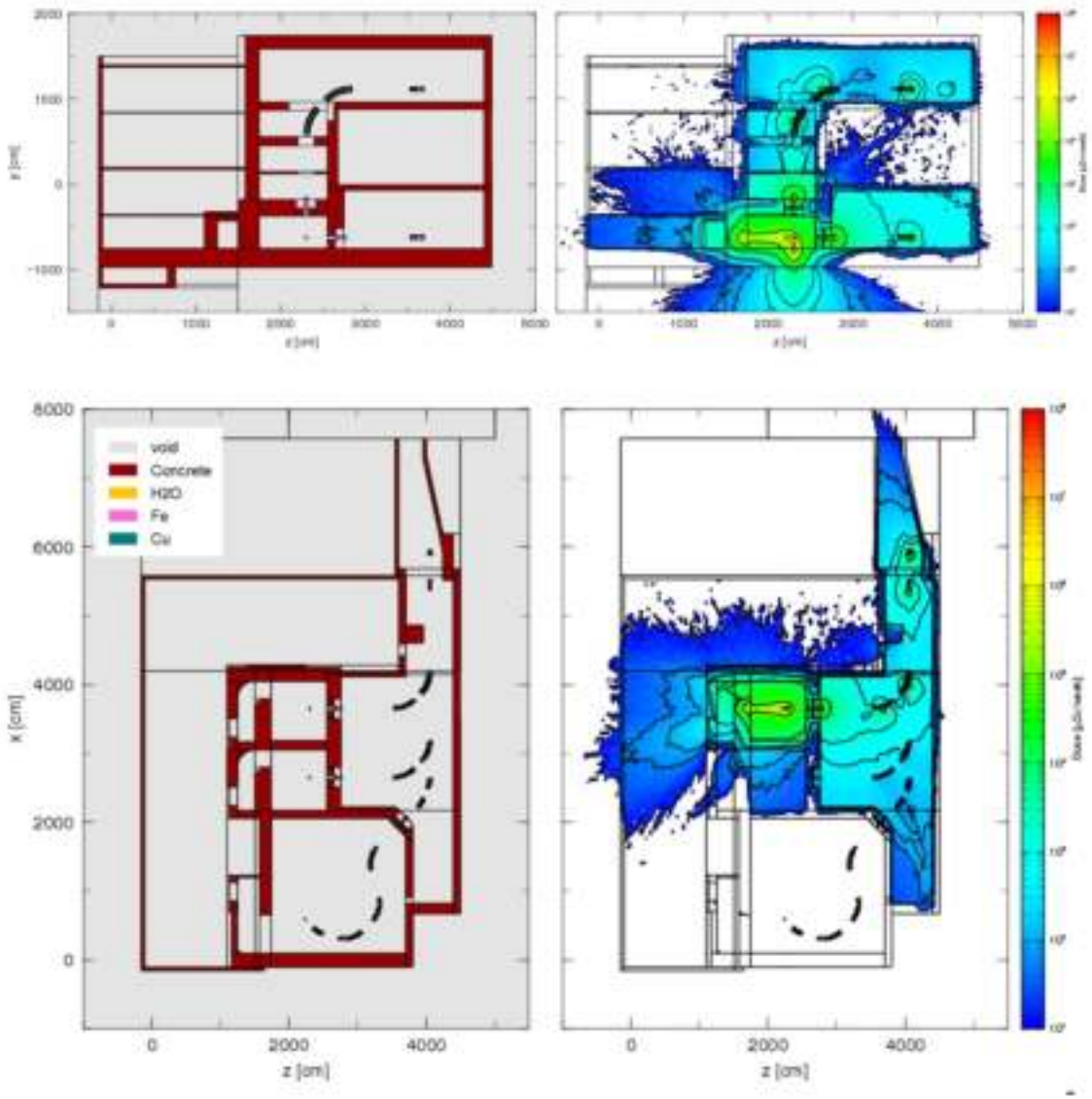
Fe
Water
Al

Tip.7 多数の線源がある場合、
個別にテスト、
確認する必要がある。

Calculation model for loss points in treatment room

Tip.7 多数の線源がある場合、
個別にテスト、
確認する必要がある。





Tip.1 大きいパーツごとにUniverseを作成

Tip.2 Universe内は標準座標

Tip.3 UniverseをTransformで配置する

Tip.4 UniverseごとにSurface番号、Cell番号を割り振る

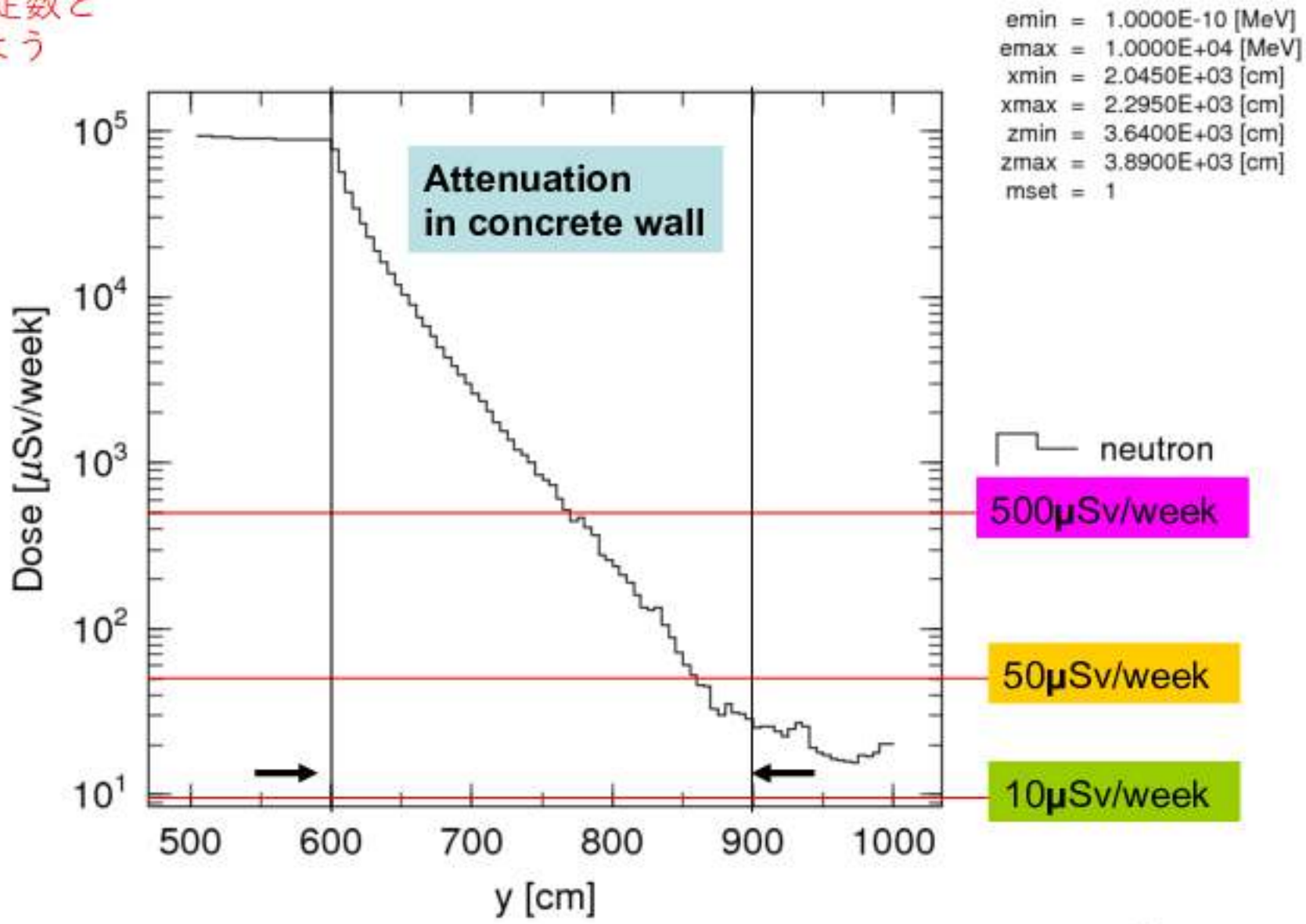
Tip.5 Universeごと別ファイル、更に cell, surface, source, transform, material 等は別ファイル

Tip.6 遮蔽体の厚さに関係する数値は定数と式で表し、変更が一括でできるようにする。

Tip.7 多数の線源がある場合、個別にテスト確認する必要がある。

Tip.6 遮蔽体の厚さに関係する数値は定数と式で表し、変更が一括でできるようにする。

```
70324   py   220+c20
70325   py   220+c20+c21
70326   py   220+c20+c21+c22
70327   py   220+c20+c21+c22+c23
70328   py   220+c20+c21+c22+c23+c24
```

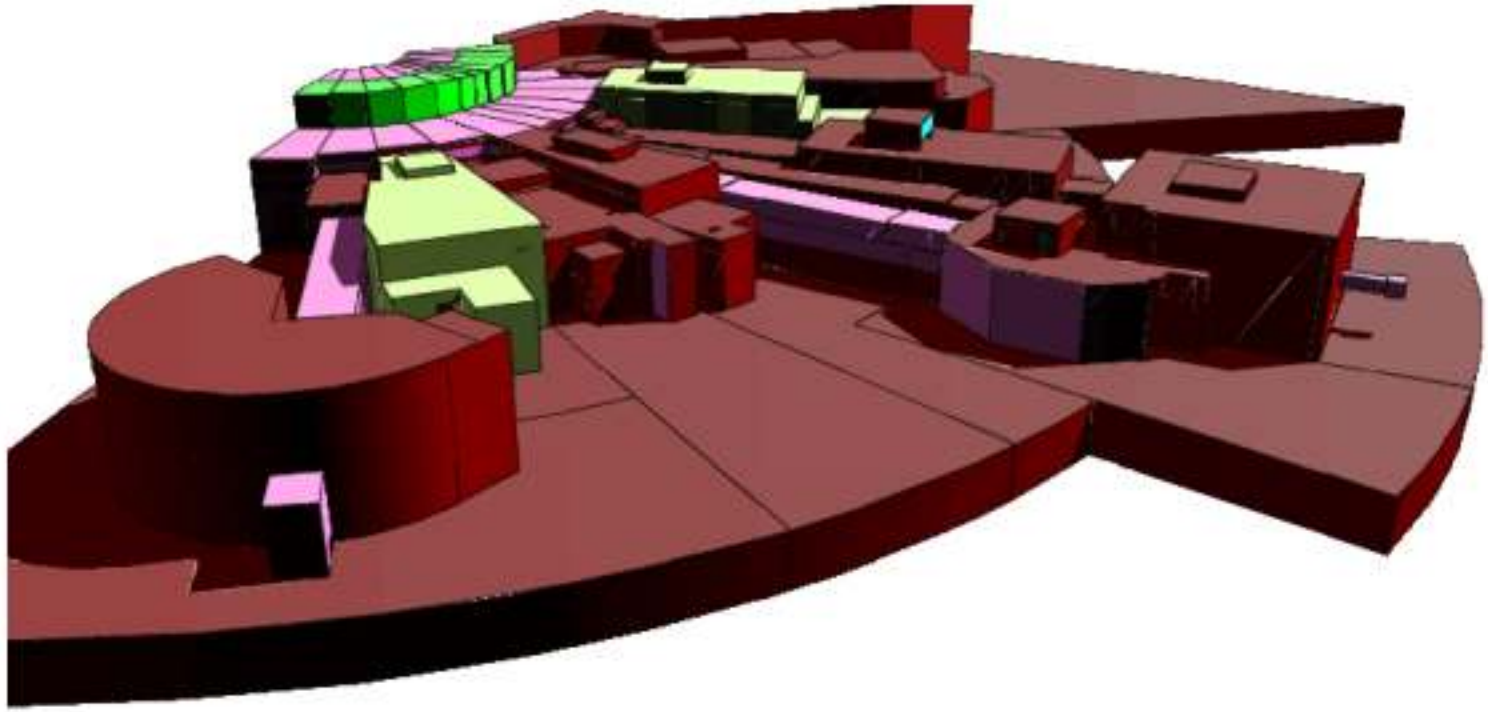


PHITSによる大型加速器施設計算モデル作成のTips

(1) PHITSコード開発の経緯

(2) PHITSのインターフェイス（入出力）の特徴

(3) 大型加速施設計算モデル作成のTips



J-PARC COMET実験における放射線計算

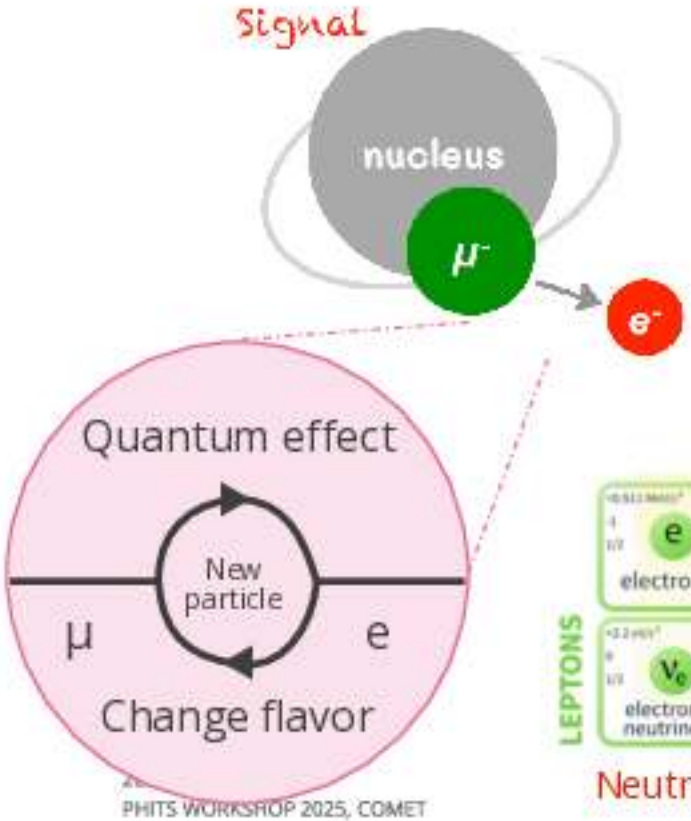
Y. Uchiyama, Y. Fukao, K. Inoue, S. Makimura,
Y. Nagasawa, M. Onoi, N. Shigyo, M. Yoshida

May 15, 2025
第2回 EGS5-Geant4-PHITS合同研究会
at KEK

The COMET experiment

A **particle physics** experiment at J-PARC Hadron Experimental Facility

- To catch evidence for **new "high-energy" physics** beyond the Standard Model of elementary particles through **"forbidden" process of muon**



Search for mu – e conversion

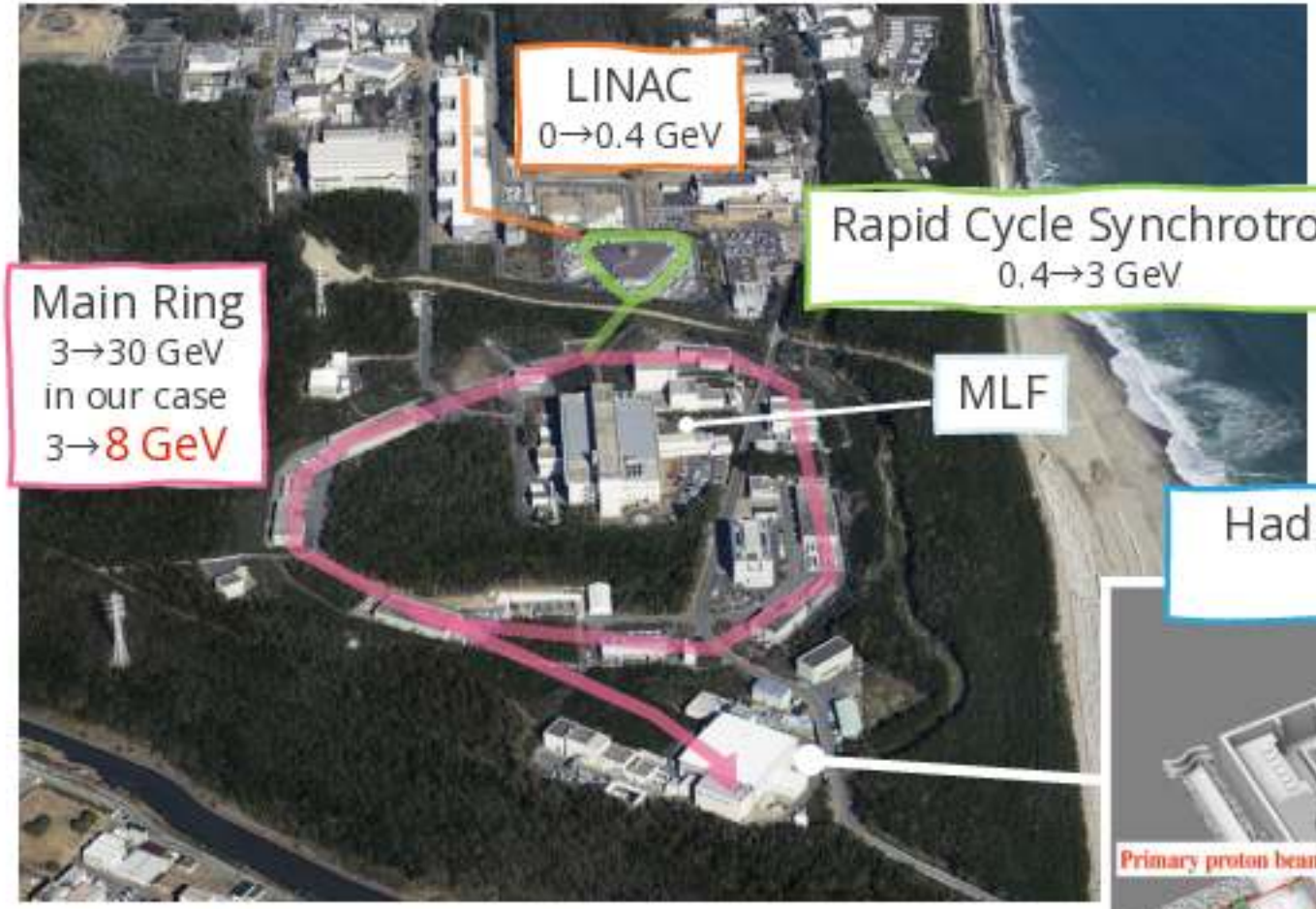
- Never occur in the Standard Model
- Could occur with new physics at a probability of ~10^{-15}

Need huge number of muons (> 10^{12} s^{-1})

⇒ Use J-PARC high-power proton beam

Can probe 10000 TeV scale physics much higher energy than LHC (13 TeV)

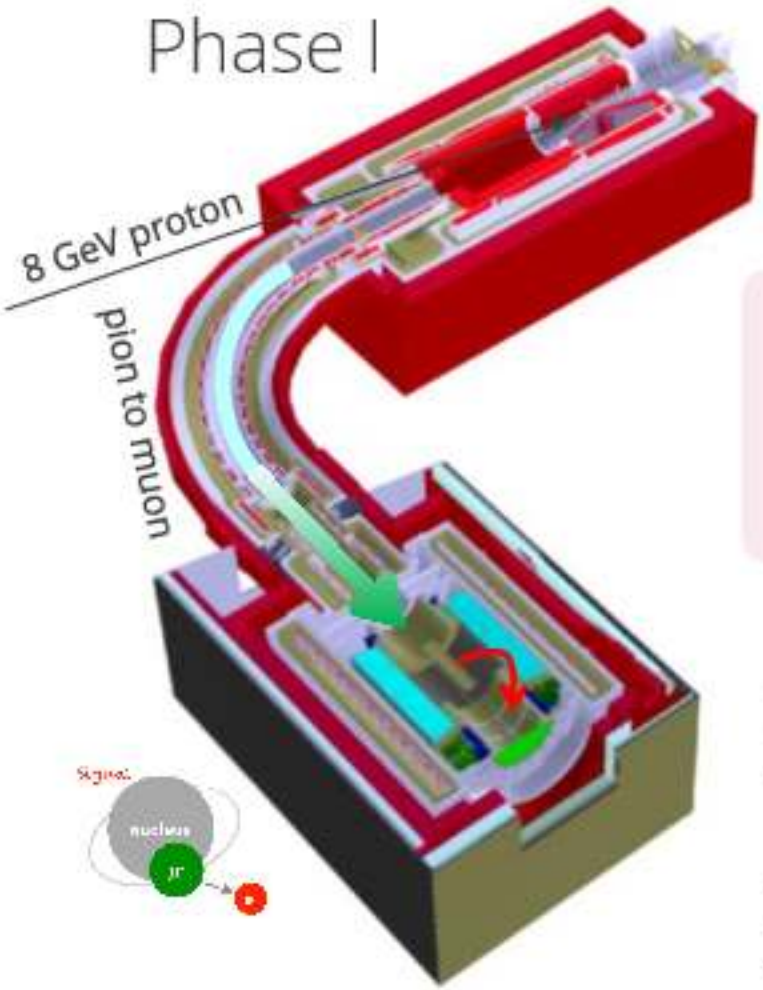
J-PARC



"8-GeV bunched slow extraction"
a special operation of the accelerator

The COMET experiment

Phase I



Phase II

Proof of concept
Study beam & BG
Risk & cost reduction
Early physics outcome

Increase beam power
3.2 kW → 56 kW
Exchange production target
graphite → tungsten

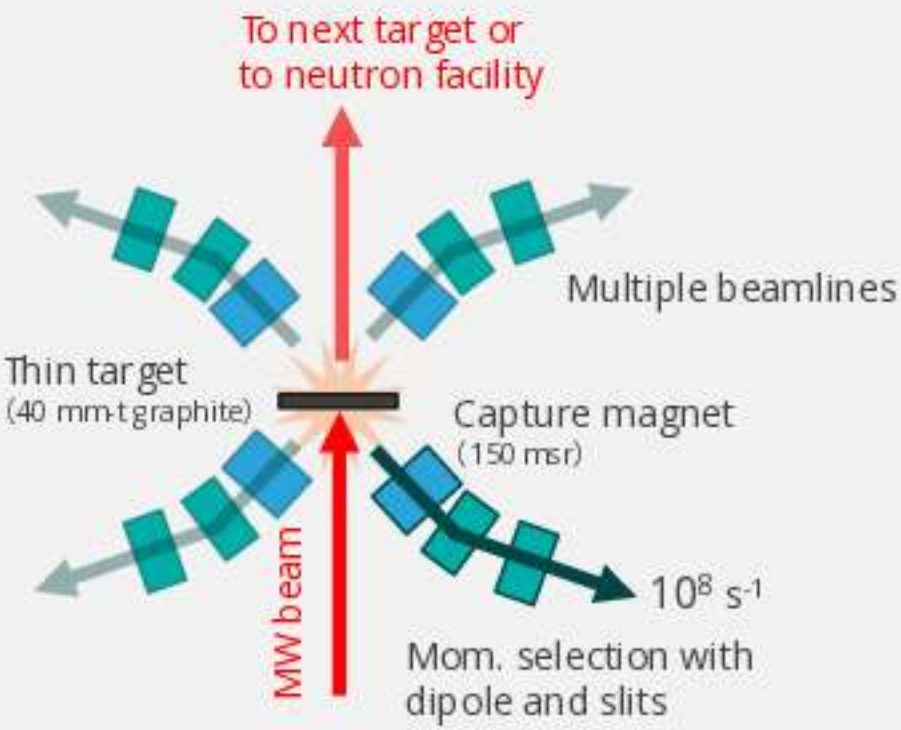
Superconducting solenoid magnets "from the cradle to the grave".

Facility must be designed considering future upgradability (modification work)

Innovative muon source

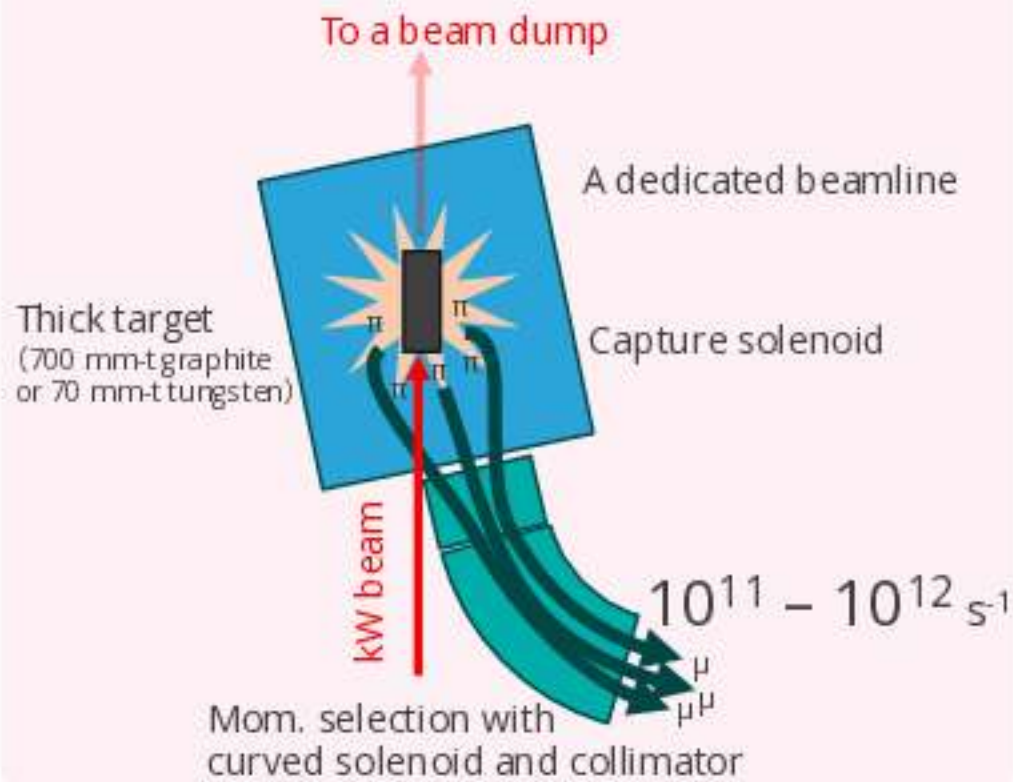
Conventional method

e.g., MLF, PSI



New method

e.g., COMET, Mu2e, muon collider



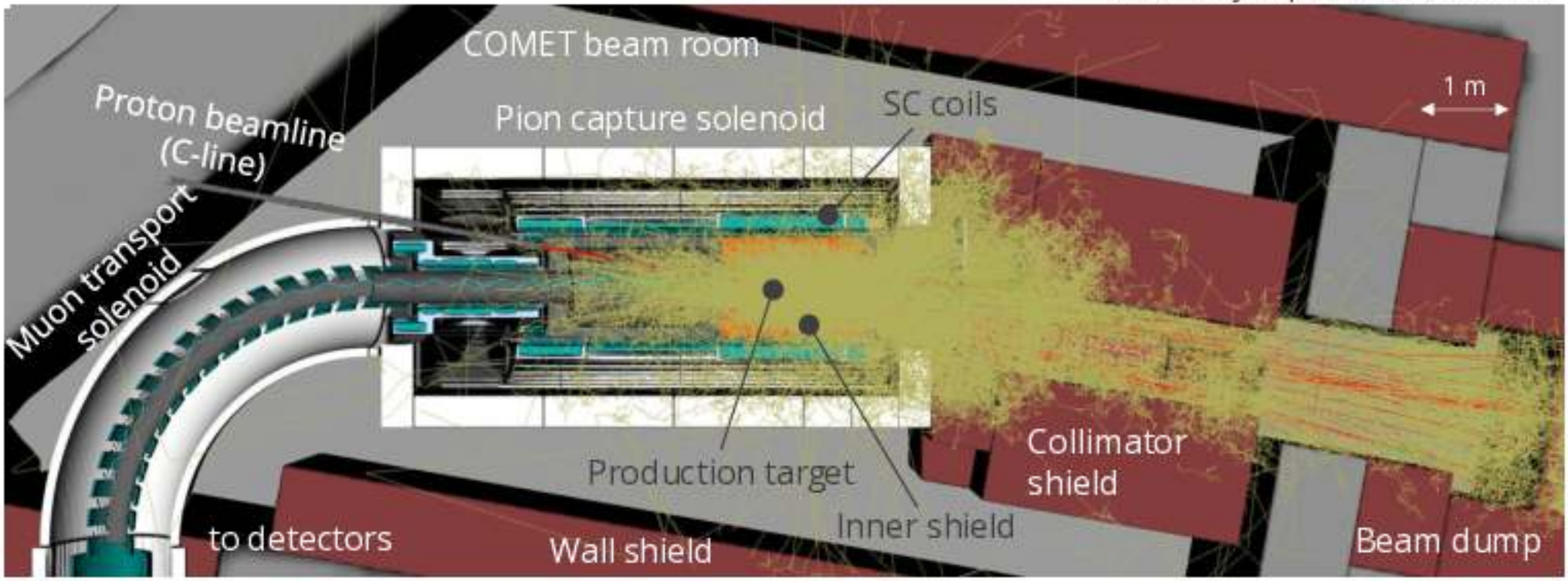
A big challenge from the facility point of view

since the birth of concept in 1989

COMET beam room under construction (as of Dec. 2024)

The pion production system & the simulation

Geometry implemented in PHITS



Interaction of high energy particles (up to 8 GeV).
Huge number of secondary particles.
Major time consumption in the simulations.

Pion production

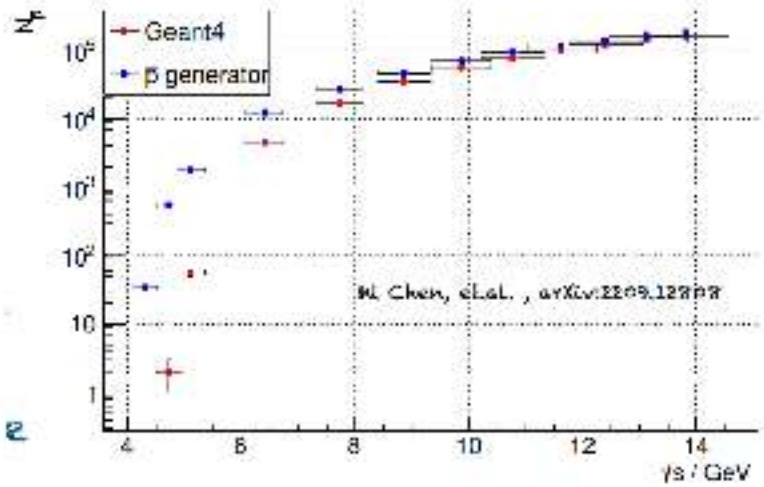
The backward pion production at 8 GeV in different target materials have not been experimentally studied.

- No data available. Large difference in different physics models.
- Yields of other secondary particles, especially anti-proton, as well.

Pion production

Models	Simulator	$N(\pi^- + \mu^-)/p$ at 3 m
CEM	MARS	0.061 ± 0.001
CEM/LAQGSM	MARS	0.138 ± 0.001
LAQGSM	MARS	0.144 ± 0.001
LAQGSM	Geant	0.1322 ± 0.0007
QGSP_BERT	Geant	0.0511 ± 0.0002
QGSP_BIC	Geant	0.1278 ± 0.0005
FTFP_BERT	Geant	0.0440 ± 0.0002

Anti-proton production

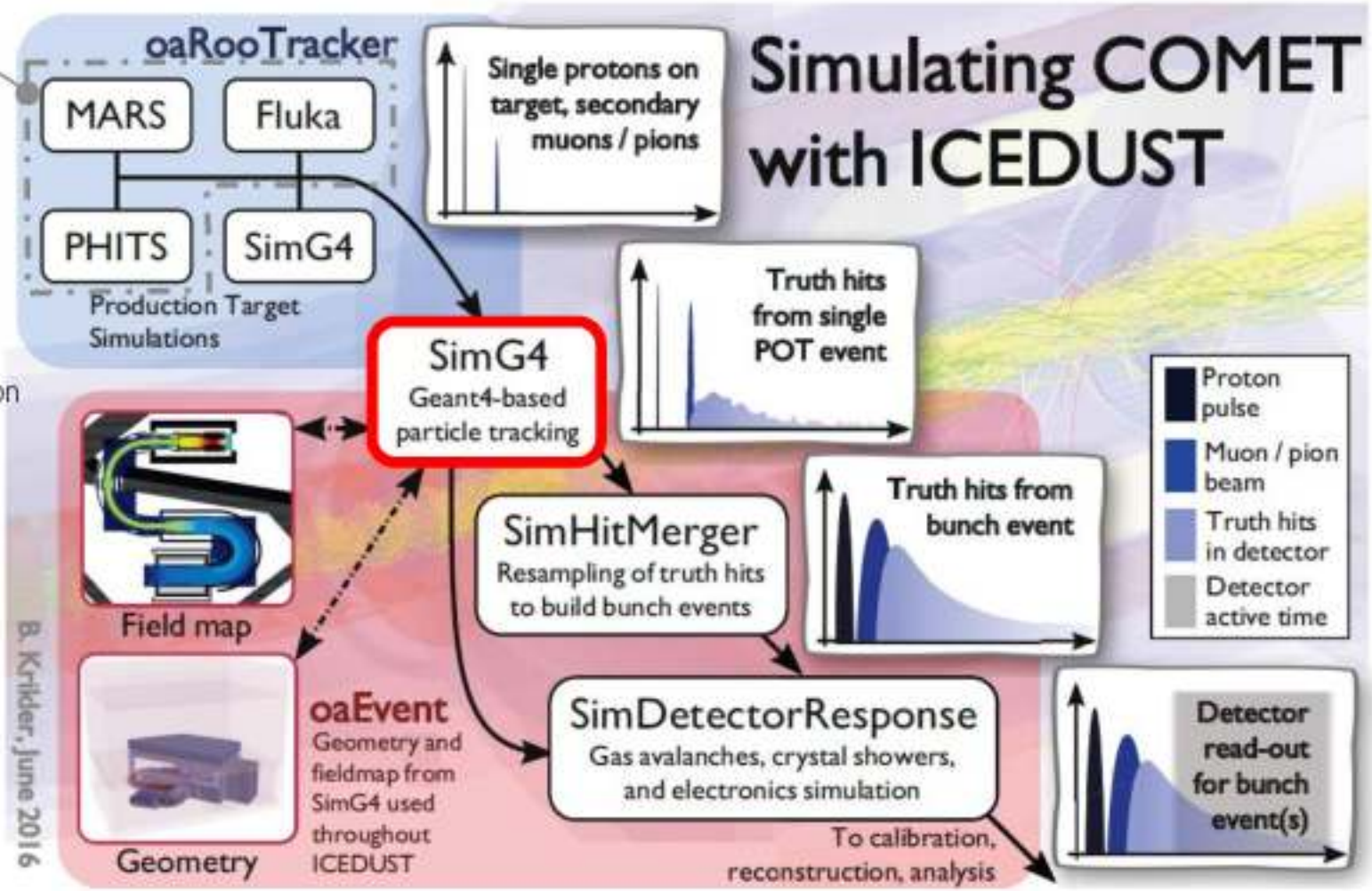


We've started discussing an experimental measurement of these hadronic interaction in the framework of NA61/SHINE experiment @ CERN

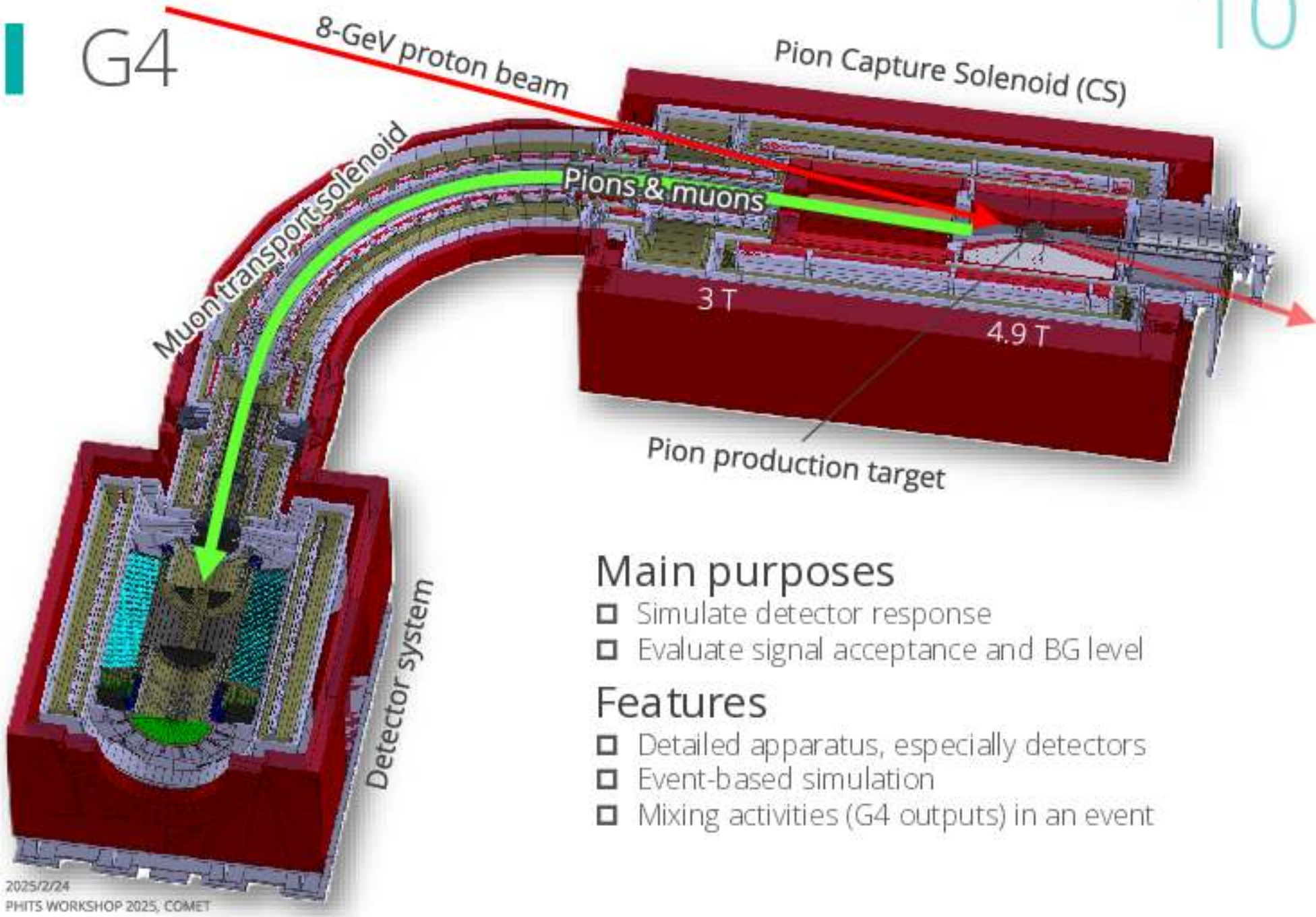
"Official" COMET simulation

This functionality was originally implemented but not used now.

Standalone simulation (MARS & PHITS)



G4



Main purposes

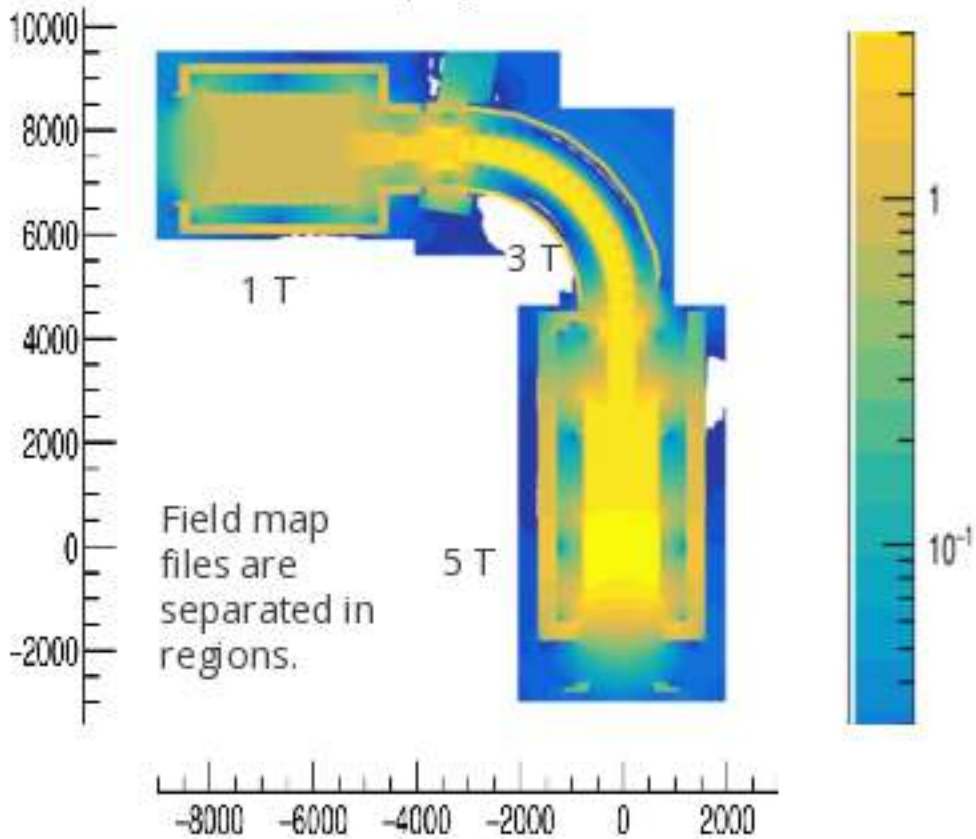
- Simulate detector response
- Evaluate signal acceptance and BG level

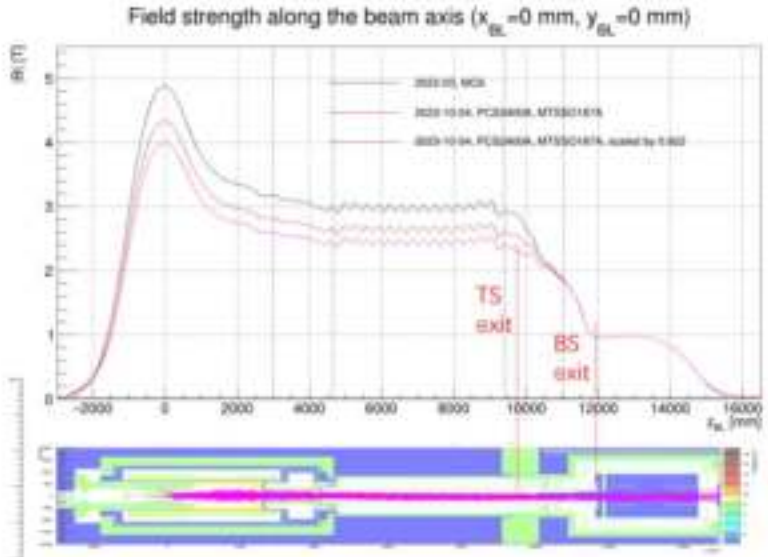
Features

- Detailed apparatus, especially detectors
- Event-based simulation
- Mixing activities (G4 outputs) in an event

Magnetic field

Field map by OPERA





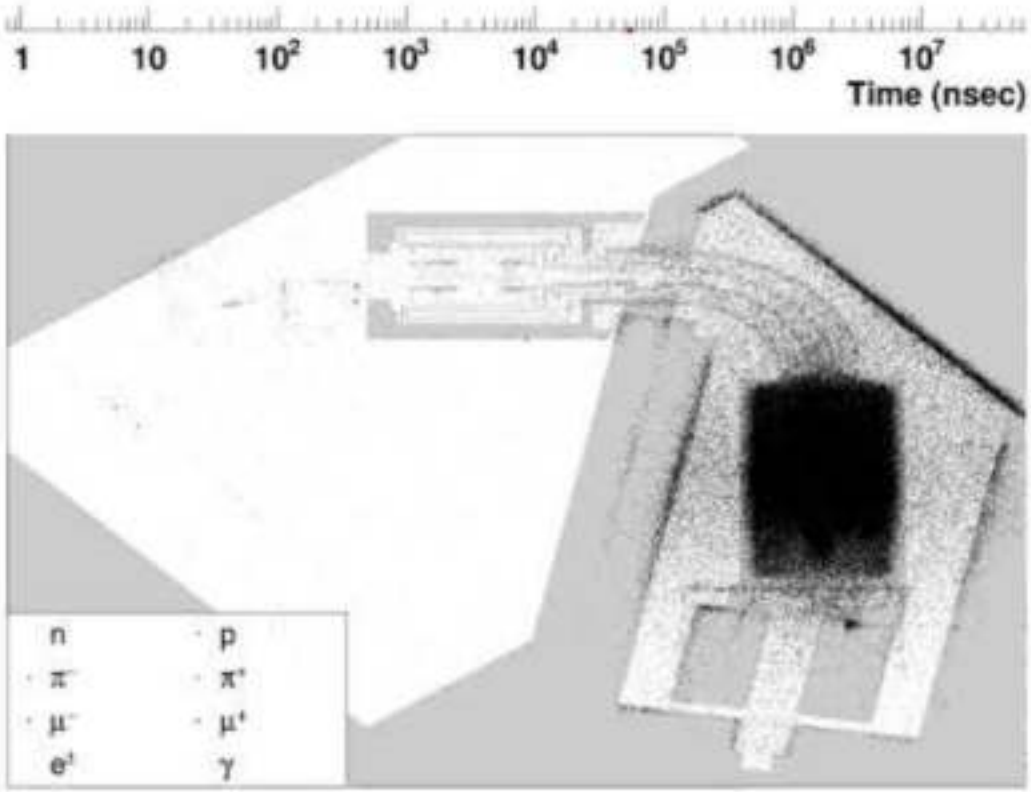
Fundamental element of COMET

- Superconducting solenoid magnets "from the cradle to the grave".

Field map files are as large as ~10 GB.

- Overhead for memory consumption & loading time

Particle tracking with G4

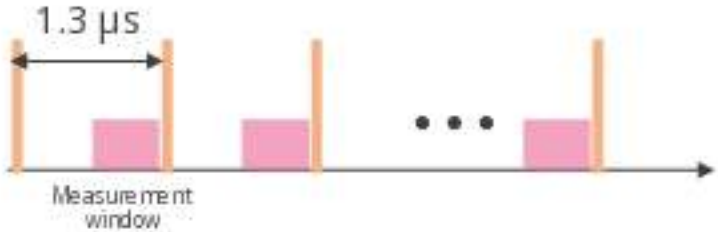


Beam bunch comes every 1.3 μs.

1.6×10^7 POT/bunch
2.5×10^{12} POT/s

(1 POT = 1 proton on target = 1 source)

To simulate an event with pileup backgrounds, we need to superimpose many bunches.

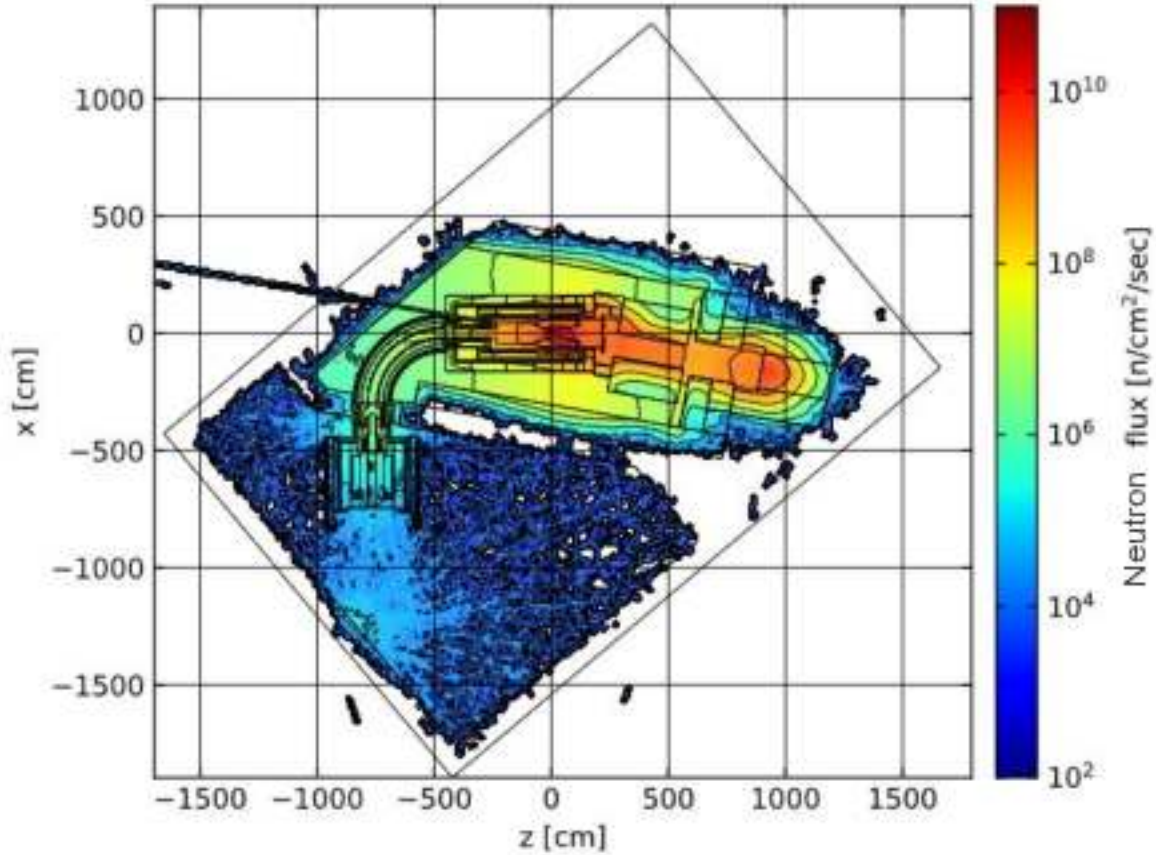


Radiation calculation

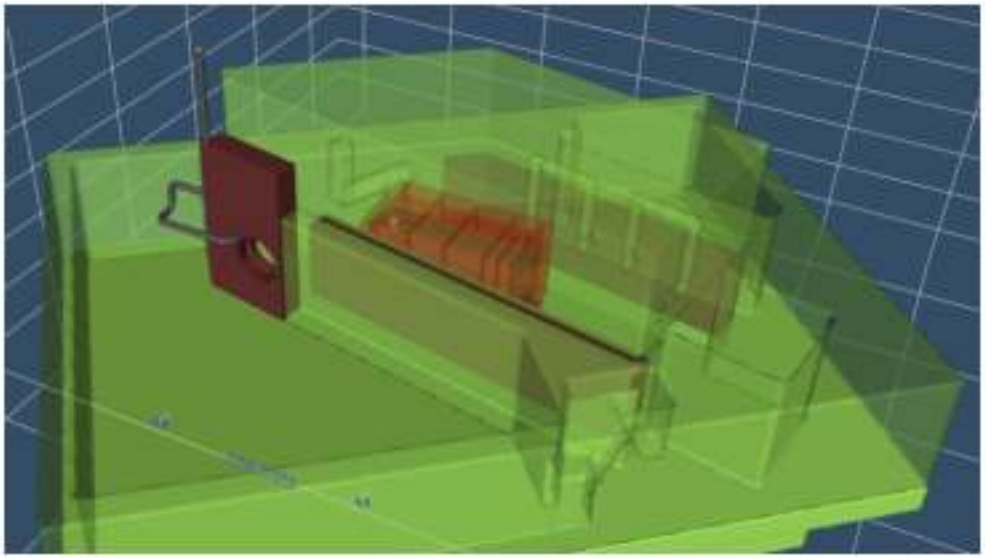
Design facility using MC simulation codes:

PHITS & MARS

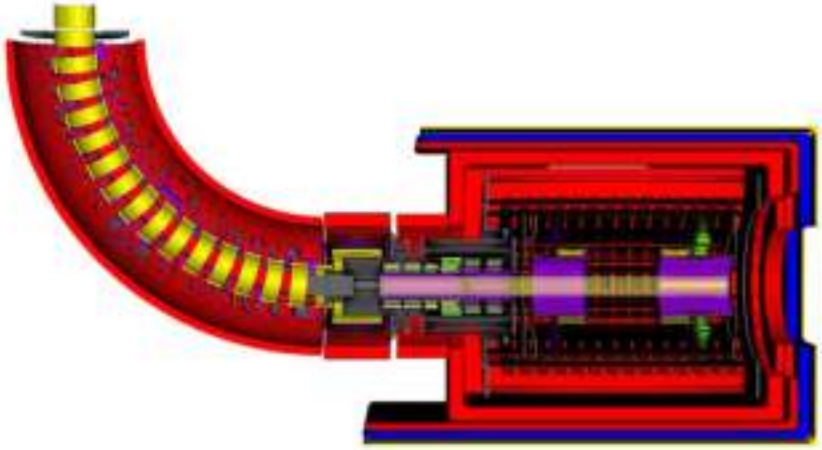
- **Superconducting coils:** heat load, neutron fluence
- **Air dose** outside the beam room during operation
- **Residual dose** during maintenance work
- etc. (target, detector BG)

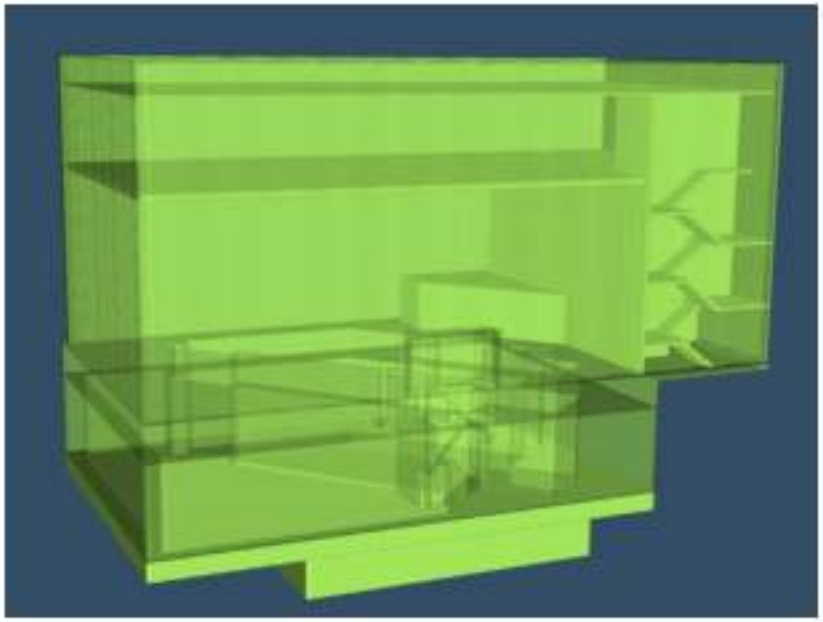


Geometry in PHITS



Simplified geometry
Whole building





Comparisons

G4 ~2 s/POT

Using HPC cluster (e.g. KEK CC) we can generate up to O(10^{10}) POT

Resampling can be applied, but statistically incorrect and biased for the event-based analysis.

PHITS ~6 s/POT (w/ EGS5)

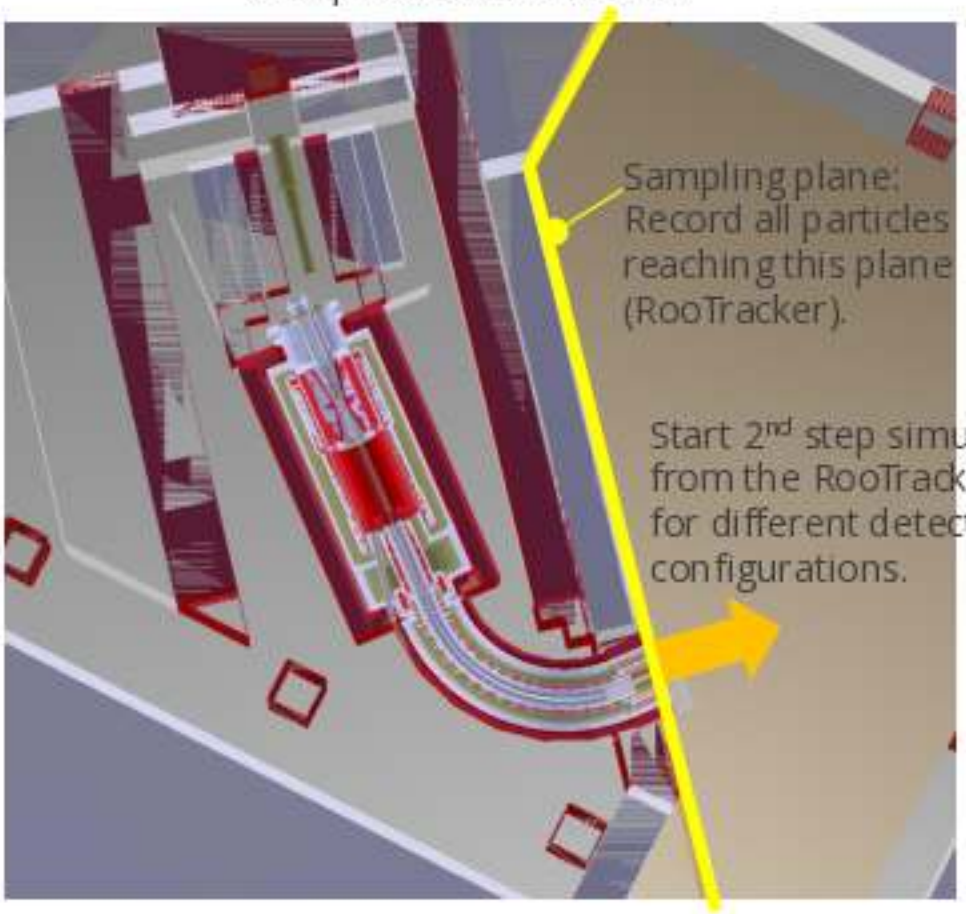
Slow and difficult to accumulate high statistics:

- using "sumtally" but file handling limits the number (O(100))
- O(10^7) POT is a practical limit

Try "variance reduction techniques" especially weight-window method to increase effective statistics.

2-step calculation may be difficult (too large dump file).

2-step calculation with G4

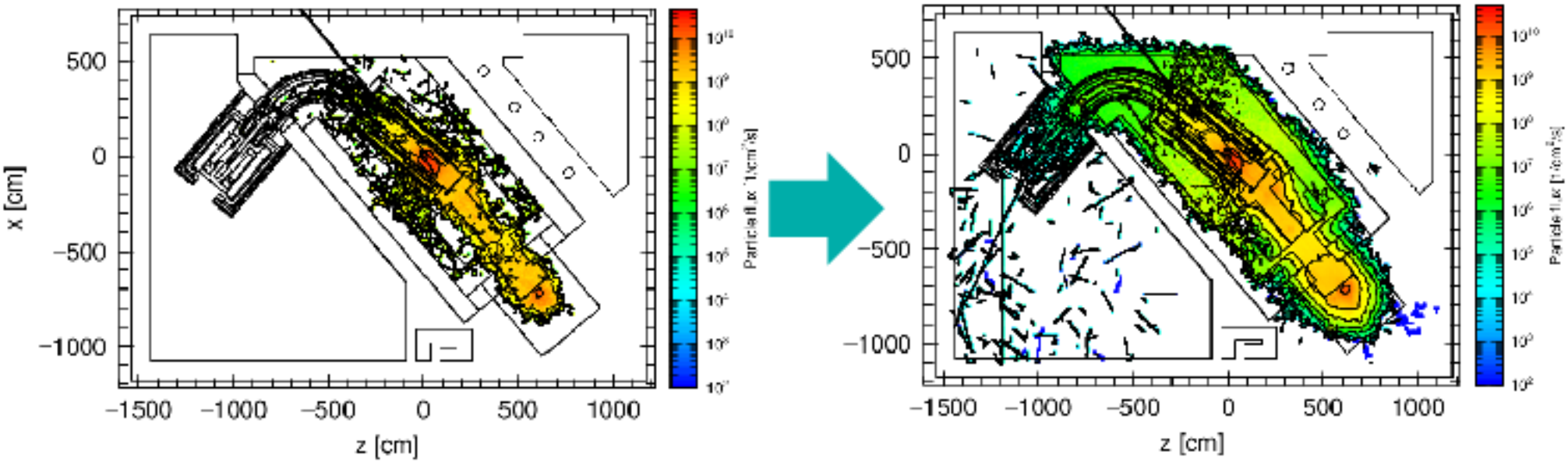


Weight window

Weight window was calculated by t-wwg (no iteration)

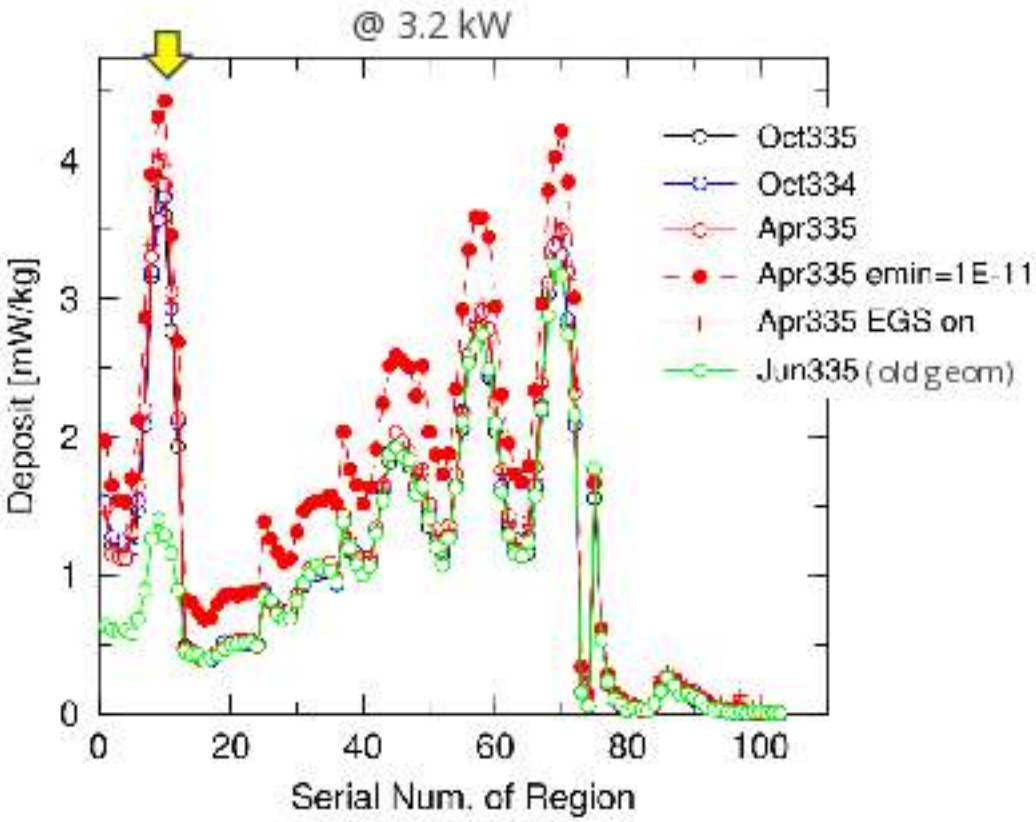
- 40×40×40 cm³ xyz mesh for ~2000×2000×3000 cm³ space.
- Reduce (kill) <0.1 MeV particles at 4/5 probability.

Neutron flux, 100 history



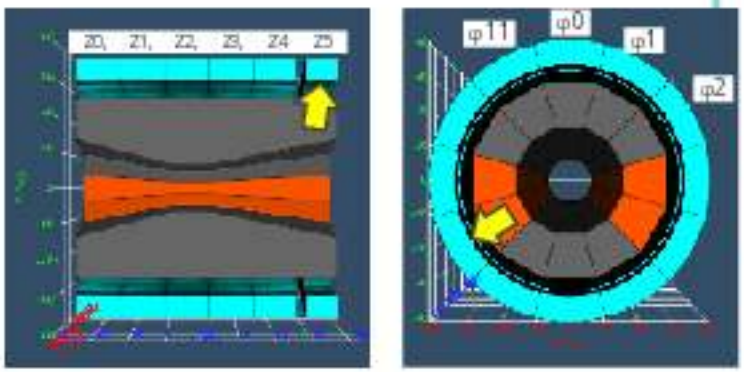
However, execution times got 50 times longer.

Impact on coils



10-20% dependence on neutron cutoff energy.

Divide CS coil into 6×12 cells



Requirement is <40 W in total
(capacity of refrigerator for Phase I).

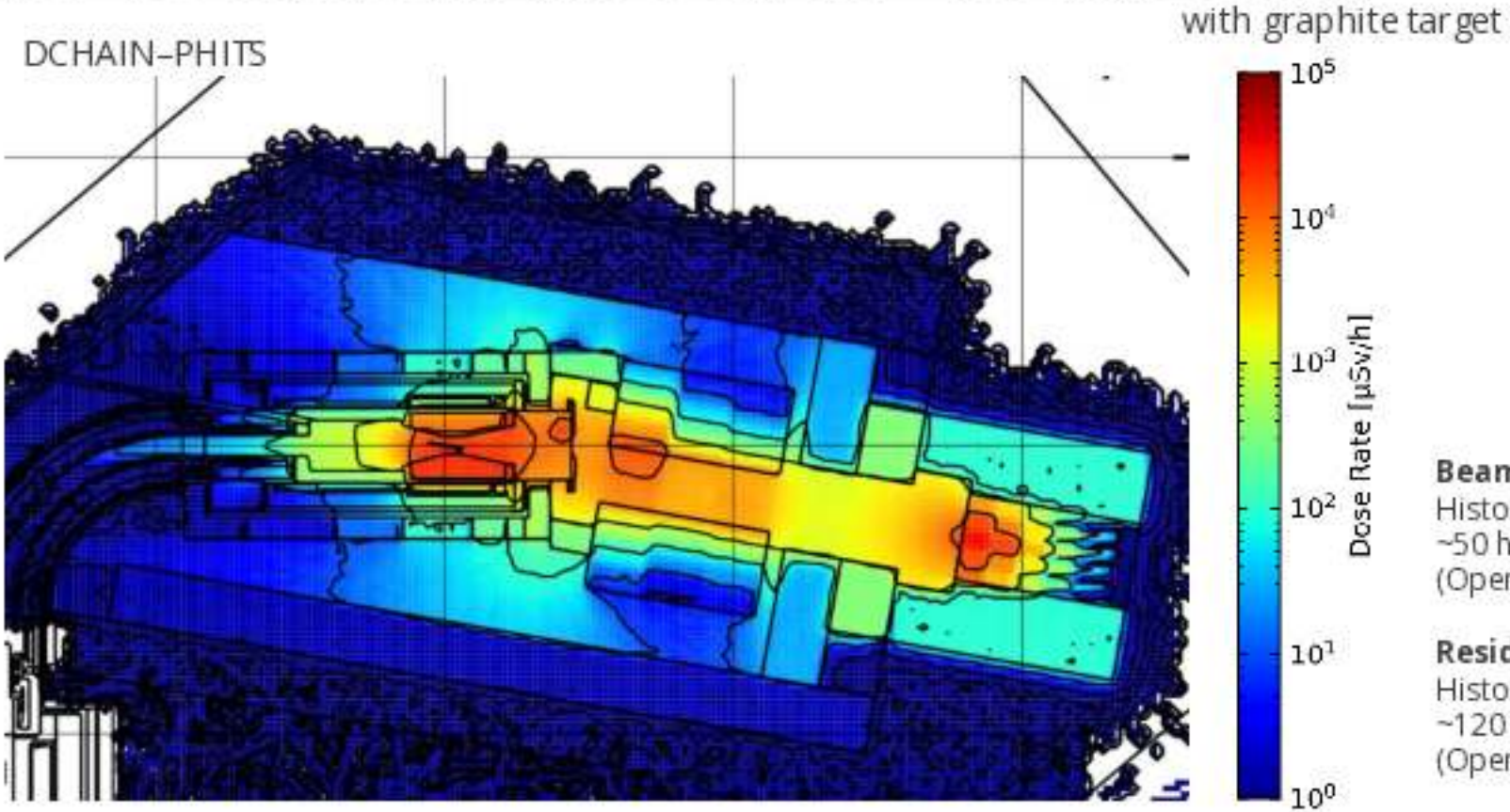
Total heat load is **17 W**
factor 1.5 lower than MARS result

Fluence limit is $\Phi_n < 10^{17}$ cm^{-2}
(Radiation damage to thermal path (Al) causes degradation of thermal conductivity from ~10^{16} cm^{-2})

150 days operation leads to
Φ_n = **1.1×10^{16}** cm^{-2} (<0.1 MeV)

Residual dose after Phase-I

After 150 days beam time @ 3.2 kW + 180 days cooling



Beam irradiation:
History: 1×10^6
~50 h with 32 cores
(OpenMP)

Residual dose:
History: 1.2×10^{10}
~120 h with 60 cores
(OpenMPI)

$e^{\pm}$ tracking with EGS5

Often fell into (quasi-)infinite loops

- Only happen when mapped-field in complex geometry is applied.
- We were suffered from this and had given up to use EGS.

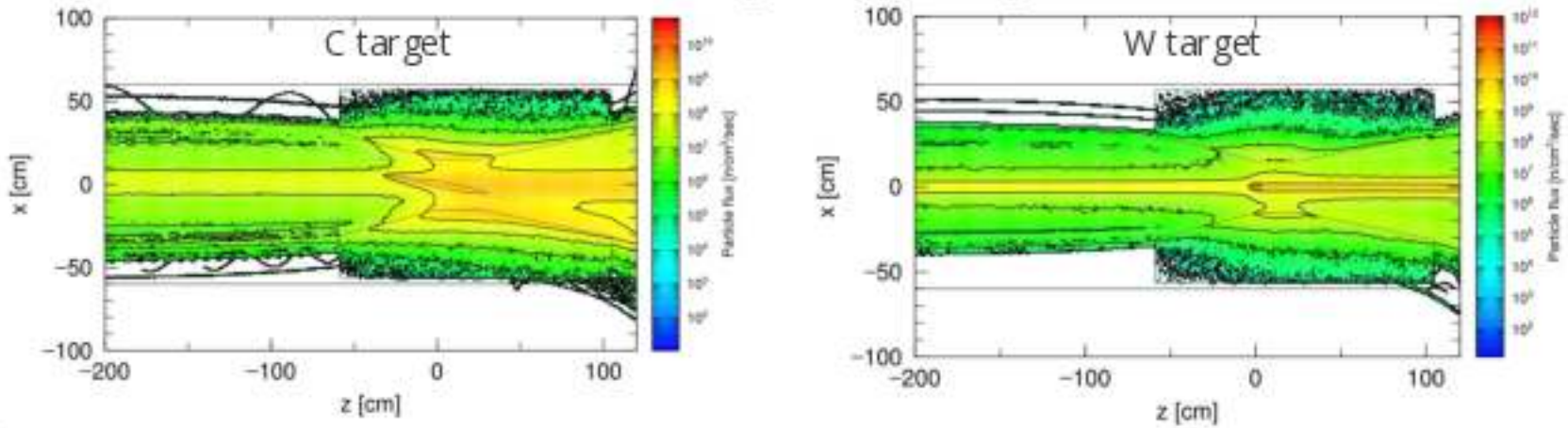
We have debugged recently

- Identified several points going into the loop (egs_elmgfd.f).
- Proposing bug-fixes, but some are not real solutions (killing the particle). → Adopted in v335.
- More fundamental solutions are awaited.

We finally succeed in running COMET simulation with EGS!

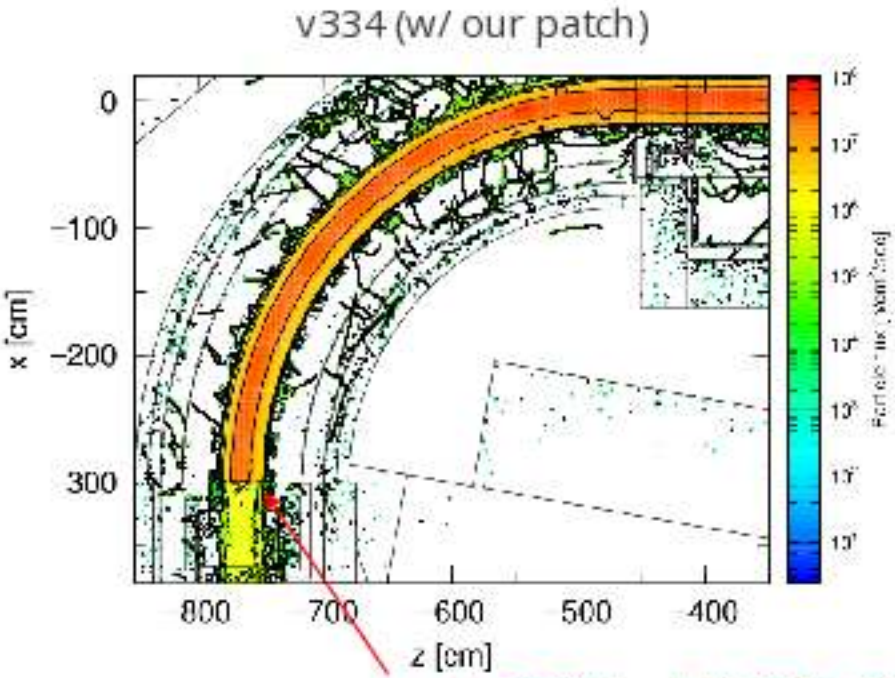
- However, there are still some cases going into infinite loop.

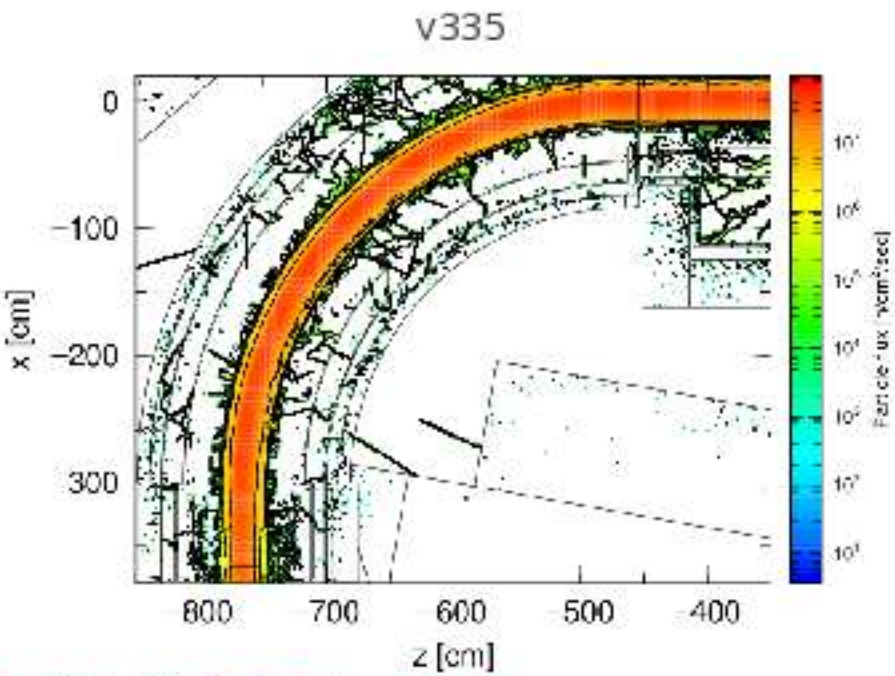
Electron background from target



Heat load on target was overestimated by 25% w/o EGS (kerma approx.)

Electron flux





334は、真空域TSと検出器の領域の境で分布が不連続になっている。

Conclusions

Geant4 based simulation is the official simulation of COMET

- Event-based analysis with mixing (superimposing) many events
- for detailed study of the experiment, especially detectors.
- High statistics generation is possible using HPC.

PHITS is a useful tool to design facility.

- Shielding design,
- High-power targetry,
- Radiation level of detectors
- with statistical analysis.

Research system

We have collaborated in radiation calculation for COMET for several years.
This year, we concluded an NDA to promote the study

Calculate dose for given shielding designs

- to evaluate the feasibility of experiment
- to optimize the design
- to consider maintenance scenario for Phase II

Using PHITS simulation

- As an alternative to MARS & Geant4 simulation
- More functionalities (& more potential for future development)
- To cross check results

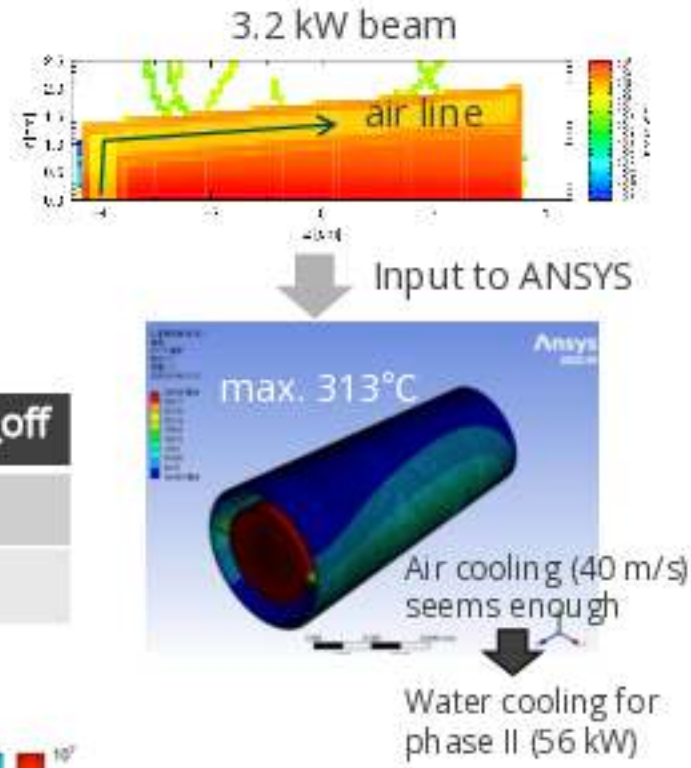
Tungsten target

Heat load: how to cool it?

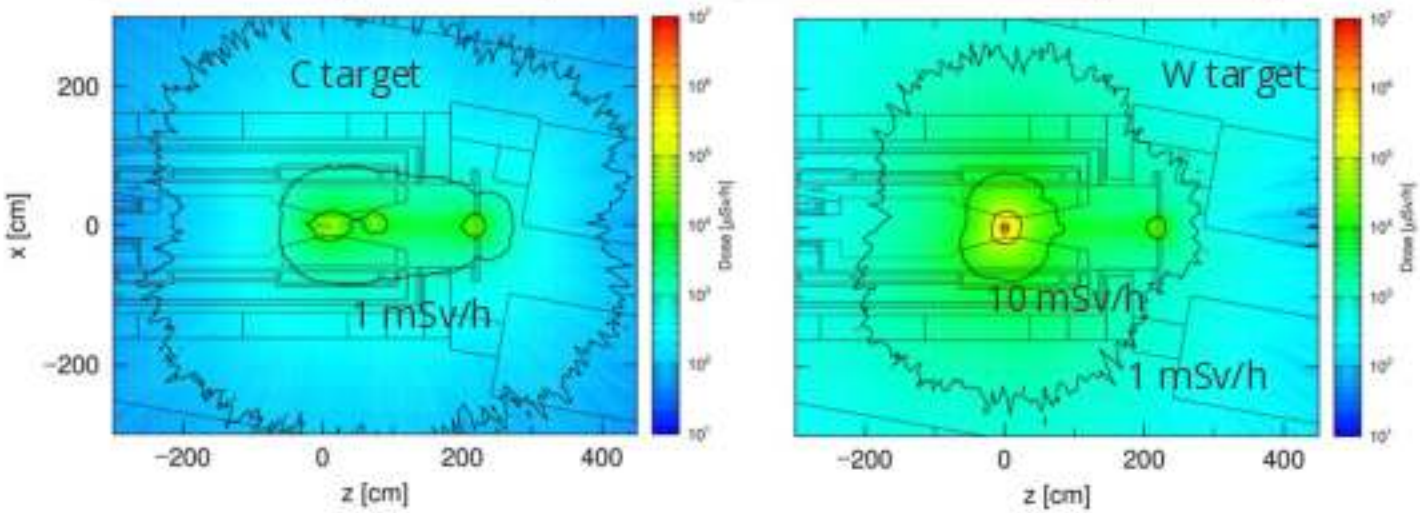
Residual dose: how to exchange?

DPA? (See "problem" slides)

Target type	Deposit (W) Kerma approx.	Deposit EGS (W)	EGS_on/EGS_off
C target	149	120	80.5%
W target	388	294	75.8%



After 150 days beam operation @ 3.2 kW + 180 days cooling

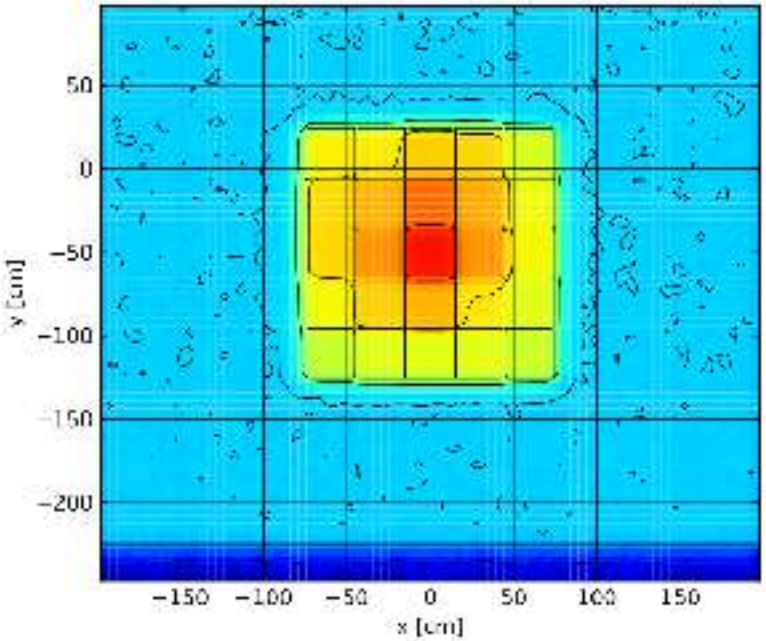


An order higher residual dose with tungsten.
Handling is already difficult with 3.2 kW beam, but not impossible.

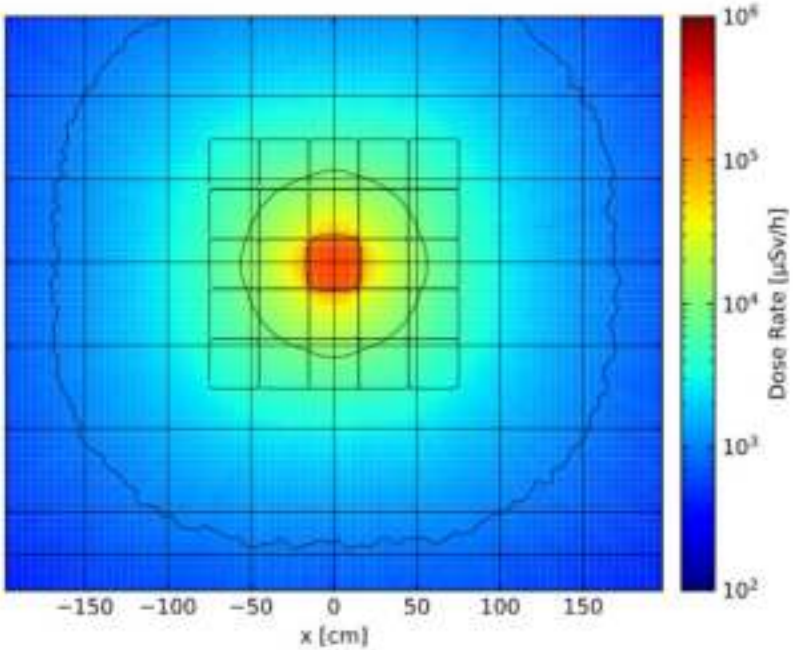
What to do with 56 kW?

Beam dump detailed

Divide central blocks into cells smaller than physical blocks with "lattice" functionality.



Radiation from a central block

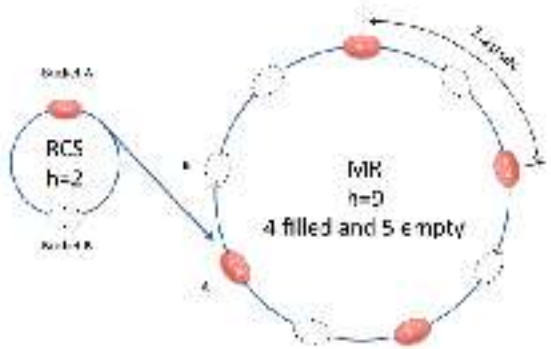


Center of dump: ~0.4 Sv/h,
1.5 m away: ~1 mSv/h.

Impossible to access dump after Phase-I.

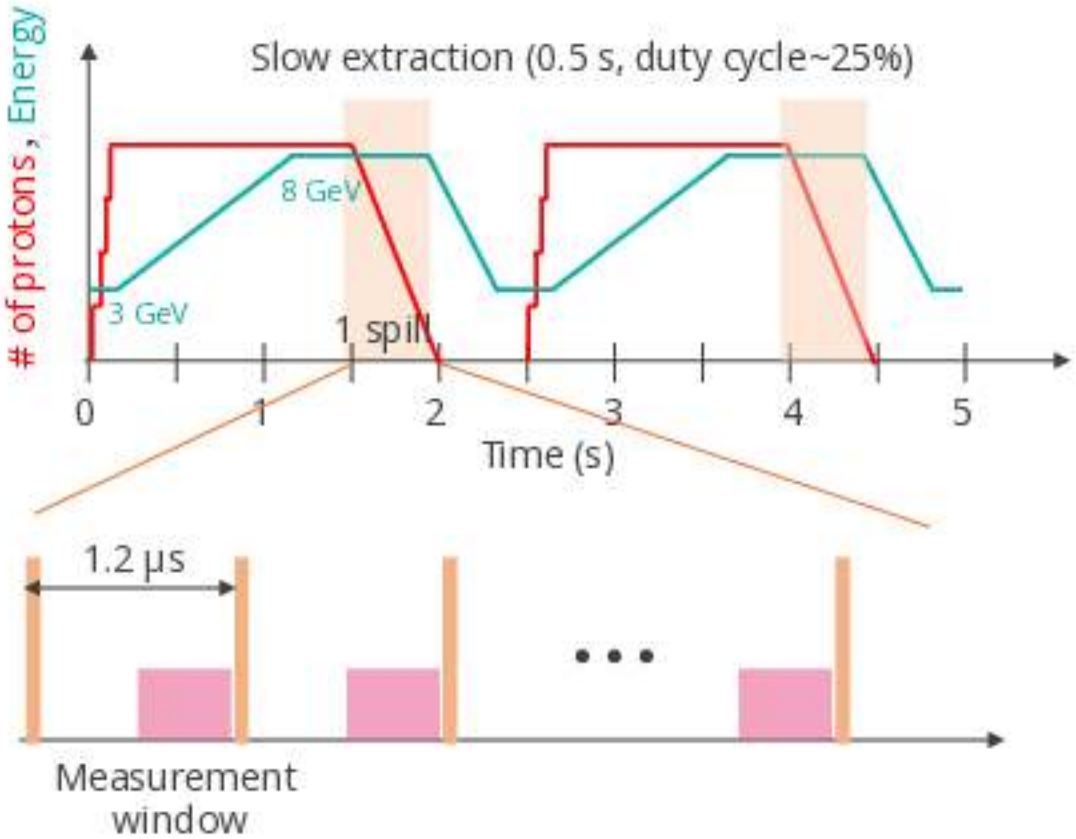
- Dismantling blocks is impossible.
- Remote handling scheme is necessary.

8 GeV bunched SX @ J-PARC MR



Special operation of accerelators to get unique beam

Cannot simultaneously run with other experiments at MR



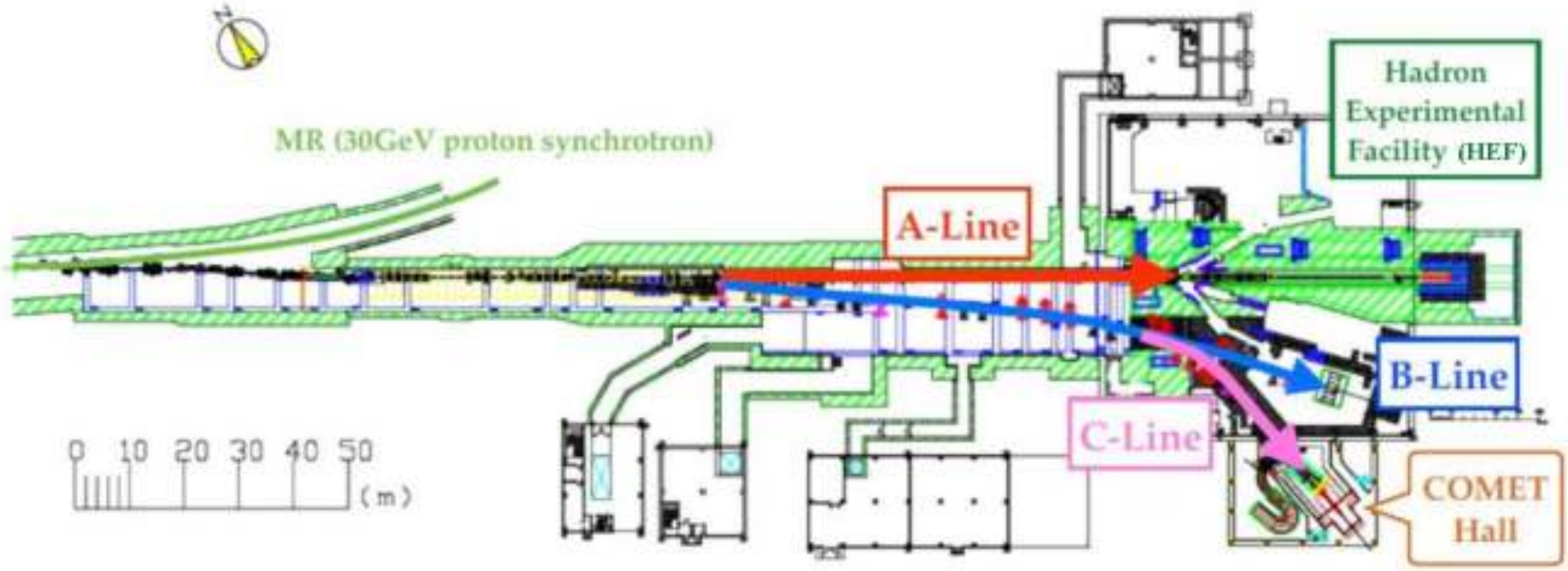
Key parameters

1. Extraction efficiency (>99.5%)
2. Spill duty factor (>70%)
3. Extinction ($<10^{-10}$)

Dedicated primary beamline

C-line dedicated to COMET experiment

- We build a dedicated production target and a beam dump, as well



Construction of C-line was completed in 2022

phitsコードの違い(EGSに関するもの)

```
ynagasawa@KF24H27:~$ diff phits{3341,335}/phits/src/egs5.f
6580,6581c6580,6589
<          !  trap possible glitches around 100 MeV
<          if (ivar.eq.4 .and. e1.gt.60.d0 .and. e1.lt.140.d0) then
---
>C         ------------------------------------------
>C         !  trap possible glitches around 100 MeV
>C         if (ivar.eq.4 .and. e1.gt.60.d0 .and. e1.lt.140.d0) then
>C         ------------------------------------------
>          ! Expand energy region to avoid unstability for second material.
>          ! To avoid negative estepe.
>          ! Related to the following part in the "subroutine egs5efpl":
>          ! --> if(estepe.lt.1.0d-10) then
>          if (ivar.eq.4 .and. e1.gt.30.d0 .and. e1.lt.300.d0) then
>C         ------------------------------------------
```

電子のエネルギー毎の飛跡の長さ(時間)をテーブルで読んでいるが、
小さくなりすぎて不具合がある領域の対処領域を
60~140MeVから30~300MeVに変更

warning: estepe is smaller than 1.0d-10 ***
のメッセージがでなくなった。

```
ynagasawa@KF24H27:~$ diff phits{3341,335}/phits/src/egs_elmgfld.f | less

1899,1901c1546,1548
<          thard = thard  - tstep
<          tinel = tinel  - tstep
<          tmscat = tmscat - tstep
---
>          thard = max(0.d0,thard  - tstep)
>          tinel = max(0.d0,tinel  - tstep)
>          tmscat = max(0.d0,tmscat - tstep)
```

次に発生する反応までの経過時間を
飛跡が進んだ分を調整?
マイナスにならないようにしている。
Hard ハード?
Inel 非弾性散乱
Mscat　Møller scattering

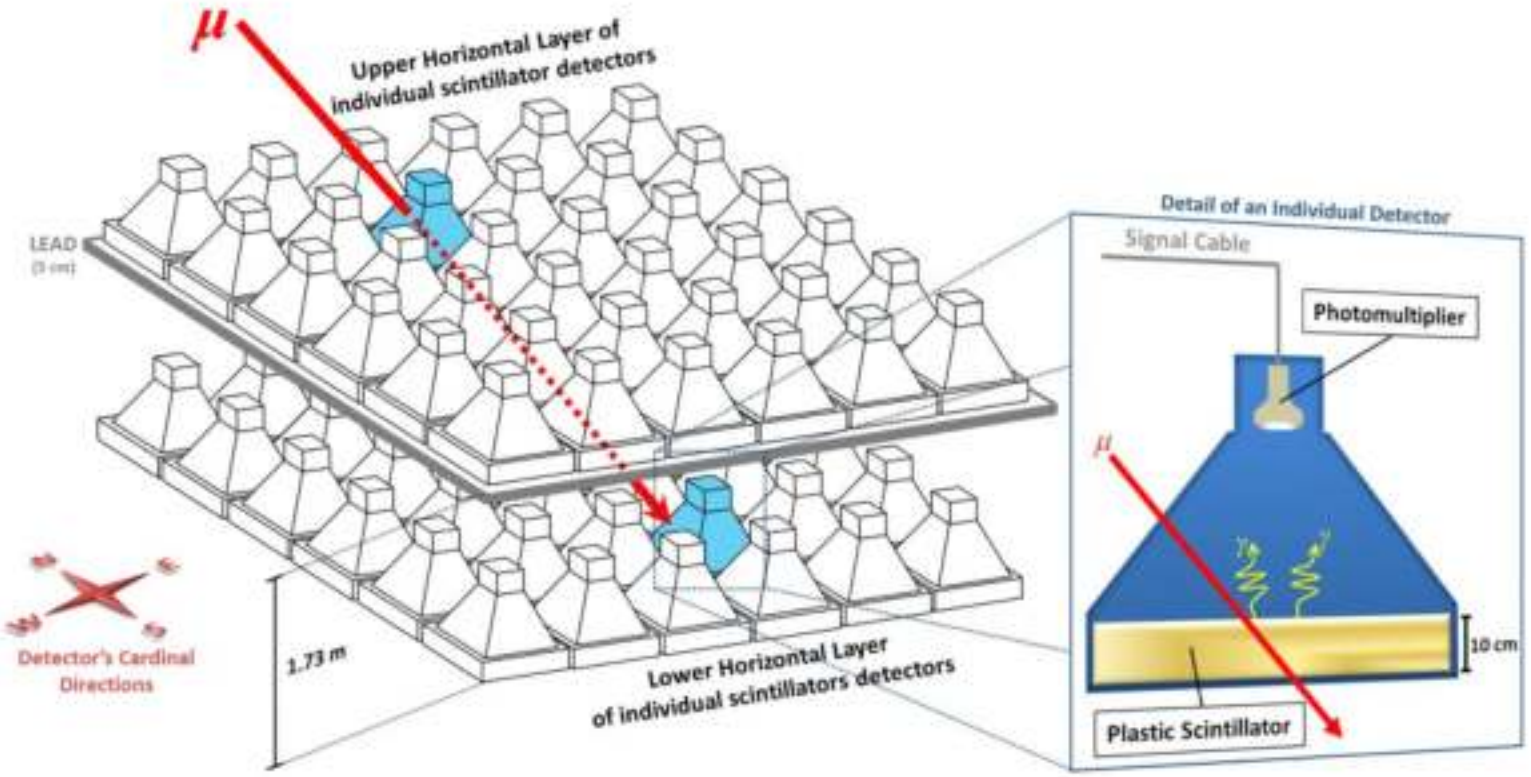
真空域ではtstepが長くなるのでこれが原因?

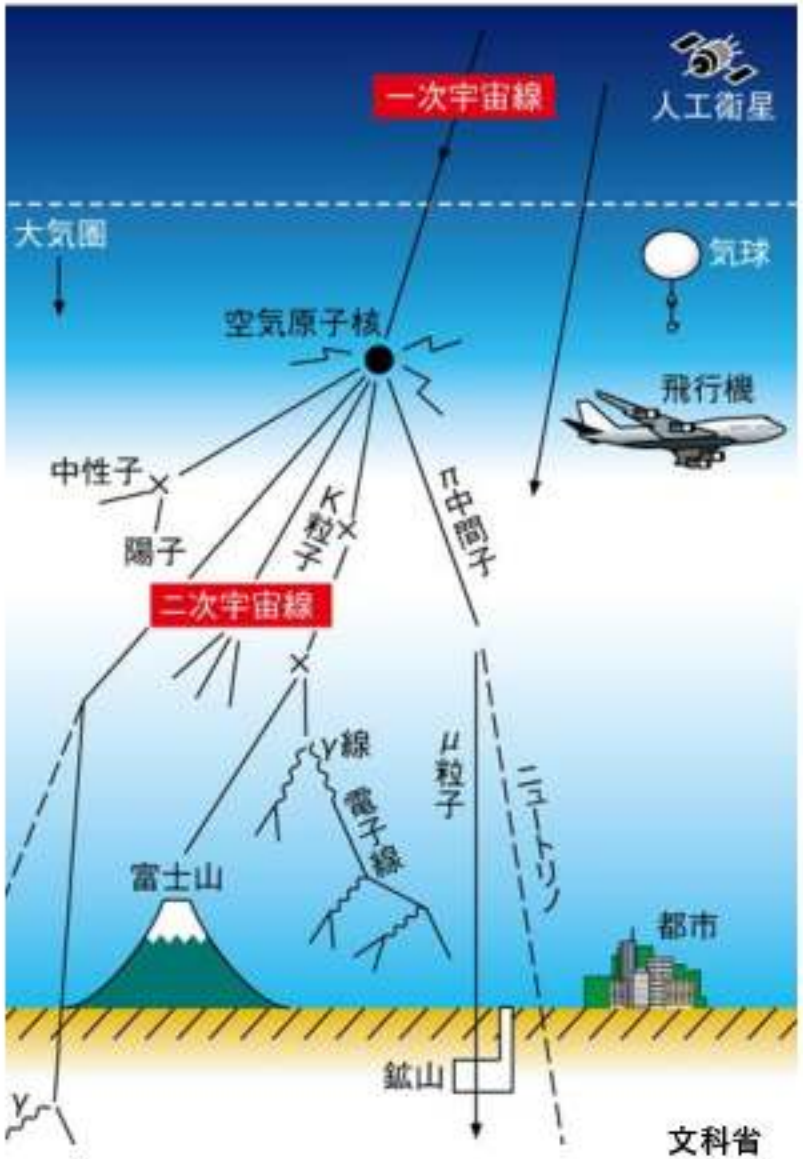
アイスランドでの宇宙線ミューオン観測へ向けた粒子シミュレーション

小財正義[1], 林優希[2], 門倉昭[1], 加藤千尋[2], 宗像一起[2]

1. 情報・システム研究機構　データサイエンス共同利用基盤施設
2. 信州大学

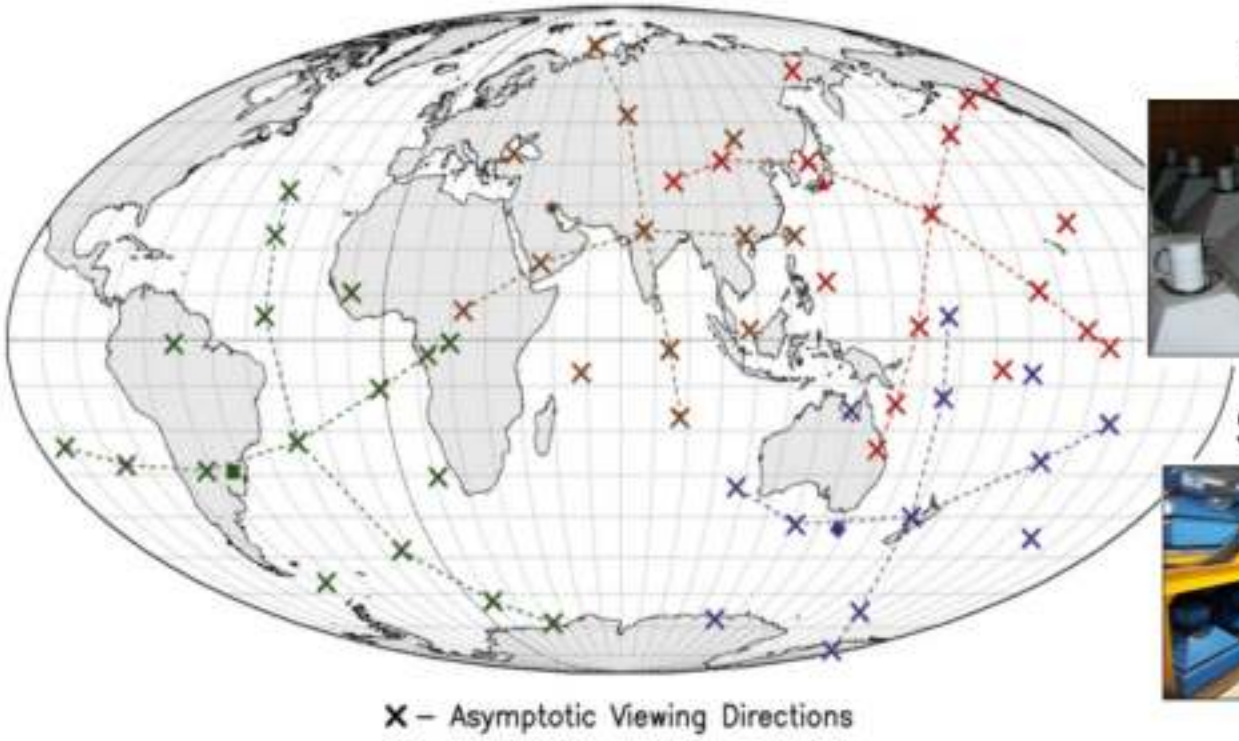
多方向ミューオン計





- 各方向チャンネルでのミューオン計数率を連続観測
- ミューオンの特徴
  - ✓ 地表で最も高い統計量（フラックス）⇒高い時間分解能
  - ✓ 高い透過力⇒1次宇宙線の運動方向を良く保存
- 宇宙線の到来方向分布＝「異方性」

Global Muon Detector Network (GMDN)



Nagoya (Japan)

Hobart (Australia)

São Martinho (Brazil)

Kuwait

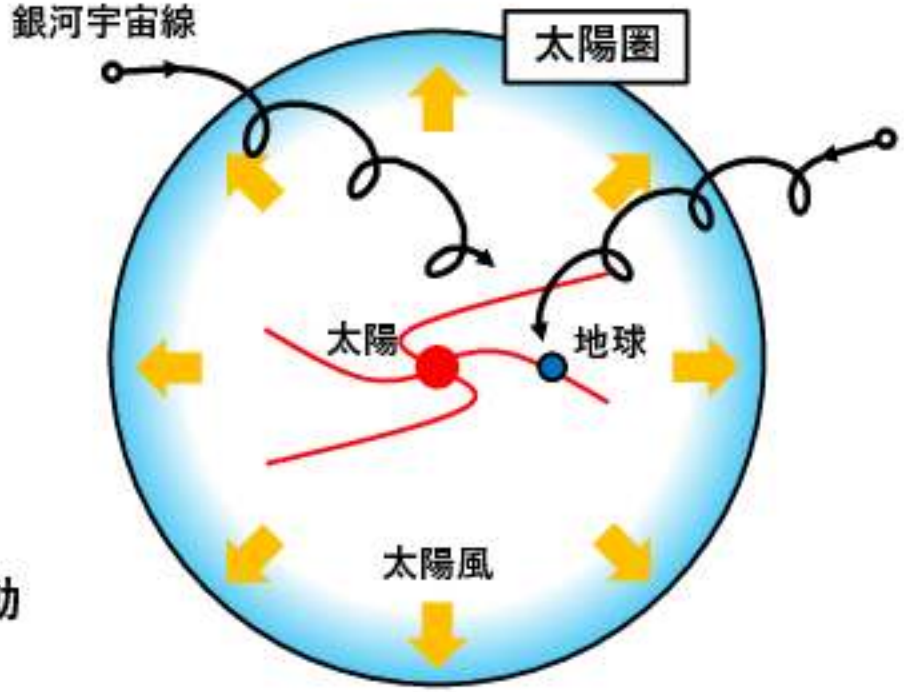
- 多方向ミューオン計を世界数カ国に設置

宇宙線異方性

- 宇宙空間での宇宙線の輸送方程式：
  宇宙線の位相空間分布$F(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ に対するボルツマン方程式

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\mathrm{coll}} \qquad \dot{\mathbf{p}} = Ze(-\mathbf{V} \times \mathbf{B} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

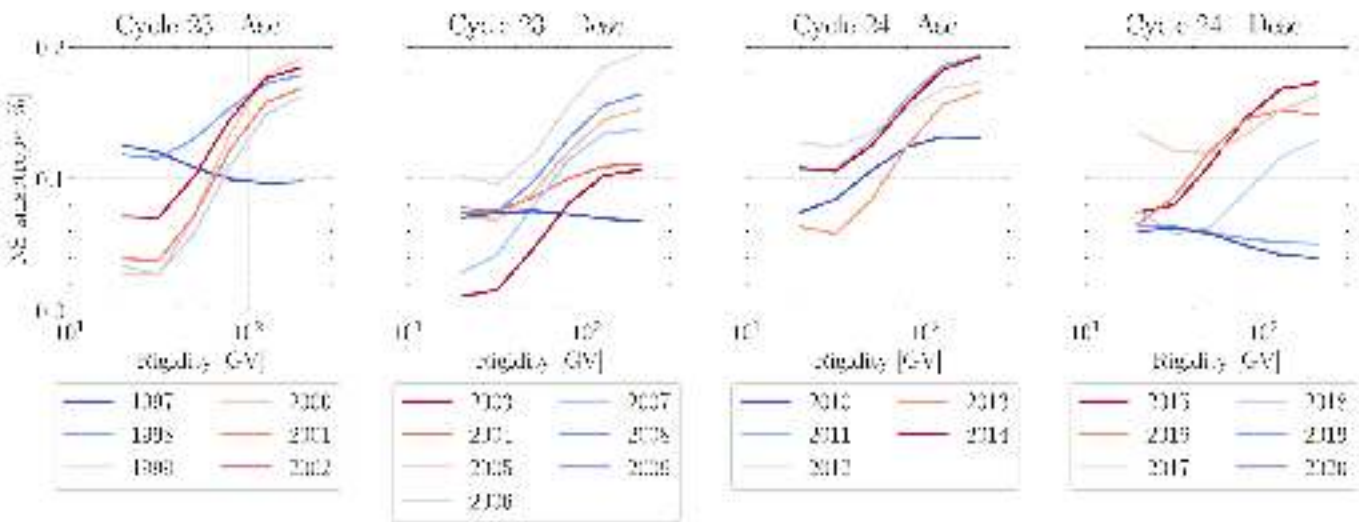
- 異方性 ⇒ 地球座標での位相空間分布（運動量分布）
  - ✓ 宇宙線輸送理論との直接的な比較
  - ✓ 宇宙空間プラズマに関する定量的な議論
    - 惑星間空間磁場B
    - 太陽風速度V
    - ピッチ角散乱$\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\mathrm{coll}}$
- 宇宙線のSolar modulation
  - ✓ 太陽活動（11年周期など）・太陽面爆発による宇宙空間変動



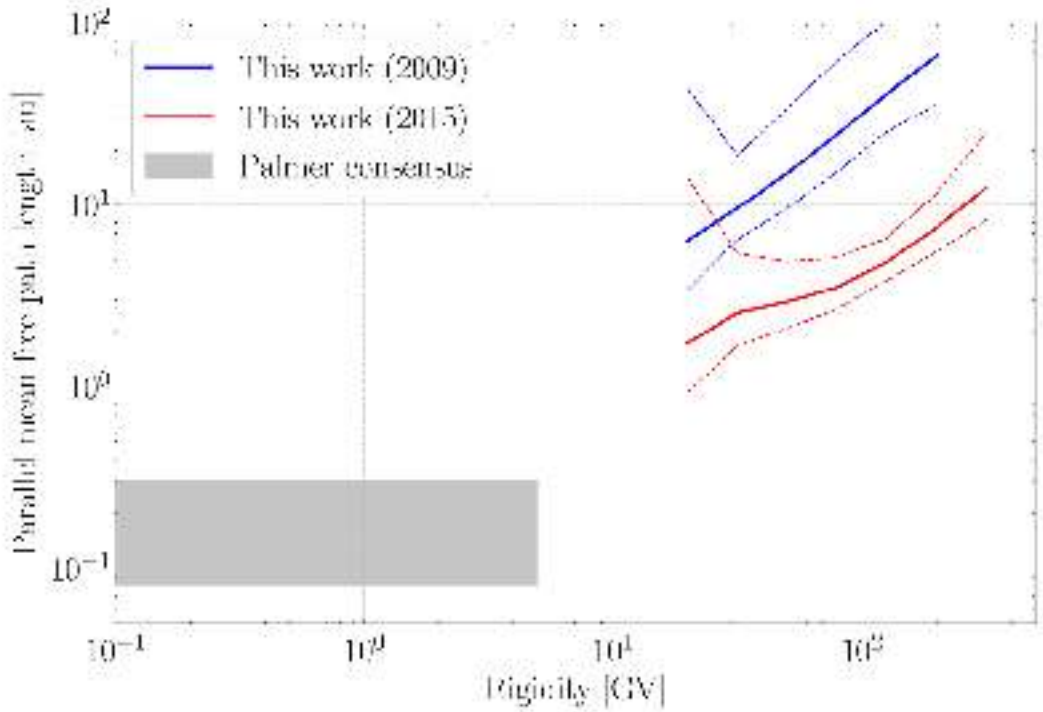
これまでの成果例①

- 宇宙線の輸送パラメータの推定
  - ✓ Kozai et al. 2024
  - ✓ 南北異方性（異方性の南北方向成分）の太陽活動による変動
  - ✓ 宇宙線の平均自由行程とその変動

各年の南北異方性 rigidityスペクトル

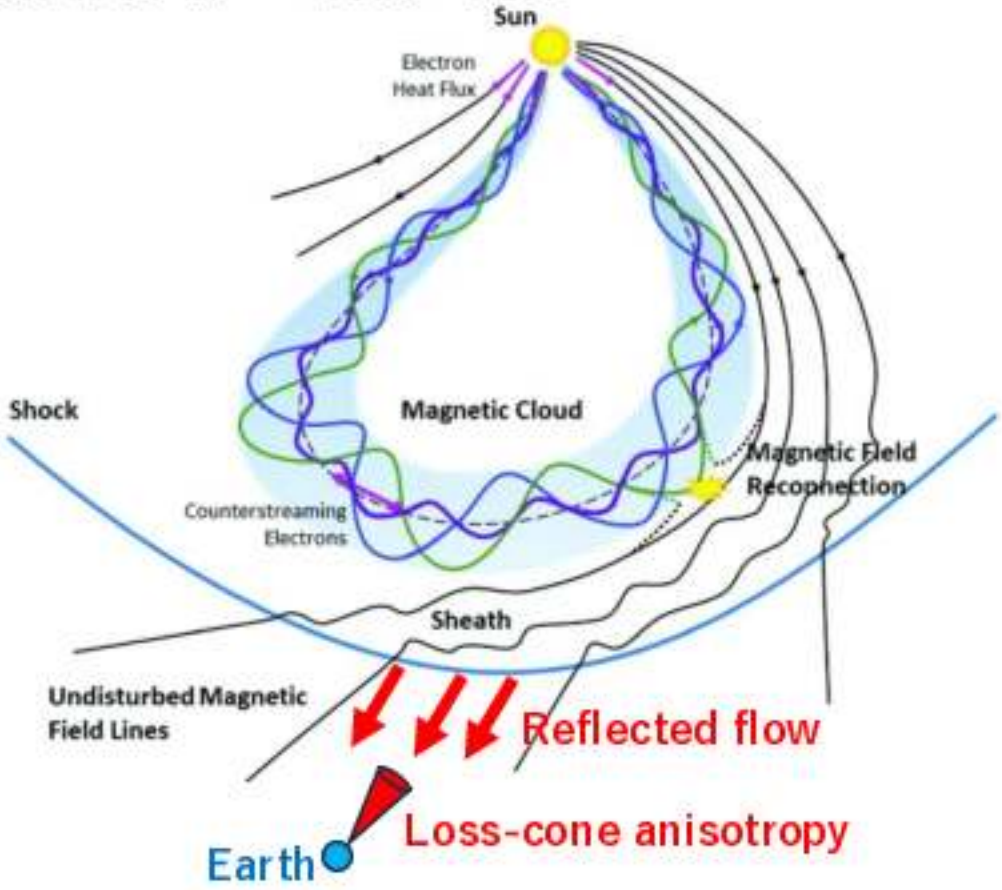


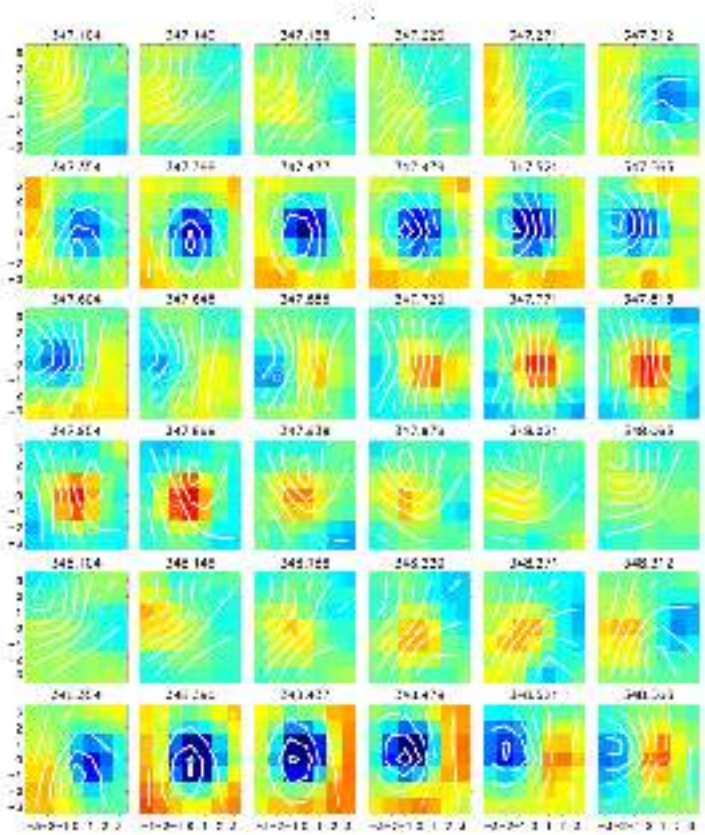
平均自由行程 rigidityスペクトル



これまでの成果例②

- 惑星間空間衝撃波によるロスコーン異方性
  - ✓ Munakata et al. 2000, Fushishita et al. 2014, Rockenbach et al. 2011 & 2014
  - ✓ 太陽面爆発に伴う宇宙空間衝撃波
  - ✓ 磁場勾配の増大による磁場方向での宇宙線強度欠損
  - ✓ 宇宙天気予報への応用に期待

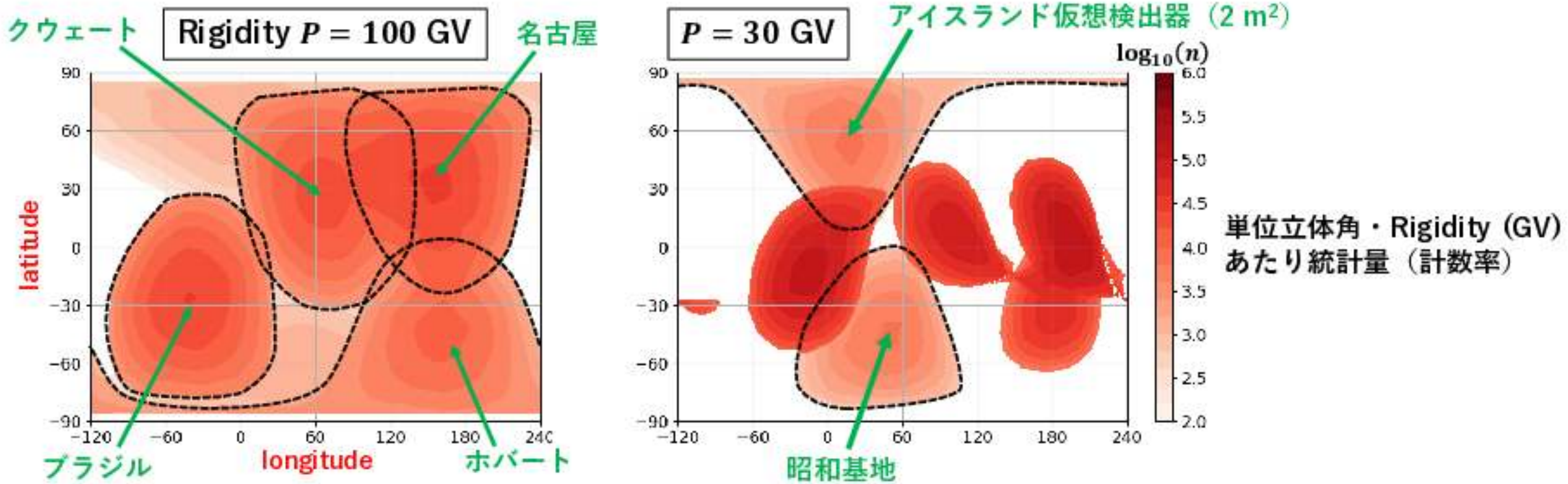




Fushishita et al. 2014

GMDNの観測視野＆アイスランド観測計画

- 地磁気モデル(IGRF)＆磁気圏中の粒子軌道(Runge-Kutta法) ⇒ 各観測所の宇宙空間での観測視野



- 地磁気による軌道偏向：東かつ低緯度方向
- 100 GV程度の高エネルギー宇宙線：中緯度観測所だけでも全天カバーできる
- 30 GV程度の低エネルギー宇宙線：地磁気効果により、高緯度方向は極域ミューオン計でしか観測できない
- 北極域視野を埋めるためアイスランドでの観測を計画中（南極は昭和基地が2018年に観測開始）

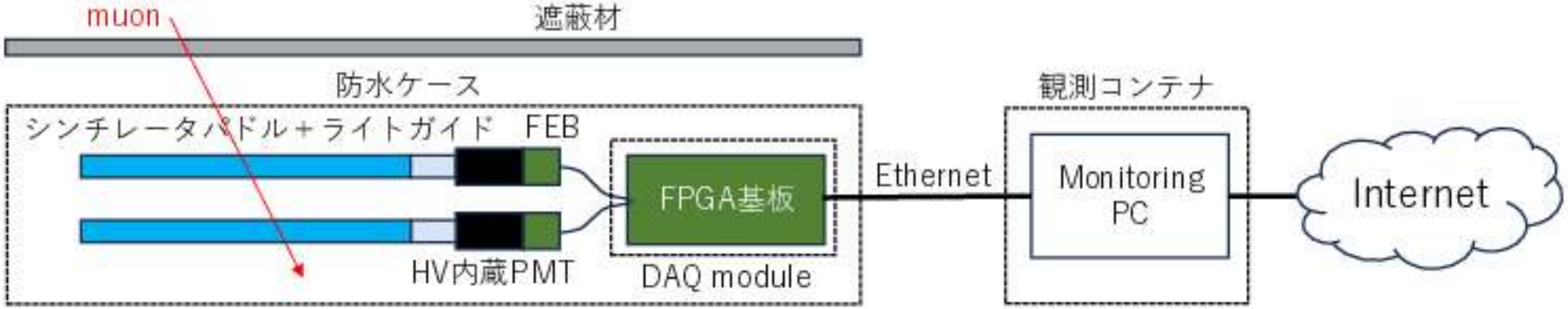
PHITSの活用：アイスランド用検出器設計

- 極地研とアイスランド大学の共同研究に基づく観測拠点
- 既存観測機器（オーロラ・電波等）：屋外設置

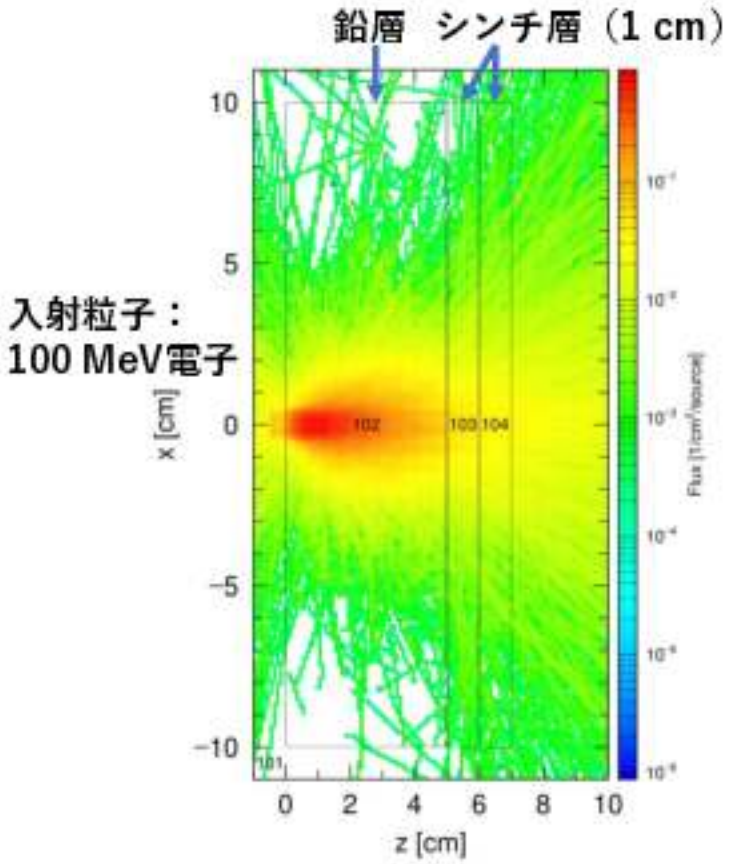
チョルネス

フッサフェル

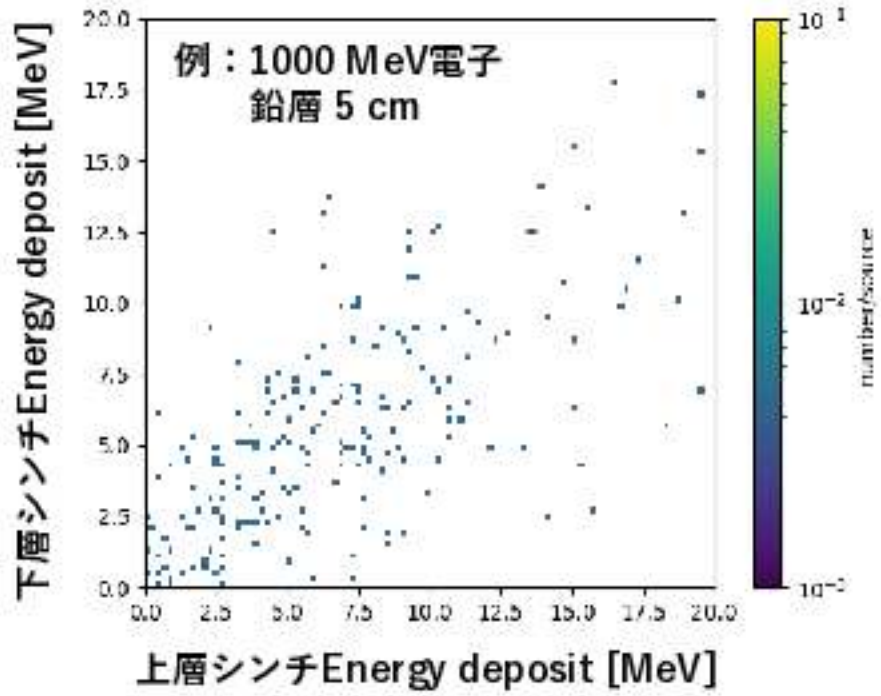
- ミューオン計も屋外設置型としたい
  - ✓ 予算的な理由・従来のGMDN等とは異なるコンセプト
  - ✓ サイズ：数十cm～１m 四方程度
  - ✓ 従来の大型ミューオン計よりも重量・構造物の節減が重要 ⇒ 遮蔽材の節減を検討（従来：5 cm厚鉛）



模擬検出器へ粒子ビーム照射

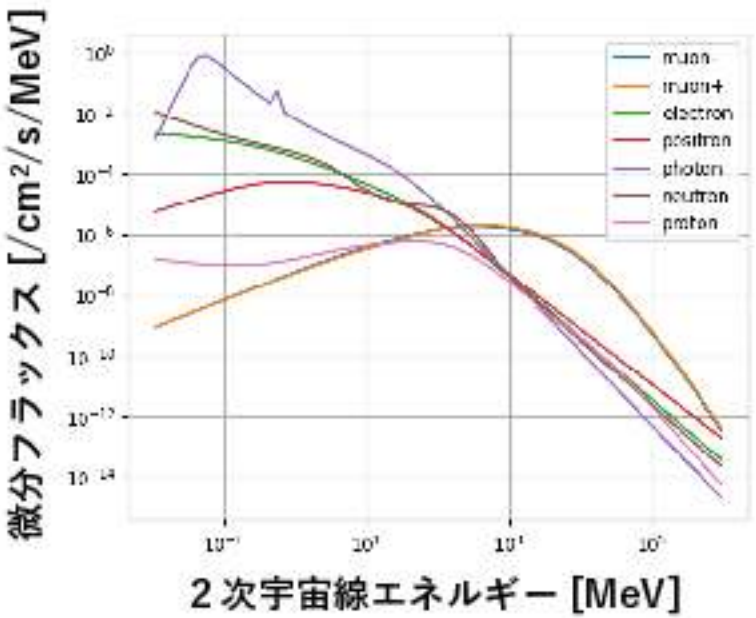


各入射粒子、エネルギー、鉛層厚みごとに
上下シンチ層でのEnergy deposit取得



（シミュレーション統計量はもう少し稼ぎたい）

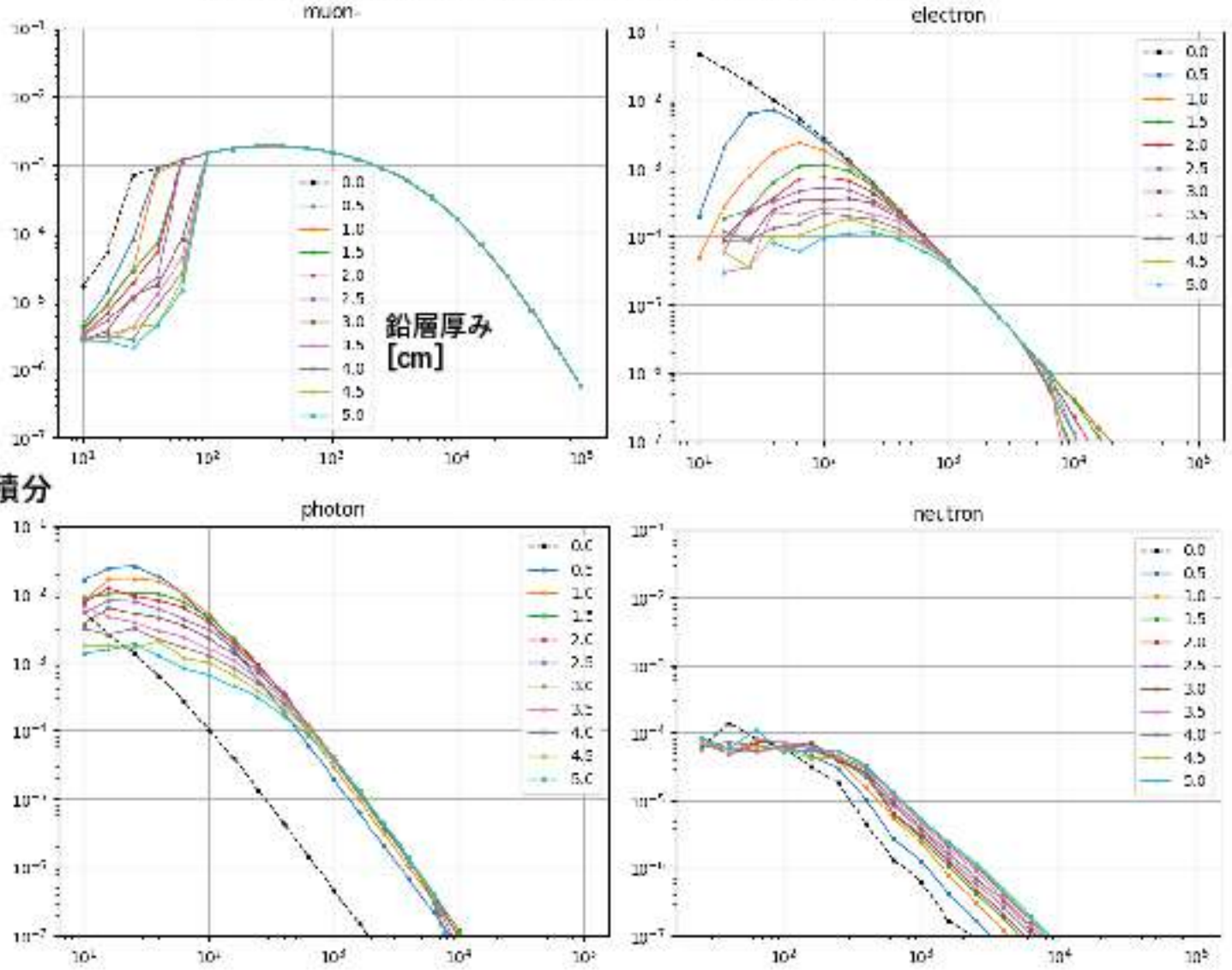
EXPACSによる
アイスランドでの２次宇宙線フラックス



重みづけ・
Edep閾値以上積分

1000 cm²あたり微分計数率 [/s/MeV]（2次宇宙線への応答関数）

例：Energy deposit閾値1.0 MeV（上下シンチ層共通）



横軸：２次宇宙線エネルギー [MeV]

- 宇宙空間の異方性解析への影響を評価するには、磁気圏外１次宇宙線への応答関数を求める必要
- EXPACS（1次宇宙線に対して積分したフラックス）ではなく、
  １次宇宙線の各粒子種・エネルギーでの大気中輸送計算が必要
- これまでは1980年頃の計算結果を使用
  - ✓ Murakami et al. 1979
  - ✓ 実用上は問題ない
  - ✓ ミューオン計数率の1次宇宙線への
    応答関数の幅：~数10 GeV
  - ✓ 大気変動の影響などの方が大きい
  - ✓ シミュレーションによる応答関数のずれ（系統誤差）は
    異方性解析結果には殆ど効かないはず

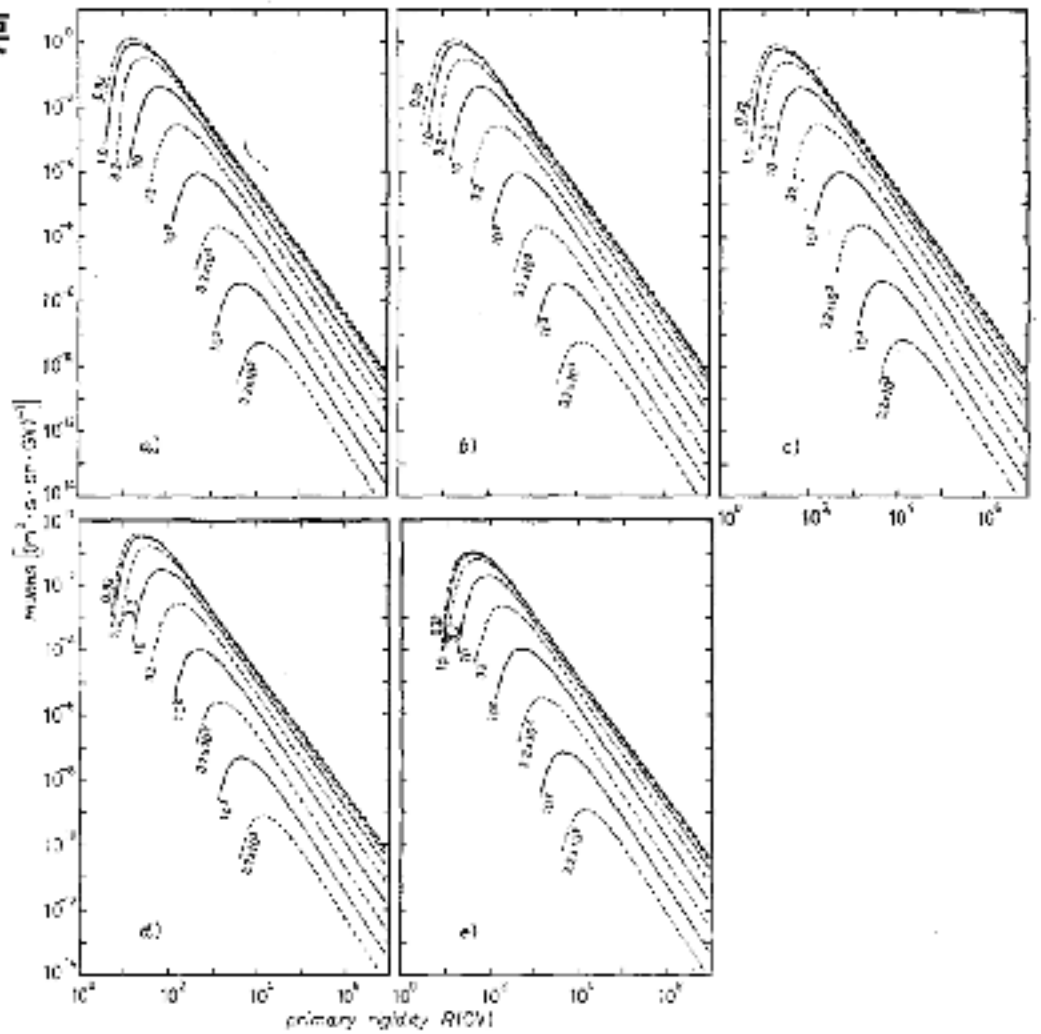
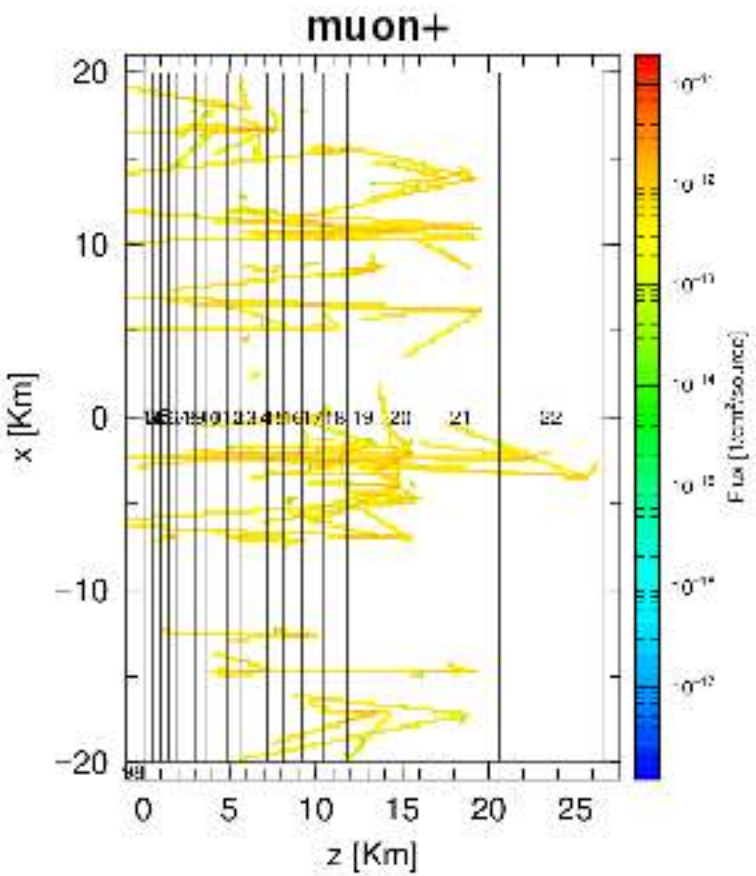
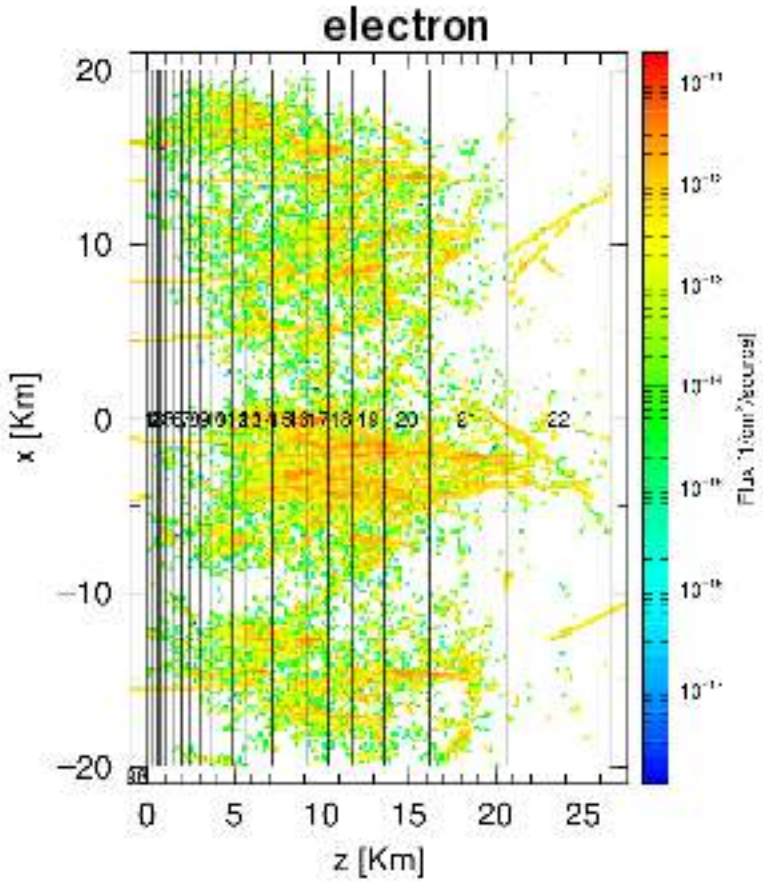


Fig. 2. – Response functions of muons at sea-level produced from primary protons and nuclei for different incident zenith angles: *a*) 0°, *b*) 16°, *c*) 32°, *d*) 48° and *e*) 64°. The number attached to each curve indicates the muon threshold energy (total energy in GeV).

- 古い反応モデルなどを使い続けたくない
- 遮蔽材厚みなどの最適化にはミューオン以外の応答関数も必要
- 改めてシミュレーションすることで新たな知見が得られる可能性も
  - ✓ 大気効果（次ページ）
- US標準大気モデルでの計算中
  （PHITS佐藤氏のサンプルコードを参考）

50 GeV proton
鉛直入射（20 events）
T-Track

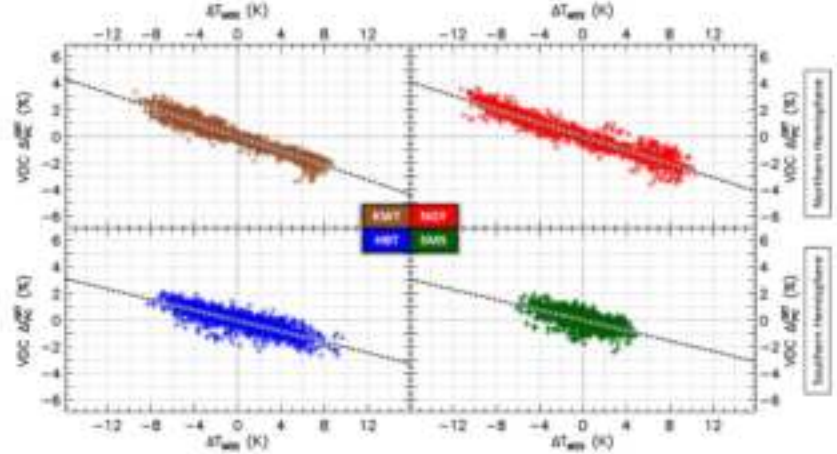




PHITSの活用：大気効果の調査

- 大気変動の地上ミューオンへの影響
  - ✓ 気圧効果：ミューオンの透過物質量（電離損失）⇒地上での気圧計測で精度良く補正
  - ✓ 正の気温効果：パイオンの平均自由行程⇒ミューオンへの崩壊確率
  - ✓ 負の気温効果：ミューオン生成高度⇒ミューオンが地表へ届く前に崩壊する確率

  気温の高度分布が影響
- 現在も補正方法の改良が進展中
  - ✓ Mendonça et al. 2016&2019
  - • 大気密度 x 気温の高度積分（T_{MSS}; Mass-weighted temperature）
  - • 気温効果によるミューオン強度の季節変動（夏－冬差）と良い相関

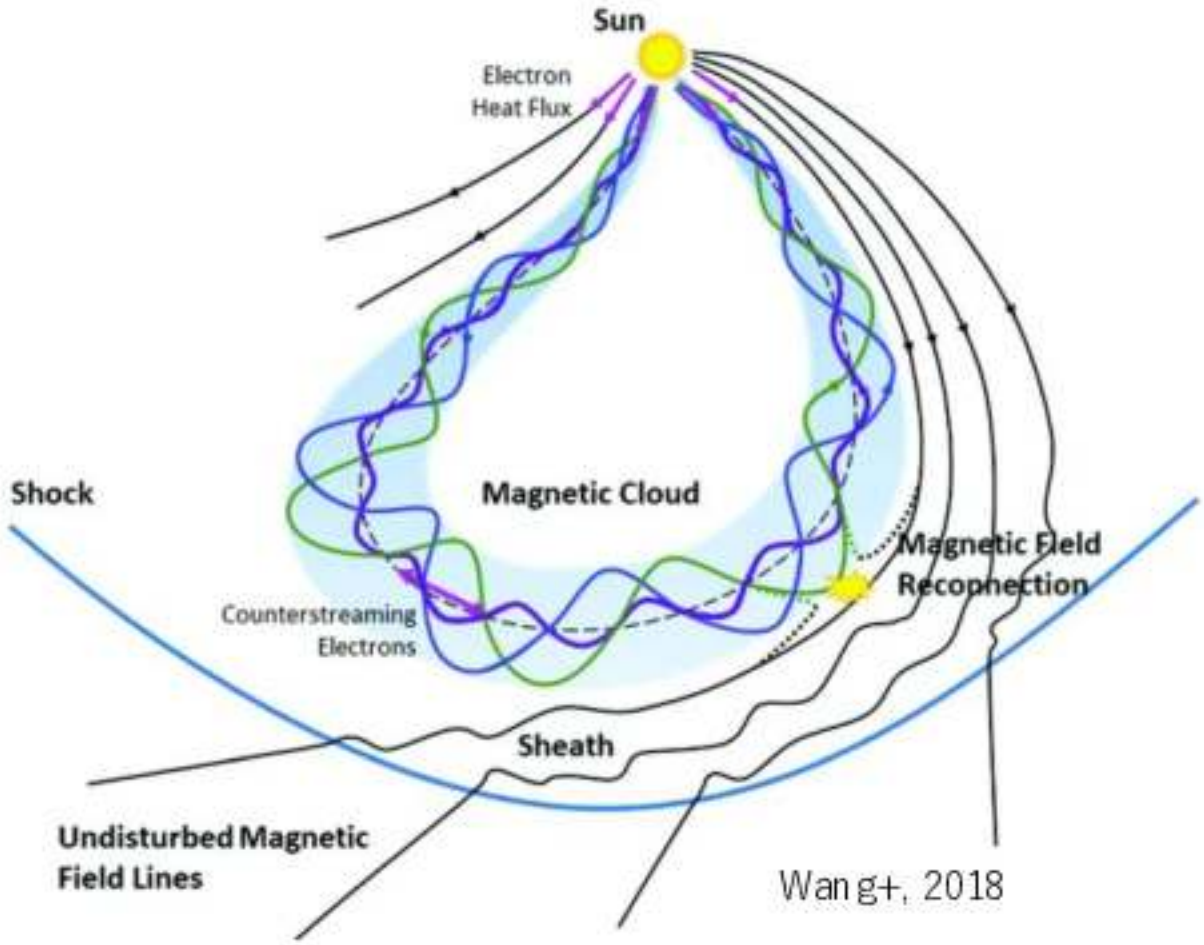


  - ✓ NOAA気象再解析データ(GDAS)から求めたT_{MSS}を指標として気温効果補正
  - ✓ 異方性（~0.1%）を検出できる精度で補正できていることを実証（Kozai et al. 2024）
  - ✓ T_{MSS}指標では補正できない期間が数日程度現れる現象も明らかに（Munakata et al. 2023）
- シミュレーションによる大気効果の調査
  - ✓ 補正法（T_{MSS}指標による近似）の系統誤差
  - ✓ 気象モデルによる違い
  - ✓ 大気効果補正・異方性観測のさらなる精度向上へ

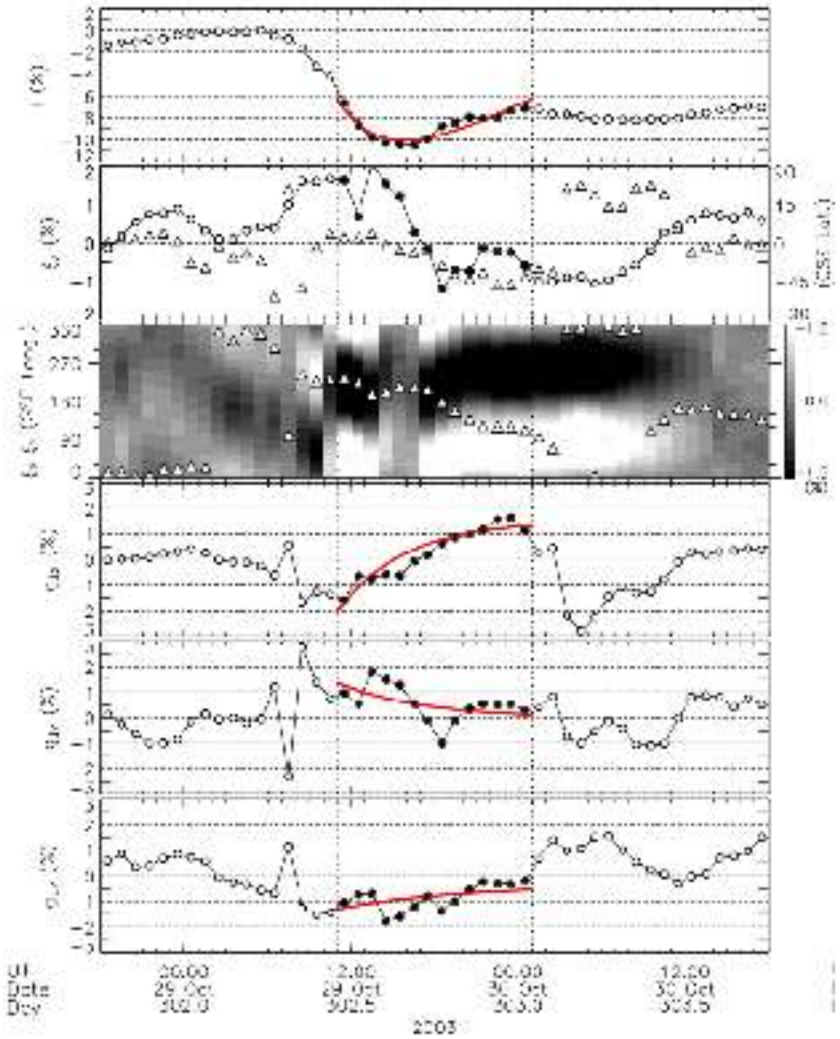
END

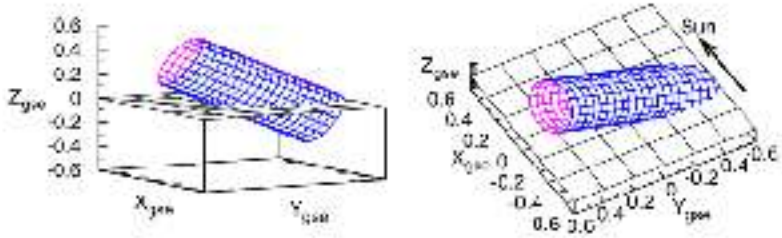
これまでの成果例

- 太陽面爆発による噴出磁場の構造推定
  - ✓ T. Kuwabara et al., 2009, JGR



Wang+, 2018





業界仕様のメッシャーツールによる複雑なトポロジー形状のPHITS計算空間への取り込み

阪間 稔
（徳島大学院医歯薬学研究部：核医学治療・核化学 Nuclear Medicine Therapy/Nuclear Chemistry）

I. 複雑なトポロジー形状を放射線輸送計算空間へ取り込む意義：放射線輸送計算に課せられた課題
II. 放射線輸送計算における複雑なトポロジー形状を計算空間へ取り込むためのワークフローの数々
III. 四面体ポリゴンメッシュ化（ボリュームソリッドポリゴンメッシュ）で求められる条件
IV. PHITS計算空間への複雑なトポロジー形状の取り込み事例
V. まとめ

I.　放射線輸送計算モンテカルロ・シミュレーション計算に課せられた課題

- 実際の実験装置を製作・運用する前に，また，人間や動物自体を治療・診察する前に，正確に再現された模擬空間上で放射線照射や放射線実験，放射線治療診断を行うことができれば，いずれにおいても，実際，それら実環境で最善の結果を得ることができる．
- 視覚的な情報を事前に提供でき，目には見えない放射線に対して，効果的な印象を与えることができる．（視覚的な手段で見えてくる新たな結果や発想が創出されることが期待できる．）

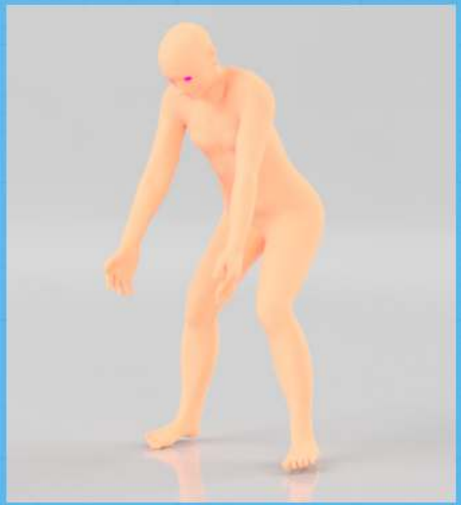
核融合炉での中性子輸送工学

とにかく高確度・高精度に
放射線輸送場を再現

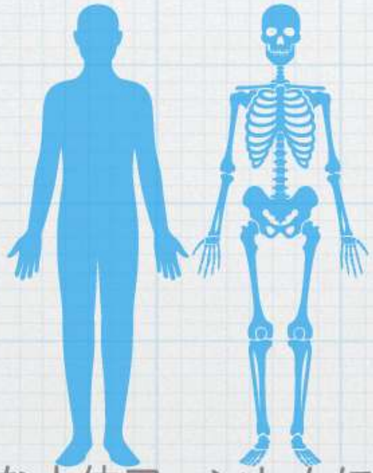
High
resolution and accuracy

放射線輸送モンテカルロ・シミュレーション計算空間

精密な3D-CAD



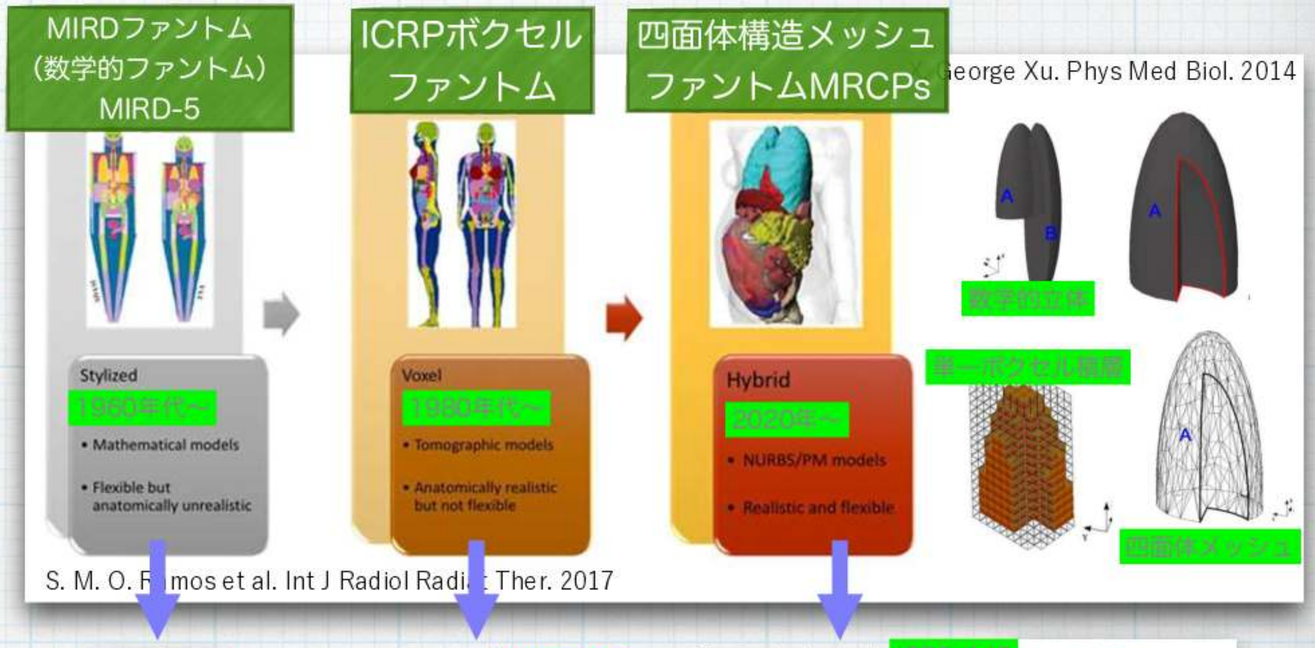
精密な3D-CG

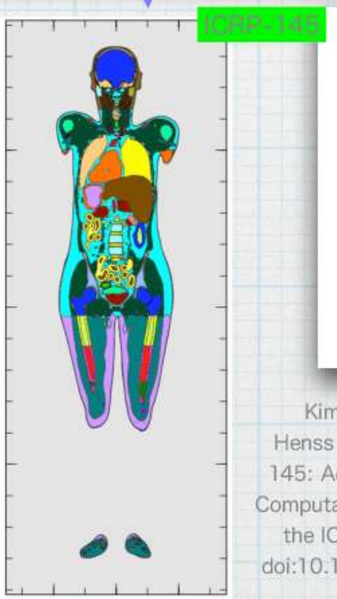


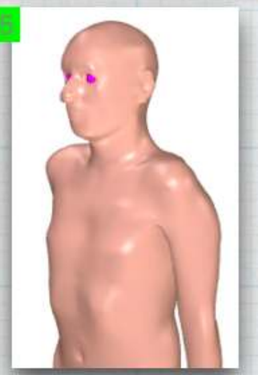
精密な人体ファントムによる
放射線の人体影響

Adult Reference Computational Phantomの変遷

- 体内に取り込まれた放射性薬剤（診断及びRI内用療法含む）による内部被ばく線量を評価するためには，以下の項目が必要となる。
  - 線源臓器(source)及びその周辺リスク臓器(target)における放射能の時間的変化
  - 臓器に集積した放射性核種(RI)から放射されるエネルギーのうち，どの程度のエネルギーがRI集積された臓器から放出（減弱過程を経て）されて，その周辺リスク臓器に吸収されるか
  - 臓器の重量（形状を含む）
- 「MIRD法」は，放射性薬剤の体内動態（体内分布）をモデルで計算し，放出される放射線によって体内の各臓器が吸収するエネルギーを数学的ファントム（MIRDファントム）⇒ICRPボクセルファントム⇒四面体構造メッシュファントムの単純な放射線減衰計算から放射線輸送モンテカルロ・シミュレーション計算に至る種々の計算プロセスを経て平均吸収線量(Gy)を求める手法である。



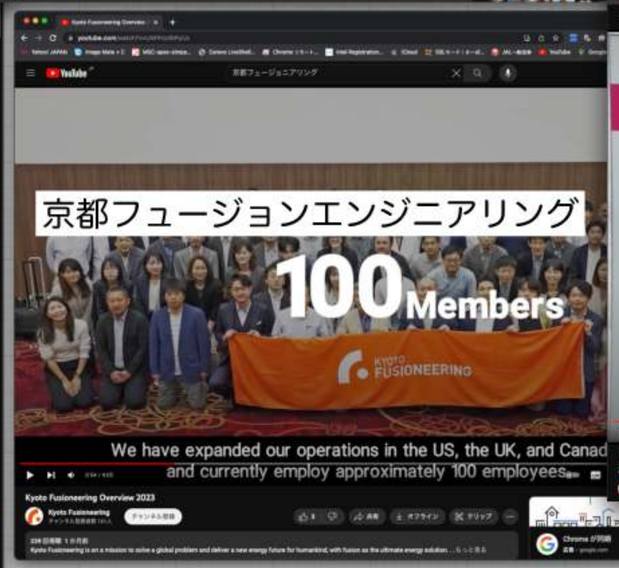




Kim CH, Yeom YS, Petoussi-Henss N, et al. ICRP Publication 145: Adult Mesh-Type Reference Computational Phantoms. Annals of the ICRP. 2020;49(3):13-201. doi:10.1177/0146645319893605

Publicity（メディアによる取り上げ）：核融合関連のスタートアップ企業の設立と成長，資金獲得

- 日本の核融合スタートアップ企業
  - 京都フュージョンエンジニアリング（ジャイロトロン・プラズマ加熱）2019年設立，社員100名
  - ヘリカルフュージョン（ヘリカル核融合炉）2021年設立，社員10名
  - エクスフュージョン（レーザー核融合）2021年設立



II.　複雑なトポロジー（形状）モデル設計をPHITS計算空間へ取り込むワークフローの数々

サーフェスデータ
（サーフェスポリゴン）
.stl .ply .off .mesh

TetGen
tfile = ○○.ele and ○○.node;
TetGenファイル群

PHITS
計算空間

複雑な体系を記述することが困難

平面，立方体，直方体，円柱などの
簡単な図形の組合せ

nfile = ○○.bdf；
Nastran バルクデータ

四面体構造ポリゴンメッシュ化：
ソリッドボリュームメッシング

細かなファセット面を貼り合わせることでボディ化したCAD形式として，それをPHITS(MCNP)に準拠したcellとsurfaceを定義文に変換する.

業界一般のシミュレーション解析におけるモデンリングで有限要素法の概念を踏襲している

Constructive Solid Geometry (CSG法)

TopMC（旧SuperMC，中国），GEOUNED（スペイン）

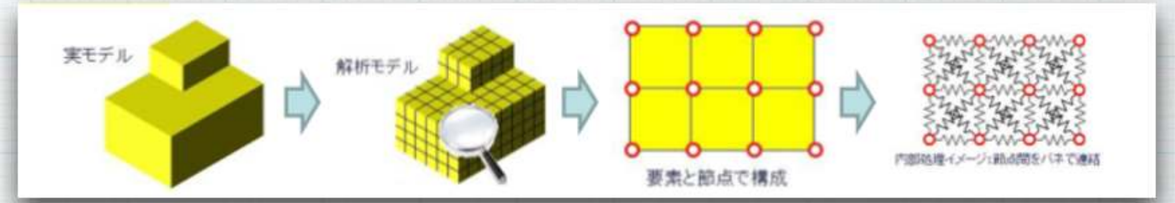
3D CADデータ
.stp .sat .igs .x_t .ipt .sldprt

Fusion Neutronic Engineering Analysis（核融合における中性子工学）

- （放射線輸送計算）＋（ジオメトリー設計とMC計算への変換）
  - OpenMC + GEOUNED（CSG法）
  - TopMC (旧 SuperMC) + TopMC内のモデリング（CSG法）
  - MCNP + DISUNED（CSG法）
  - [MCNP, FLUKA, OpenMC, GEANT4, PHITS] + DAGMC (Wisconsin)（メッシュポリゴン）
  - MCNPを組み込んだ統合型：MCNP-Attila4MC（メッシュポリゴン）
    - PHITSを組み込んだ統合型（将来計画）：PHITS-Attila4MC（メッシュポリゴン）
  - PHITS + [Autodesk Fusion/Blender and Altair Simlab]（メッシュポリゴン）

III.　四面体ポリゴンメッシュ化（ボリュームソリッドポリゴンメッシュ）で求められる条件：複雑なトポロジーをモンテカルロ・シミュレーション計算空間へ取り込み，放射線挙動解析シミュレーション計算コードをソルバーとして機能させる．有限要素法の概念とメッシュ化（プリ/ポスト処理）

- 有限要素法（Finite Element Method: FEM）とは，厳密に解くことができない工学的な問題を数値計算により解くための解析コアとなる計算方法の一つである．
- 構造力学分野で，構造物などの応力解析に発展し，現在では多様な分野に渡って拡がっている．放射線挙動解析においても，核熱連成分析として，注目されている．phitsでも，その応用展開が近年，進捗している．
- 3次元空間に作成した複雑な構成物（トポロジーもしくは，エンティティ-）を，そのままで計算（特に，応力解析や流体解析など）しようとしても計算できない．流体解析の場合は，空間全体をメッシュ化する．
- 有限要素法は，その構造物を小さな単純形状（節点をもつ要素，メッシュ）に分割し，そのそれぞれについて数式を立てる．
- それら数式をつなぎ合わせた連立方程式を解くことで，構造物全体の挙動を解析し再現する．
- 小さなメッシュ（要素）は節点を介して隣り合う要素と連結しているので，有限要素の解析はその節点間をバネで連結された形として考えて解析する．
- 放射線挙動解析の場合は，メッシュ化された物質情報とその位置（どのメッシュなのか）が分かれば良いので，基本的には，有限要素法解析前までのメッシュ化だけを応用している．



放射線挙動解析はここまで → ソルバーは，PHITS

構造力学や流体解析はここまで
ソルバーは，Nastran，HyperWorks CFD, AcuSolve, Adams, Actran，scFLOWほかが行う

CAD/CG, ソルバー，可視化ツールの連携作業によるワークフローの一般的な概念

- 工業標準では，CAD設計データをプリポスト処理を行い，それをスループットで，ソルバーに引き渡して，構造解析や流体解析などを実行する．
- ものによるが，ソフトウェア自体で，数百万から数千万規模の価格となる．

CAD/CG 作成，プリ処理 モデリング

装置の工学設計や人体構造の造形

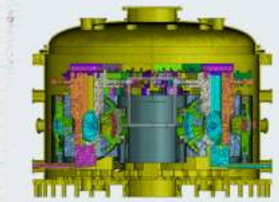
3D-CAD設計：AUTODESK Fusion SolidWorks, Inventor, CATIA, NX AutoCAD, FreeCAD, Rhinoceros, iCAD

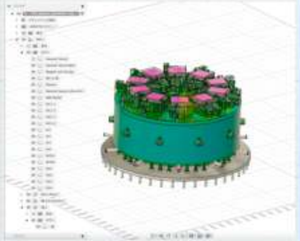
3D-CG：Blender, Maya, ZBrush

サーフェスメッシングからのボリューム/ソリッドメッシング

テトラメッシュからヘキサメッシュ（2.5次元メッシュ）

PHITSの縛り（ルール）を考慮して四面体構造メッシュ化





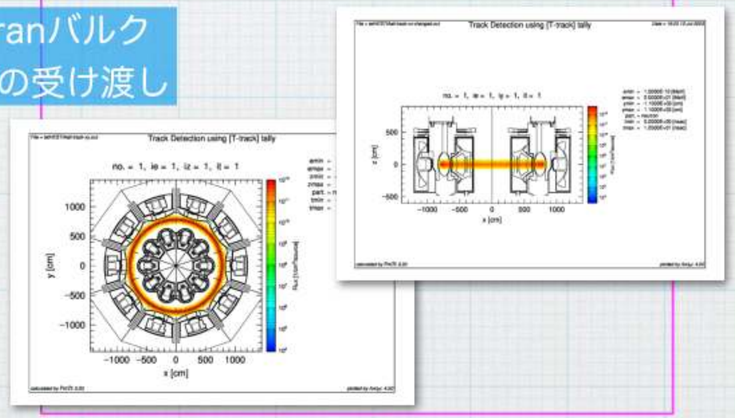
Nastranバルクデータの受け渡し

ソルバー

相互にカバーしている

構造解析や流体解析，電磁界解析：Ansys Fluent, Feko, Flux, HyperWorks，Simlab with CFD, HyperWorks CFD, AcuSolve

放射線解析のソルバーとしてPHITS, MCNPなどが担う



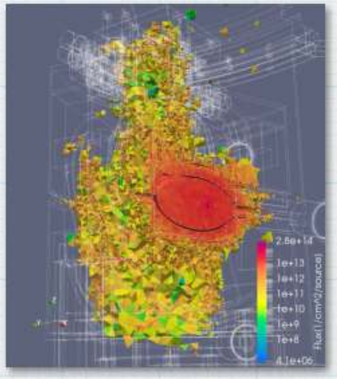
Nastranバルクデータやopenfoamデータの受け渡し

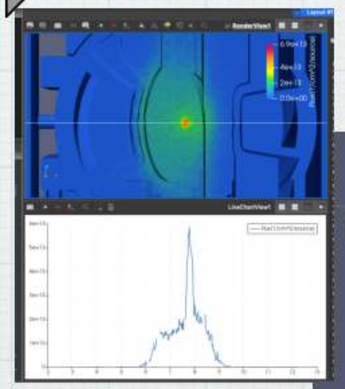
可視化ツール ポスト処理

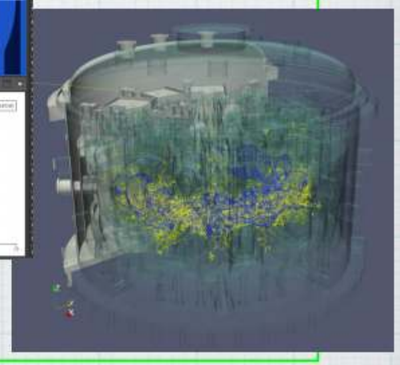
Paraview

科学技術系では有名

Phig3Dも

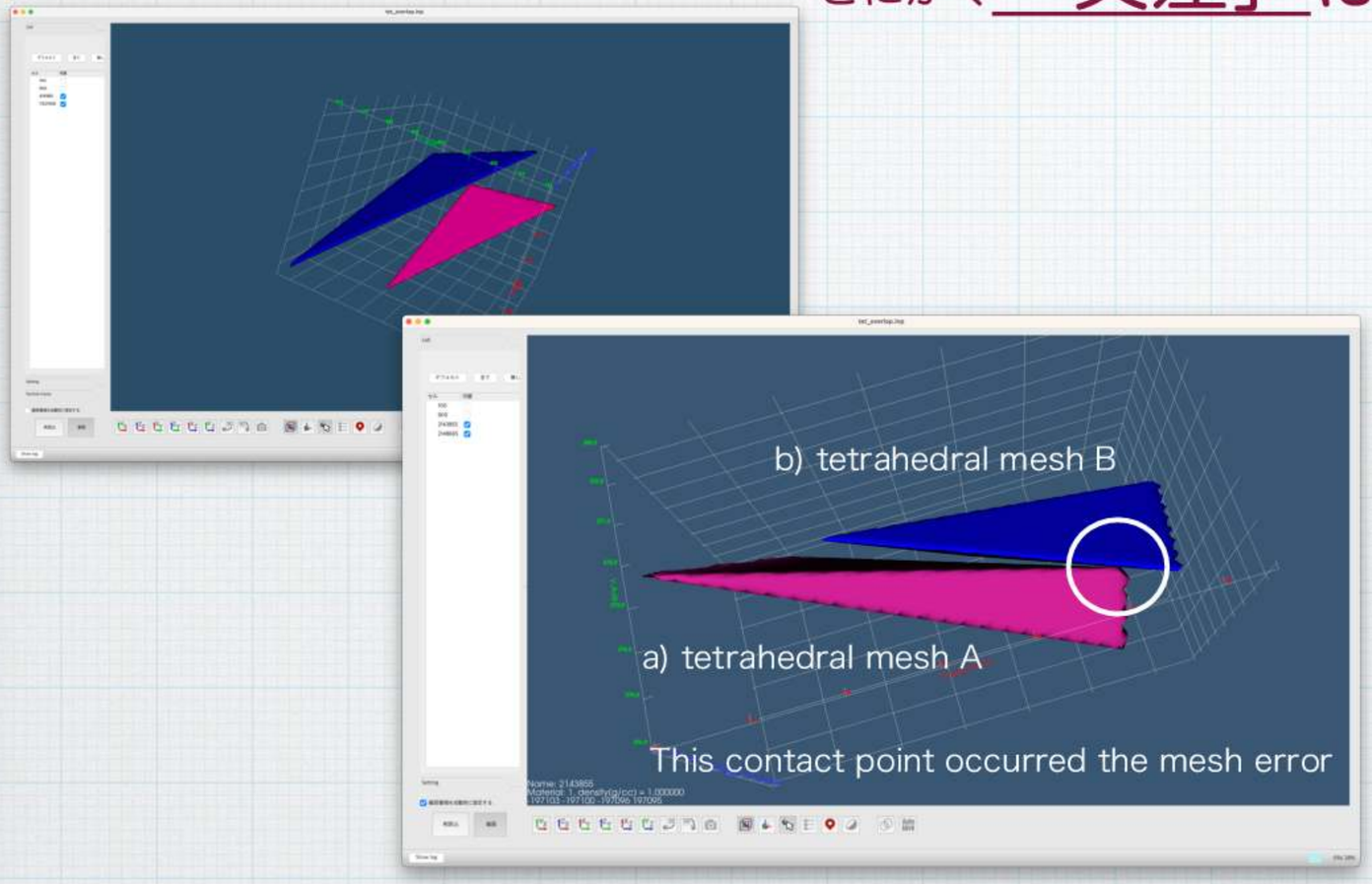






PHITS計算における厳格なポリゴンメッシュ（ソリッドメッシング）・tetメッシュへの条件

とにかく「交差」は厳禁！

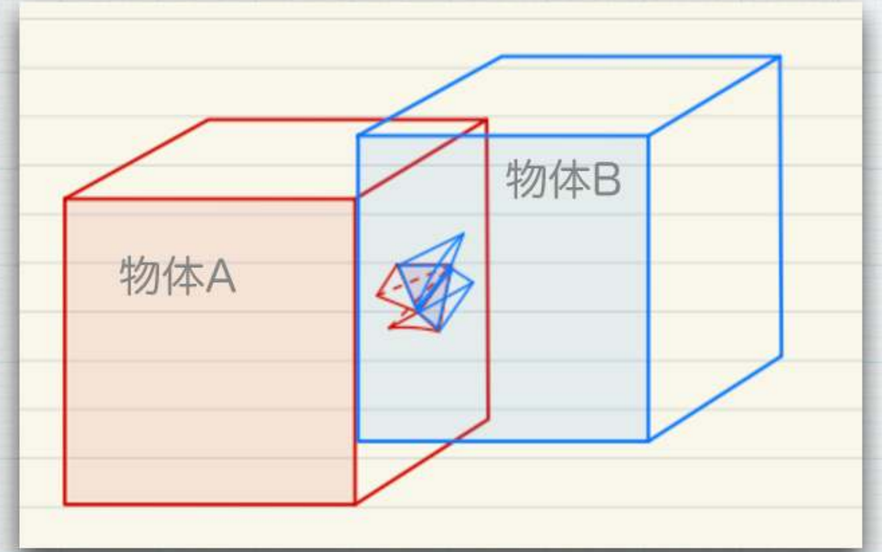


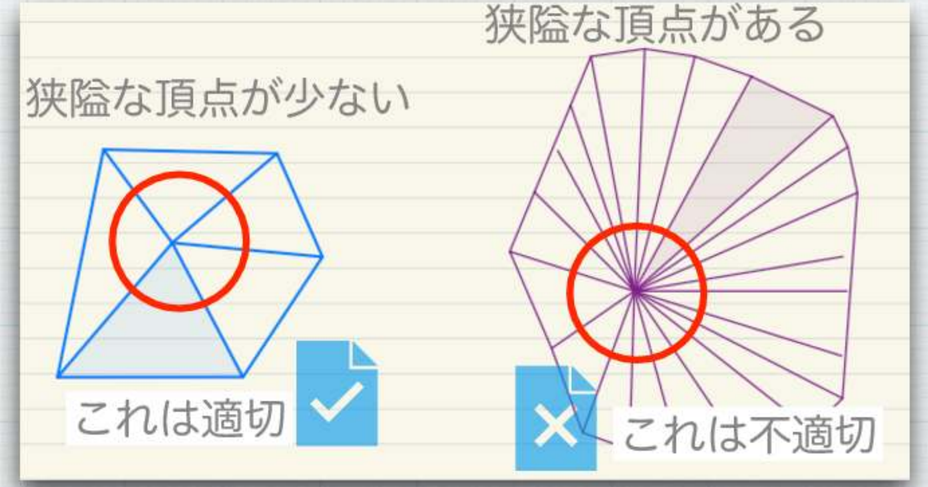

```
tmusakama@hsesyll:~/phits_sakama_work/all-fpp-corei7-2024apr27
$ /usr/local/phits333/bin/phits_MacIfort_OMP < 2024may16full-units-neu-fpp-gd.inp
TETRAHEDRAL-MESH GEOM. check has been started  by itgchk= 1
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  3920088 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  3929739 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  4113820 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  4116840 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  4118128 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  4213546 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  4353524 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  4379560 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  5522834 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  5522874 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR: intersection found in itet= 1 between
ielem =  5522875 jelem =  5522919
*** TETRA INTERSECTION ERROR more than 10 times. Omitted further report
*** TETRA GEOMETRY ERROR: tetrahedral-mesh geometry itet= 1 is not compatible
 icntl = 8: Draw geometry by gshow option

>>> Print Geometry Errors >>>
```

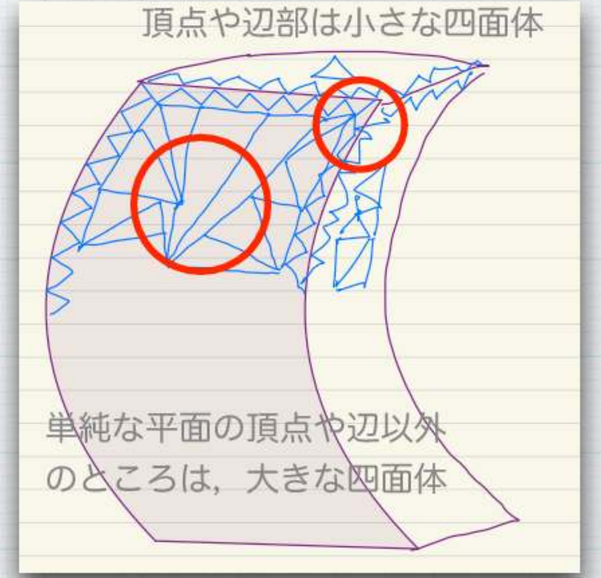
- PHITS計算において，ソリッドメッシングチェック機能がある．
- bdfファイル作成時までのエラー状況
- メッシングが上手くいっていないと，右のようなエラーが発出される．その後，phitsのアウトプットで，左のような一つ目の交差状況を確認することができる．

PHITS（放射線挙動解析全般にいえる）にとって効果的な（最適な）四面体構造メッシュ化メッシングの基本

- 接触している物体Aと物体Ｂの接触面は，四面体の一面で共有すること．
- 四面体の頂点vertexがあまり密集せずに，狭隘な頂点が存在しないことが望ましい．
- 四面体の頂点vertexが隣り合う他の四面体へ貫入（公差）が無いこと．
- 物体のサーフェスメッシングするときに，頂点vertexや辺edge付近では，小さな四面体で良いが，それ以外の単純な形状である平面faceでは，大きな四面体の一面で構成することが望ましく，内部成長率もしくは，Unstructured mesh率を上げることで，可能な限り少ない要素elementと節点node数とすることで，生成されるbdfファイルのファイルサイズを小さくすることが最善である．



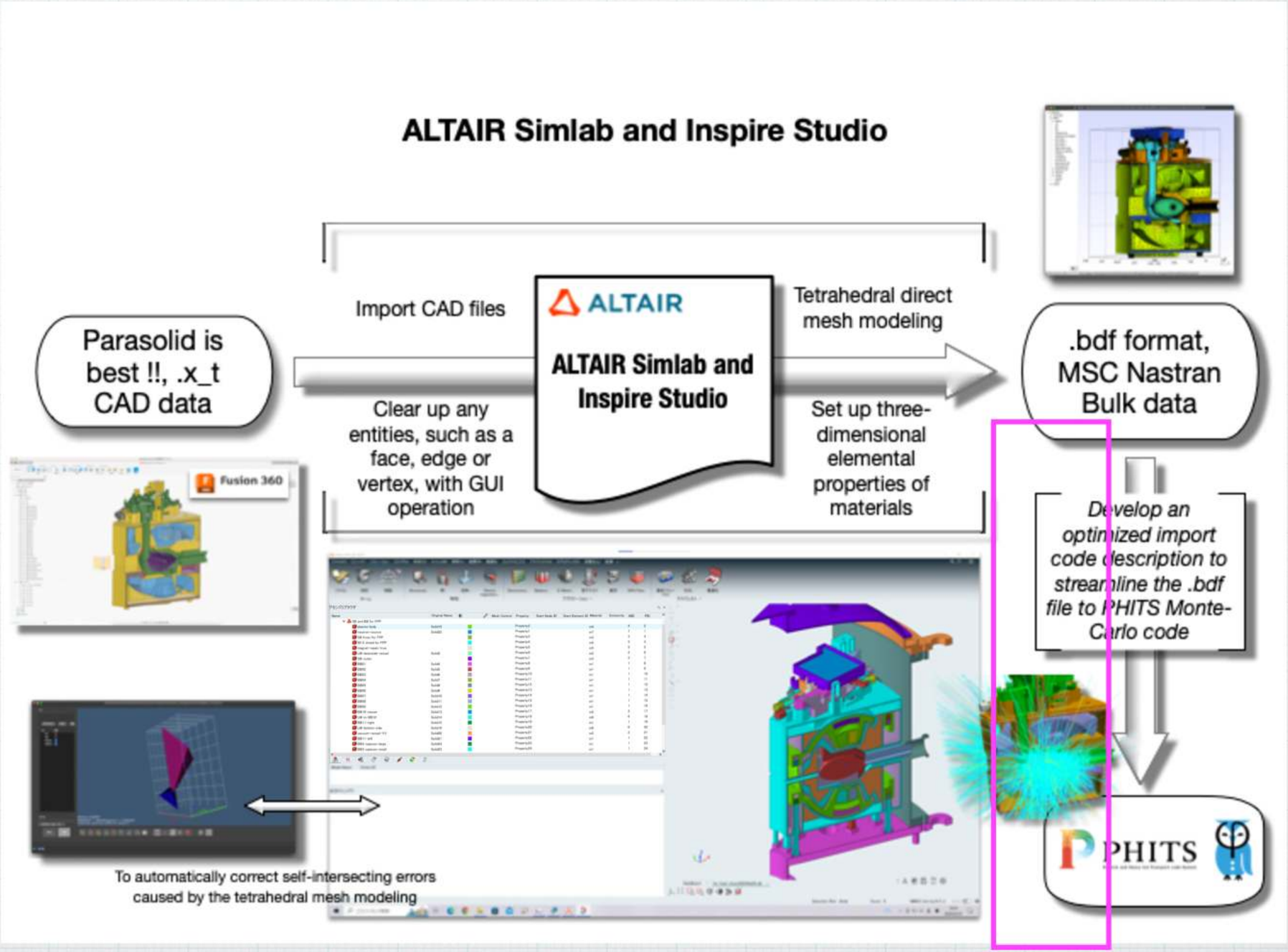


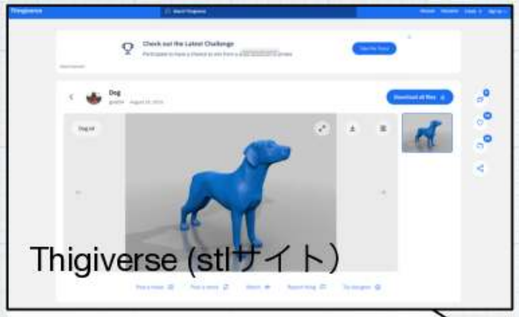


本研究で技術開発したソリッドメッシングモデリングワークフロー（メッシュ化プリポスト処理ワークフロー）

Altair社 Simlab/Inspire Studio

PHITSにおける Universe番号が, simlabのPID番号に相当する



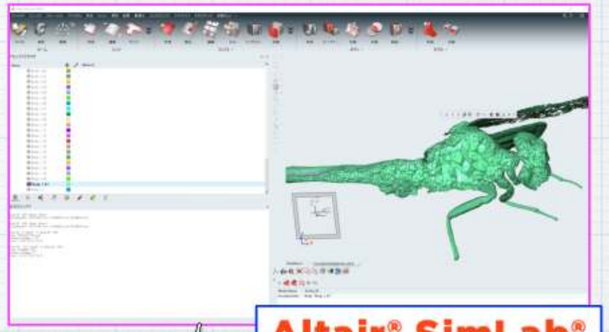


3Dデータ（サーフェスポリゴン）.stl

事前修正

サーフェスポリゴンデータ

ポリゴンメッシュ小さな三角形の集合体
ここで必ずメッシュの検証が必要.
1．クリーニング
2．スムージング
3，簡略化
4，デフィーチャ
5，穴埋め

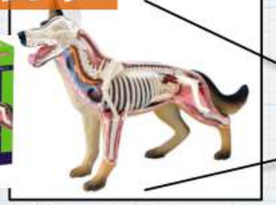


Altair® SimLab®

CG系

blender

リバースエンジニアリング

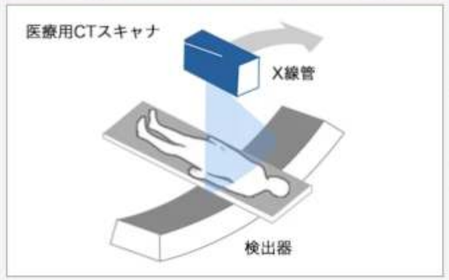


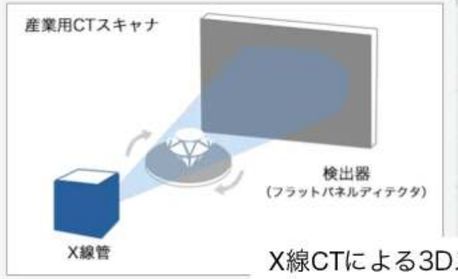
模型を使った光学式
3Dスキャナ（いわゆる測量）

Revopint MIRACO
3Dスキャナ

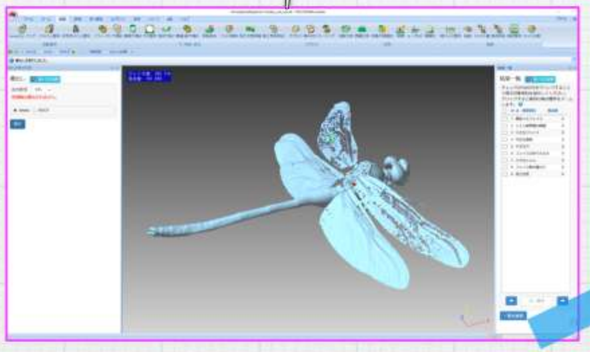
クリーニング，リメッシュ化，等の繰り返し，CTメッシュ成形，強力交差修正

ソリッドメッシング，.bdf生成，ここでは，主に





X線CTによる3Dスキャナ
内部構造までも再現できる

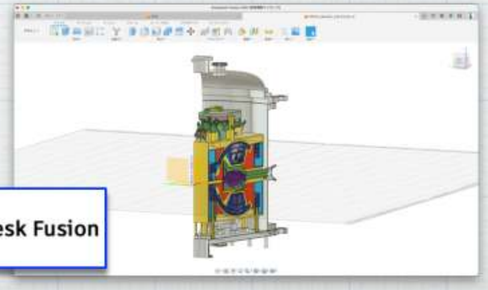


Polygonal meister

ソリッドボディ，中味が詰まったデータで，
1, デフィーチャ
2, 交差処理

ソリッドデータ

CAD系



Autodesk Fusion

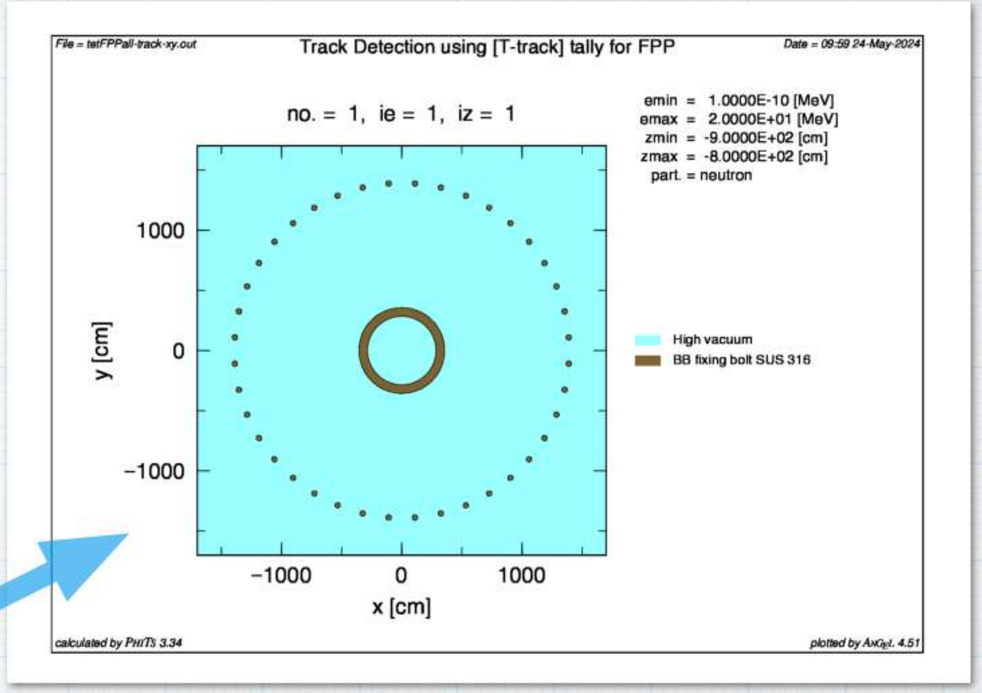
PHITS
Particle and Heavy Ion Transport code System

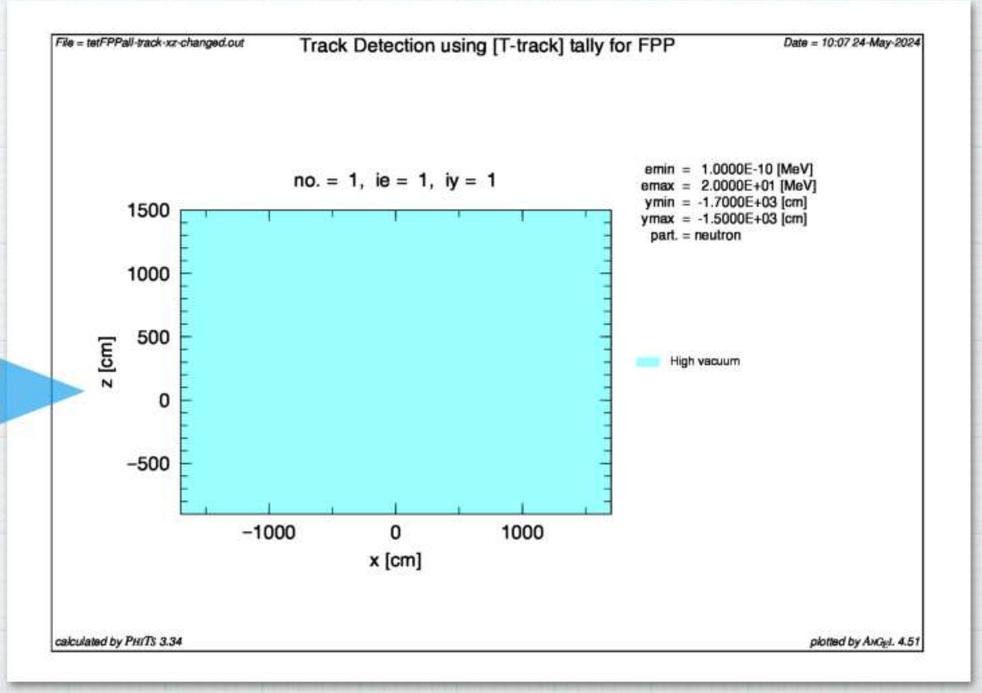
CAD設計とメッシング化したときに生じるメッシュ交差を修正！

Tokushima University

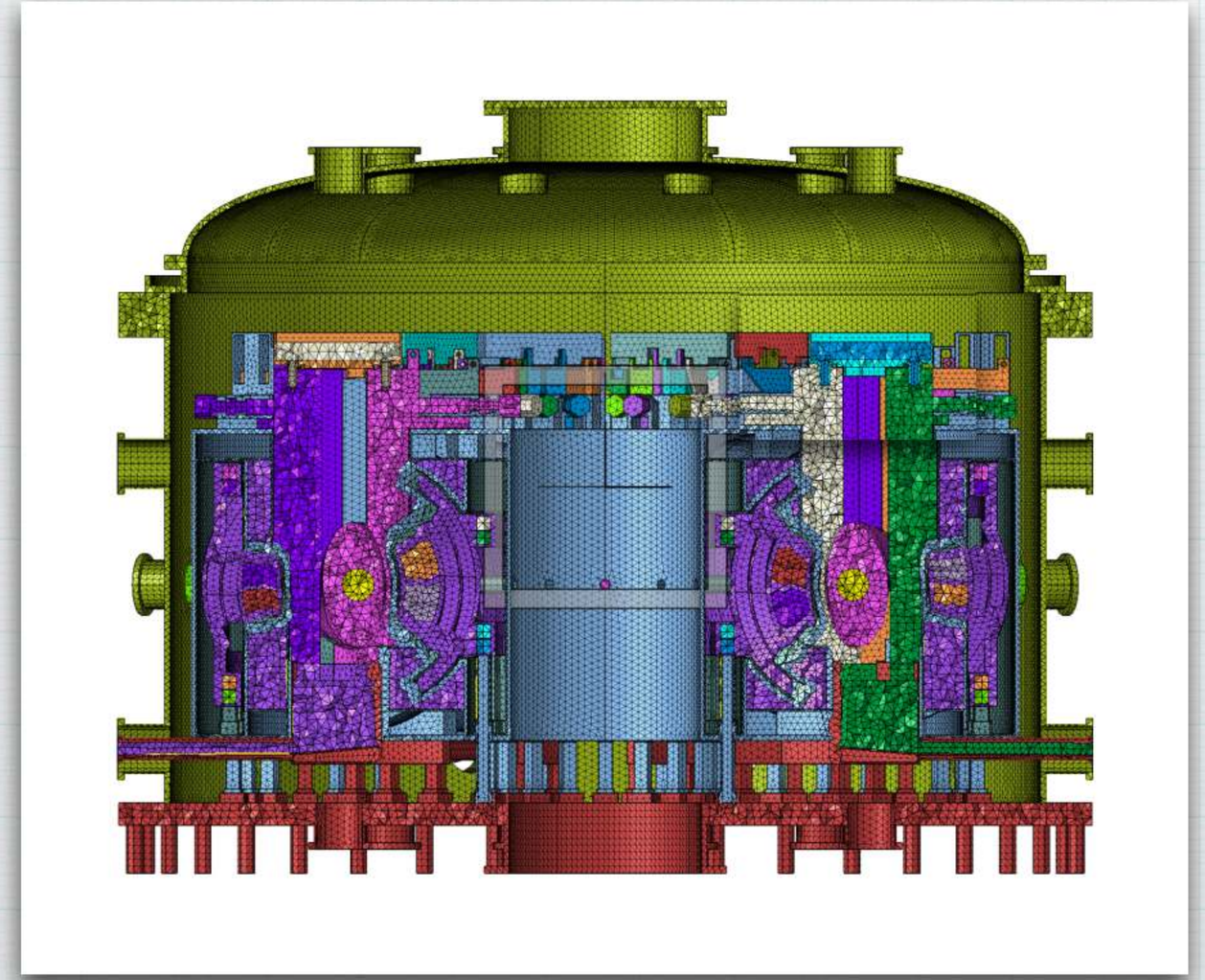
IV.　PHITS計算空間への複雑なトポロジー形状の取り込み事例

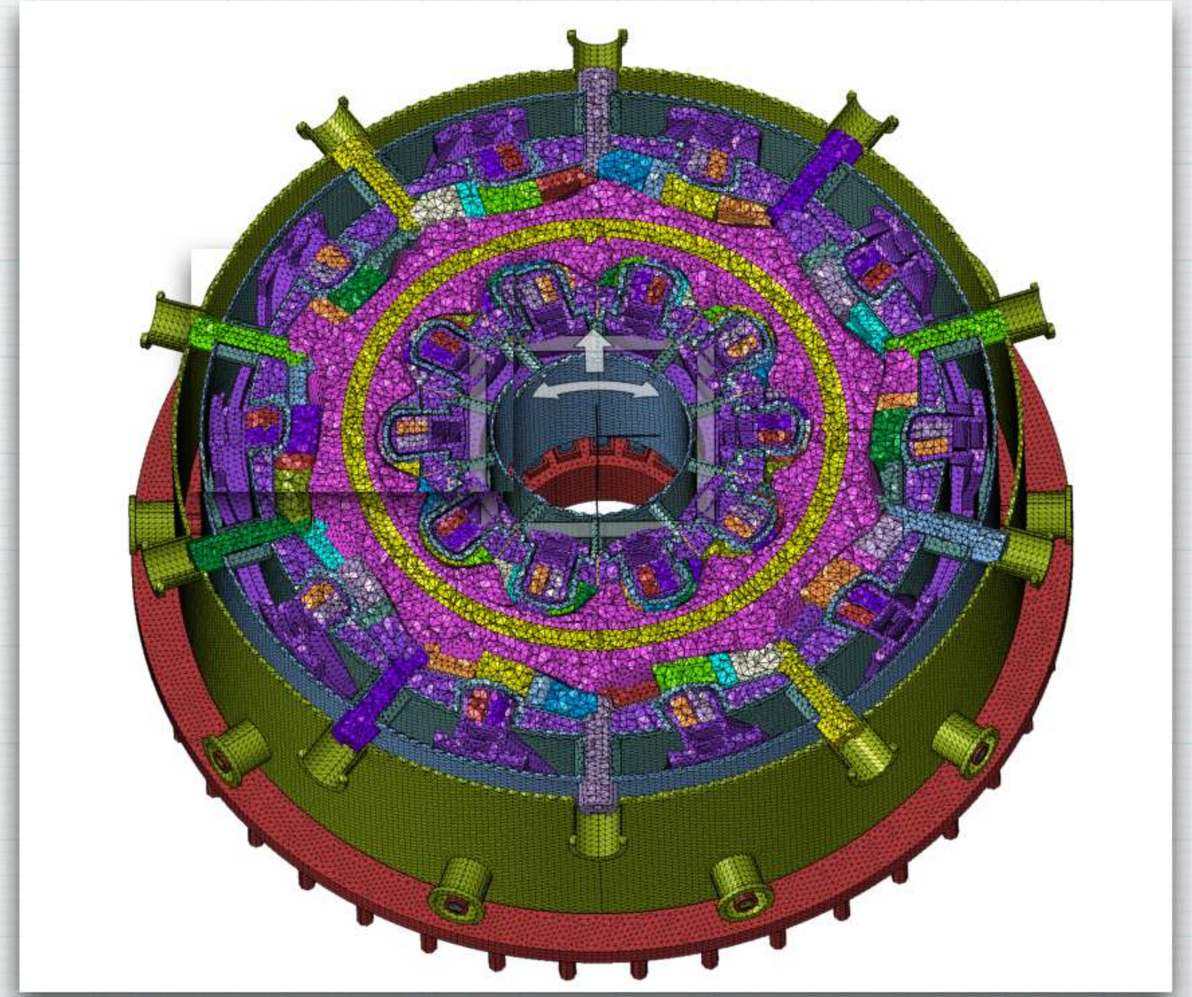
PHITSでのジオメトリー確認

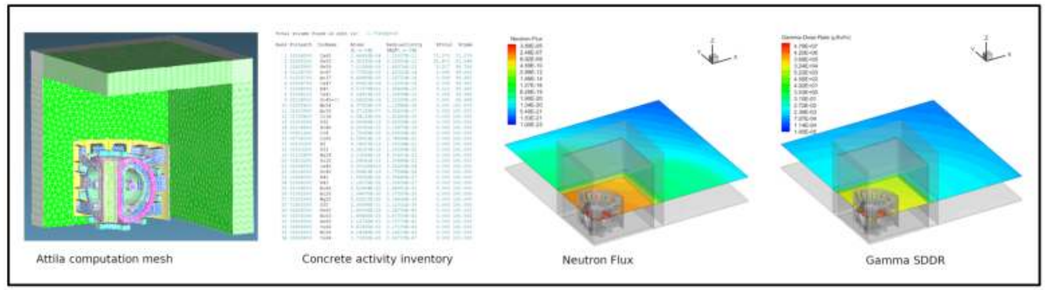




エラー発出することなく，本研究のプリポスト処理ワークフローで成功した大型ヘリカル核融合炉の四面体構造メッシュ化の状況



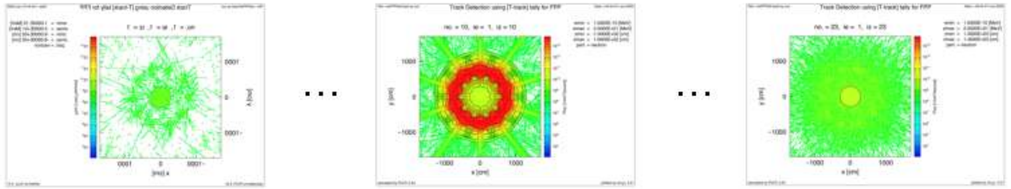




Attila4MC

https://www.silverfirsoftware.com/Pages/Products/Fornax.php

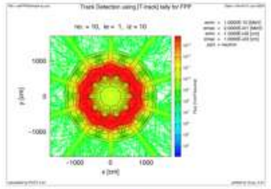
CAD —> SpaceClaim (mesh repair) —> MCNP at present and PHITS in future



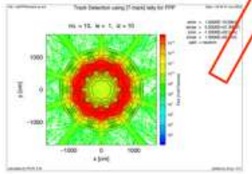
tetFPPall-track-xy.pdf

/Users/sakama13inch2018air/Library/CloudStorage/Dropbox/phits_jobs/all-fpp-corei7-2024apr27

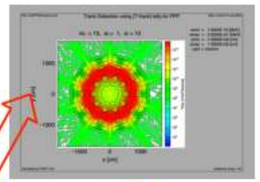
By pdf分割sakama



Save as .png by プレビュー



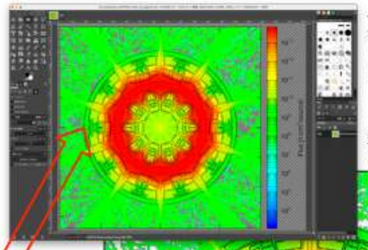
切り取り



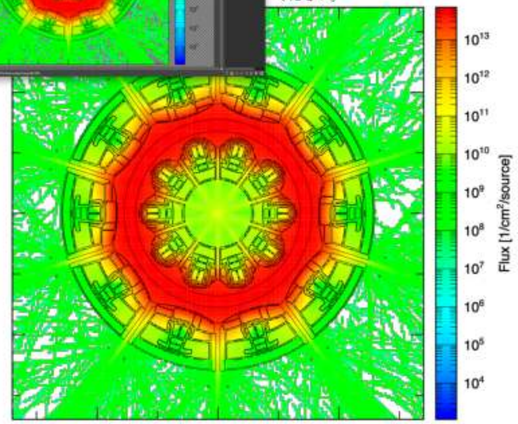
GIMPで白抜き

https://dreamina.capcut.com/ja-jp/resource/gimp-remove-background

まず、画像をGIMPにアップロードします。読み込んだら、レイヤーを右クリックして「アルファチャンネルを追加」をクリックします。これにより、背景が削除されたときに背景を透明にすることができます。



次に、ツールバーの「色で選択」ツールを選択します（またはキーボードの「Shift+O」を押します）。ツールオプションで「アンチエイリアシング」と「マスクの描画」が両方とも有効になっていることを確認してください。

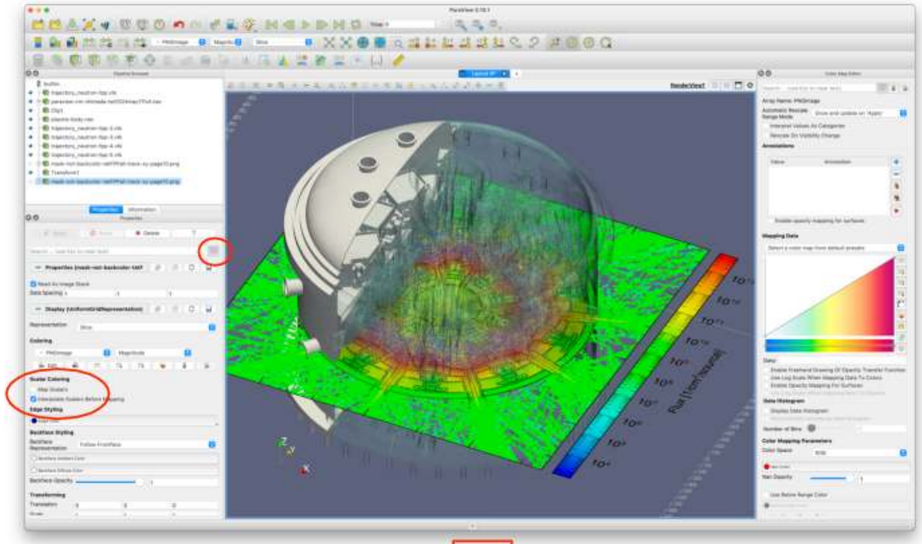


ParaView

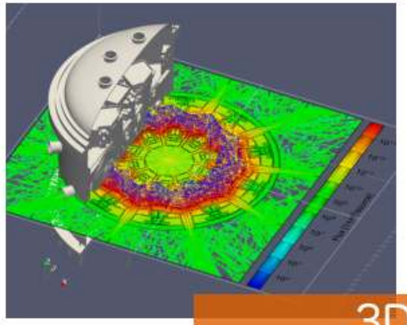
https://www.rccm.co.jp/icem/pukiwiki/index.php?画像ファイルの読み込み

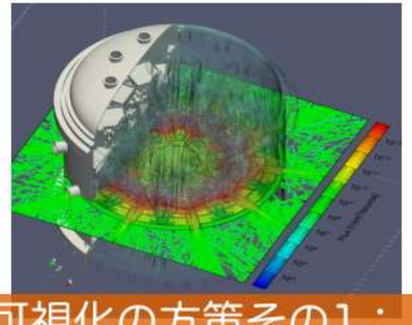
1) 画像png（左下の白抜き透明背景）を開く
2) 画像を読み込むと期待していたものとは違った描画になるかもしれません。
そのときは、Propertiesタブ内の右上にある歯車ボタン（"Advanced properties"ボタン）を押して、"Scalar Coloring"内の"Map Scalars"のチェックを外す

3) 画像の移動は、Transfom(filters —> alphabetical —> transform



ScreenShotでexport





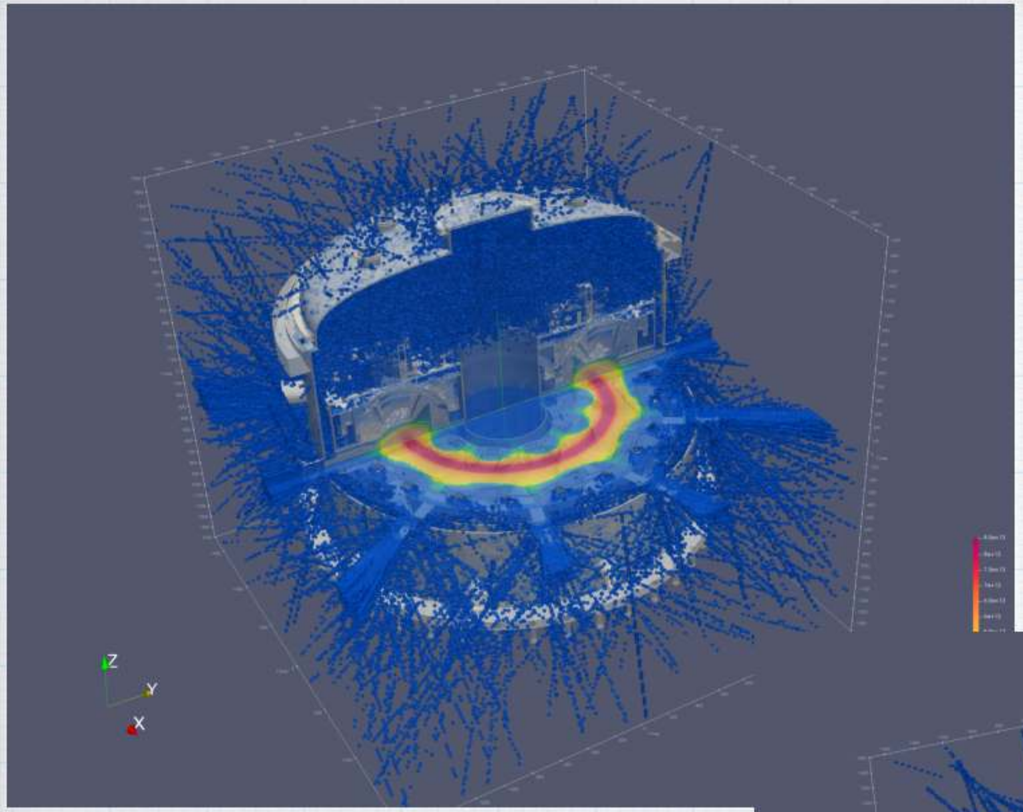
3D可視化の方策その1：
2Dマップ画像と3Dジオメトリーの融合

Tokushima

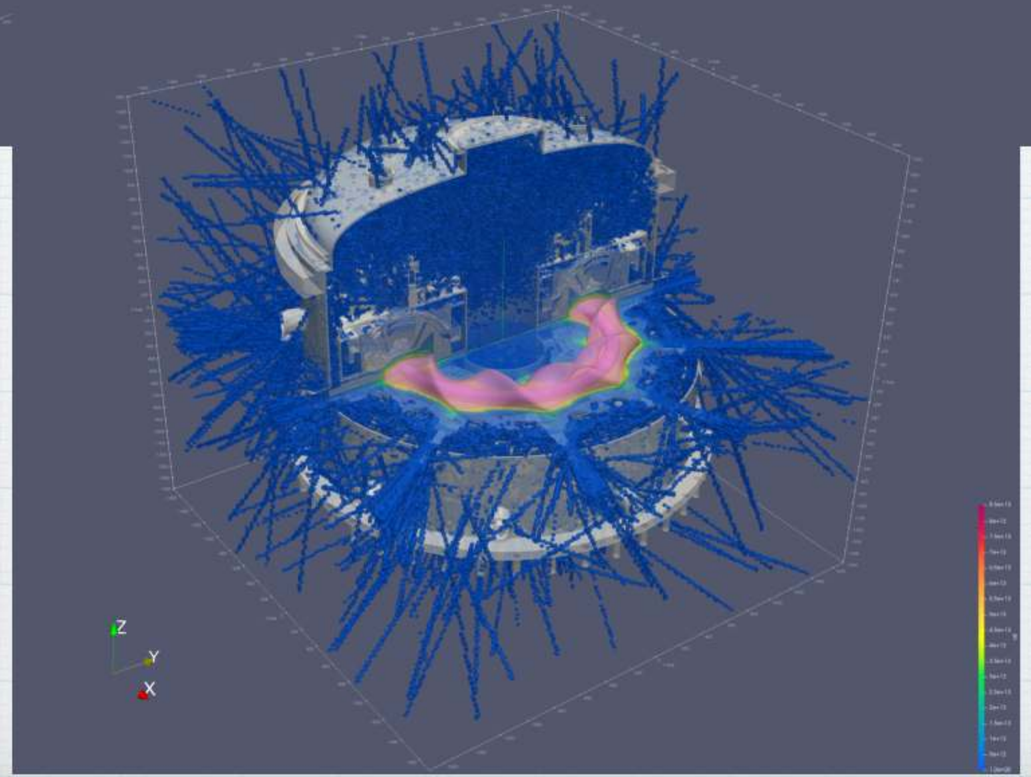
3次元可視化の方策その2：PHITSのvtk出力の利用（ポスト処理）

- その1の方策よりも手動による融合が無いので，可視化されている体系位置と中性子束の値の相関は正しい（精確）
- vtkの出力データを取得（phits計算）するための時間が長時間になってしまう．これは2次元表示データよりも3次元データを出力するために，どうしても輸送計算よりも長時間となってしまう．
- PHITSに限らず，モンテカルロ・シミュレーション計算は並列計算を実行できるが，描画出力するためのデータ（vtk出力）については並列計算していない．
- vtk出力の3次元分割数nx, ny, nzを過剰に大きくすることができないので，オブジェクトのジオメトリー体系（対象とするトポロジー形状）の解像度を上げることができない．そのため，ジオメトリー体系については，別途でstlやbdf(.nas) ファイルを読み込んで融合させる．
- ParaViewのポスト処理により，多様な解析が期待できる．例えば，任意の点における物理量（中性子束の値など）を瞬時に読み取ることができ，それをグラフ化することも容易にできる．

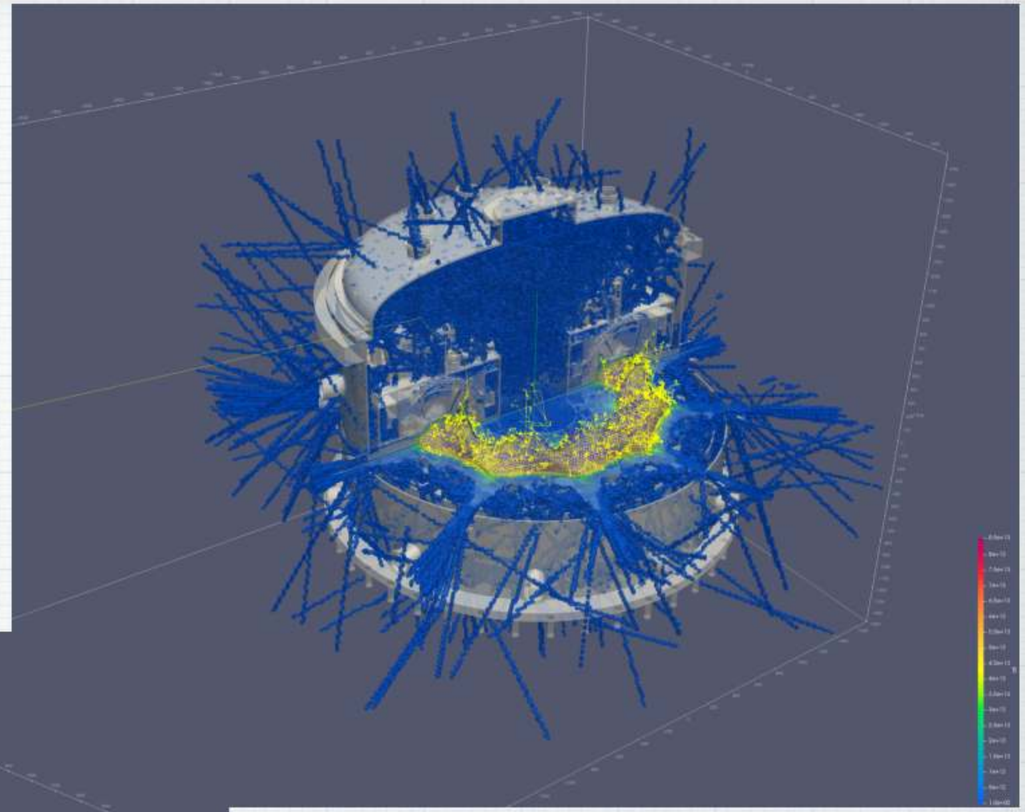
1e+7ヒストリーの
vtk出力



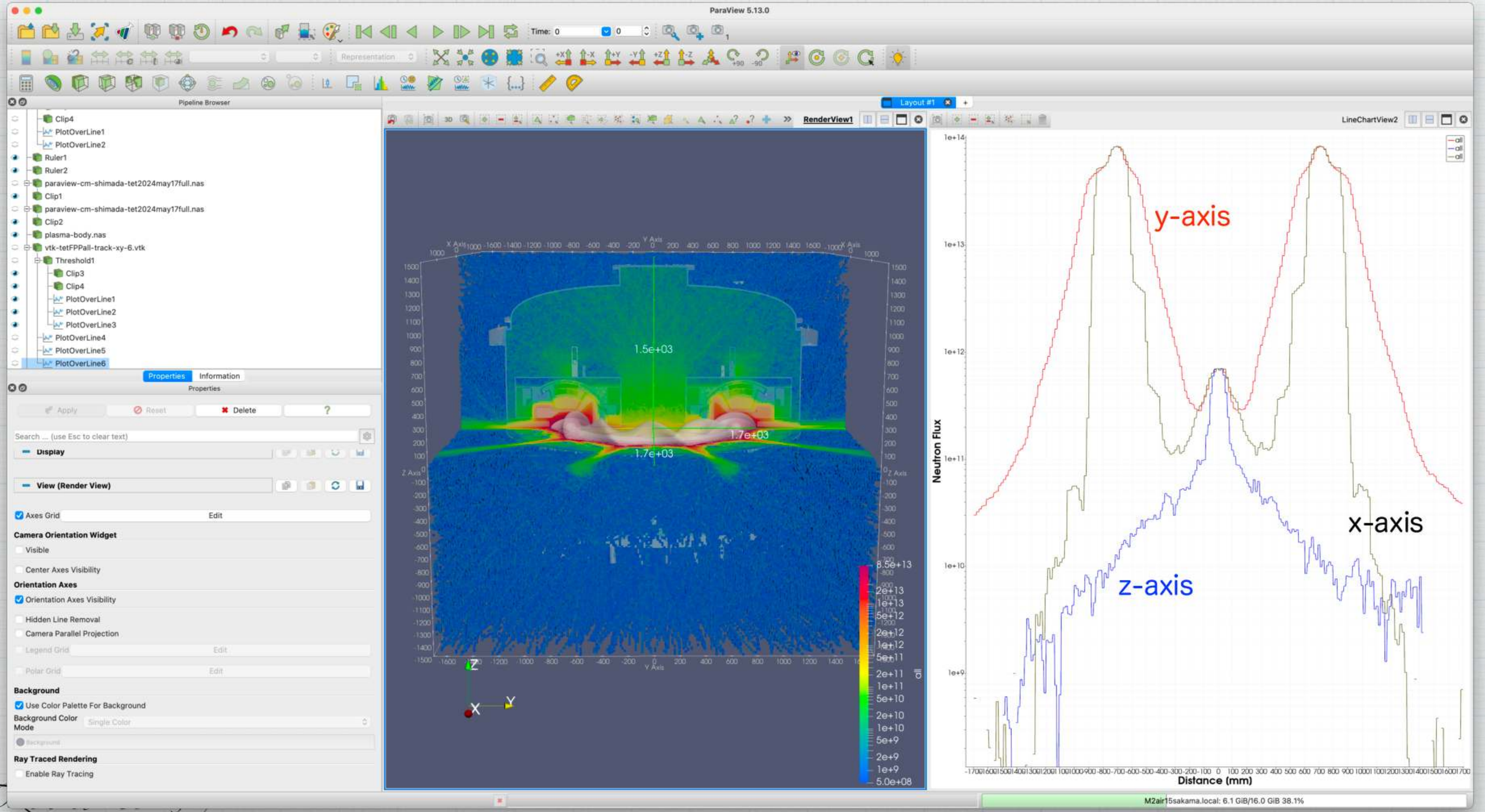
①Paraview上にて x 軸とz軸でクリッピング

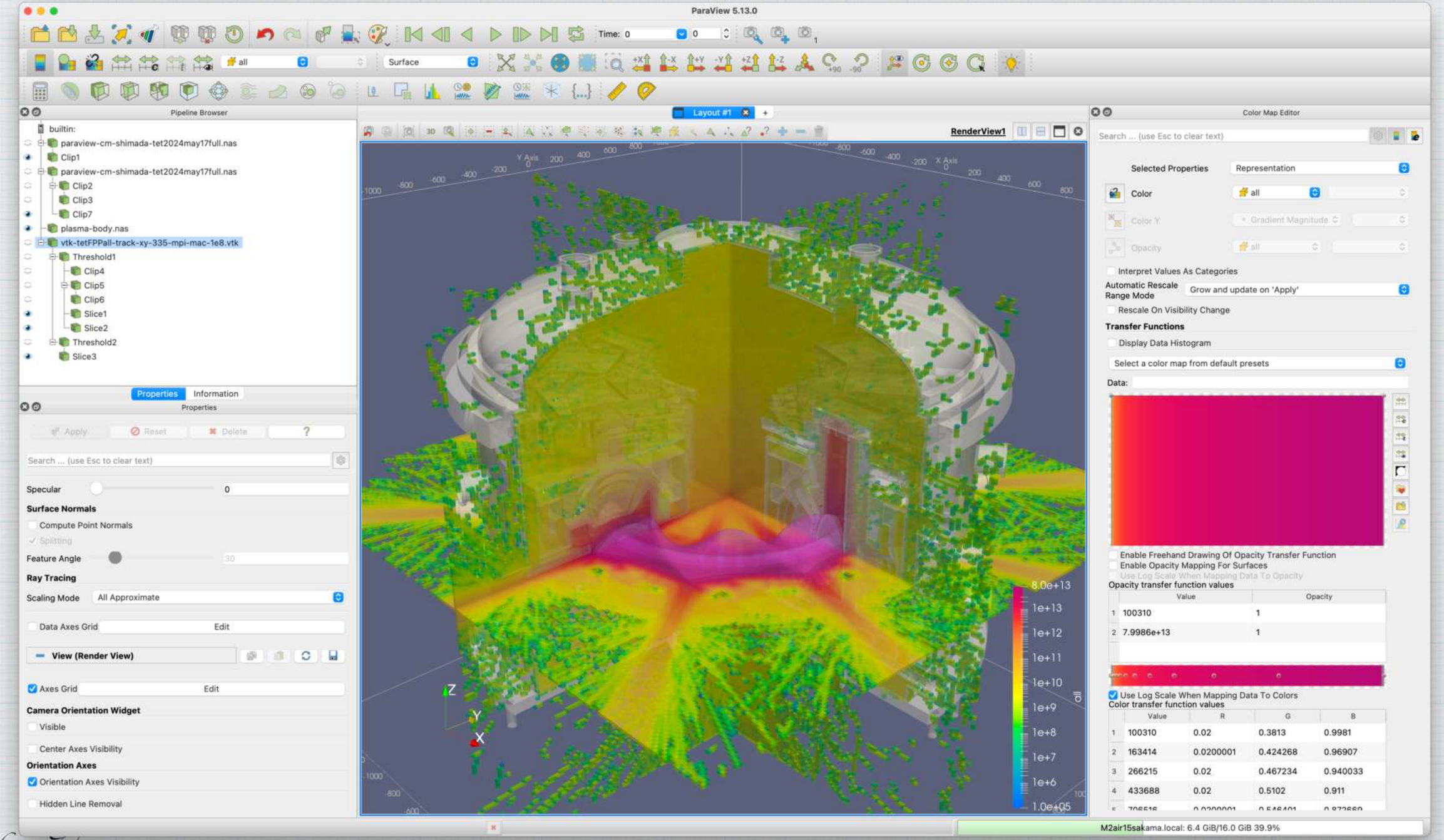


② プラズマ形状をインポート

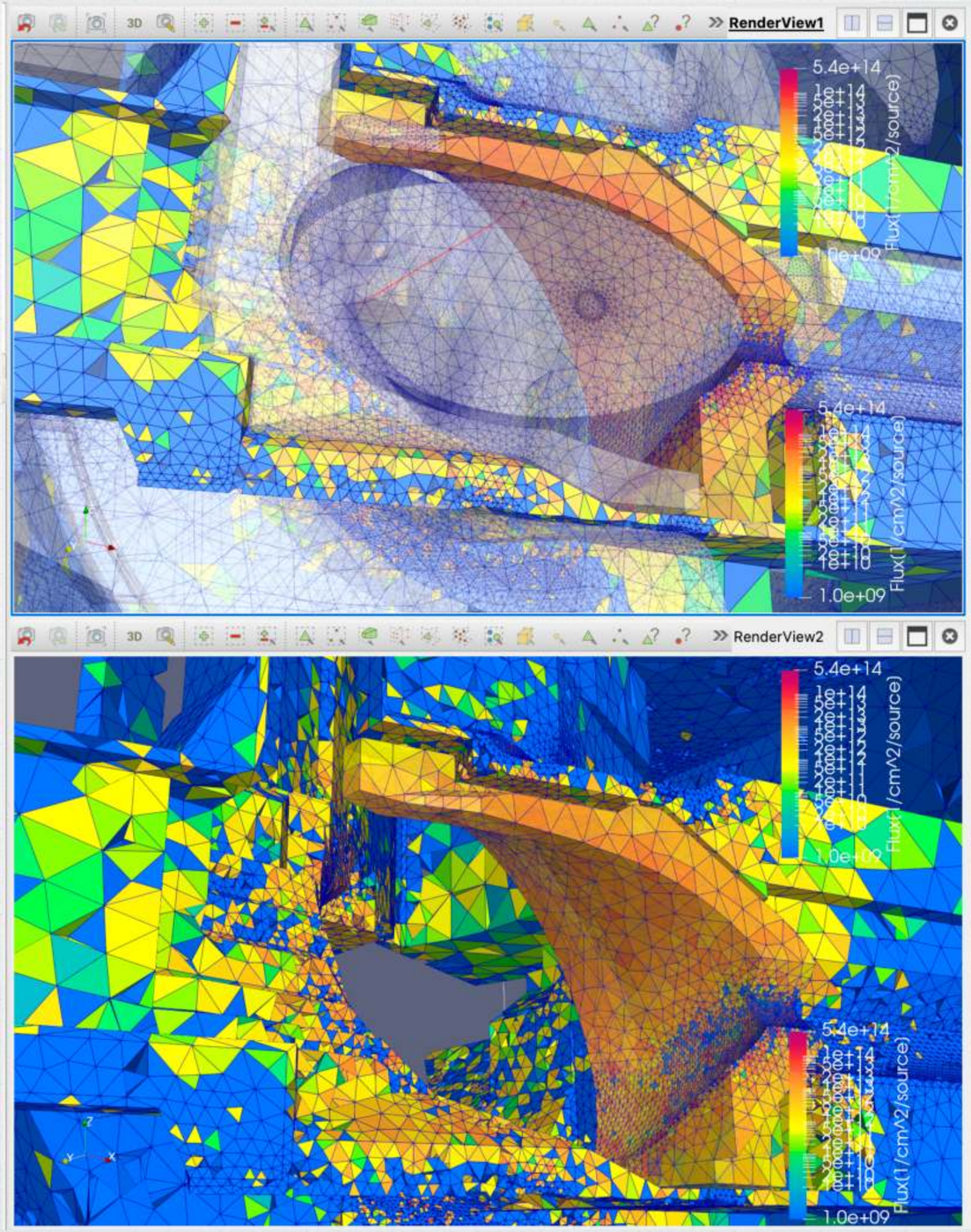


③ 中性子飛跡trajectoryの付加


ParaView 5.13.0
Pipeline Browser
Clip4
PlotOverLine1
PlotOverLine2
Ruler1
Ruler2
paraview-cm-shimada-tet2024may17full.nas
Clip1
paraview-cm-shimada-tet2024may17full.nas
Clip2
plasma-body.nas
vtk-tetFPPall-track-xy-6.vtk
Threshold1
Clip3
Clip4
PlotOverLine1
PlotOverLine2
PlotOverLine3
PlotOverLine4
PlotOverLine5
PlotOverLine6
Properties
Information
Apply
Reset
Delete
Display
View (Render View)
Axes Grid
Edit
Camera Orientation Widget
Visible
Center Axes Visibility
Orientation Axes
Orientation Axes Visibility
Hidden Line Removal
Camera Parallel Projection
Legend Grid
Polar Grid
Background
Use Color Palette For Background
Background Color Mode
Single Color
Ray Traced Rendering
Enable Ray Tracing
RenderView1
1.5e+03
1.7e+03
1.7e+03
8.5e+13
2e+13
1e+13
5e+12
2e+12
1e+12
5e+11
2e+11
1e+11
5e+10
2e+10
1e+10
5e+9
2e+9
1e+9
5.0e+08
LineChartView2
y-axis
x-axis
z-axis
Neutron Flux
Distance (mm)
M2air15sakama.local: 6.1 GiB/16.0 GiB 38.1%



Tokushima University



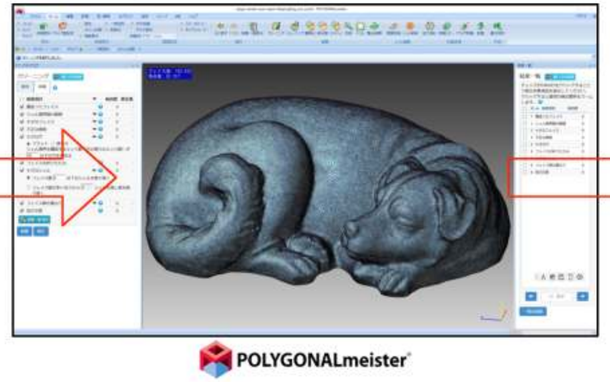
Discrete mappingの例

- PHITS OpenFOAM出力の利用
- 次世代ヘリカル核融合炉のブランケット部の中性子束分布

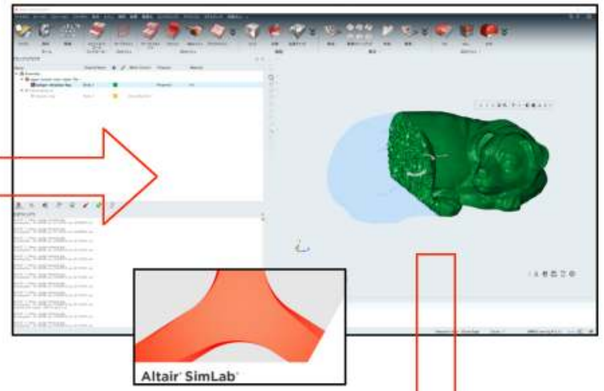
IV. PHITS計算空間への複雑なトポロジー形状の取り込み事例（メッシュモデルと通常のPHITS記述のモデンリングの融合も可能）

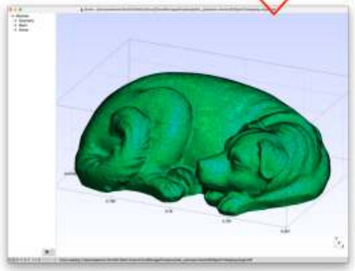
① 3Dスキャナーでリバースを想定した仮想3Dポリゴンデータ
ここで入力画像の1次チェック修正（座標位置など）：Sleeping-dog.stl

② ポリゴンエディタツールに不良な三角ポリゴンメッシュ綺麗な
メッシュへ，かつ孔空き，交差の修正等によるリメッシュを行う



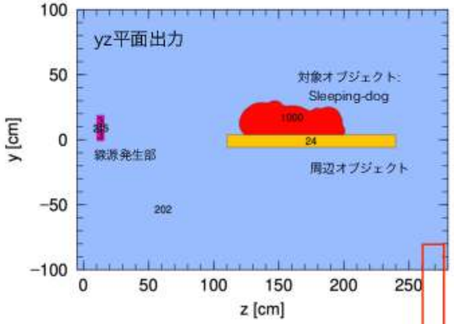
③ サーフェスメッシュ状況からソルバーにデータ連成するための
プリポスト処理ソリッドボリュームメッシングを行う.

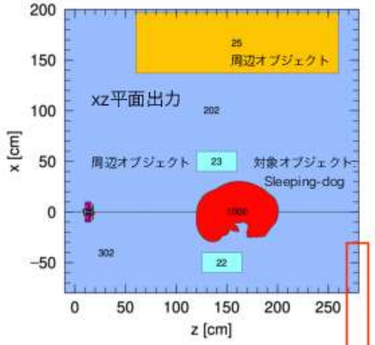


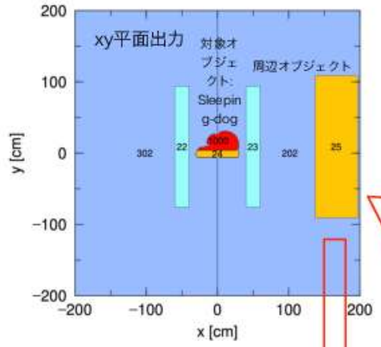


④ Nastran bulk data (.bdf file) の生成・確認
：sleeping-dog2.bdf.

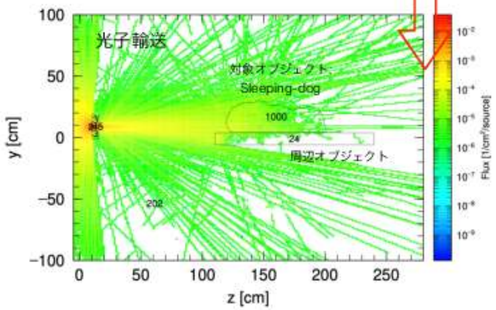
⑤ PHITSでのジオメトリー確認 icntl=8

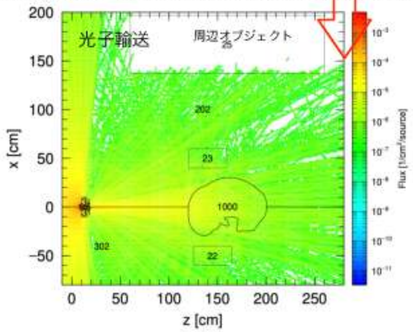


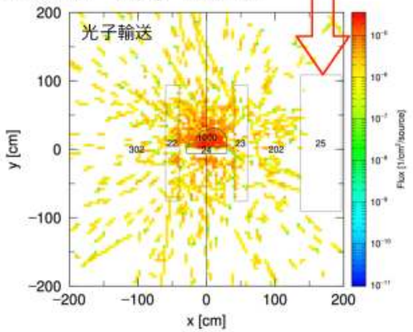




⑥ PHITS計算の実行（試験計算結果，電子線発生の光核反応による高エネルギーX線） icntl=0








```
[ C e l l ]
  1    3 -19.25    1 -2 -11    trcl=2 $ W_for_X-ray_generator
  2    4 -8.94     2 -3 -11    trcl=2 $ Cu_for_X-ray_generator
  3    5 -17.0     3 -4  11 -12  trcl=2 $ Collimator_with_hole
  4    1 -0.0012   3 -4 -11    trcl=2 $ Hole_in_the_collimator
  5    4 -8.94    -31          trcl=2 $ Flattening_filter
$  21    1 -1.0    -21                $ pet
  22    2 -1.0    -22   trcl=1        $ human1
  23    2 -1.0    -23   trcl=1        $ human2
  24    6 -7.85   -24   trcl=1        $ bed
  25    8 -7.85   -25   trcl=1        $ cabinet
$26    7 -2.4    -41 40               $ outside
$27    2 -0.0012   (5 -6 7 -8 9 -10)  $ inside
$28   -1                 #26 #27

  200   0                -100  #1 #2 #3 #4 #5 #22 #23 #24 #25   FILL=100
  201   0                -150  151   U=100   FILL=200
  202   1 -0.0012  -150    U=200   LAT=3   nfile=sleeping-dog2   TSFAC=10.0   $ pet_polygon
$$$$$
  301   0                -150  -151  U=100   FILL=300
  302   1 -0.0012  -150    U=300   LAT=3   nfile=sleeping-dog2   TSFAC=10.0   $ pet_polygon
$$$$$
  203  -1                100
$$$$$
 1000   9 -1.0      -90    U=1   $ tokugon_internal_material
$$$$$$$
```

⑤ PHITS放射線輸送計算コードへのコード記述による連成計算準備

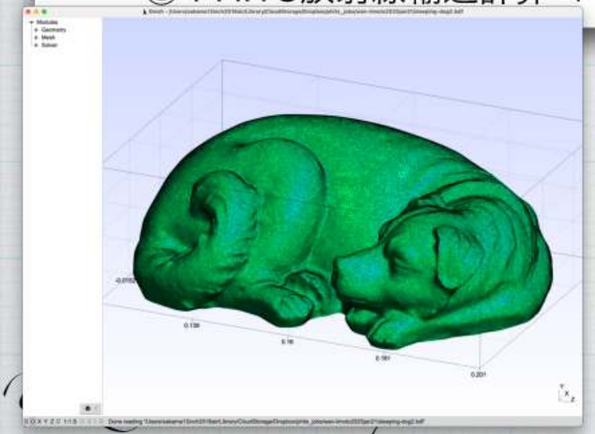
ポリゴンメッシュ（bdfファイル）とCSG法（PHITS記述によるジオメトリーモデリング）のinpファイル比較

ポリゴンメッシュ（bdfファイル）

Cell記述

```
[ C e l l ]
  1    3 -19.25    1 -2 -11    trcl=2 $ W for X-ray generator
  2    4 -8.94     2 -3 -11    trcl=2 $ Cu for X-ray generator
  3    5 -17.0     3 -4  11 -12  trcl=2 $ Collimator with hole
  4    1 -0.0012   3 -4 -11    trcl=2 $ Hole in the collimator
  5    4 -8.94   -31          trcl=2 $ Flattening filter
$  21   1 -1.0    -21          $ pet
  22   2 -1.0    -22   trcl=1        $ human1
  23   2 -1.0    -23   trcl=1        $ human2
  24   6 -7.85   -24   trcl=1         $ bed
  25   8 -7.85   -25   trcl=1        $ cabinet
 $26   7 -2.4    -41 40              $ outside
 $27   2 -0.0012   (5 -6 7 -8 9 -10)    $ inside
 $28   -1                #26 #27

  200   0          -100  #1 #2 #3 #4 #5 #22 #23 #24 #25   FILL=100
  201   0          -150  151   U=100   FILL=200
  202   1 -0.0012  -150    U=200   LAT=3   nfile=sleeping-dog2   TSFAC=10.0   $ pet polygon
$$$$$
  301   0          -150  -151  U=100   FILL=300
  302   1 -0.0012  -150    U=300   LAT=3   nfile=sleeping-dog2   TSFAC=10.0   $ pet polygon
$$$$$
  203  -1          100
$$$$$
 1000   9 -1.0     -90    U=1   $ toku
$$$$$$$
```

⑤ PHITS放射線輸送計算コー



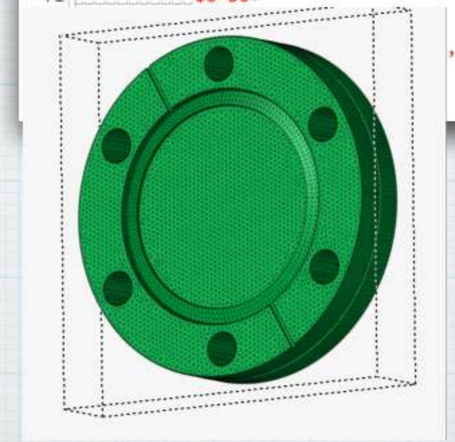
Surface記述

```
[ S u r f a c e ]
set:c1[50.0] $ size of pet1
set:c2[10.0] $ size of pet2
set:c3[170.0] $ size of human1
set:c4[40.0] $ size of human2
set:c5[200.0] $ size of cabinet1
set:c6[60.0] $ size of cabinet2
set:c7[130.0] $ size of bed1
set:c8[60.0] $ size of bed2
set:c9[10.0] $ size of bed3
set:c10[80.0] $ size of bed4
$ 90  box -1000 -1000 -1000 2000 0 0 0 2000 0 0 0 2000

 1  pz  -1.0
 2  pz  -0.9
 3  pz   0.0
 4  pz   6.0
11  cz   1.0
12  cz  10.0
31  trc   0.0 0.0  8.0   0.0 0.0 -1.5   8.0  0.1
40  rpp -197.6 197.6 -197.6 197.6 2.4 397.6
41  rpp -200 200 -200 200 0 400

 21  rpp  -c2/2 c2/2  -c2/2 c2/2    170 170+c1   $pet area outside sakama
 22  rpp  -c8/2-c4/2-10 -c8/2-10 -c3/2 c3/2    165 165+c4   $human1
 23  rpp  c8/2+10 c8/2+10+c4/2  -c3/2 c3/2    160 160+c4   $human2
 24  rpp  -c8/2 c8/2  -c2/2-c9 -c2/2    150  150+c7   $bed
 25  rpp  200-c6-3 200-3  -c5/2 c5/2    100 300   $cabinet
 26  rpp  -(c2-0.1)/2 (c2-0.1)/2  -(c2-0.1)/2 (c2-0.1)/2    (170+0.1) (170+c1-0.1)   $pet area inside sakama
$30  rpp  -1 1 -1 1 83 85

$$$$$$$$$$ Nastran cell below $$$$$$$$$$$$$$$$$$
 100  so   1000.0
 150  rpp  -3000.0  3000.0    -3000.0  3000.0     -3000.0   3000.0
 151  px    0.0
 152  px   -35.0
 153  px    40.0

 90  so  10000.0
```

CSG法

Cell記述

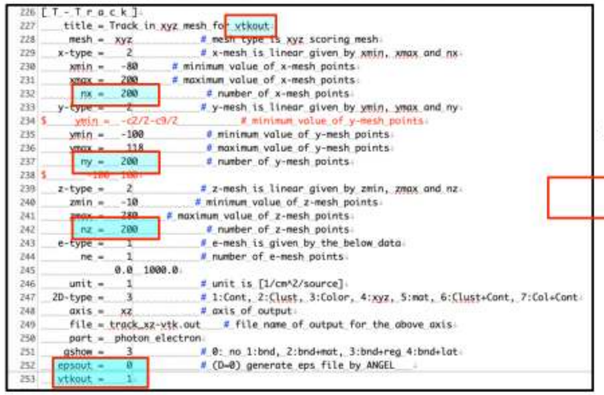
```
$ ##########################################################
$                    CELL DEFINITION
$ ##########################################################
$
[CELL]
12001 1 -7.0          -12001 12014 12015 12016 12017 12018 -12013 12019 12002:
            -12004 -12020 12014 12015 12016 12017 12018 12019 12021 12003:-12005
            -12020 12014 12015 12016 12017 12018 12019 12021 12004:-12003 12041
            -12020 12014 12015 12016 12017 12018 12019 12021 12001:-12023 12042
            12003 12022:12024 -12022 12043 12003:-12023 -12021 -12003 12001:
            12025 -12021 12044 12023:-12026 -12011 (-12045:12046):-12026 12012
            (-12046:12047):-12027:-12028 -12011:12012 -12028:-12029:-12030:
            -12031:-12032:-12033:-12034:-12035:12030 12028 12005 12026 12052
            -12009 12021 -12011 12051 12050 12018 12016 12048 12015 -12020 12036
            12033 (12049:-12045):-12036:12034 12037 -12020 12054 12055 -12009
            12056 12057 12005 -12053 12012 12014 -12048 12017 12019 12021 12026
            12028 12031:-12037:-12038:-12039:12032 12035 12038 12039 12040
            -12020 12010 12059 12060 12061 12062 12063 12064 -12002 -12058 12014
            12015 12016 12017 12018 12019 12027 12029:-12040
$            Vol=4.381038e+01 cm3
            $U=50
            $/330.ICFフランジ_きり穴/SOLI
$
$ ##################################
$                VOID CELLS
$ ##################################
$
12003 0          -12071 #12001
$            Vol=1.0 cm3
            $U=50
```



Surface記述

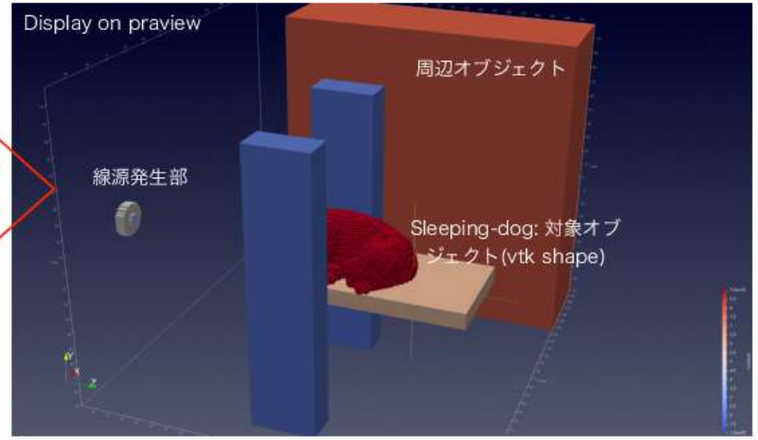
```
$
$ ##########################################################
$                  SURFACE DEFINITION
$ ##########################################################
$
[SURFACE]
12001  PY   6.8500000e-01
12002  PY   5.8500000e-01
12003  PY   1.1500000e+00
12004  PY   1.2150000e+00
12005  PY   1.2200000e+00
12006  PY   1.1270925e+00
12007  PY   1.1700000e+00
12008  PY   1.0985295e+00
12009  PY   1.2700000e+00
12010  PY   9.8607613e-33
12011  P    5.0000000e-01 -0.0000000e+00  8.6602540e-01 -5.0000000e-02
12012  P    5.0000000e-01  5.0299285e-19  8.6602540e-01  5.0000000e-02
12013  CY      3.450000
12014  C/Y    -1.467500      2.541785      0.340000
12015  C/Y    -2.935000     -0.000000      0.340000
12016  C/Y    -1.467500     -2.541785      0.340000
12017  C/Y     1.467500      2.541785      0.340000
12018  C/Y     1.467500     -2.541785      0.340000
12019  C/Y     2.935000      0.000000      0.340000
12020  C/Y     0.000000      0.000000      3.500000
12021  C/Y     0.000000      0.000000      2.415000
12022  C/Y     0.000000      0.000000      2.095000
12023  K/Y   0.000000e+00  1.977518e+00  4.120600e-16  7.548632e+00 -1
12024  TY   0.0000000e+00  1.1700000e+00  2.4379563e-16
            2.0750000e+00  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12025  TY   0.0000000e+00  1.1270925e+00  2.3485489e-16
            2.3950000e+00  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12026  TY   0.0000000e+00  1.2500000e+00  2.6046542e-16
            3.4800000e+00  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12027  TY   0.0000000e+00  2.0000000e-02  4.1674467e-18
            3.4800000e+00  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12028  TY   0.0000000e+00  1.2500000e+00  2.6046542e-16
            2.4350000e+00  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12029  TY  -1.4675000e+00  2.0000000e-02  2.5417846e+00
            3.6000000e-01  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12030  TY   1.4675000e+00  2.0000000e-02  2.5417846e+00
            3.6000000e-01  2.0000000e-02  2.0000000e-02
12031  TY  -1.4675000e+00  1.2500000e+00  2.5417846e+00
            3.6000000e-01  2.0000000e-02  2.0000000e-02
```

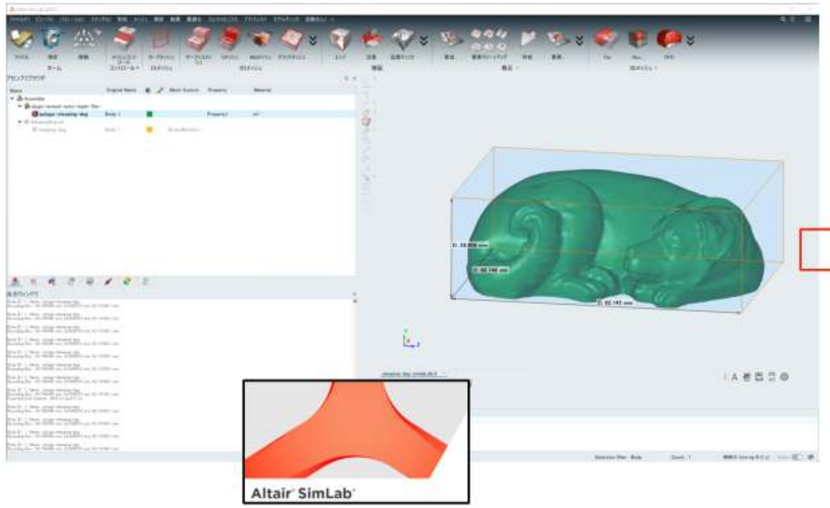
下段に膨大な行が続く



```
[T-Track]
    title = Track in xyz mesh for vtkout
     mesh =  xyz            # mesh type is xyz scoring mesh
   x-type =    2            # x-mesh is linear given by xmin, xmax and nx
     xmin =  -80        # minimum value of x-mesh points
     xmax =   200        # maximum value of x-mesh points
       nx =   200            # number of x-mesh points
   y-type =    2            # y-mesh is linear given by ymin, ymax and ny
$    ymin =  -C2/2-c9/2          # minimum value of y-mesh points
     ymin =  -100            # minimum value of y-mesh points
     ymax =   118            # maximum value of y-mesh points
       ny =   200            # number of y-mesh points
$                  100
   z-type =    2            # z-mesh is linear given by zmin, zmax and nz
     zmin =  -10          # minimum value of z-mesh points
     zmax =   280        # maximum value of z-mesh points
       nz =   200            # number of z-mesh points
   e-type =    1            # e-mesh is given by the below data
       ne =    1            # number of e-mesh points
              0.0  1000.0
     unit =    1            # unit is [1/cm^2/source]
  2D-type =    3            # 1:Cont, 2:Clust, 3:Color, 4:xyz, 5:mat, 6:Clust+Cont, 7:Col+Cont
     axis =   xz            # axis of output
     file = track_xz-vtk.out    # file name of output for the above axis
     part =  photon electron
    gshow =    3            # 0: no 1:bnd, 2:bnd+mat, 3:bnd+reg 4:bnd+lat
   epsout =    0            # (D=0) generate eps file by ANGEL
   vtkout =    1
```

phitsのvtkoutによる出力
のまま

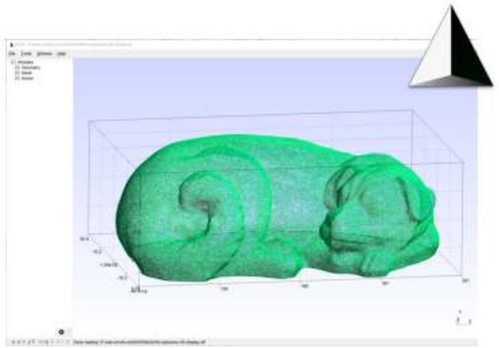




アルテアエンジニアリングのSimlabによる
stlの出力と上記のvtkoutのフュージョン図

stl出力

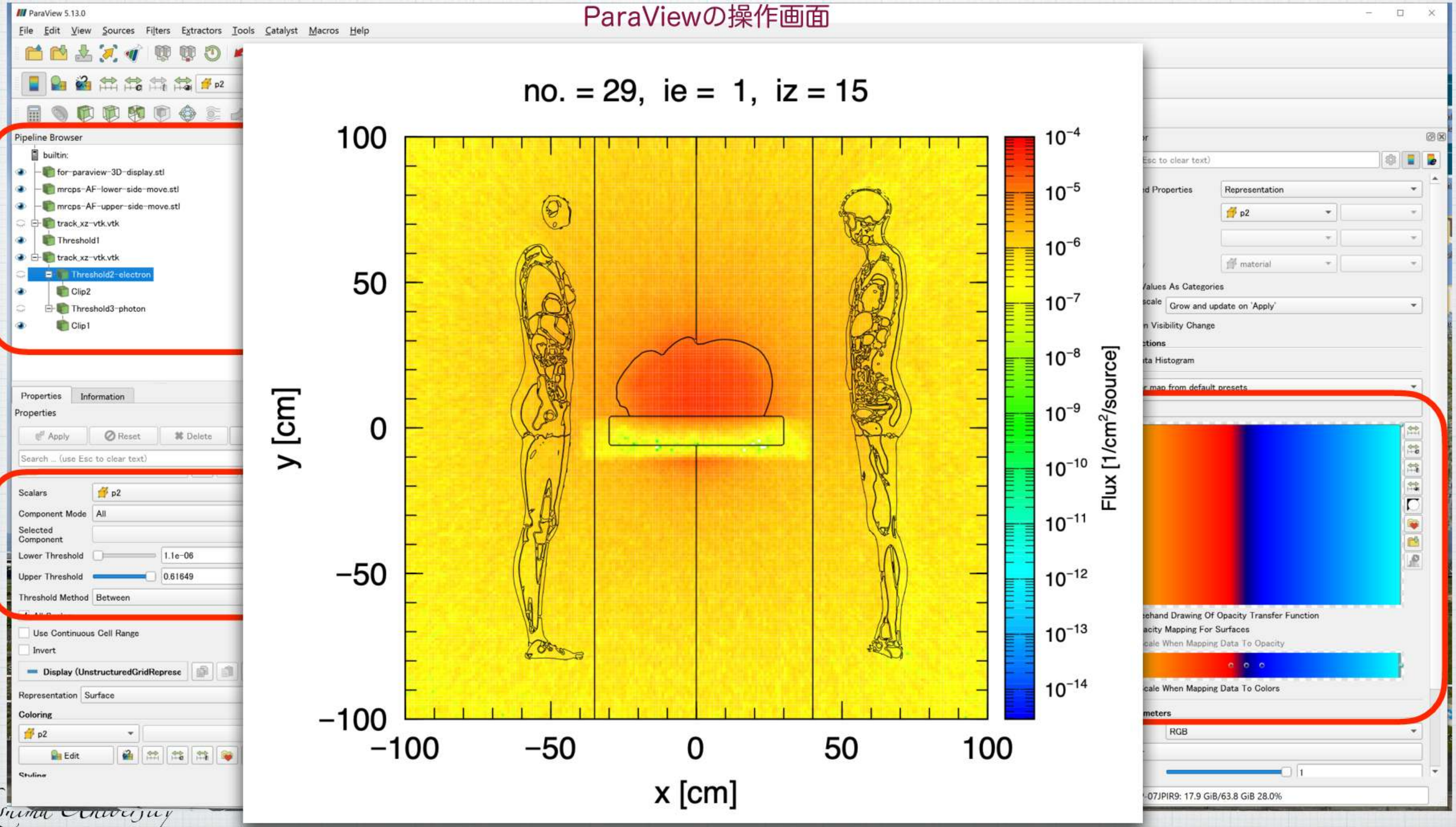
Paraview上でmat=9（dog）に対して,
thresholdをオン・オフしている



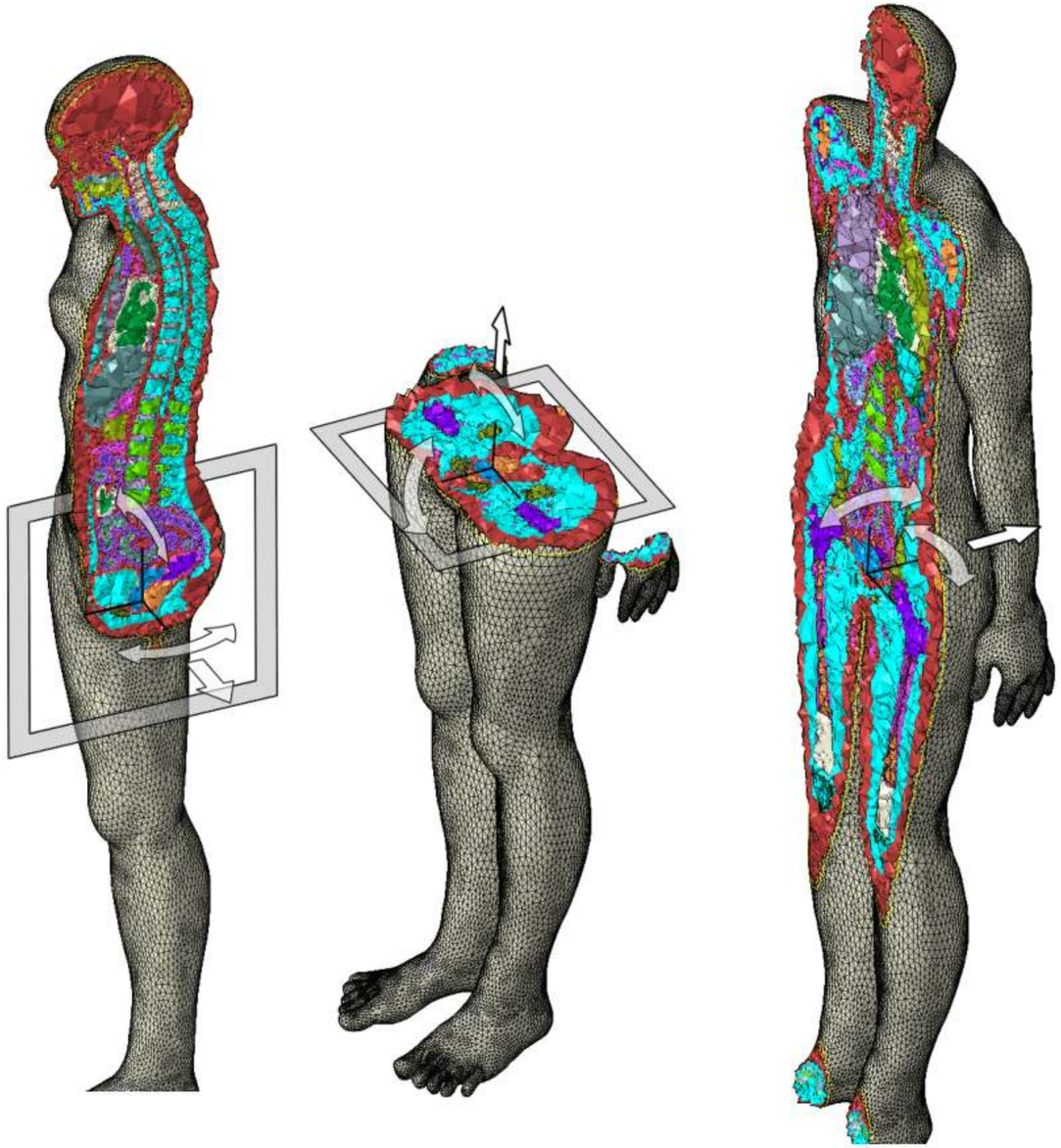
Gmshにてスケール確認だけ

Tokushima

ParaViewの操作画面

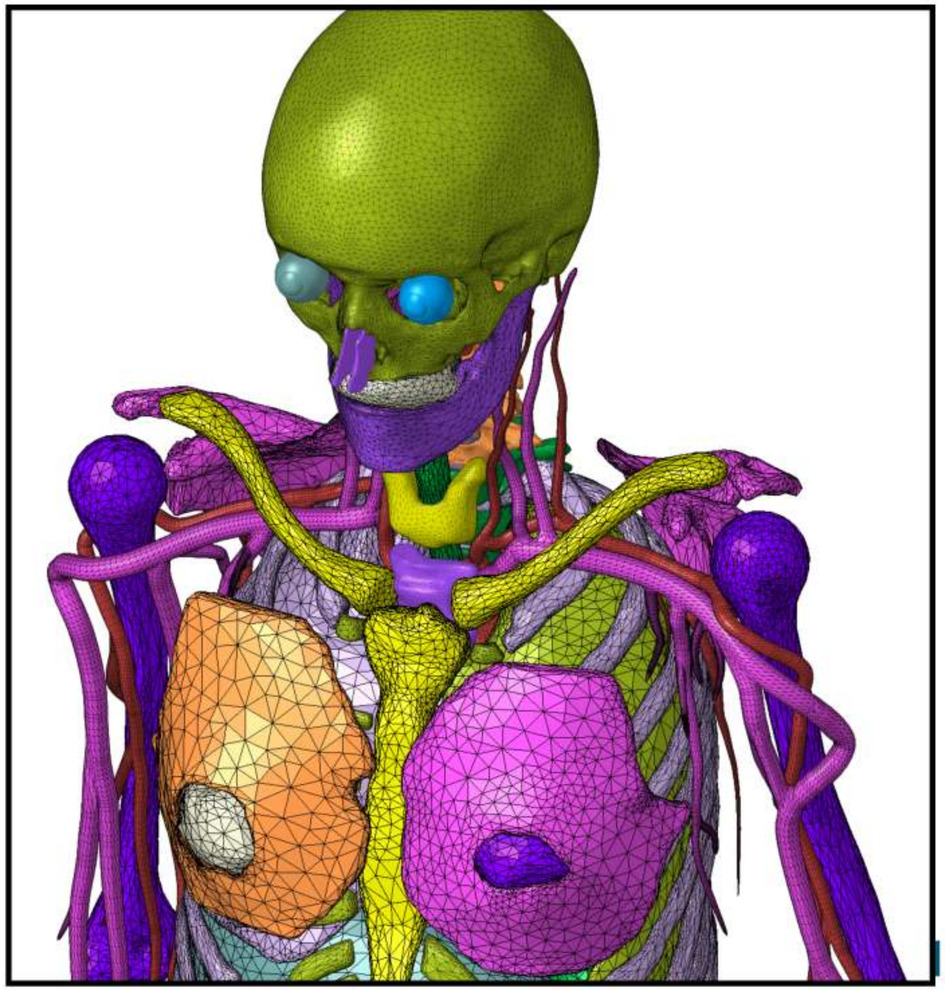


MRCPs人体ファントムデータのbdfファイル化に成功



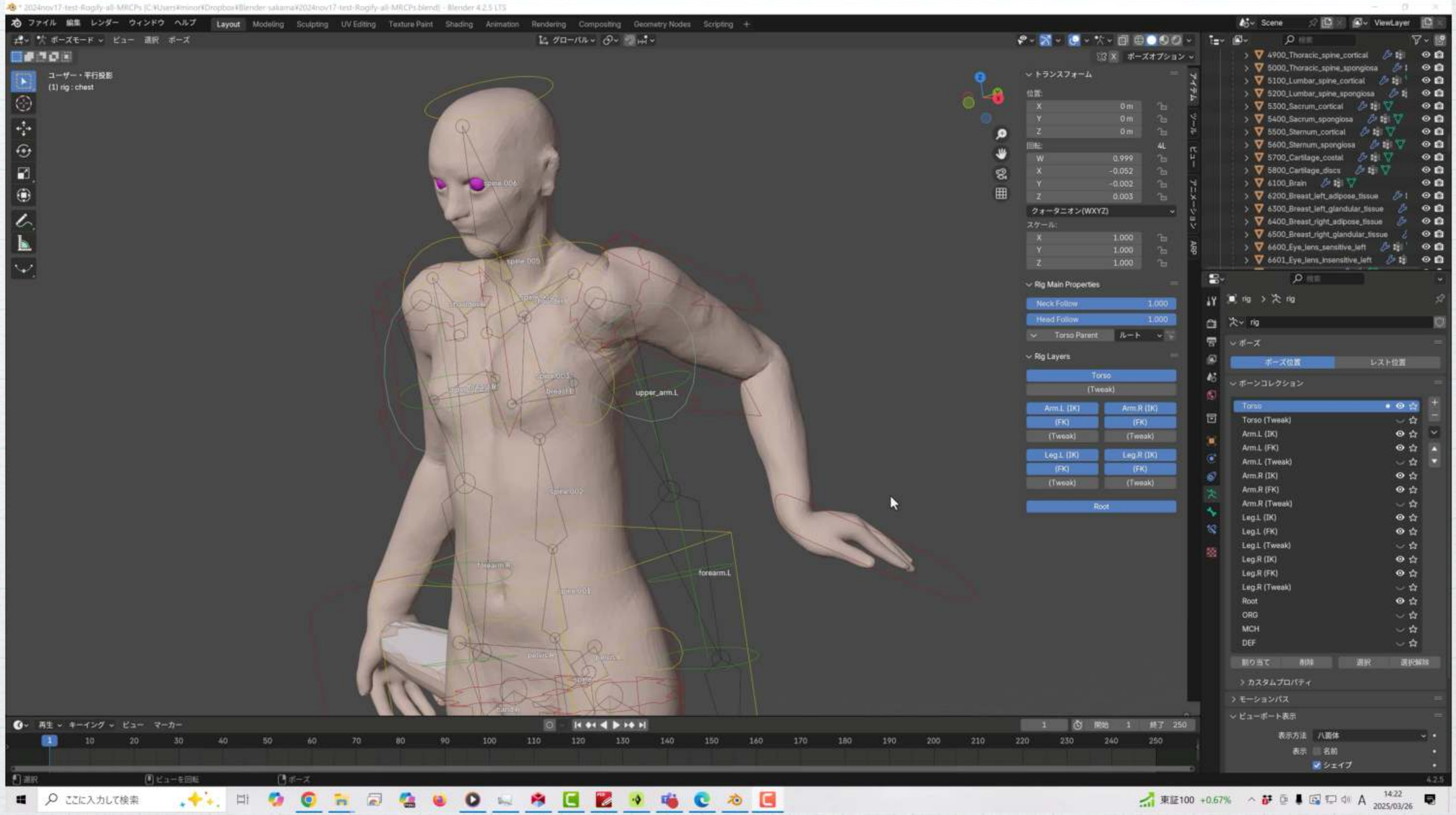
TetGenの.ele .nodeのMRCPsの方が計算速度が速いか？
それとも，bdf化した方が計算速度，特に読み込みの点で早いかどうか？

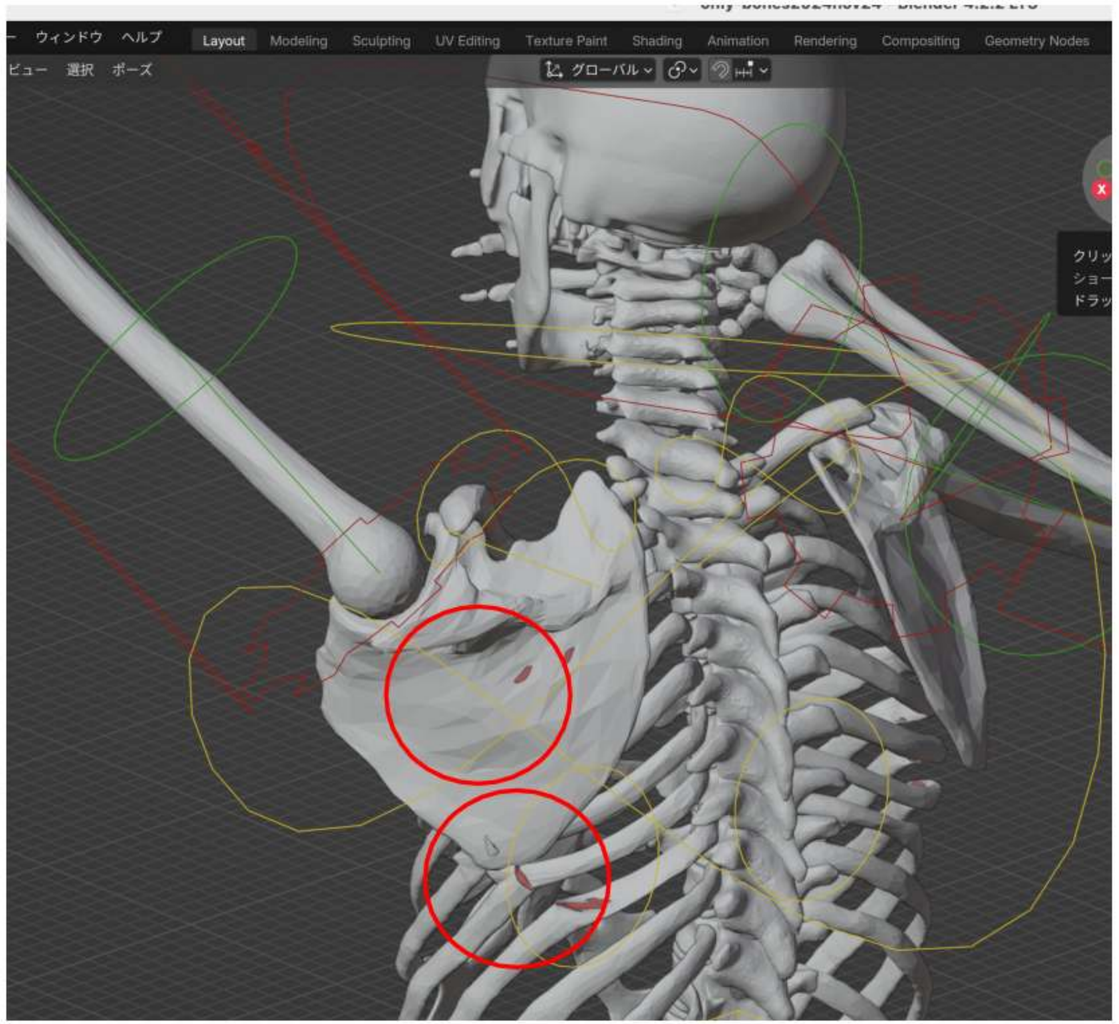
編集作業は圧倒的に，bdf化の方が優れいている.

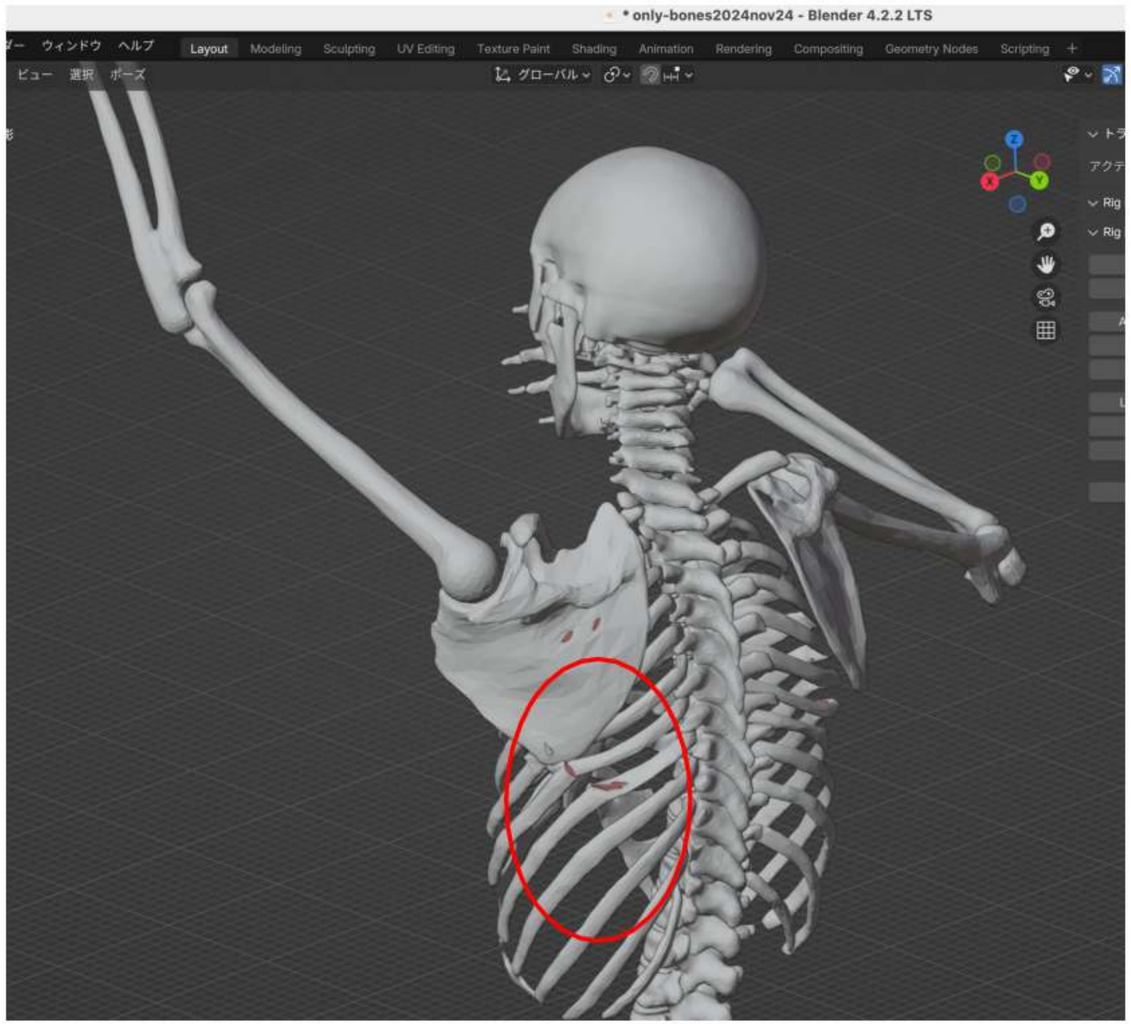


Blender（3D-CG）にて，MRCPs人体ファントムを任意の体系に変形すること目指しているが，，，

- CG機能のアーマチュアとリギングにより，任意の姿勢に変形させることができる．
- メッシュの交差が大量に発生する．
- CG機能のウェイトペイント作業に熟練を要する．

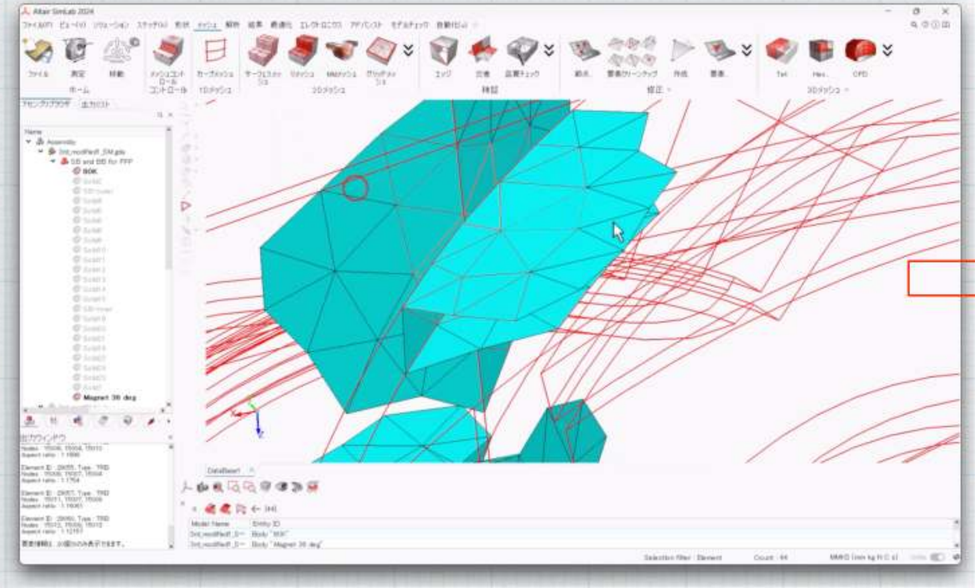


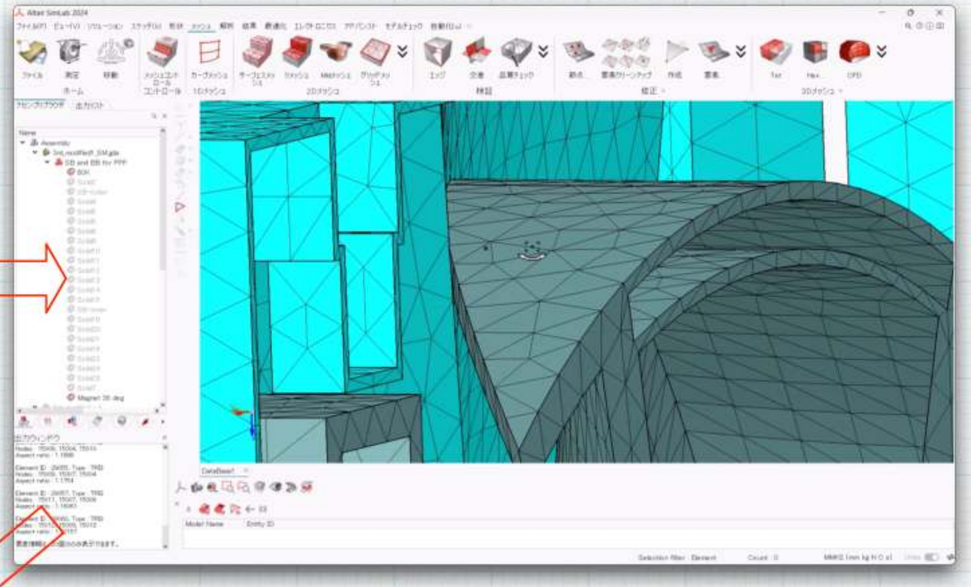


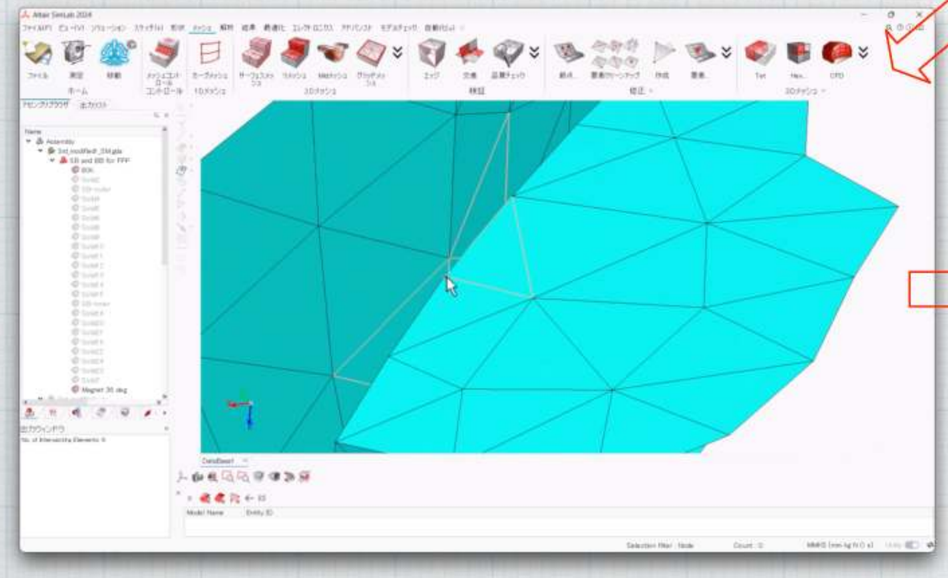


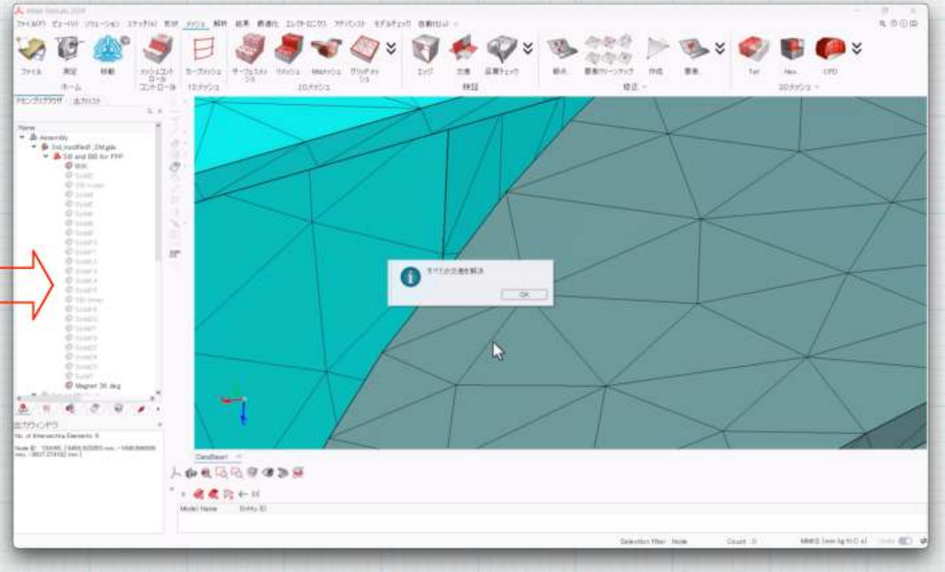
赤丸枠でくくった領域に，赤い斑点のようなものみえると思いますが，これは，骨の内部組織（骨皮成分・スポンジ）が見えてしまっており，このような交差をブーリアン等で，削り落としている．が，多数発生するので，このような交差問題を解消することを目指している．

複雑なトポロジー形状（ヘリカル型核融合炉設計）におけるサーフェスメッシュ編集の一例



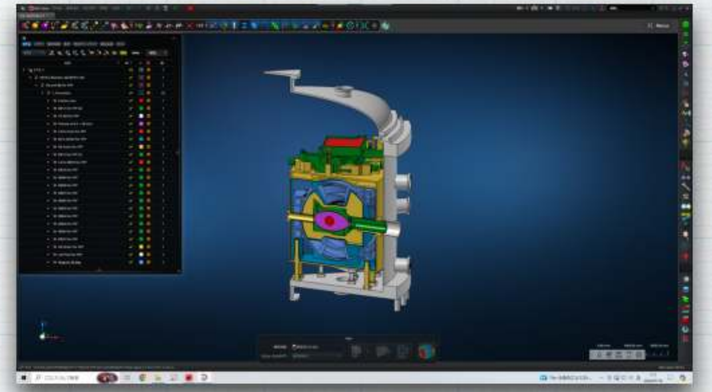




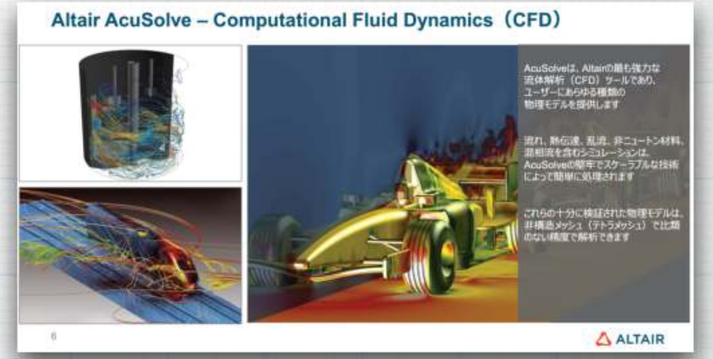


- bdfファイル生成には，必ずサーフェスメッシュ（ある意味，stl編集に近く，CG系の編集ツールでも対応できる）を経由する．
- SimLabの優れていることは，一度，サーフェスメッシュで節点共有でミスすることがあっても，再度サーフェスメッシュすることで，クリヤーすることができる．

メッシャーツール群の一覧（アカデミック価格で運用可能）



- MSC Apex modeler：サブスク保守約20万円/年
- Altair：30ユニット購入　サブスク保守約30万円/年
  - SimLab
  - Inspire
  - HyperWorks CFD + AcuSolve



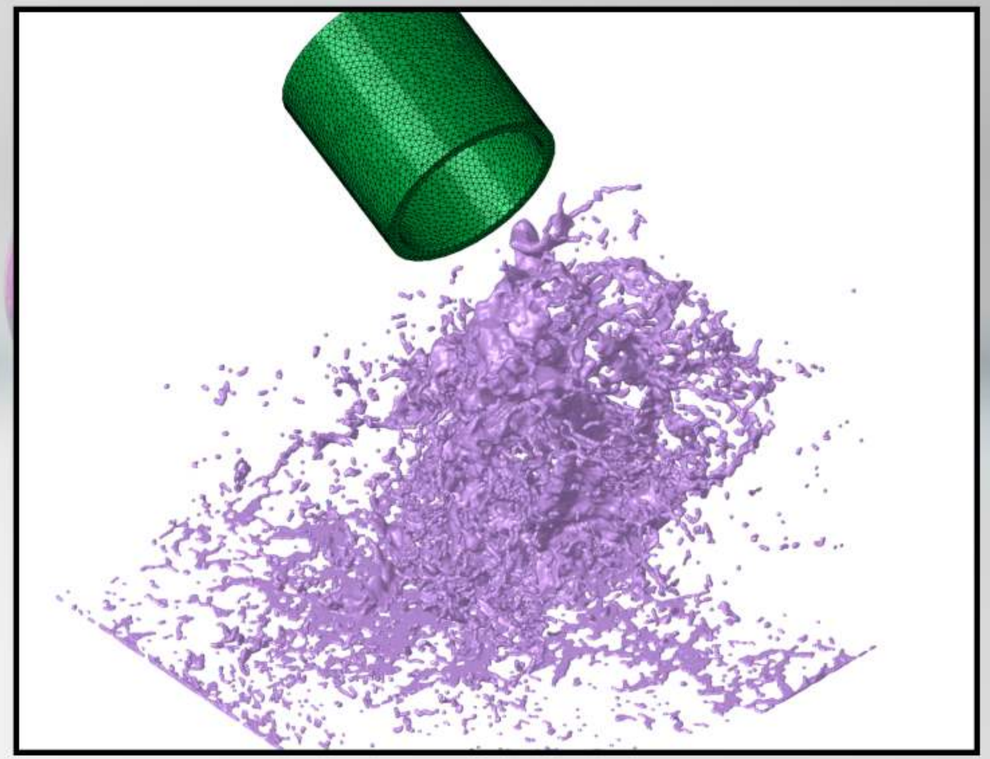
- Polygonalmeister（ポリゴンメッシュ編集）：概ね年１回程度 version upにつき，約15万円，ただし，ver.9（現在）→ver.10（９月頃）については無償
- Hexagon VISI（ポリゴンメッシュ編集）：今年度購入予定，約３０万程度，以後，サブスク保守約４万/年

まとめ，展望

- 業界標準のメッシャーツール（高価ではあるが，ある程度，アカデミック価格でカバー）ではあるが，このツール群を用いることで，どのような高精細かつ複雑なトポロジー形状（CADでもCGでも）のジオメトリーモデリングが必要になっても，全て対応できるパスを構築することができた．
- 3Dスキャナーを用いるリバースエンジニアリングで，CADデータ化されていないものも取り込むことができる．
- 今後，人体や次世代核融合炉のような複雑なトポロジーさが増大し，モデリングで発出されるエラー（特に，交差）が発出されたとしても，今年度に整備した複数のメッシャーツール群を駆使することで，様々な方策で対応（克服）することができる．特にGUI操作で修正することが可能である．
- Paraviewの多彩なディスプレイ能力をフルに活用して，高度な可視化ポスト処理を行えることができる．
- CSG法（GEOUNED）との比較検証も必要である．

Acknowledgements

- ヘリカルフュージョン社（Helical Fusion Co., Ltd.）：宮澤順一 博士，後藤卓也 博士，中村誠 博士，金田健一 博士，田村仁 博士，田口昂哉 氏，相良明男 名誉教授
- 核融合科学研究所（NIFS）：小林真 先生，佐瀬卓也 先生，
- 香川大学創造工学部：藤本憲市 先生



この背景も自作による3D-CGデータ

PHITSを用いた独立計算システムの構築（基礎検証）

千々岩 拓夢, 磯村 泰己, 垣花 泰政

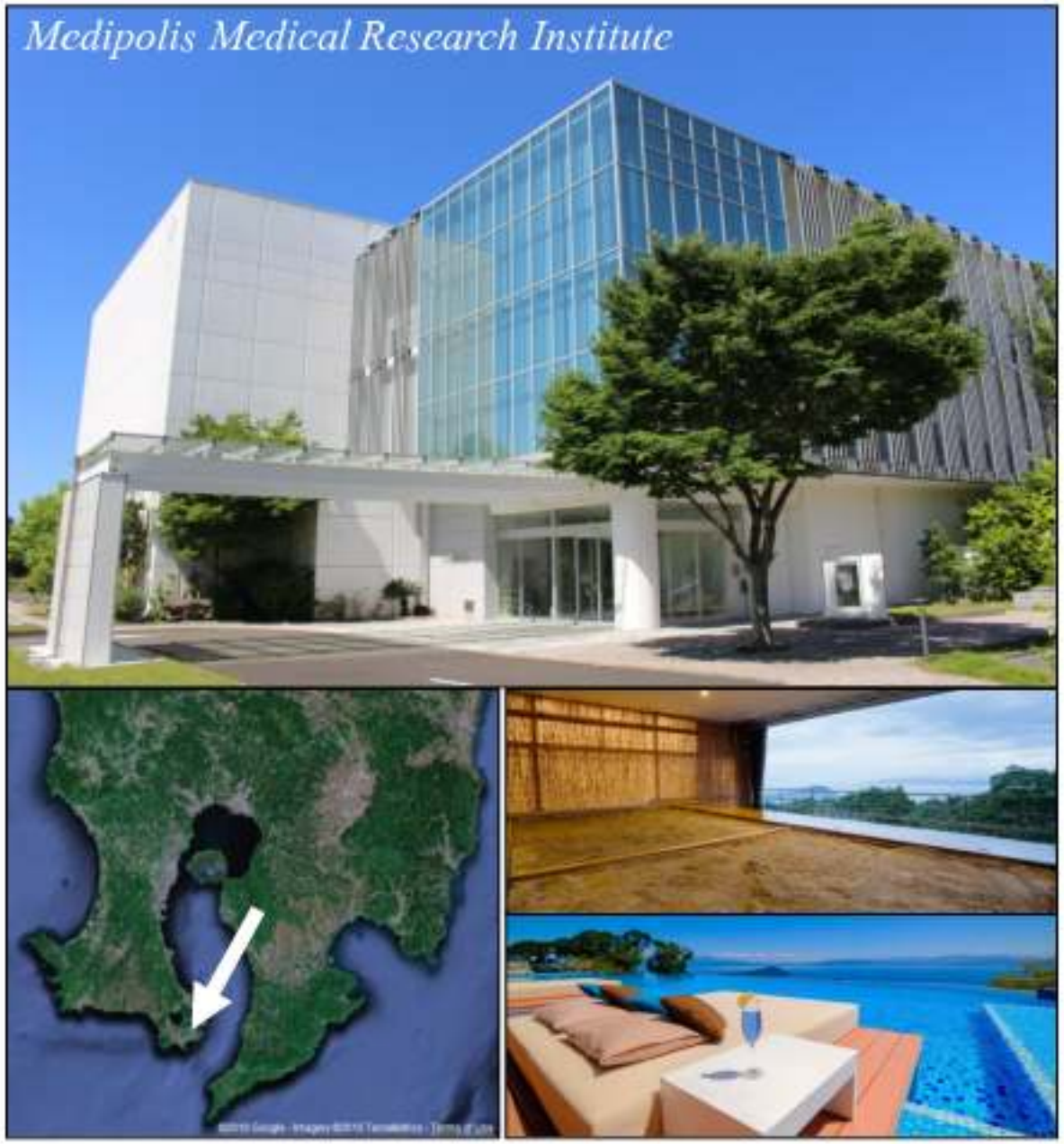
Medipolis Proton Therapy and Research Center

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

COI開示

☑　この発表に関する利益相反事項はありません

当施設について



- リゾート一体型陽子線治療施設
- 臨床開始　：2011年1月
- 総治療件数：6,420件

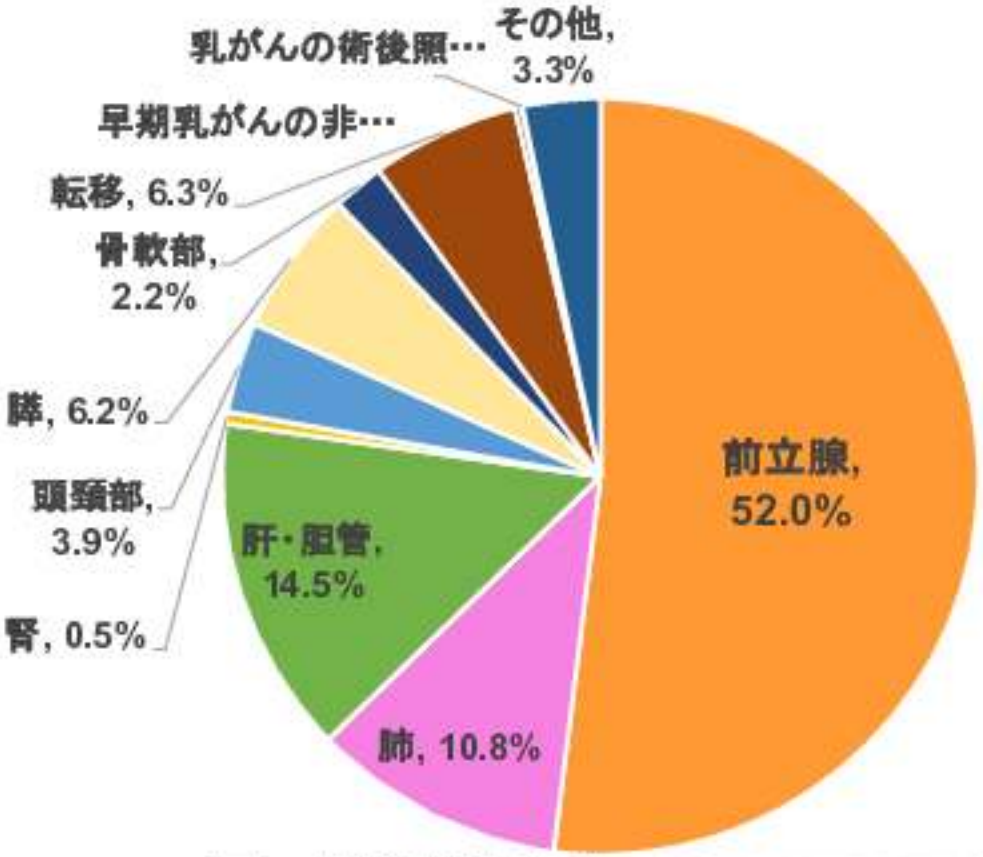


図　治療部位内訳

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

日立（旧三菱社製）360°回転ガントリー

- 照射方式　：　拡大散乱体法(Wobbler法)
- エネルギー　：　120,150, 210 MeV
- 最大線量率　：　2 Gy（/min）
- 最大照射野　：　15×15 cm²
- 照合システム　：　I.I 管

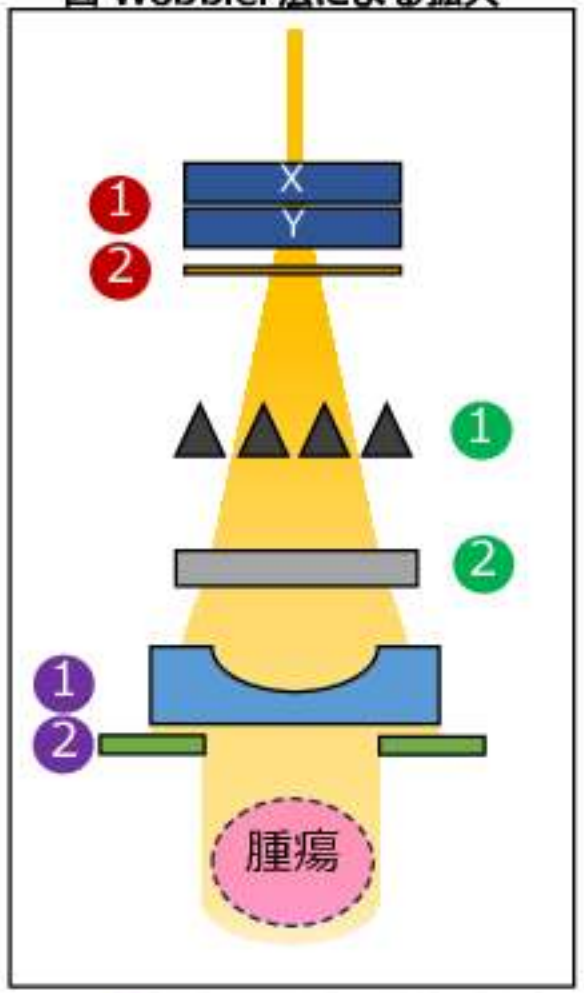
当施設について　～拡大散乱体法（Wobbler法）～

※シンクロトロンにより加速

➤ ペンシルビーム※を3次元的に広げ、腫瘍に均一に線量を投与する手法

- **水平方向の拡大/調整**
  - ① **ワブラー電磁石(X/Y)**で円形状に広げる。
  - ② **散乱体**で均すことで水平方向に拡大。
- **垂直方向の拡大/調整**
  - ① **リッジフィルター**で垂直方向に一定幅で広げる(SOBP)。
  - ② **レンジシフター**で飛程を腫瘍深さに合わせて調整する。
- 線量分布形状の調整
  - ① **レンジコンペセーター**で線量分布を腫瘍形状に形成する。
  - ② **MLC**で腫瘍形状にカット。

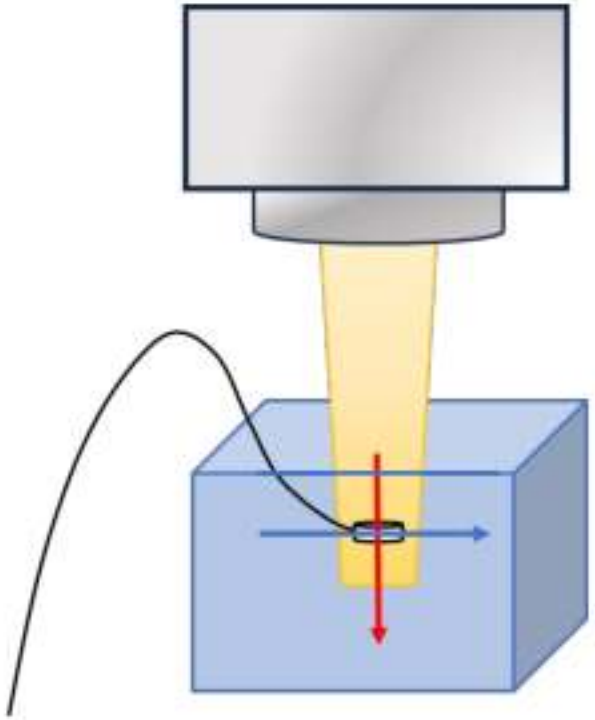
図 Wobbler法による拡大

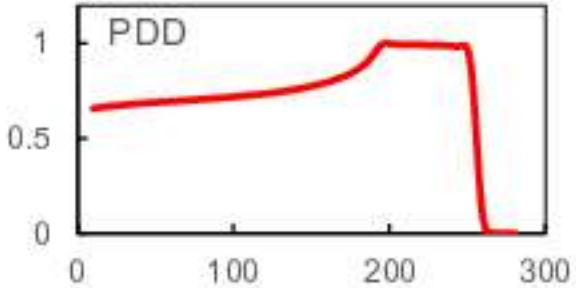


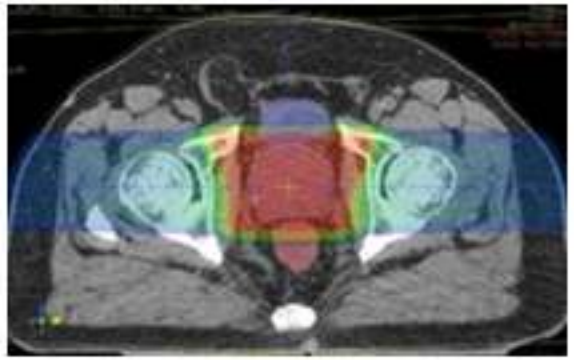
治療計画装置による線量計算

- 治療計画装置：**Xio-s**（Elekta）
- 計算アルゴリズム：Pencil beam

① ビームデータ測定 → ② XiOへビーム登録 → ③ 線量計算







（線量分布）

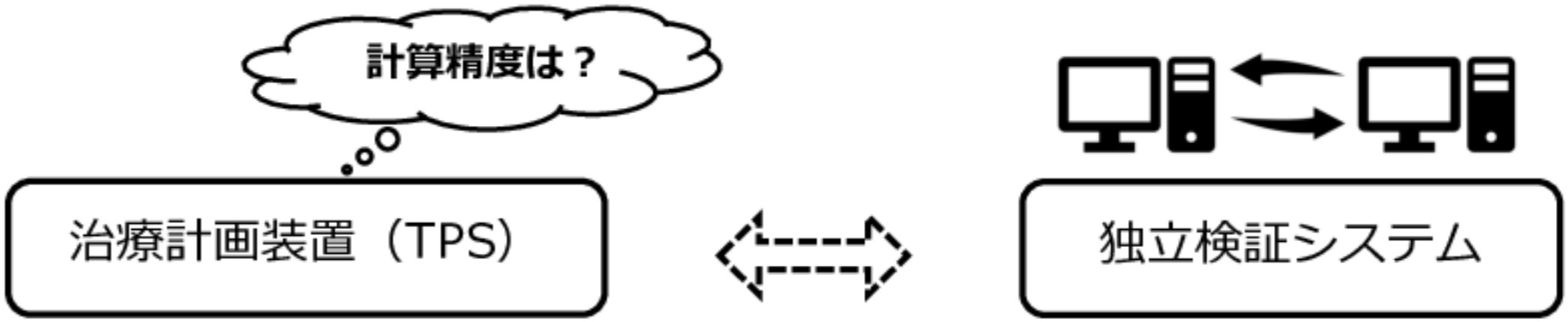
（DVH解析）

研究背景

「ICRUレポートNo. 83」

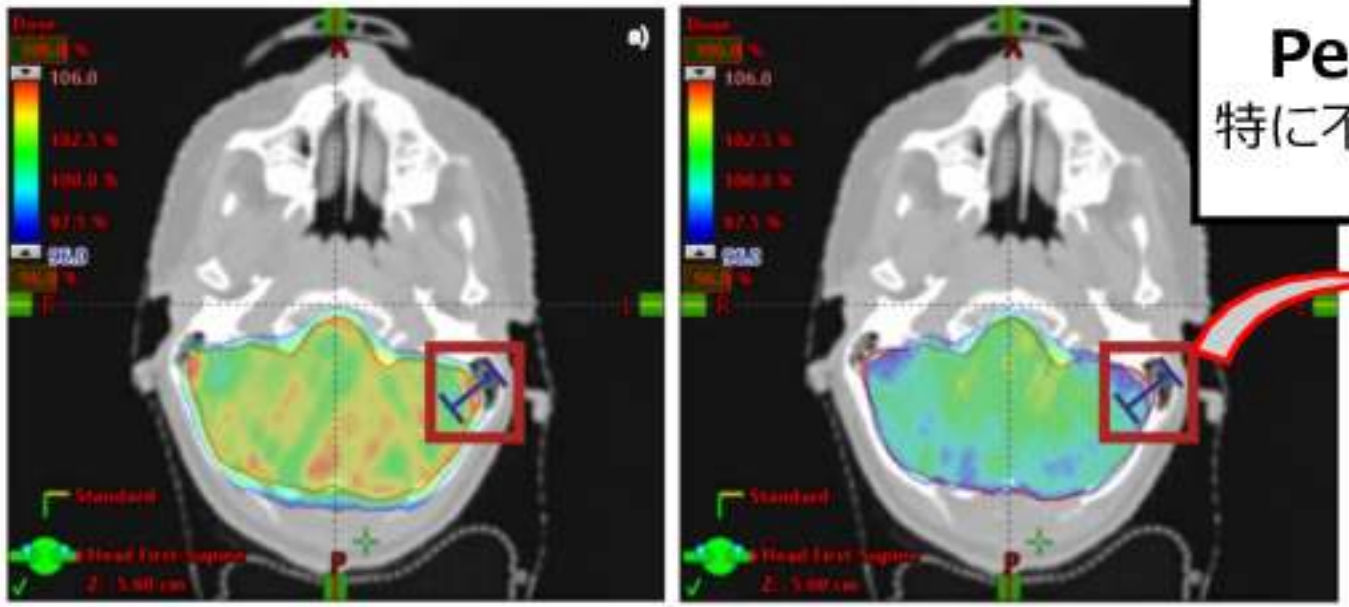
独立した吸収線量計算を使用する場合、治療計画システム（RPTS）を同等以上の線量計算アルゴリズムと照合する必要があることを提案している。（独立検証！！）

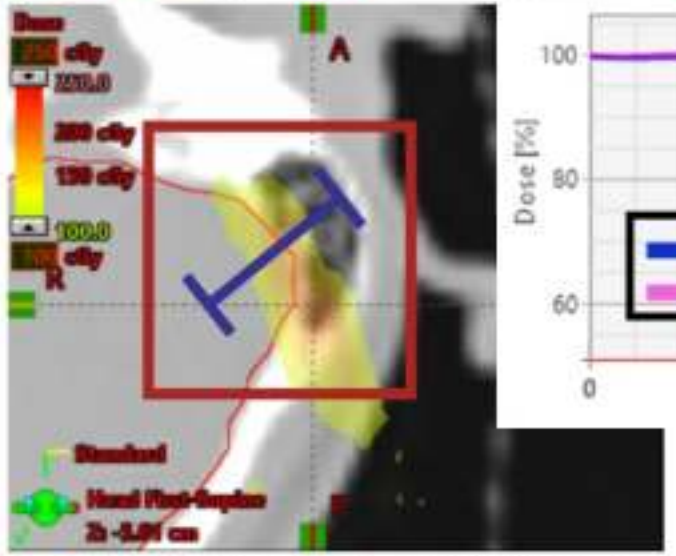
モンテカルロアルゴリズムも、ビームコミッショニングの結果との相互校正が行われていれば、特に不均一組織の吸収線量を計算するための独立した線量計算法として認められるとしている。

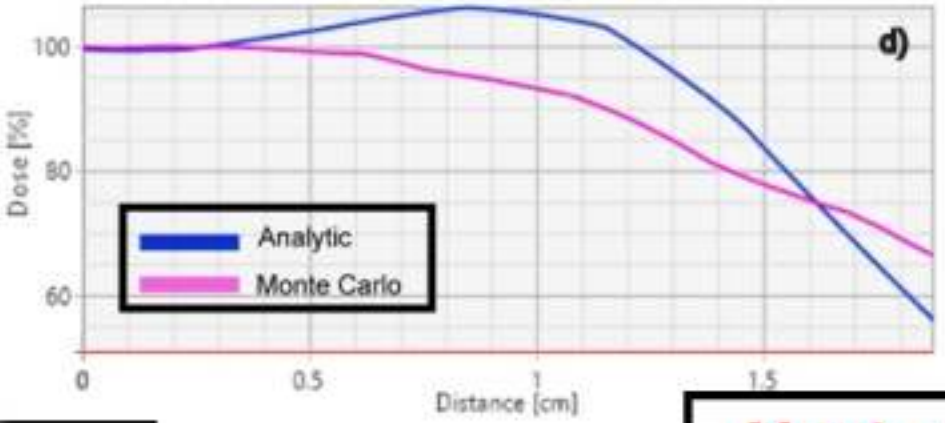


当施設には独立検証をするシステムがない…

研究背景

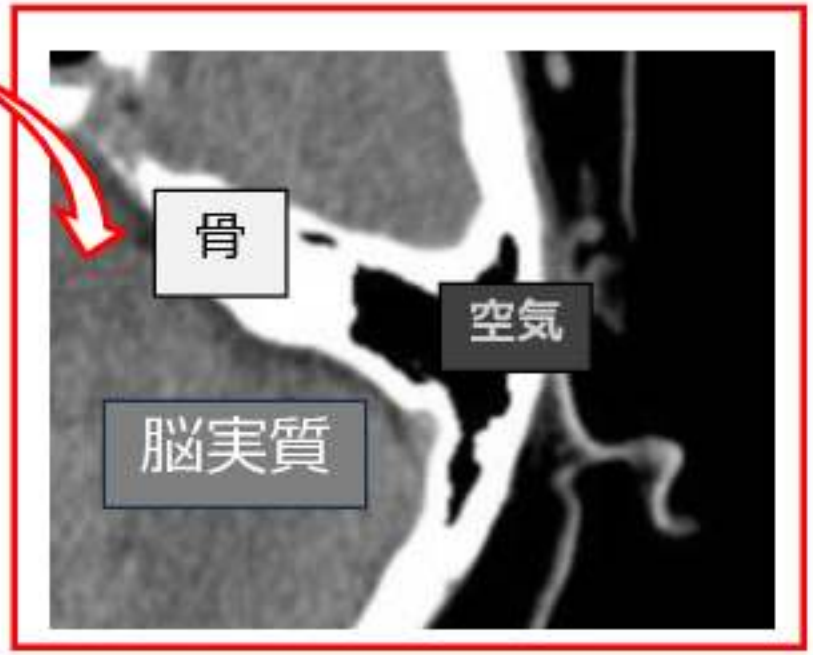






Pencil beam法

特に不均質領域では計算誤差が大きくなる！！



Monte Carloを用いた独立検証を行いたい！

Johnson JE et al. PLoS ONE14(2): e0212412

MEDIPOLIS MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

商用Monte carlo計算装置

- Pencil beam Scanning systemでは開発が進められている

Ray station ： Monte carlo dose engine for proton PBS planning

Martin Janson et al. Medical Dosimetry 49 (2024) 2–12

⇩

- **近年の陽子線治療の主な照射方式はscanningのため、拡大散乱体法でのMonte carlo計算は開発は進んでいない…**

目的

PHITSを用いた独立検証システムの構築

独立計算システム構築までのプロセスマップ（こんなイメージで…）

ビームデータ測定	➢ Pencil,Wobbler,SOBP beam（PDD,OCR）
ガントリーヘッド作成	➢ ビームライン上内部構造を再現
ビームモデリング	➢ Pencil beam → SOBP beam
モデリング精度検証	➢ ガンマ解析（PDD,OCR）
臨床データでの精度評価	➢ ガンマ解析・DVH評価
end to end test	➢ RT-PHITS （CT-DICOM data）
完成	

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

今回の検証でのプロセスマップ　（基礎検証）

基礎検証

- **ビームデータ測定**
  - Pencil,Wobbler,SOBP beam（PDD,OCR）
- **ガントリーヘッド作成**
  - ビームライン上内部構造を再現
- **ビームモデリング**
  - Pencil beam → SOBP beam
- **モデリング精度検証**
  - ガンマ解析（PDD,OCR）
- **臨床データでの精度評価**
  - ガンマ解析・DVH評価
- **end to end test**
  - RT-PHITS　（CT-DICOM data）
- **完成**

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

今回の検証でのプロセスマップ　（基礎検証）

ビームデータ測定

- Pencil,Wobbler,SOBP beam
  （PDD,OCR）

⇩

ガントリーヘッド作成

- ビームライン上内部構造を再現

⇩

ビームモデリング

- Pencil beam → SOBP beam

⇩

モデリング精度検証

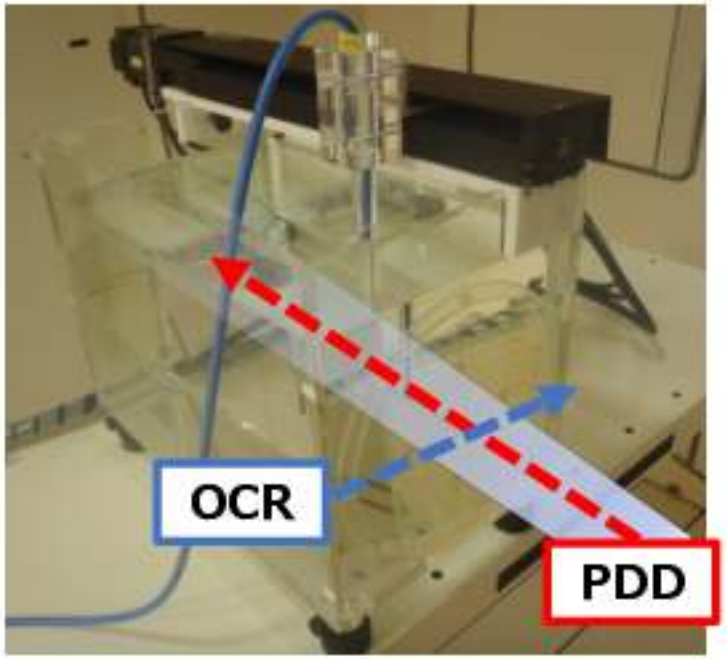
- ガンマ解析（PDD,OCR）

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

ビームデータ測定

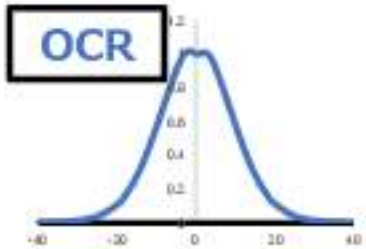
測定機器

- ファントム：水平水ファントム
- 線量計：PTW31013 (0.3cm³)　Semiflex Chamber



照射条件

	Pencil beam	Wobbler beam	SOBP beam
散乱体(3.7 mm)	–	–	○
Wobbler	–	○	○
Ridge filter	–	–	○
Field size	15x15 cm²	15x15 cm²	15x15 cm²
測定項目	PDD, OCR	OCR	PDD, OCR
IC位置	2cm深	2cm深	SOBP中心



今回の検証でのプロセスマップ　（基礎検証）

ビームデータ測定

- Pencil,Wobbler,SOBP beam（PDD,OCR）

⇩

ガントリーヘッド作成

- ビームライン上内部構造を再現

⇩

ビームモデリング

- Pencil beam → SOBP beam

⇩

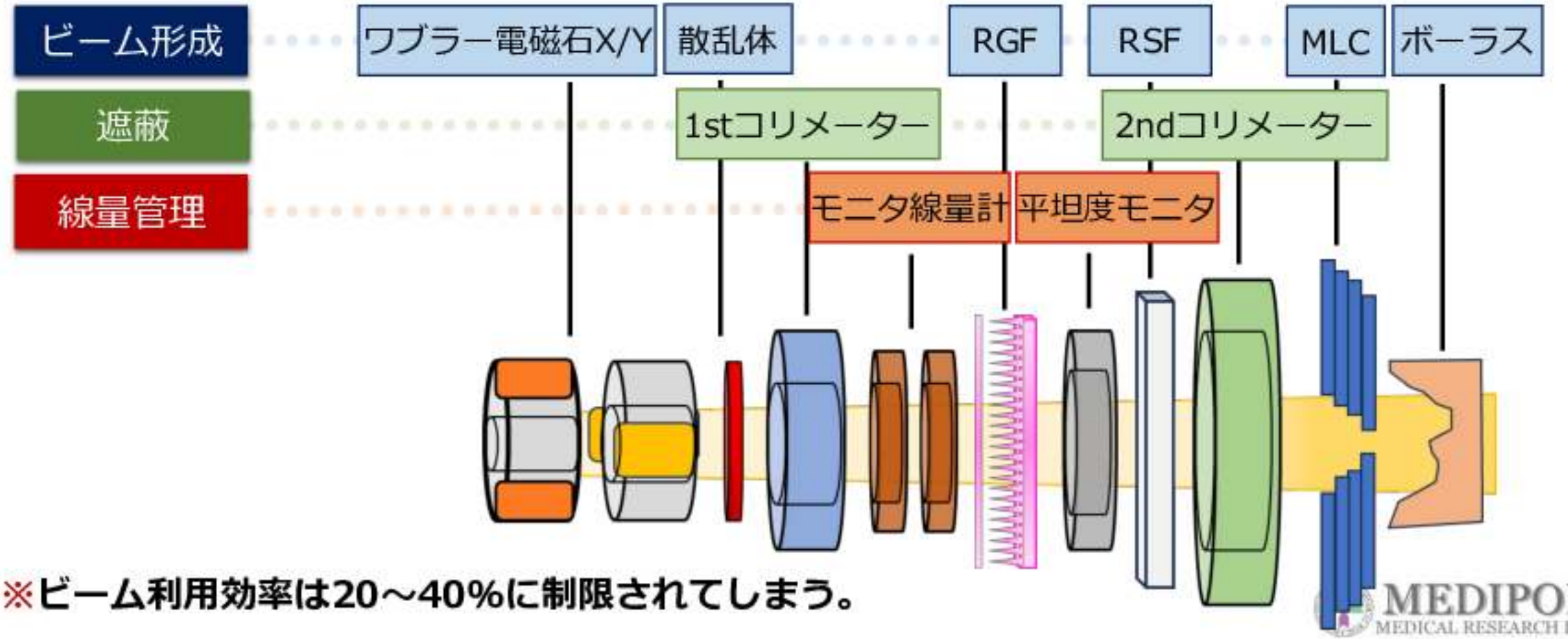
モデリング精度検証

- ガンマ解析（PDD,OCR）

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

- 陽子線照射方法：Wobbler法によるパッシブ照射
- ガントリヘッド内のビームライン上の構造物を再現(設計図参照)

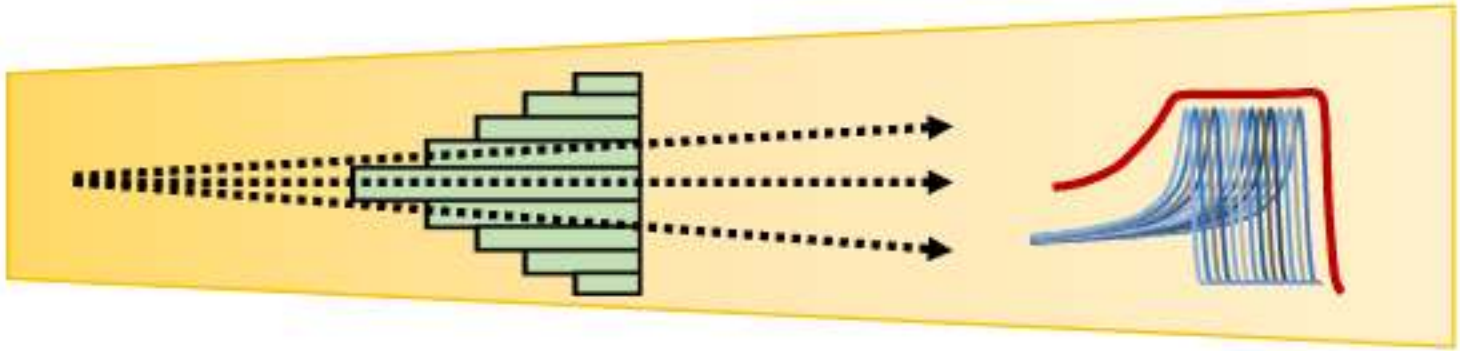
ビームライン上構造物

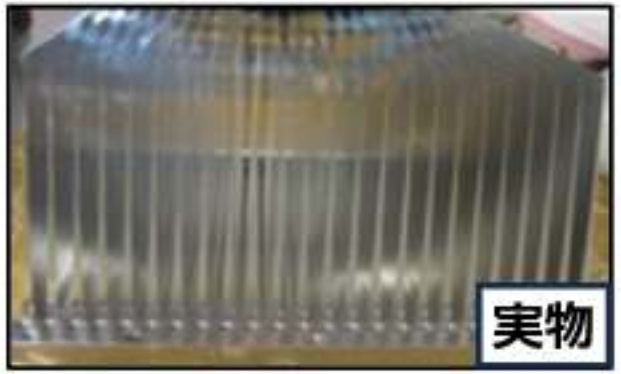


※ビーム利用効率は20～40%に制限されてしまう。

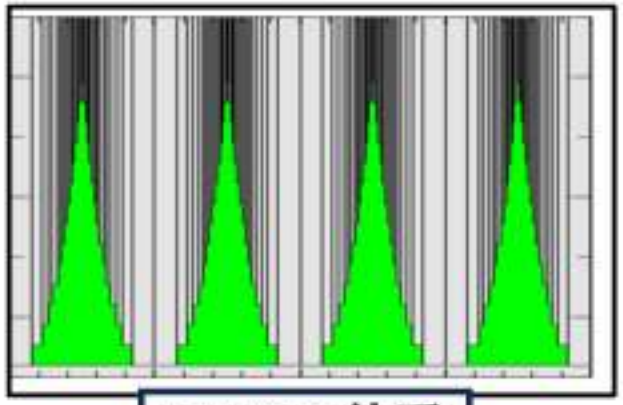
リッジフィルター

- ステップ状に異なる厚みを持つ楔形状のフィルター **(アルミニウム2.7g/cm³)**。
- 厚みに応じて様々な飛程の陽子が発生し、深さ方向に拡大した分布を得る。





➤ PHITSでの体系作成



PHITS体系

- 1つの楔形状をLattice空間に展開して全体を作成。
  →(phits/lecture/therapy/RidgeFilter)
- クーロン分散の影響を考慮したステップ分割も実施。
- SOBPサイズ50,60,80mm ⇒ 設計図を基に作成。
- 70mm ⇒ 他のリッジデータから近似的に作成.(設計図無)

今回の検証でのプロセスマップ　（基礎検証）

ビームデータ測定

- Pencil,Wobbler,SOBP beam（PDD,OCR）

⇩

ガントリーヘッド作成

- ビームライン上内部構造を再現

⇩

ビームモデリング

- Pencil beam → SOBP beam

⇩

モデリング精度検証

- ガンマ解析（PDD,OCR）

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

ビームモデリング　～モデル作成のフロー～

1st, Pencil beam

線源の調整

PDD

OCR

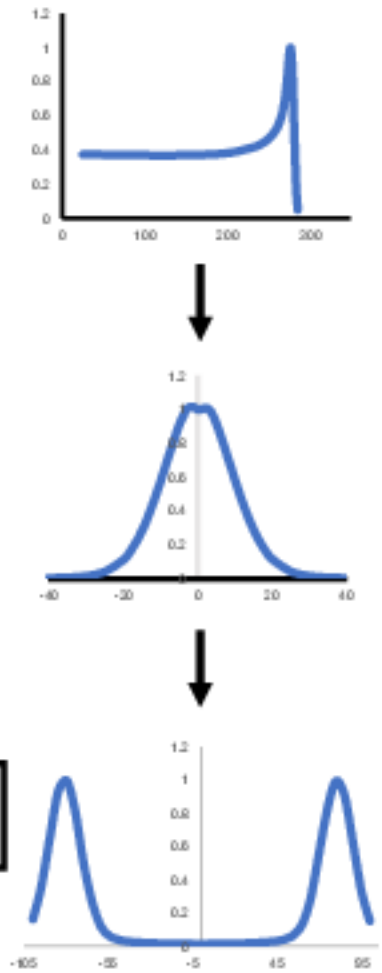
測定値との誤差

許容外

許容内

ワブラー半径調整

SOBP



2nd, SOBP

1st, → さらに最適化

線源の再調整

PDD

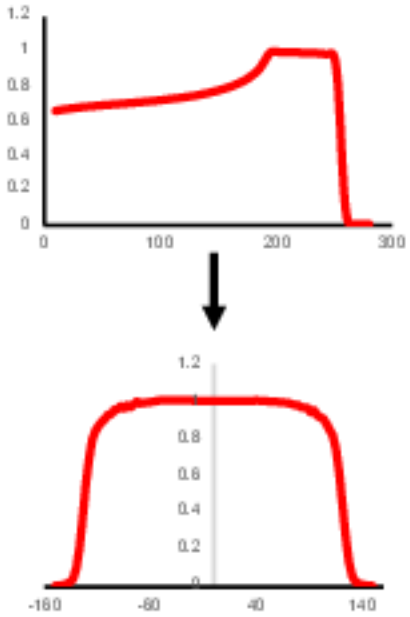
OCR

測定値との誤差

許容外

許容内

Beam model 完成



MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

手順

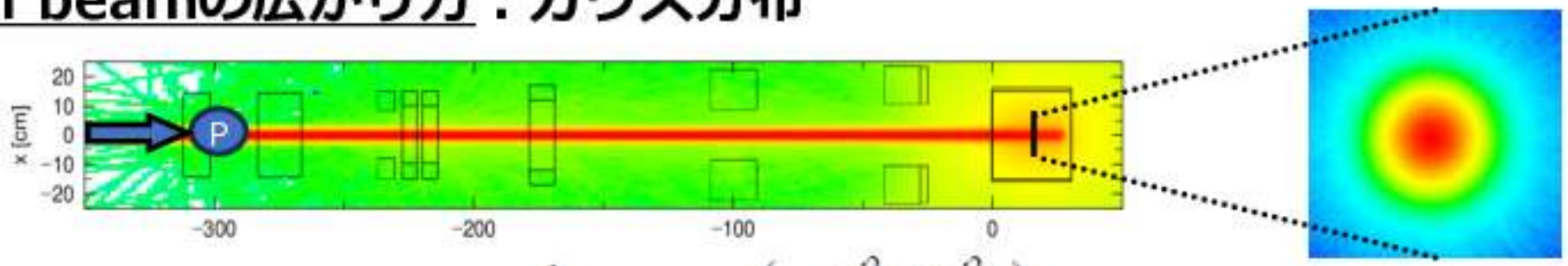
① Pencil beam：ガウス分布によるフィッティング

② Wobbler半径：磁場設定によるモデリング

③ SOBPビームのモデリング

モデリング① Pencil beam：ガウス分布によるフィッティング

陽子Pencil beamの広がり方：ガウス分布



$$O(x', y', z') = \frac{1}{2\pi[\sigma_{tot}(z')]^2} \exp\left(-\frac{x'^2 + y'^2}{2[\sigma_{tot}(z')]^2}\right)$$

※Hong L et al., Phys. Med. Biol. 41 1305–30

➤ PHITS設定値

```
[Source]      # 線源セクション
S type  =  13    # 線源タイプ（ガウス分布）
  r1    =  c1    # x,y軸でのガウス分布の半値全幅 [cm]
e type  =  2     # エネルギー分布形状(ガウス分布)
 eg0    =  210   # エネルギー[MeV/u]
 eg1    =  c2    # エネルギー分布の広がり半値全幅 [cm]
```

➤ 評価項目

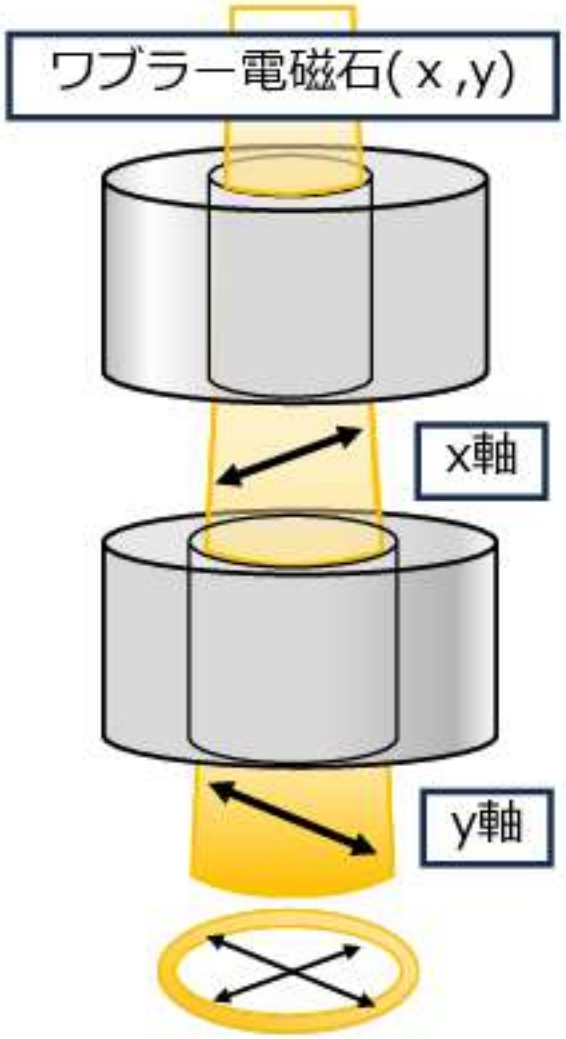
- PDD：ピーク位置、レンジストラグリング ・・・・・・・・ **eg0, eg1で調整**
- OCR：スポットサイズ(FWHM)(@IC) ・・・・・・・・ **r1で調整**

MEDIPOLIS MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

モデリング② Wobbler半径：磁場設定によるモデリング

ワブラー電磁石による円軌道の形成

- 2つの二極管電磁石でX・Y方向にビームを広げる。
- ワブラー周期を90°ずらすことで同心円状を形成する。



➤ PHITS設定値

```
[ Magnetic Field ]                          # 磁場設定
 reg  typ  gap  mgf   trcl   time           # mgf : 磁場強度
 14    2    1   c1     1     pi             # wobbler電磁石X
 15    2    1   c2     2     pi/2           # wobbler電磁石Y
```

↳ 二極管電磁石

➤ 評価項目

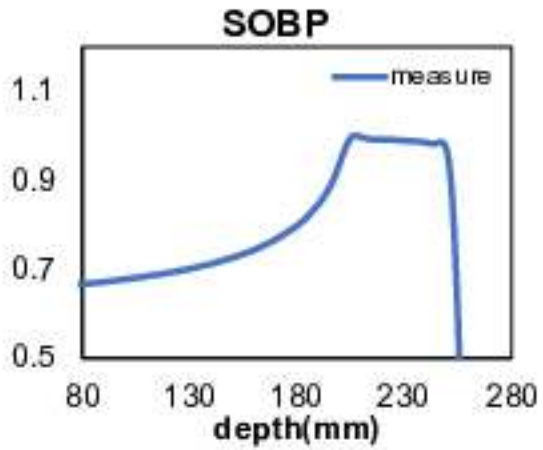
- wobbler半径 ・・・・・・・・ **mgfで調整**

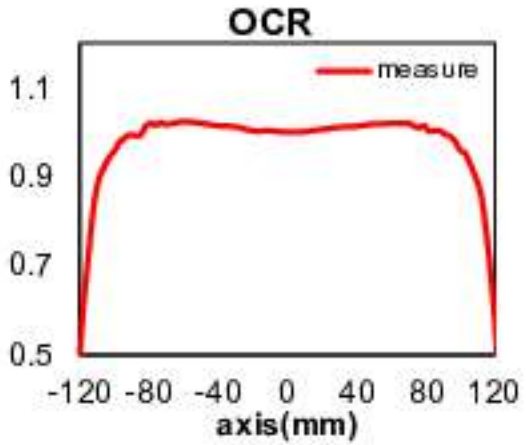
（複数のwobbler半径に対応するmgfを取得）

SOBPビームのモデリング (SOBP=50,60,70,80)

- **SOBPの調整 …… 線源パラメータやリッジ分割数などを再調整**

- **評価項目**
  - PDD：ビーム中心軸(95%線量範囲)
  - OCR：SOBP中心（95%線量範囲）

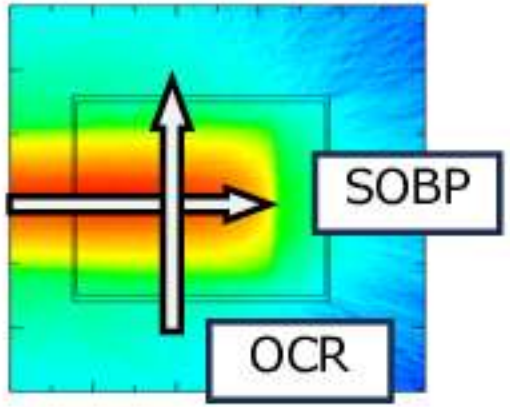




- **評価方法：ガンマ解析**
  - 線量差DDと位置誤差DTAを複合した評価を行う解析手法。
  - 全体の何割でγが許容となっているかで判定する。

$$\gamma = \sqrt{\left(\frac{DD}{\Delta DD}\right)^2 + \left(\frac{Distance}{\Delta DTA}\right)^2}$$

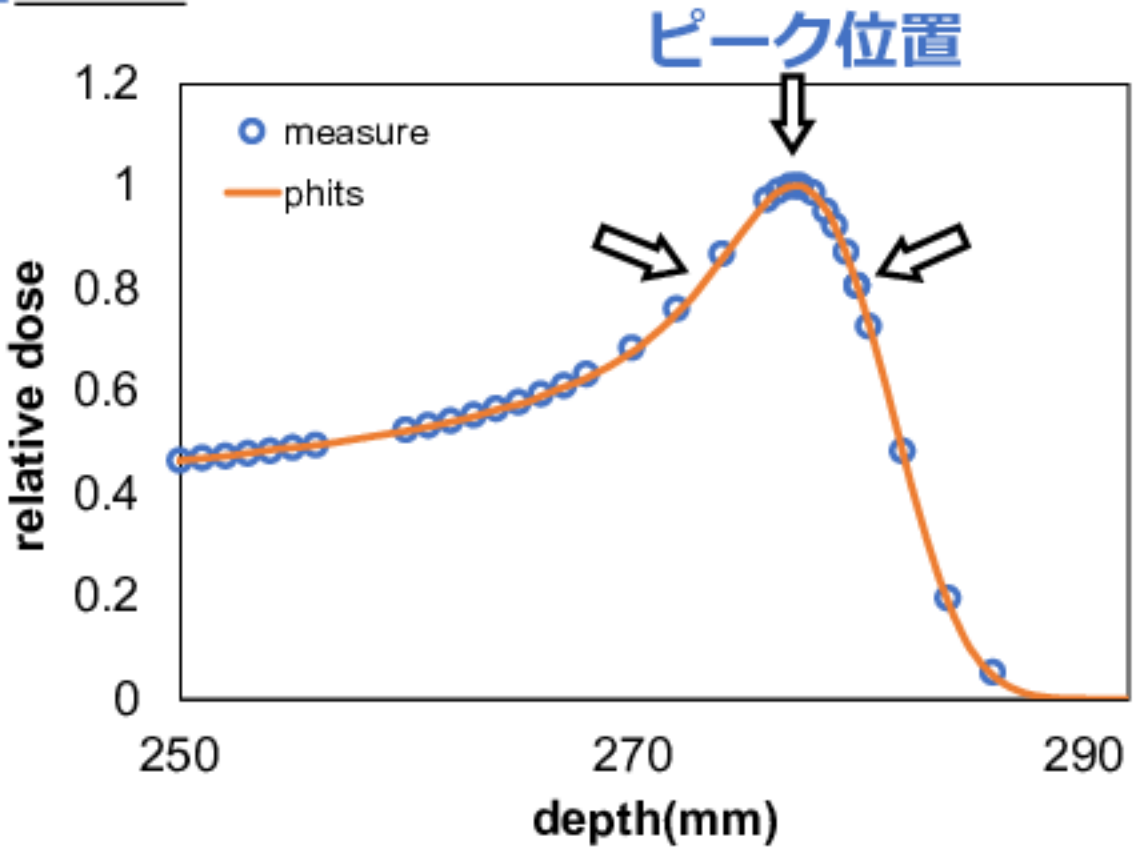
criteria：線量・位置誤差がこの基準を超えるとγ>1となり許容外の判定



- Criteriaとして1mm/1%, 2mm/2%, 3mm/3%などが使われる。

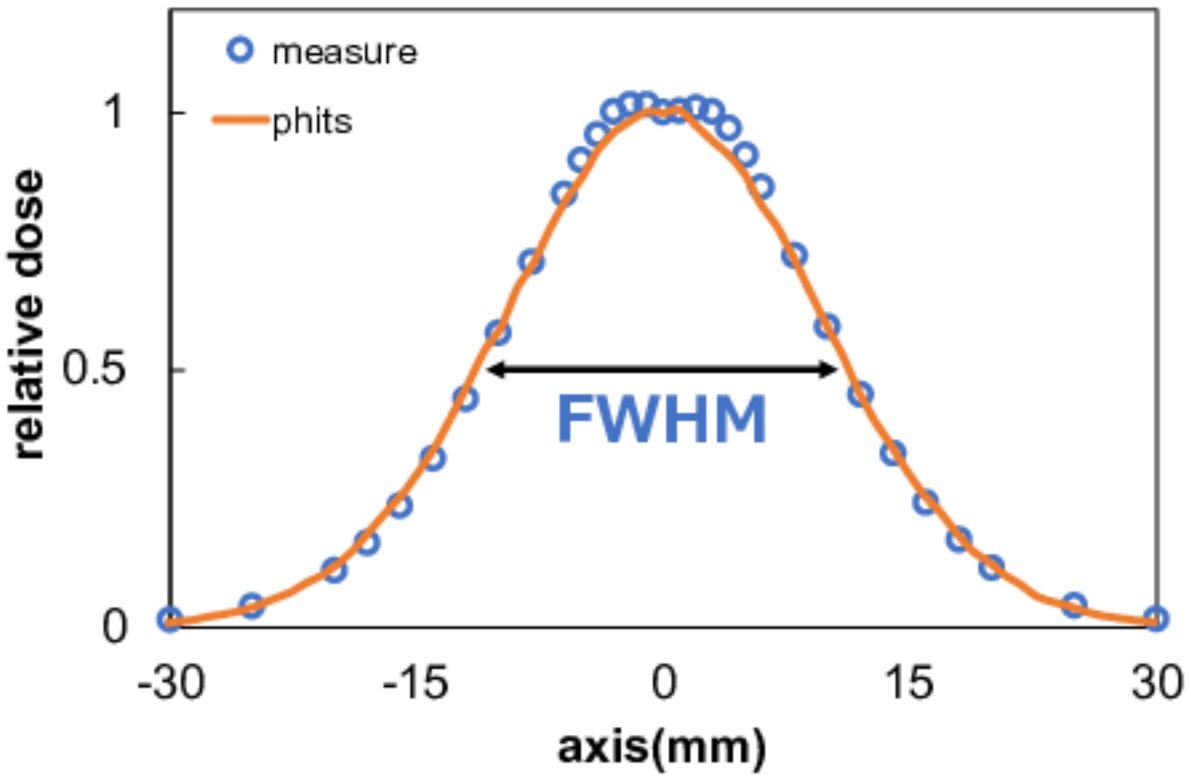
モデリング結果① Pencil beam：ガウス分布によるフィッティング

PDD



OCR

※クロスヘアライン+によって下がってる



- ピーク位置誤差

<0.01mm

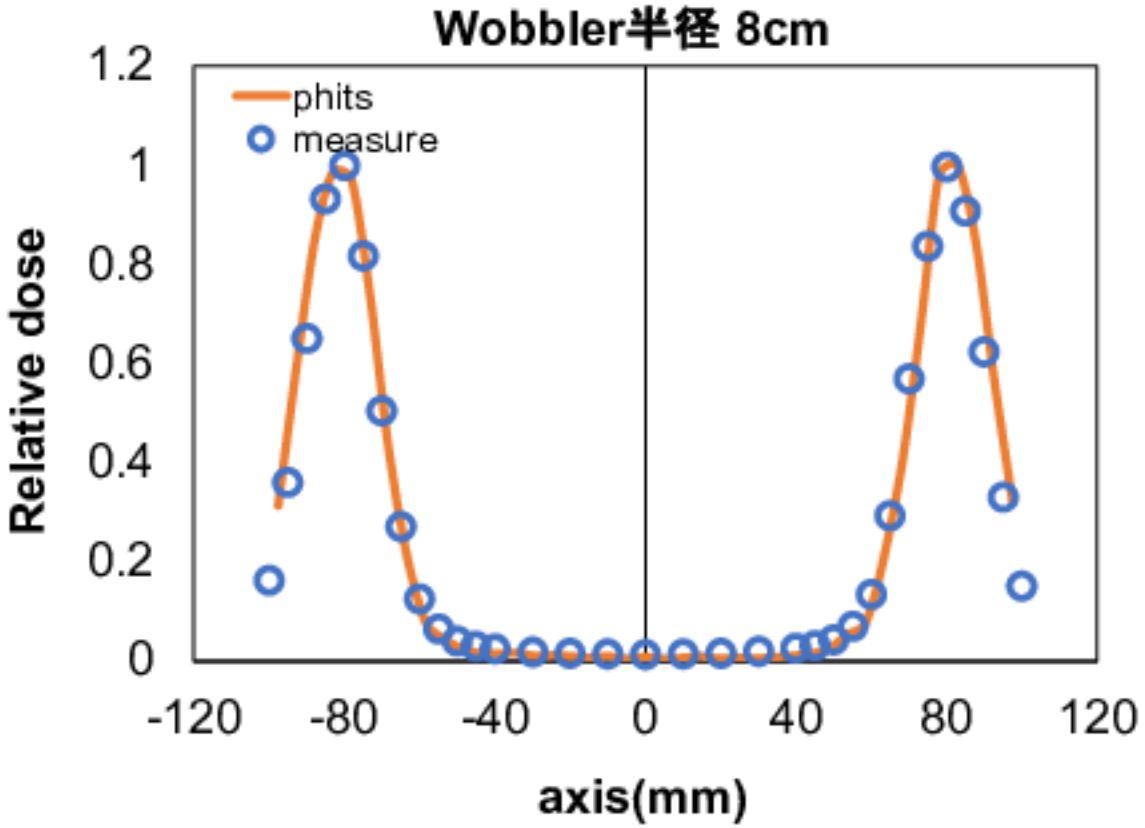
- FWHM誤差 (スポットサイズ)

<0.3mm

MEDIPOLIS MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

モデリング結果② Wobbler半径：磁場設定によるモデリング

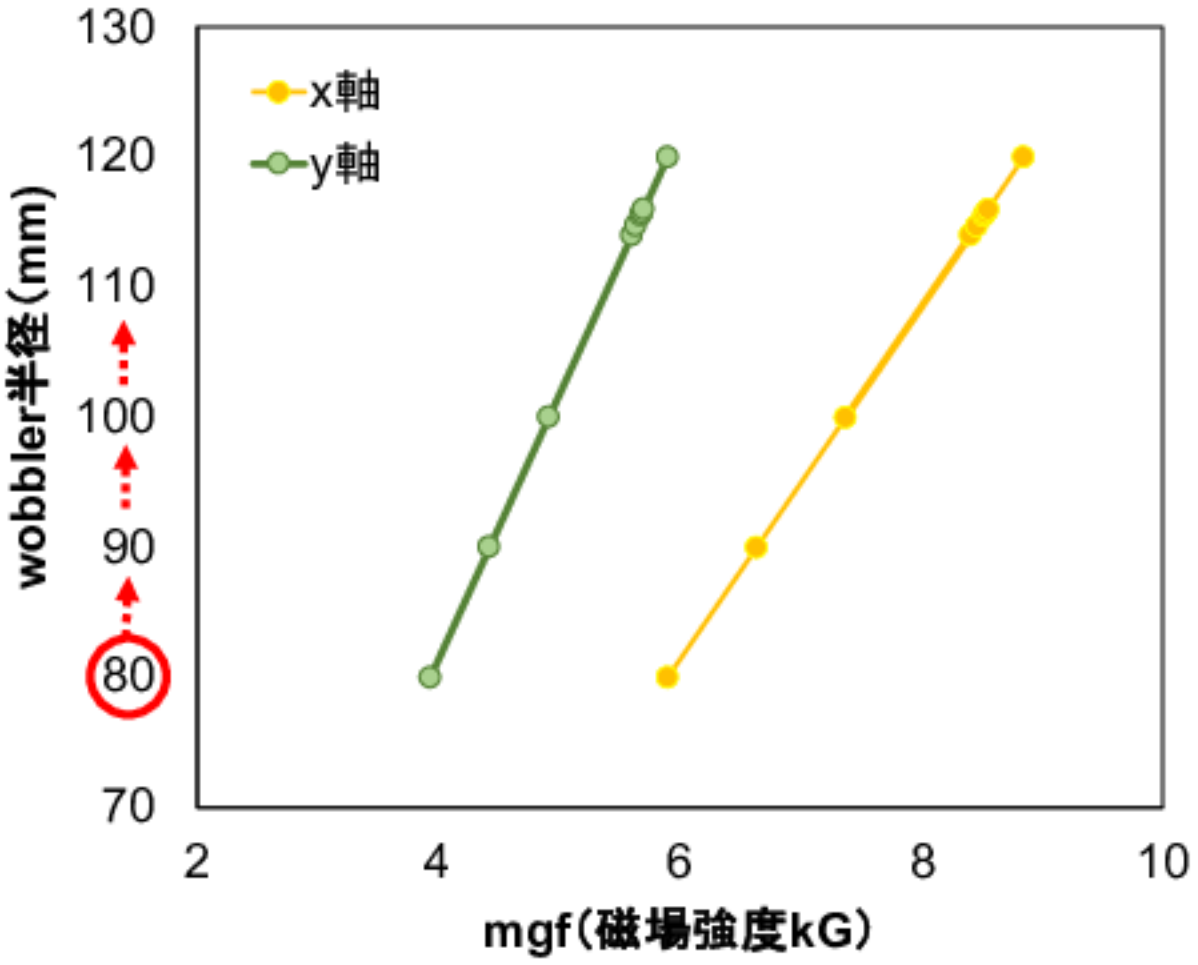
Wobbler beam



➤ **ピーク位置誤差** (全ての半径で)

<3.0 mm

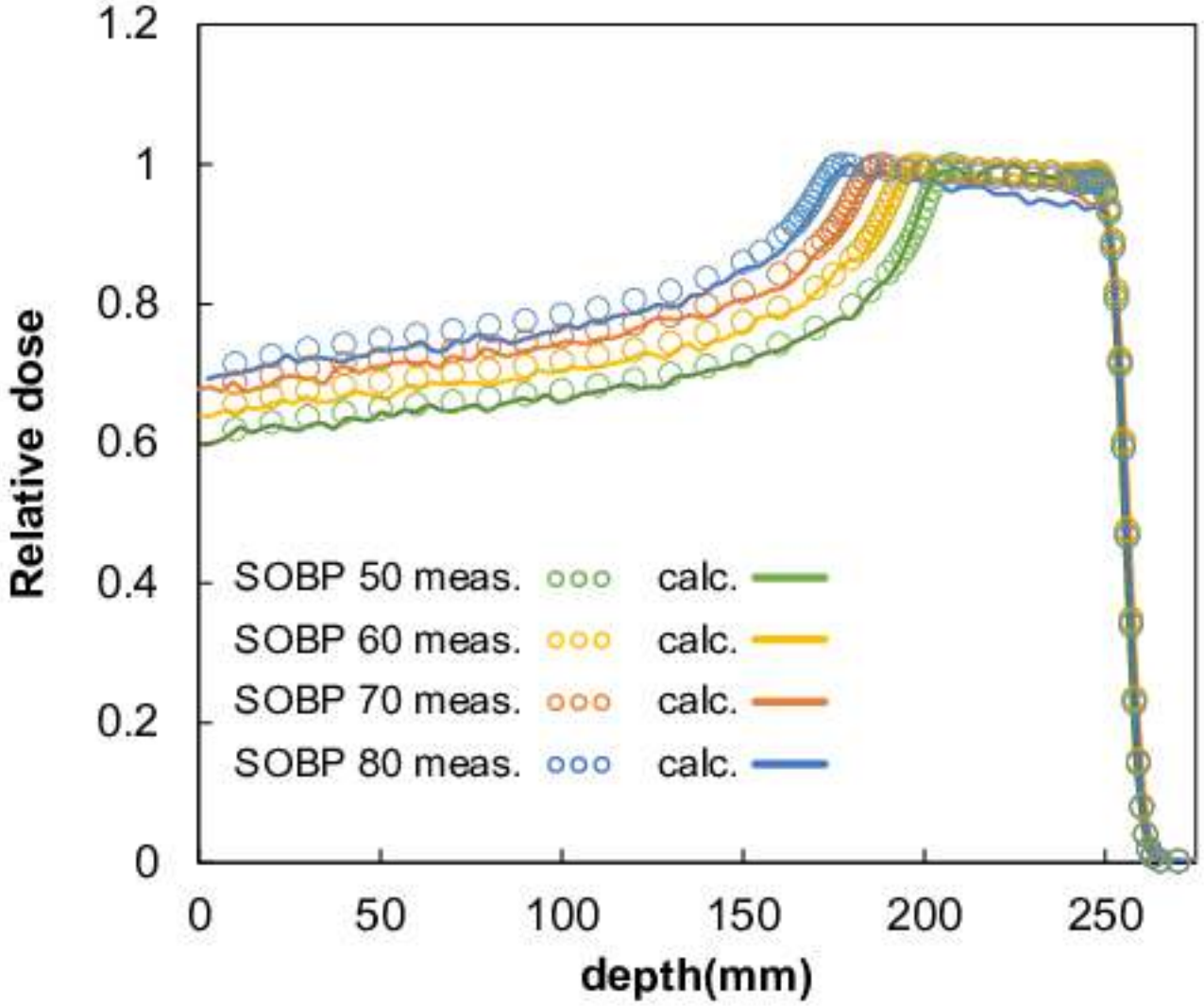
➤ **ワブラー半径とmgfの関係**



MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

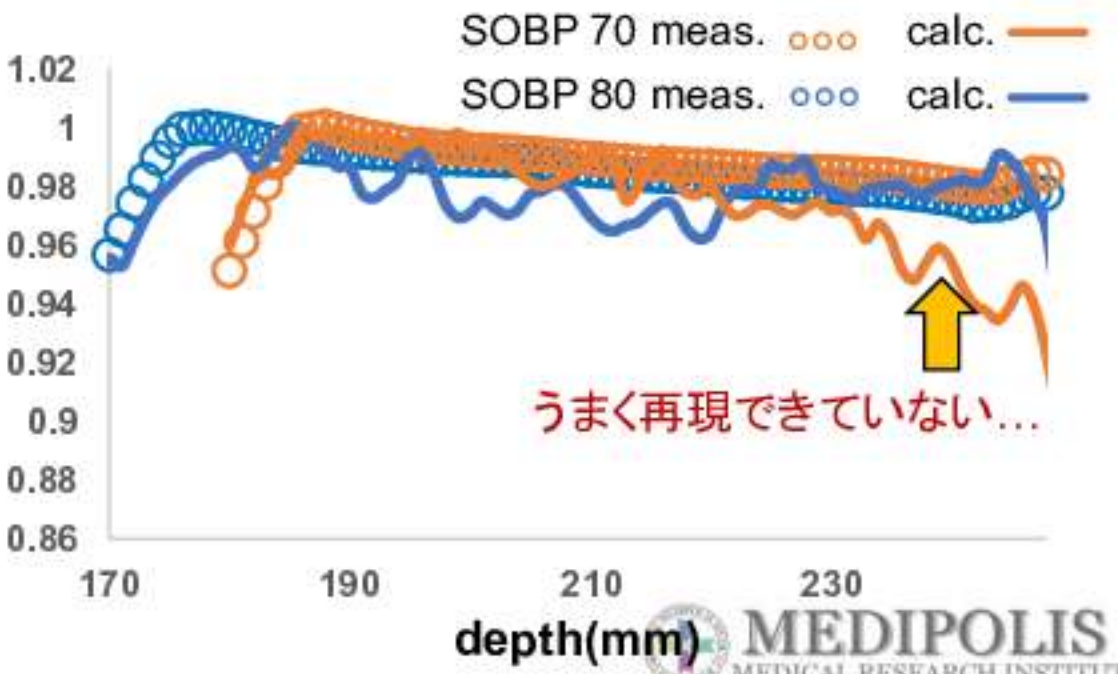
モデリング結果③ SOBPビームのモデリング

SOBP：PDD



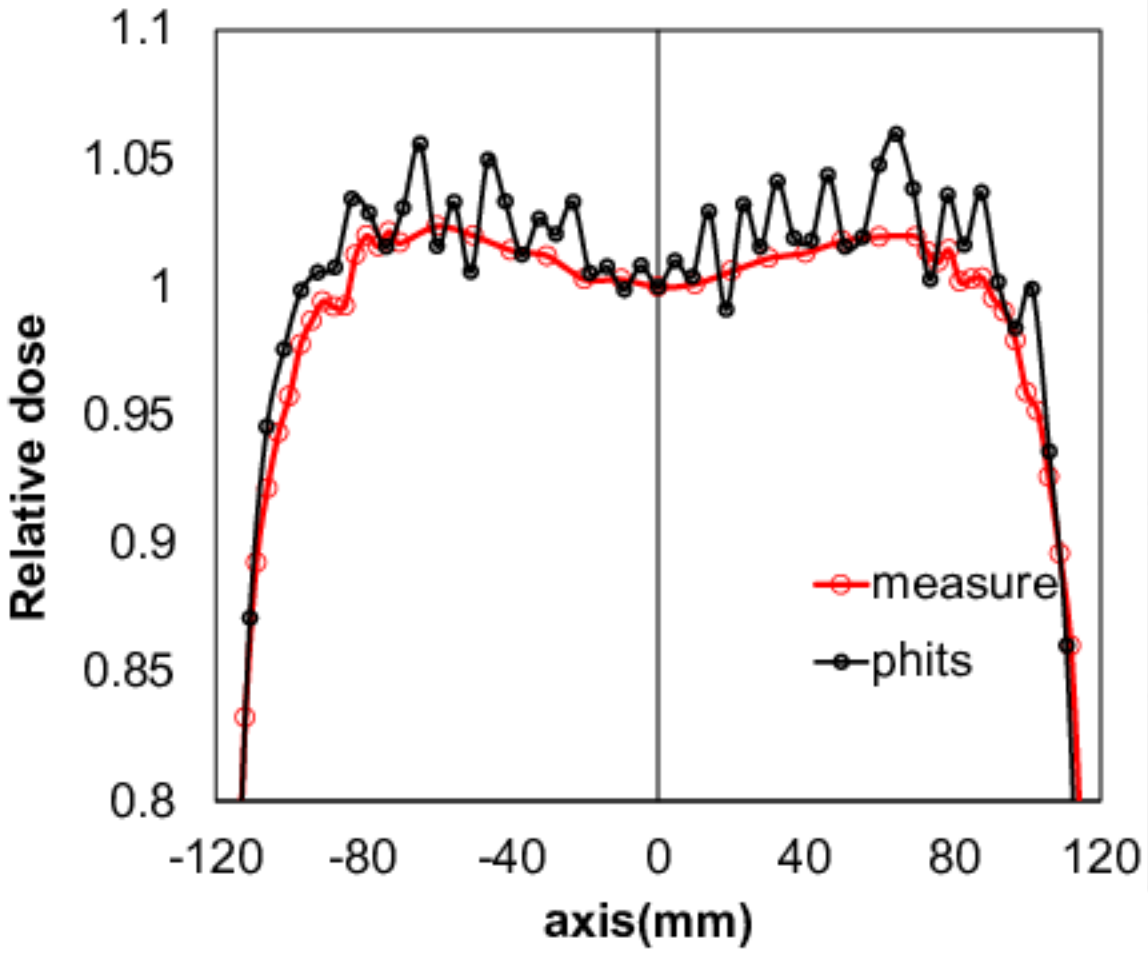
➤ ガンマ解析結果

SOBP	2mm/2%	1mm/1%
50	96	72
60	96.6	65
70	78.9	53
80	97	57



結果③ SOBPビームの再現性 (OCR)（ proximal / Iso / distal ）

SOBP : OCR



Gamma pass rate

SOBP size(mm)	axis	3mm/3%	2mm/2%	1mm/1%
50	x	**82**	**58**	**33**
	y	**80**	**62**	**40**
60	x	**83**	**60**	**33**
	y	**81**	**60**	**30**
70	x	**88**	**84**	**69**
	y	**78**	**70**	**52**
80	x	**87**	**83**	**73**
	y	**81**	**77**	**43**

今回の検証でのプロセスマップ　（基礎検証）

ビームデータ測定

➢ Pencil,Wobbler,SOBP beam（PDD,OCR）

⇩

ガントリーヘッド作成

➢ ビームライン上内部構造を再現

⇩

ビームモデリング

➢ Pencil beam → SOBP beam

⇩

モデリング精度検証

➢ ガンマ解析（PDD,OCR）

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

モデリング精度検証

➤ モデリング条件と異なる条件での計算精度を確認する必要がある。

臨床条件に合わせて変化するパラメータ

- Energy
- Wobbler半径
- 散乱体厚
- リッジフィルター
- レンジシフター
- 照射野サイズ
- 測定深
- MLC angle

今回はこの2つを検証

検証条件

	モデリング条件	検証条件
Energy	210	210
Wobbler	115	115,122,126
散乱体	3.7	3.7
Ridge	50,60,70,80	50,60,70,80
Range shifter	0	0,60,120
Field Size	15x15	15x15
測定深	Iso center	Iso center

現在OCRについてのみ実施
評価方法はガンマ解析

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

モデリング精度検証 結果

Gamma pass rate ： 3mm / 3%

SOBP size(mm)	Wobbler size(mm)	Range shifter(mm)	Iso
50	115	60	**92.1**
		120	**90.5**
	122	60	**92.3**
		120	**94.2**
60	115	60	**94.5**
		120	**90.6**
	122	60	**90.7**
		120	**90.3**

SOBP size(mm)	Wobbler size(mm)	Range shifter(mm)	Iso
70	115	60	**90.3**
		120	**88.8**
	122	60	**90.3**
		120	**87.6**
80	116	60	**90.6**
		120	**90.2**
	122	60	**90.1**
		120	**87.5**

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

考察

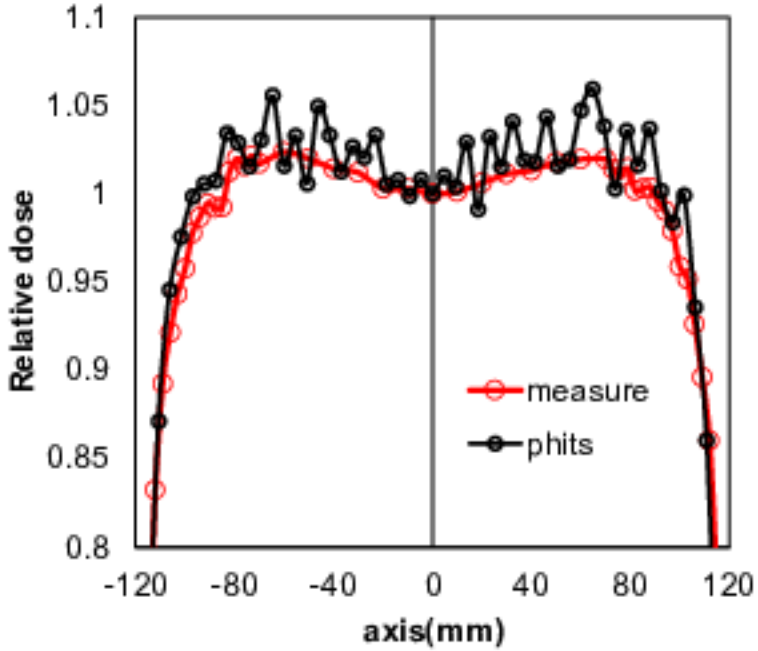
☑ Pencil beam, wobbler beamで精度良く合っているが、SOBP (特に70で…)で再現精度が落ちる。

➤リッジフィルタ形状及びステップ分割数が不十分か…

☑ OCRの平坦部分において周期的な増減が見られる。

➤ 原因について調査中

☑ 3次元線量分布については、これから詳細な確認が必要



☑ 今後の検討事項

- 複雑な照射野での線量分布検証
- DICOM CT Imageを使用したRT-PHITSへの応用
- 不均質領域に対する線量計算精度について、TPS(XiO)と比較
- end-to-end testによる精度検証

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

まとめ

☑ ビームモデルの作成、及び再現性について評価を行った

☑ 一部計算精度の劣る条件はあるが、PHITSによる実測値を再現できることが確認できた。

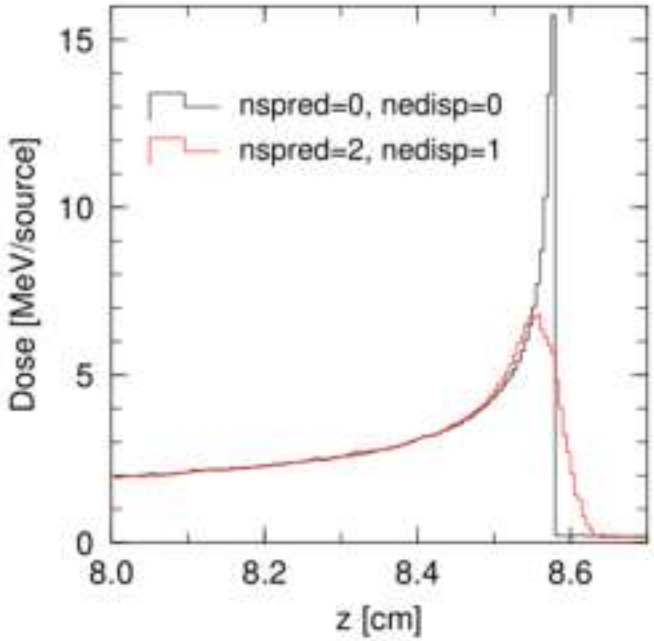
☑ 検討事項や未解決の問題などが多くあるため、1つずつ解決していく。

- ご清聴ありがとうございました

荷電粒子のビームライン設計オプション

nspred & nedisp: 荷電粒子の物質中での角度・エネルギー分散を考慮するためのオプション。
加速器ビームのビームライン設計の際，不可欠となる。[Parameters]セクションに入力

ビームライン設計時の奨励値は nspred = 2 & nedisp = 1
（初期設定では共に0）



200MeV/u炭素線を水に照射した際の吸収線量の深さ分布（ブラックピーク付近を拡大）

線源パラメーターの設定について…

```
dmax(2)  =      20.0   # High energy transport [MeV] (Neutron)
dmax(12) =       500   # High energy transport [MeV] (Electron)
dmax(13) =       500   # High energy transport [MeV] (Positron)
dmax(14) =       500   # High energy transport [MeV] (Photon)

ascat1   =      13.6   # (D=13.6) S2 parameter in Lynch formula for nspred = 2
ascat2   =  8.80E-02   # (D=0.088) e parameter in Lynch formula for nspred = 2
negs     =         1   # (D=0) =1 EGS photon and electron
nucdata  =         1   # (D=0) 0:no, 1:Neutron nuclear data library
```

詳細な計算にはnegs=1が奨励！！*

✓ emin(i), i:粒子ID番号

各粒子のカットオフエネルギー。指定したエネルギー以下の輸送は行わない。計算時間を短縮したい場合や，高い空間分解能を必要とする計算で変更が必要となる。

✓ dmax(i), i:粒子ID番号

断面積ライブラリを用いて輸送する粒子エネルギーの上限
JENDL-4.0/HEなど高エネルギー核データライブラリを使う場合に設定

emin(1) = 0.001 # Cut-off energy [MeV] (Proton/ Neutron/ others/ Electron/ Positron/ Photon)

変更が必要な計算例

- ✓ 1mm以下の分解能で吸収線量を計算したい → emin(12, 13) = 0.001*
- ✓ 体系が大きいのでなんとか計算時間を短縮したい → emin(12, 13) = 1.0
- ✓ 高エネルギーの光子・電子・陽電子を輸送したい → dmax(12-14) = 1.0e5**
- ✓ JENDL-4.0/HEデータライブラリを利用したい → dmax(1,2) = 200.0

核反応モデルの変更

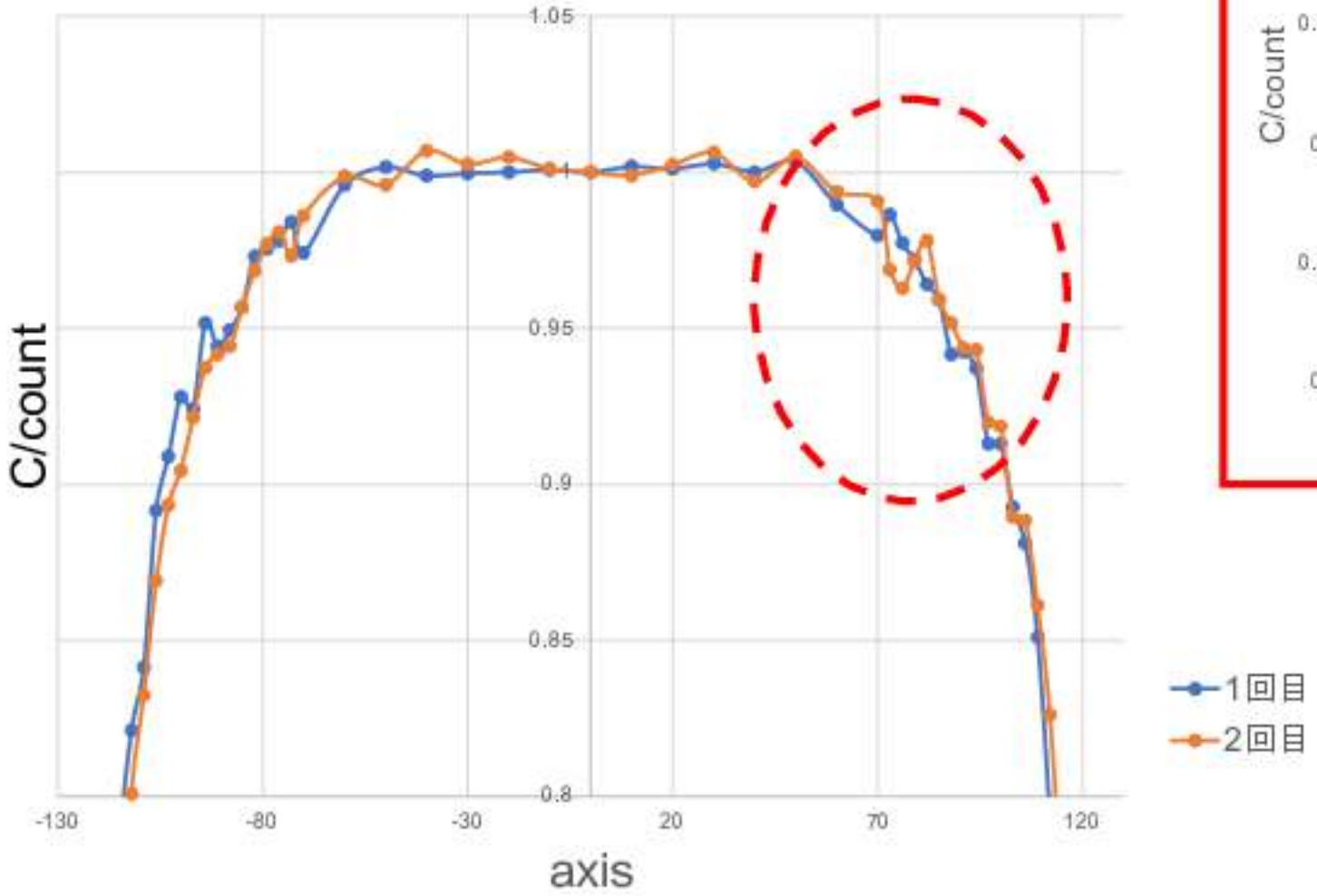
PHITSには、Bertini, JAM, JQMD, INCL, INC-ELFという核反応モデルがあり、状況に応じてユーザーが使い分けることができます。

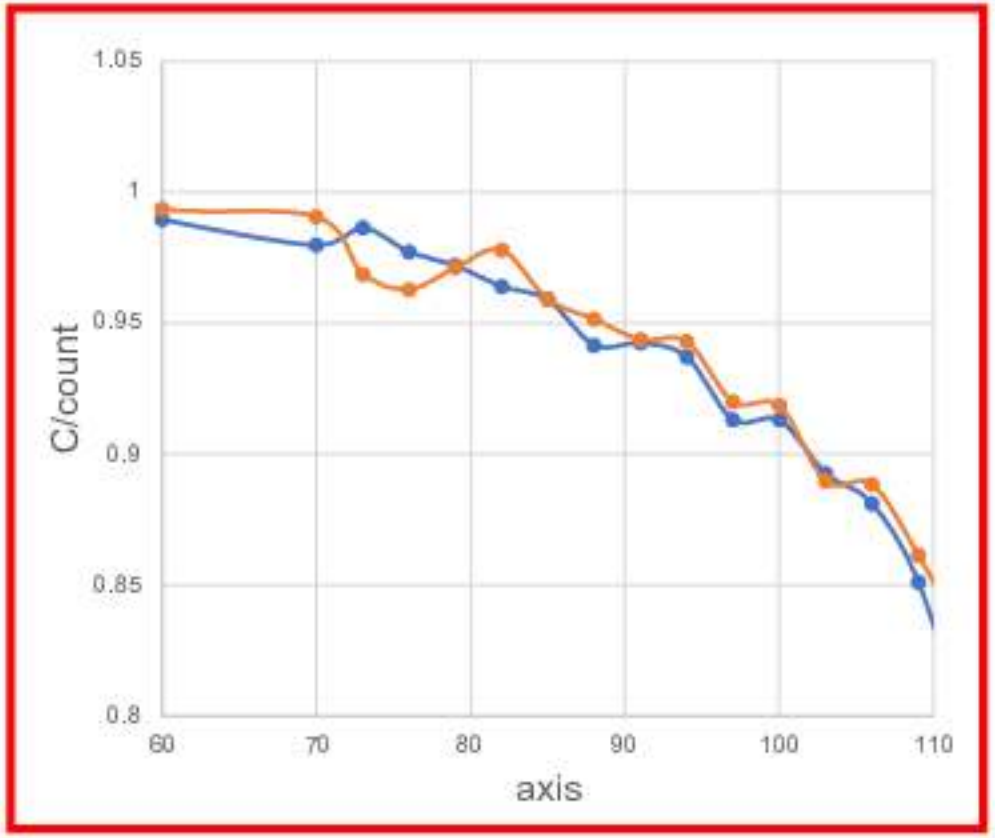
inclg	(D=1)	INCLを使用する場合の切り替えオプション
ejamnu	(D=20.)	JAMへの切り替えエネルギー(MeV)
ejampi	(D=20.)	パイオン入射反応のJAMへの切り替えエネルギー (MeV)
eqmdnu	(D=20.)	JQMDへの切り替えエネルギー (MeV)
eqmdmin	(D=10.)	JQMD適用の下限エネルギー (MeV/n)
ejamqmd	(D=3000.)	原子核反応のJQMDからJAMQMDへの切り替えエネルギー (MeV/n)
incelf	(D=0)	INC-ELFを使用する場合の切り替えオプション
dmax(i)	(D=emin(i))	i-th粒子のライブラリー利用の上限エネルギー

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

測定データのばらつき

同じ条件で2回測定を行った結果…
ビームにばらつきが見られた





MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

小照射野での再現性について

【体系】

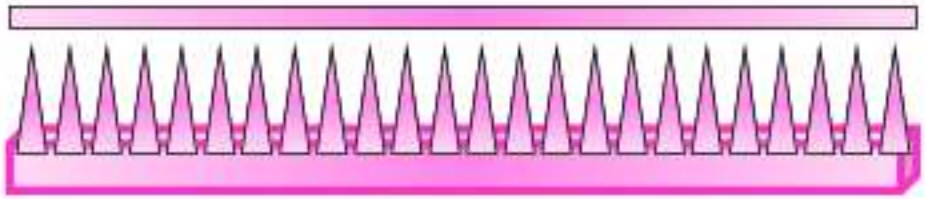
Ridge-filter：60 mm

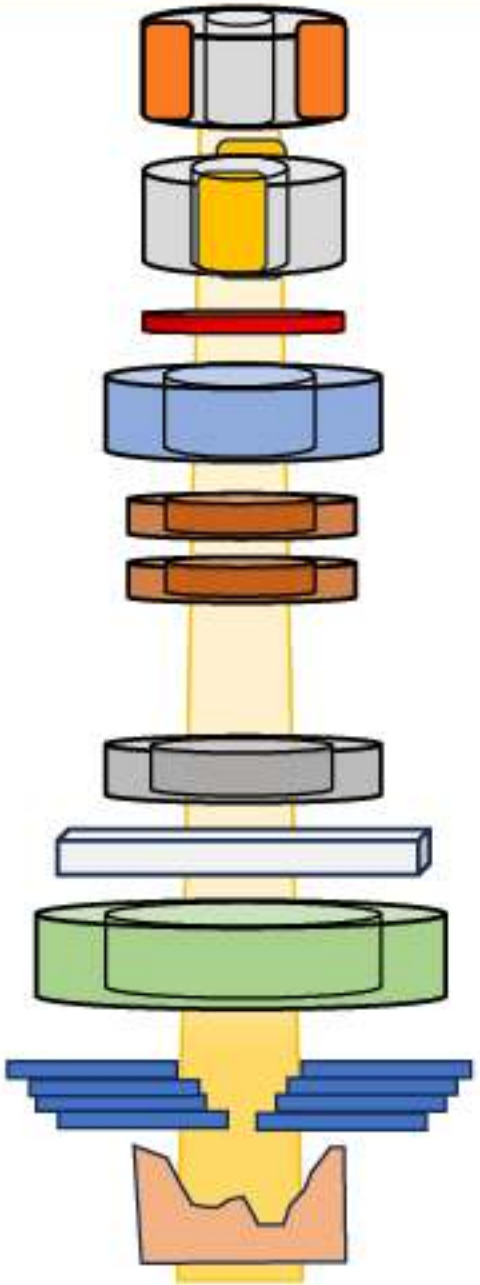
Wobbler半径 ：115,122,126 mm

Range shifter ：0,60,120 mm

照射野サイズ：　cm²

測定深：





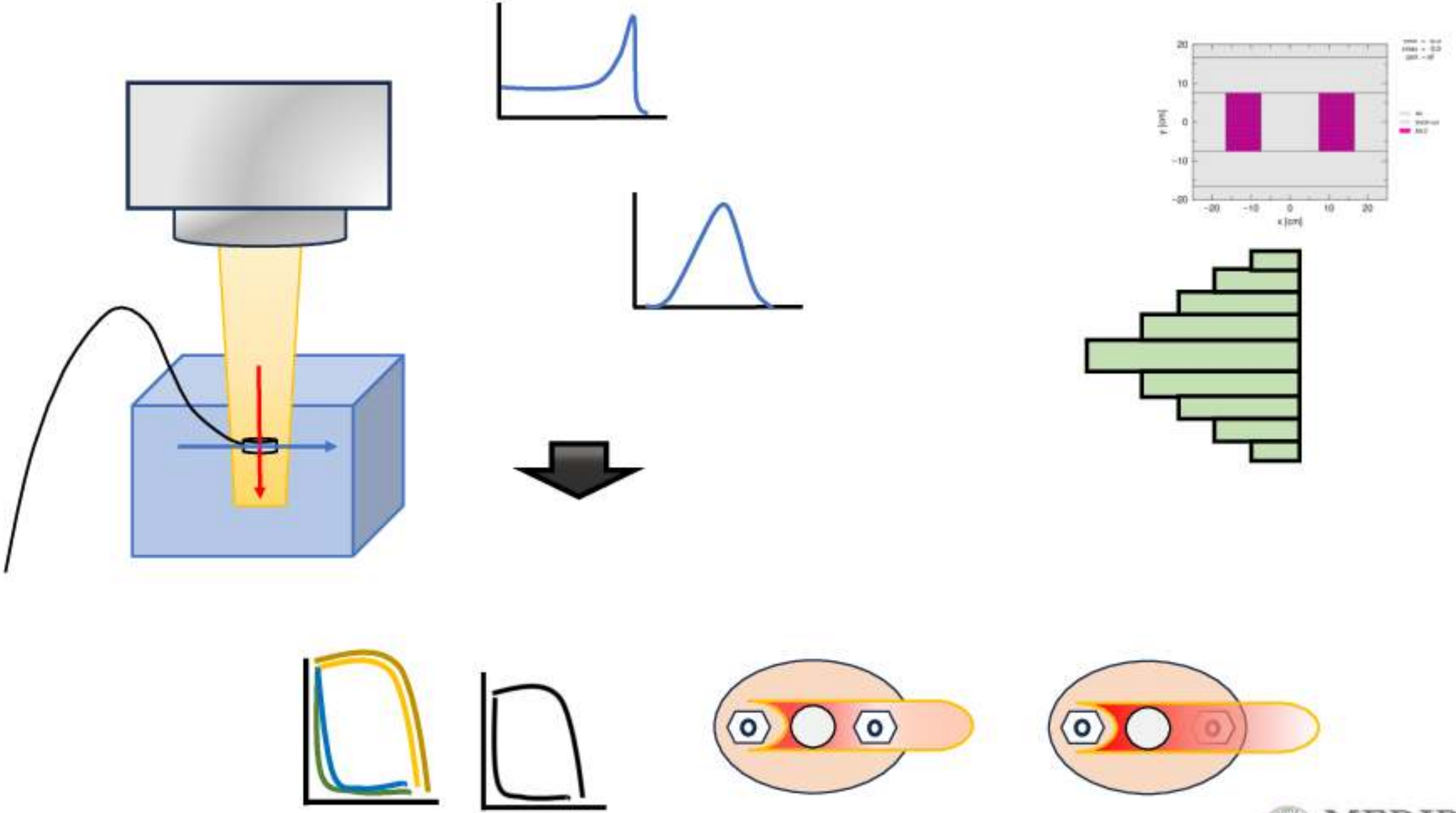
MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

小照射野での再現性について

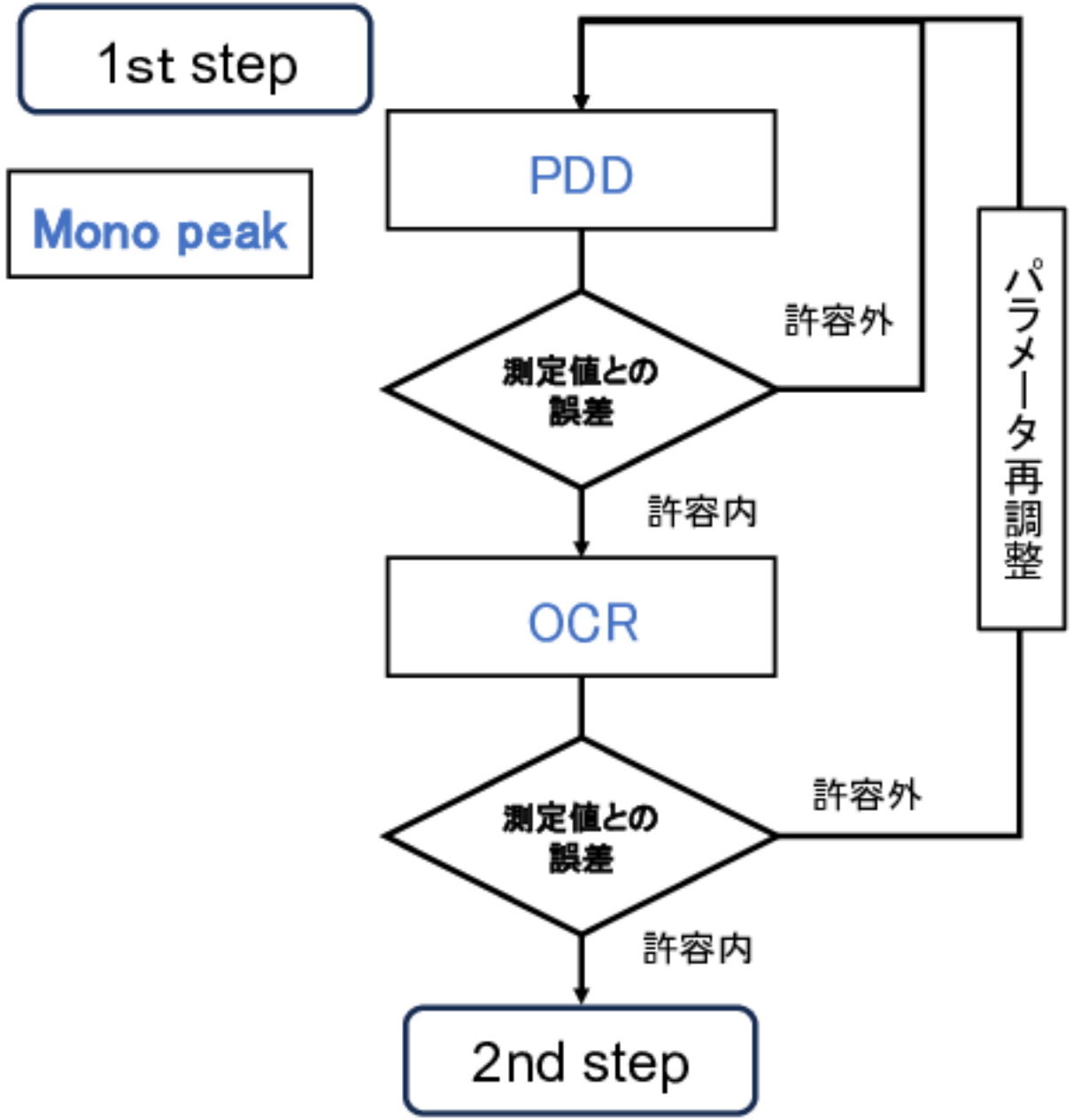
Gamma pass rate：3mm / 3%

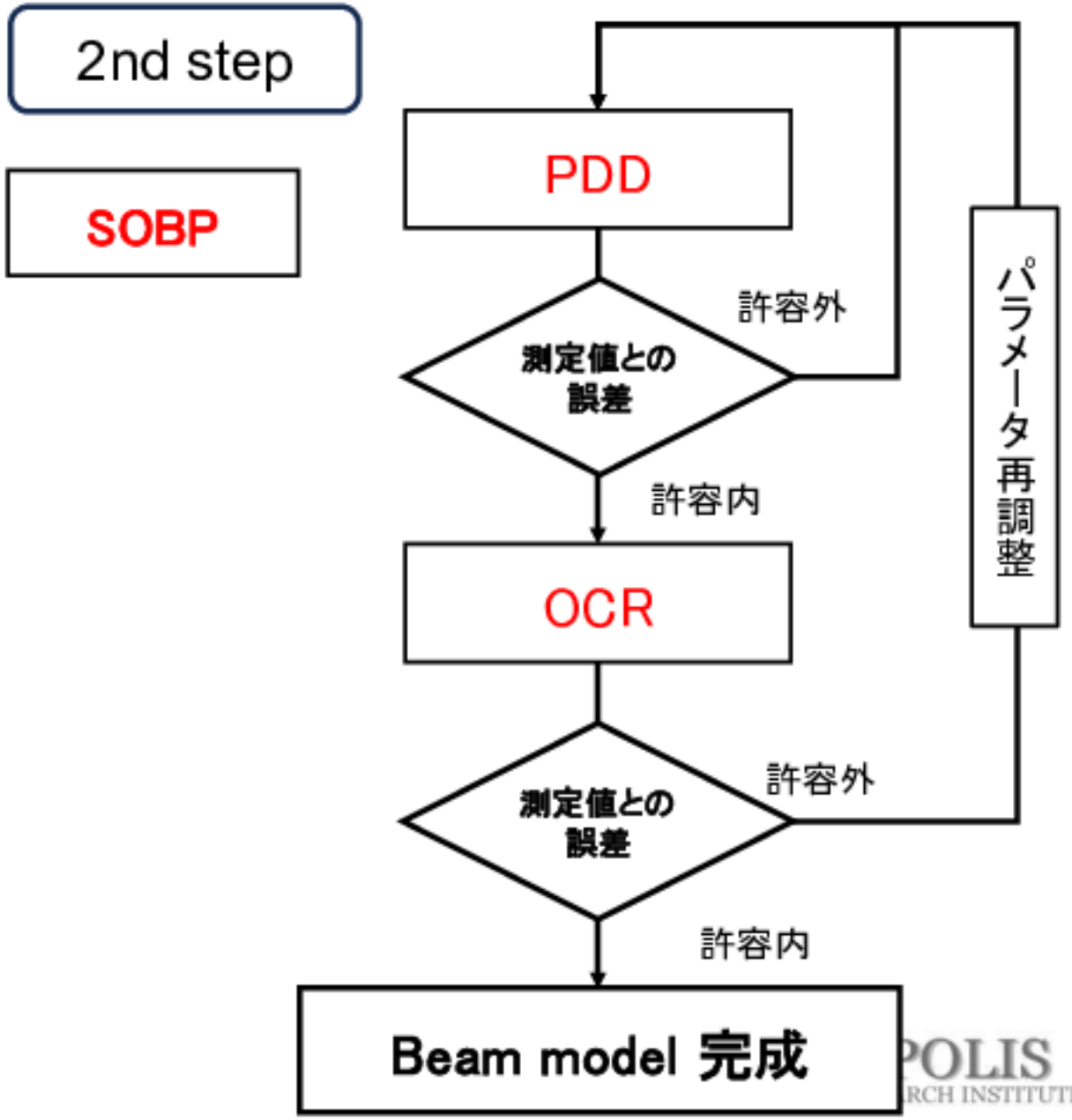
SOBP size(mm)	Wobbler size(mm)	Range shifter(mm)	Field size(cm²)	Iso
50				
60				
70				
80				

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

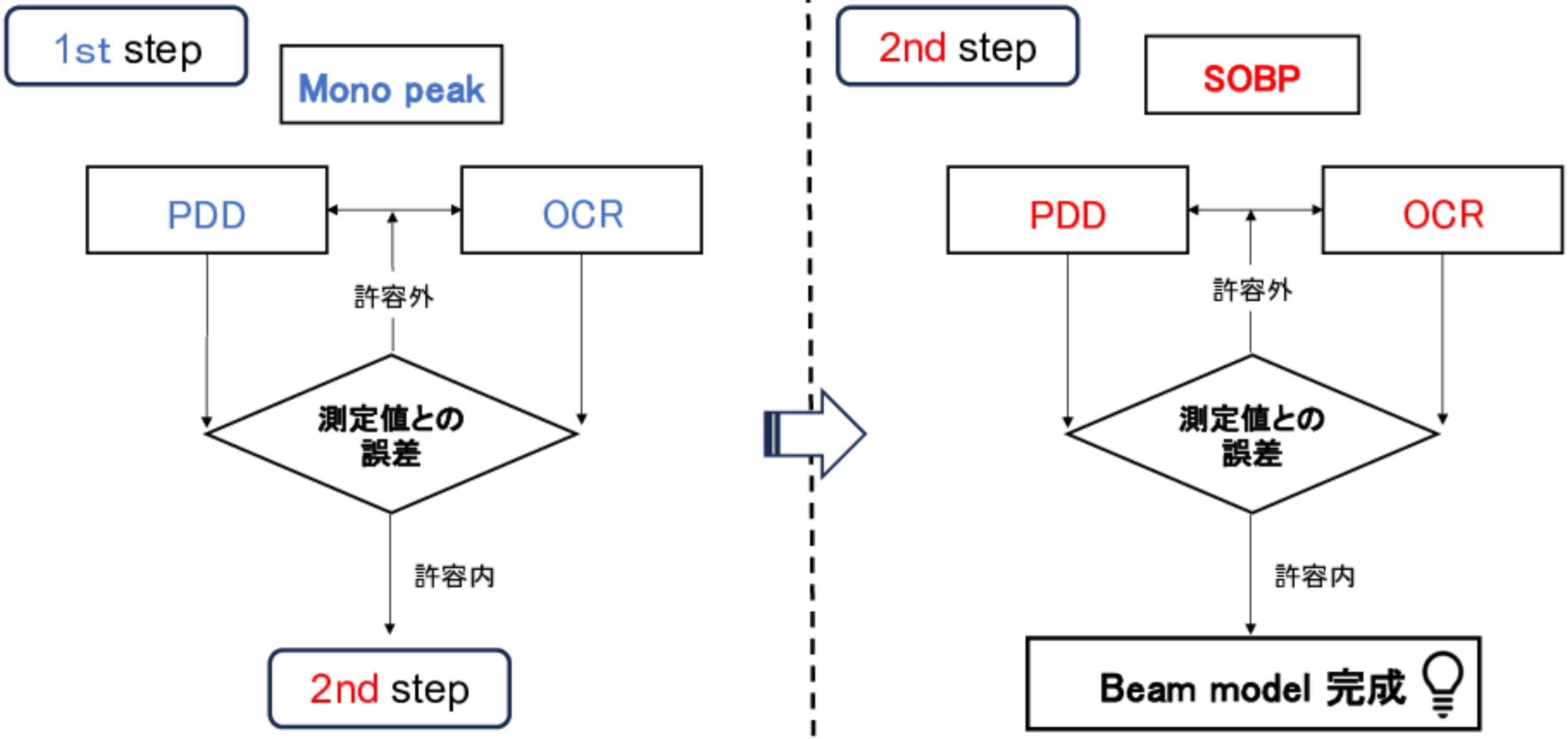


ビームモデリングでのTry & Error…



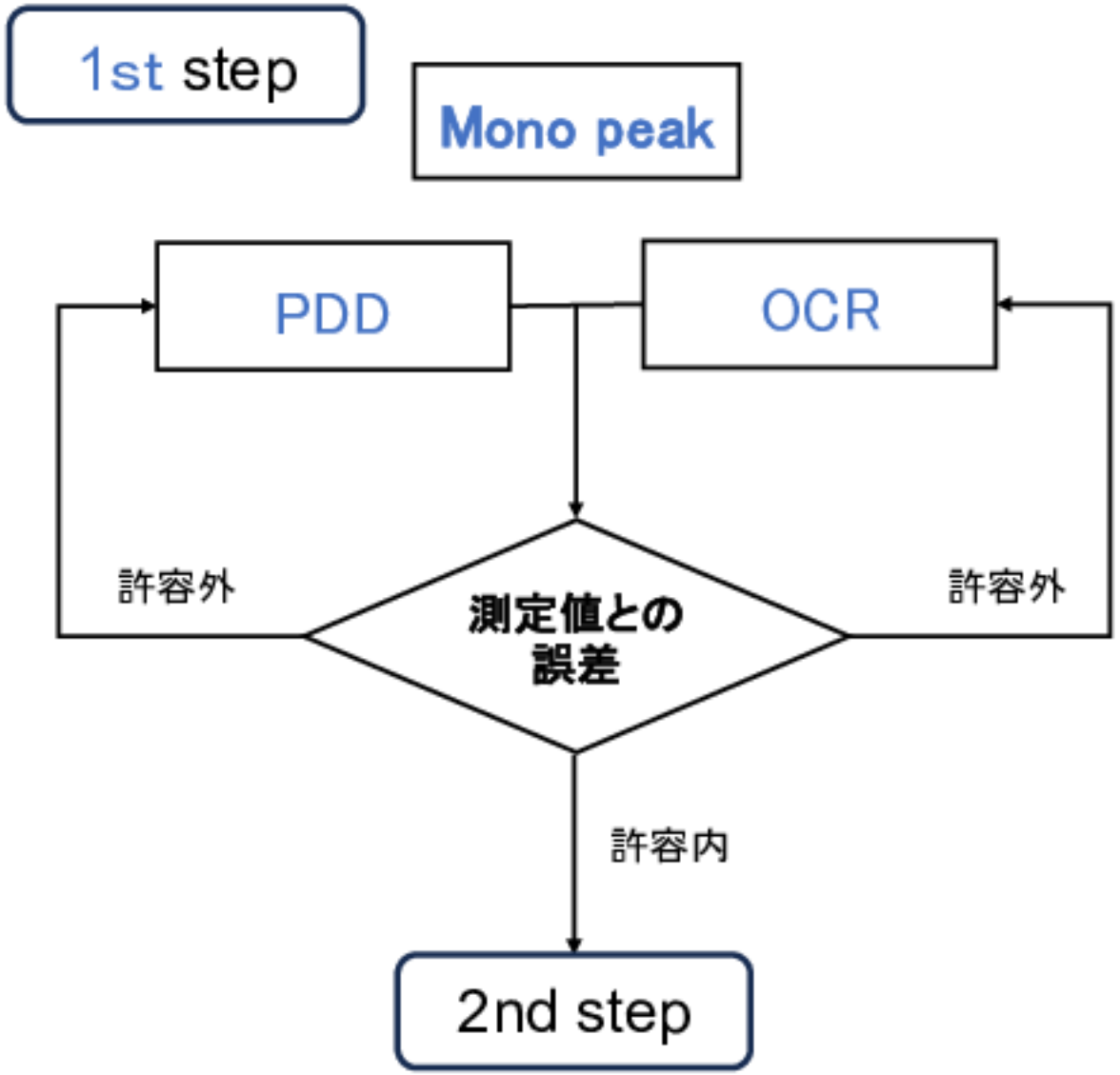


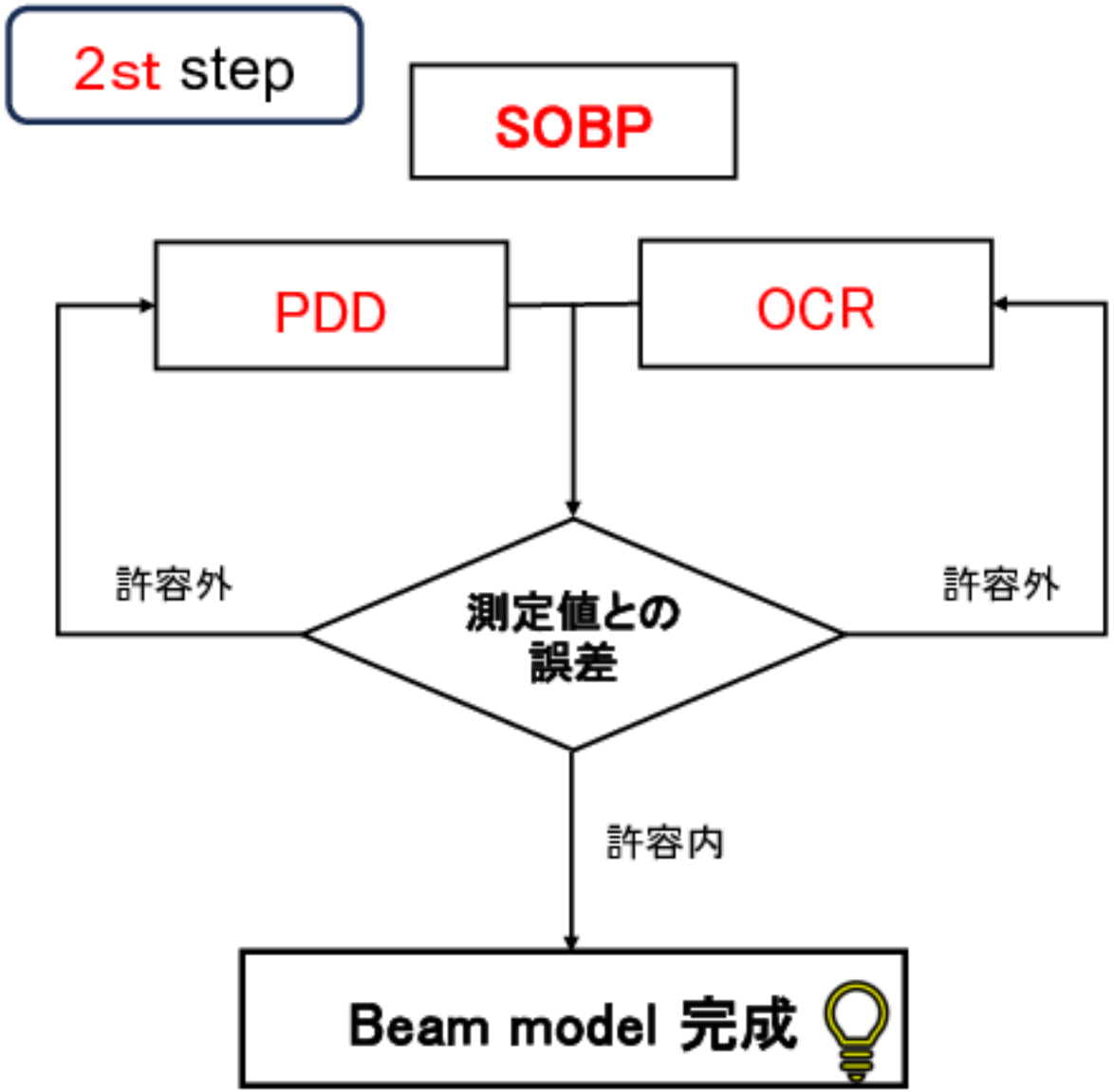
ビームモデリングでのTry & Error…



MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

ビームモデリングでのTry & Error…





MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

中性子が発生する割合について…

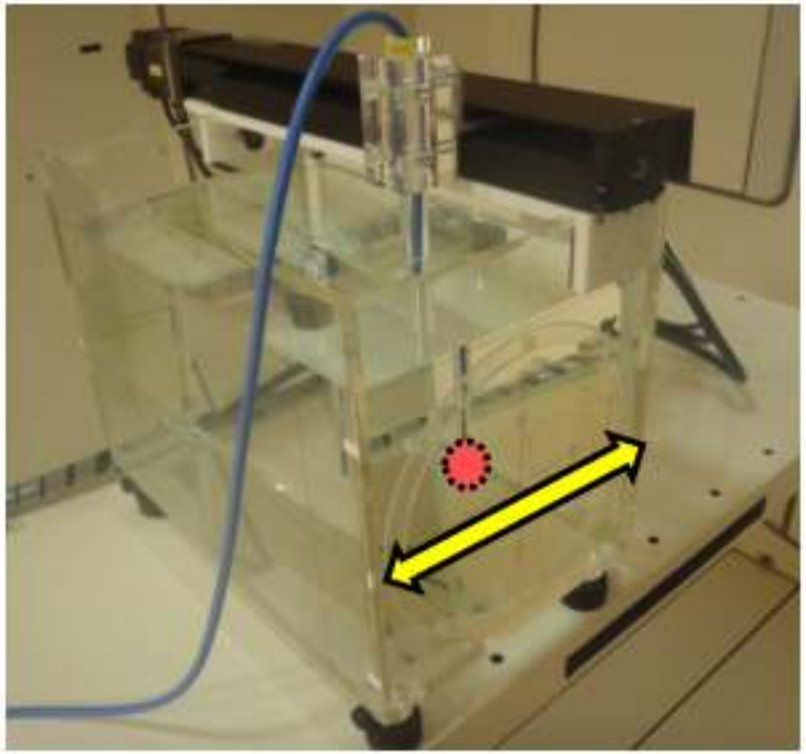
Pencil beam spot scanning ＜ **Broad beam**

AAPM TG 158: Measurement and calculation of doses outside the treated volume from external-beam radiation therapy

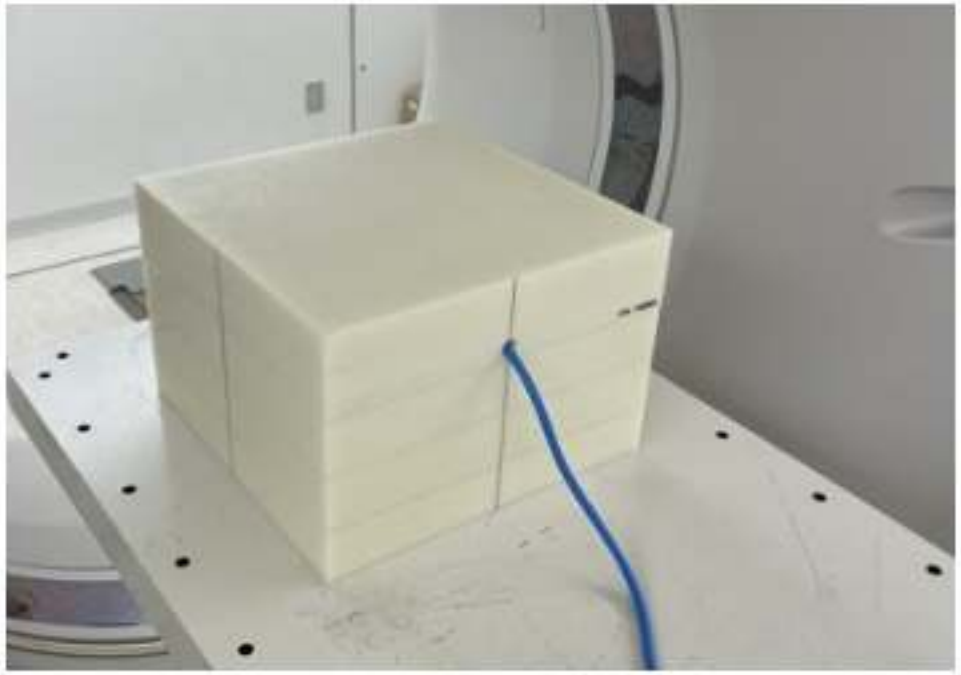
「The dosimetric advantage to the patient is even more pronounced when scanning proton therapy is employed. This technique improves the dose conformality relative to scattered proton therapy and thereby reduces the integral dose to the patient. It also reduces the dose associated with neutrons produced in the treatment head.」

当センターの患者QAシステムについて

water fantom



Tough water fantom



現在、患者QAでの測定領域は、SOBP中心（Iso center）

横方向のプロファイルも測定可能だが…

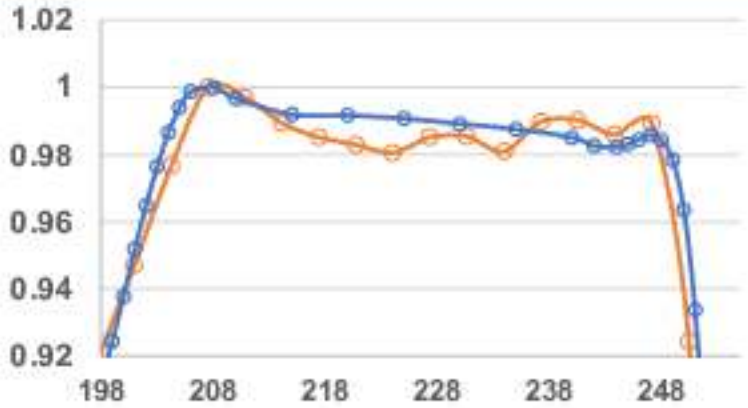
患者QA測定に時間を要している ⌛

MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

Ridge-filter：50,60mm

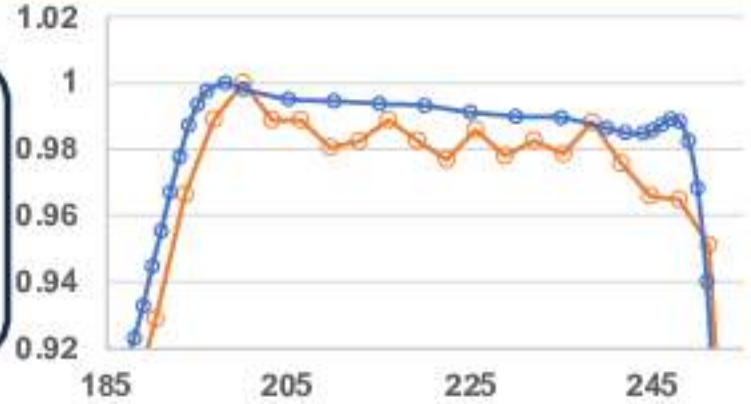
50mm

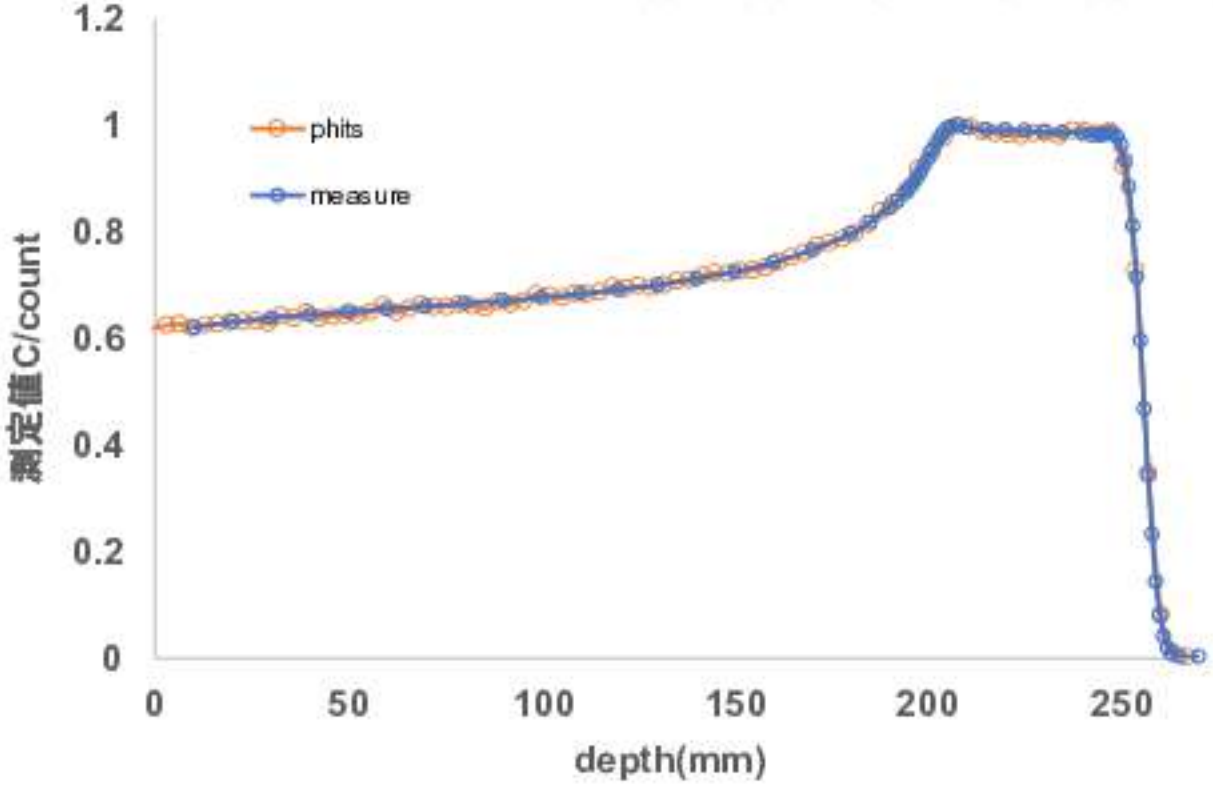
(pass rate)
1mm/1% = 97.1
2mm/2% = 100

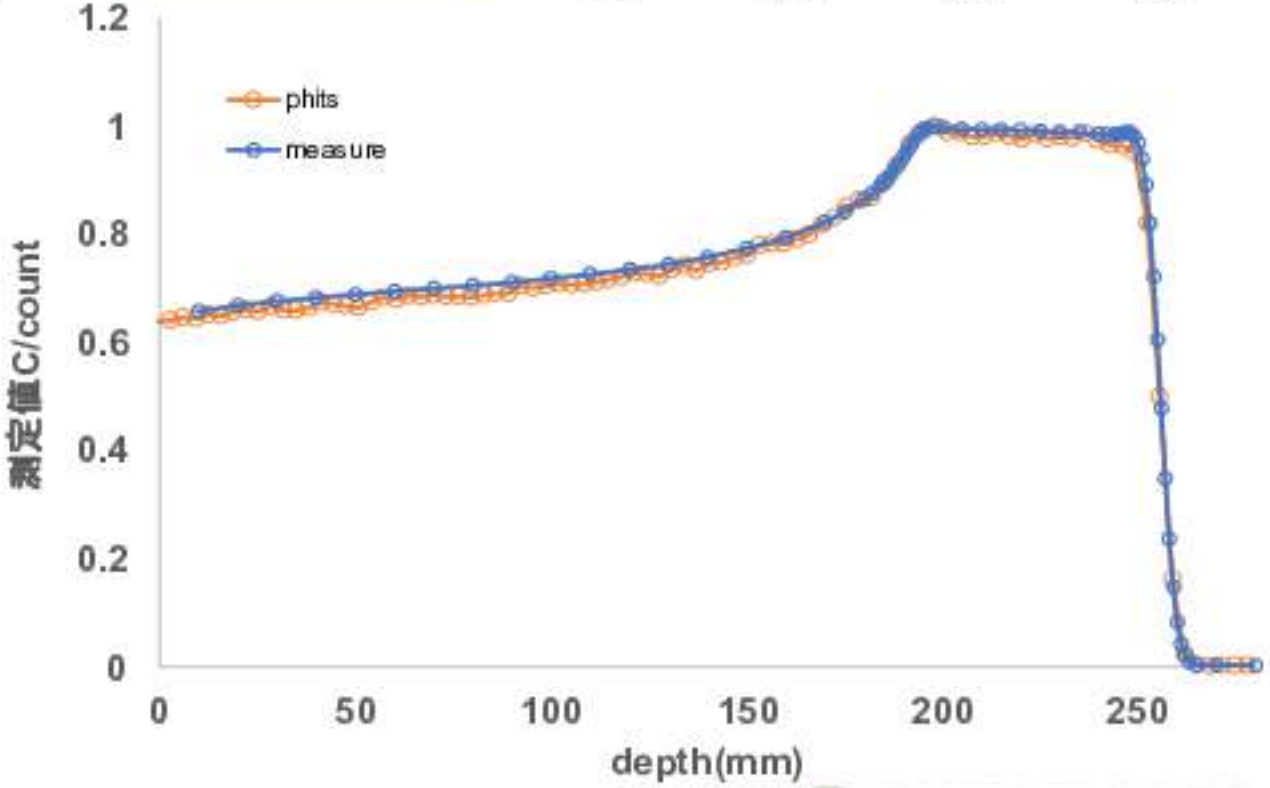


60mm

(pass rate)
1mm/1% = 89.7
2mm/2% = 100





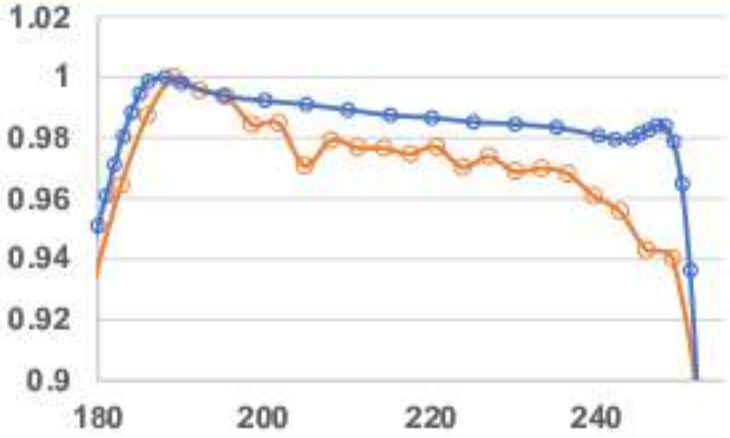


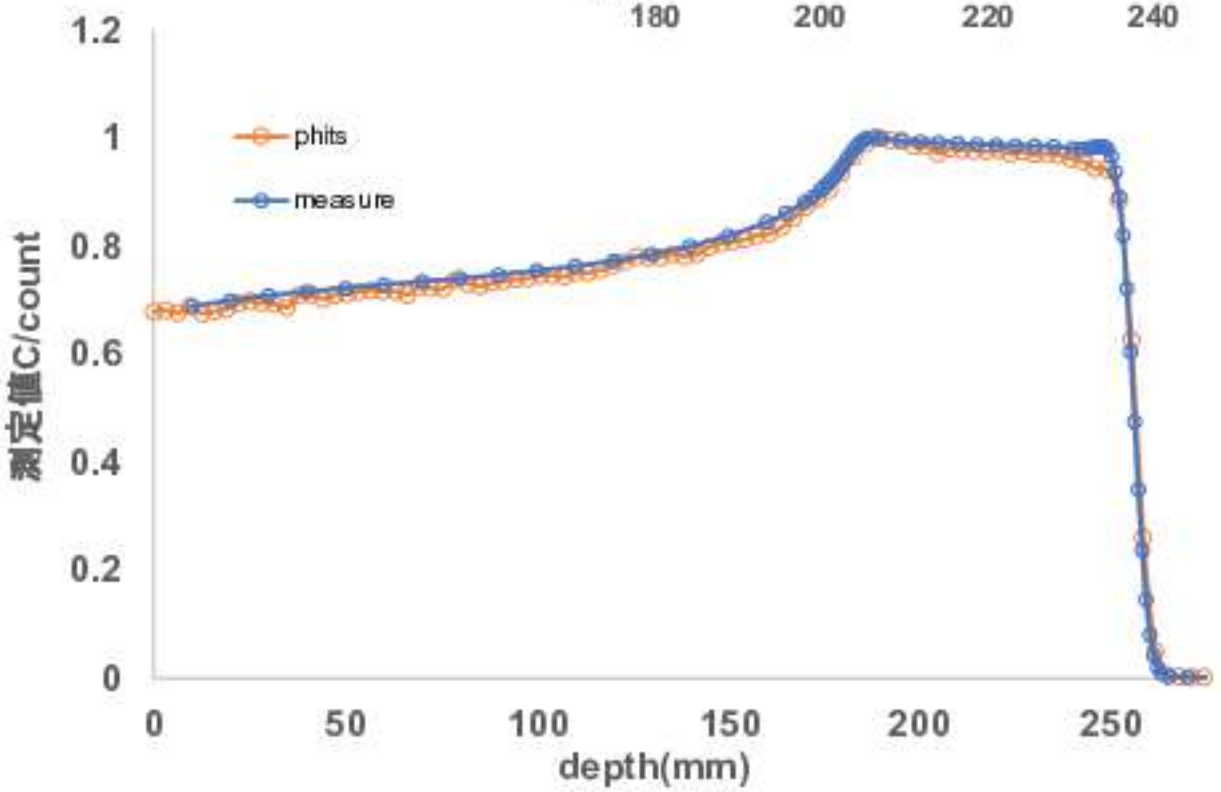
MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

Ridge-filter：70,80mm

70mm

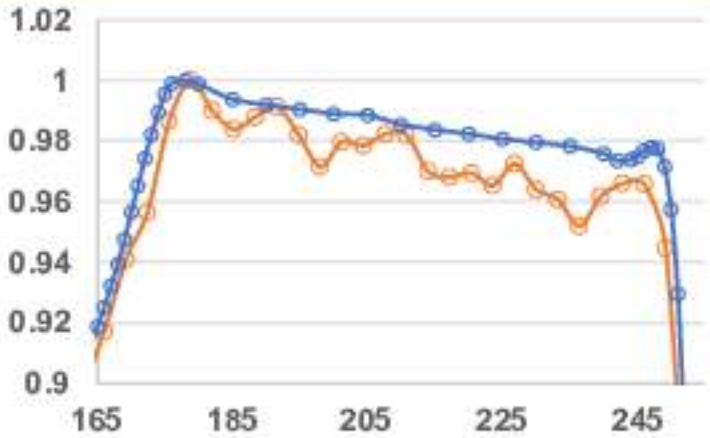
(pass rate)
1mm/1% = 66.2
2mm/2% = 95.6

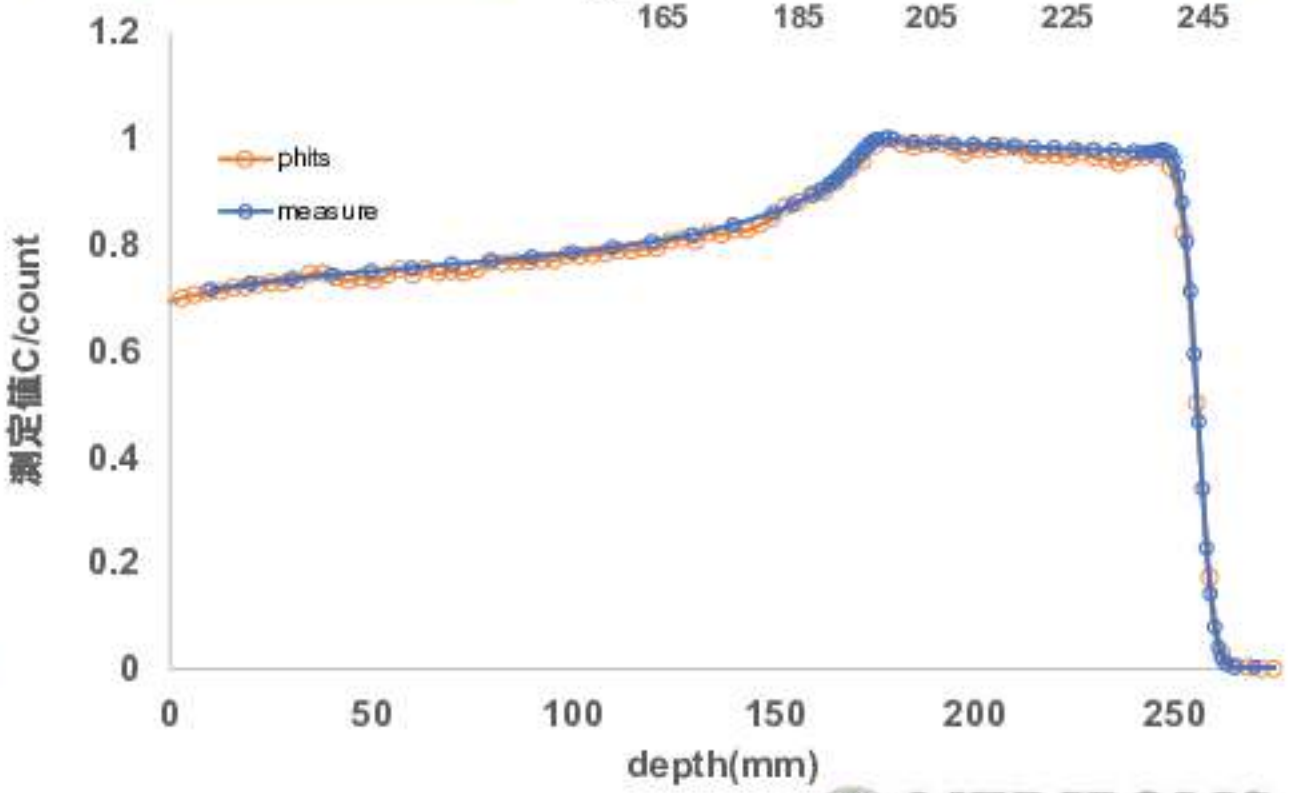




80mm

(pass rate)
1mm/1% = 95.6
2mm/2% = 100





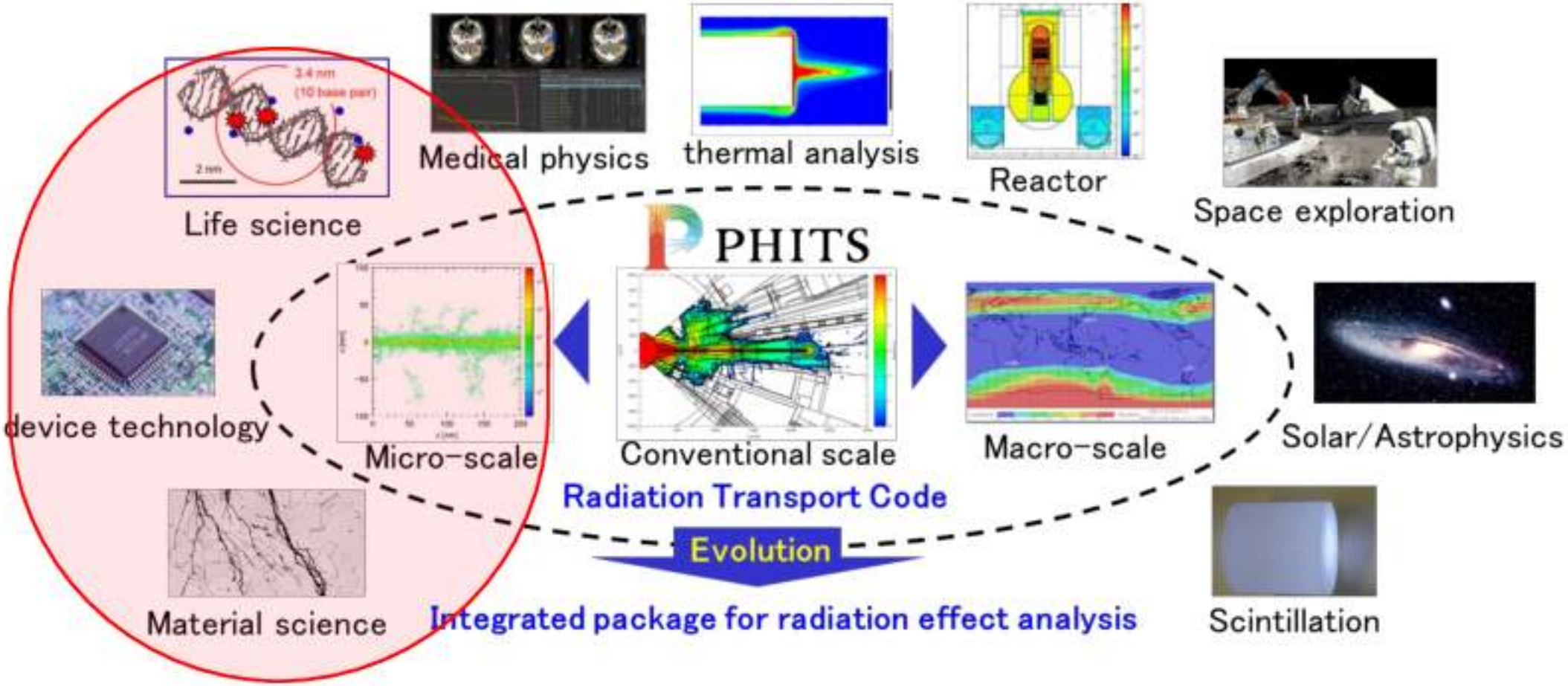
MEDIPOLIS
MEDICAL RESEARCH INSTITUTE

PHITSにおける飛跡構造解析モードの2024年度の現状と応用

○平田悠歩[1]，甲斐健師[1]，小川達彦[1]，松谷悠佑[2]，佐藤達彦[1]

日本原子力研究開発機構[1]，北海道大学[2]

背景



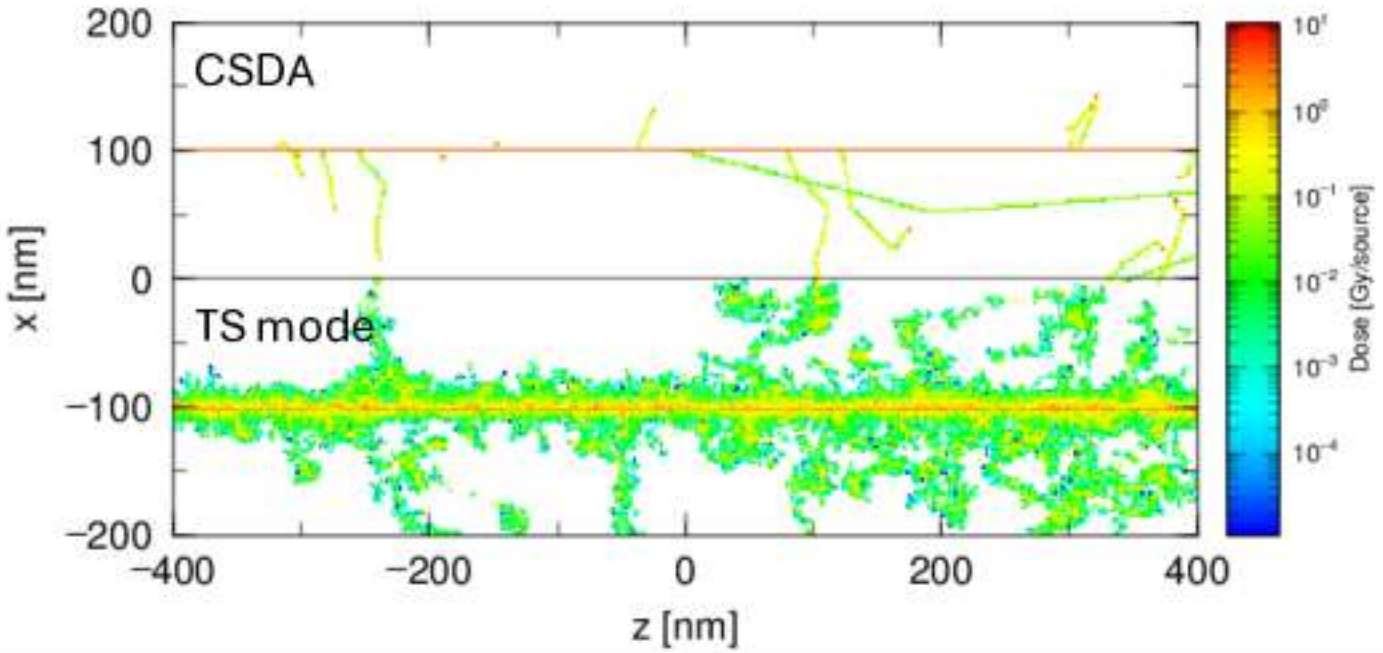
放射線が生体や材料に及ぼす影響の評価や発生機序の解明には
ミクロ(ナノ)スケールな放射線挙動解析が必要

➡ 飛跡構造解析モードを開発

目次

飛跡構造解析モードとは

5 MeV/uの炭素イオン周辺の付与エネルギー分布



高速に解析・エネルギー付与や粒子フルエンスを評価

- ✓ **連続エネルギー損失近似（CSDA）**：多くのイベントをまとめて再現
- ✓ **飛跡構造解析モード（TS mode）**：個別のイベントを全て再現

微小領域の評価・詳しいメカニズムの解析・長時間の計算

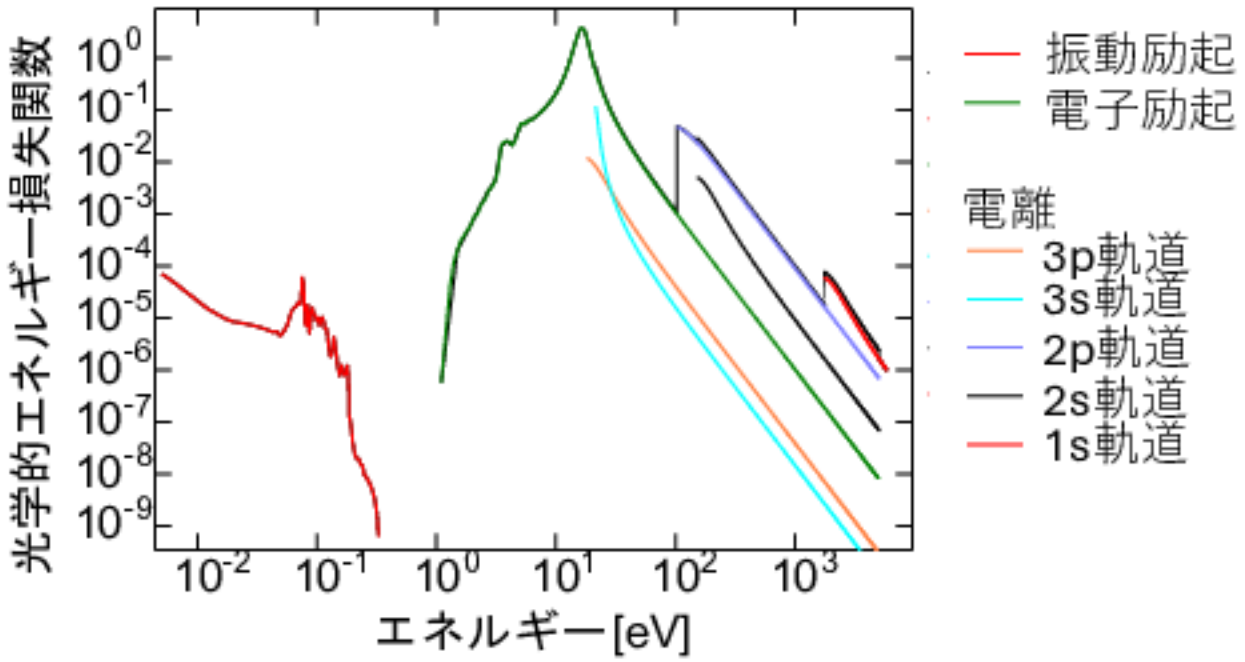
飛跡構造解析モードとは（モデル紹介）

	固有物質モード	任意物質モード
	物質ごとに断面積データを整備した **最も精密な解析モード**	モデルにより断面積データを導出 **より汎用的な解析モード**
電子線	水：ETS 半導体Si：ETS for Si	ETSART （Electron Track-Structure mode for ARbitrary Targets）
粒子線	水：KURBUC (Proton, Cのみ)	ITSART （Ion Track-Structure mode for Arbitrary Radiation and Targets）

目次

固有物質モードの概要

光学的エネルギー損失関数（Si）

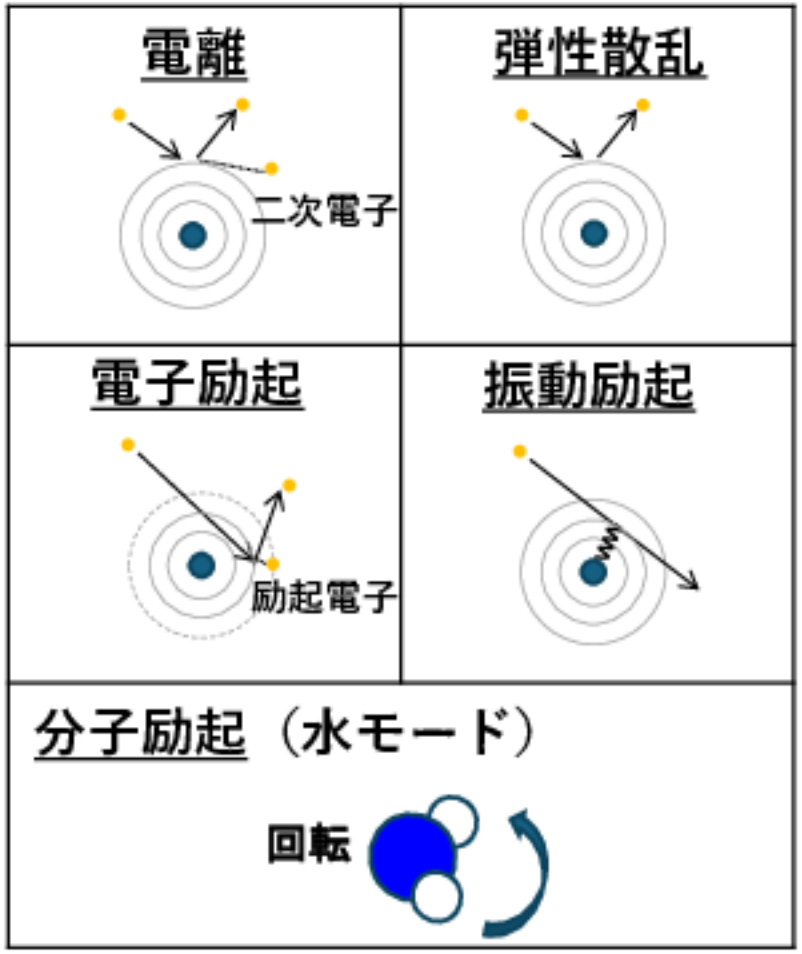


光の吸収率を基に

エネルギー吸収確率 ⇒ 相互作用断面

を計算

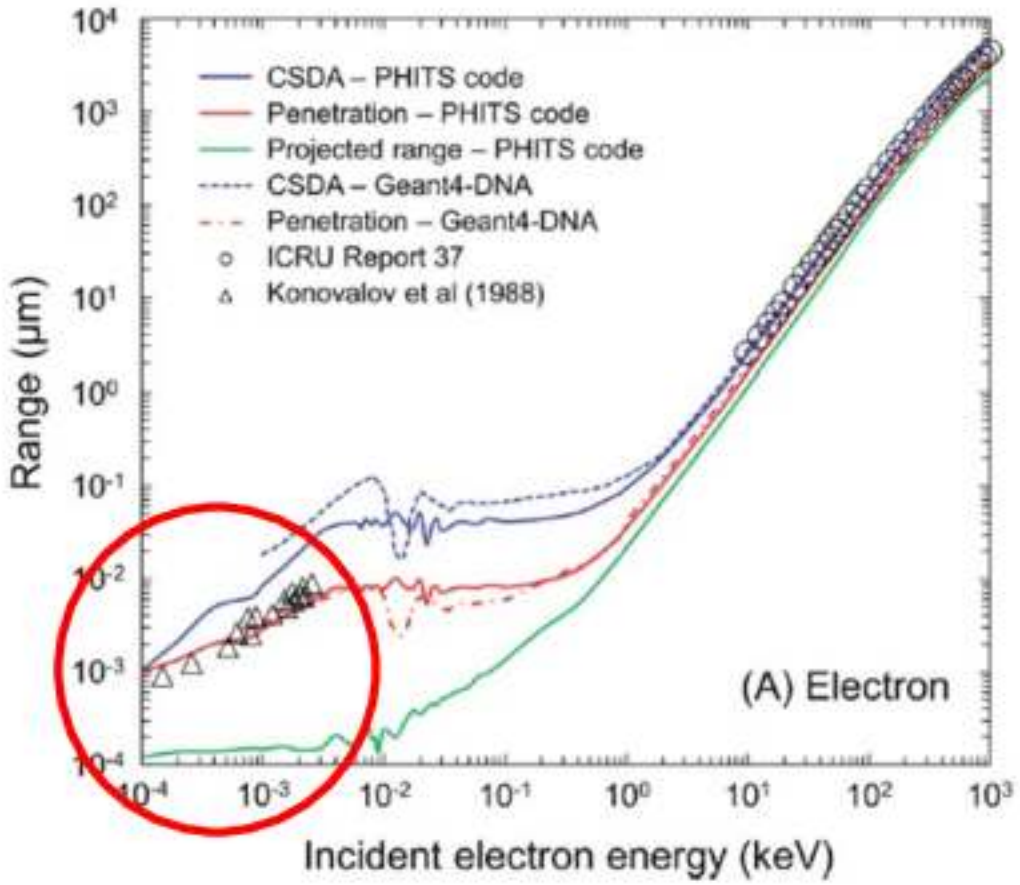
考慮する相互作用の種類



様々な種類の相互作用を明示的に再現

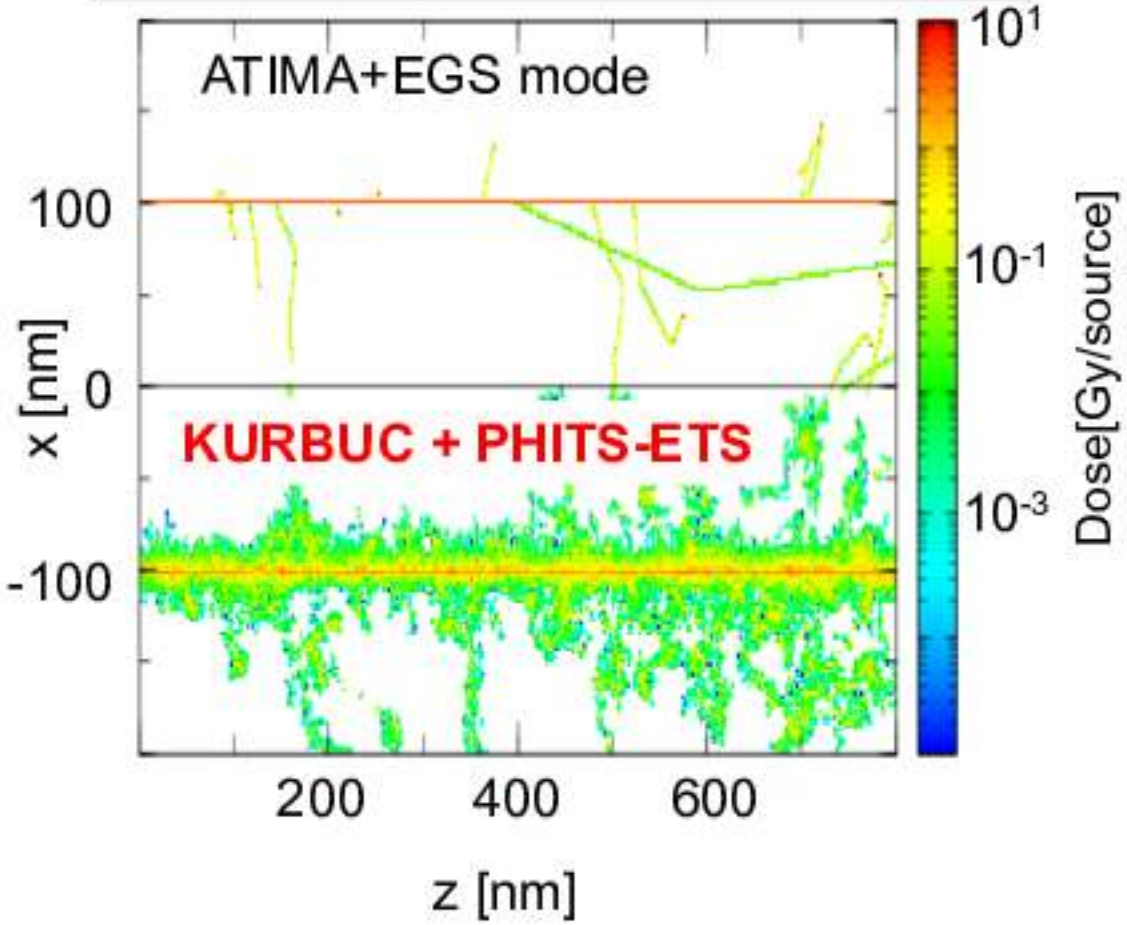
固有物質モードの概要（計算例）

水中の電子の飛程



Y. Matsuya, *et. al.*, Int. J. Radiat. Biol., 98, 148-157 (2022)

水中の5 MeV/n炭素線
エネルギー付与分布



数eVまで放射線を追跡、nmスケールで放射線の挙動を評価可能

目次

任意物質モードの概要

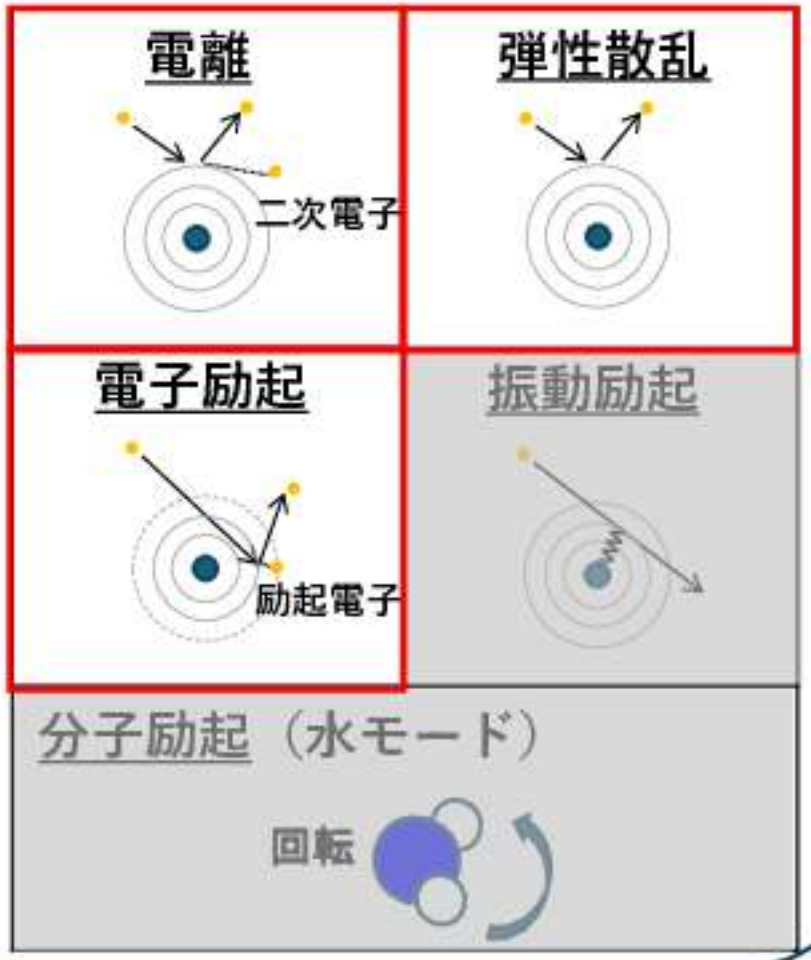
元素ごとの束縛エネルギー

		束縛エネルギー [eV]					
Z	元素	K	L1	L2	…	P3	Q1
1	H	13.61					
2	He	23.42					
3	Li	59.85	5.5				
4	Be	118.36	8.18				
⋮							
99	Es	139110	26824	26007	…	25.44	5.78
100	Fm	142680	27622	20894	…	25.77	5.85

電子殻ごとの断面積をモデルにより決定

EADL database (S. T. Perkins, *et al.*,Report No. CRL-50400-Vol.30 DOE Research Org.: Lawrence Livermore National Lab. (LLNL) https://www.osti.gov/biblio/10121422.)

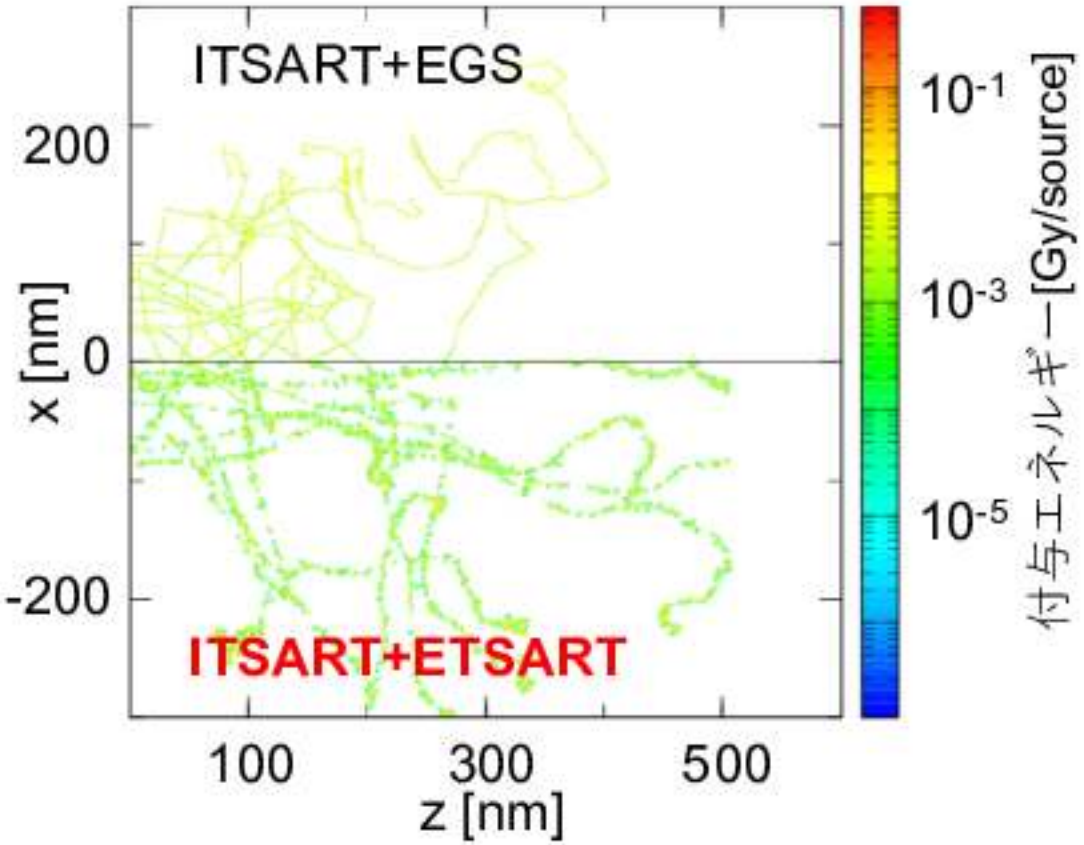
相互作用の種類



物質の組成・密度・バンドギャップから**電離・励起断面積**を計算

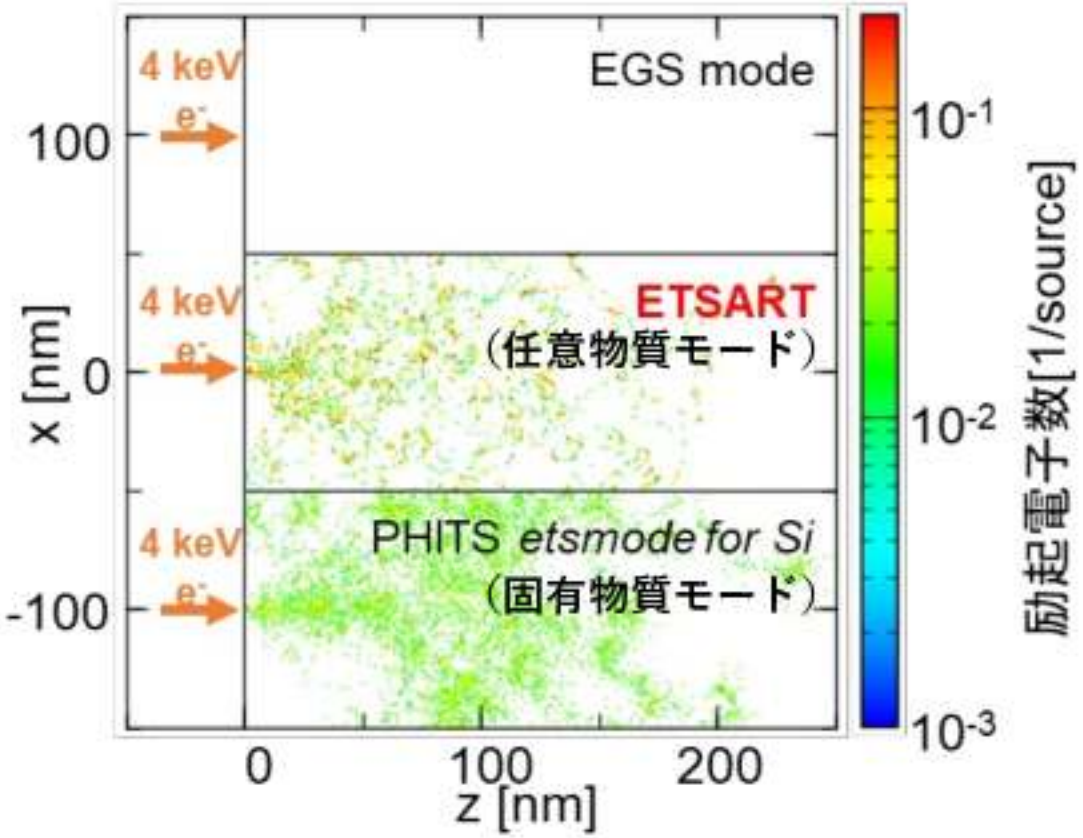
任意物質モードの概要（計算例）

GaAs中の10 keV陽子線
エネルギー付与分布



T. Ogawa, *et. al.*, EPJ Nuclear Sci. Technol. 10, 13 (2024)

Si中の4 keV電子線
励起電子生成分布

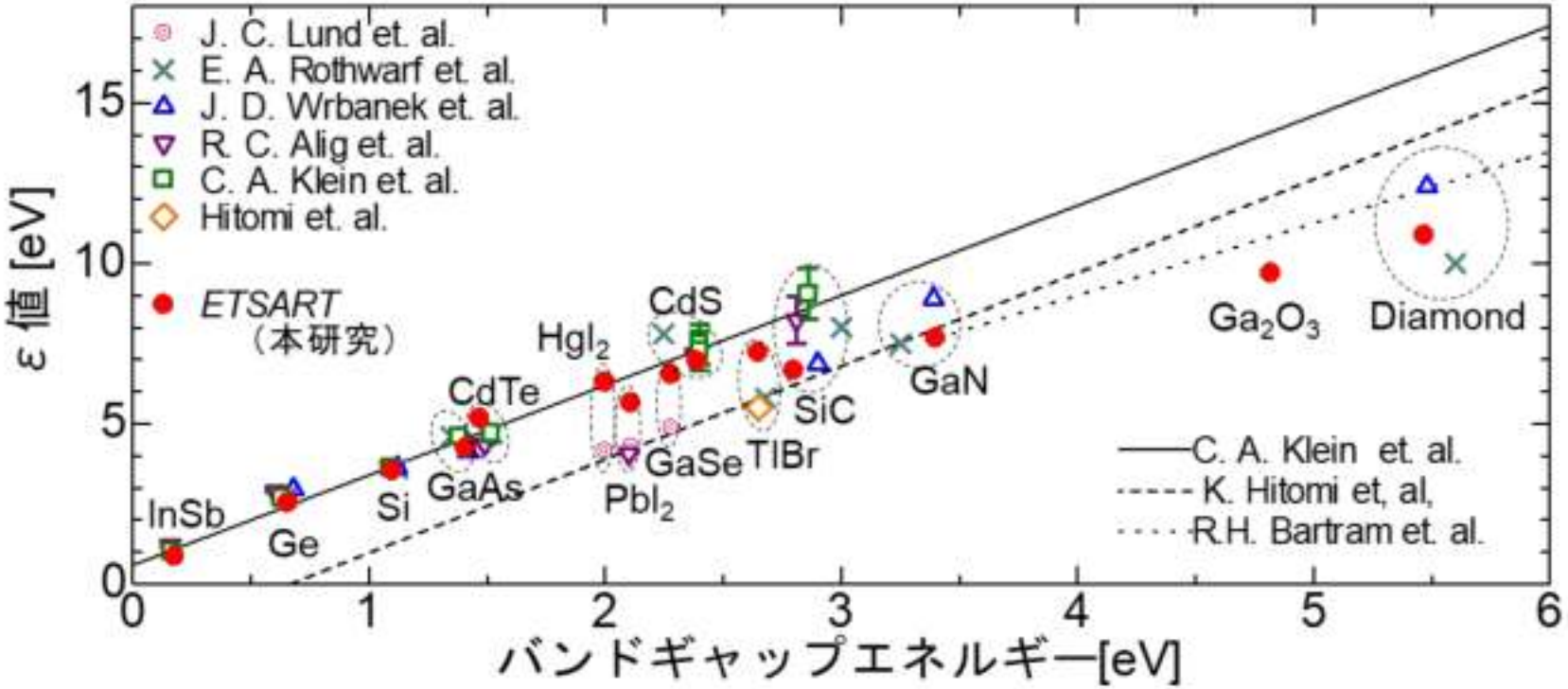


Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 62, 106001 (2023)

任意物質モードの概要（計算例）

一つのキャリア生成に必要なエネルギー（ε値）を計算

複数の半導体におけるε値とバンドギャップエネルギーの関係



励起電子生成を模擬することで評価可能

半導体への放射線影響解析が可能

Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 62, 106001 (2023)

目次

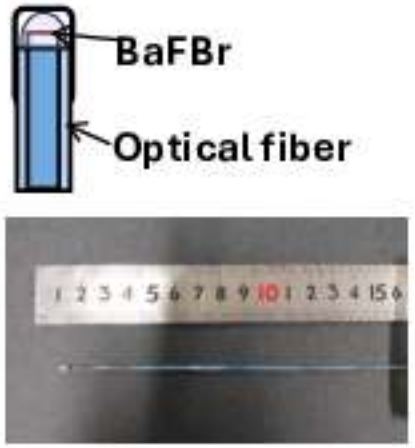
【応用例】蛍光体検出器の粒子線に対する消光現象

BaFBr:Eu小型線量計の消光現象

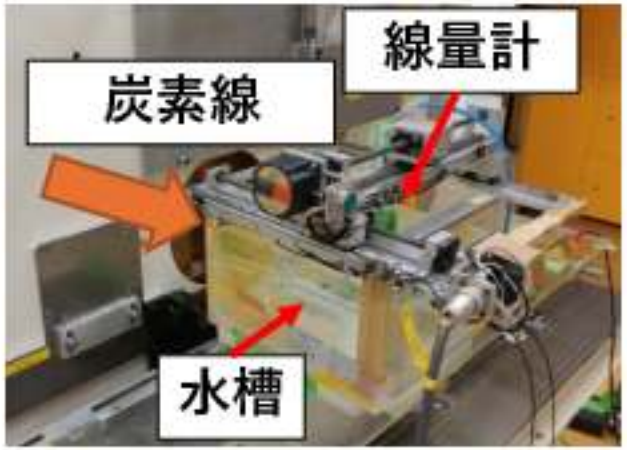
BaFBr ：光刺激蛍光 (OSL)材料

トラップ中心を有し、放射線情報を蓄積

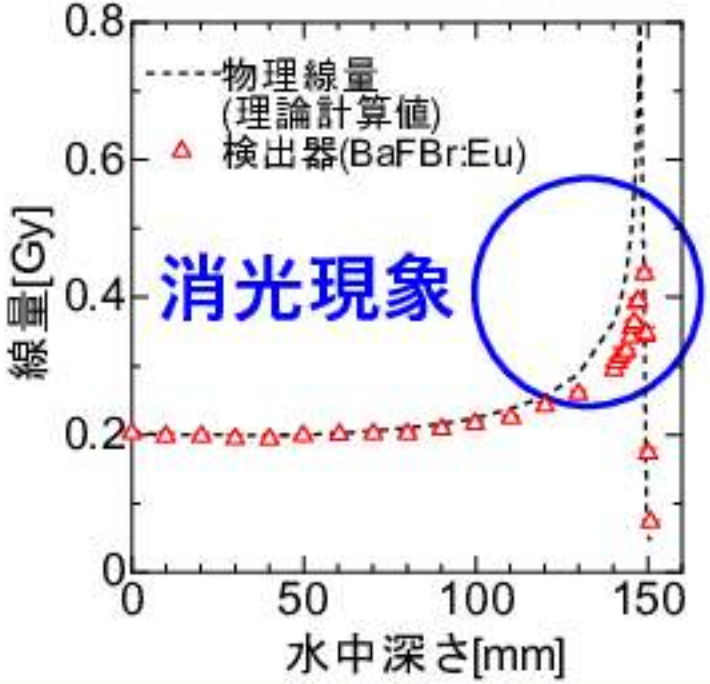
小型線量計



炭素線照射実験



炭素線の水中線量分布



消光現象により検出器出力が低下

線量の過小評価の危険性有

【応用例】消光現象の発生メカニズム

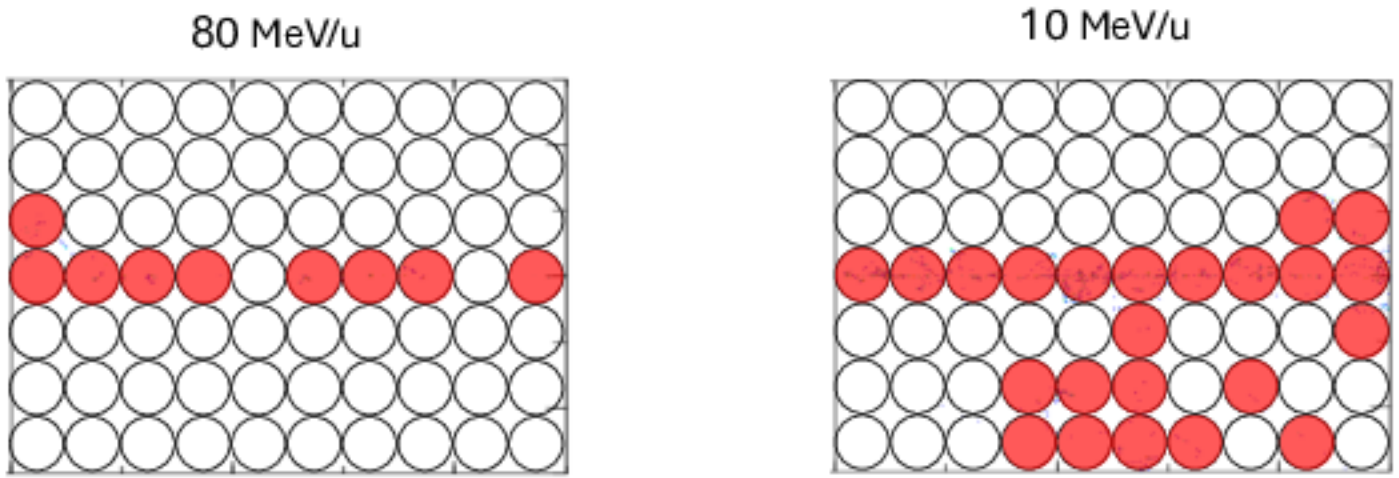
消光現象は局所的な発光中心の飽和

➡ 飛跡構造解析モードによる解析が有効

局所飽和モデル

- 蛍光体をトラップ中心を一つ含む**発光ドメイン**の集合体であると仮定
- 線量計応答は電子をトラップした発光ドメインの数に比例する

炭素線照射による電子正孔対分布



e-h対数 線量計応答=トラップされたe-h対数の数

134 ➡ 9　　**1252 ➡ 23**

●：トラップしたセル

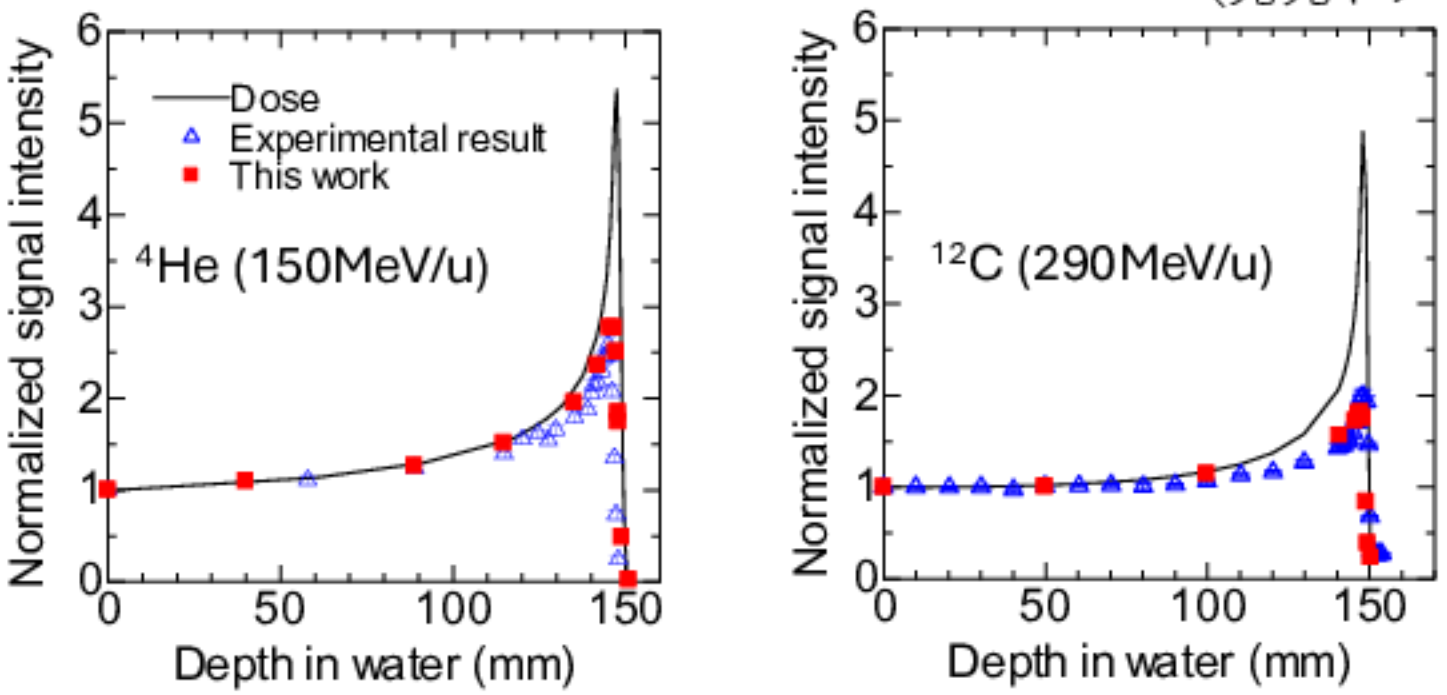
【応用例】消光現象の再現計算

ITSART+ETSARTで蛍光体中の励起電子生成分布を計算

➡ **局所飽和モデル**により検出器出力を予測

線量分布の計算結果

（発光ドメイン直径：80 nm）



BaFBr:Euで測定した線量分布を再現

➡ **適切な検出器デザインに活用可能**

Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. Nucl. Inst. Method B, 547, 165183 (2024)

まとめ・今後の展望

まとめ

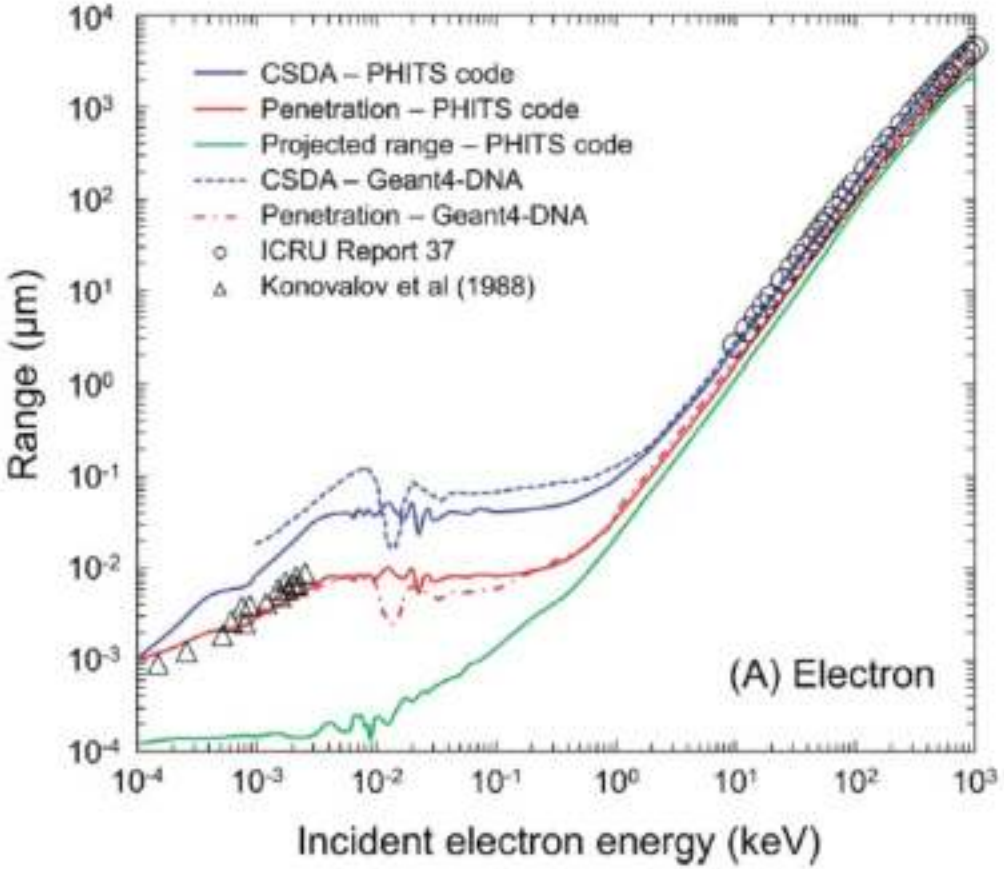
- ✓ 飛跡構造解析モードは電離・励起などの相互作用を明示的に計算
- ✓ 固有物質モード：物質ごとに断面積を整備した高精度な計算モード
- ✓ 任意物質モード：モデルにより任意の物質への対応が可能
- ✓ 放射線が数eV以下なるまで追跡し、nmスケールの解析が可能
- ✓ 物質や生体の放射線影響の解析に有効

今後の展望

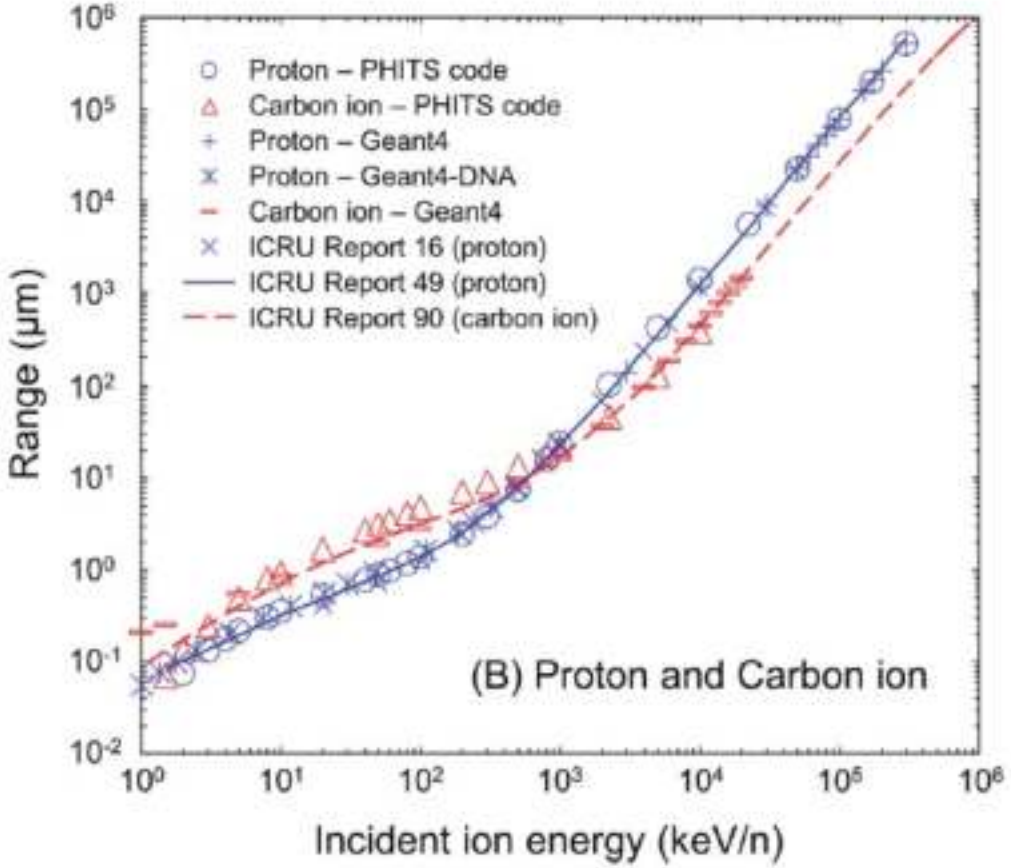
- ✓ 固有物質モードの対象物質の拡張
- ✓ 任意物質モードのモデルを拡張し、気体や金属の計算精度を向上

ETS(水)の基礎性能

水中の電子の飛程



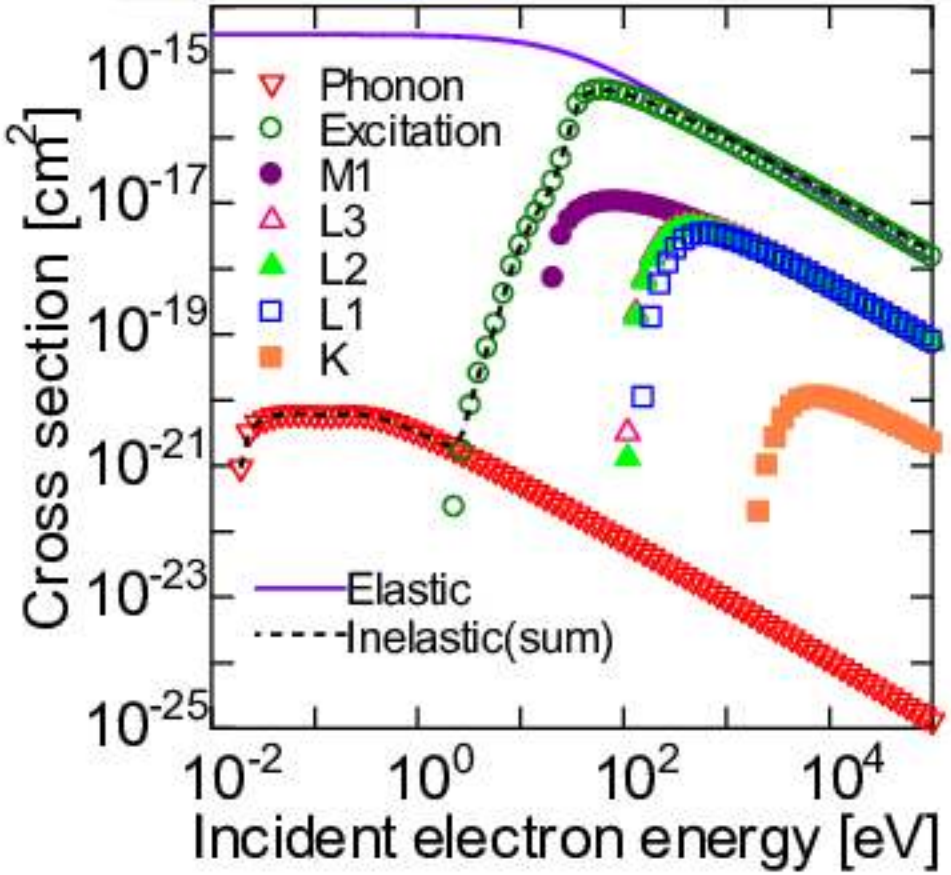
水中の陽子・炭素線の飛程



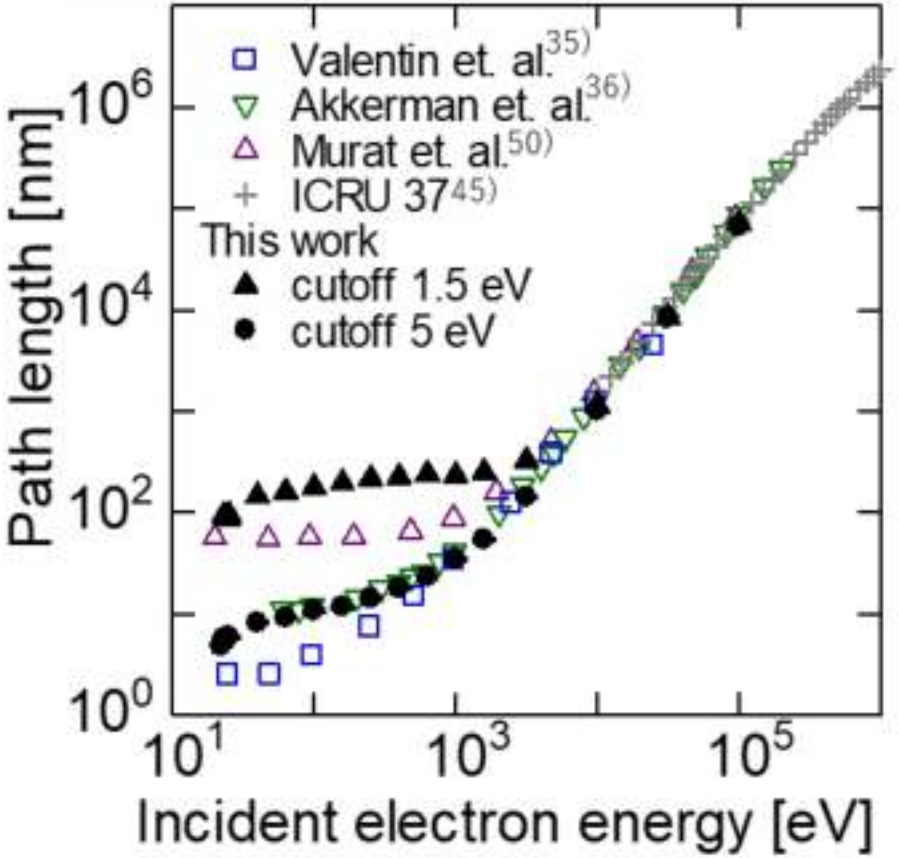
Y. Matsuya, *et. al.*, Int. J. Radiat. Biol., 98, 148-157 (2022)

ETS for Siの基礎性能

相互作用ごとの断面積



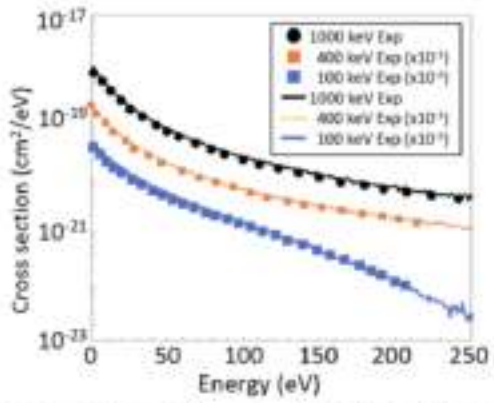
Si中の電子飛程



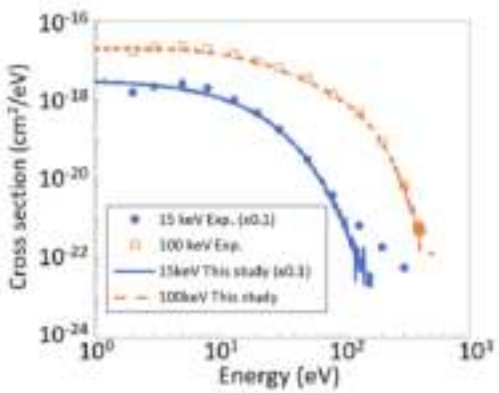
Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 61, 106004 (2022)

ITSARTの基礎性能

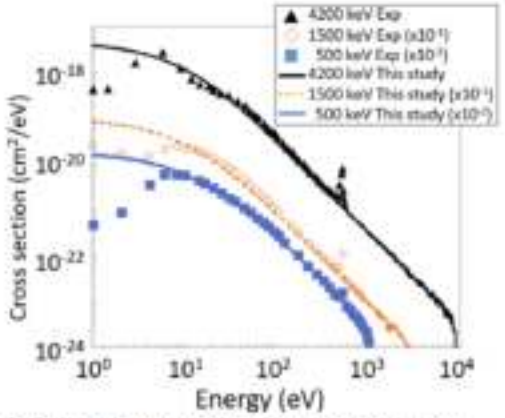
種々の物質・イオンの断面積



(a) Target : He, Projectile : protons of 100, 400 and 1000 keV

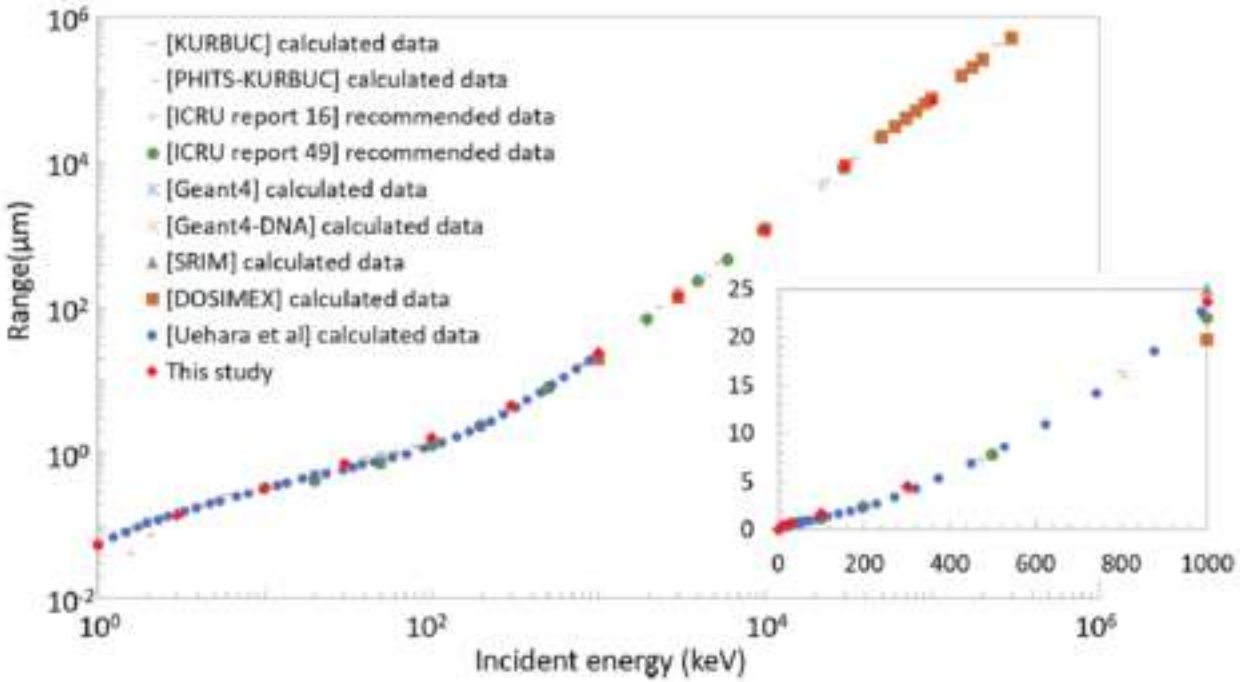


(b) Target : liquid water, Projectile : protons of 15 and 100 keV



(c) Target : liquid water, Projectile : protons of 500, 1500, and 4200keV

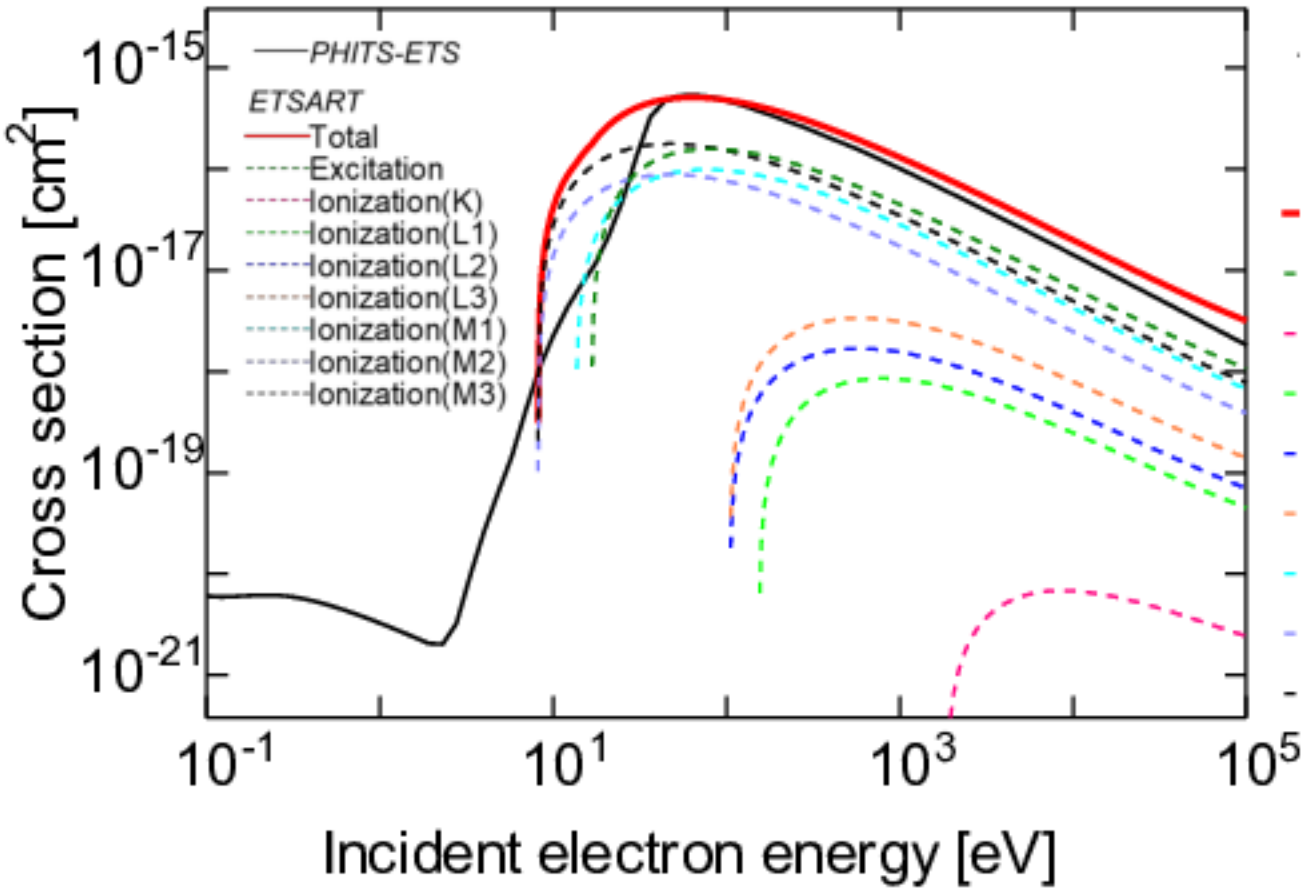
水中の陽子線飛程



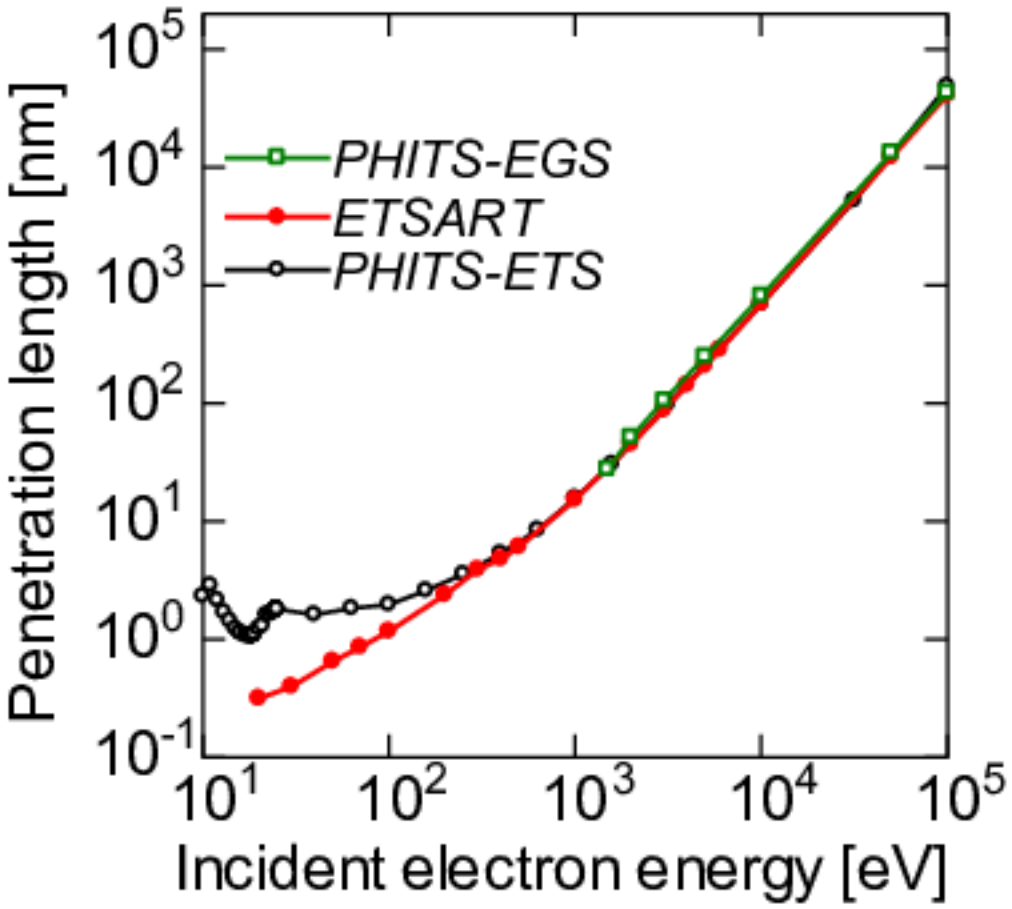
T. Ogawa, Y. Hirata, Y. Matsuya, and T. Kai, Sci. Rep. 11, 1 (2021).

ETSARTの基礎性能

Siの断面積(ETSART)



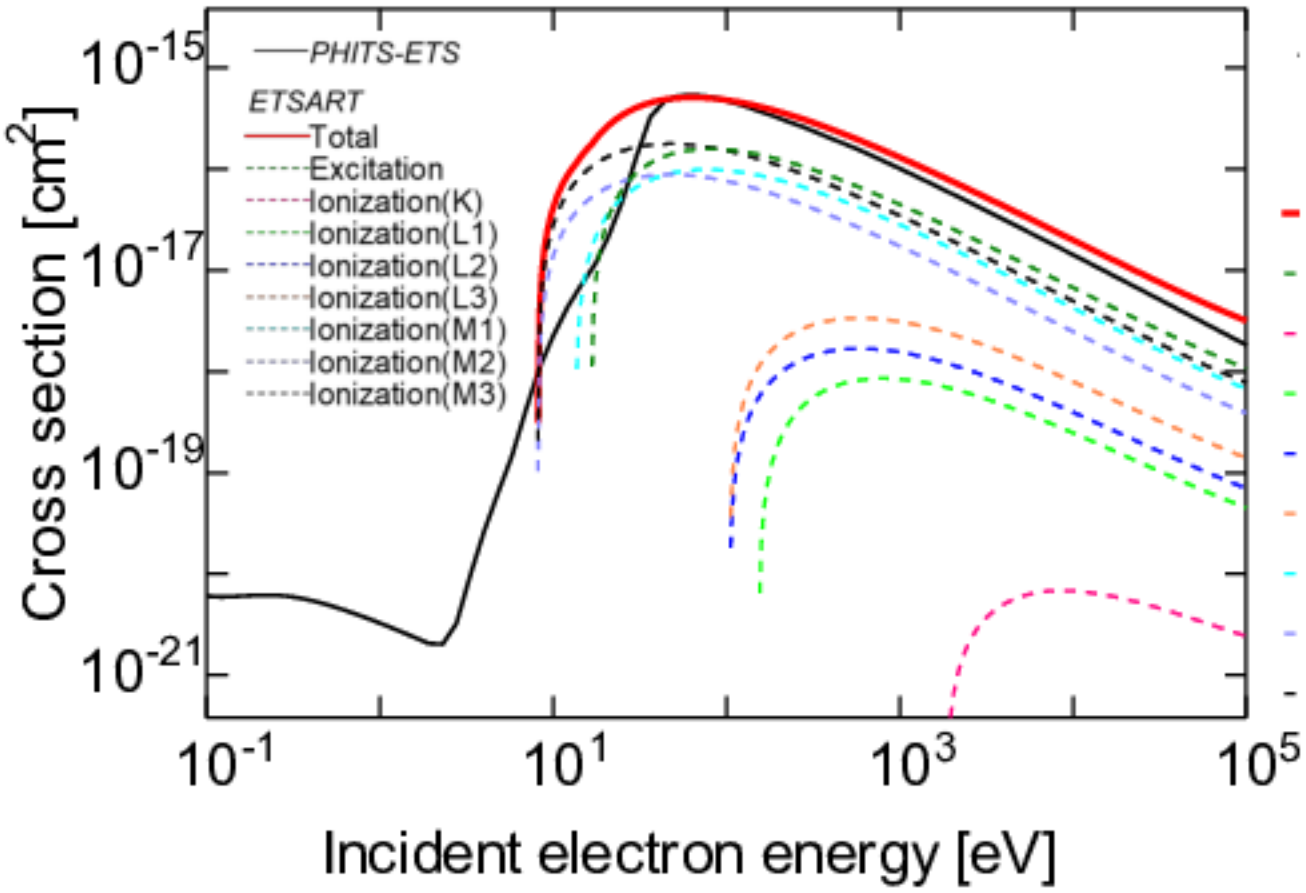
複数の物質中の電子飛程



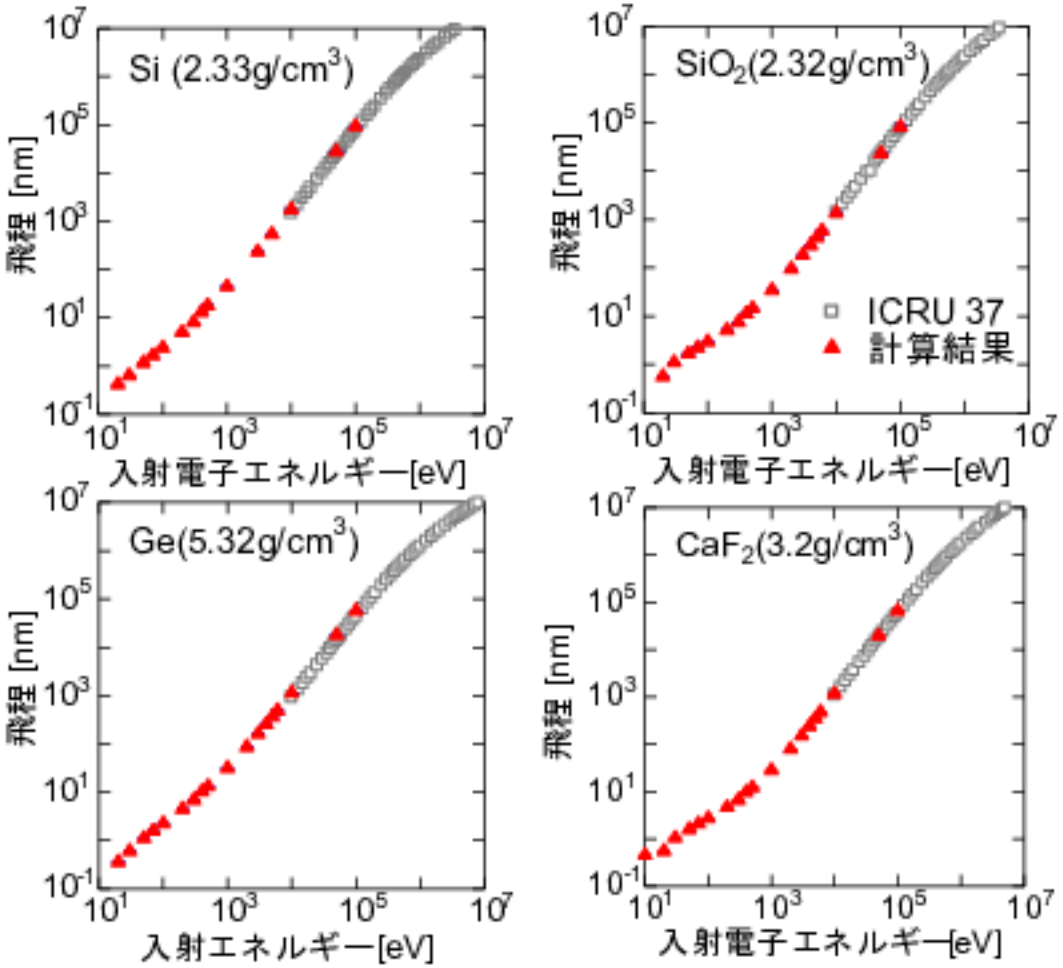
Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 62, 106001 (2023)

ETSARTの基礎性能

Siの断面積(ETSART)



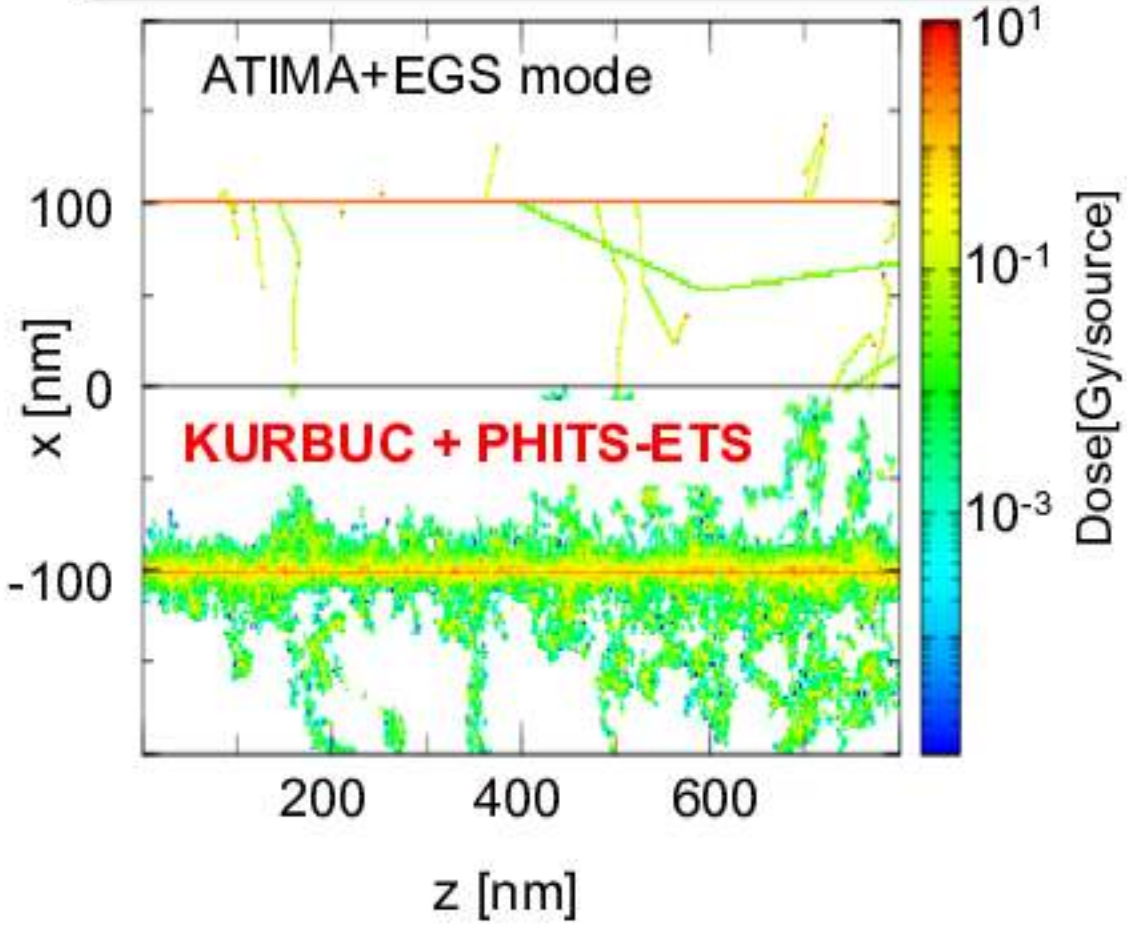
複数の物質中の電子飛程



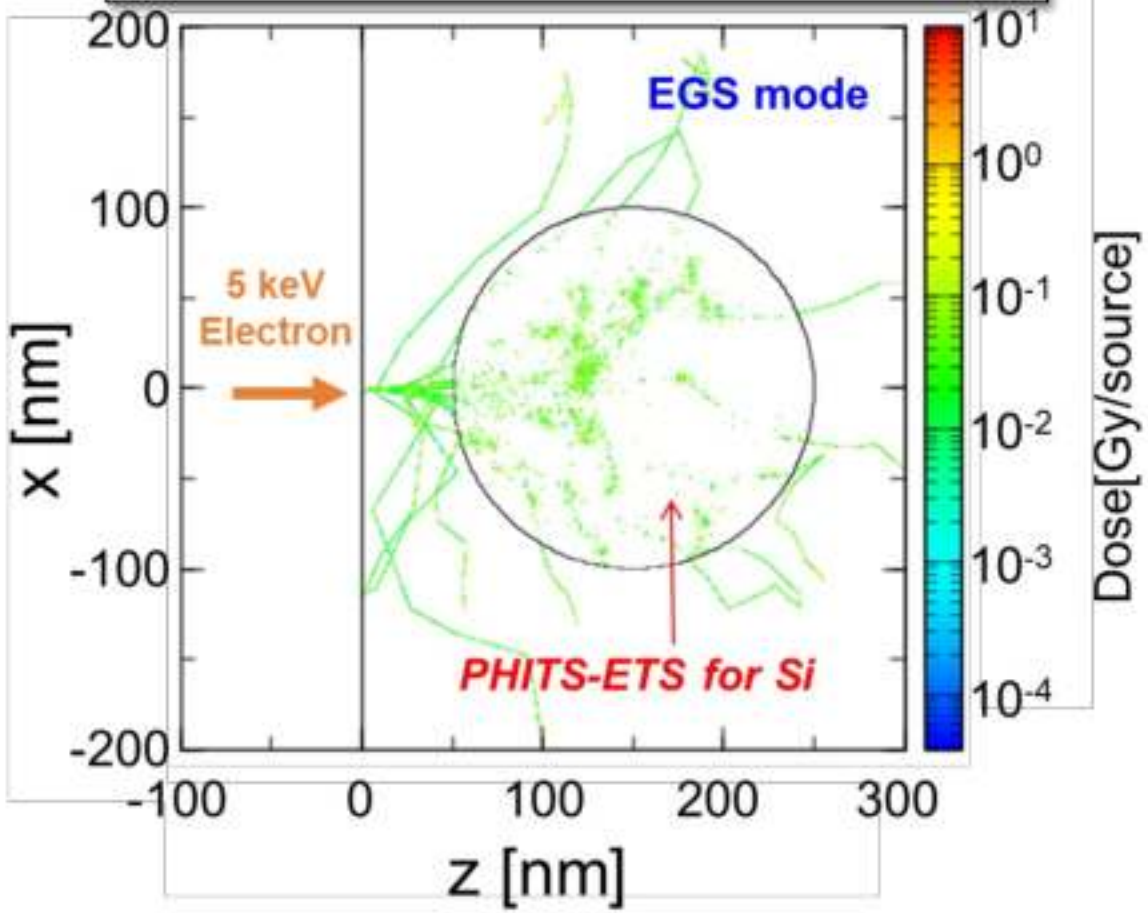
Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 62, 106001 (2023)

固有物質モードの概要（計算例）

水中の5 MeV/n炭素線
エネルギー付与分布



Si中の5 keV電子線
エネルギー付与分布



Y. Hirata, *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 61, 106004 (2022)

nmスケールで放射線の挙動を評価可能

EGS5電子輸送におけるカットオフエネルギーと計算精度の最適評価

岩瀬広

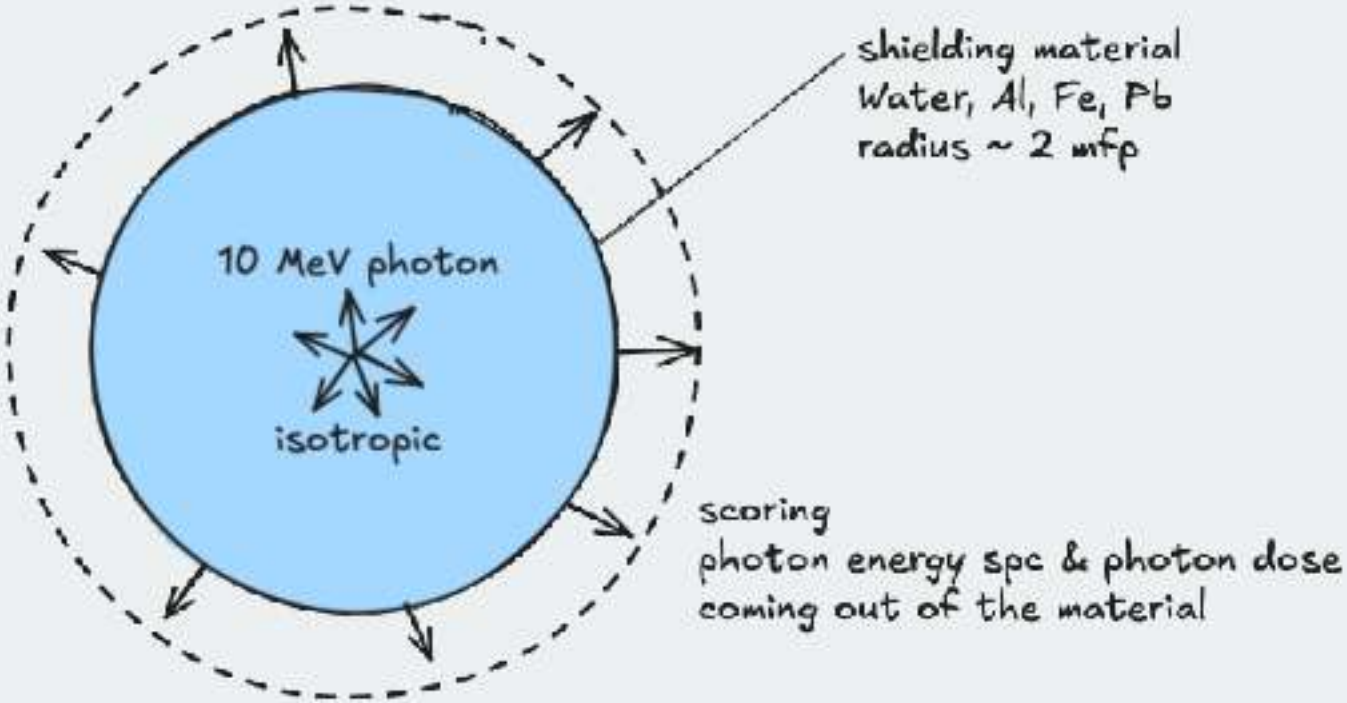
KEK

目的

- PHITSのnegs=-1 (電子を輸送しない計算)の場合、MCNPと違いが生じる問題が指摘
- 現行のデフォルト値は negs=-1
- negs=-1は光子を断面積で計算、電子を輸送しないモード
- negs=1でEGS5が動作
- negs=1で電子のカットオフ値に対する計算時間と計算結果の関係を調べて最適設定を探る

計算体系

- 球体系、半径は2λ (10MeV時)
- 中心に等方線源（光子、モノエネルギー）
- 球状物質から外へ出た光子をスコアリング

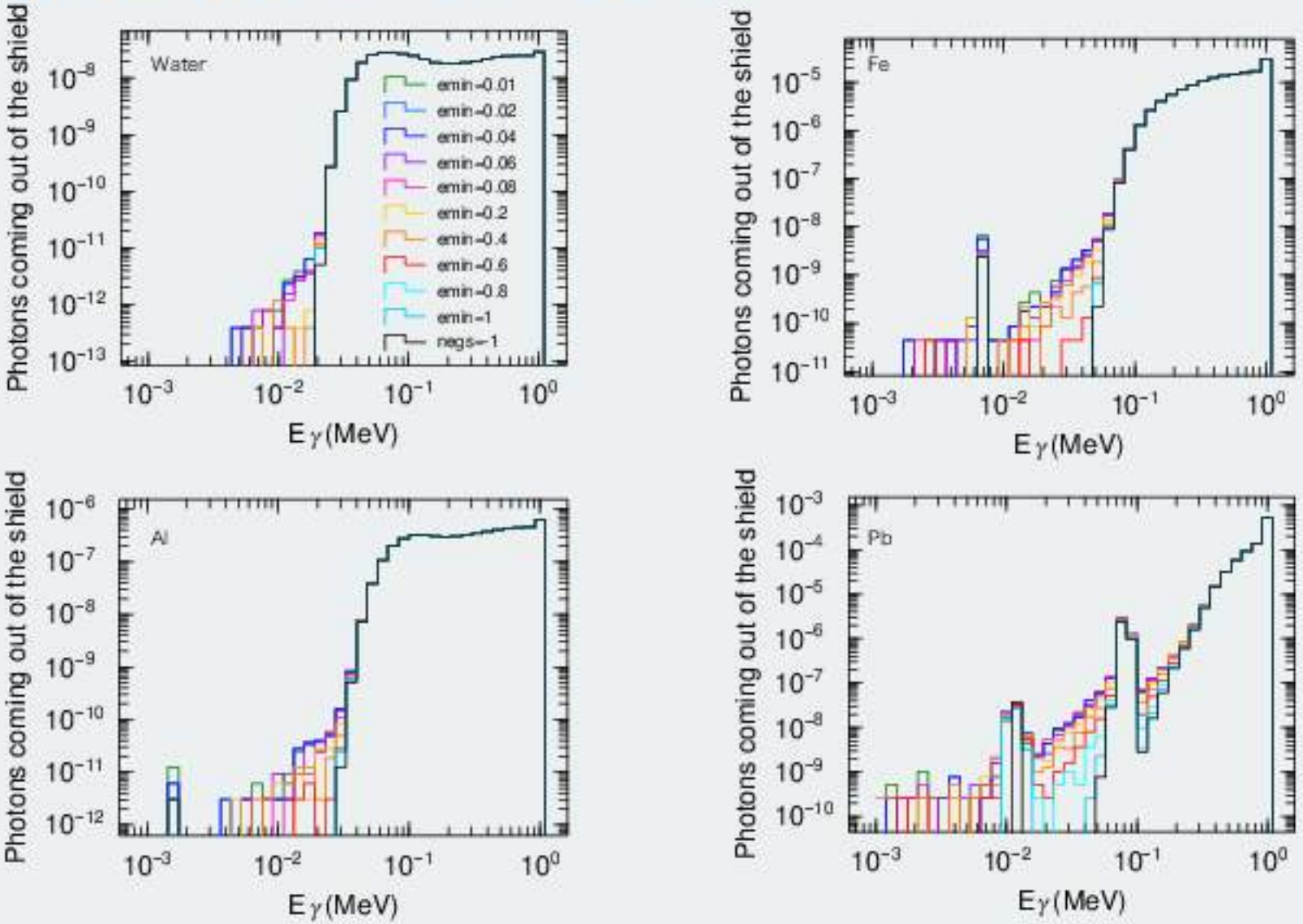


計算条件

- 標的
  - 水、アルミ、鉄、鉛
- 光子線源エネルギー
  - 1, 10 MeV
- 光子のカットオフエネルギー 0.001 MeV
- 電子のカットオフエネルギー → 本スライドで **ecut** と定義
  - ecut = 0.01~線源エネルギーまで多段階
    (0.01 0.02 0.04 0.06 0.08 0.1 0.2 0.4 0.6 0.8 1 … 線源エネルギー)
  - **ecut = 0.01 MeV** (10 KeV) の計算結果を今回の下限値とし、かつ**基準値**と定義
  - (例) ecutを0.01 MeVから0.1 MeVに引き上げると計算時間↓ 計算精度↓

結果 (E_0= 1 MeV)

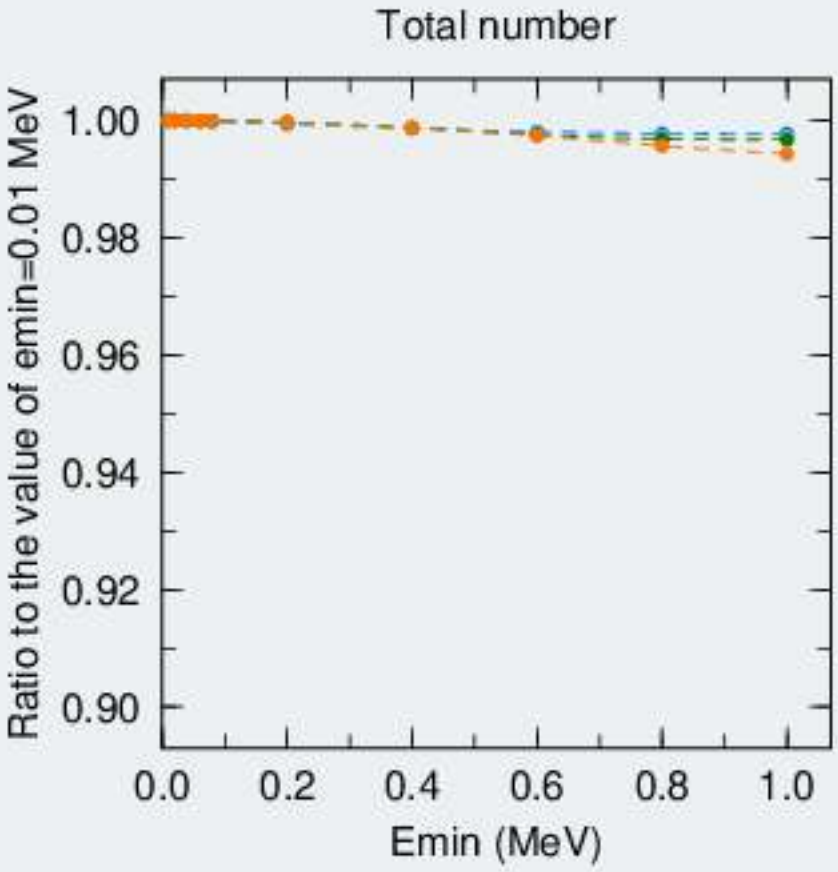
体系外エネルギースペクトル

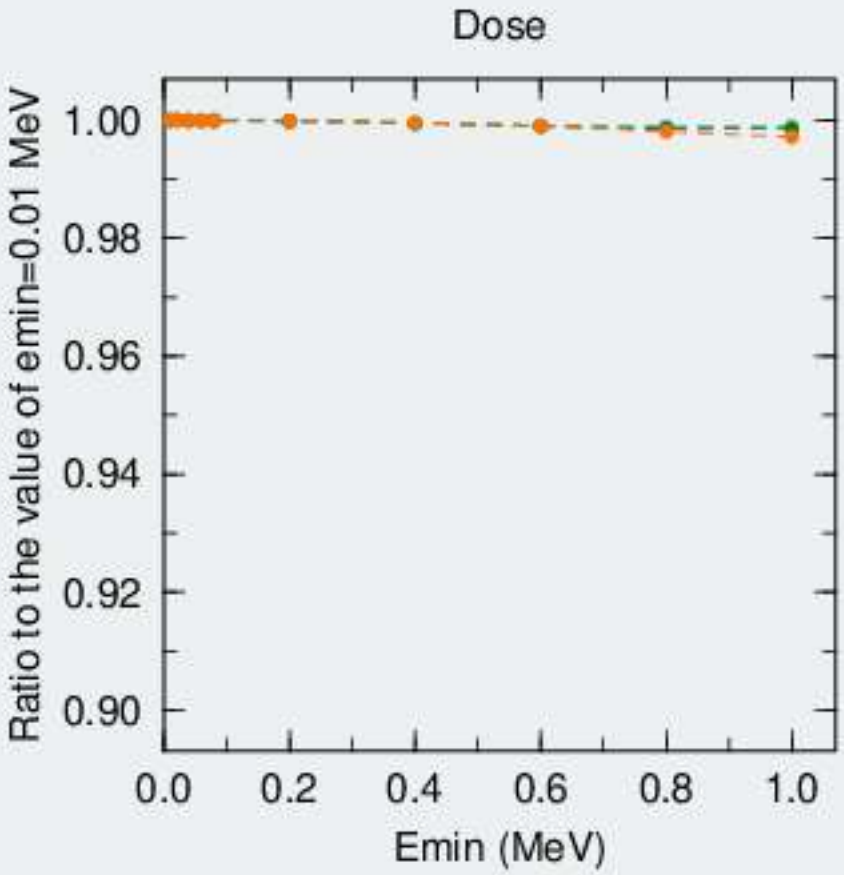


- カットオフを上げていくほど、カットオフエネルギー0.01MeVから離れていき、negs-1に近づく

結果

スペクトル積分値　および　線量値



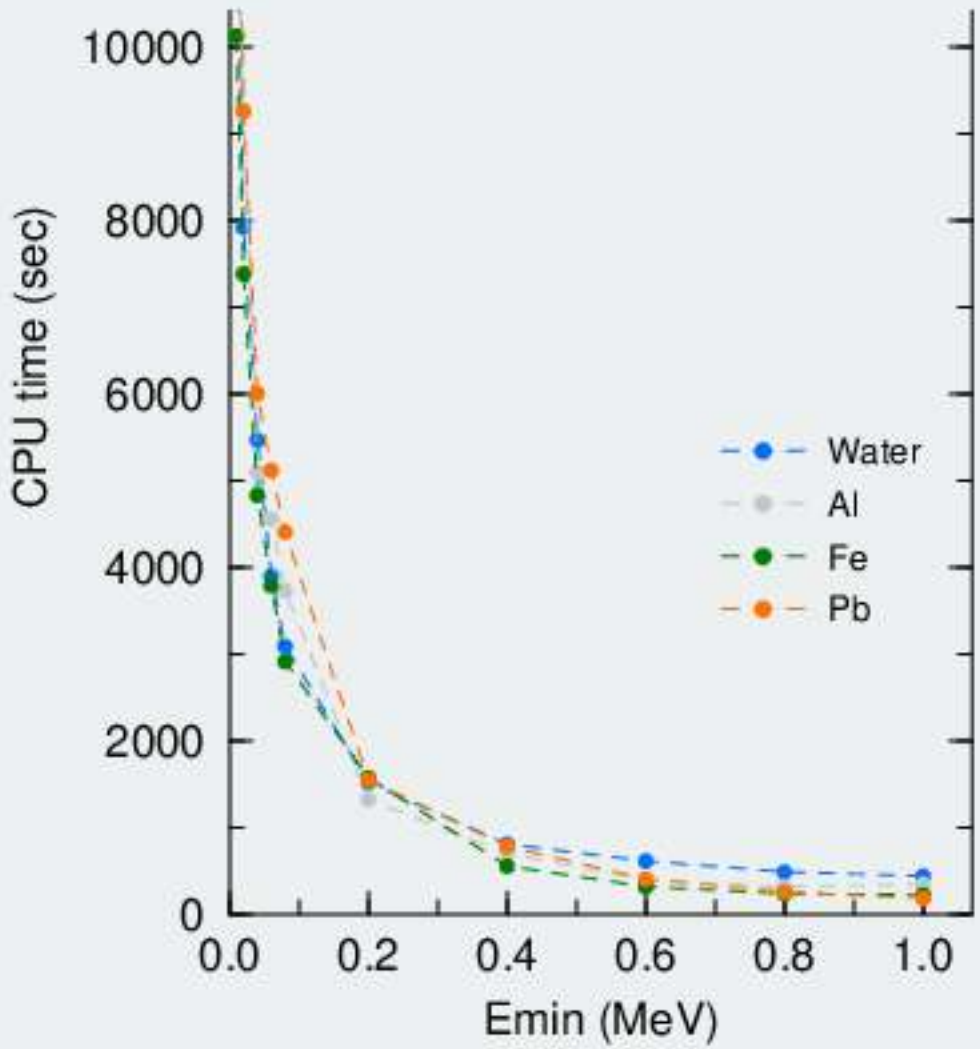


- ecut 0.01 MeVとの違いは、絶対量ではわずか
  （次ページに数値）

基準値(ecut=0.01)との比

	water	water	Al	Al	Fe	Fe	Pb	Pb
ecut	n/n0	d/d0	n/n0	d/d0	n/n0	d/d0	n/n0	d/d0
0.01	1.	1.	1.	1.	1.	1.	1.	1.
0.02	1.	1.0000246	1.0001252	1.0000737	1.	1.0000217	0.99993127	0.99997478
0.04	0.99997674	1.0000123	1.0000358	1.	0.99992997	0.99997825	1.	0.99997478
0.06	0.99993021	0.99998770	0.99996423	1.	0.99992997	0.99997825	0.99995418	0.99994956
0.08	0.99983715	0.99993849	1.0000179	1.0000737	0.99992997	0.99997825	0.99988545	0.99992434
0.2	0.99937187	0.99979088	0.99953501	0.99985254	0.99964986	0.99991301	0.99956471	0.99987391
0.4	0.99862743	0.99950796	0.99849772	0.99948389	0.99873950	0.99960853	0.99873995	0.99964694
0.6	0.99802257	0.99923734	0.99758562	0.99911524	0.99754902	0.99906481	0.99735389	0.99911734
0.8	0.99774340	0.99907742	0.99708486	0.99889405	0.99677871	0.99862984	0.99561273	0.99818425
1	0.99774340	0.99907742	0.99708486	0.99889405	0.99670868	0.99860809	0.99426104	0.99732681
negs-1	1.0127254	1.0155731	1.0049539	1.0082578	1.0050420	1.0059591	1.0027148	1.0036567

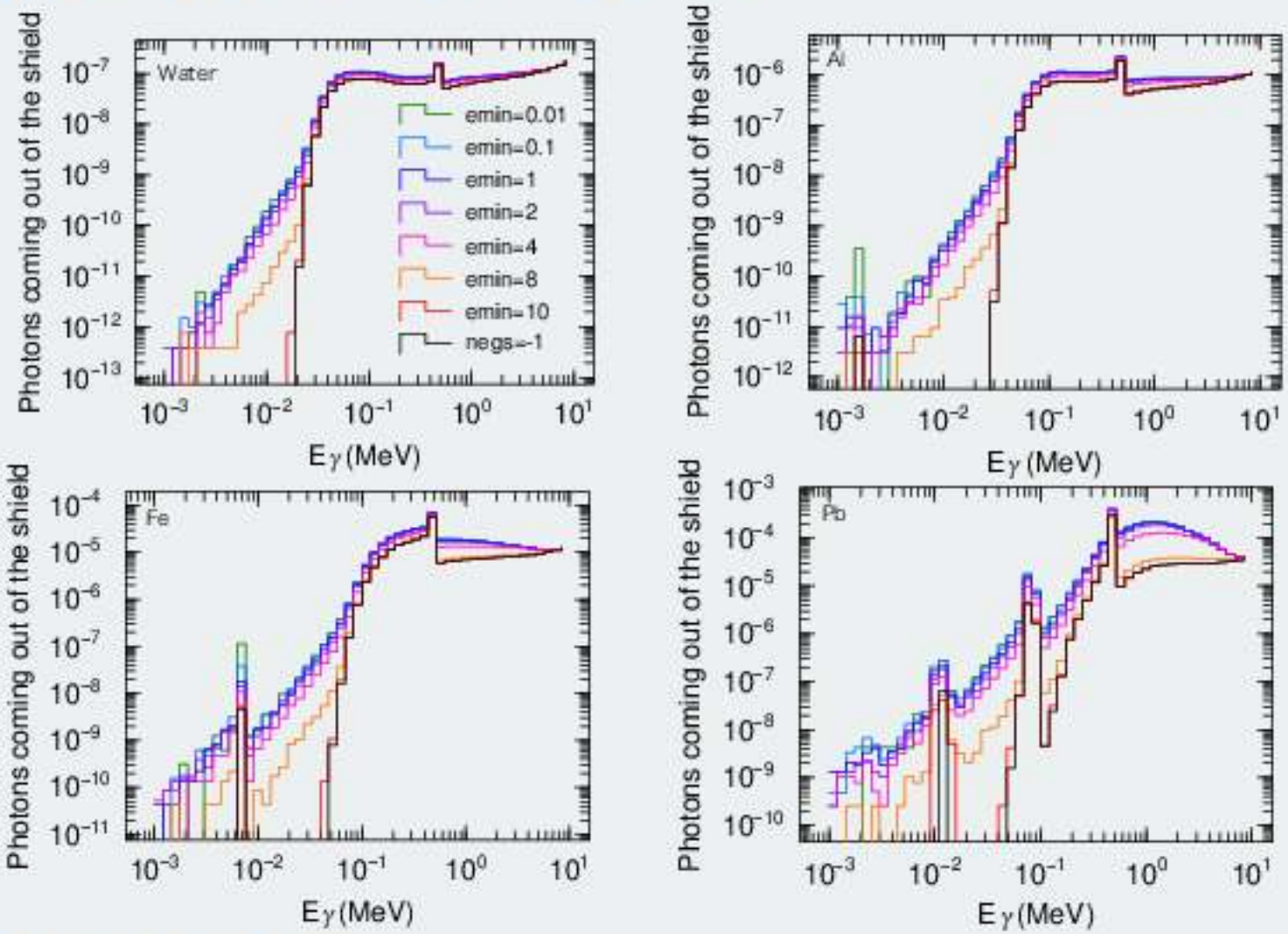
計算時間



- ecut 0.2 MeV くらいから傾きが鈍化

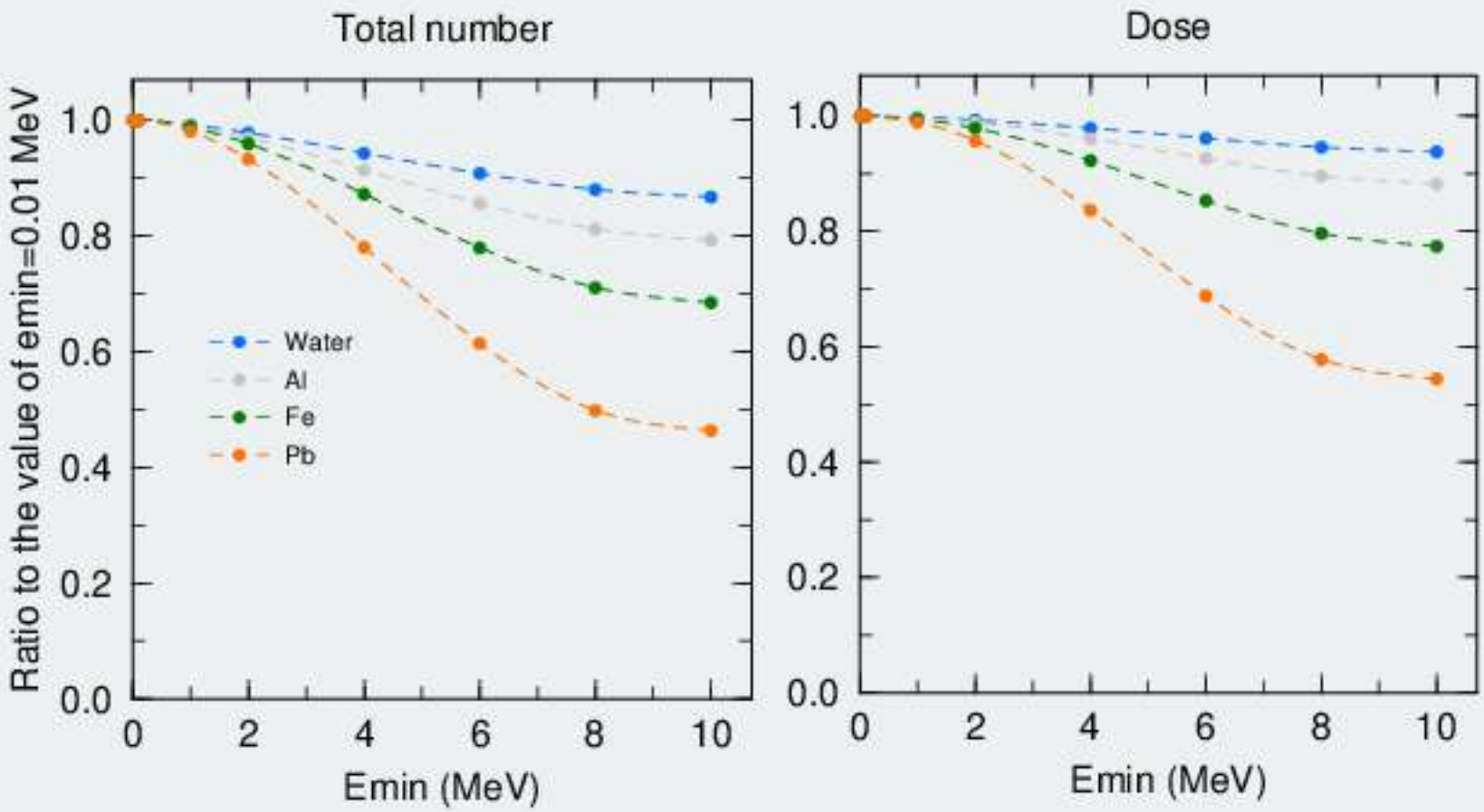
結果 (E_0= 10 MeV)

体系外エネルギースペクトル



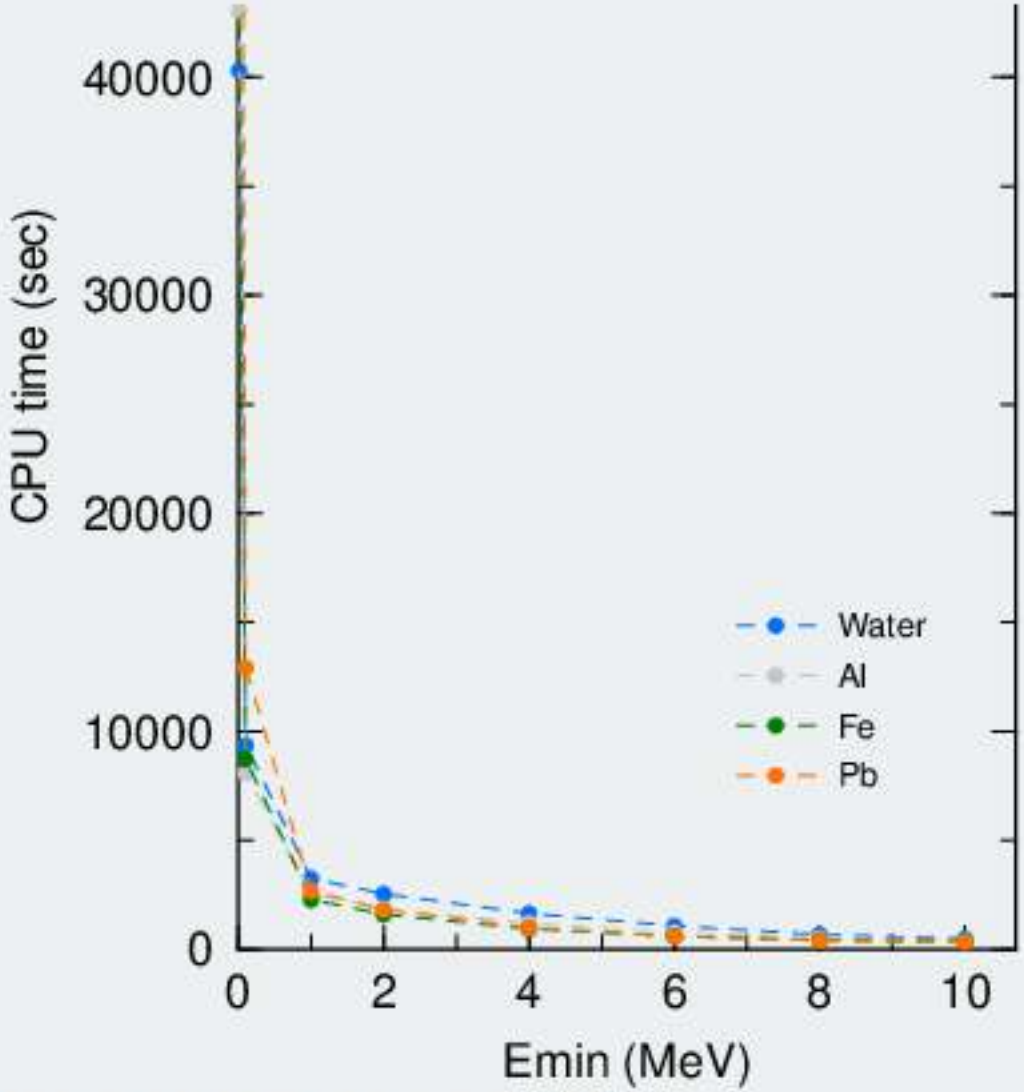
- 全体の傾向はE_0=1MeVと同じ
- ecutによる結果の差が大きくなる

スペクトル積分値　および　線量値　　(E_0=10MeV)



- スペクトル積分値(左)は、軽い標的では最大で2割減、重い標的で5割以下
- 線量(右)ではecutの影響は若干鈍くなるが、中重元素では無視できない

計算時間 (E_0 = 10 MeV)



- ecut 1 MeV くらいから傾きが鈍化

まとめ

- 光子入射の場合の電子のカットオフエネルギーの違いによる計算時間と結果への感度を調べた
- 異なるカットオフエネルギーによる計算結果の違いと計算時間について調べた

- 入射エネルギーとλを振った計算を行っている
- 最適条件の探索を行い、negs=-1の代替となるか検討する

JENDL-5 断面積α線ライブラリを用いたAmBe線源等の計算

小川　達彦,

原子力機構　放射線挙動解析研究グループ

本研究に当たり以下の方々から有益な助言を頂きました
・原子力機構　中山梓介様
・Universidad Politécnica de Madrid
Professor Oscar Cabellos

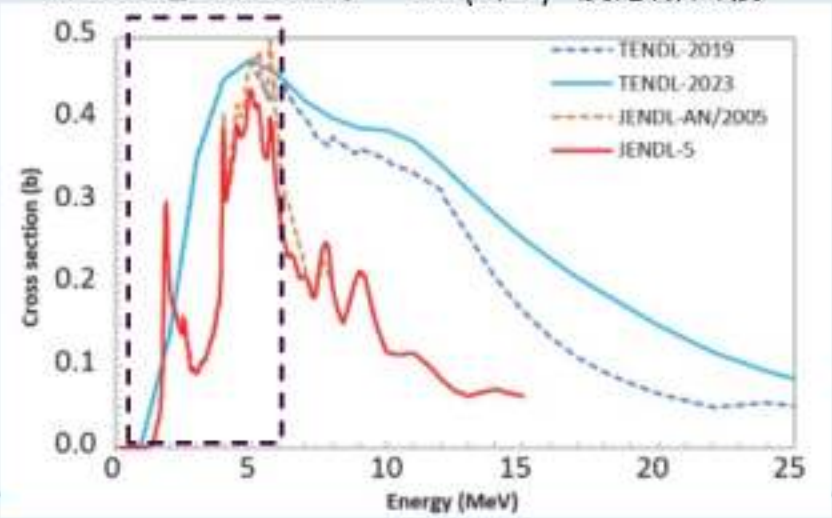
背景　ー複合中性子線源とその再現ー

- 複合中性子源(AmBeなど)
  - アクチノイド＋軽核　で構成される中性子源
  - 電源不要・長寿命・安価・可搬で便利
    - 長寿アクチノイドを使えば、Cf-252より長寿

- 既存のシミュレーション手法の限界
  - アクチノイドのα線は6MeV程度
  - JENDL-5は、(α,n)断面積を高精度化　→
  - PHITSのATIMAはアクチノイドでも使える

→ **PHITS で高精度に計算**できるのでは？

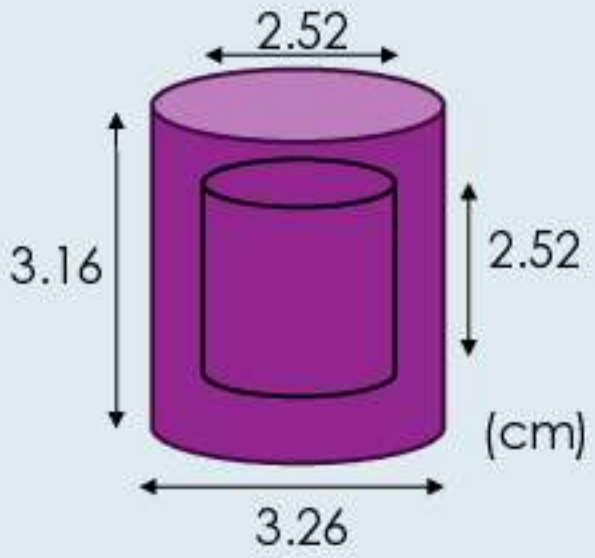
TENDL と JENDL の　^{7}Be(α,n')　反応断面積



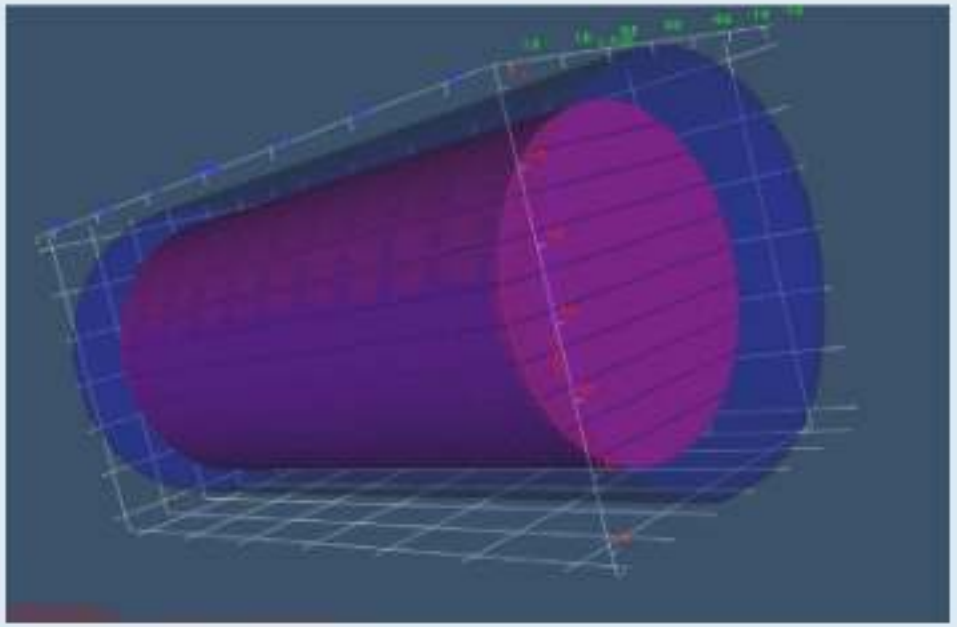
JENDL-5＋PHITSによる中性子源の計算

- 本研究で目指したこと
  - AmBe以外の (α,n)を使う複合中性子線源も計算 （PuBe、CmBe、PuC、AmF、AmB等）
  - 強度絶対値を再現する （計算コードの利用ではとても大事）
  - インプットサンプルをユーザーに提供

シミュレーション設定



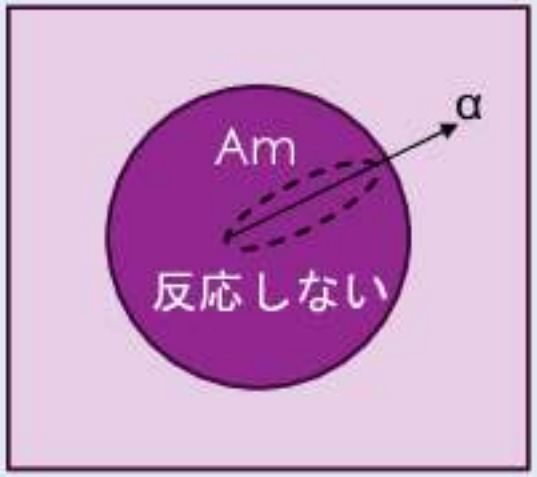
- Am-Be線源の例
  - 0.5gの^{241}Amと4.7gの^{9}Be
  - 内側は縦横2.52センチの円柱
  - 外側は3センチ強



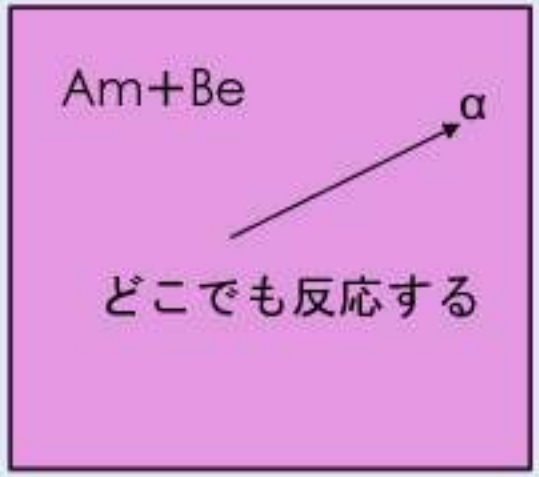
- 粉末の微細構造はLatticeで
  - 0.5gの^{241}Amを径1μmの粒にすると10^{9}セル！！
  - そこで、現実的な数のセル(Am粒)で代表させる
  - 10×10×10の  Latticeを並べる →

ラティス設定の効果

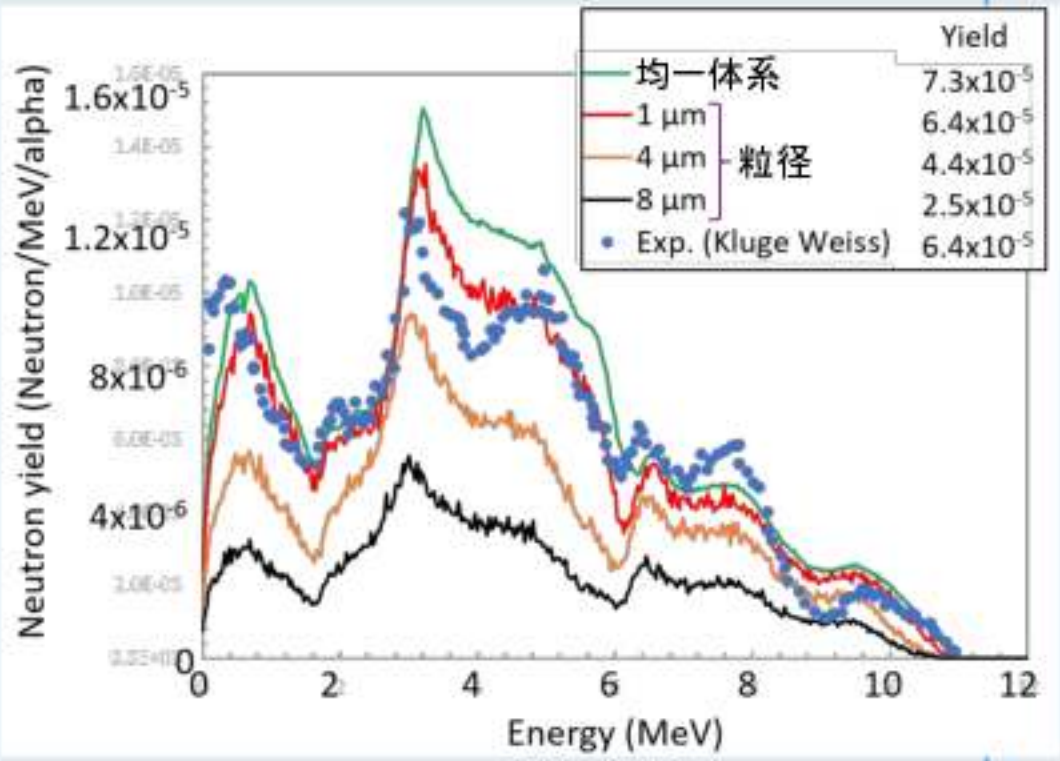
- 均一体系にすると、反応が多すぎる
- α線はアクチノイド粒内でまず減速 → **反応減**



○ 本モデル



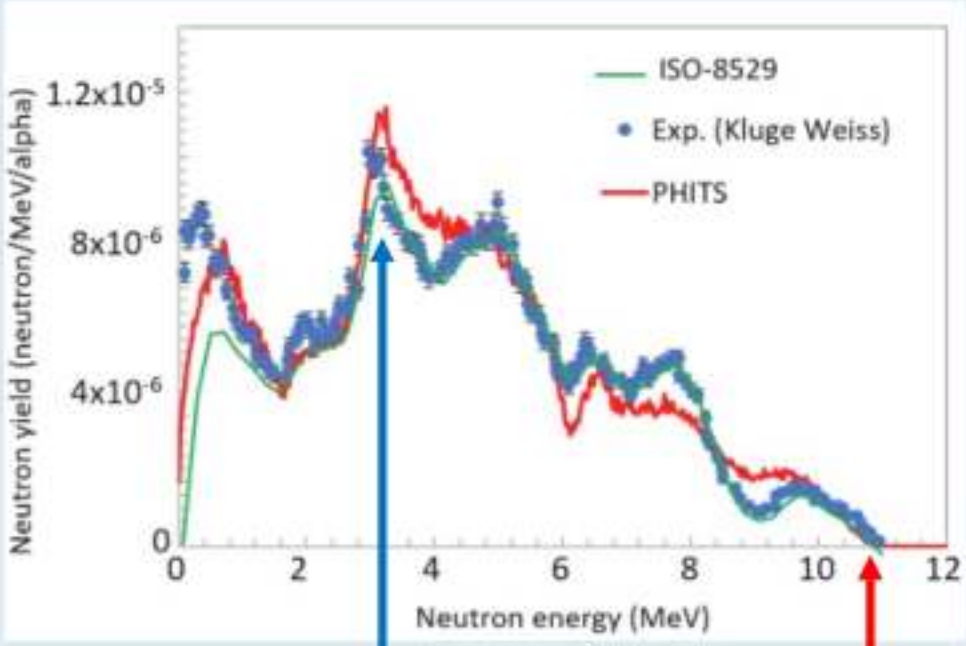
× 均一体系



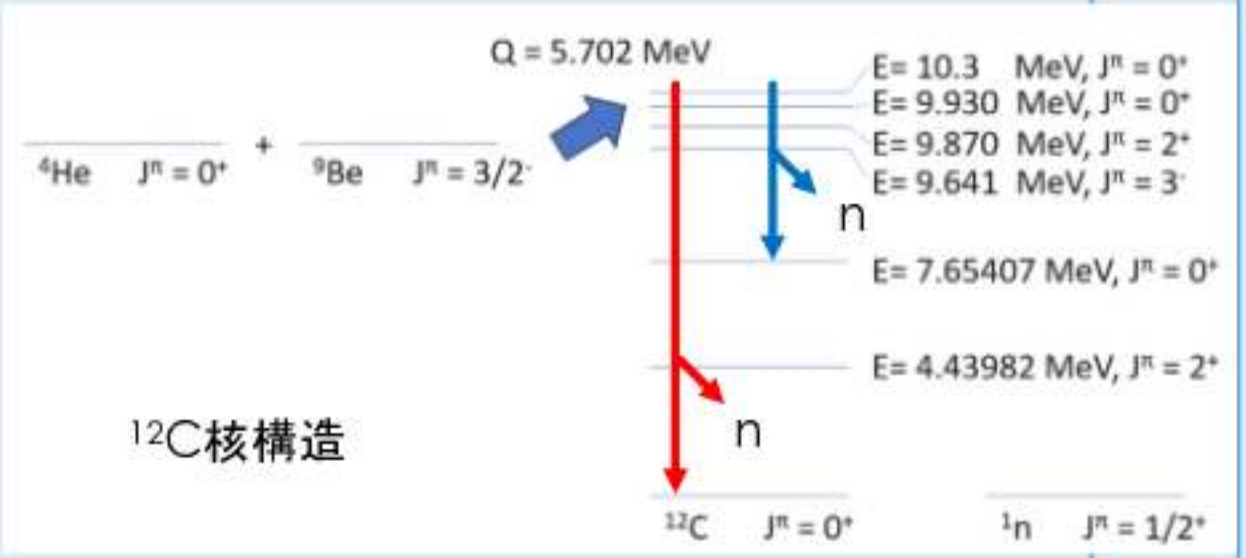
AmBe線源のシミュレーション結果。
Amの粒径を変えた計算4通り
(0は完全均一な混合に相当)

結果 - ^{241}Am-Be 中性子スペクトル

➢ 中性子スペクトル



^{241}Amのα線エネルギー = 5.486MeV
Q値 = 5.702MeV
合計 11.188 MeVが利用可能

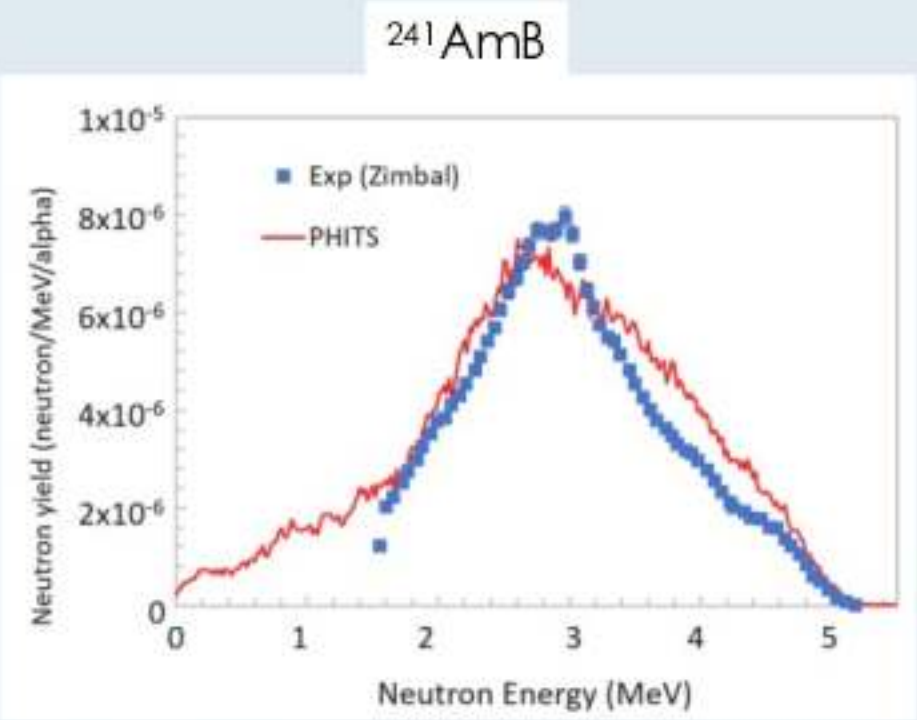


7.654MeVの準位に落ちて
出た中性子

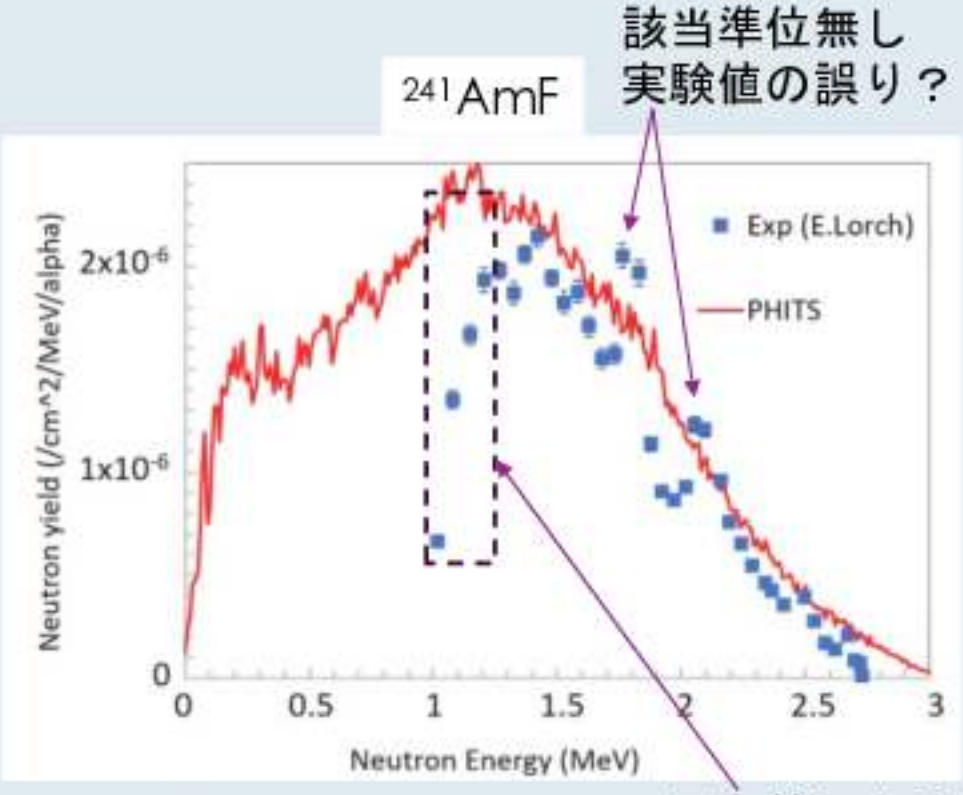
11.188MeVを全て使った中性子

^{7}Be＋^{4}He-n = ^{12}C
の核構造が重要

結果 - 他の中性子源



標的に準位がない場合
→位相空間の自由度でスペクトルが決まる

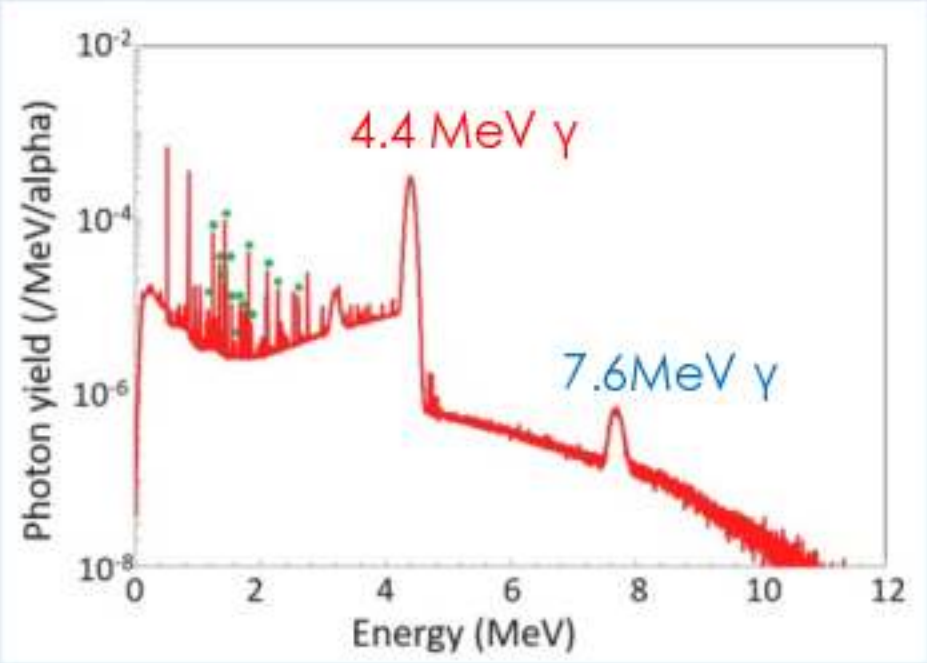


吸熱反応の場合
→スペクトルは狭い

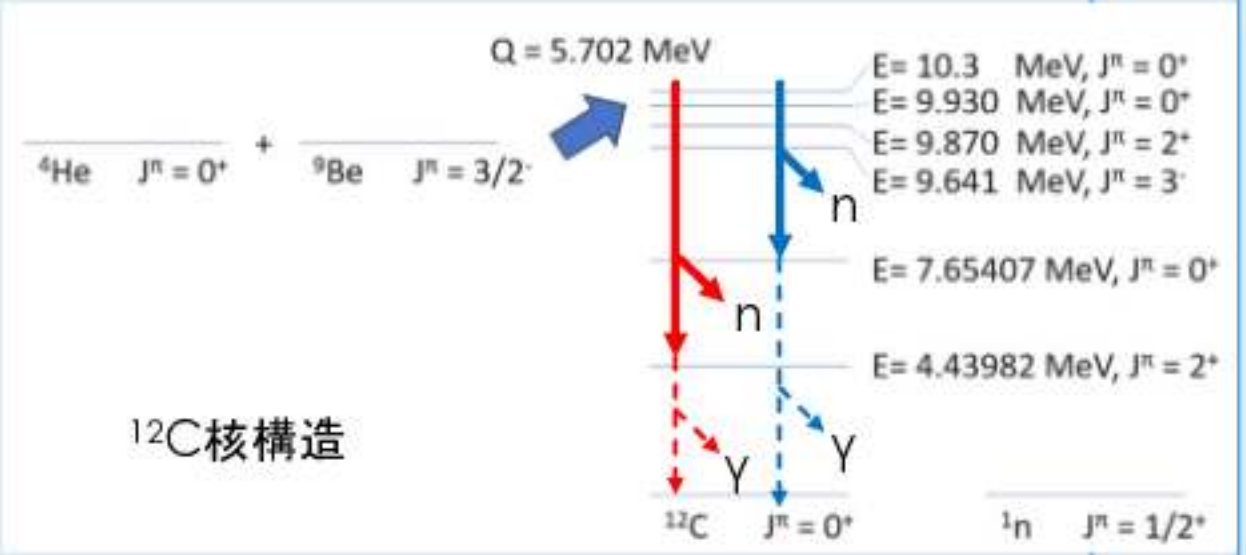
元文献によると
検出下限

ガンマ線スペクトル

- ^{7}Be(α,n)に伴うγ線



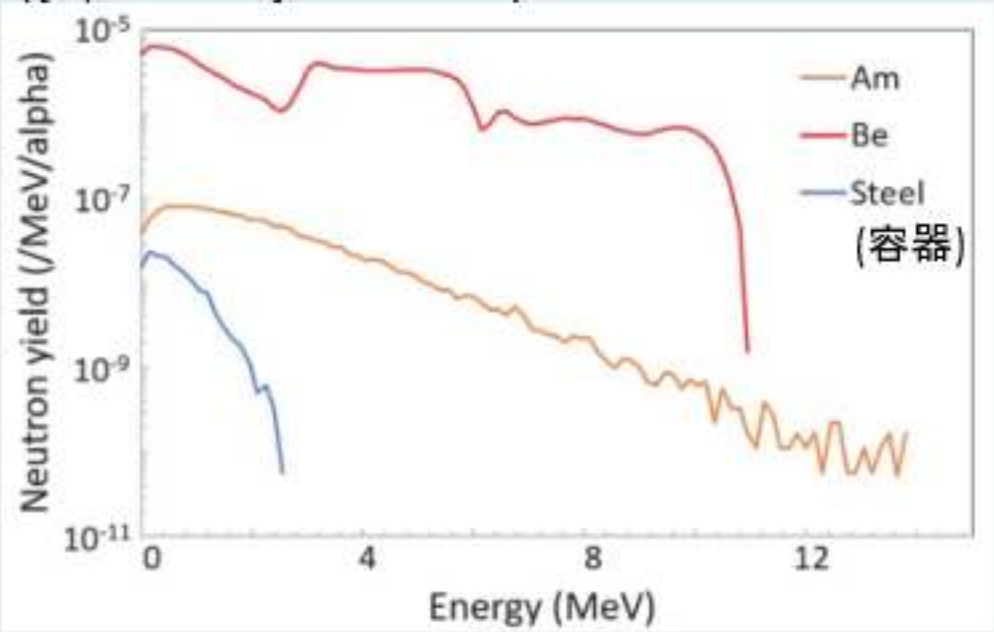
^{241}Amのα線エネルギー = 5.486MeV
Q値 = 5.702MeV
合計 11.188 MeVが利用可能



中性子放出時の経路と、ガンマ線の放出は、表裏一体
PHITSの方法なら、AmBe線源のガンマ線放出も計算できる

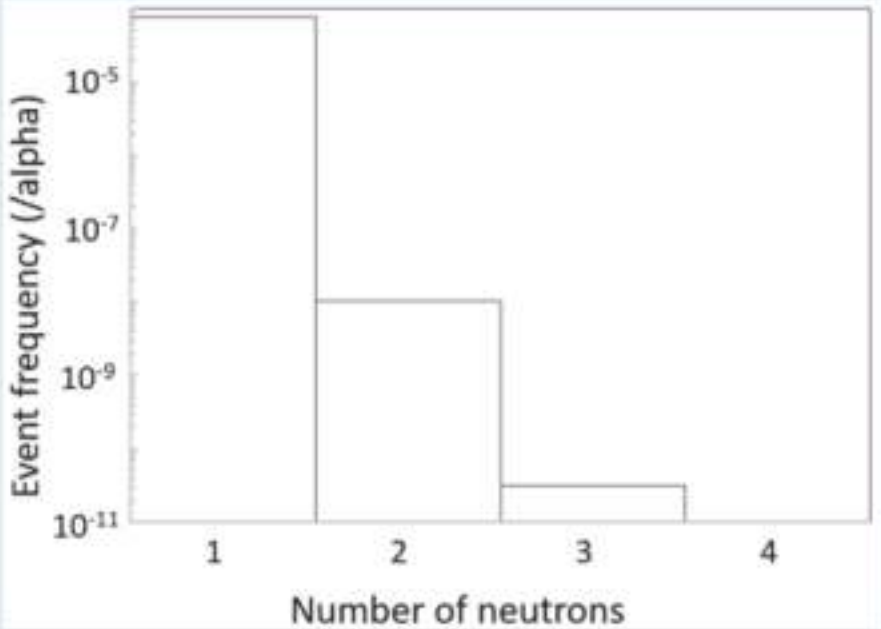
中性子源の補足情報

α崩壊当たり、起源核ごとの中性子スペクトル
([t-product] + mother)



^{241}Am(n,fission)のように、
Be以外からも中性子は出る

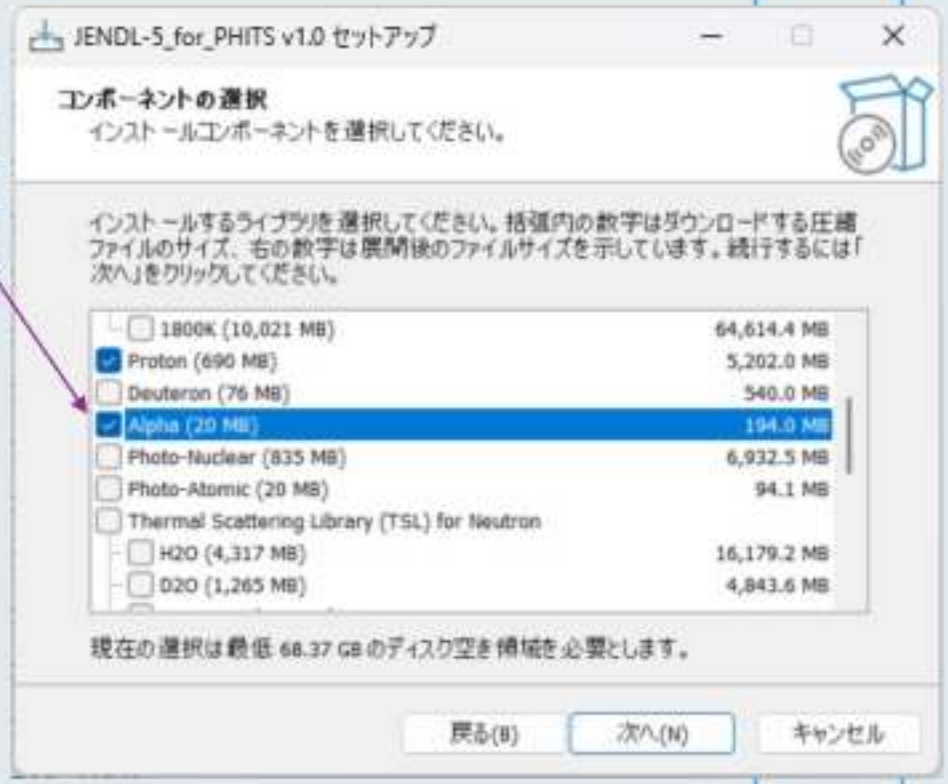
α崩壊当たりの中性子放出数
([t-interact] + output=transmut)



Be(n,2n), Am(n,fission)などで、
２個以上中性子が出る
→コインシデンス信号の原因

ユーザー向け情報

- JENDL-5 α入射断面積データライブラリ
  - これさえインストールすれば、
    phits¥sample¥source¥NeutronSource¥Precise-model
    にあるサンプルファイルがすぐ使える
- 設定は可変　¥Precise-model ¥AmBe　の例




```
[ P a r a m e t e r s ]
$
$ Parameter setup ##########################################
$
$ size parameter taken from https://doi.org/10.1093/rpd/ncm085
set: c1[2.52] $ source diameter (cm)
set: c2[2.52] $ source height (cm)
$ size parameter taken from https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a080571
set: c3[0.37] $ side wall thickness (cm)
set: c4[0.32] $ bottom wall thickness (cm)
$ mass parameter taken from https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a080571
set: c5[0.5] $ AmO2 mass (g)
set: c6[4.7] $ Be mass (g)
set: c7[2.e-4] $ alpha source grain radius
$ Am isotopic molar fraction taken from https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109066
set: c10[2.599*1e-3] $ Am-241
set: c11[9.879*1e-5] $ Am-242
set: c12[4.920*1e-5] $ Am-243
$
##############################################################
```

インプットの頭に、可変パラメータを記述
サイズ・線源重量・アクチノイド組成等
デフォルトは一般的な設定になっている

結論

- PHITSでJENDL-5を活用し、(α,n)線源をシミュレート。従来法にない特徴は・・・・
  - 様々な中性子源 (AmBe、CmBe、PuBe、AmB、AmF、PuC等)が扱える
  - 絶対値を再現できる
  - 粒、容器、アクチノイドの量、軽核の量等のサイズパラメタが変えられる
  - ガンマ線、多重度などの補完的な量が得られる

- PHITSユーザーには、サンプルインプット(AmBe、CmBe、PuBe、AmB、AmF、PuC)を提供
  - 検出器校正、非破壊検査など、応用していただきたい
  - 詳細は T.Ogawa, Annals of Nuclear Energy 216 (2025) 111256 参照

他の線源

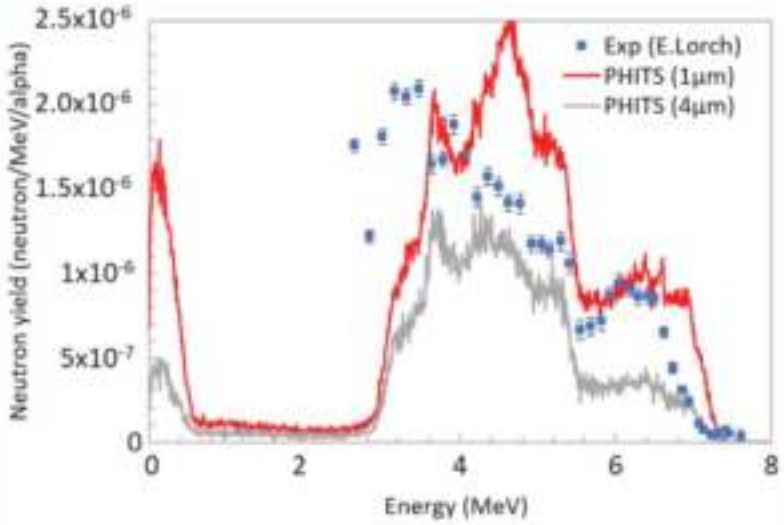


Fig. 9. Same as Fig. 4 but ^{238}Pu-^{13}C source.

^{238}Pu^{13}C

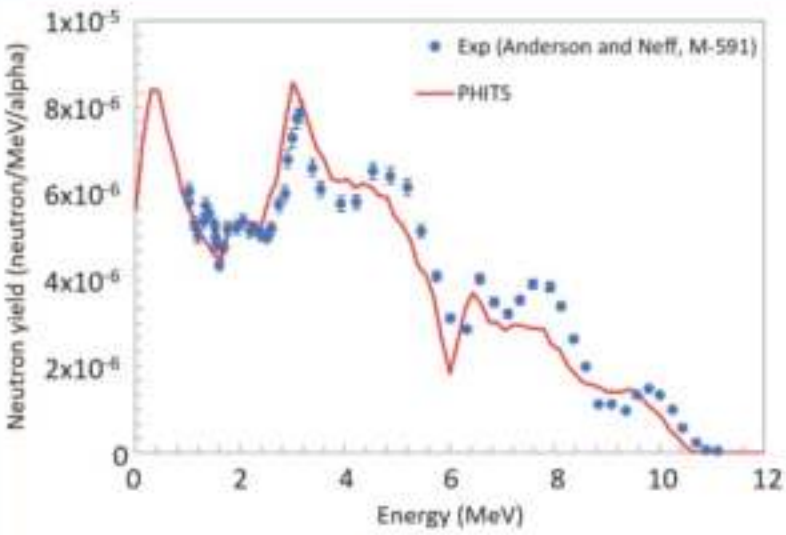


Fig. 6. Same as Fig. 4 but ^{239}Pu-Be source.

^{239}PuBe

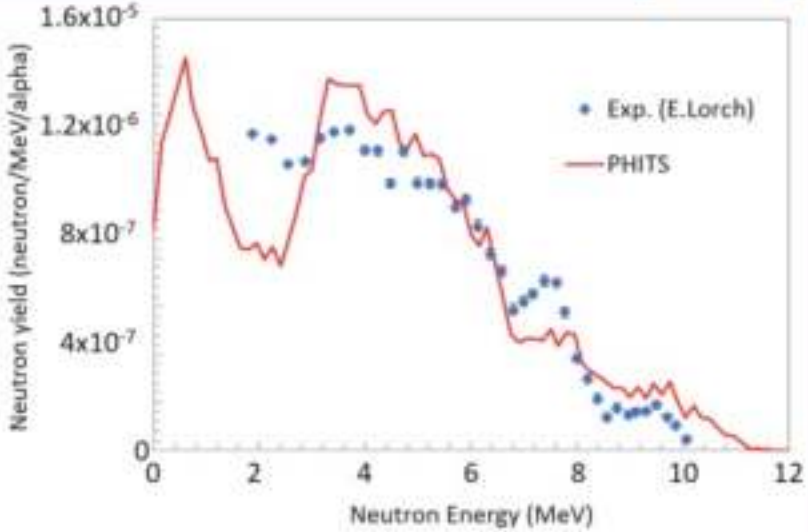


Fig. 5. Same as Fig. 4 but ^{242}Cm-Be source.

^{242}CmBe

INC-ELFモデルによる α粒子入射反応計算の現状

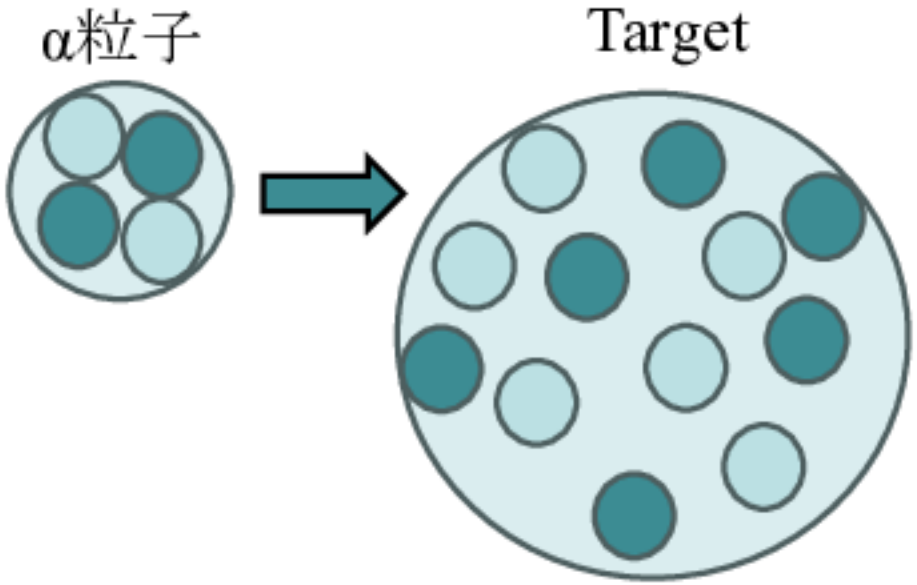
*古田稔将[1]、魚住 裕介[1]、山口 雄司[2]
[1]九州大学，[2]JAEA

九州大学

背景

α粒子入射反応

- 宇宙開発
- 原子力関連施設
- 加速器施設



PHITS(Particle and Heavy Ion Transport code System)

核反応を記述する物理モデルの例

INC　：Intra-Nuclear Cascade　核内カスケード模型
QMD　：Quantum Molecular Dynamic　量子分子動力学模型
GEM　：Generalized Evaporation Model　一般化蒸発モデル

INC-ELF模型

INC(Intra Nuclear Cascade)模型

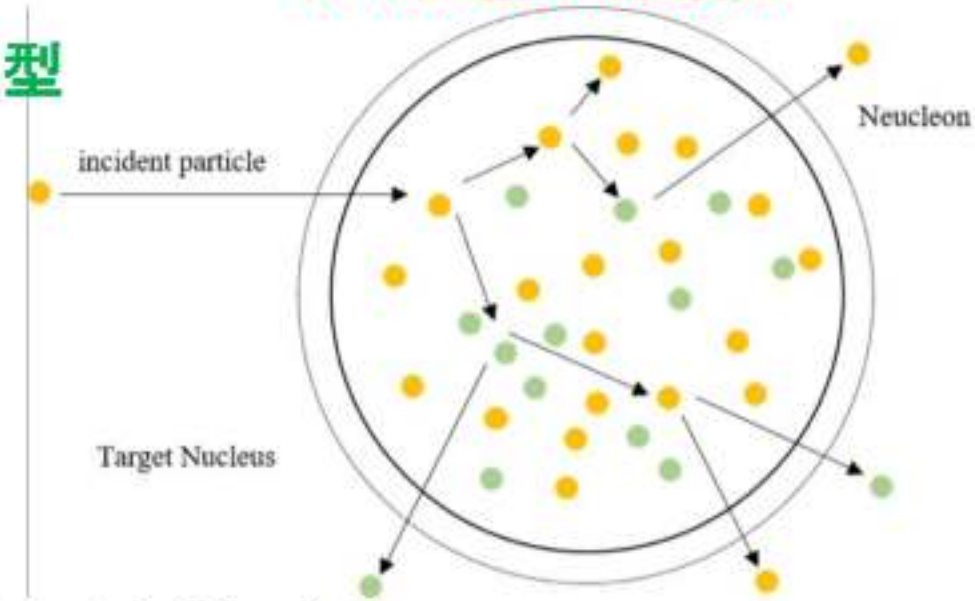
・核反応

＝入射粒子と核内粒子の二体衝突

・原子核は自由粒子の集合体

・核内ポテンシャルは箱型

INC模型の概観図



課題

原理的に、複合粒子を伴う反応は記述不可

⇩

INC-ELF (IntraNuclear Cascade with Emission of Light Fragment)

量子効果等の導入により複合粒子放出反応の計算を可能に

研究目的

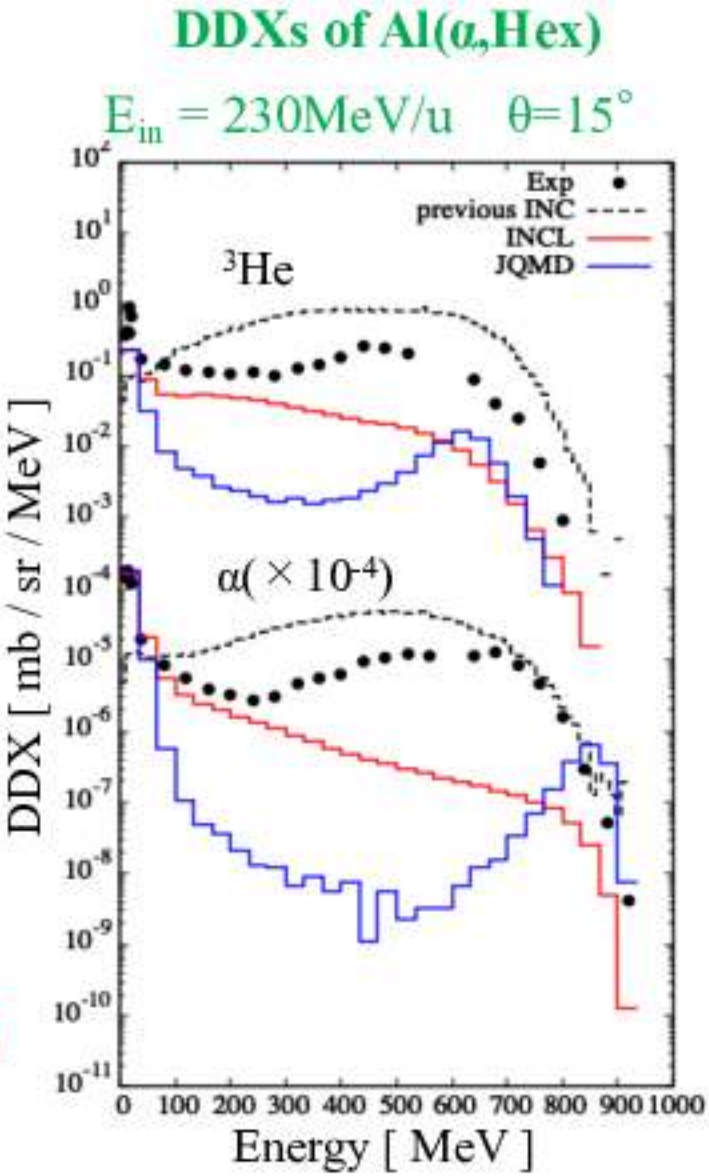
α粒子入射反応計算の課題

PHITSに搭載されているINCLとJQMD
およびこれまでにα粒子入射反応用に改良した
INC-ELF模型の計算精度が低い
特に非弾性散乱の断面積が大きいにも関わらず、計算精度は低い

現INC-ELF模型は低エネルギーのα粒子のDDXを大きく過大評価し、実験結果のピークを再現できていない

^{3}Heの高エネルギーのスペクトルが大きい

INC-ELF模型を改良し、α粒子入射反応の計算精度の向上を目指す

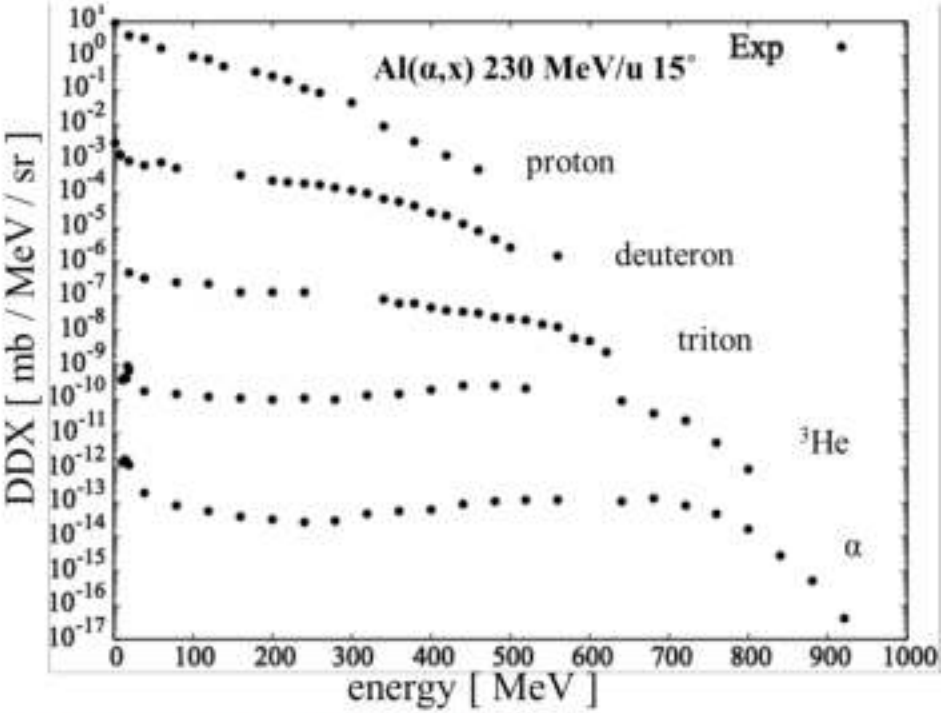


フラグメンテーション反応

α粒子が標的核に入射した瞬間に break up

複合粒子はカスケード過程では ブレークアップしない

従来の核反応模型とは異なる反応描像



230 MeV/u のAlターゲットへのα粒子入射反応、放出角15°の実験結果

p,d,t → ピークが無い　**^{3}Heとα粒子 → 幅広いピークが存在**

^{3}HeのDDXのピークのエネルギー ≒ 690 MeV (230 MeV ×3)

↓

α→^{3}He+nのブレークアップ断面積は標的核周辺部で他のチャンネルよりも大きくなる

フラグメンテーション

ブレークアップチャンネル

$\alpha \to n + {}^3\mathrm{He}$、 $p + t$、 $d + d$、 $n + n + p + p$

中心入射 (b < 3.21 fm)

フラグメンテーション反応の式

$$|\alpha_{init}\rangle|T_{gr}\rangle \to c_0'|\alpha\rangle|T'\rangle + c_1'|{}^3\mathrm{He}n\rangle|T'\rangle + c_2'|tp\rangle|T'\rangle + c_3'|dd\rangle|T'\rangle + c_4'|ppnn\rangle|T'\rangle$$

$$c_0'^2 = 0.038$$
$$c_1'^2 = 0.062$$
$$c_2'^2 = 0.316$$
$$c_3'^2 = 0.208$$
$$c_4'^2 = 0.375$$

周辺入射(b ≥ 3.21 fm)

フラグメンテーション反応の式

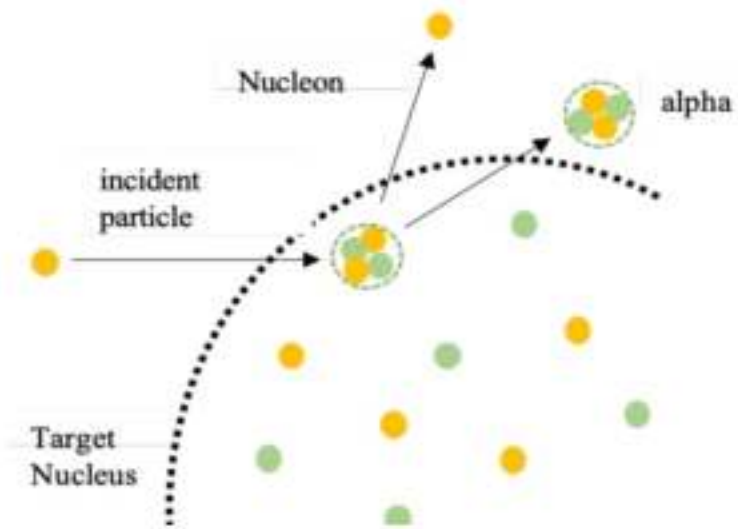
$$|\alpha_{init}\rangle|T_{gr}\rangle \to c_0''|\alpha\rangle|T'\rangle + c_1''|{}^3\mathrm{He}n\rangle|T'\rangle + c_2''|tp\rangle|T'\rangle + c_3''|dd\rangle|T'\rangle + c_4''|ppnn\rangle|T'\rangle + c_5''|\alpha_{init}\rangle|T_{gr}\rangle$$

$$c_0''^2 = 0.377$$
$$c_1''^2 = 0.242$$
$$c_2''^2 = 0$$
$$c_3''^2 = 0$$
$$c_4''^2 = 0$$
$$c_5''^2 = 0.381$$

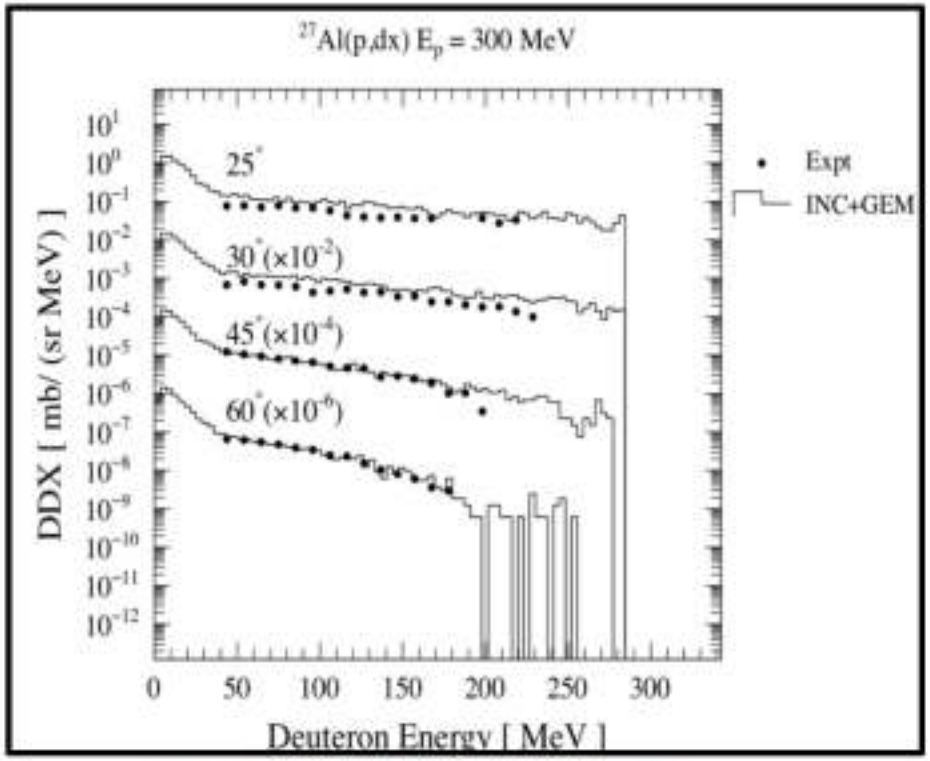
標的核内複合粒子のノックアウト

INC-ELF模型の陽子入射反応計算で導入されている複合粒子生成反応の一つ

標的核内で生成された複合粒子を入射粒子がはじき出す反応



標的核内のクラスターのはじき出し



複合粒子生成の確率

deuteron	・・・	10 %
triton	・・・	10 %
^{3}He	・・・	10 %
α粒子	・・・	20 %

カスケード過程

INC模型では標的核は密度分布を持った核子の集合体

↓

入射粒子は核内での運動に伴い核内核子との散乱を繰り返す

核子-核子衝突

衝突判定には衝突に関与する2粒子の位置関係のみを用いる

$$r_{ij} < \sqrt{\sigma/\pi}$$

核子-核子断面積にはCugnonの式を用いる

複合粒子-核子衝突

複合粒子内の代表となる1核子と標的核内核子による核子-核子衝突
代表核子の運動量変化を複合粒子の運動量変化とみなす

Pauli Blocking

衝突後、フェルミエネルギー以下となる核子が生じる衝突を禁止する

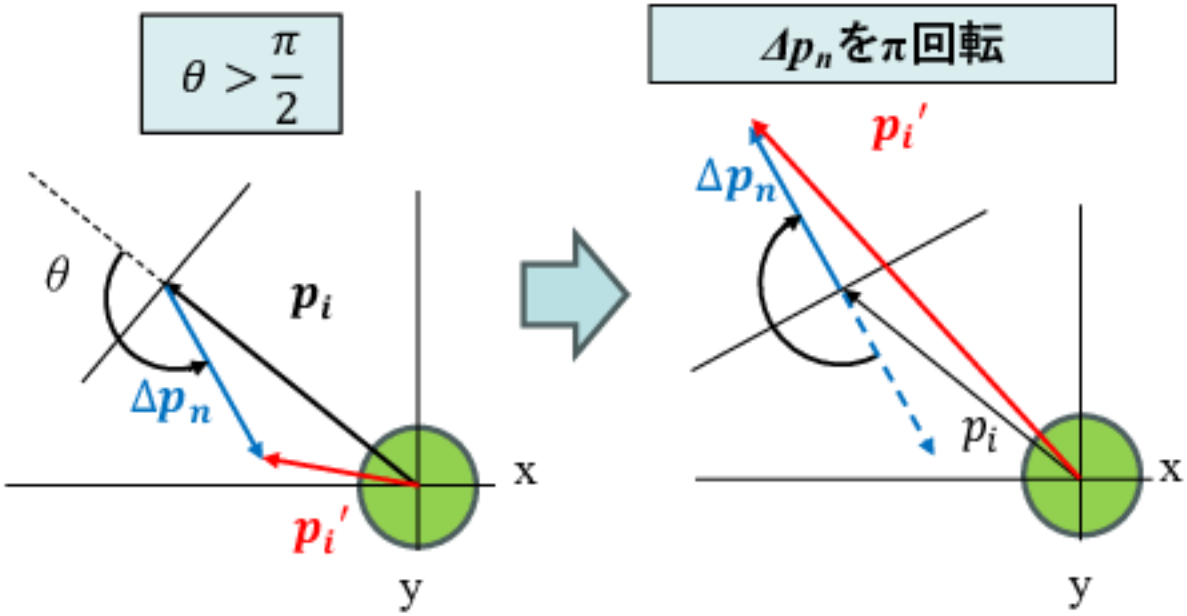
カスケード過程

外側への散乱（斥力効果）

^{3}Heとα粒子の衝突回数が非常に多く、その結果、低エネルギーのDDXにおいて大きく過大評価

↓

複合粒子－核子衝突における粒子の運動量変化の方向を外側に向ける



$$p_i' = p_i + \Delta p_n$$

p_i' ：衝突後の粒子の運動量

p_i ：衝突前の粒子の運動量

Δp_n ：粒子内の核子の運動量変化

角度偏向

標的核内入射時および放出時に標的核のポテンシャルによる粒子の角度偏向

粒子のエネルギーが小さく、標的核の質量数が大きいほど角度偏向の影響は大きくなる

例えば、α粒子の場合

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \exp\{-0.01(A - 0.12E + 4)\theta\}$$

Ω : 立体角
θ : 偏向角度
A : 標的核の質量数
E : 粒子のエネルギー

角度偏向

新たなエネルギー依存性

角度偏向の効果は粒子の入射・放出位置によってその様子が異なる
→衝突係数依存性
その違いは粒子のエネルギーによって変わる
↓
標的核の核子密度分布と同じWoods-Saxon型のエネルギー依存性を採用

$$F = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - 500}{30}\right)}$$

$\zeta < F$

方位角 $\varphi = 2\pi\xi$　ランダムな方向に角度偏向

$\zeta \geq F$

方位角 $\varphi = \pi$　前方方向に角度偏向

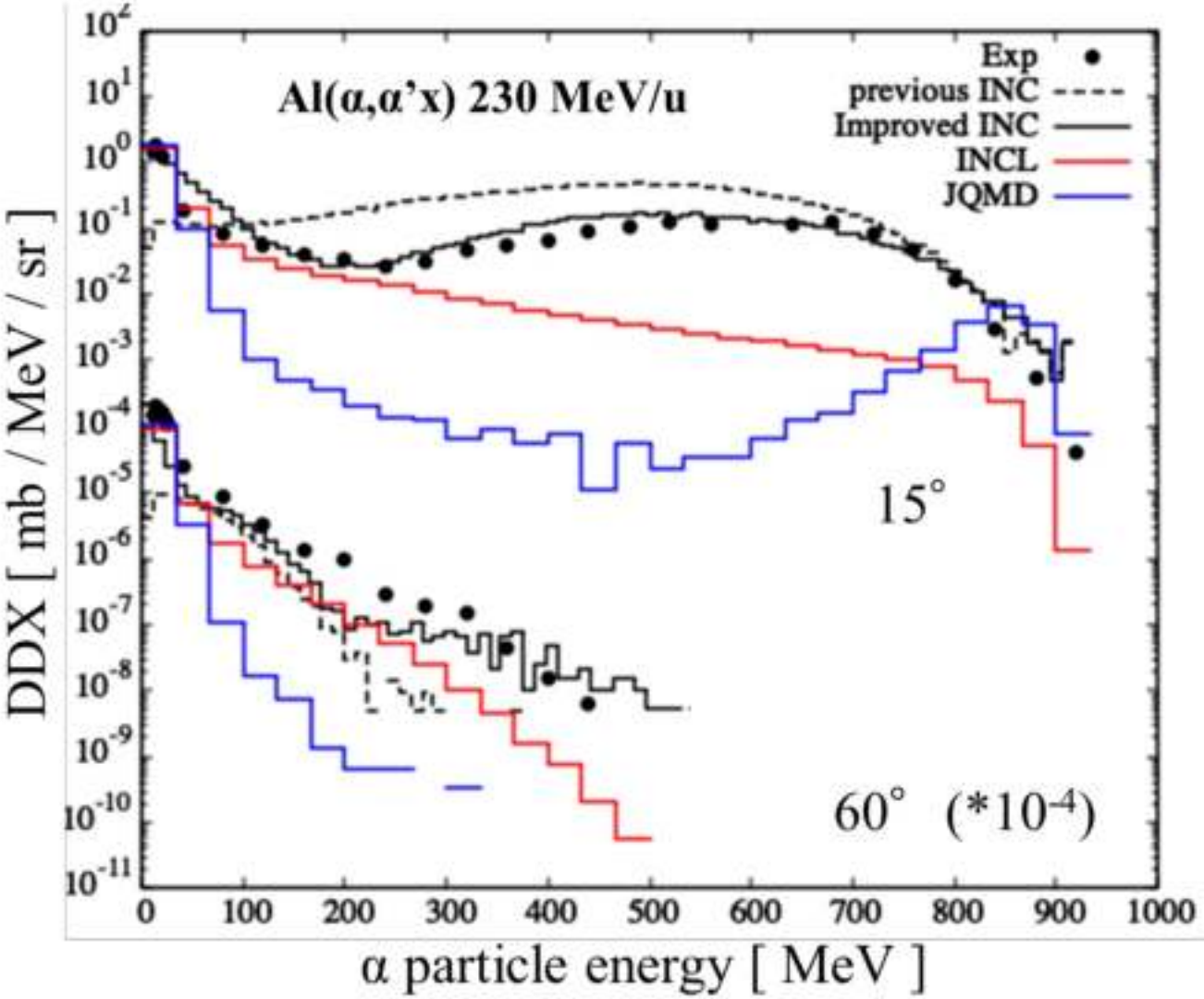
ζ, ξ：乱数

計算結果

放出角度15°における
低エネルギー領域の
過大評価を解消

放出角度60°における
最大エネルギーの増加

実験結果の再現性が
本研究のモデルが
最も良い

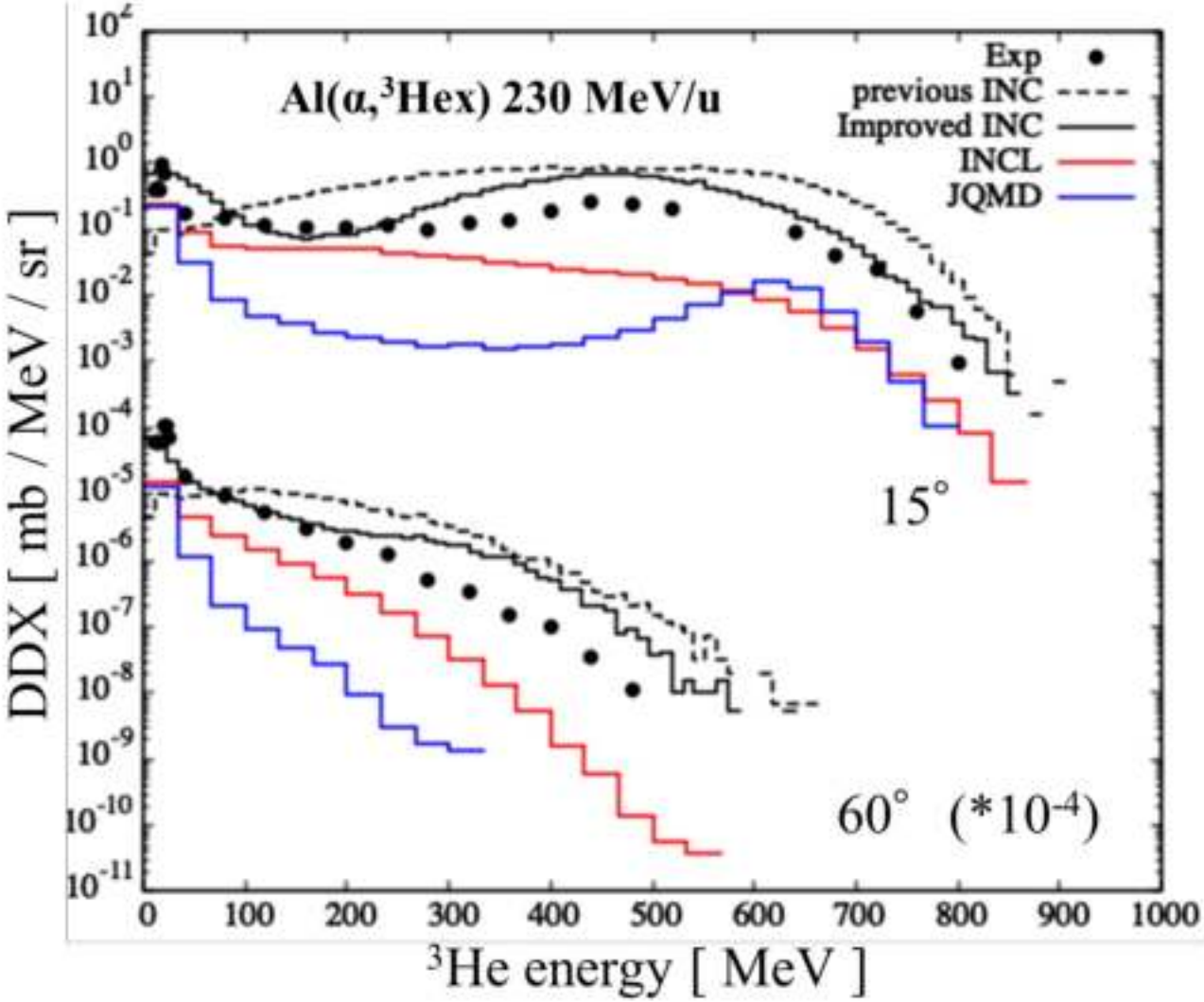


計算結果

放出角度15°における低エネルギー領域の過大評価を解消

放出角度60°における過大評価を緩和

依然として全体的に過大評価

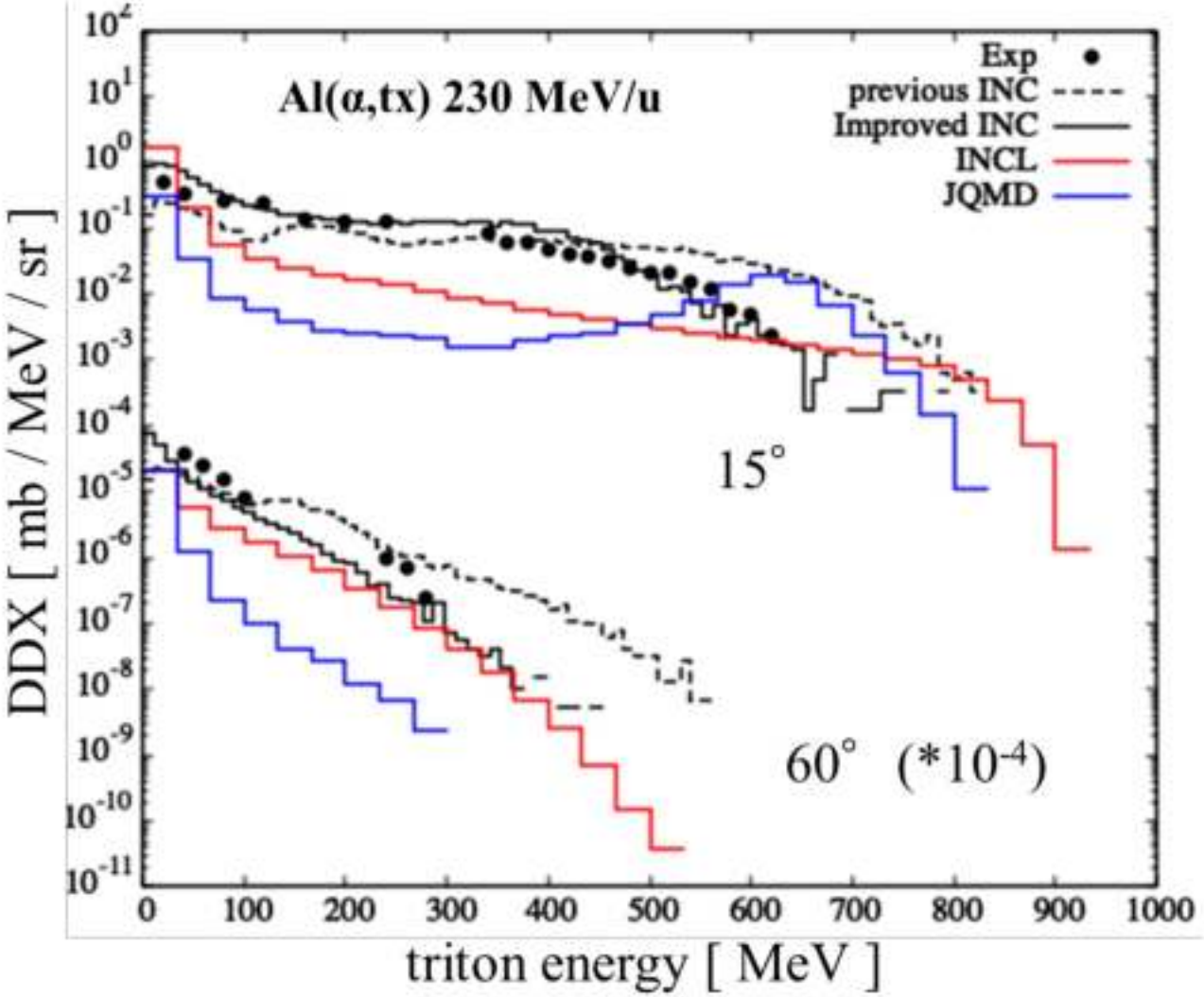


計算結果

放出角度15°における高エネルギー領域の過大評価を解消

放出角度60°における過大評価を解消

本研究の計算モデルが実験結果に対して最高の再現性を示す

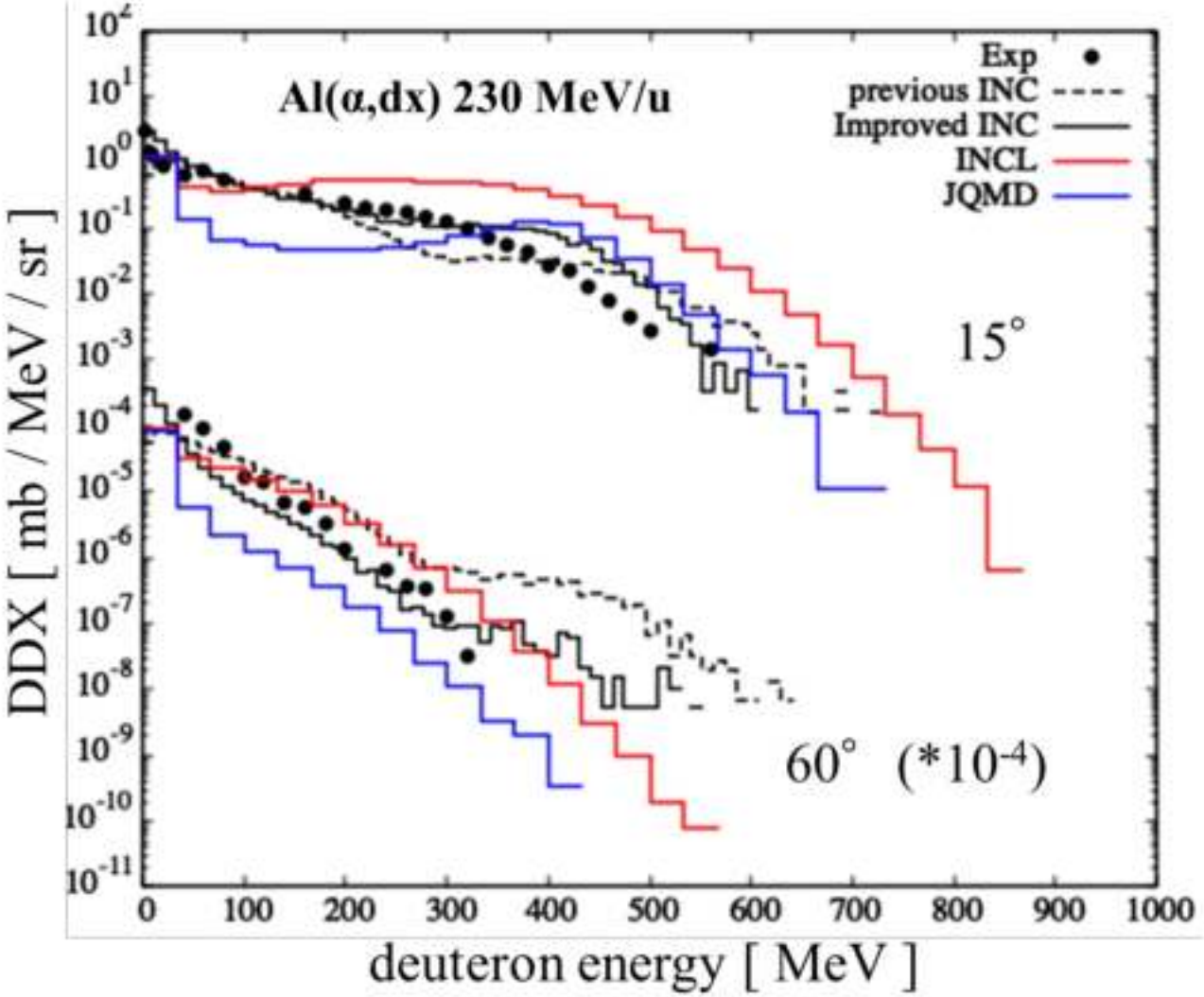


計算結果

放出角度15°における200 ~ 400 MeVの過小評価を解消

放出角度60°における高エネルギー領域の過大評価を解消

400 MeV以上の領域で過大評価が存在

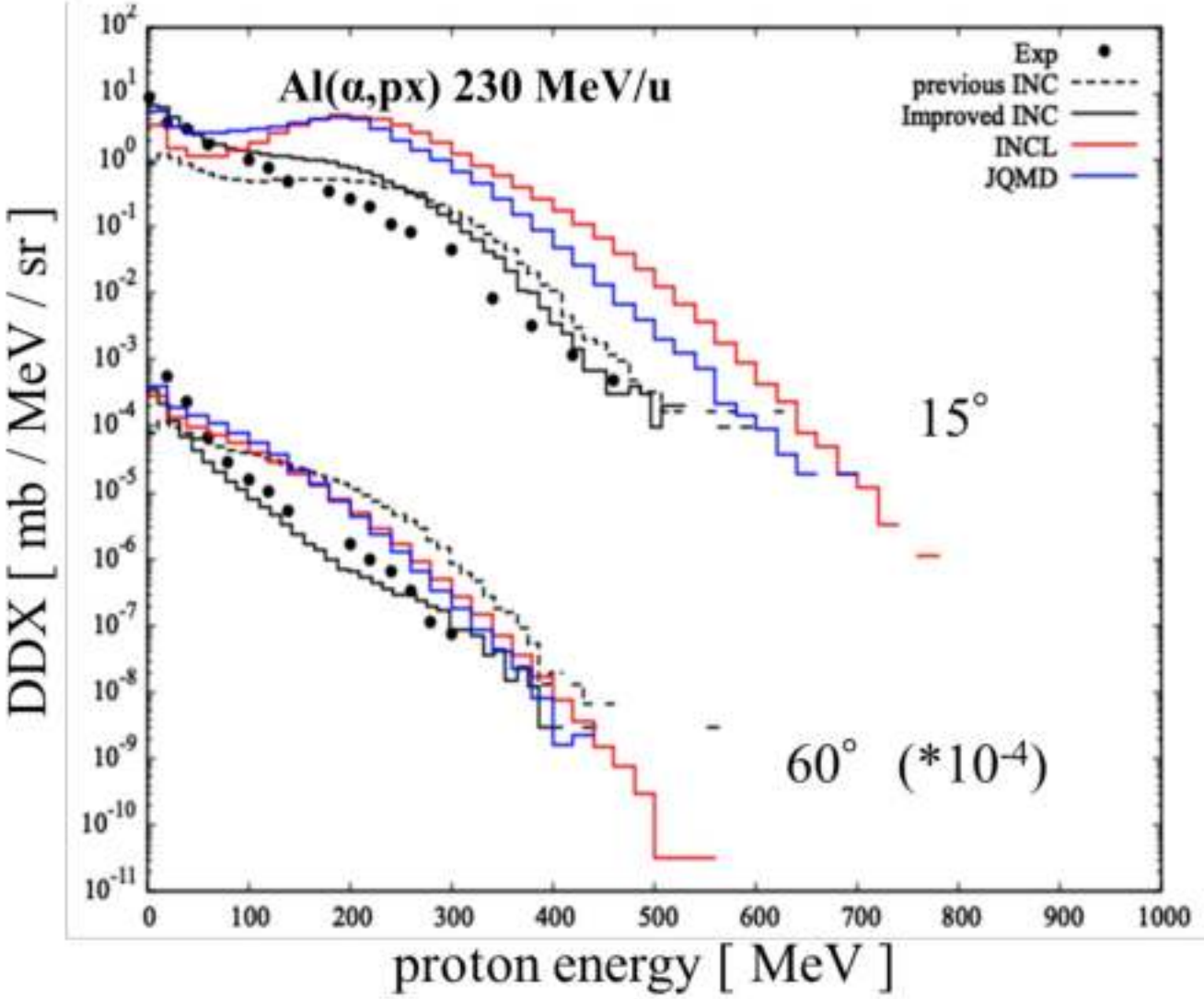


計算結果

放出角度15°において低エネルギー領域で過大評価

放出角度15°において本研究の計算モデルの再現性が最も高い

放出角度60°における過大評価を解消



まとめ

数百MeVのα粒子入射反応INC-ELF模型の改良

・標的核入射した瞬間のフラグメンテーション反応＋衝突係数依存性
・複合粒子のノックアウト
・外側への散乱（斥力効果）
・角度偏向＋エネルギー依存性

230MeV/uのAlターゲットへのα粒子入射反応の計算結果と実験結果の比較

α粒子・・・低エネルギーの過大評価を解消し、実験結果を精度よく再現

^{3}He・・・全体的な過大評価を解消。依然として過大評価は存在

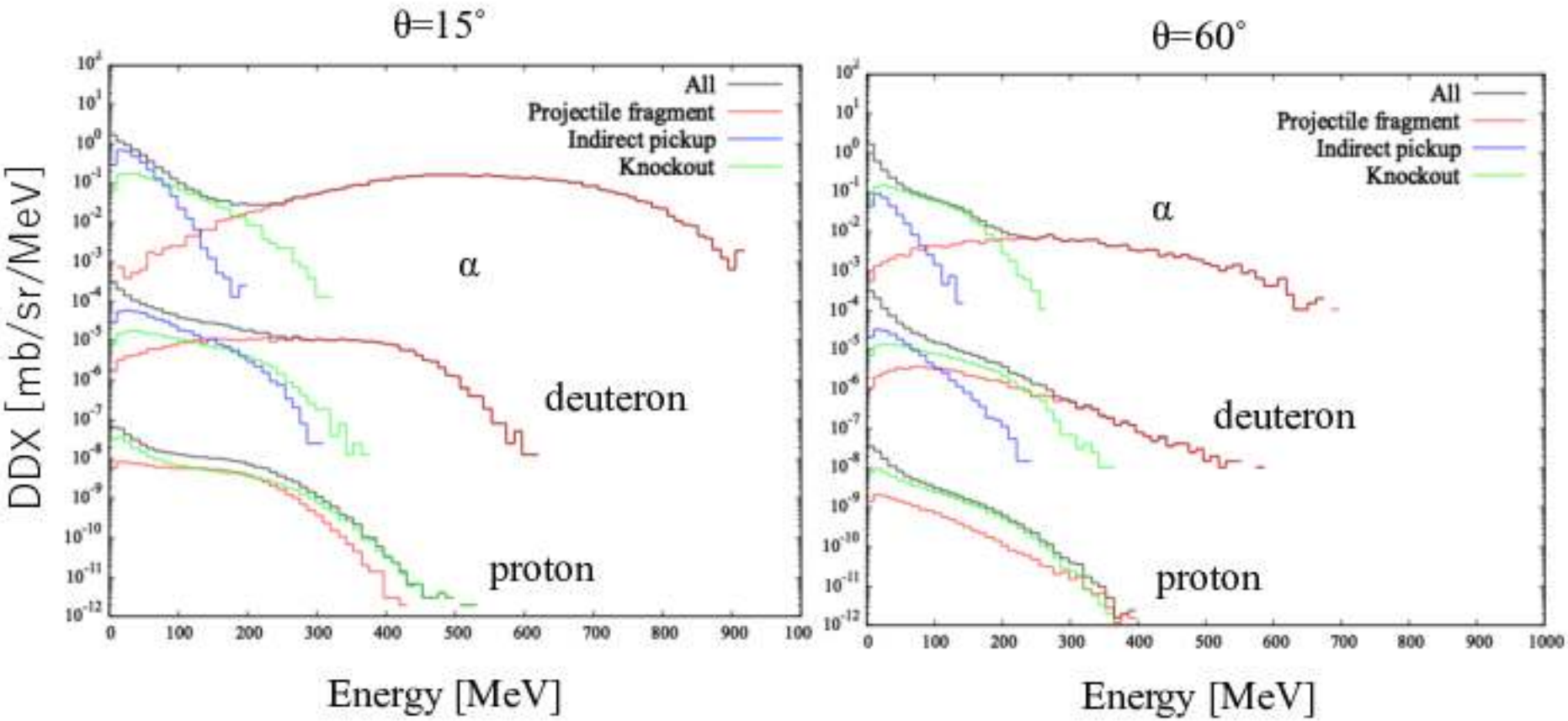
triton・・・高エネルギーでの過大評価を解消し、実験結果を精度よく再現

deuteron・・・放出角度60°の高エネルギーにおける過大評価を解消。
15°の高エネルギーで過大評価

proton・・・放出角度60°の過大評価を解消。放出角度15 °においても高精度

今後の課題

Alターゲットや入射エネルギー230 MeV/u以外でのα粒子入射反応の計算


θ=15°
θ=60°
All
Projectile fragment
Indirect pickup
Knockout
α
deuteron
proton
DDX [mb/sr/MeV]
Energy [MeV]
Energy [MeV]

基底状態

α粒子

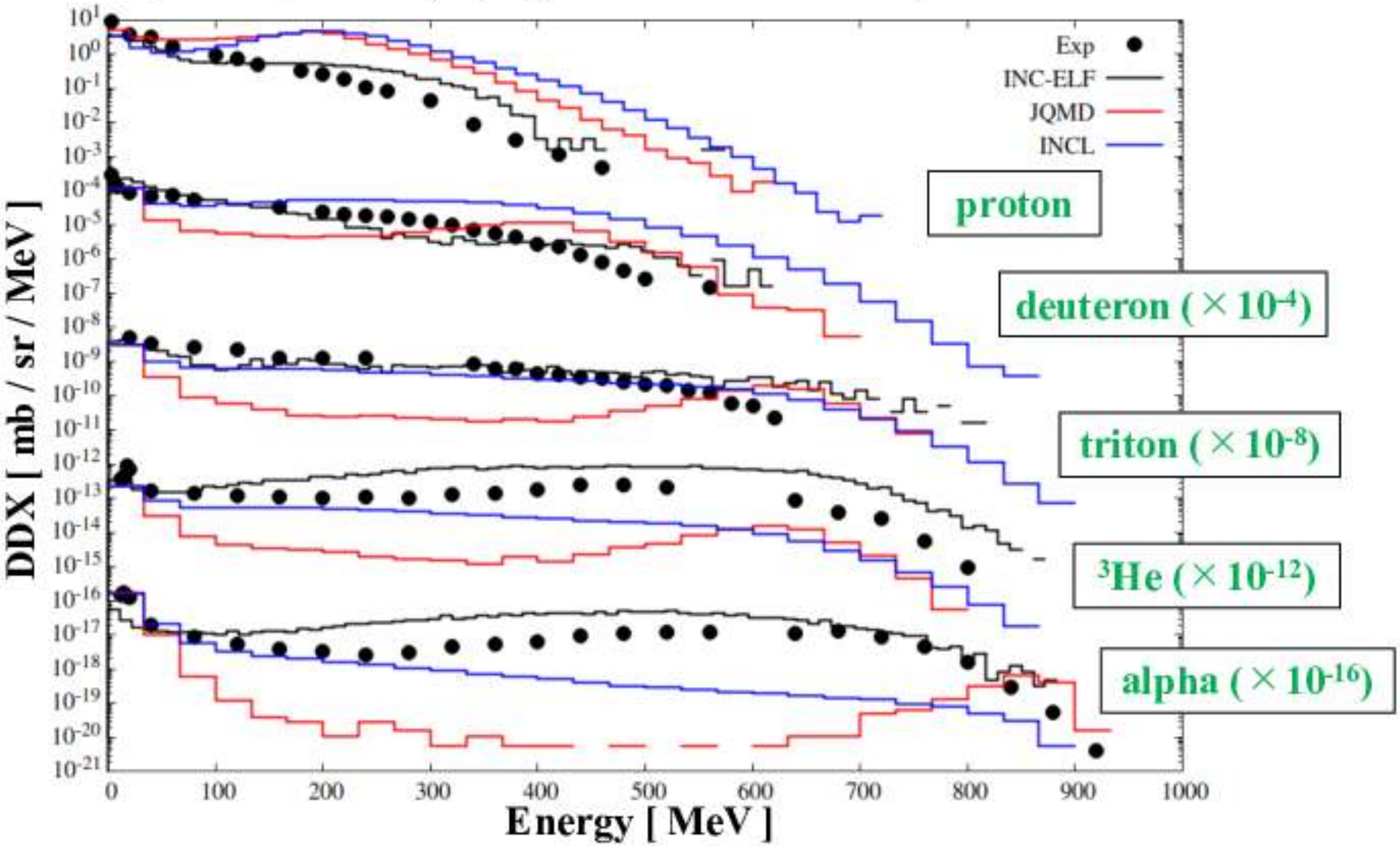
$$\rho_G(r) = \begin{cases} \left(\frac{R}{\pi}\right)^3 exp\left(\frac{-r^2}{R^2}\right) & (r \leq R_{max}) \\ 0 & (r > R_{max}) \end{cases}$$

$$\rho_{G,F}(p) = \begin{cases} \left(\frac{\hbar}{\pi R}\right)^3 exp\left(\frac{-R^2 p^2}{\hbar^2}\right) & (p \leq P_{max}) \\ 0 & (p > P_{max}) \end{cases}$$

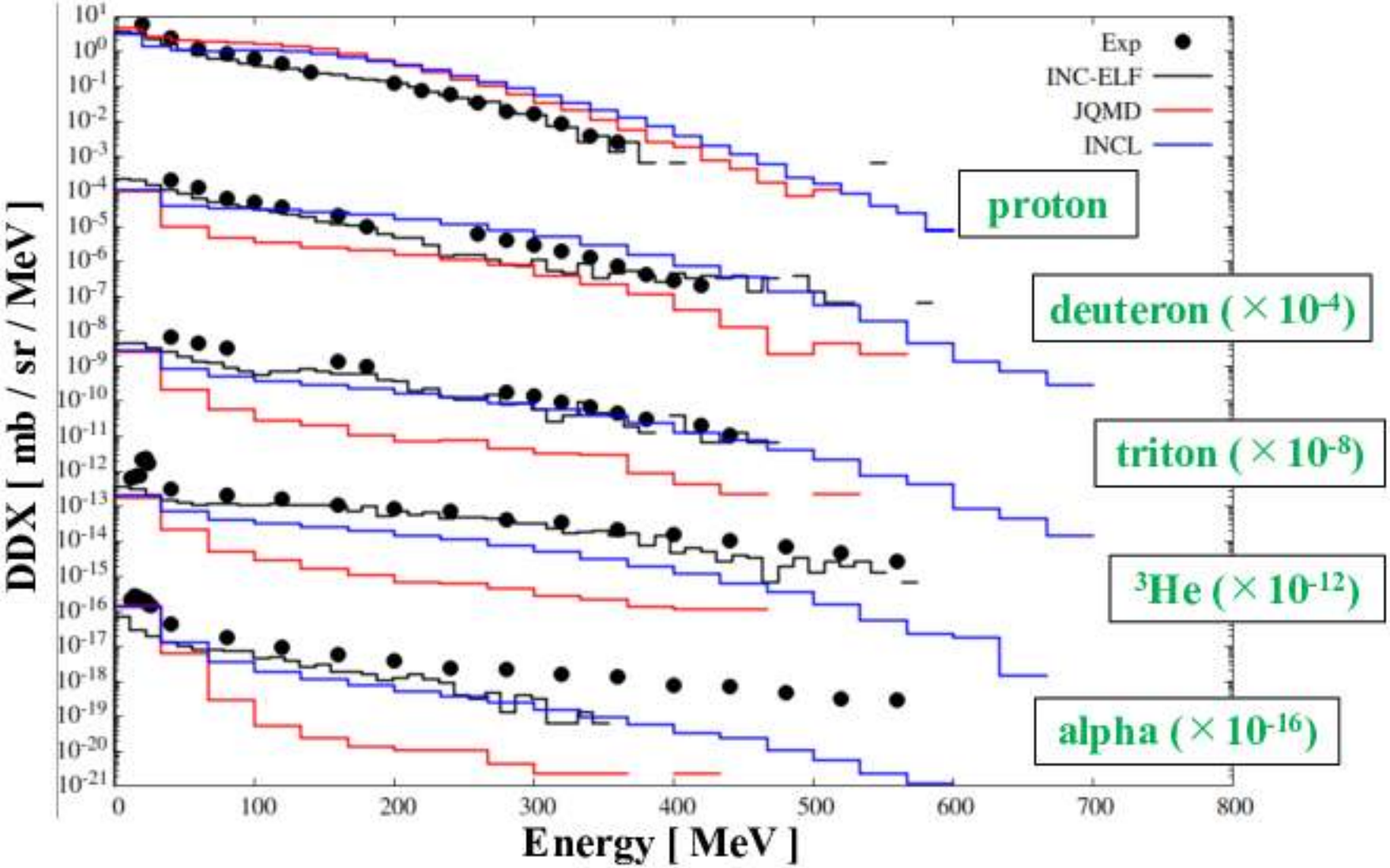
標的核

$$\rho_{ws}(r) = \begin{cases} \frac{\rho_0}{1 + \exp(\frac{r - R_0}{a})} & (r \leq R_0 + 5a) \\ 0 & (R_0 + 5a < r) \end{cases}$$

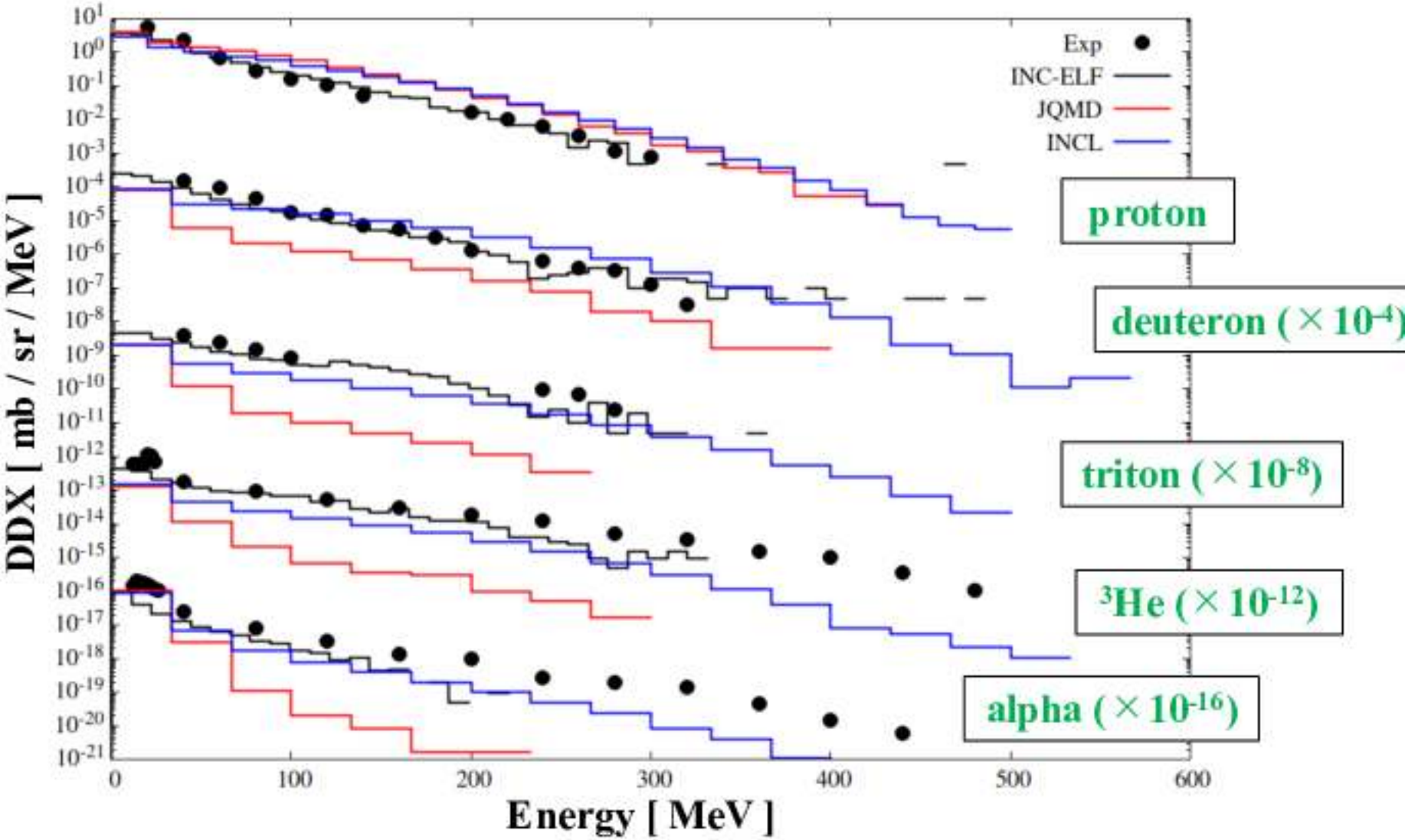
計算結果 Al(α,x) 230 MeV/u, θ = 15°



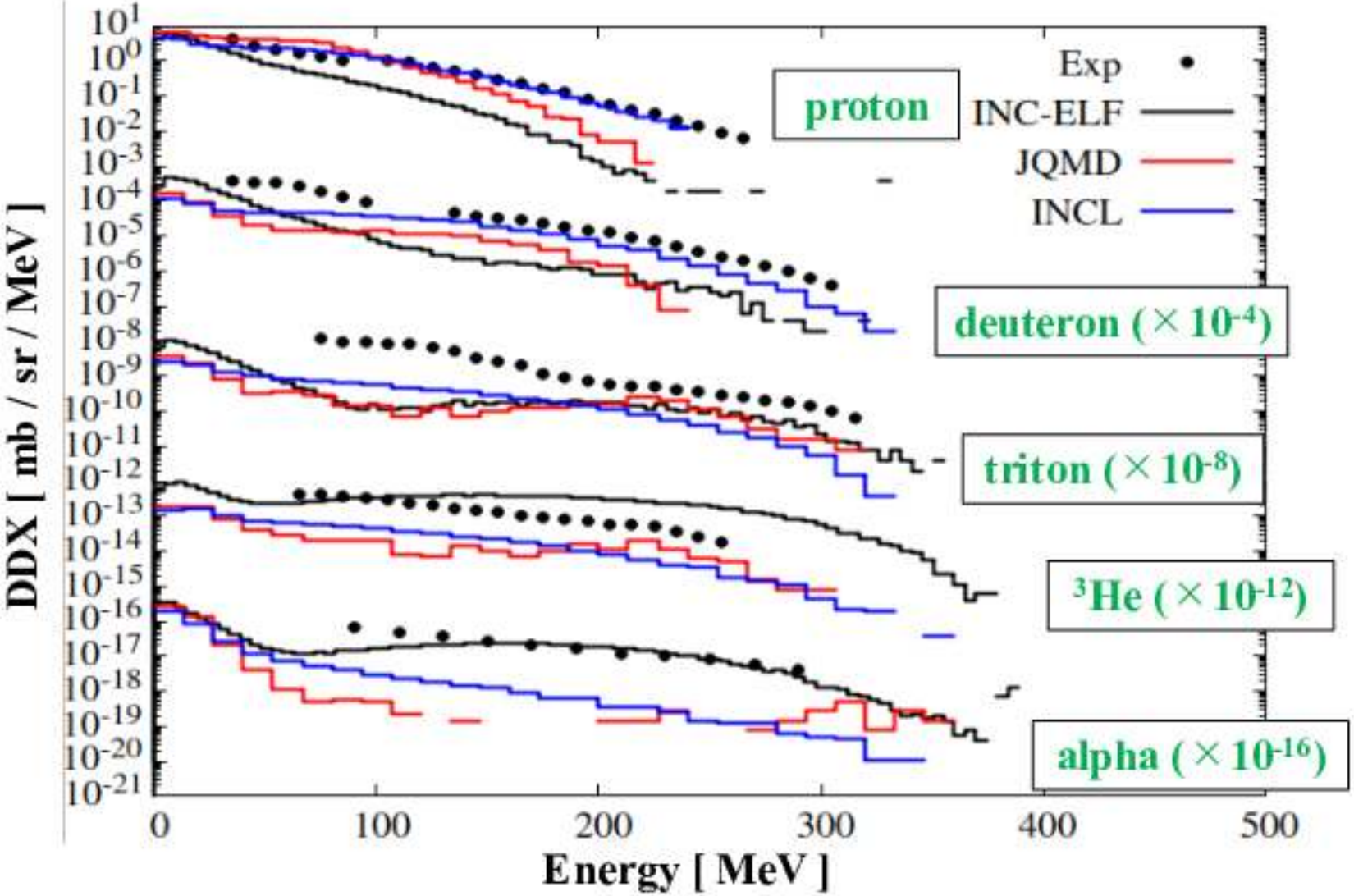
計算結果 Al(α,x) 230 MeV/u, θ = 40°



計算結果 Al(α,x) 230 MeV/u, θ = 60°



計算結果 Al(α,x) 100 MeV/u, θ = 30°



まとめ

数百MeVのα粒子入射反応に対する高精度な計算モデルの開発

INC-ELFはINC模型に量子効果等を導入することで複合粒子放出を計算

⇩

α粒子入射反応計算モデルにINC-ELFを改良

⇩

230 MeV/uのAl(α,x)反応のDDXの実験結果と計算結果を比較

⇩

INCLやJQMDと比較して実験結果の再現性が向上

- α粒子のフラグメンテーション反応は標的核のポテンシャルによって生じる可能性
- 複合粒子は壊れにくい
- direct knock out 反応の導入が効果的

α粒子の基底状態

α粒子内核子の運動量分布

Glauber型分布

$$\rho(p_i) = \left(\frac{\pi R}{\hbar}\right)^3 \exp\left\{-\left(\frac{p_i R}{\hbar}\right)^2\right\}$$

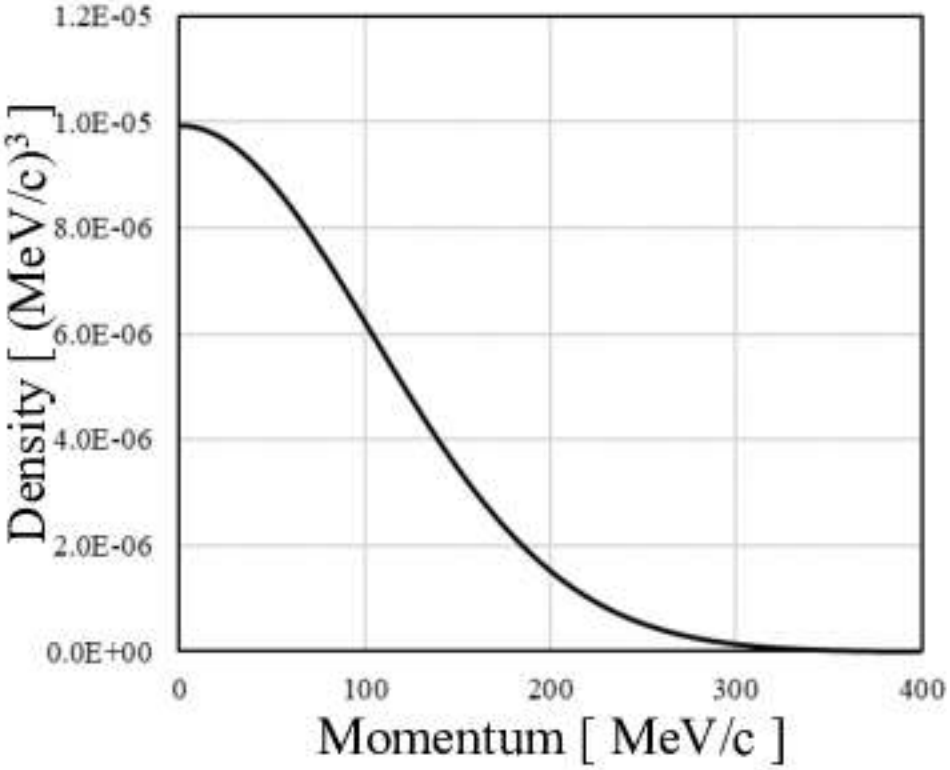
$$R = 1.348 \text{ fm}$$

α粒子内核子の実験室系での運動量

$$\boldsymbol{p}_i' = \boldsymbol{p}_i + \gamma\left(\frac{\gamma}{\gamma+1}\boldsymbol{p}_i \cdot \boldsymbol{\beta}_\alpha - E_i\right)\boldsymbol{\beta}_\alpha$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\boldsymbol{\beta}_\alpha{}^2}}$$

$$E_i = \sqrt{\boldsymbol{p}_i{}^2 + m_i{}^2}$$



α粒子内核子の運動量分布

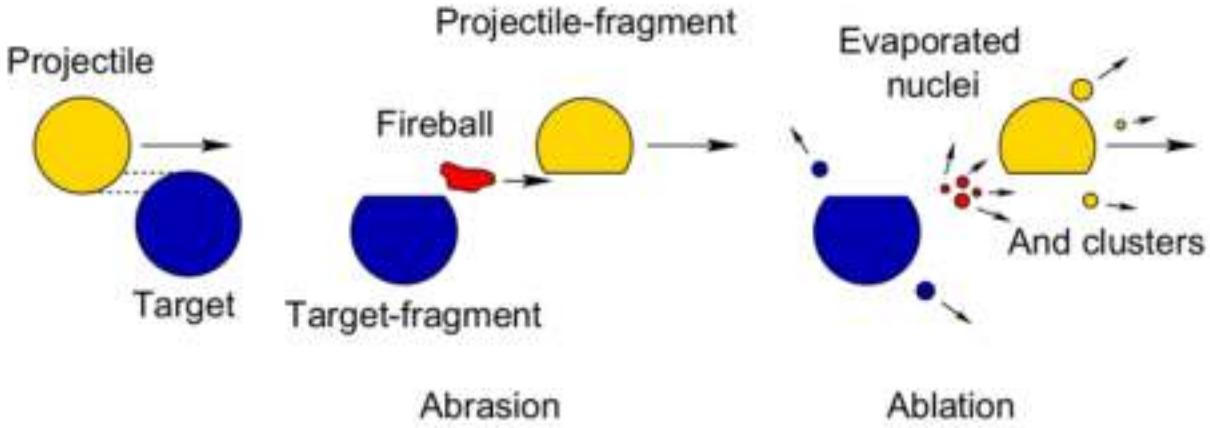
フラグメンテーション反応

重粒子入射において重粒子がいくつかの粒子に分裂する反応

重粒子入射において支配的な役割を持つ

AA(Abrasion-Ablation)モデルによって定性的に説明されるも不十分

JQMDやINCLではコアレッセンスによって再現される



AAモデル

考察

後方角においてもINC-ELFはINCLとJQMDの計算結果よりも
<u>実験結果の再現性が向上</u>

特に、tritonと^{3}Heの再現性が向上

⇧

<u>direct knock out 反応を導入した効果</u>

課題

INC-ELFでは、高エネルギーのα粒子が放出されない

⇩

複合粒子－核子衝突の計算モデルの改良の必要性

考察

INC-ELF

・・・入射α粒子が入射時に標的核のポテンシャルによって壊れる

⇩

放出角度15°における^{3}Heとalphaの高エネルギーのピークの再現性が向上

INCLやJQMDでは、^{3}HeとalphaのDDXを過小評価

⊕

protonのDDXを過大評価

⇩

入射α粒子が壊れすぎている

α粒子 (および複合粒子) は従来の計算モデルで考えられているよりも壊れにくい

背景

INC模型・・・原理的には、複合粒子を伴う反応は記述不可

↓

INC-ELF（IntraNuclear Cascade with Emission of Light Fragment）

・量子効果等の導入により複合粒子放出反応、100 MeV以下の低エネルギー陽子入射反応の計算を可能に

INC-ELF による(p,dx)反応計算

・直接ピックアップ過程

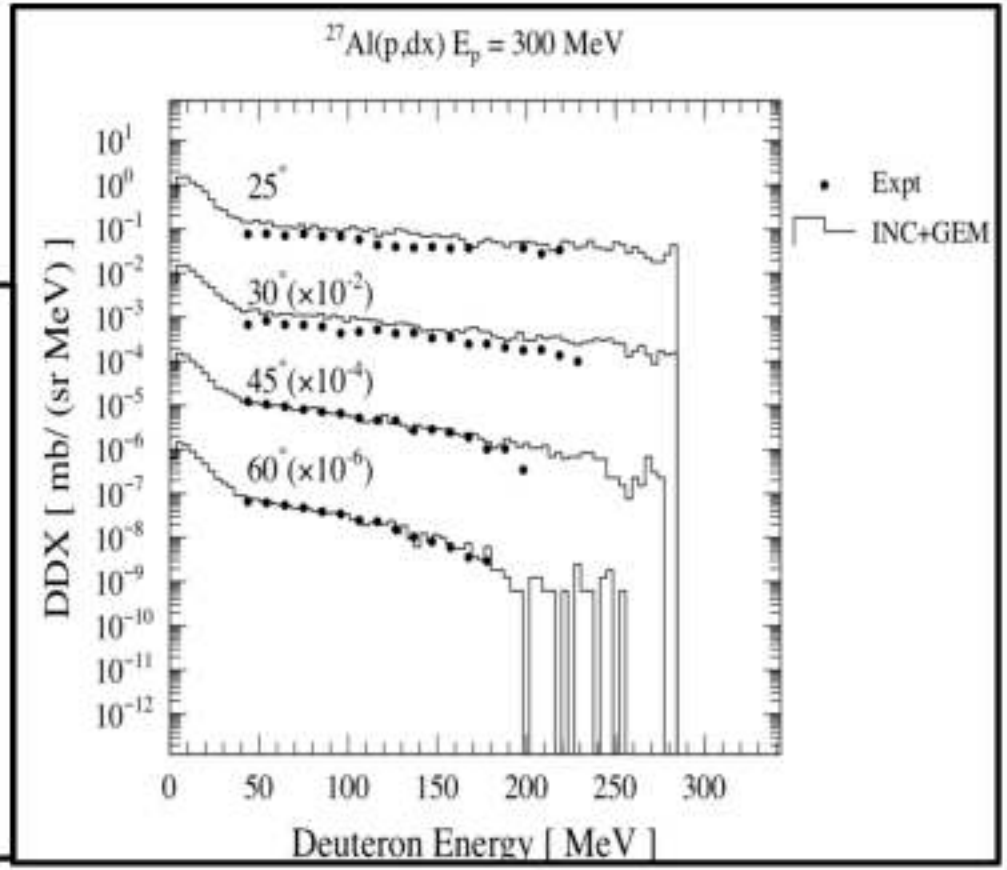
$p + \langle n \rangle \rightarrow d$

・ノックアウト過程

$p + \langle d \rangle \rightarrow p + d$

・間接ピックアップ過程

$p + \langle n \rangle \rightarrow d$



計算手法

alpha粒子の波動関数

$$|\alpha\rangle \rightarrow C_{\alpha}|\alpha\rangle + C_{\mathrm{pt}}|\mathrm{p,t}\rangle + C_{\mathrm{dd}}|\mathrm{d,d}\rangle + C_{{}^{3}\mathrm{Hen}}|{}^{3}\mathrm{He,n}\rangle + C_{\mathrm{ppnn}}|\mathrm{p,p,n,n}\rangle$$

α粒子はいくつかのクラスター状態を内包

→内部構造に従い入射時にフラグメンテーション反応

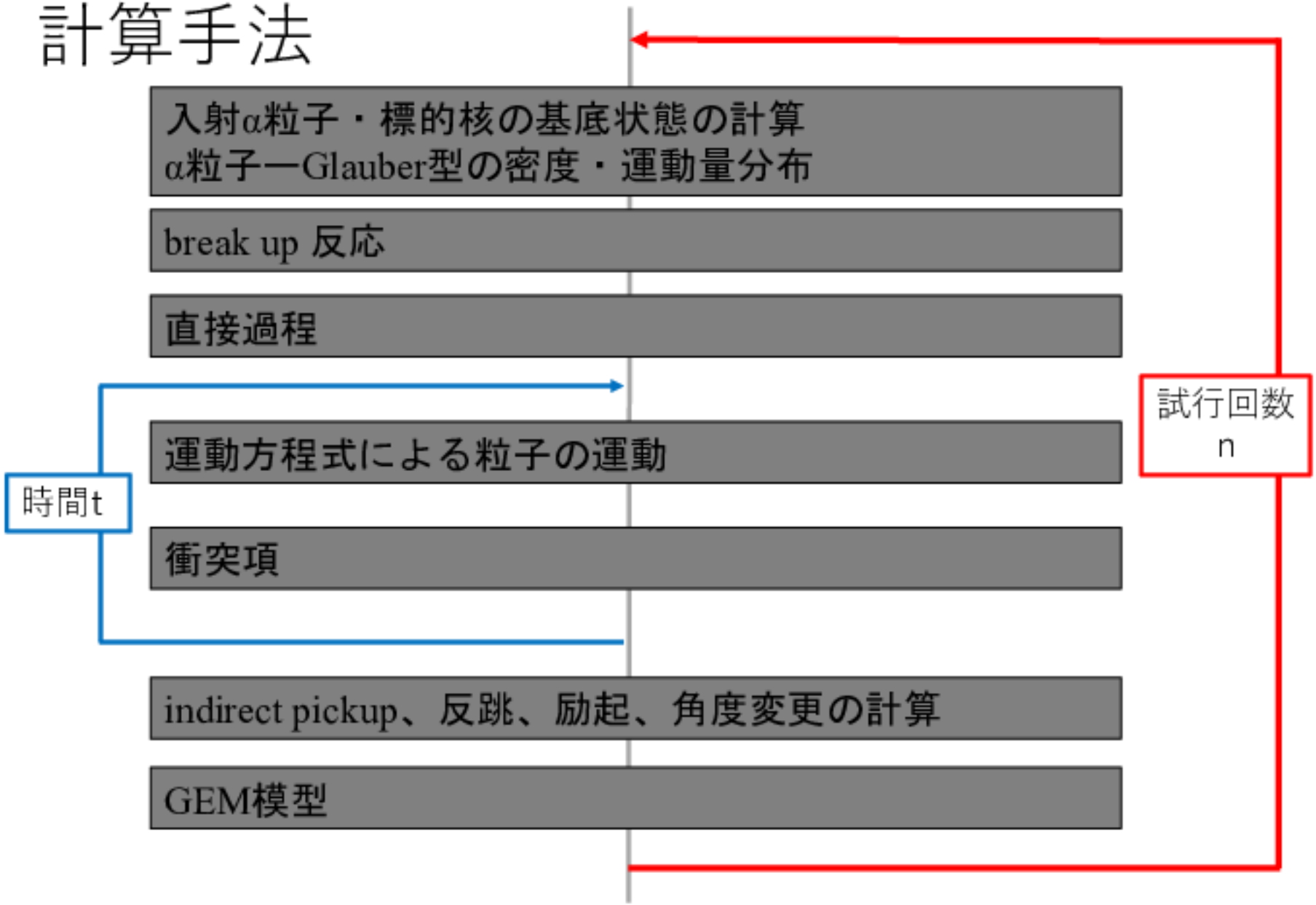
bパラメータ依存性

フラグメンテーション反応は標的核との相互作用

標的核の密度分布の影響を反映させるために簡易的な

bパラメータ依存性を導入

計算手法


入射α粒子・標的核の基底状態の計算
α粒子ーGlauber型の密度・運動量分布
break up 反応
直接過程
運動方程式による粒子の運動
衝突項
時間t
試行回数
n
indirect pickup、反跳、励起、角度変更の計算
GEM模型

背景

α粒子入射反応のDDX

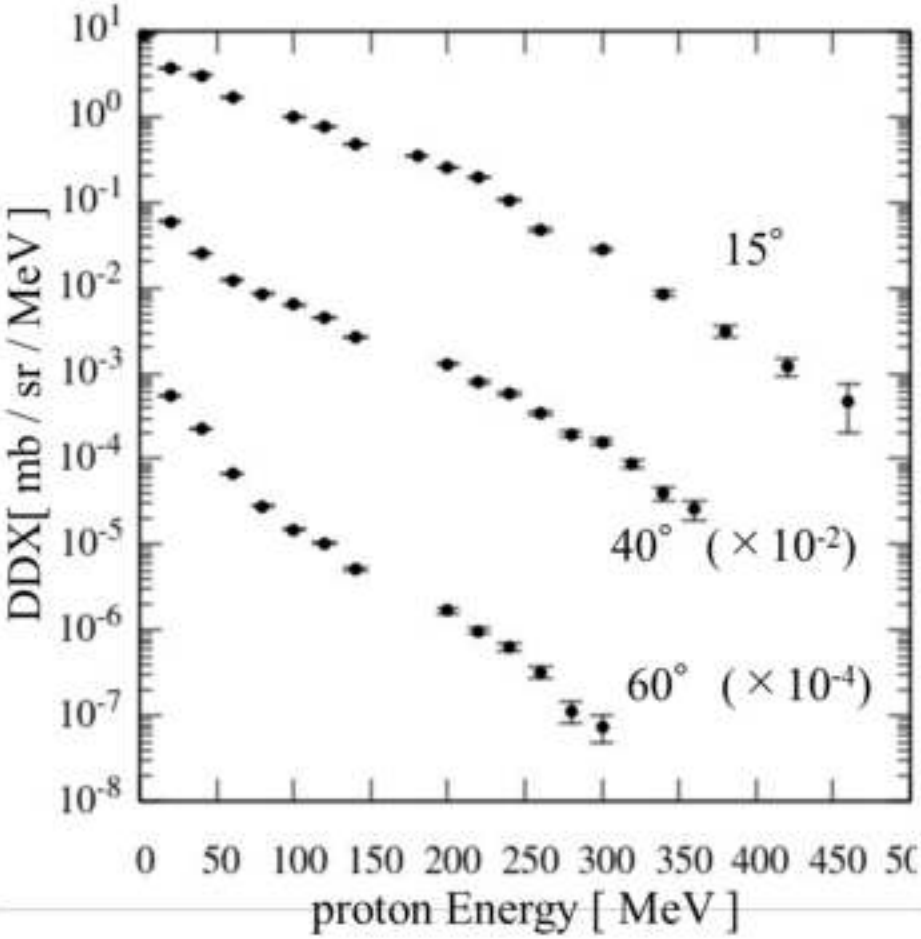
- **J.R.Wu et al.**
  入射エネルギー 20 – 40 MeV/u、標的核 Al~Th、検出粒子 p,d,t,^{3}He,α

- **R.R.Doering et al.**
  入射エネルギー 180 MeV/u、標的核 Al~Ta、検出粒子 p,d,t,^{3}He,α
  （検出角度は60°以上のみ）

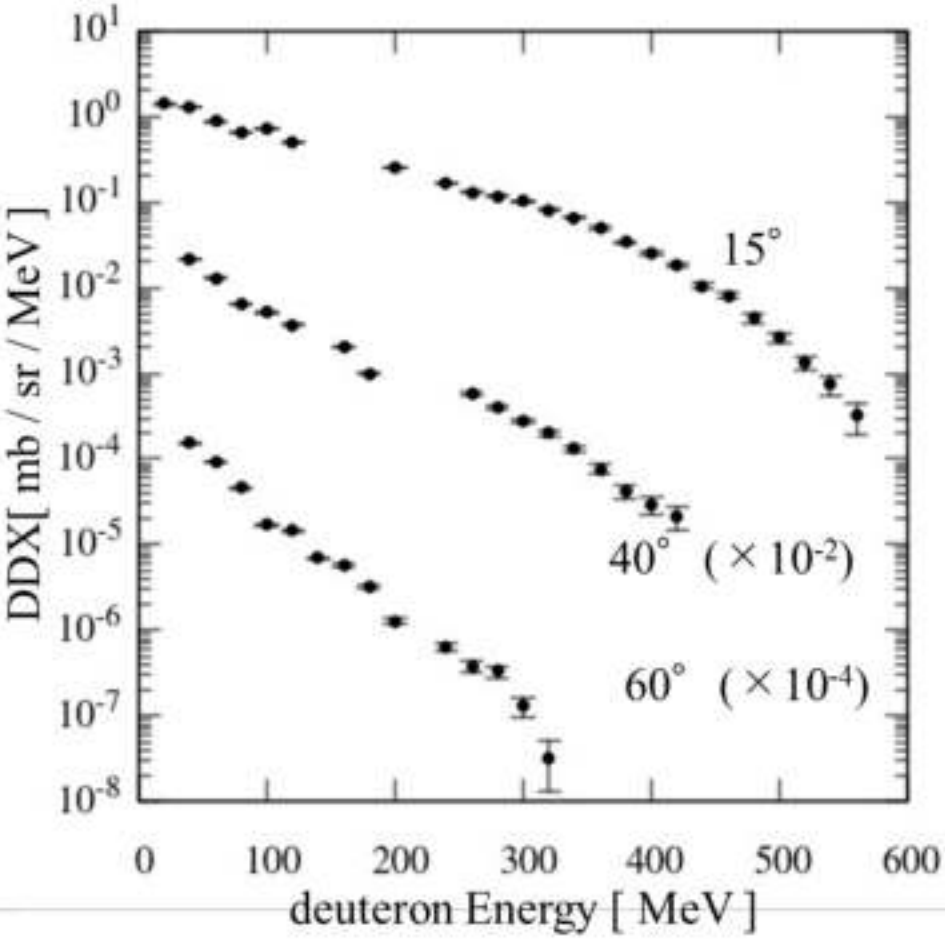
- **G.Montarou et al.**
  入射エネルギー 200 – 800 MeV/u、標的核 C~Pb、　検出粒子 p,d

- **Our group** New
  入射エネルギー 230 MeV/u、 標的核 Al、検出粒子 p,d,t,^{3}He,α

230MeV/u α粒子入射,標的核AlのDDX

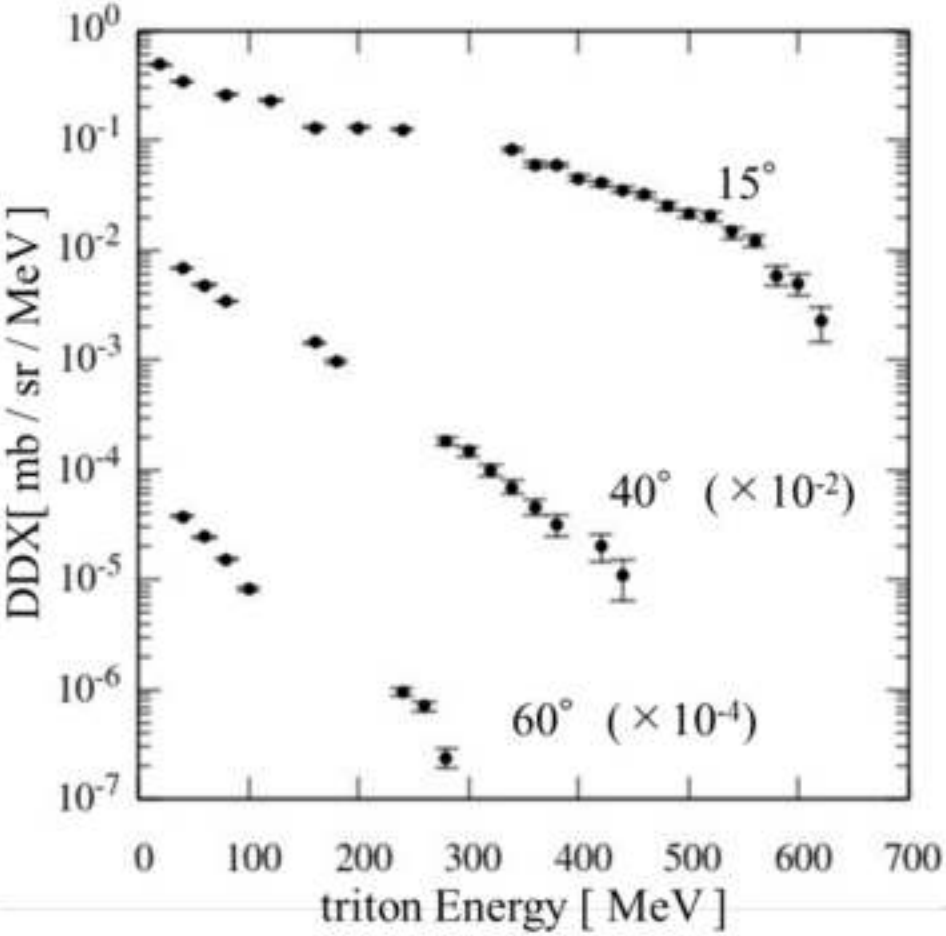


陽子

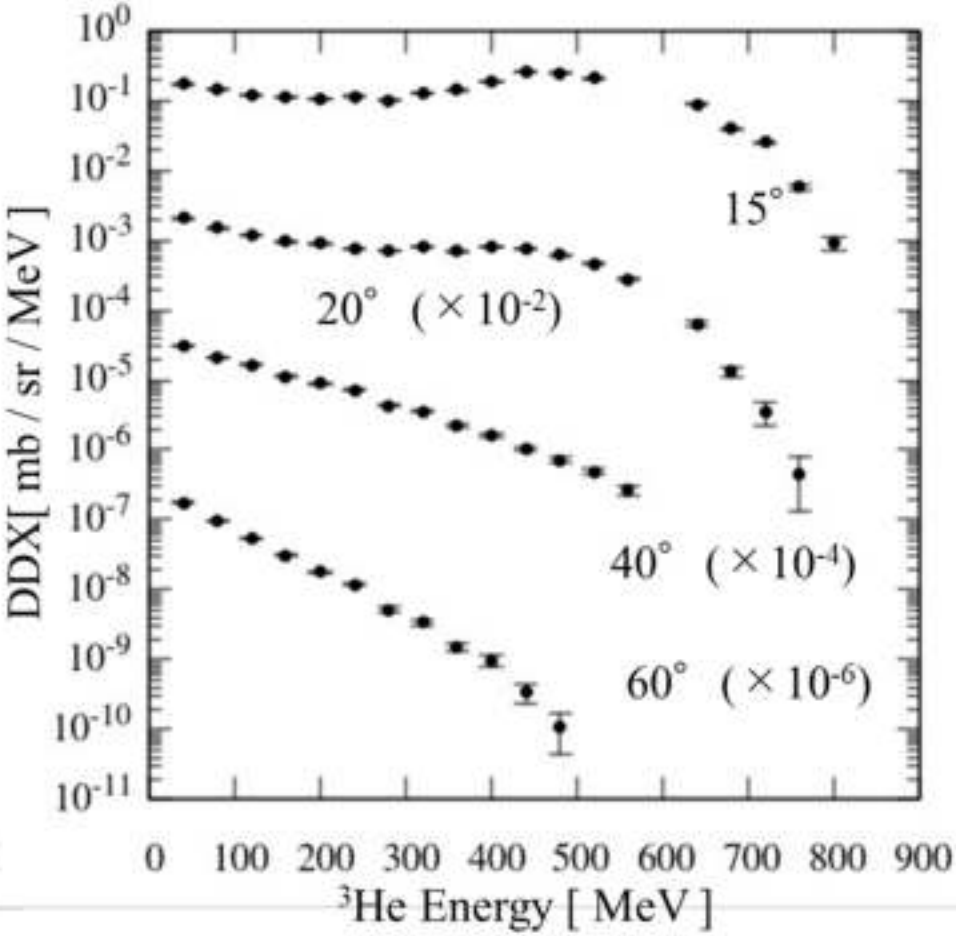


重陽子

230MeV/u α粒子入射,標的核AlのDDX

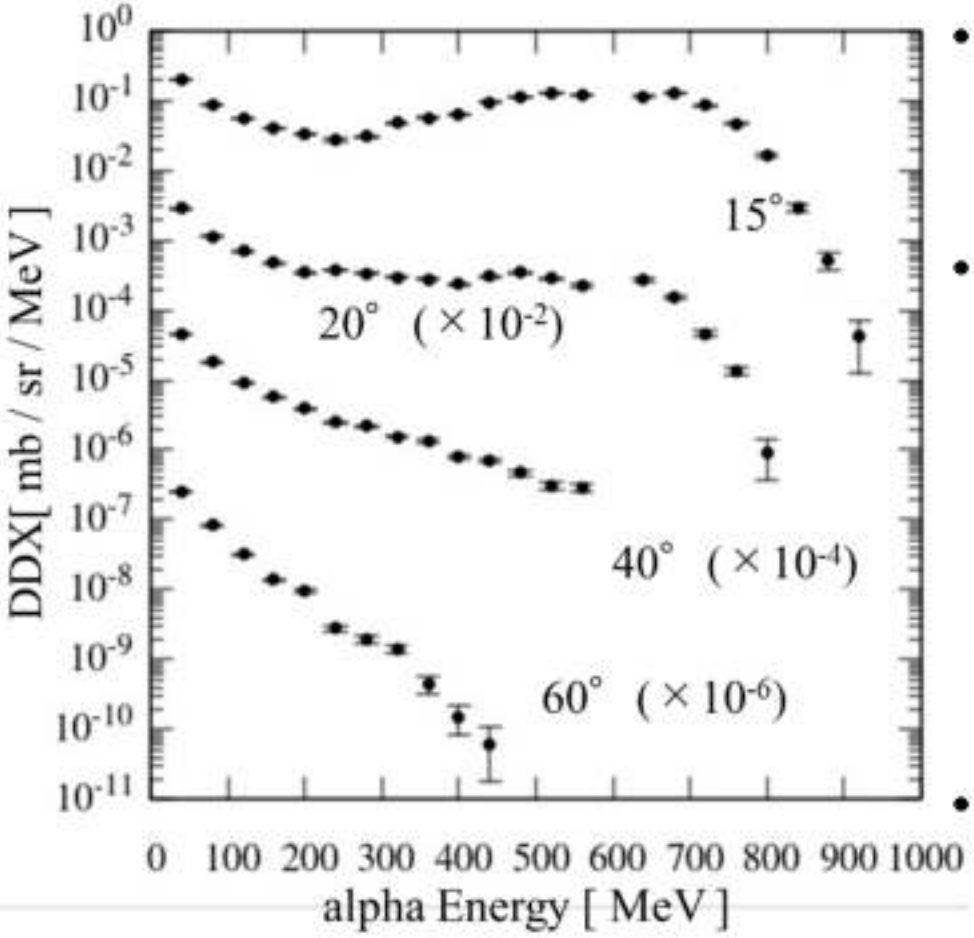


三重陽子



^{3}He

230MeV/u α粒子入射,標的核AlのDDX



alpha

- **p、d、tのDDXはエネルギーの増加とともに減少**
- **15°の^{3}He、αのDDXは幅広いピークが存在**
  ーピーク位置はα-Nの一回弾性散乱後のエネルギー
  ↓
  p,d,tと^{3}He,αで異なる反応機構
- **15°の三重陽子と^{3}Heの収量比は1:2**
  ↓
  35 MeV/u α粒子入射反応と同様

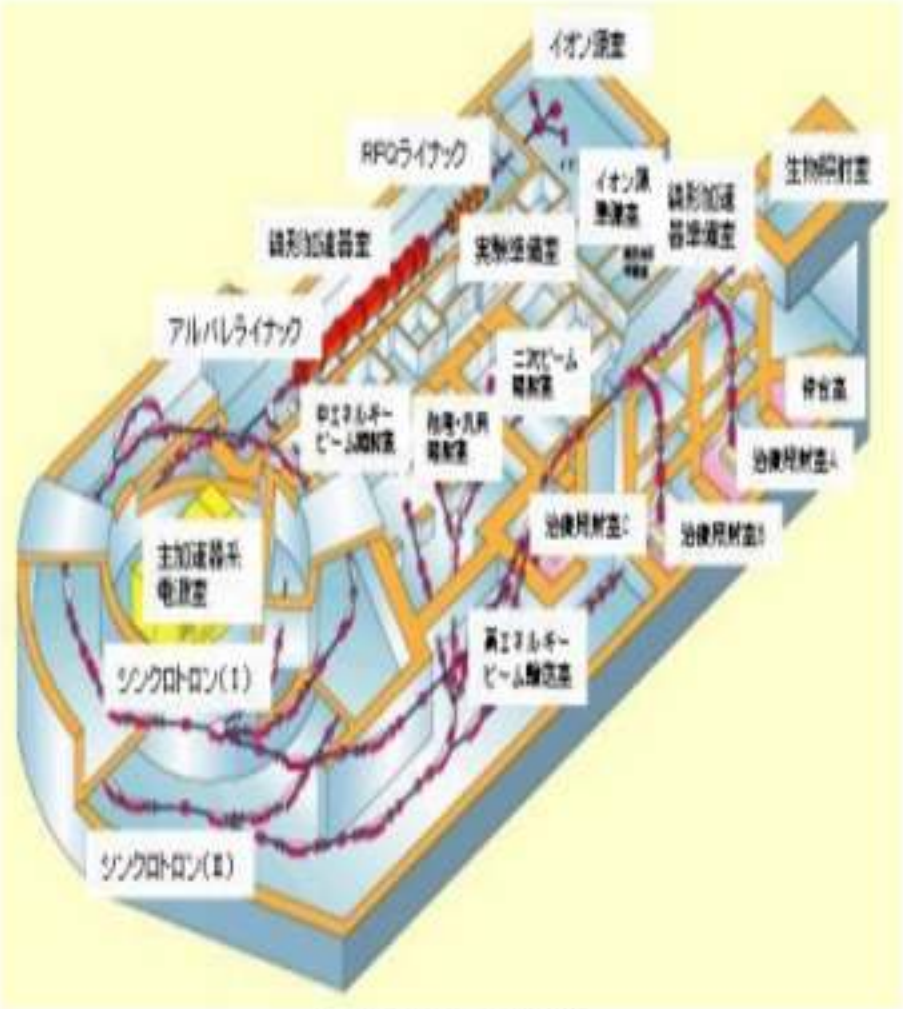
実験

実験場所
量子科学技術研究開発機構
HIMAC棟

入射粒子
230 MeV/u　α粒子

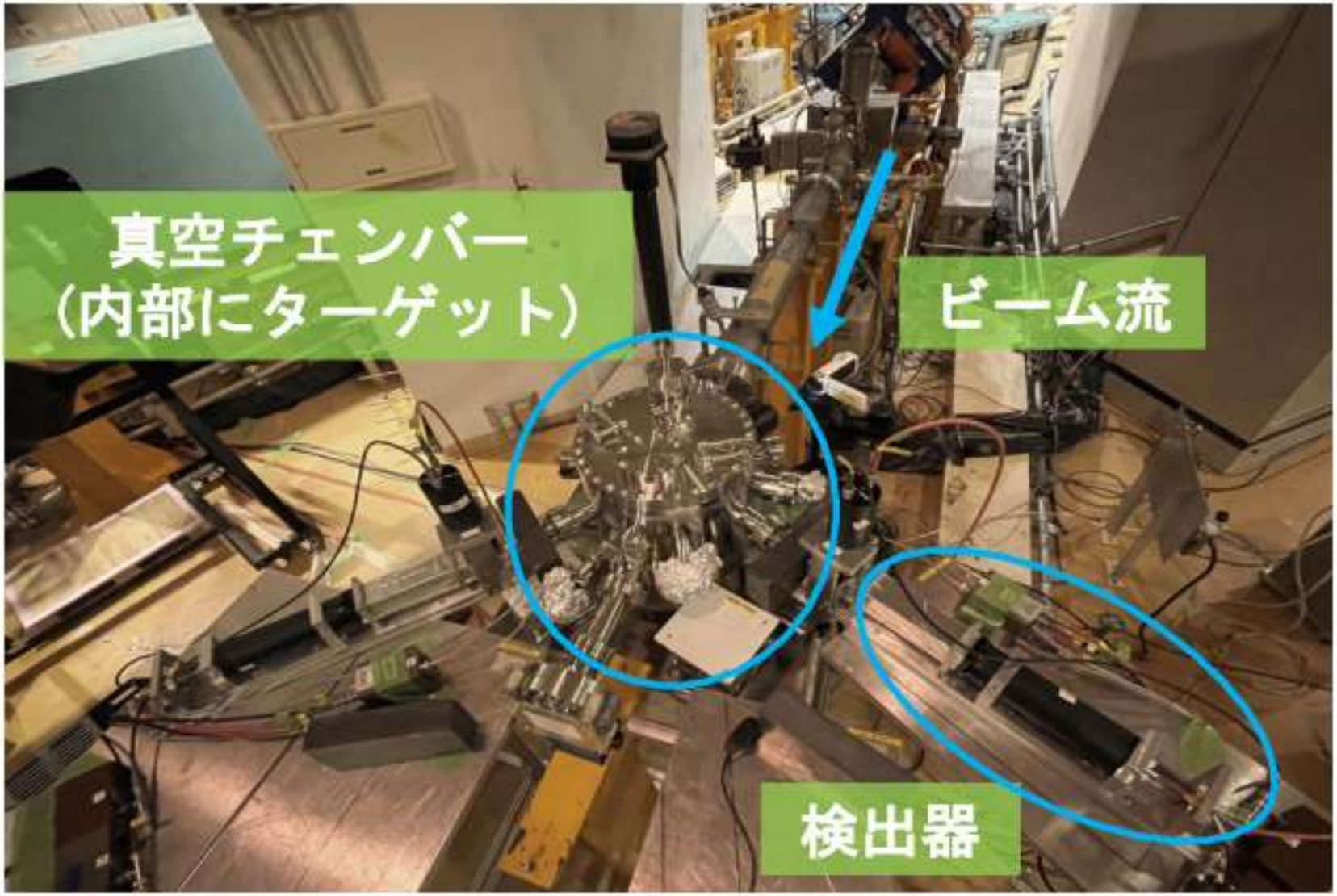
ターゲット
C(20mm×25mm×0.1mm)
Co(20 mm×25 mm×0.05 mm)

検出角度
p,d,t - 15°,40°,60°
^{3}He,α - 15°, 20°, 40°, 60°



HIMAC棟

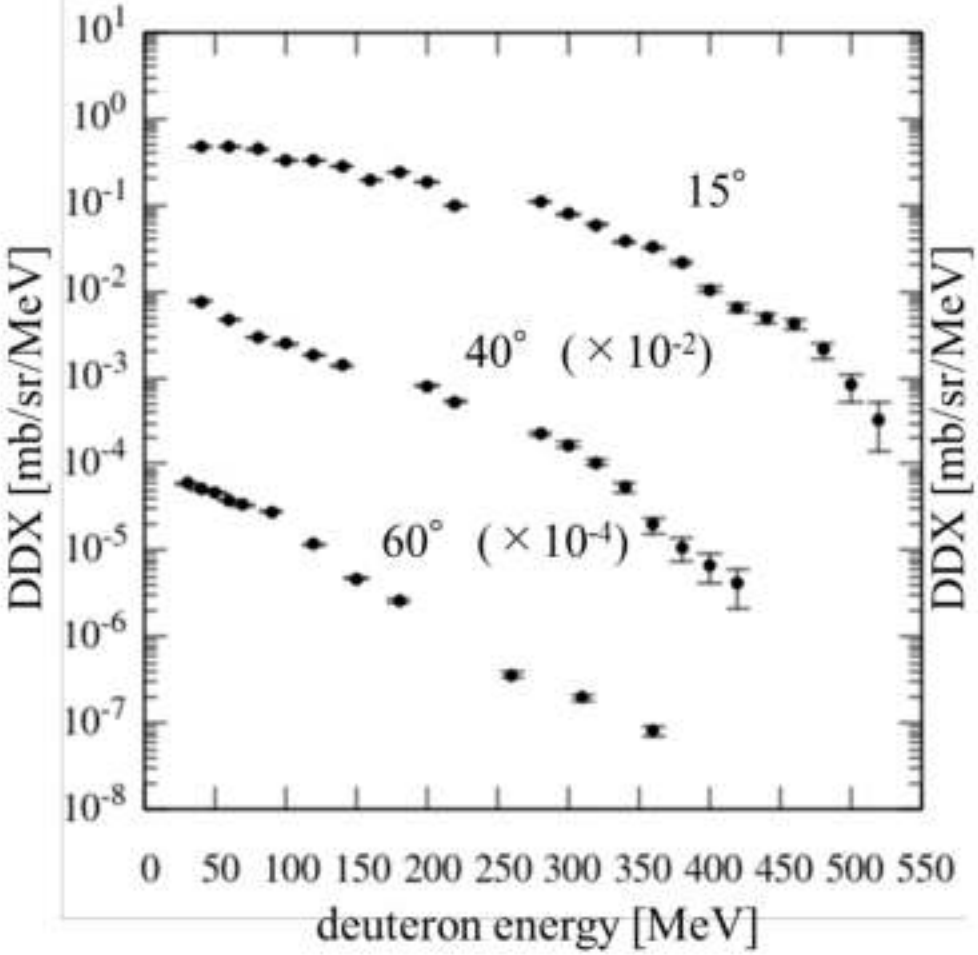
実験体系



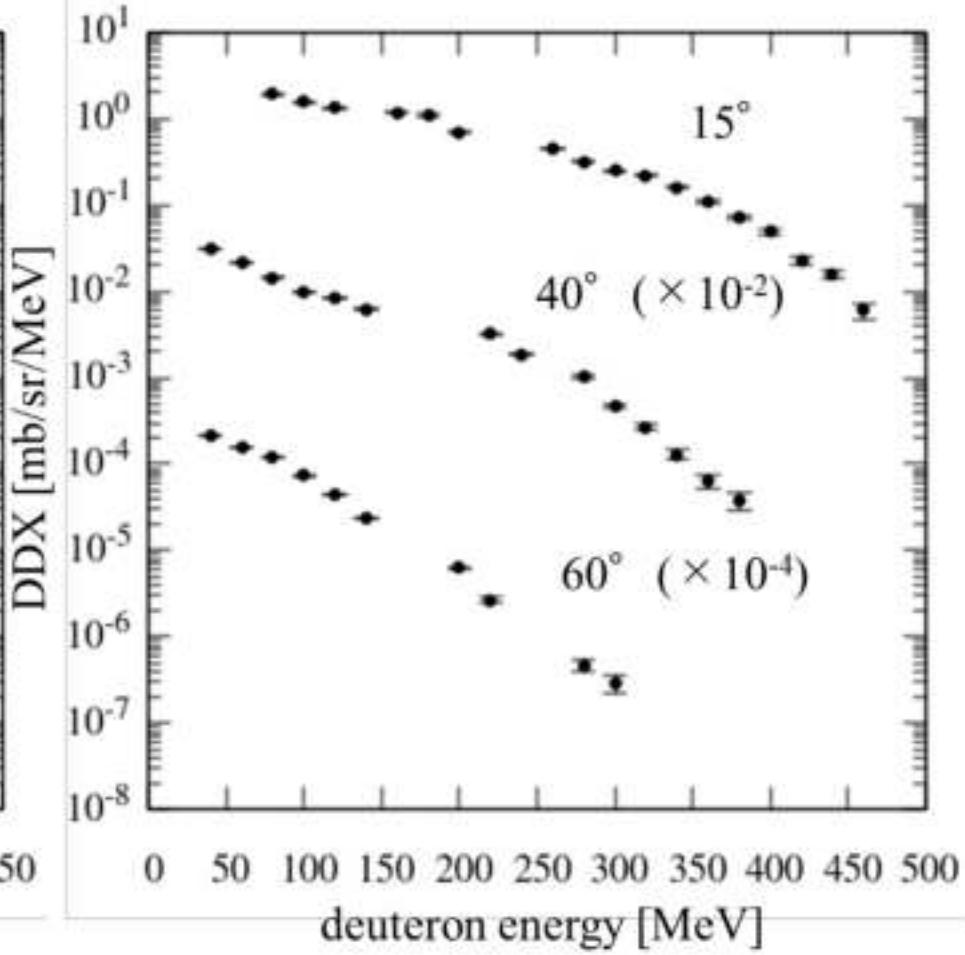
検出器

SSD1(0.1mm)、SSD2(0.3mm)、GSOシンチレータ(43mm)、PWOシンチレータ(200mm)

結果 重陽子

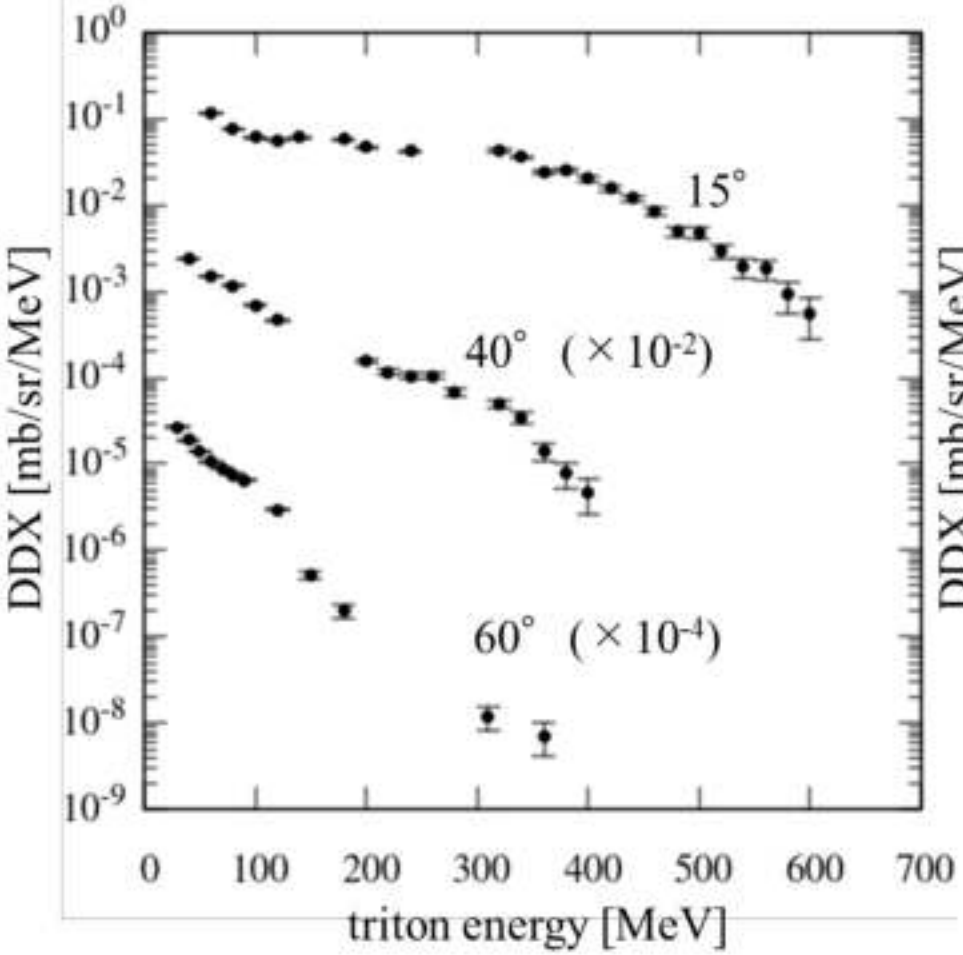


標的核C

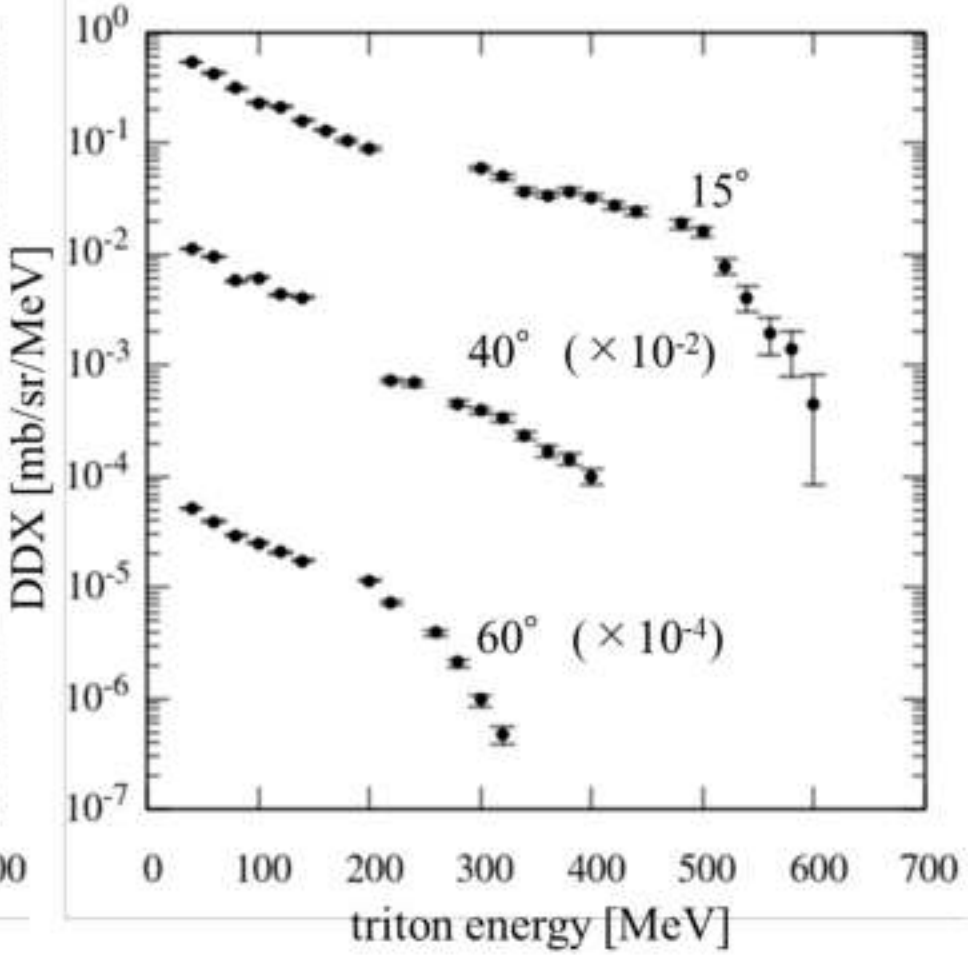


標的核Co

結果 三重陽子

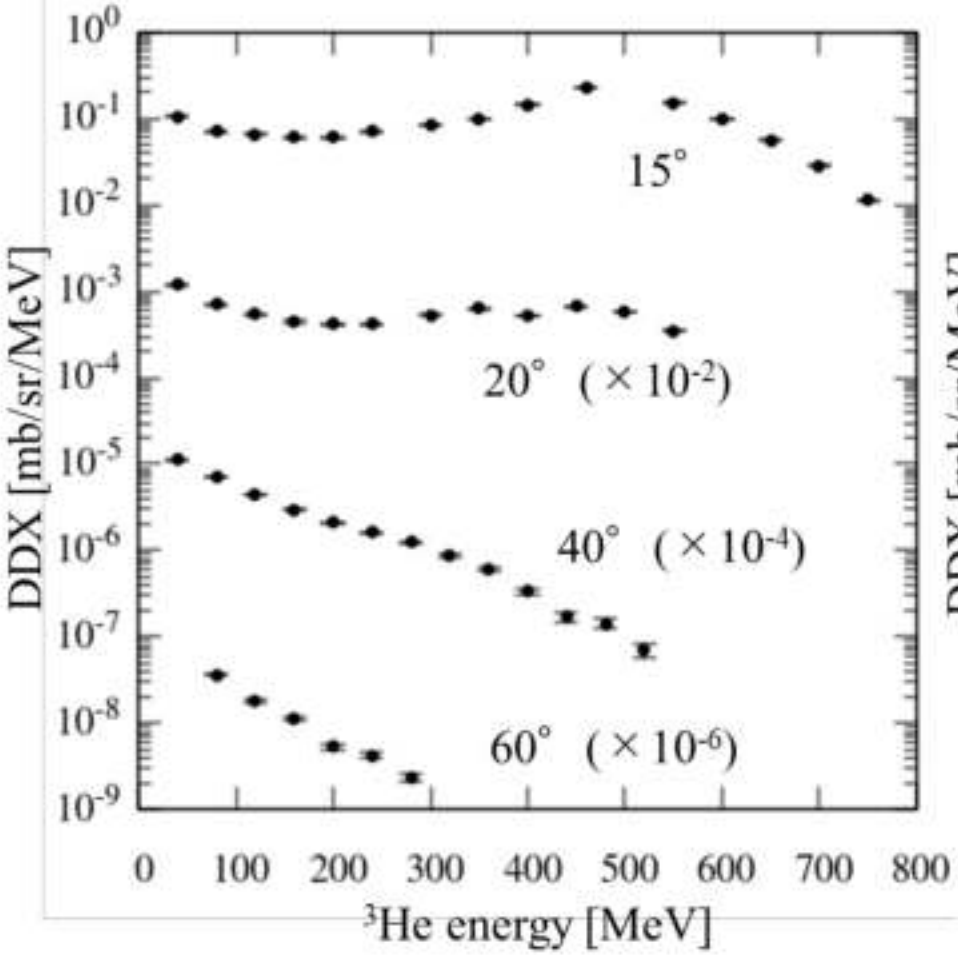


標的核C

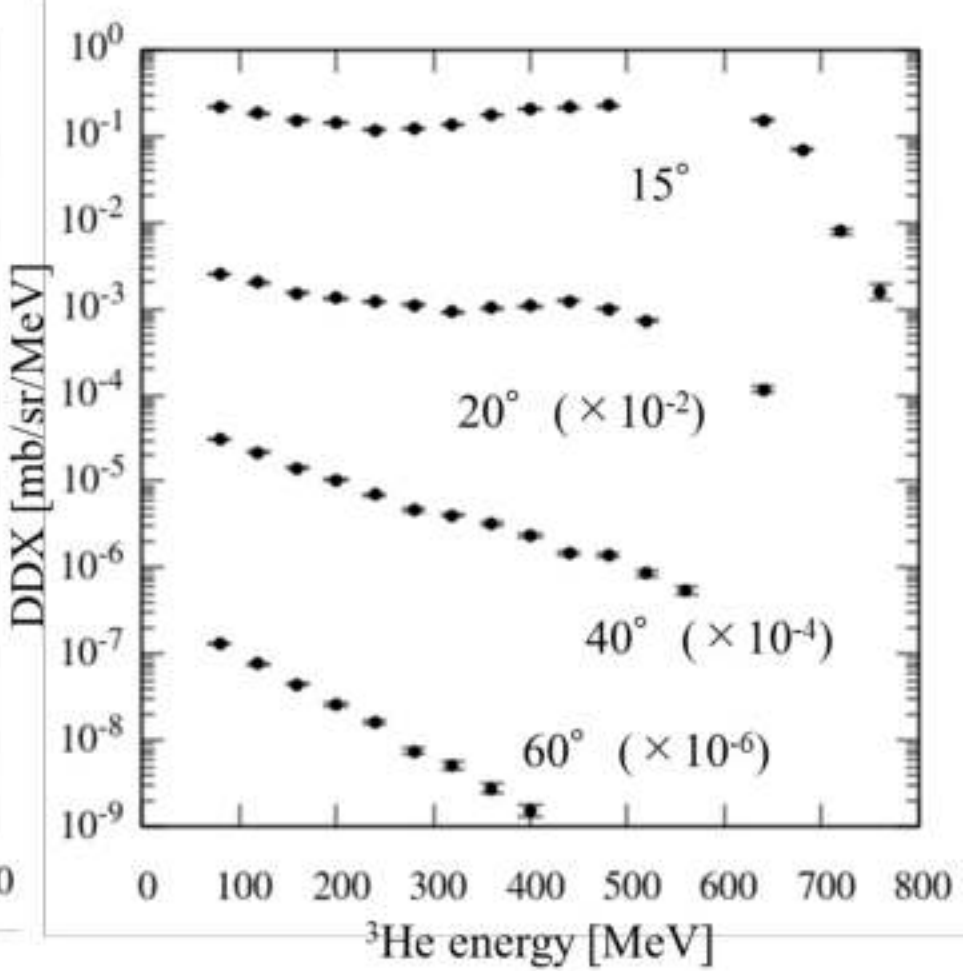


標的核Co

結果 ^{3}He



標的核C



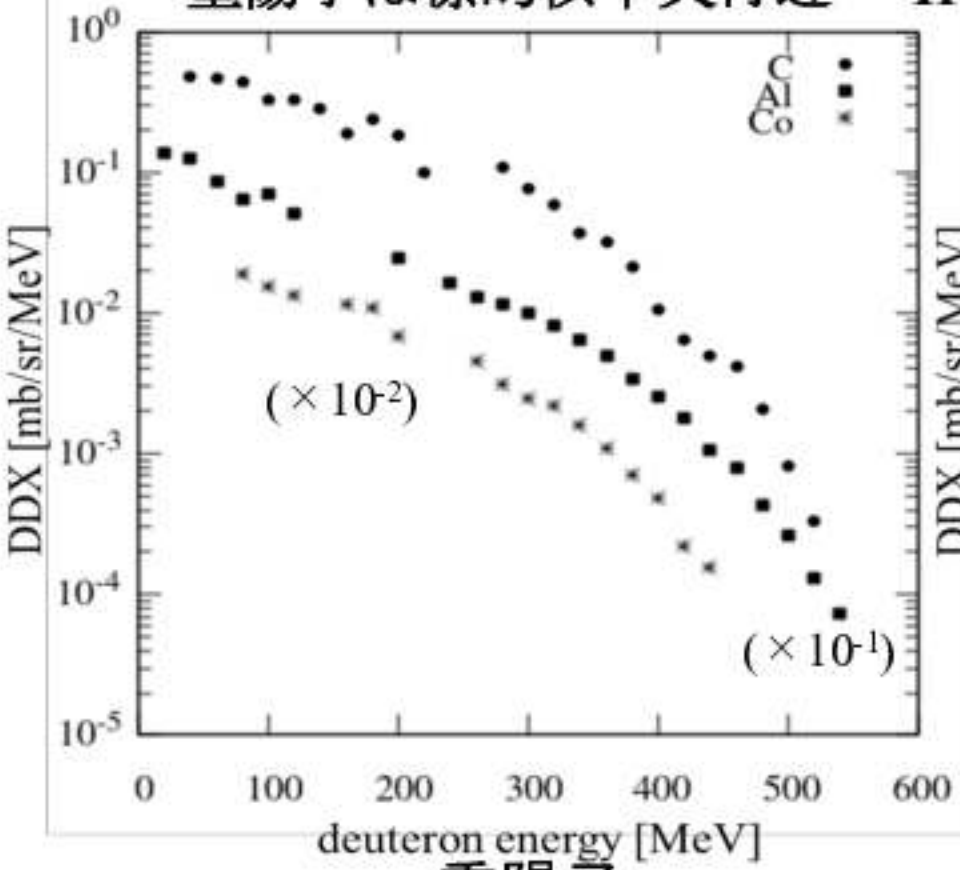
標的核Co

標的核による違い 15°

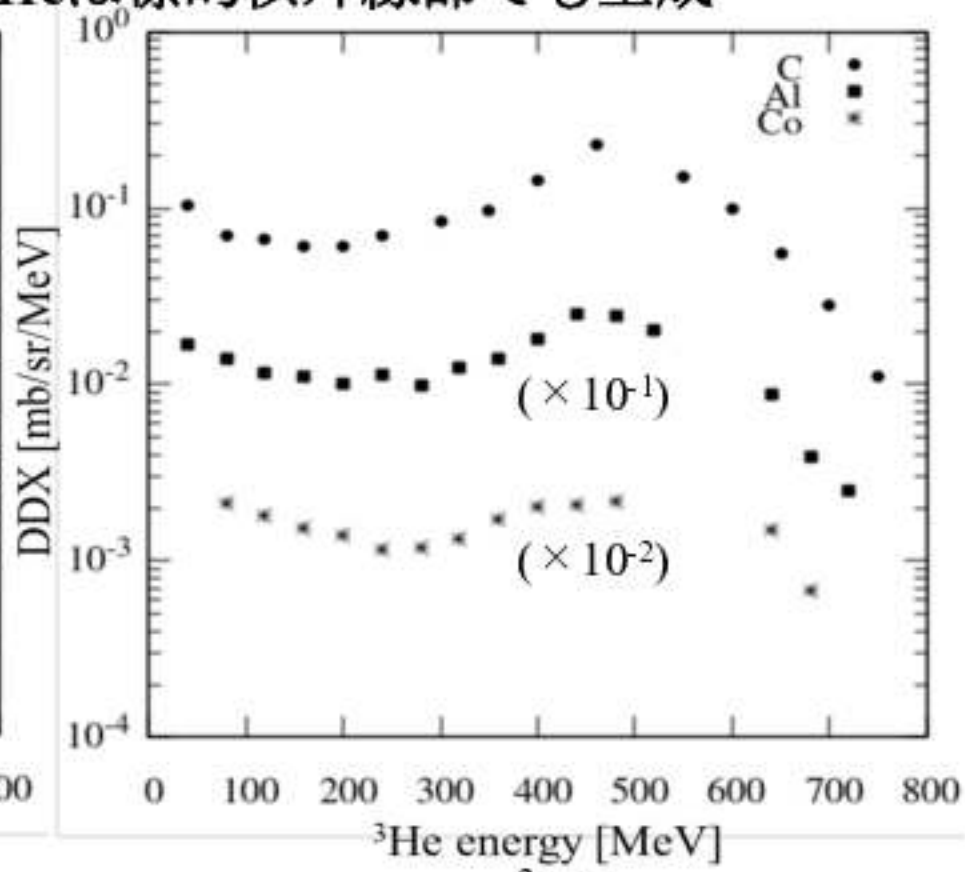
標的核が変化してもDDXの形状には変化なし

入射α粒子は入射直後にbreak up

重陽子は標的核中央付近　^{3}Heは標的核外縁部でも生成



重陽子



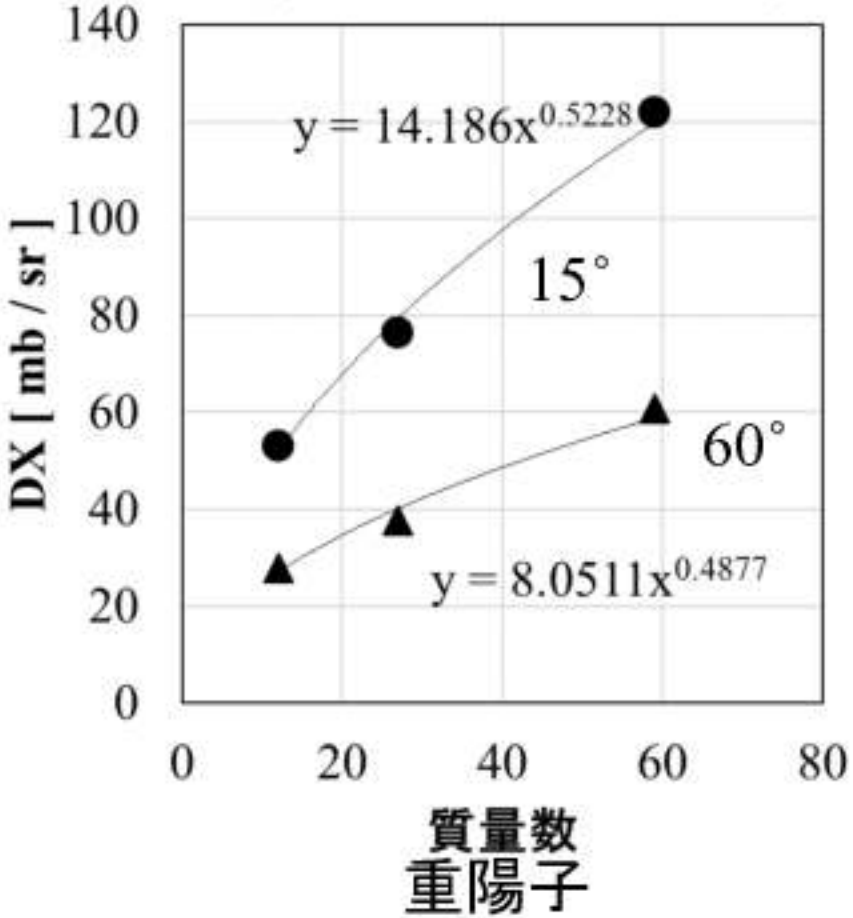
^{3}He

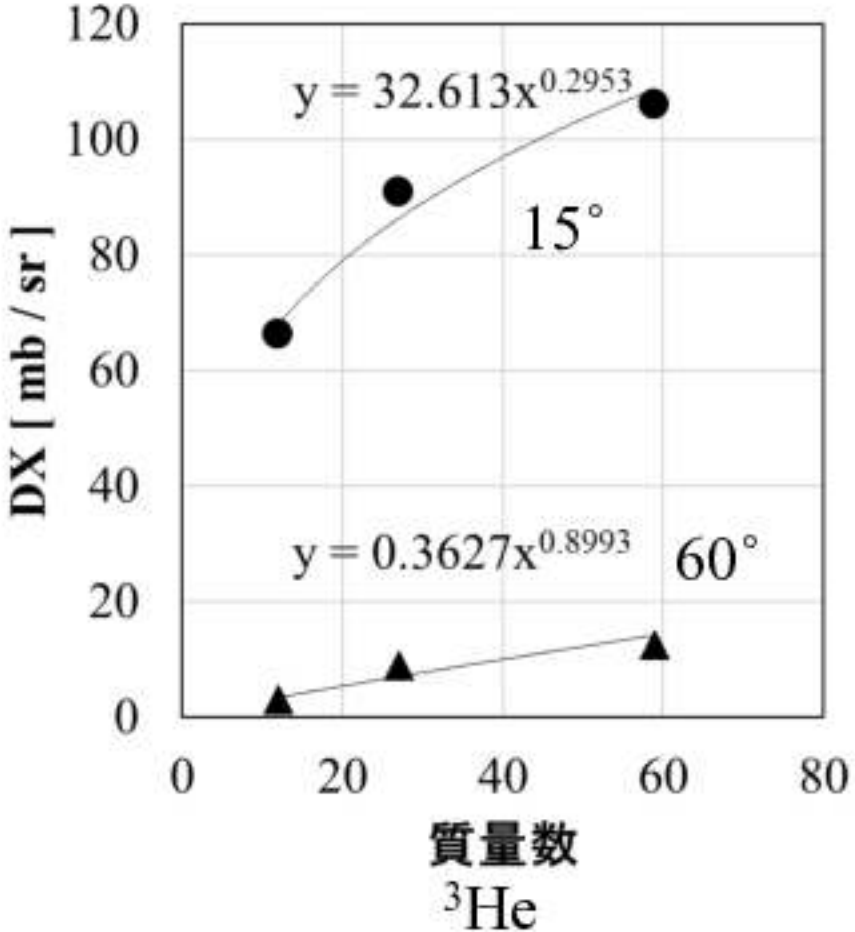
結果・考察

DXの質量数依存性

(蒸発過程の寄与を避けるため) 80 MeV以上のDDXをエネルギー積分

質量数の増加とともにDXも増加

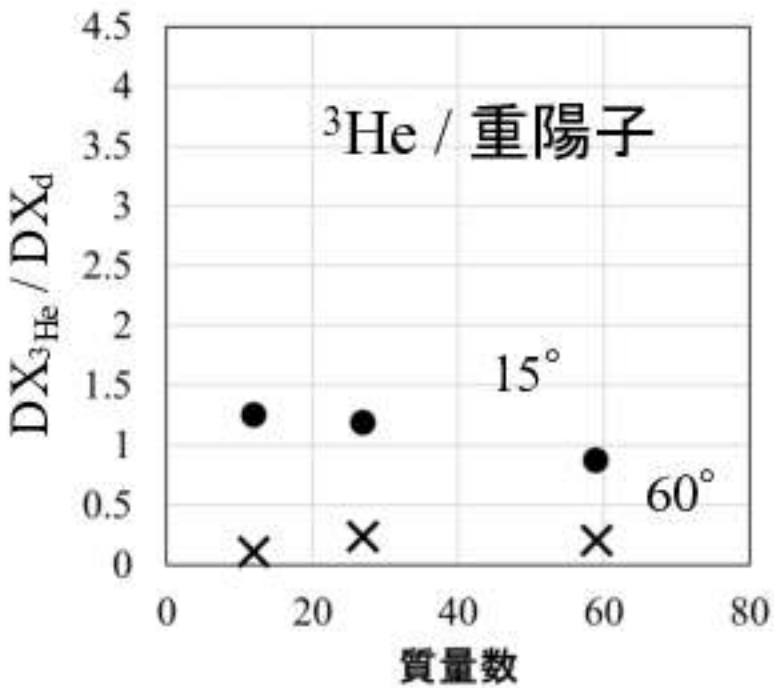


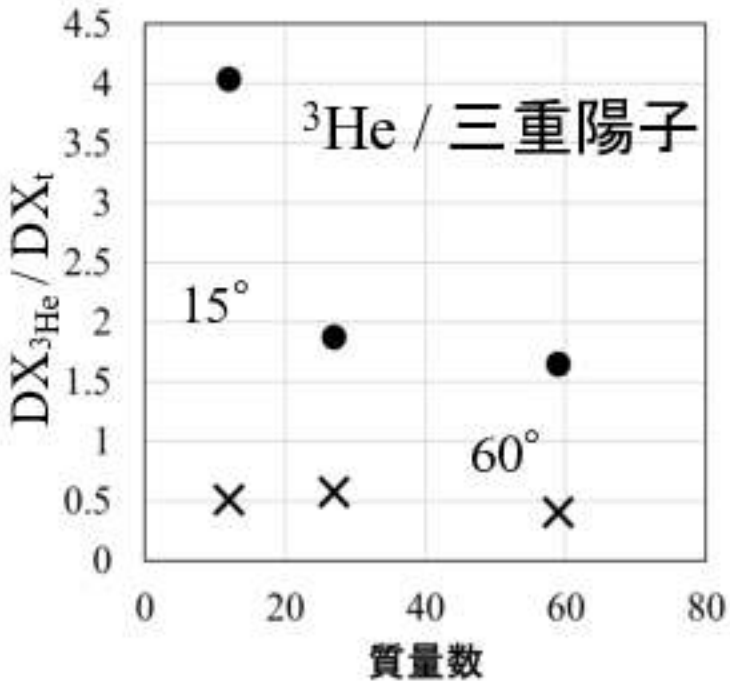


結果・考察

検出角度15°と60°における重陽子、三重陽子と^{3}HeのDXの比

15°では質量数の増加とともに収量比が減少
→ 標的核外縁部の面積の割合が相対的に減少
60°では質量数に関わらず一定
→ 標的核中央部入射で生成される割合は一定





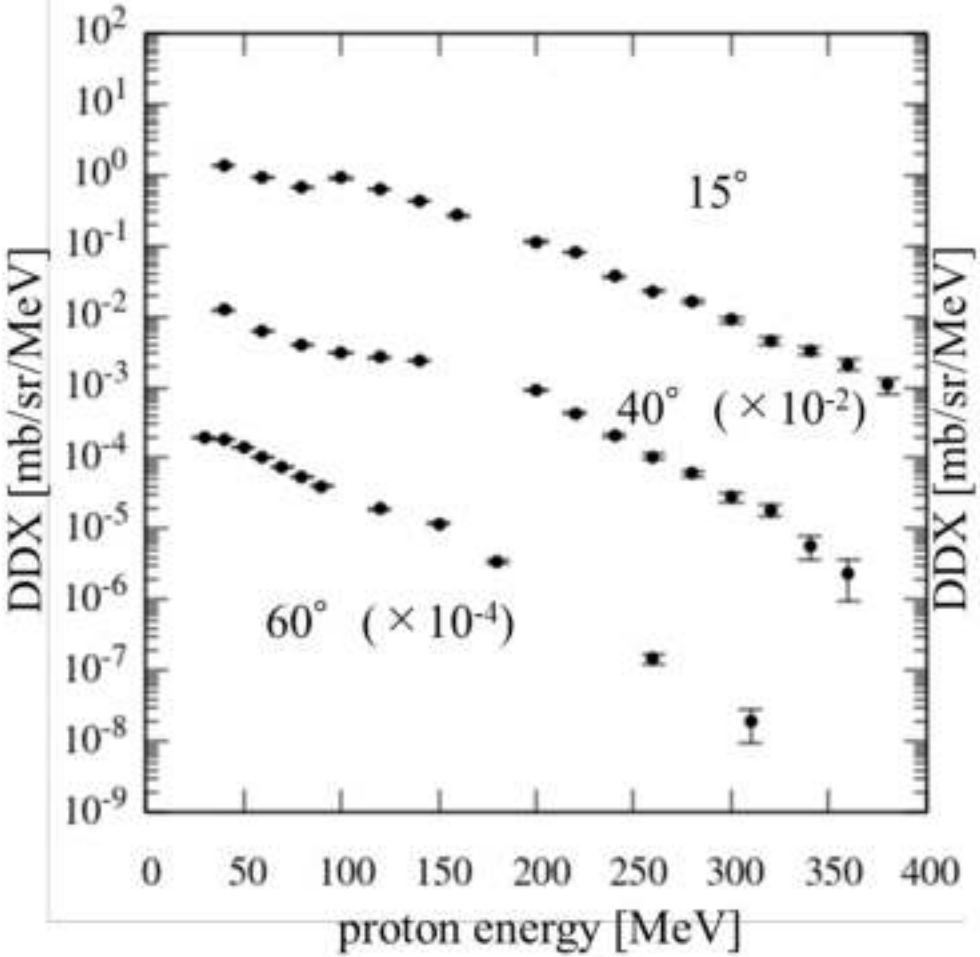
まとめ

- 標的核CとCoのDDXを実験により取得
- DDXの形状は標的核の種類とは関係ない
- 標的核依存性は放出粒子によって異なる
  →d,tと^{3}He,αでは異なる傾向であることが改めて確認された
- 重陽子、三重陽子と^{3}Heの収量比は15°では質量数依存性があるが60°では存在しない

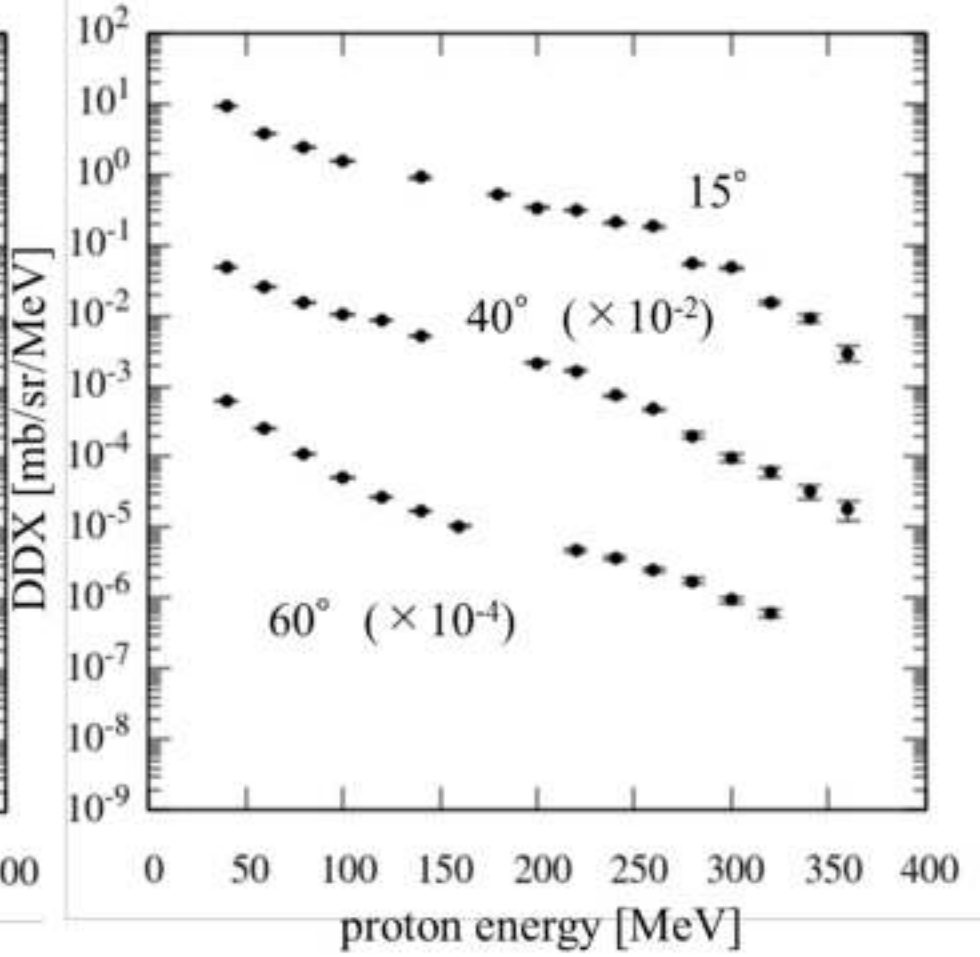
今後の課題

標的核の種類が少ないため、さらに重い標的核で実験を行う
今回得られた知見を計算モデルに反映する

結果 陽子

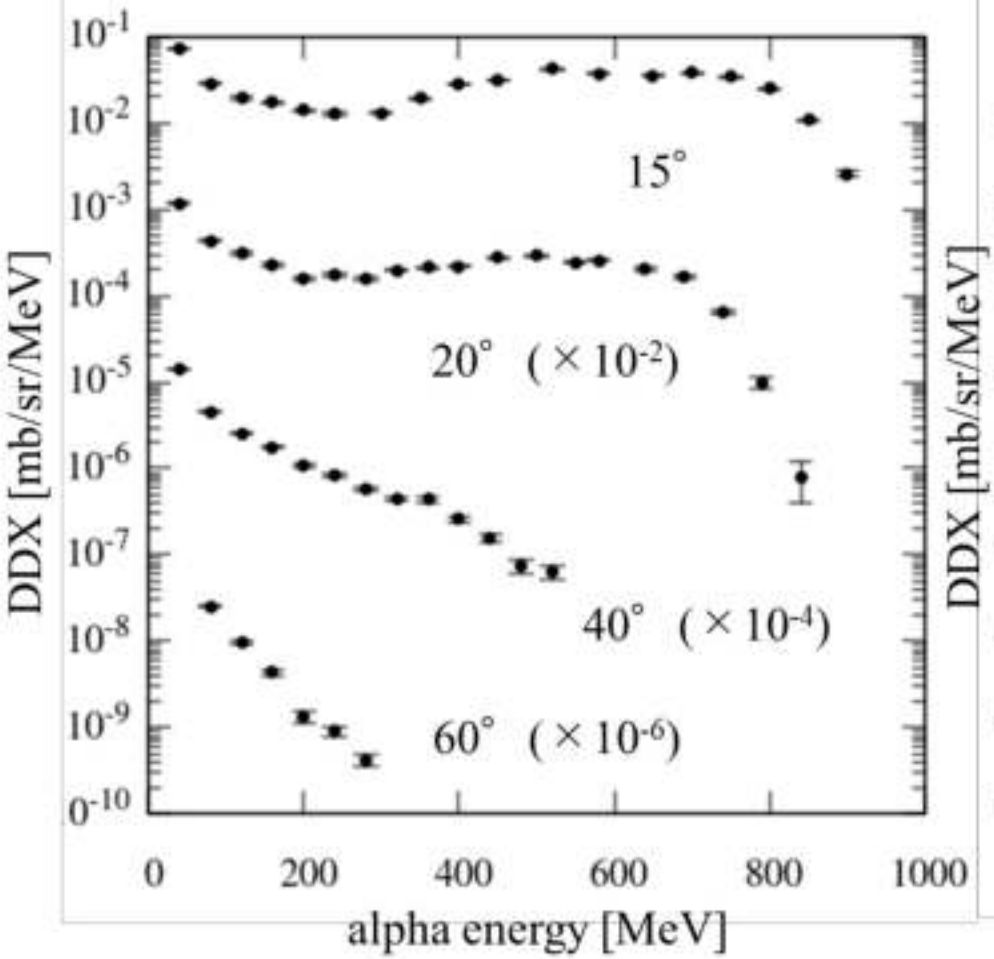


標的核C

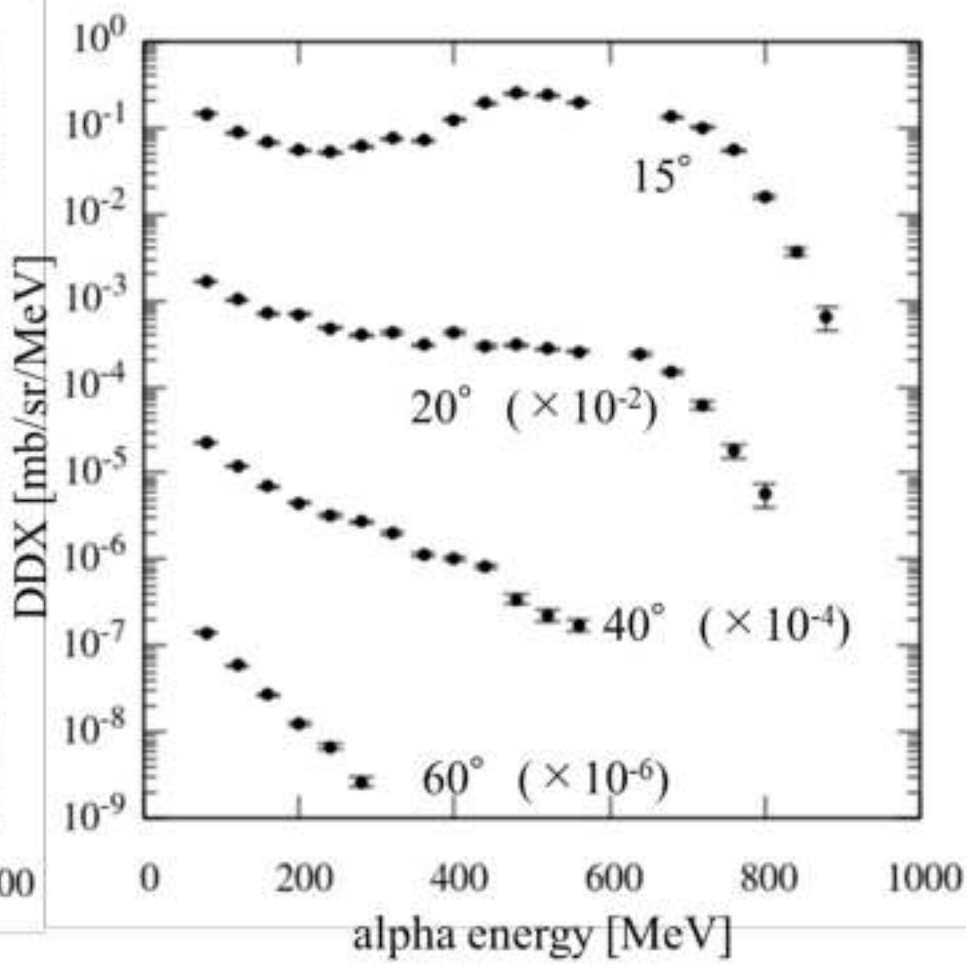


標的核Co

結果 alpha

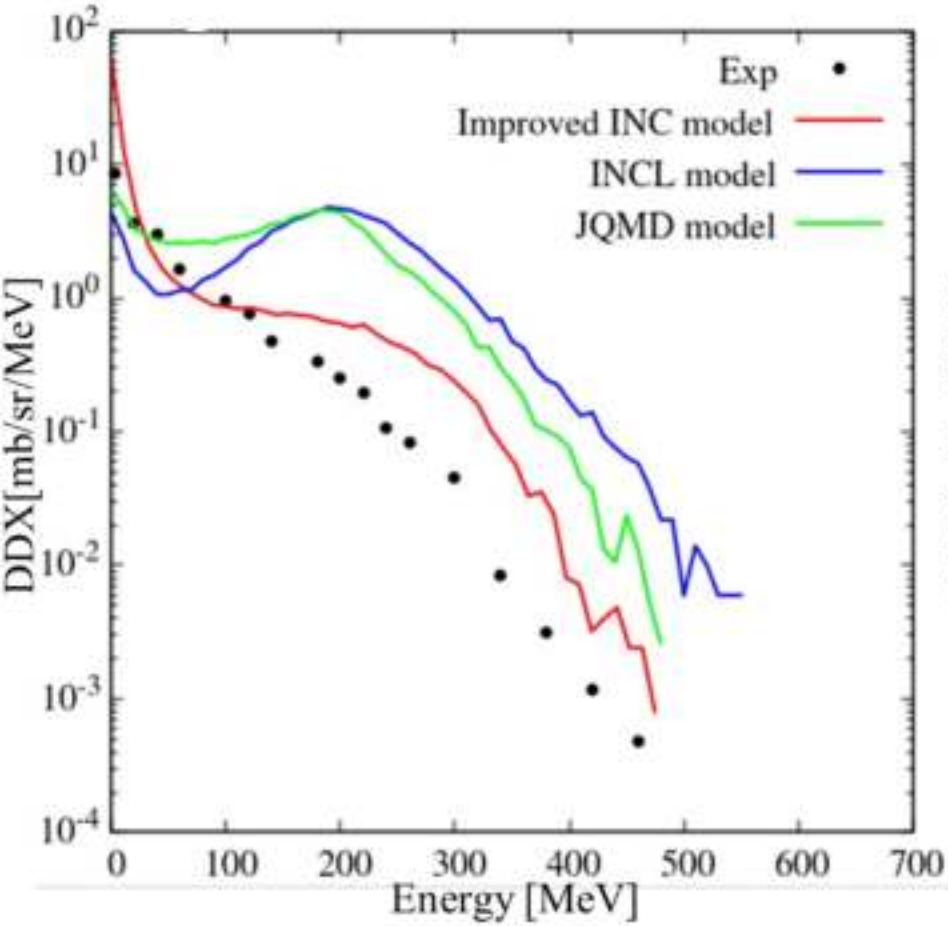


標的核C

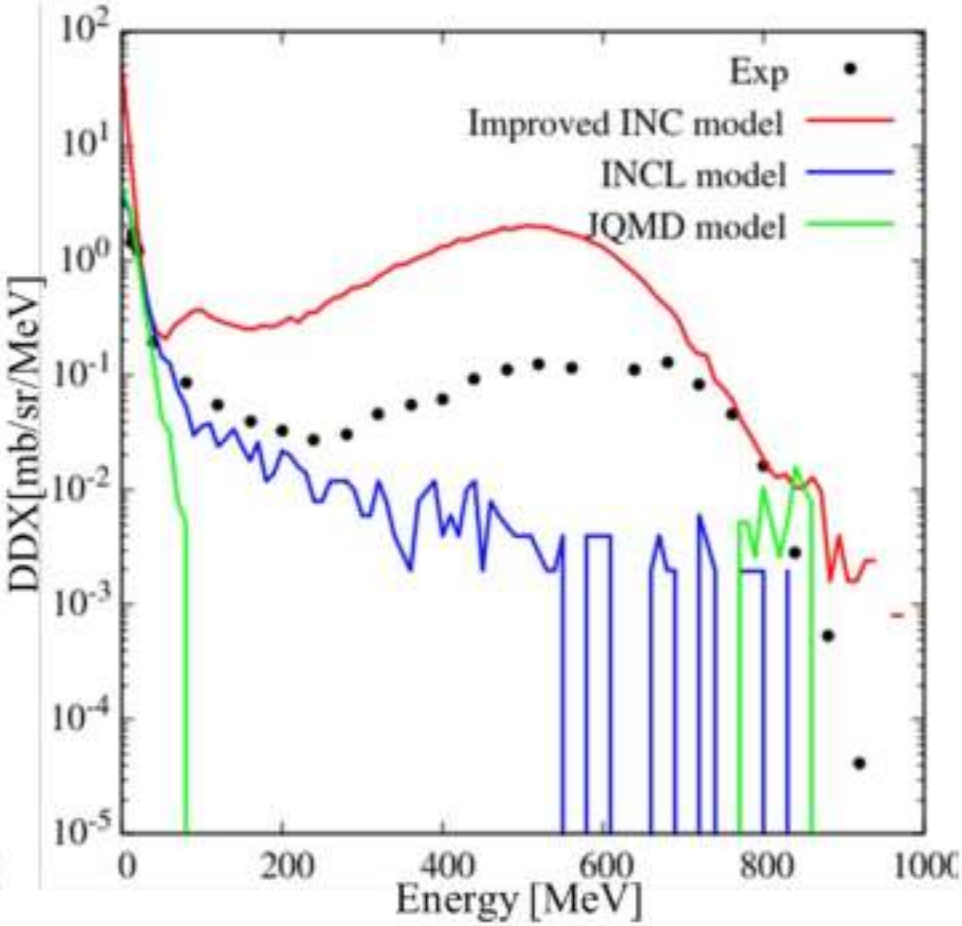


標的核Co

DDX of Al(α,x) with results of calculation



重陽子

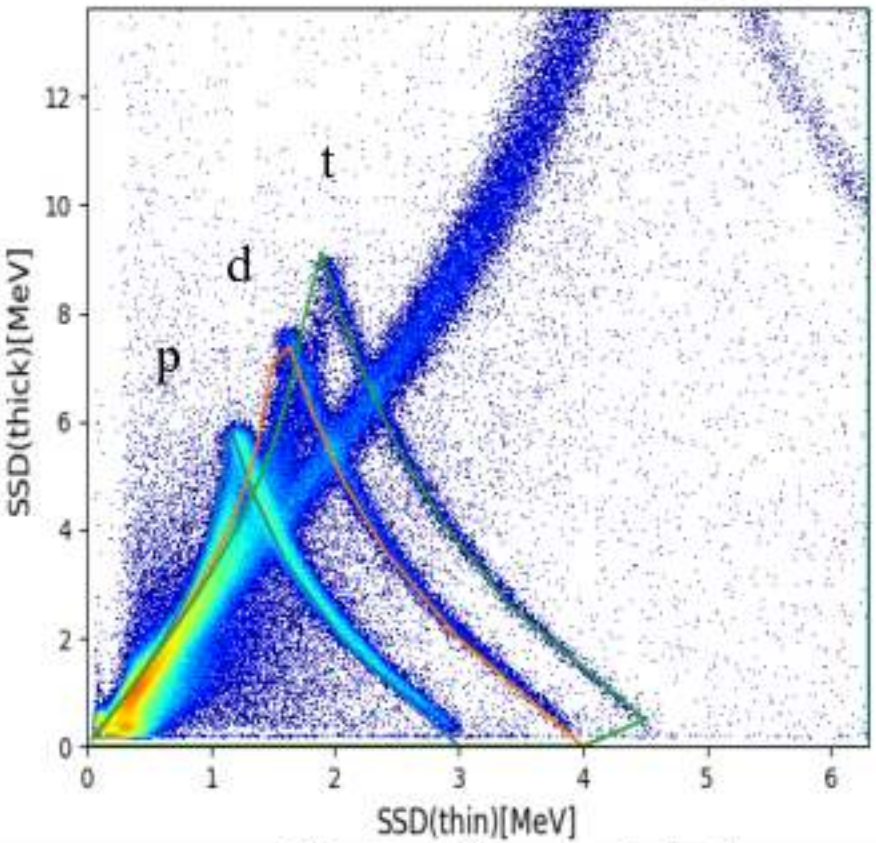


alpha

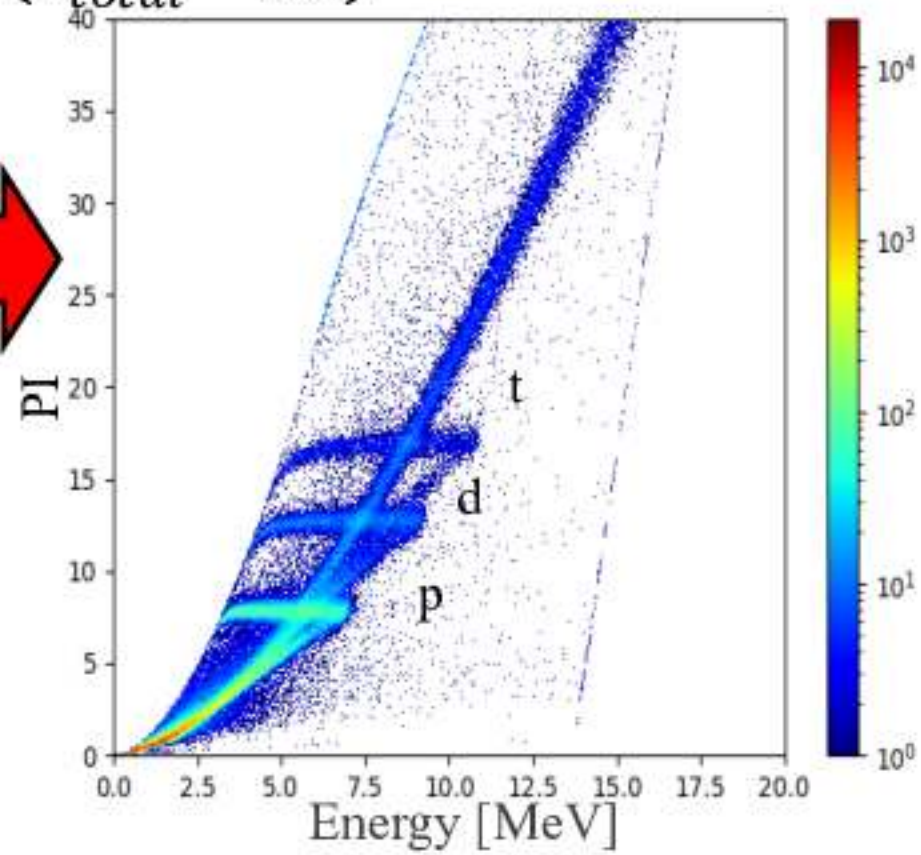
解析　ΔE-E測定法

PI変換

$$PI = E_{total}{}^{1.73} - (E_{total} - \Delta E)^{1.73}$$



二次元プロット図



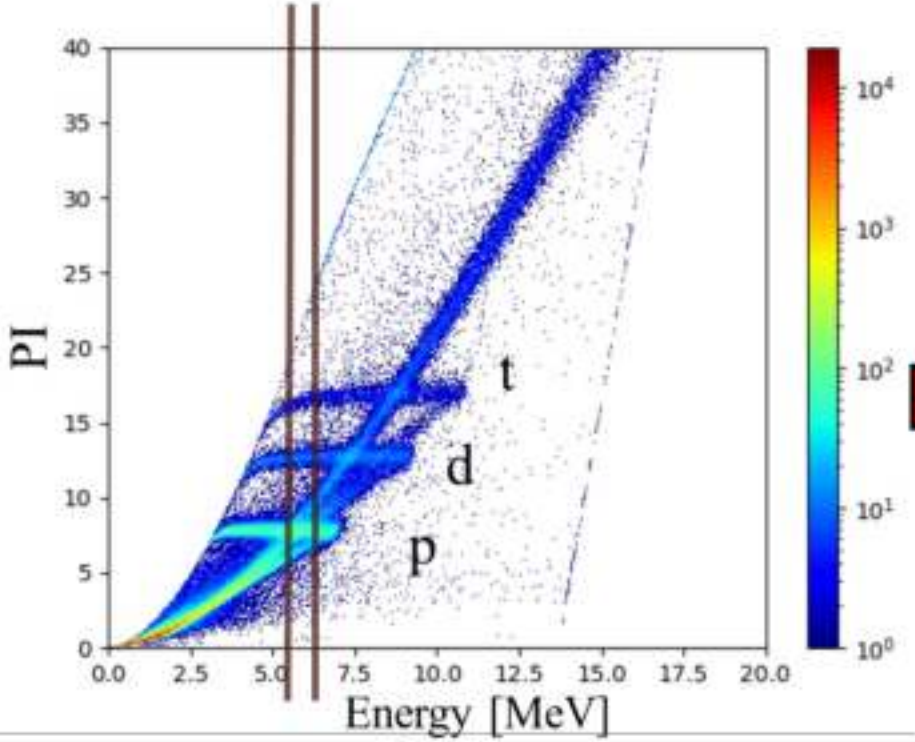
PI図

解析　収量計算

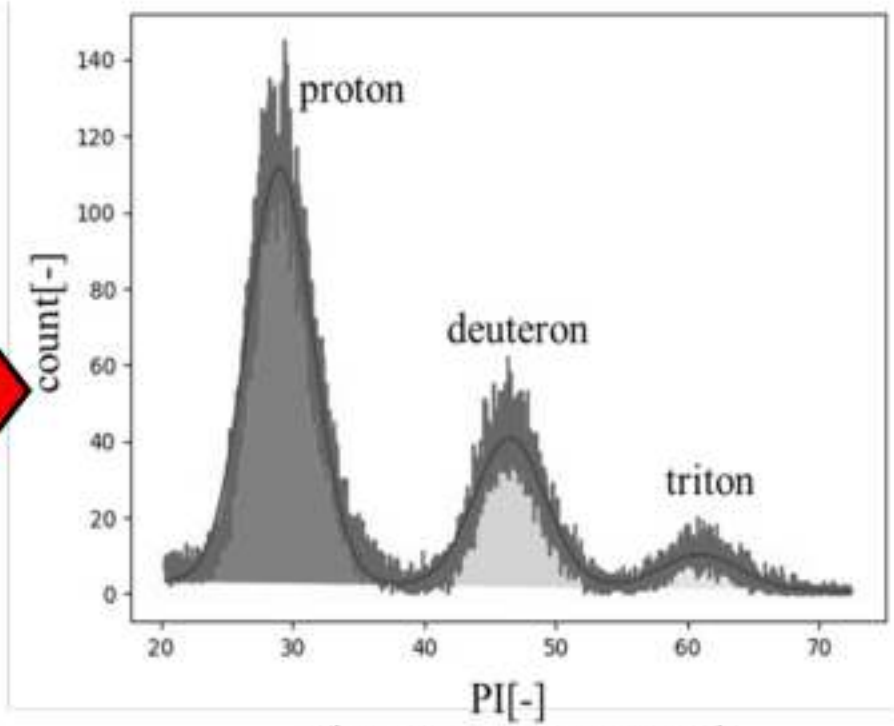
PI図を任意のエネルギー幅ΔEで抽出

↓

ピークをガウス関数でフィッティング

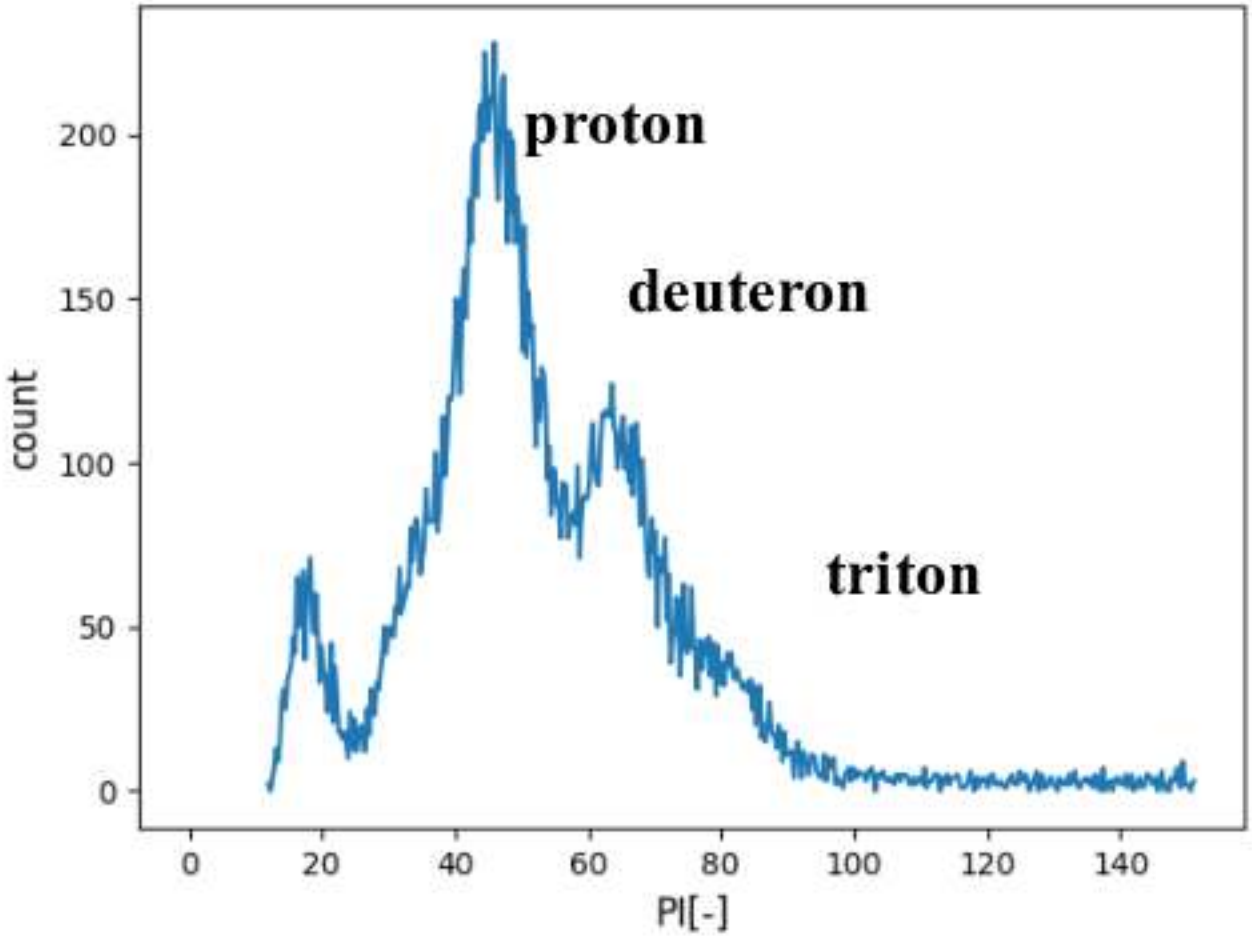


PI図



ガウスフィッチング

標的核C　検出角度40°
放出エネルギー 100 MeV



解析　DDXの算出

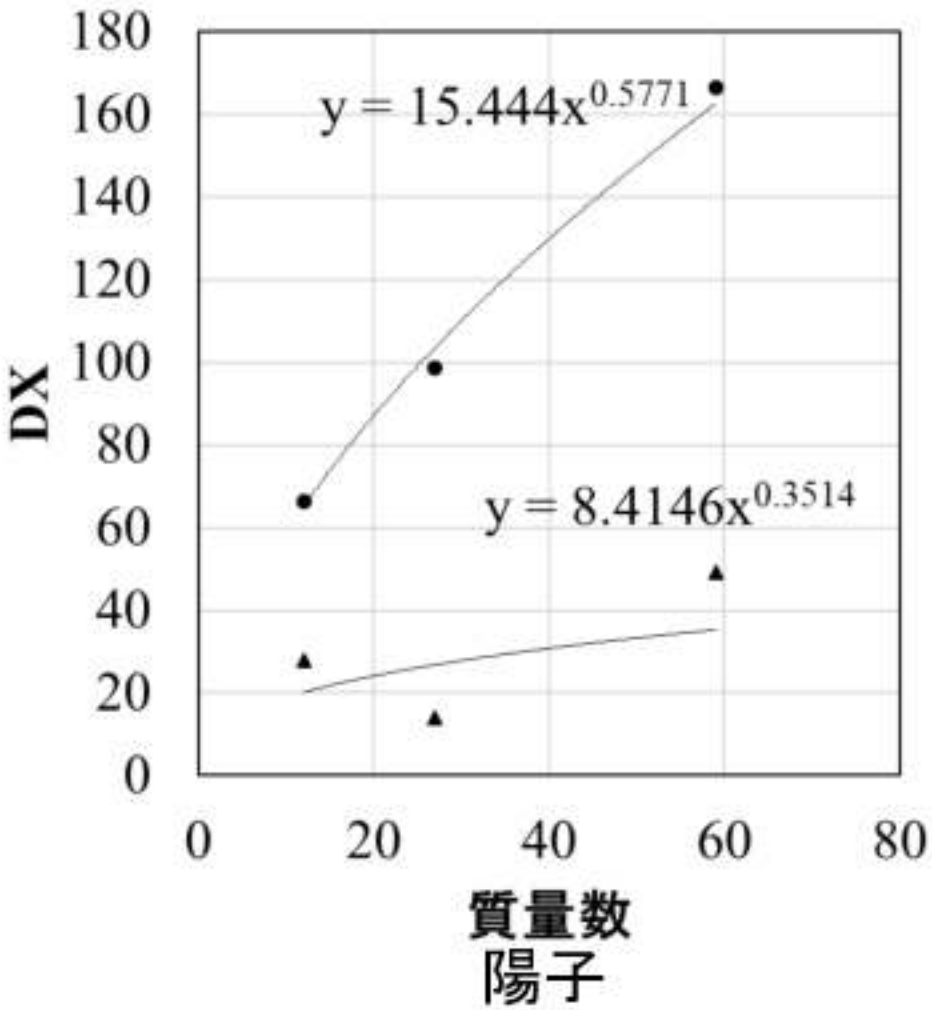
$$\mathrm{DDX} = \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{aY}{\Phi \varepsilon_D P d \Delta E \Delta\Omega}$$

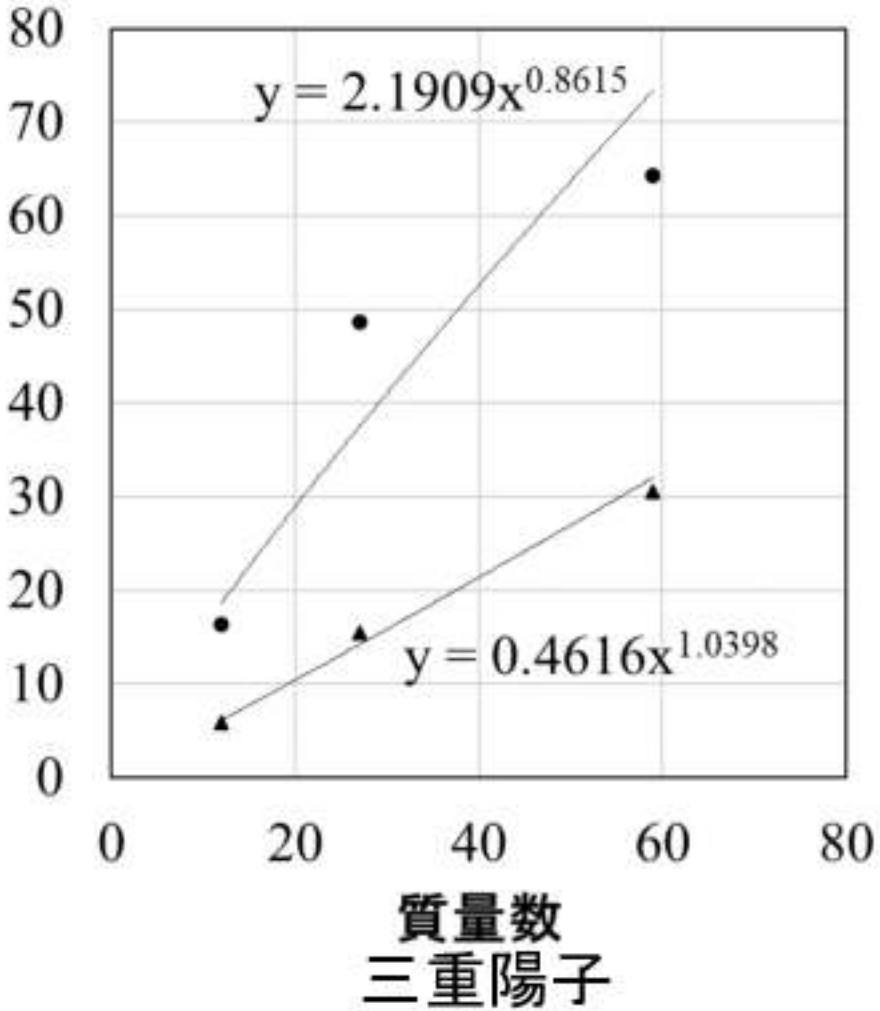
Y　：収量[count]
ε_D　：DAQ効率[-]
P　：ピーク効率[-]
d　：面密度[n/cm^2]
ΔE　：エネルギービン幅[MeV]
ΔΩ　：検出器立体角[sr]
a　：規格化定数[mb/cm^2]

DAQ効率・・・データ収集体系(DAQ)の収集効率

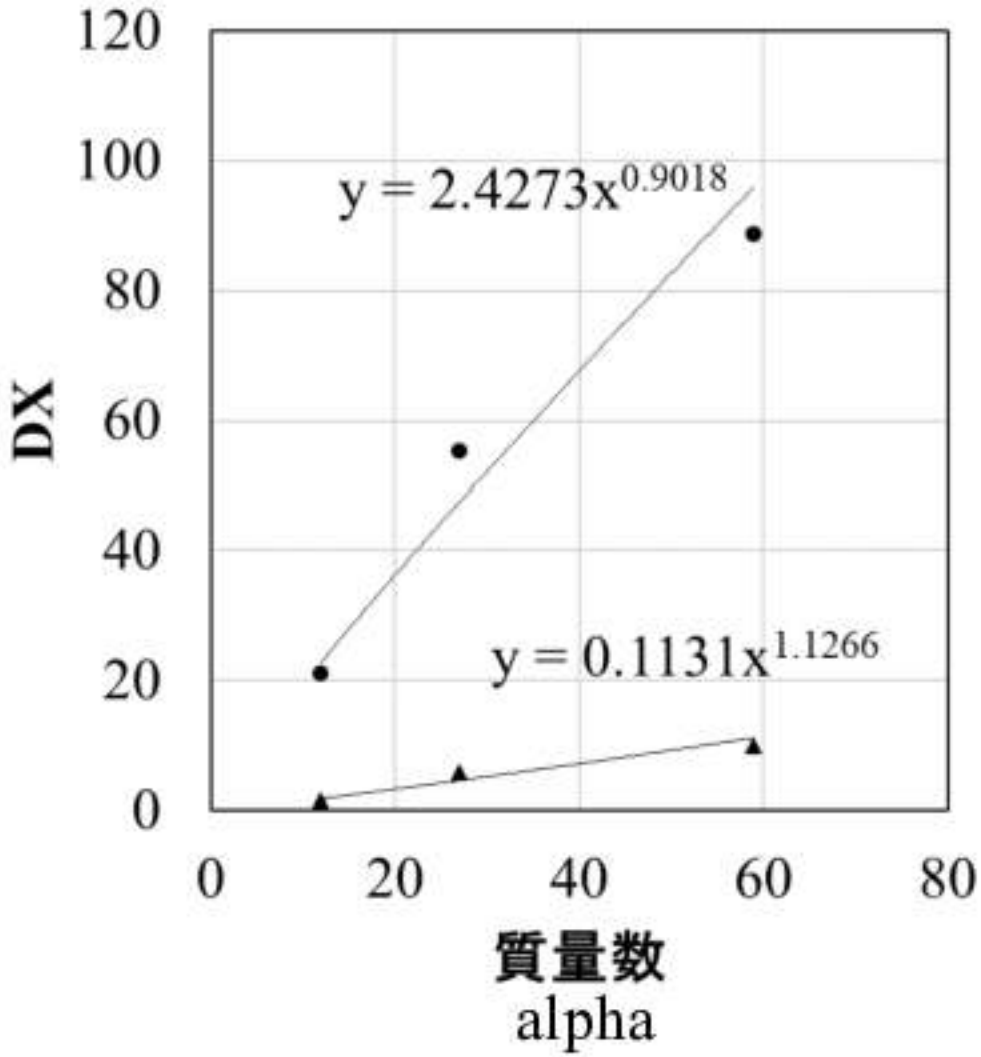
ピーク効率・・・検出器に入射した粒子の内、検出器外に飛び出したり核反応を起こす粒子を除いた割合

DXの質量数依存性

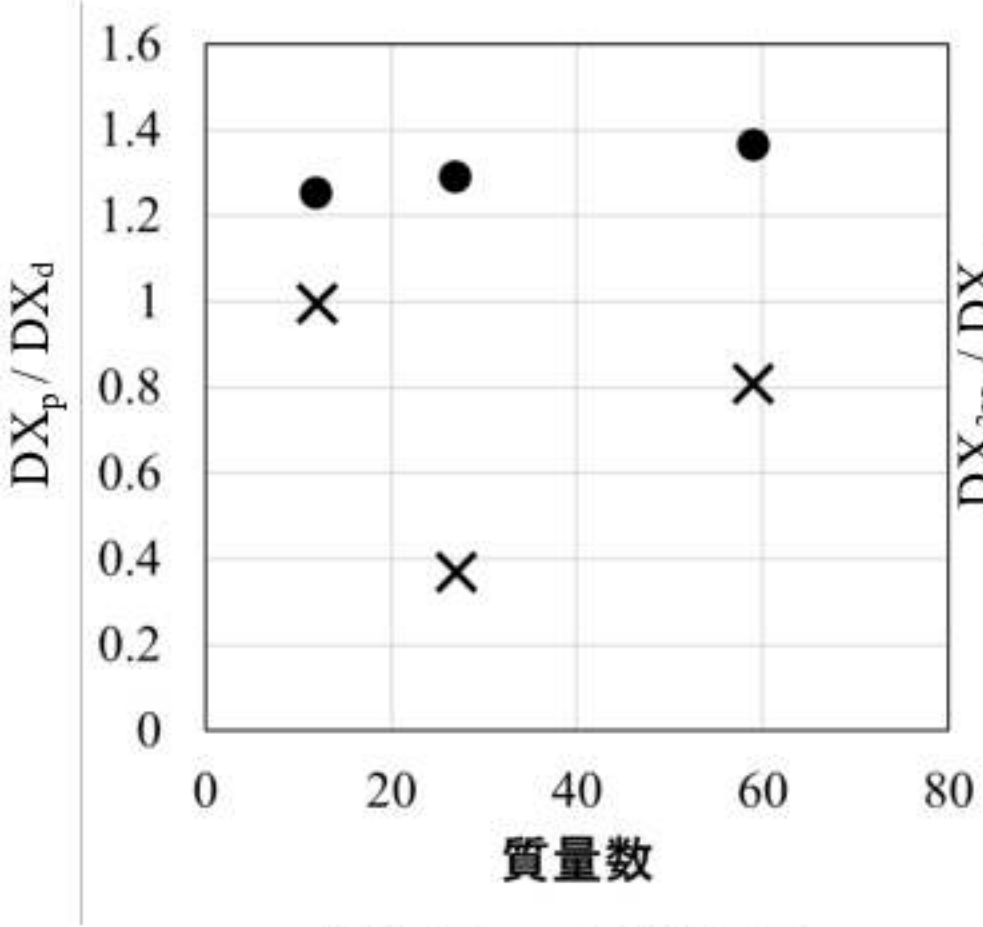

DX
180
160
140
120
100
80
60
40
20
0
0
20
40
60
80
y = 15.444x^0.5771
y = 8.4146x^0.3514
質量数
陽子


80
70
60
50
40
30
20
10
0
0
20
40
60
80
y = 2.1909x^0.8615
y = 0.4616x^1.0398
質量数
三重陽子

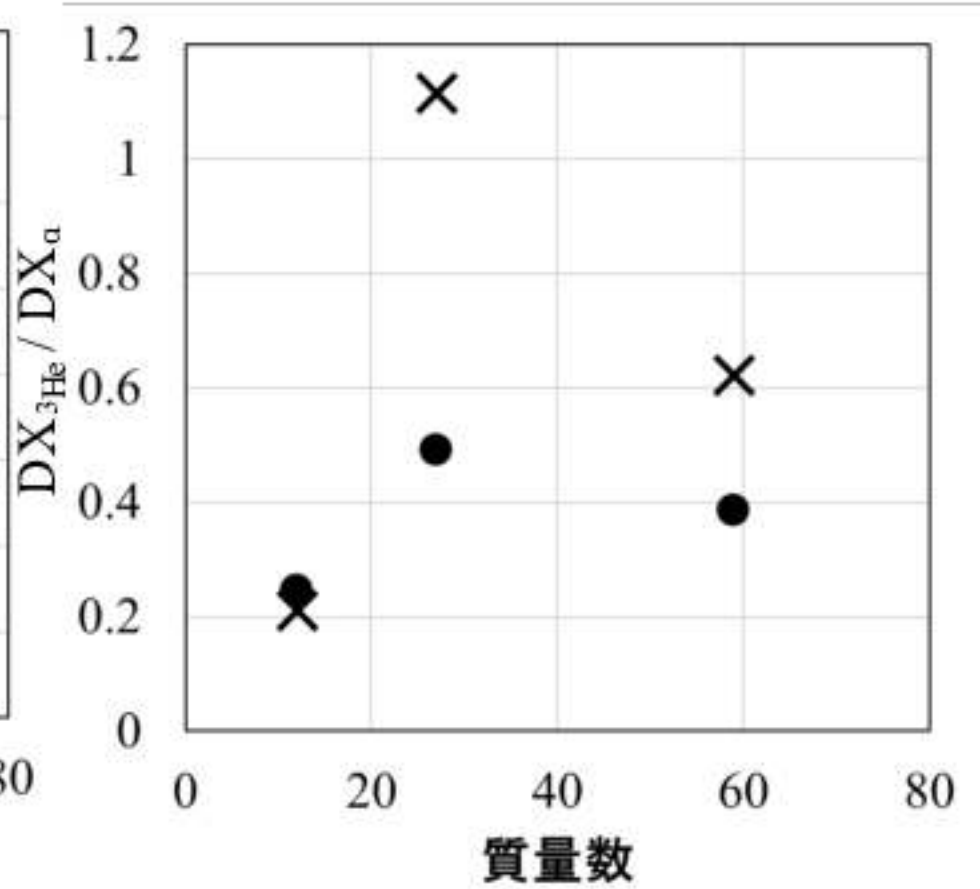
DXの質量数依存性


120
100
80
60
40
20
0
DX
y = 2.4273x^0.9018
y = 0.1131x^1.1266
0
20
40
60
80
質量数
alpha

収量比

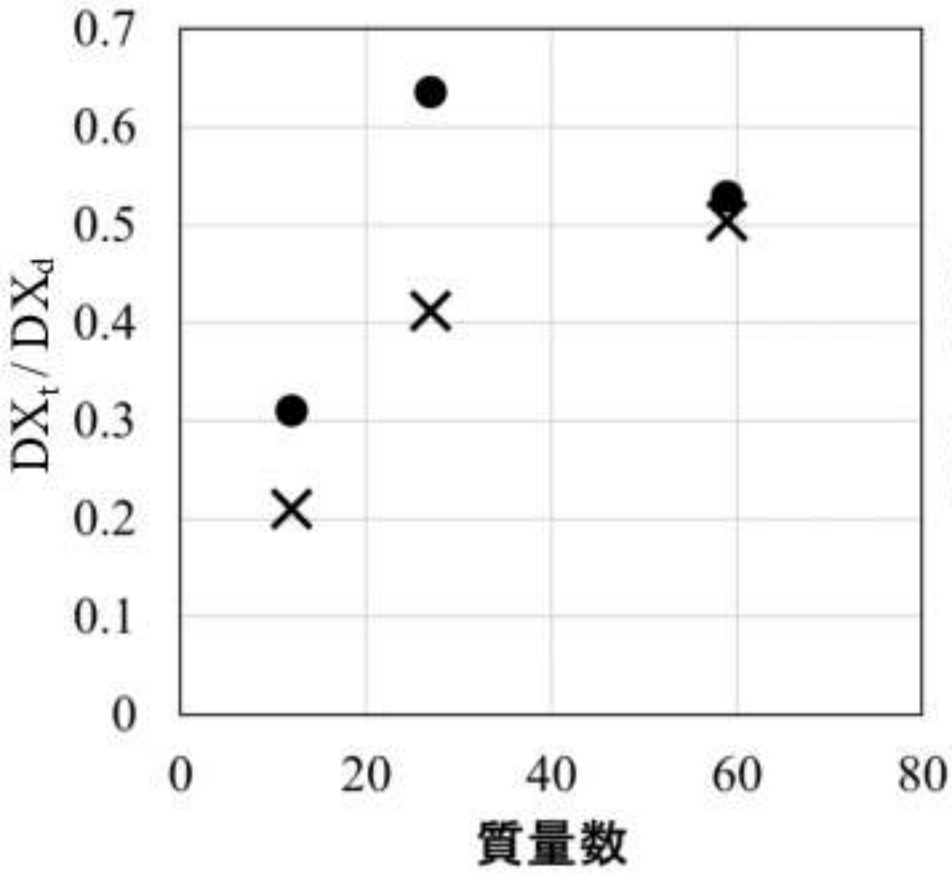


陽子 / 重陽子

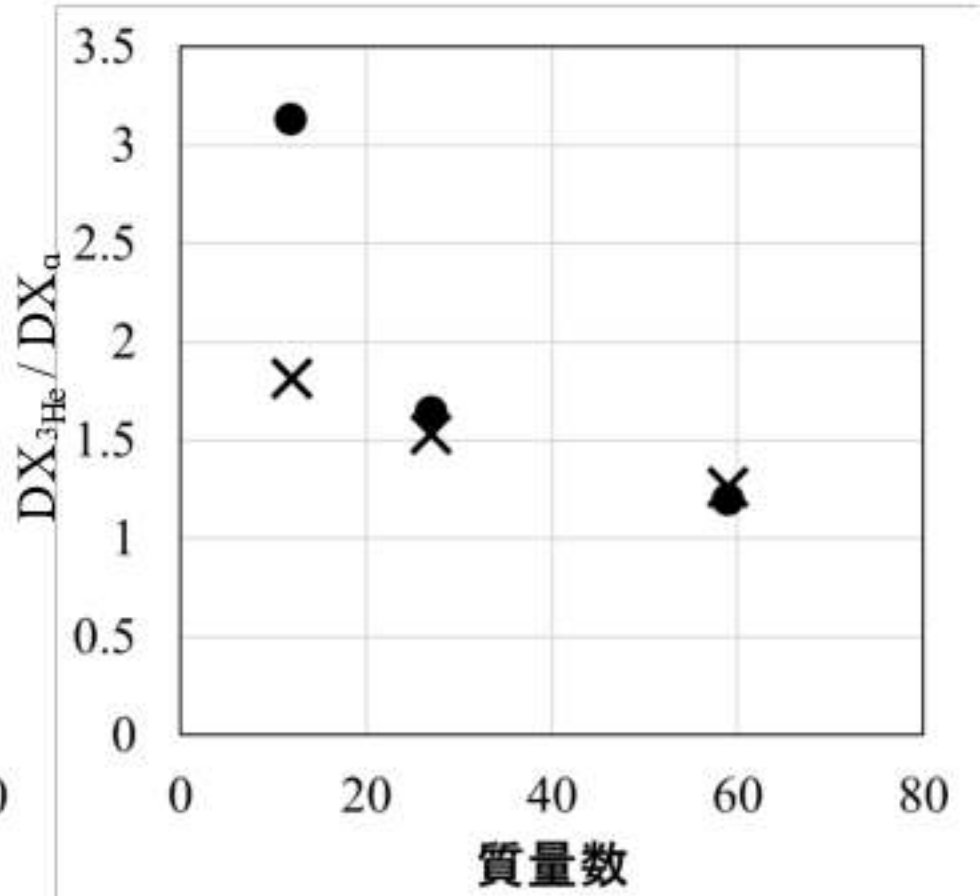


三重陽子 / 陽子

収量比

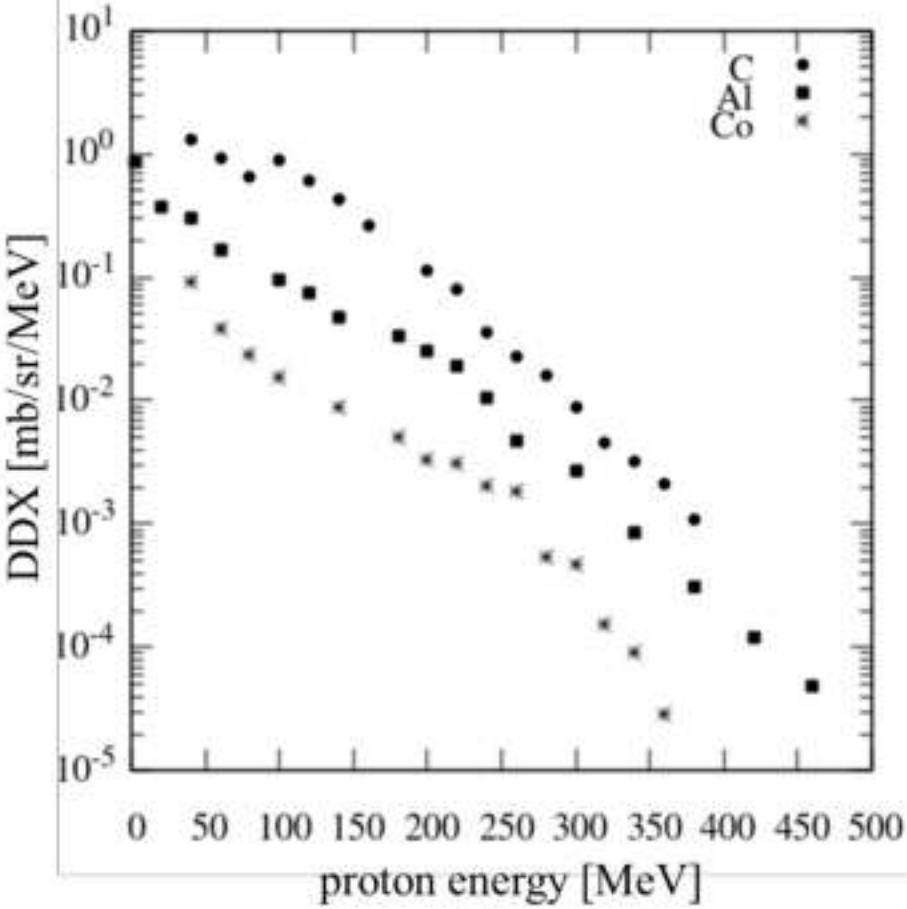


三重陽子 / 重陽子

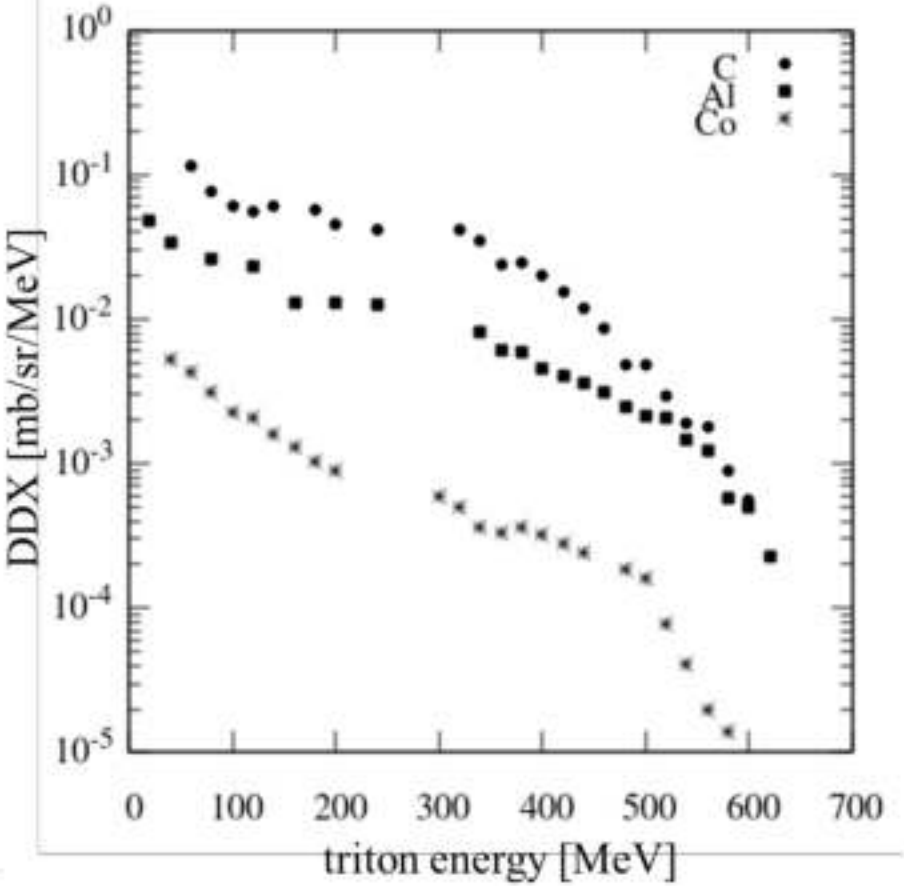


^{3}He / alpha

DXの質量数依存性

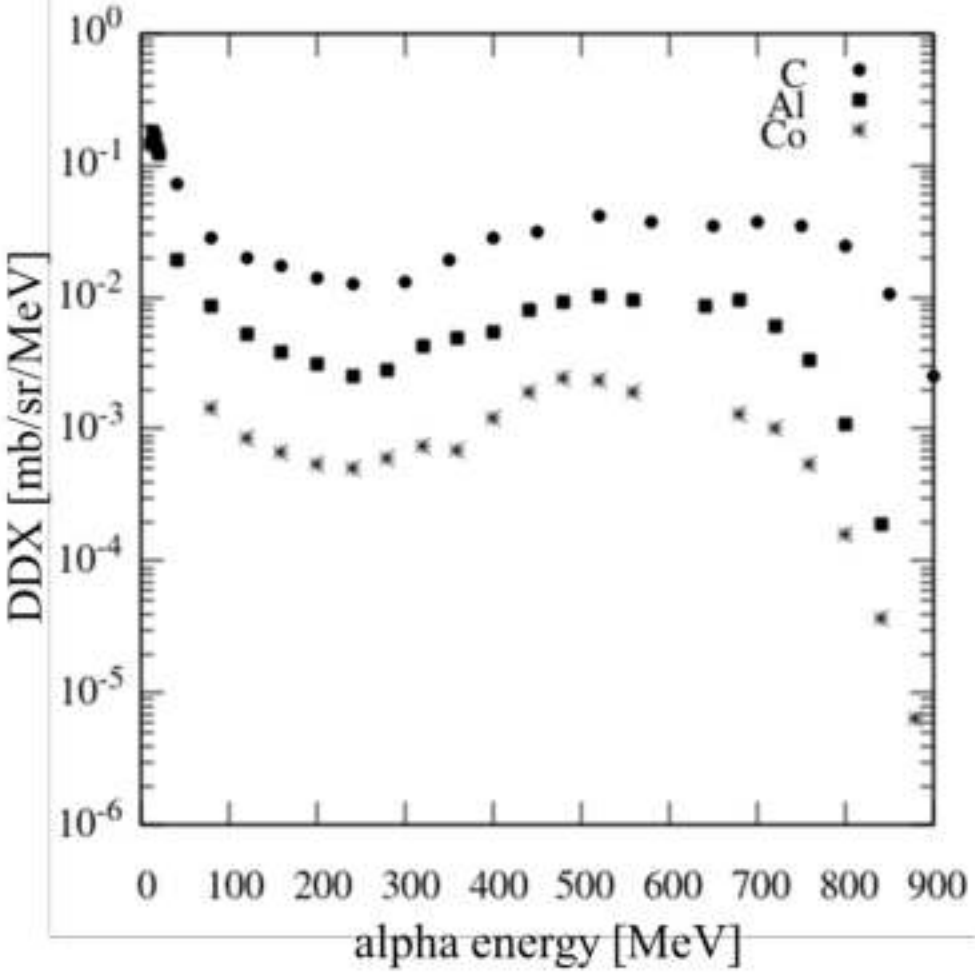


陽子



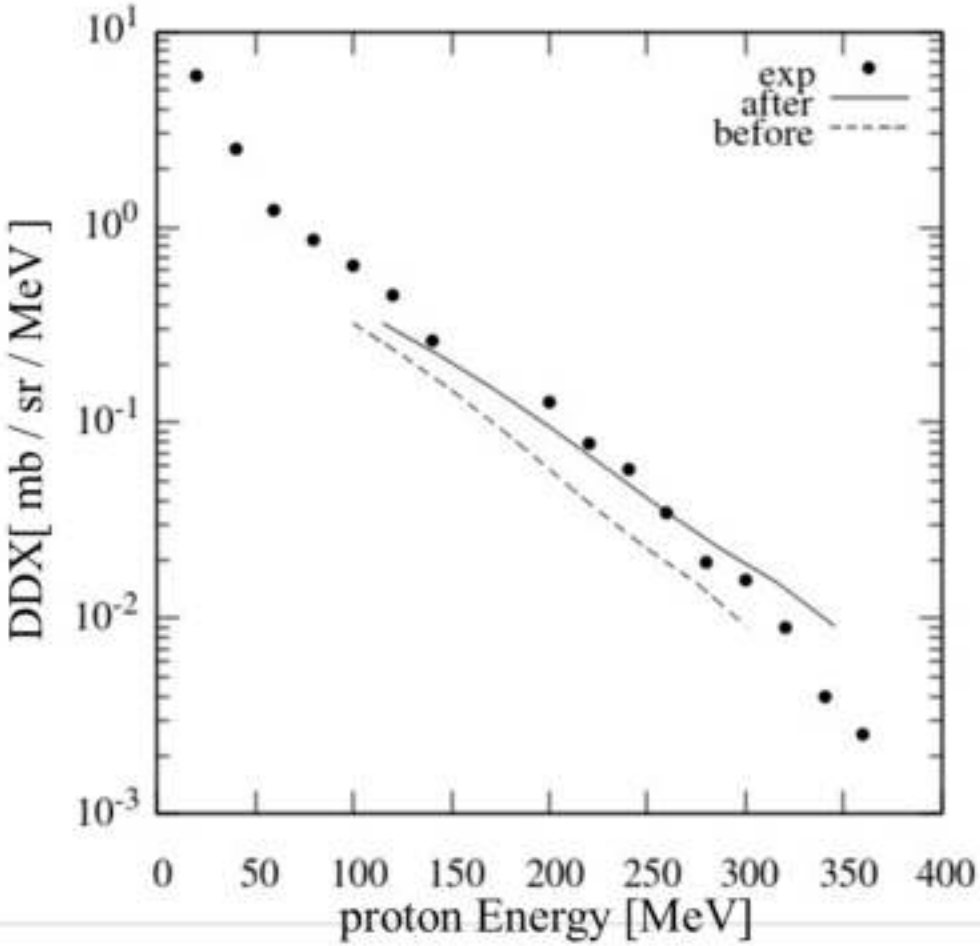
三重陽子

DXの質量数依存性



alpha

実験データの比較 Montarou et al.

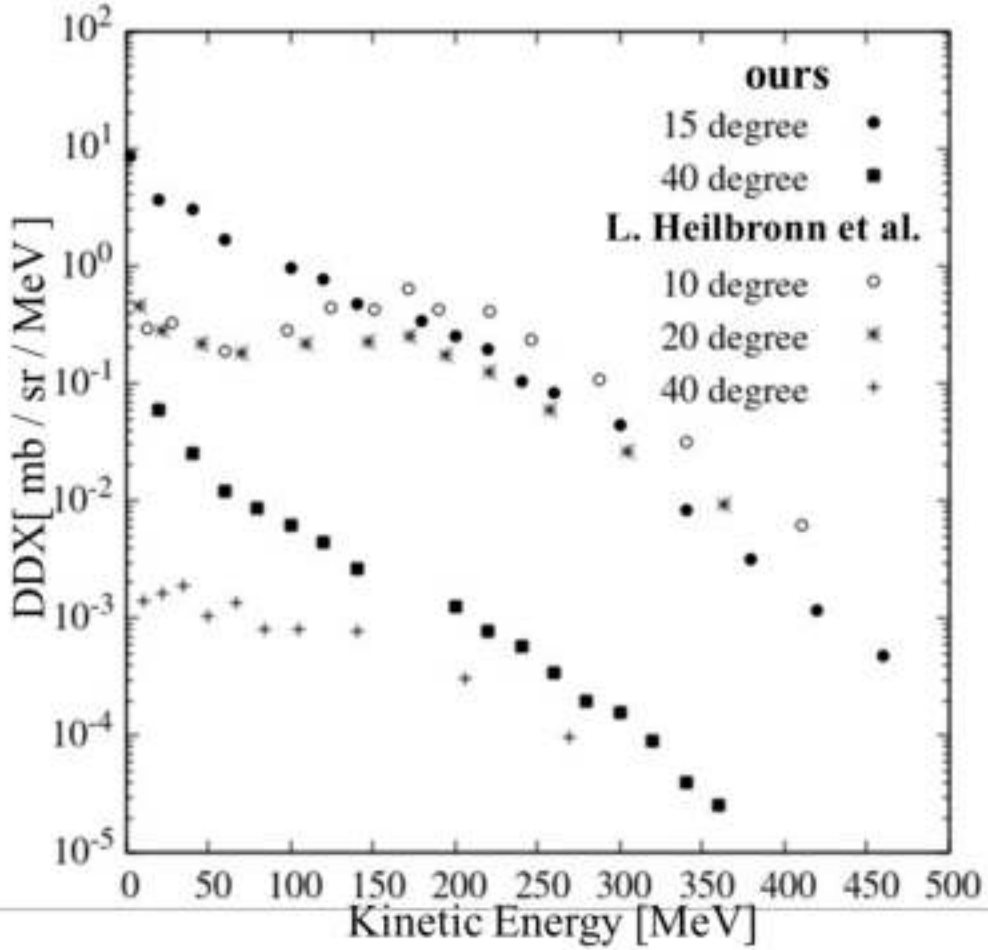


DDXs of Al(α,p) 230MeV/u

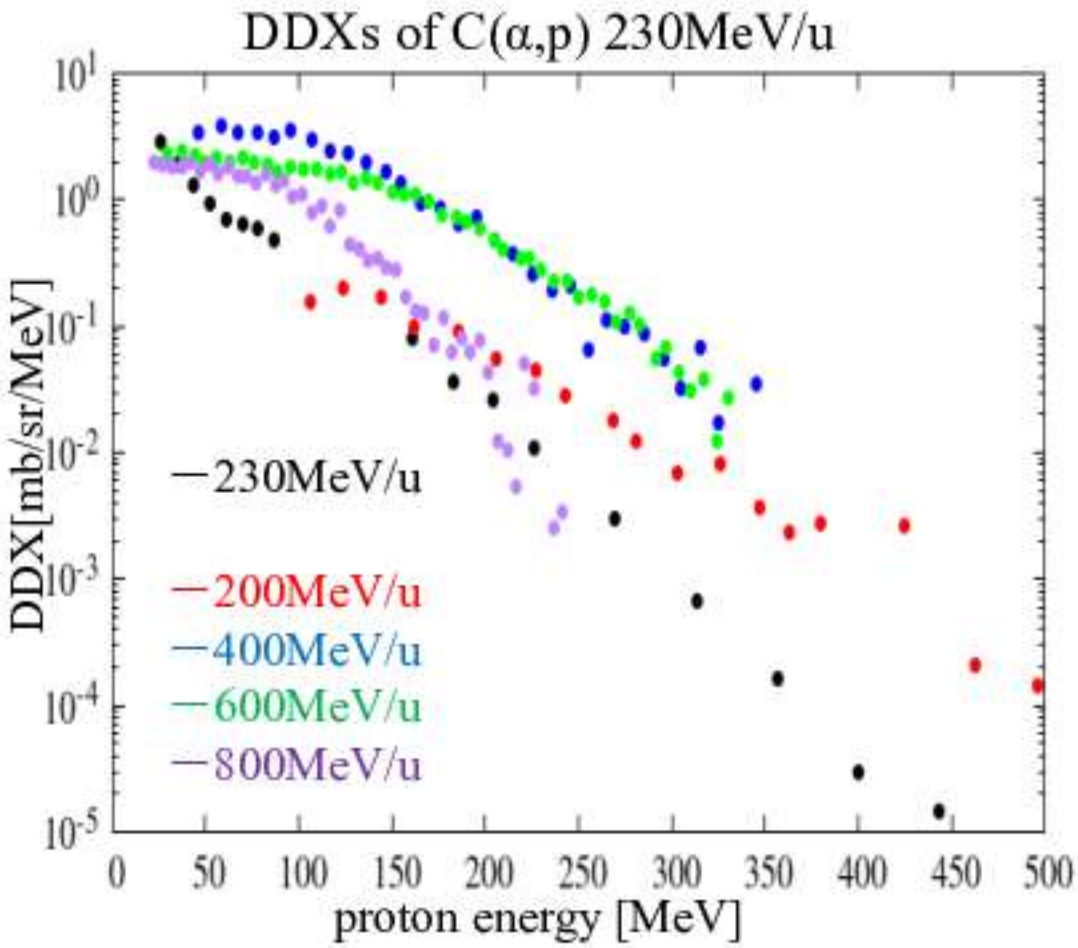
実験データ Montarou et al.
入射エネルギー 200 MeV/u
標的核 C,Cu,Pb
検出角度 30°,50°

Al(α,p)を算出
230 MeV/uのDDXと比較するために、エネルギースケーリング

実験データの比較　L.Heilbronn et al.



実験データの比較　Montarou et al.



Montarouの200,400,600,800MeV/uとの実験データの比較

エネルギーを以下の式で規格化

$$E_i' = \frac{200}{E_{in}} E_i$$

E_i = 粒子エネルギー
E_{in} = 入射エネルギー

400MeV/u,600MeV/uの実験データと絶対値は違うが傾向は酷似

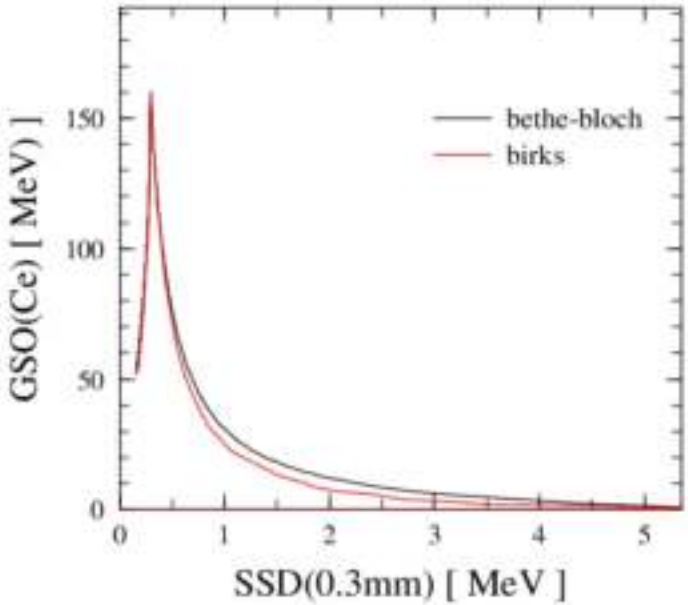
Birksの式

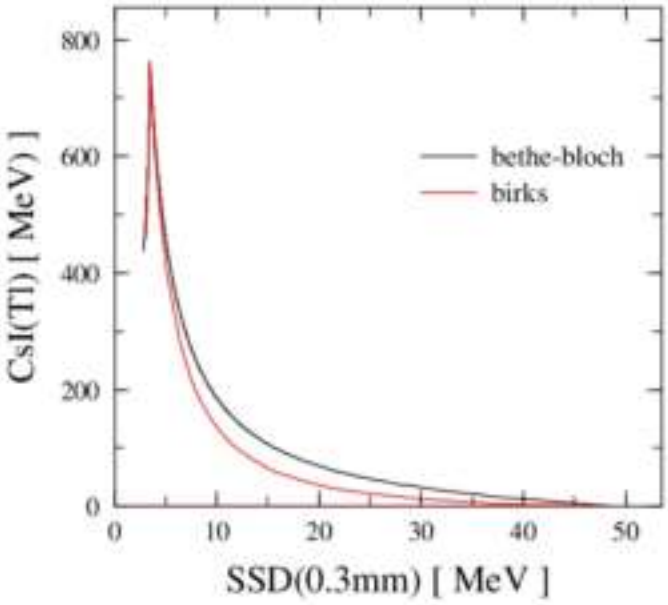
シンチレータ検出器は荷電粒子の消光によって付与エネルギーは低エネルギー部分は小さく、高エネルギー部分で大きくなる

$$\frac{dL}{dx} = \frac{S(\frac{dE}{dx})}{1 + kB(\frac{dE}{dx})}$$

dL/dx : 単位長さあたりの発光量、S : 絶対シンチレーション効率[1/MeV]

kB : Birks パラメータ[m/MeV]



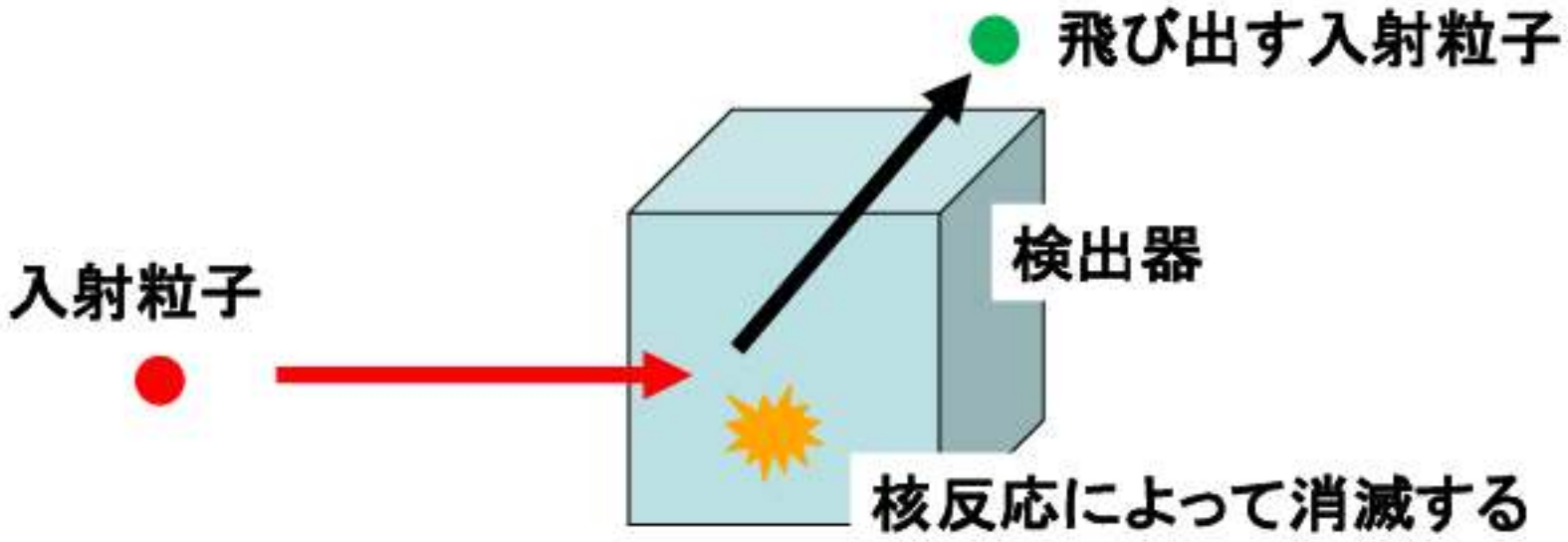


陽子(左)と^{7}Li(右)のBethe-Blochの式とBirksの式の計算結果

ピーク効率について

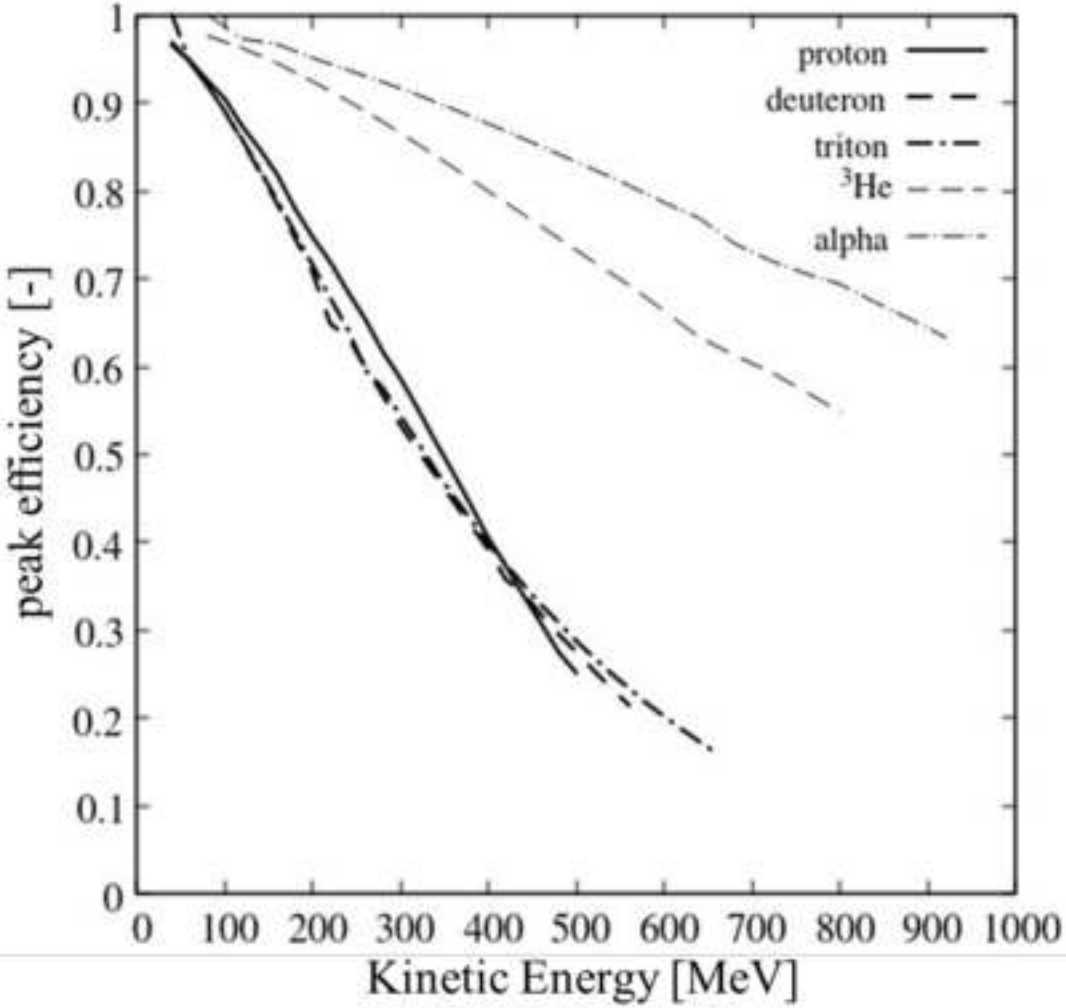
検出器は全ての入射粒子を検出できるわけではない

$$(\text{ピーク効率}) = 1 - \frac{(\text{核反応を起こした粒子数}) + (\text{飛び出した粒子数})}{(\text{入射粒子数})}$$



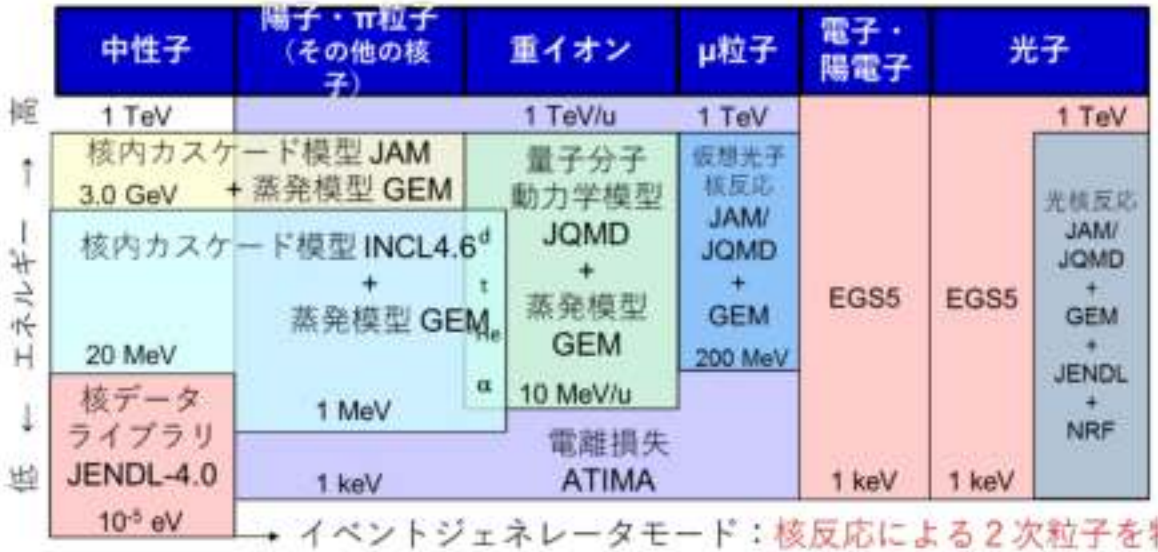
- ピーク効率は検出器体系を模擬してPHITS上で計算を行っている

ピーク効率について



陽子からヘリウムまでのピーク効率

PHITSについて

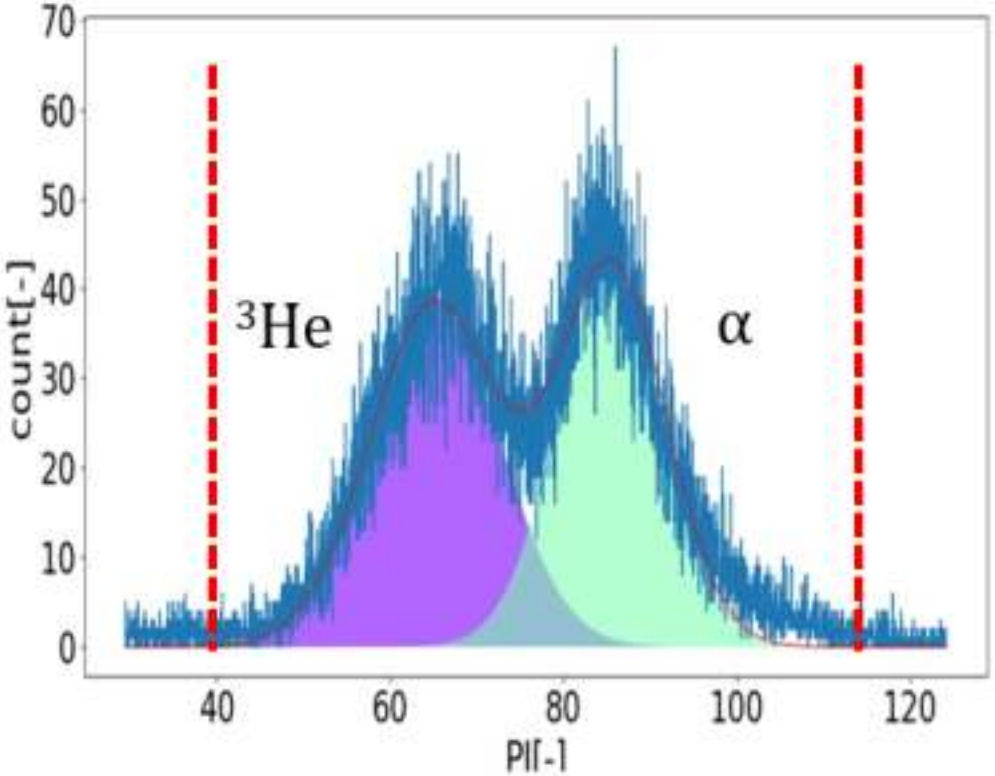


各反応模型	概要	反応過程	開発
INCL(Intra Nuclear Cascade of Liege)	古典力学をもとに作られたコード。高エネルギーの核子 - 核子散乱模型と Watson 反映による数値解析を行う	直接過程 前平衡過程	CEA (FRA)
JQMD(Jaeri Quantum Molecular Dynamics)	反古典的力学をもとに作られたコード。原子核を核子集合体とみなし、全核子間力の数値解析を行う	直接過程 前平衡過程	JAEA (JPN)
GEM（Generalized Evaporation Model	INCL や JQMD で計算された励起原子核の情報を引き継ぎ、原子核の脱励起の数値解析を行う	複合核過程 (蒸発過程)	JAEA (JPN)

誤差

- 各データの統計誤差
- 入射粒子数の誤差　なし
- 面密度の誤差（ターゲット厚さ、重さ）約0.1%
- ピーク効率　3%未満
- フィッティングの誤差　約1~7%
- 間接ビームモニター法の誤差　最大で約20%

フィッティングの誤差



青色の誤差は、二つのピークの面積の合計と赤色点線の範囲の実験値の収量差上図は約3%であった。フィッテイングによって差はあるが、1%から7%の範囲に収まる。

各データの統計誤差、入射粒子数の誤差

統計誤差： $\frac{1}{\sqrt{N}}$ N:荷電粒子数

入射粒子数の誤差

入射粒子数(3千万程度)における統計誤差については、全ての測定において十分に小さく無視できる

面密度

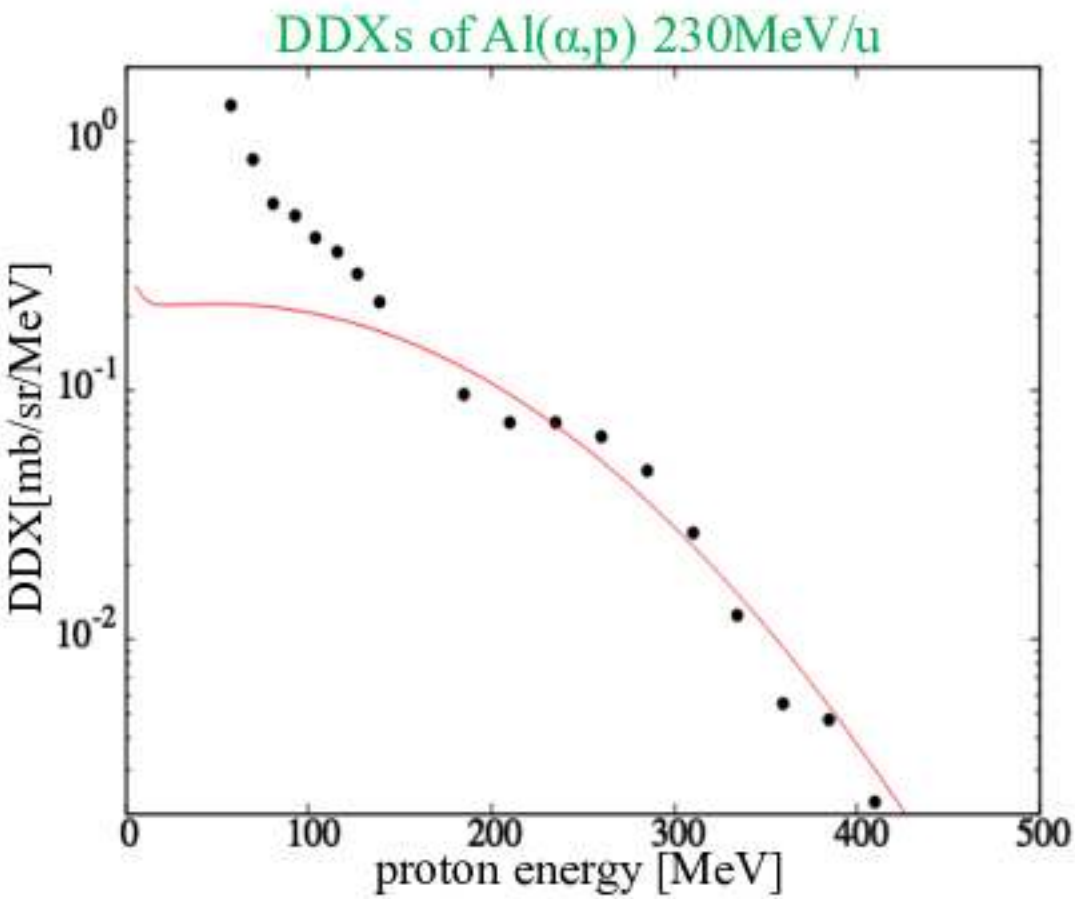
- ターゲットの重さについては、 5 回測定した平均をとっているため測定値の幅が誤差となる。今回の測定の誤差は全ターゲット で約 0.1%程度となったため、無視できるとした。

- 純度　99+% (ニラコのホームページより)

- 厚さ　ニラコのホームページ記載なし

Moving-Source Parameterzation

$$\frac{d^2Y}{dEd\Omega} = \left\{\frac{N_0}{\sqrt{2\pi\sigma_c(\theta)^2}}\exp\left(-\frac{\left(E_n - E_c(\theta)\right)^2}{2\sigma_c(\theta)^2}\right)\right\} + \left\{\sum_{i=1}^{2} N_i \frac{\sqrt{E_n}}{2(\pi T_i)^{3/2}}\exp\left(-\frac{E_s}{T_i}\right)\right\}$$



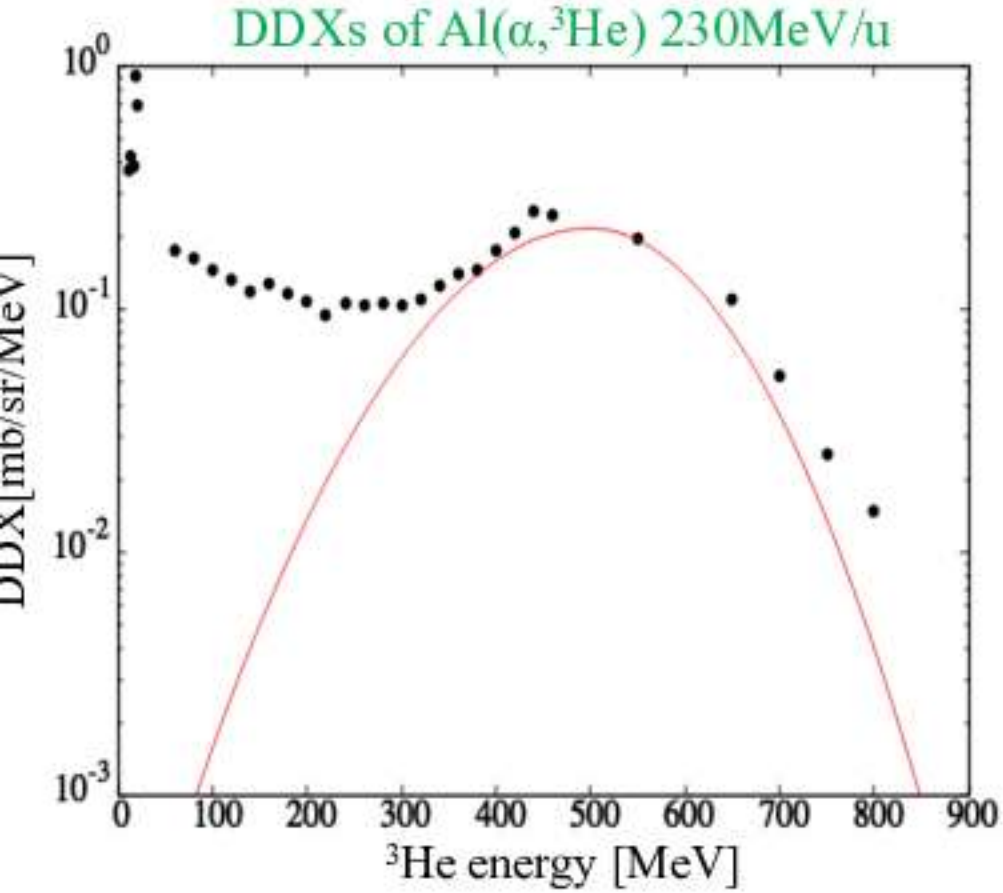
$$E_s = E_n + \varepsilon_i - 2\sqrt{E_n\varepsilon_i}\cos(\theta)$$

N_0 : 0.613
N_1 : 0.402
N_2 : 0.221
$\sigma_c(15^\circ)$: 121.5
$E_c(15^\circ)$: 53.6
T_1 : 3.07
T_2 : 14.82
ε_1 : 0.231
ε_2 : 0.406

※T.Kato ,T.Kurosawa , and T.Nakamura, Nucl. Instrum. Meth. A480, 571 (2002).

Kalbachのabsorptive breakup model

$$\frac{d^2\sigma_{\mathrm{ab}}(E,\theta)}{dE\,d\Omega} = \sigma_{\mathrm{ab}}(E,\theta)\,\frac{P_{\mathrm{E}}^{(\mathrm{ab})}(E)}{\int P_{\mathrm{E}}^{(\mathrm{ab})}(E)\,dE}\,P_{\theta}^{(\mathrm{ab})}(\theta)$$



※C .Kalbach ,Phys. Rev. C 95, 014606 (2017) 17.

低エネルギーのα粒子入射のabsorptive breakupのDDXに合うように作成された式

σ_{ab}とピークの幅を調整

$$\sigma_{ab} = N_{ab} \cdot F(E_{inc})$$

^{3}He : $N_{ab} = 0.34$

t : $N_{ab} = 0.19$

J.R.Wuのbreakup model

$$\frac{d^2\sigma}{dE\,d\Omega} \propto |\psi(\vec{p})|^2 m(2mE)^{1/2}$$

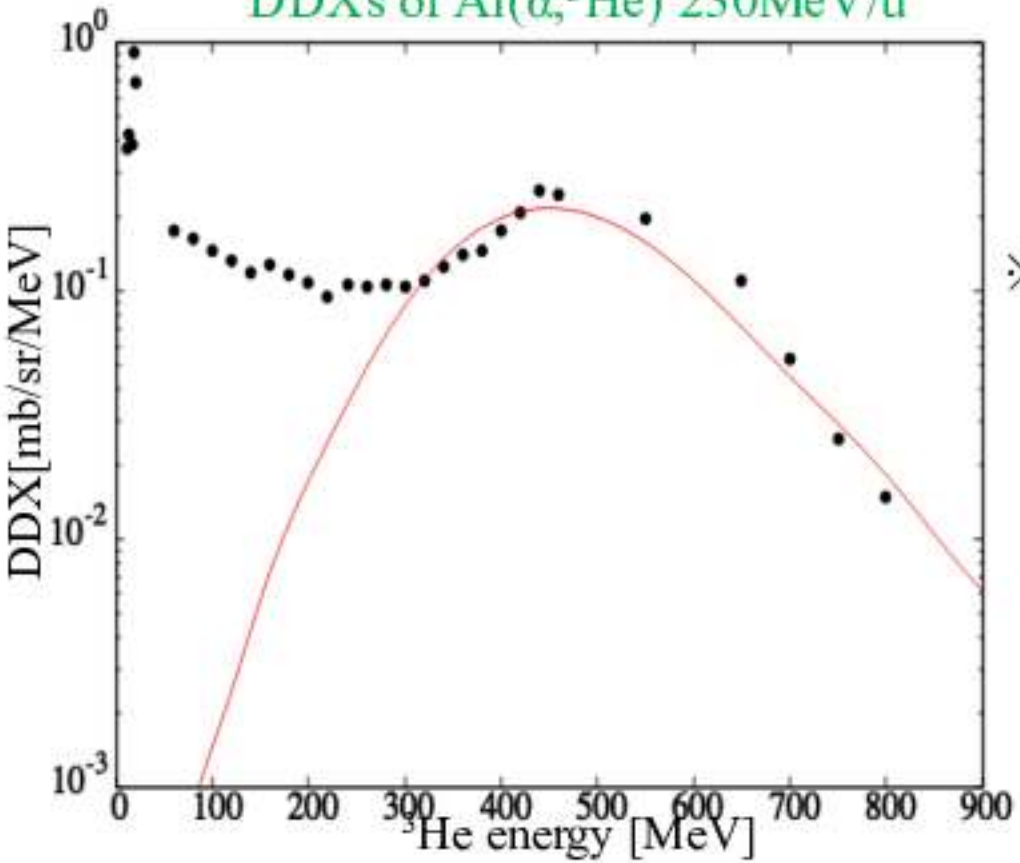
$$\psi(\vec{p}) = \frac{1}{h^{3/2}} \int \psi_\alpha(r) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right) d^3r$$

αの波動関数

$$\psi_\alpha(r) = C\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \frac{e^{-\alpha r}}{r}\left(1 - e^{-\beta r}\right)^4$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2\mu\varepsilon_i}}{\hbar} \qquad \beta = 1.2\ \mathrm{fm}^{-1}$$

DDXs of Al(α,^{3}He) 230MeV/u



※J.R.Wu , C. C. Chang , and H. D. Holmgren , Phys. Rev. Lett 40 (1978) 1013.

α粒子の入射運動と波動関数を基にした計算

↓

α粒子の波動関数に従って break up

ハドロン治療への応用に向けた相対論的原子核模型に基づくQMDシミュレーション

Akihiro Haga
Graduate School of Biomedical Sciences,
Tokushima University

EGS5-Geant4-PHITS合同研究会, 2025年5月16日

Collaborators

Yoshi-hide Sato
Tokushima University

Hana Fujiwara
Tokushima University

Dousatsu Sakata
Osaka University

Susanna Guatelli
University of Wollongong

David Bolst
University of Wollongong

Edward C. Simpson
The Australian National University

Background – Relativistic QMD

- QMD explicitly calculates the interaction of every single particle in the system; such a simulation can therefore be used to calculate particle multiplicities and fragment yields in each reaction explicitly.
- Various QMD code (TUQMD, ImQMD, RQMD, URQMD, and JQMD) were developed and successfully reproduced secondary particle yields. However, in these codes, **nuclei were disintegrated spuriously or excited during time evolution**, mainly owing to the nonrelativistic description of the Hamiltonian, which uses;

$$H = \sum_i \sqrt{\mathbf{p_i}^2 + m_i^2} + V,$$

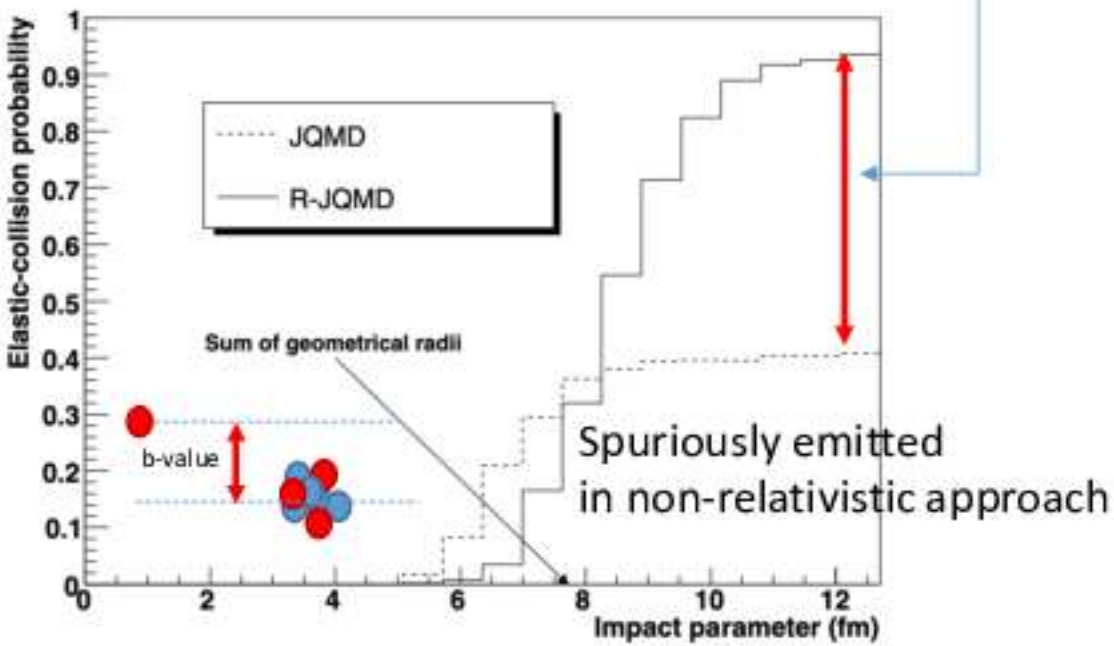
By contrast, the relativistic Hamiltonian is written as,

$$H = \sum_i \sqrt{\mathbf{p_i}^2 + m_i^2 + 2m_i V_i},$$

RQMD approach

Current Geant4 employs this, too. (since 2015?)

where, the particle mass is no longer a constant but is effectively changed (the effective mass).



D. Mancusi, K. Niita, T. Maruyama, and L. Sihver, Stability of nuclei in peripheral collisions in the JAERI quantum molecular dynamics model, Phys. Rev. C **79**, 014614 (2009).
T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, Cluster formation in relativistic nucleus-nucleus collisions, Phys. Rev. C **98**, 024611 (2018).

Background – RQMD.RMF

- Typical QMD models are based on the **Skyrme** interaction model, which is in a category of the **non-relativistic nuclear model.**
- Recently, relativistic mean field (RMF) model based QMD, named **RQMD.RMF** has been proposed by Nara et. al. (Phys. Rev. C100, 054902 (2019). and Phys. Rev. C102, 024913, (2020)), which is a model with the full covariant manner including self-consistent scalar and vector potentials.
- However, the evaluation was limited for heavy nucleus-nucleus collision at high energy (e.g. Au+Au,2.5<√(s_NN)<20 GeV). In addition, the nuclear model is not tested globally (they just used own parameter sets, no rho-meson interaction, inconsistent meson self-energy, etc.).

The motivation of this study is to develop the general-purpose RQMD.RMF model and to assess its performance with the ground state properties and the light-ion fragmentation for hadron therapy energy range.

Relativistic QMD

https://arxiv.org/pdf/2503.19395

The relativistic version of QMD model, RQMD model, is formulated based on the constraint Hamiltonian dynamics[39–41], which reduce the number of degrees of freedom in the relativistic phase space ($8N \to 6N$)[3, 7, 42]. World lines are given by $(\boldsymbol{q}_i(\tau), \boldsymbol{p}_i(\tau))$, meaning that position and momentum of i-th particle as a function of the time τ[43]. The constraints $\phi_i, i \in 1 \sim 2N$ is assumed to be invariant,

$$\frac{d\phi_i}{d\tau} = \frac{\partial \phi_i}{\partial \tau} + \sum_k^{2N} C_{ik}^{-1} \lambda_k = 0 \tag{1}$$

on the physical space, where $C_{ik}^{-1} \equiv \{\phi_i, \phi_k\}$ is the Poisson brackets for four-vectors:

$$\{\phi_i, \phi_k\} = \sum_{k=1}^{N} \frac{\phi_i}{\partial q_k^\mu} \frac{\phi_k}{\partial p_{k\mu}} - \frac{\phi_i}{\partial p_k^\mu} \frac{\phi_k}{\partial q_{k\mu}}. \tag{2}$$

Now, we constrain as,

$$\phi_k = \begin{cases} K_k(q^\mu, p_\mu) = 0 & (k \in (1 \sim N)) \\ \chi_k(q^\mu, p_\mu) = 0 & (k \in (N+1 \sim 2N-1)) \\ \chi_{2N}(q^\mu, p_\mu, \tau) = 0 & (k = 2N) \end{cases} \tag{3}$$

where only ϕ_{2N} depends on τ. Assuming $\{K_i, K_j\} = 0$, we have,

$$\lambda_k = -C_{k,2N} \frac{\partial \phi_{2N}}{\partial \tau}, \tag{4}$$

and $\lambda_k = 0$ for $k \in (N+1 \sim 2N)$. We define the constraint Hamiltonian as $\sum_{k=1}^{2N} \lambda_k \phi_k$, then, the equations motion are given by,

$$\frac{q_i^\mu}{d\tau} = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \frac{\partial K_k}{\partial p_{i\mu}} \tag{5}$$

$$\frac{p_i^\mu}{d\tau} = -\sum_{k=1}^{N} \lambda_k \frac{\partial K_k}{\partial q_{i\mu}}, \tag{6}$$

where the Lagrange multipliers λ_k has an analytical solution,

$$\lambda_k = (2p_k^{*\mu} U_\mu)^{-1} = \frac{1}{2p_k^{0*}}, \tag{7}$$

with $U_\mu \equiv (1, \mathbf{0})$, where $p_k^{*\mu}$ includes the vector potential Σ_k^μ as $p_k^\mu - \Sigma_k^\mu$. The constraint K_k is taken by on-mass shell condition:

$$K_k = p_k^{*2} - m_k^{*2}, \quad k \in (1 \sim N), \tag{8}$$

where $m_k^* = m_k - \Sigma_{s,k}$ includes the scalar potential $\Sigma_{s,k}$. The equations of motion in RQMD is obtained by substituting Eqs.(7) and (8) into Eqs.(5) and (6).

The single particle energy is,

$$p_i^0 \equiv \sqrt{(\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{\Sigma}_{v,i})^2 + (m_i - \Sigma_{s,i})^2} + V_i,$$

$$V_i = \frac{1}{2}\frac{m_i}{p_i^0}\Sigma_{s,i} + \frac{1}{2}\Sigma_{v,i}^0 + \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{p}_i}{p_i^0} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_{v,i} + (\mathrm{SE})_i,$$

for RMF model.

D. Mancusi, K. Niita, T. Maruyama, and L. Silver, Stability of nuclei in peripheral collisions in the JAERI quantum molecular dynamics model, Phys. Rev. C 79, 014614 (2009).
R. Marty and J. Aichelin, Molecular dynamics description of an expanding q/q̄ plasma with the Nambu–Jona-Lasinio model and applications to heavy ion collisions at energies available at the BNL Relativistic Heavy Ion Collider and the CERN Large Hadron Collider, Phys. Rev. C 87, 034912 (2013)

https://arxiv.org/pdf/2503.19395

Relativistic mean field (RMF) theory

Lagrangian;

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} =& \bar{\psi}[i\partial\!\!\!/ - m_N - g_\sigma \sigma - g_\omega \omega\!\!\!/ - g_\rho \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\rho}\!\!\!/ - eQ A\!\!\!/]\psi \\
&+ \frac{1}{2}(\partial_\mu \sigma)^2 - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 - \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 \\
&- \frac{1}{4}(\Omega_{\mu\nu})^2 + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu + \frac{1}{4} c_3 (\omega_\mu \omega^\mu)^2 \\
&- \frac{1}{4}(\boldsymbol{R}_{\mu\nu})^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \boldsymbol{\rho}_\mu \cdot \boldsymbol{\rho}^\mu \\
&- \frac{1}{4}(F_{\mu\nu})^2 , \qquad (12)
\end{aligned}
$$

Euler-Lagrange equations

Expectation with Gaussian packet

Mean field of mesons (and photon)

$$
\begin{aligned}
m_\sigma^2 \sigma_i + g_2 \sigma_i^2 + g_3 \sigma_i^3 &= -g_\sigma \sum_{j \neq i} f_j \rho_{ij}, \\
m_\omega^2 \omega_{\mu,i} + c_3 (\omega_{\nu,i} \omega_i^\nu) \omega_{\mu,i} &= g_\omega \sum_{j \neq i} \frac{p_{\mu,j}}{p_j^0} \rho_{ij}, \\
m_\rho^2 \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\rho}_{\mu,i} &= g_\rho \sum_{j \neq i} \tau_{3,i} \tau_{3,j} \frac{p_{\mu,j}}{p_j^0} \rho_{ij}, \\
eA_{\mu,i} &= \alpha \hbar c \sum_{j \neq i} \frac{1}{R_{ij}} \mathrm{erf}\left(\frac{R_{ij}}{\sqrt{4\pi}}\right),
\end{aligned}
$$

From the {00} component of energy-momentum tensor leads to the Hamiltonian,

$$
H = \sum_i \left(\sqrt{\boldsymbol{p}_i^{*2} + m_i^{*2}} + \frac{1}{2}\Sigma_{v,i}^0 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}_{v,i} \cdot \boldsymbol{\beta}_i + \frac{1}{2}\Sigma_{s,i} f_i \right) + \int d\boldsymbol{r} \left(-\frac{1}{6} g_2 \sigma^3 - \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 + \frac{1}{4} c_3 (\omega_\mu \omega^\mu)^2 \right),
$$

where

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p}_i^* &= \boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{\Sigma}_{v,i} \\
m_i^* &= m_N - \Sigma_{s,i} \\
\boldsymbol{\beta}_i &= \frac{\boldsymbol{p}_i}{p_i^0} \\
f_i &= \frac{m_N}{p_i^0}
\end{aligned}
$$

momentum dependent term

scalar potential $\Sigma_{s,i} = g_\sigma \sigma_i + V_{s,i}^{\mathrm{MD}},$

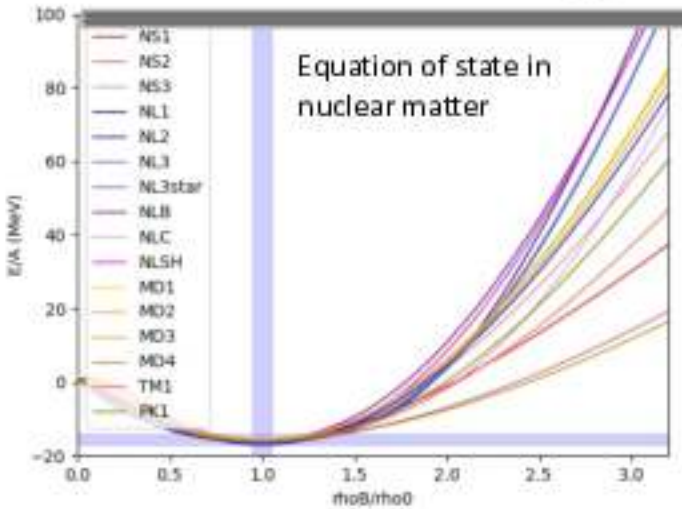
vector potential $\Sigma_{v,i}^\mu = g_\omega \omega_i^\mu + g_\rho \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\rho}_i^\mu + eA_i^\mu + V_{v,i}^{\mu,\mathrm{MD}},$

Representative parameter sets

TABLE I. Parameter sets of relativistic mean field model used in this study. † Unit in MeV.

	NS1[7]	NS2[7]	NS3[7]	NL1[31]	NL2[32]	NL3[33]	NL3*[34]	NLB[28]	NLC[28]	NLSH[35]	MD1[8]	MD2[8]	MD3[8]	MD4[8]	TM1[36]	FK1[37]
g_σ	6.448	7.902	8.864	10.14	9.111	10.22	10.09	9.696	9.750	10.44	9.030	9.233	5.489	4.059	10.03	10.32
†g_2	-76	88.62	4.382	24.34	4.608	20.86	21.62	4.055	25.34	13.82	8.436	8.024	-31.38	-320.6	14.47	16.34
g_3	2038	131.9	162.4	-217.6	82.70	-173.3	-180.9	10.0	-200.0	-95.0	40.0	33.12	2347	16104	3.710	-59.99
†m_σ	530.0	550.0	550.0	492.3	504.9	508.2	502.6	510.0	500.8	526.1	550.0	550.0	550.0	550.0	511.2	514.1
g_ω	6.859	6.859	10.07	13.29	11.49	12.87	12.81	12.59	12.20	12.95	6.740	3.888	0	5.632	12.61	13.01
c_3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	71.31	55.64
†m_ω	783.0	783.0	783.0	795.4	780.0	782.5	782.6	783.0	783.0	783.0	783.0	783.0	783.0	783.0	783.0	784.3
g_ρ	7.5	7.5	7.5	9.951	11.01	8.948	9.150	8.544	8.66	8.766	7.5	7.5	7.5	7.5	9.264	9.059
†m_ρ	763	763	763	763	763	763	763	770	770	763	763	763	763	763	763	763
$\bar{g}_\sigma$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3.186	2.502	7.711	5.544	0	0
$\bar{g}_\omega$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8.896	10.43	11.22	3.926	0	0
$\bar{g}_\rho$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
†Λ_σ	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	641	489.7	1702	704	-	-
†Λ_ω	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1841	2489	1898	4252	-	-
†Λ_ρ	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Nuclear properties in various RMF models



1) Y. Nara, et al., Momentum-dependent potential and collective flows within the relativistic quantum molecular dynamics approach based on relativistic mean-field theory. *Phys. Rev. C*, 102:024913, Aug 2020.

2) P.G. Reinhard, et.al., Nuclear ground-state properties in a relativistic Meson-Field theory, *Z. Phys. A* 323 (1986) 13

3) S.K. Patra, Relativistic mean field study of light nuclei, *Nucl.Phys.A* 559 (1993) 173-192

4) G.A. Lalazissis, et al., A New Parameterization for the Lagrangian Density of Relativistic Mean Field Theory. *Phys. Rev. C* 55, 540 1997.

5) Lalazissis et al., The effective force NL3 revisited, *Phys.Lett.B* 671 (2009) 36-41.

6) B. D. Serot and J. D. Walecka, The Relativistic Nuclear Many Body Problem, Adv. Nucl. Phys. 16, 1 (1986).

7) M. M. Sharma, et.al., Rho meson coupling in the relativistic mean field theory and description of exotic nuclei, Phys. Lett. B 312, 377 (1993).

8) Y. Sugahara and H. Toki, Nucl. Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with non-linear σ and ω terms Phys. A 579, 557 (1994)

9) W. Long, et.al., New effective interactions in relativistic mean field theory with nonlinear terms and density-dependent meson-nucleon coupling, Phys. Rev. C, 69, 034319 (2004)

Parameter set	Saturation density [fm^{-3}]	Binding energy [MeV]	Effective mass [ratio]	Incompressibility [MeV]	Symmetry energy [MeV]
NS1[1)]	0.168	-15.97	0.83	380.32	30.07
NS2[1)]	0.168	-15.97	0.83	209.50	30.01
NS3[1)]	0.168	-15.91	0.70	379.01	32.34
NL1[2)]	0.152	-16.43	0.57	211.46	43.49
NL2[3)]	0.146	-17.02	0.67	399.60	45.13
NL3[4)]	0.148	-16.24	0.60	270.80	37.36
NL3star[5)]	0.15	-16.31	0.59	257.57	38.64
NLB[6)]	0.148	-15.77	0.61	420.59	35.00
NLC[6)]	0.149	-15.77	0.63	223.86	35.33
NLSH[7)]	0.146	-16.36	0.60	355.61	36.13
MD1[1)]	0.168	-15.77	0.65	379.15	32.99
MD2[1)]	0.168	-15.86	0.65	380.70	33.13
MD3[1)]	0.168	-15.70	0.65	381.61	32.77
MD4[1)]	0.168	-15.99	0.82	210.46	30.07
TM1[8)]	0.145	-16.26	0.63	281.71	37.30
PK1[9)]	0.148	-16.27	0.61	281.91	37.60

large

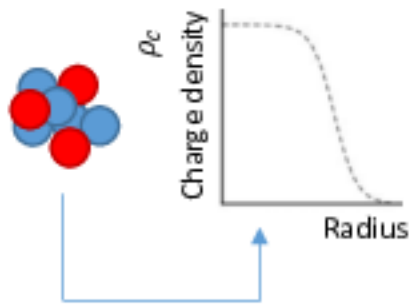
small

large

small

Model evaluation with ground state properties

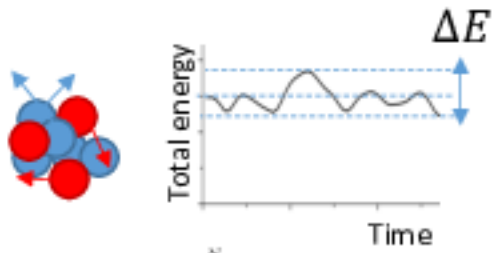
1. Charge radius



$$R = \sqrt{\langle r^2 \rangle},\ \langle r^2 \rangle = \int r^2 \rho_c(r) d\boldsymbol{r}$$

To compare the charge radii simulated by QMD with the experimental data (https://www-nds.iaea.org/radii/)

2. Stability



$$\frac{\boldsymbol{q}_i}{d\tau} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2p_i^{0*}} \frac{\partial K_i}{\partial \boldsymbol{p}_i}$$

$$\frac{\boldsymbol{p}_i}{d\tau} = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2p_i^{0*}} \frac{\partial K_i}{\partial \boldsymbol{q}_i},$$

To compare the fluctuation of binding energy, ΔE (which is the difference between the maximum and minimum binding energy during 100 [fm/c].

3. Binding energy

sampling from Wood-Saxon profile

$$p(r) \propto \frac{1}{1 + e^{(r-c)/w}}$$

To compare the binding energy just after the sampling from Wood-Saxon profile (parameters are modeled as a function of (Z,A)) with the experimental data.

If the absolute difference from the experiment is less than 0.5 MeV/A, the sampling is judged to be succeeded. The number of trials required to be a success is counted.

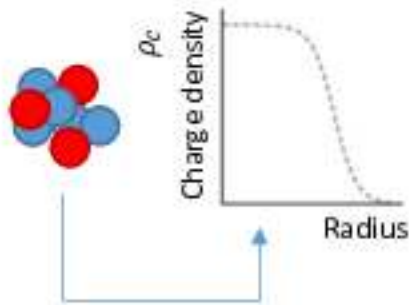
- Evaluated with ten stable nuclei (^{12}C, ^{14}N, ^{16}O, ^{31}P, ^{40}Ca, ^{48}Ca, ^{63}Cu, ^{90}Zn, ^{120}Sn, and ^{208}Pb)
- The squared width of the Gaussian wave packet L is modeled as a function of nuclear mass A ;

$$L = aA^{2/3} + b, \qquad (a, b) = (0.035, 0.9)$$

where the parameters (a, b) are determined to reasonably produce in NL3* [1. charge radii] of above nuclei. Therefore, the model evaluation is performed in [2. stability and 3. binding energy] with a condition that the charge radii are reproduced.

Result: Model evaluation with ground state properties

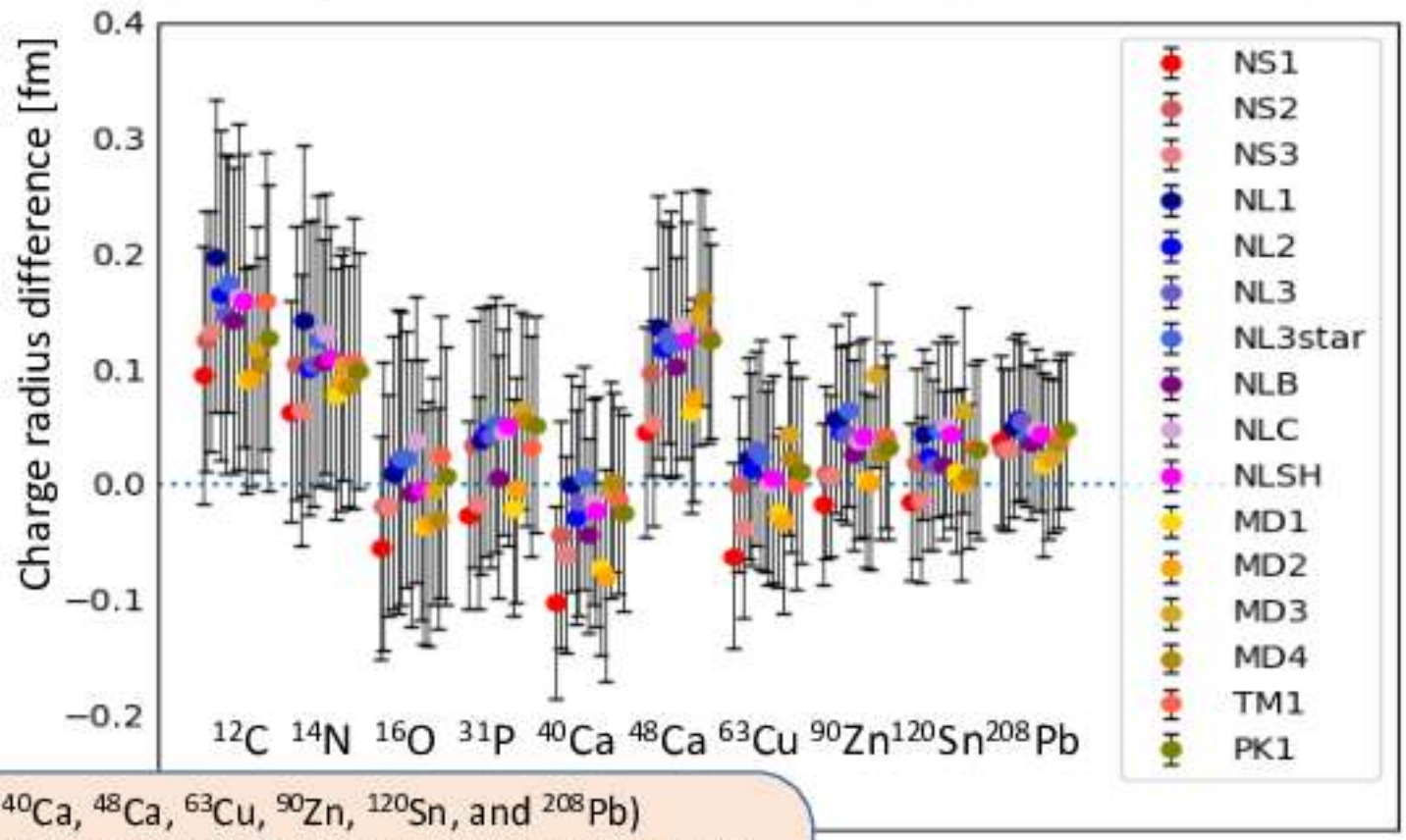
1. Charge radius



$$R = \sqrt{\langle r^2 \rangle},\ \langle r^2 \rangle = \int r^2 \rho_c(r) d\boldsymbol{r}$$

To compare the charge radii simulated by QMD with the experimental data (https://www-nds.iaea.org/radii/)

Mean (circles) and the standard deviation (bars) with **100 times QMD sim.**



- Evaluated with ten stable nuclei (^{12}C, ^{14}N, ^{16}O, ^{31}P, ^{40}Ca, ^{48}Ca, ^{63}Cu, ^{90}Zn, ^{120}Sn, and ^{208}Pb)
- The squared width of the Gaussian wave packet L is modeled as a function of nuclear mass A ;

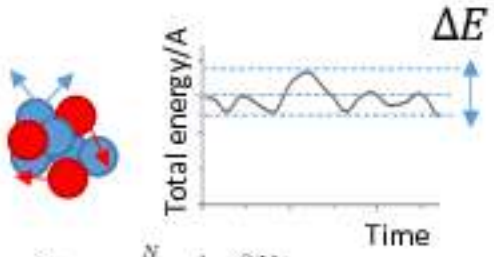
$$L = aA^{2/3} + b, \qquad (a, b) = (0.035, 0.9)$$

where the parameters (a, b) are determined to reasonably produce in NL3* [1. charge radii] of above nuclei. Therefore, the model evaluation is performed in [2. stability and 3. binding energy] with a condition that the charge radii are reproduced.

The charge radii can be reproduced within 0.2 [fm]

Result: Model evaluation with ground state properties

2. Stability



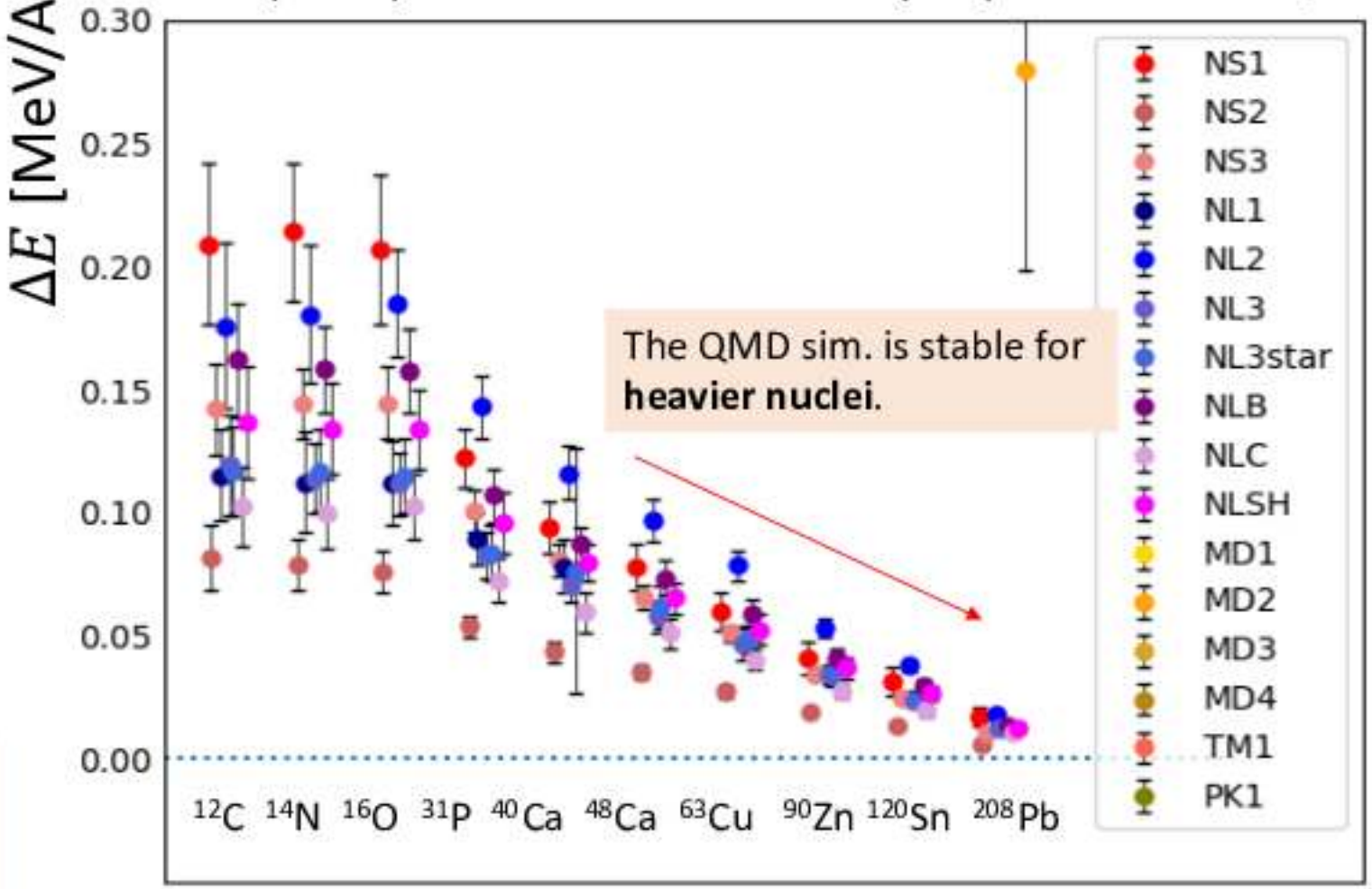
$$\frac{\boldsymbol{q}_i}{d\tau} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2p_i^{0*}} \frac{\partial K_i}{\partial \boldsymbol{p}_i}$$

$$\frac{\boldsymbol{p}_i}{d\tau} = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2p_i^{0*}} \frac{\partial K_i}{\partial \boldsymbol{q}_i},$$

To compare the fluctuation of binding energy, ΔE (which is the difference between the maximum and minimum binding energy during 100 [fm/c]) is monitored.

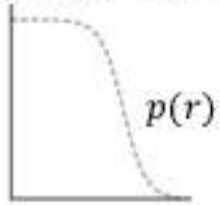
The models with relatively **small incompressibility** such as **NS2** (210 MeV) and **NLC**(224 MeV) are stable in the time evolution.

Mean (circles) and the standard deviation (bars) with **100 times QMD sim.**



Result: Model evaluation with ground state properties

3. Binding energy



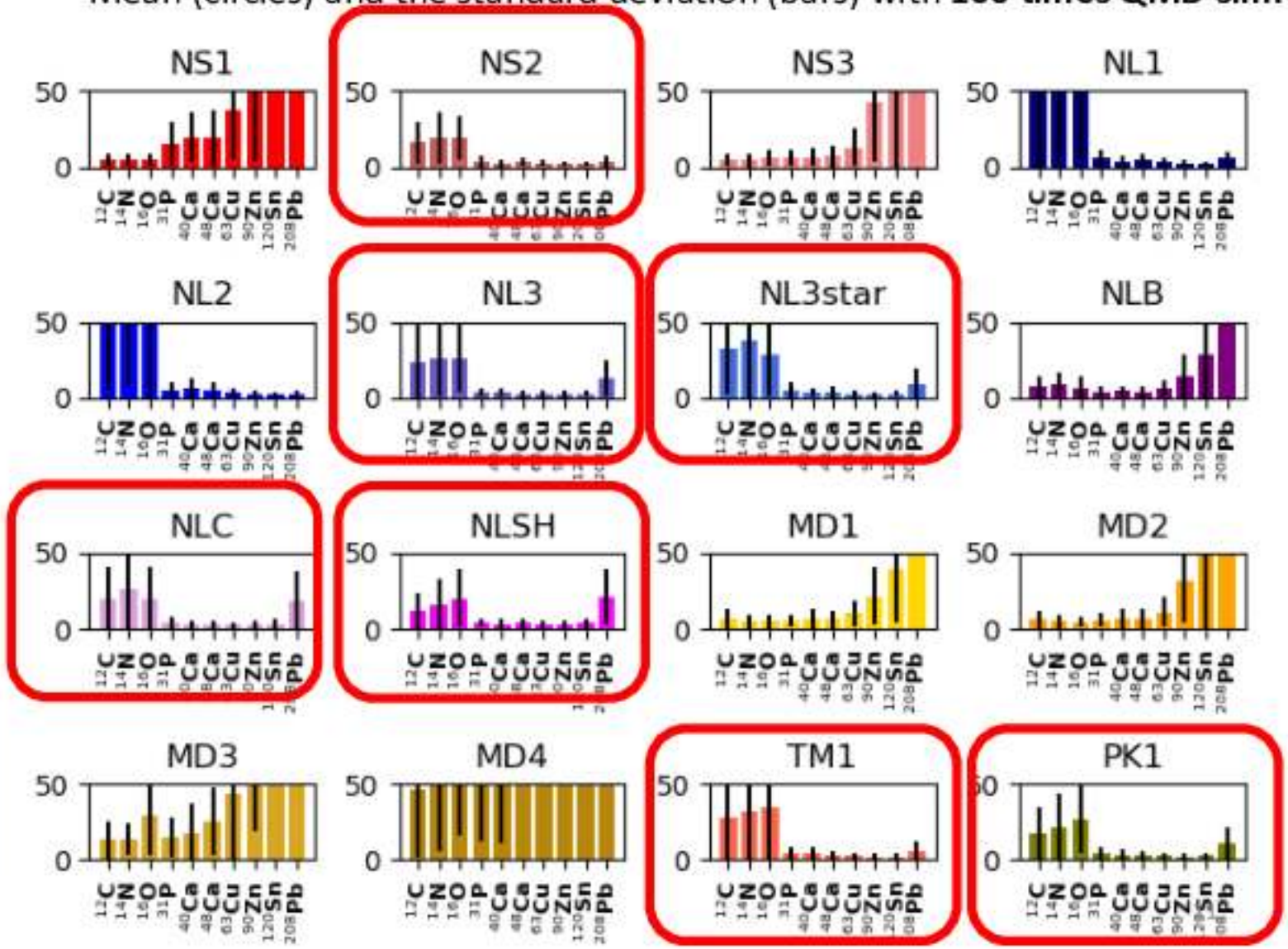
$$p(r) \propto \frac{1}{1+e^{(r-c)/w}}$$

To compare the binding energy just after the sampling from Wood-Saxon (WS) profile (parameters are modeled as a function of (Z,A)) with the experimental data.

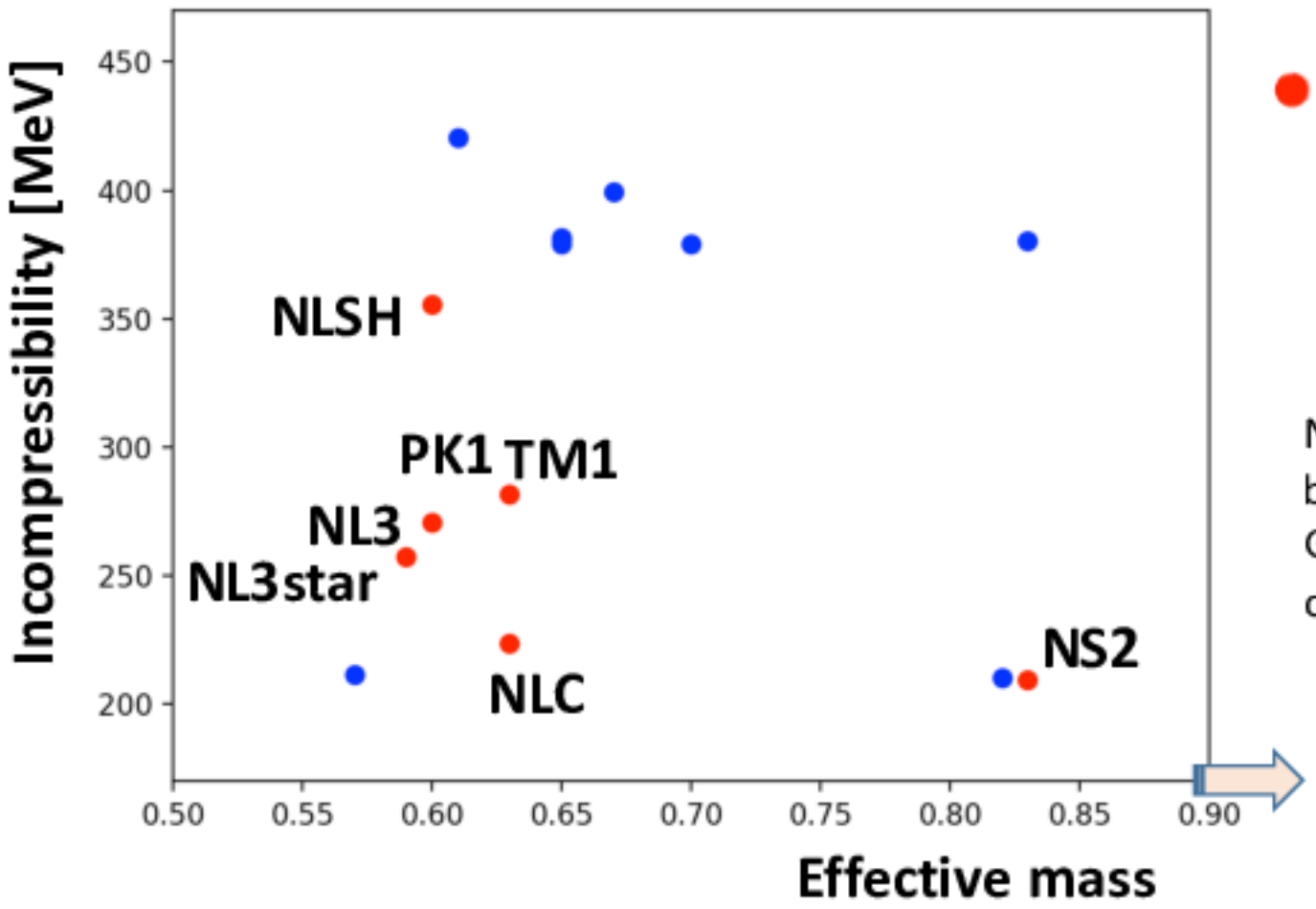
If the absolute difference is **less than 0.5 MeV/A**, the sampling is judged to be a "success". The number of trials to obtain the "success" result is counted.

The less trials means the nuclear binding energy can be reproduced with the position sampling from WS shape efficiently.

Mean (circles) and the standard deviation (bars) with **100 times QMD sim.**



Model evaluation with ground state properties



- the nuclear binding energy can be reproduced with the position sampling from WS shape efficiently for whole nuclear mass range.

Namely, in these parameter sets, the reasonable binding energy can be given from the width of the Gaussian wave packet L yielding the reasonable charge radius.

- lower incompressibility
- independent of effective mass

Short summary in ground state properties

- The relativistic mean field (RMF) models can create the ground state nuclei for a wide mass range in QMD simulation 👍.

NS2 parameter set seems to be most stable. ➡ Use for fragmentation analysis

- The stability analysis in time evolution showed that the parameter sets with relatively small incompressibility maintain the binding energy within 0.1 MeV for time range of 100 [fm/c].

- The binding energy is also reasonable by position sampling from Wood-Saxon profile modeled with (Z, A).

Fragmentation analysis

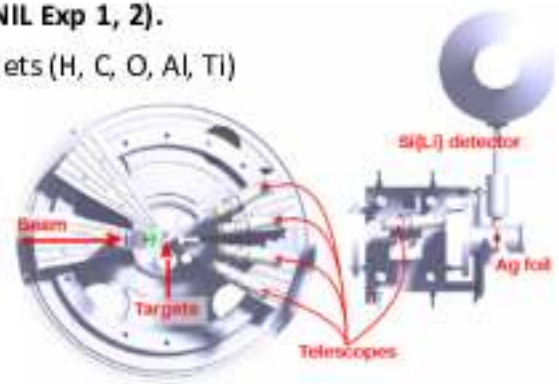
- To compare fragmentation simulated in QMD with experimental data[1-3)]

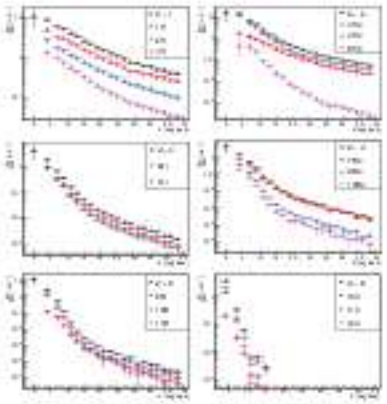
1) C. Divay et al., Phys. Rev. C **95**, 044602 (2017).
2) J. Dudouet et al., Phys. Rev. C 88, 024606 (2013).
3) C. Zeitlin, et al., Phys.Rev.C **76**, 014911 (2007).

Experiments

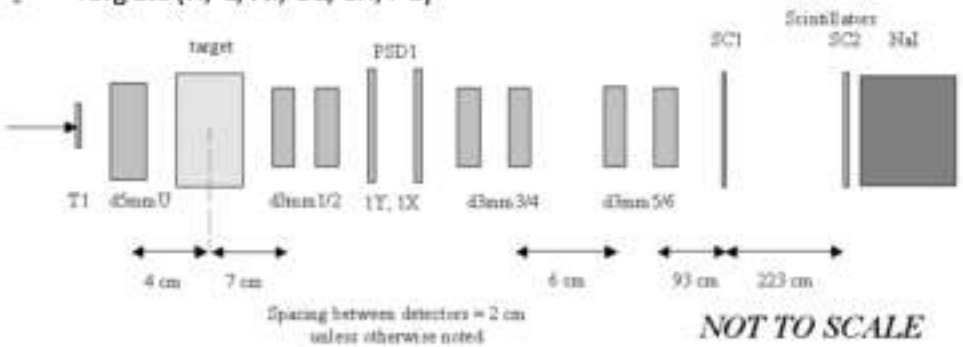
Carbon ion beam
50 MeV/u[1)] , 95 MeV/u[2)] , → differential cross section, total cross section
290 MeV/u[3)] , 400 MeV/u[3)] , → total cross section (limited angle range)

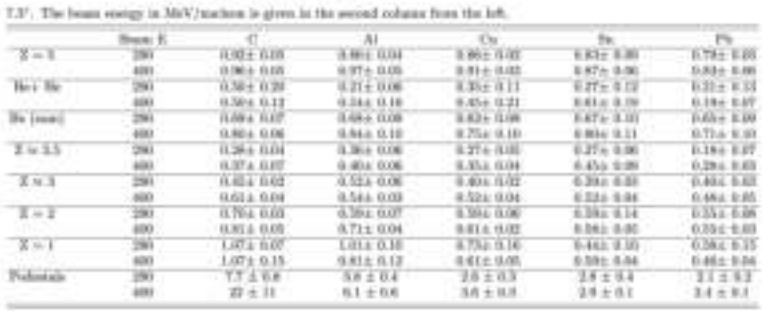
GANIL Exp 1, 2).
Targets (H, C, O, Al, Ti)





HIMAC Exp 3).
Targets (H, C, Al, Cu, Sn, Pb)

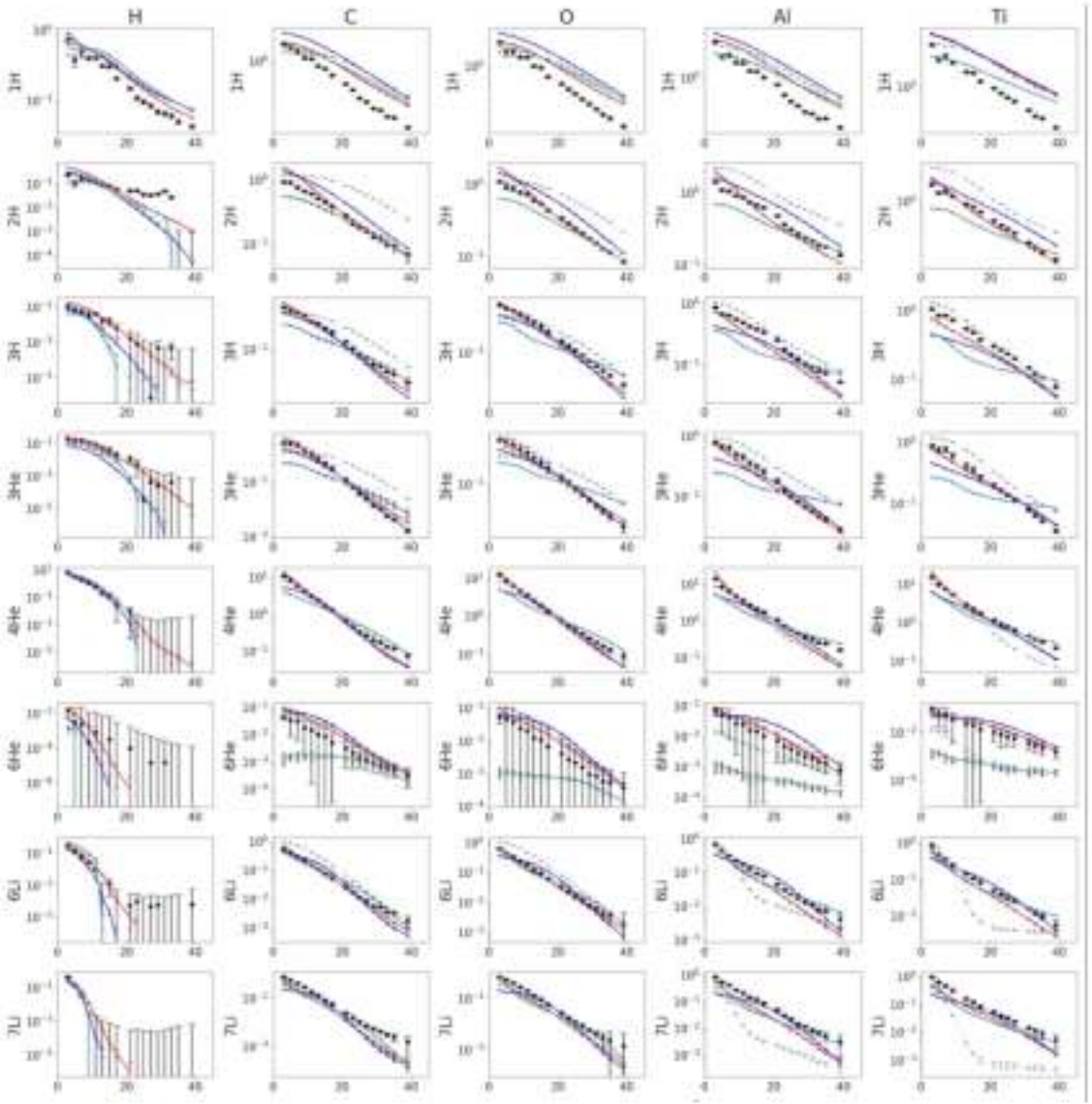




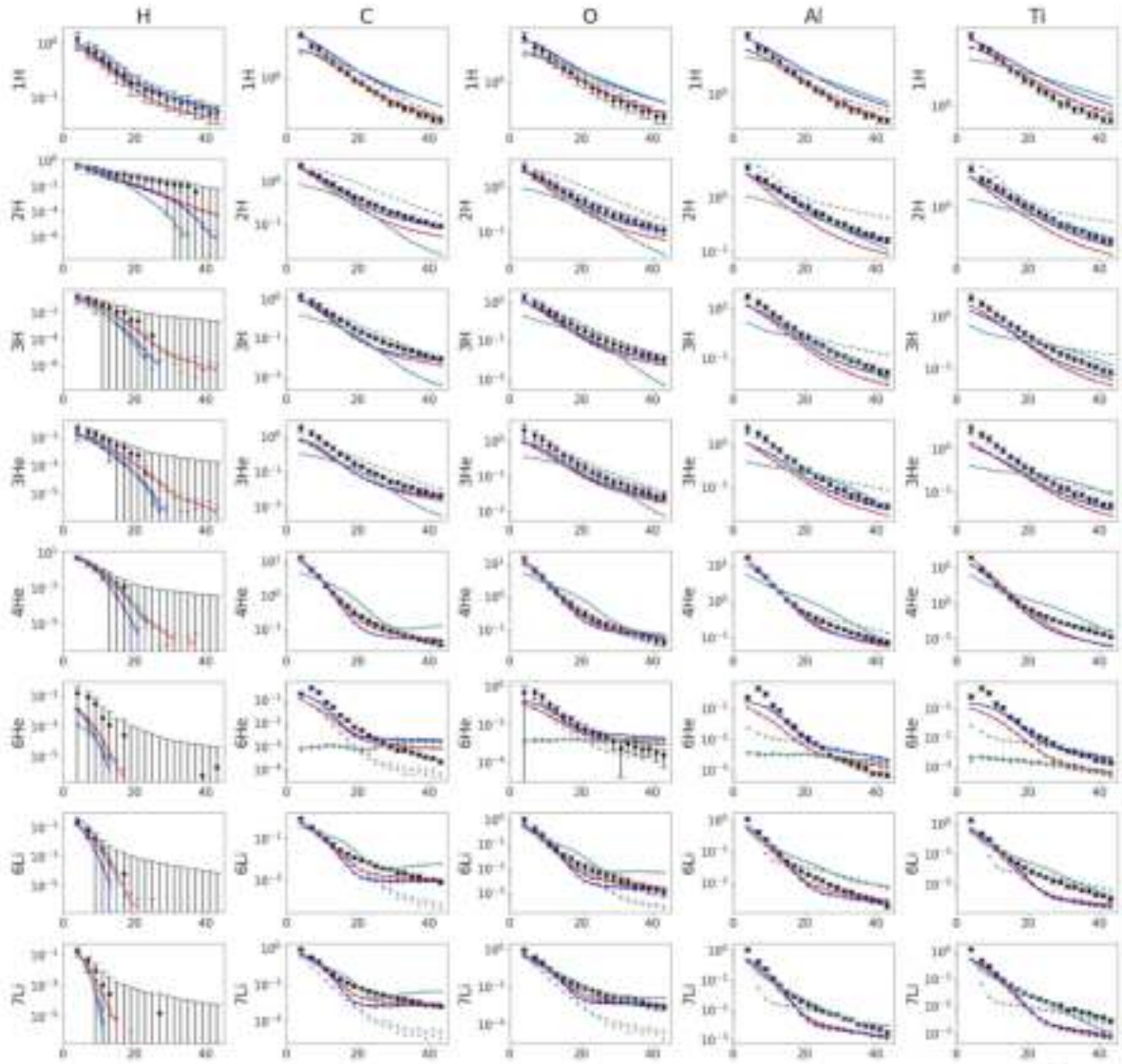
RQMD.RMF simulation

RMF model parameter: **NS2**
Parameter tuning R = 4 [fm], T_max ~ 60 [fm/c] (event 10^7)
b_max = b_sigma * 1.2 (for light nuclei)
* 1.05 (for others)

Carbon ions 50 MeV/u

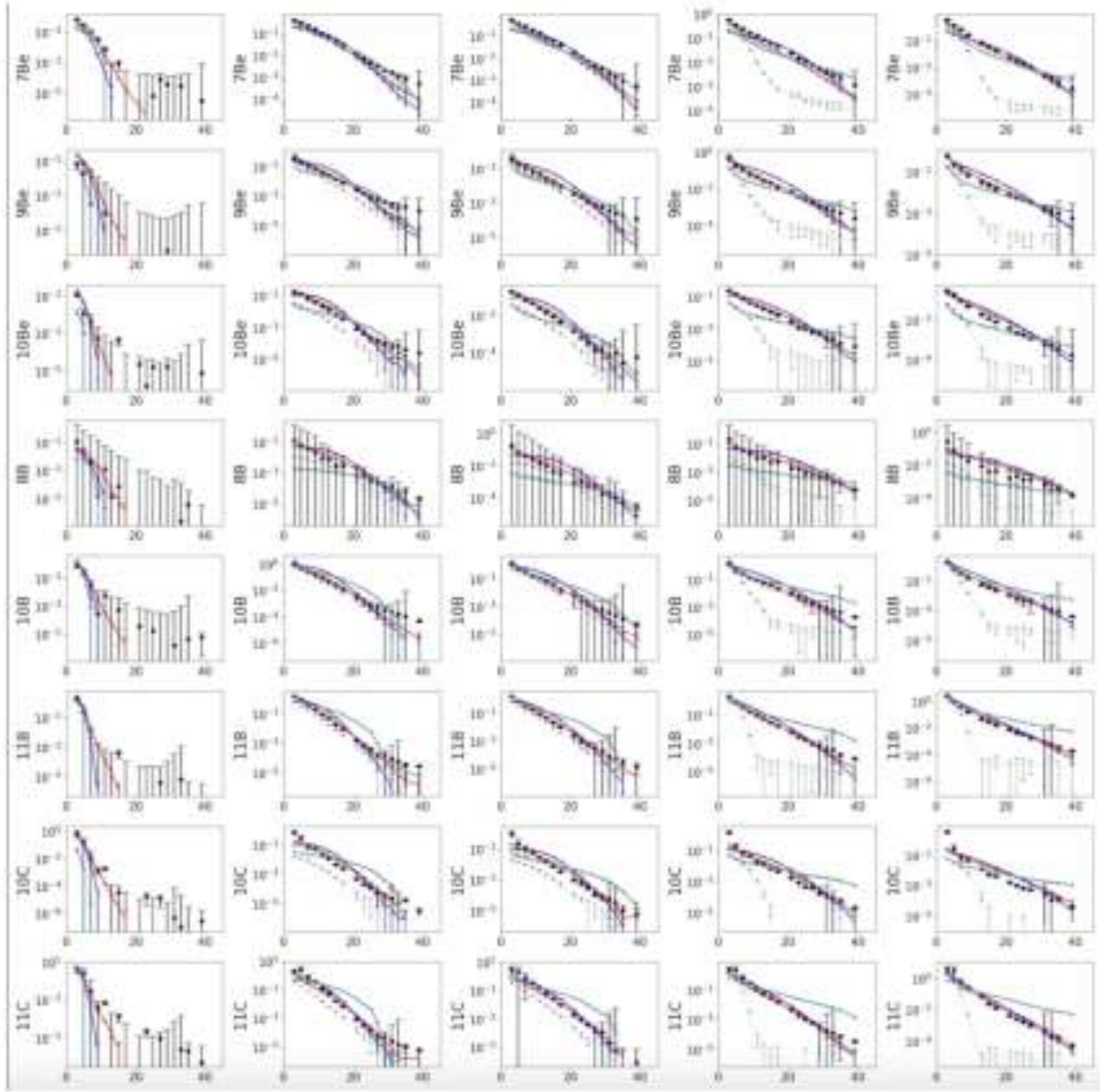


Carbon ions 95 MeV/u

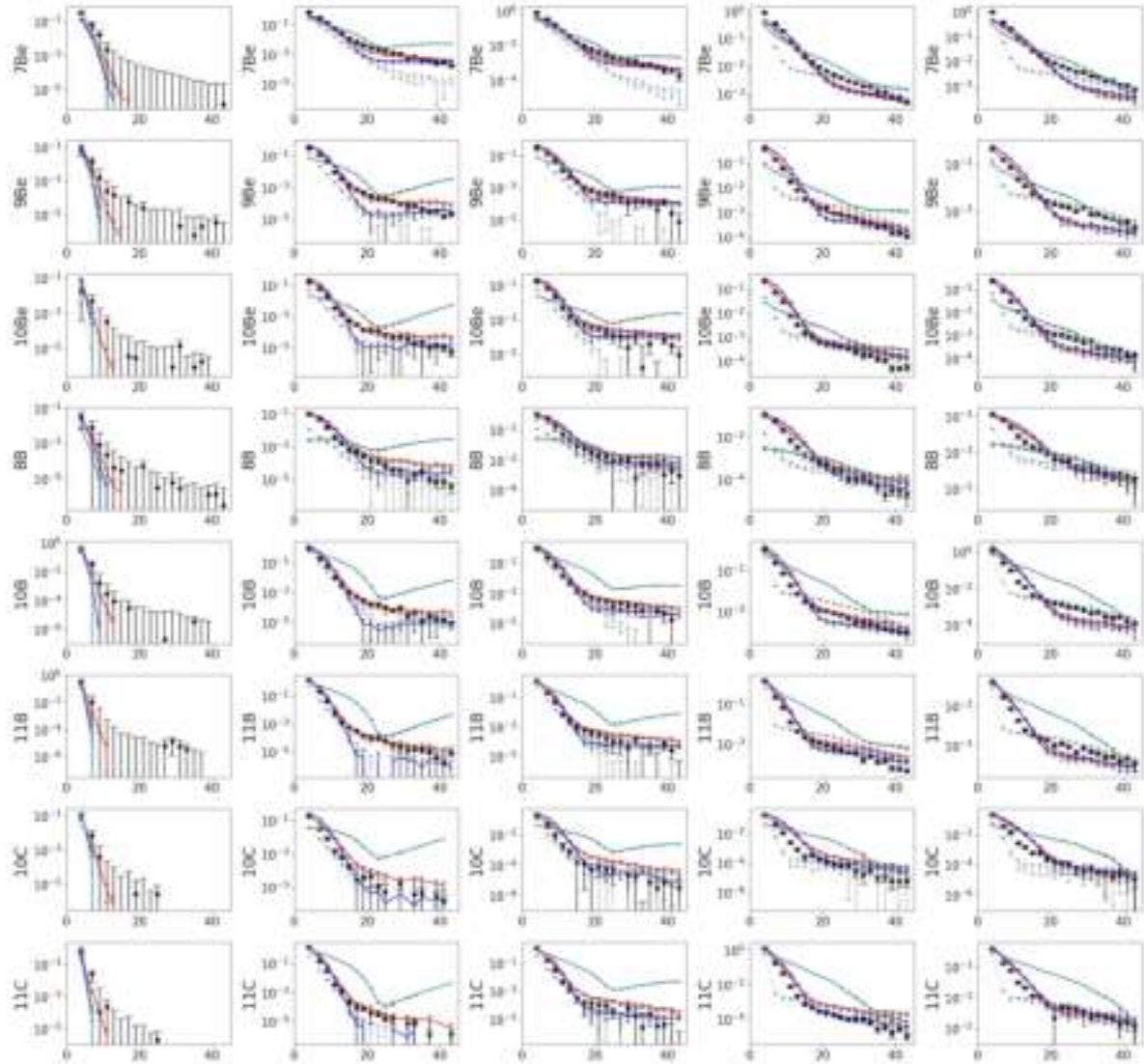


Exp.
RQMD.RMF(NS2)
LIQMD
BIC
INCL

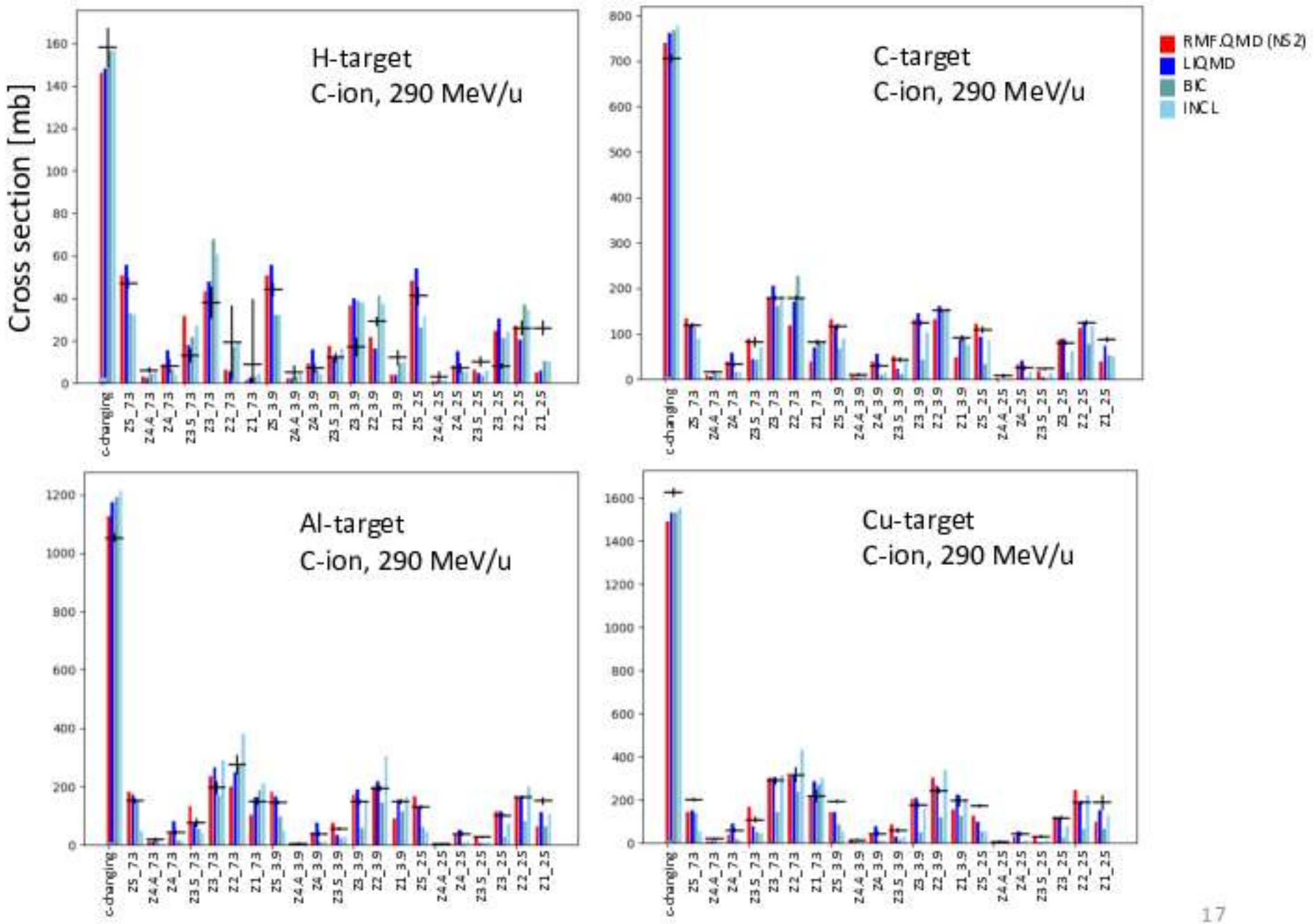
Carbon ions 50 MeV/u



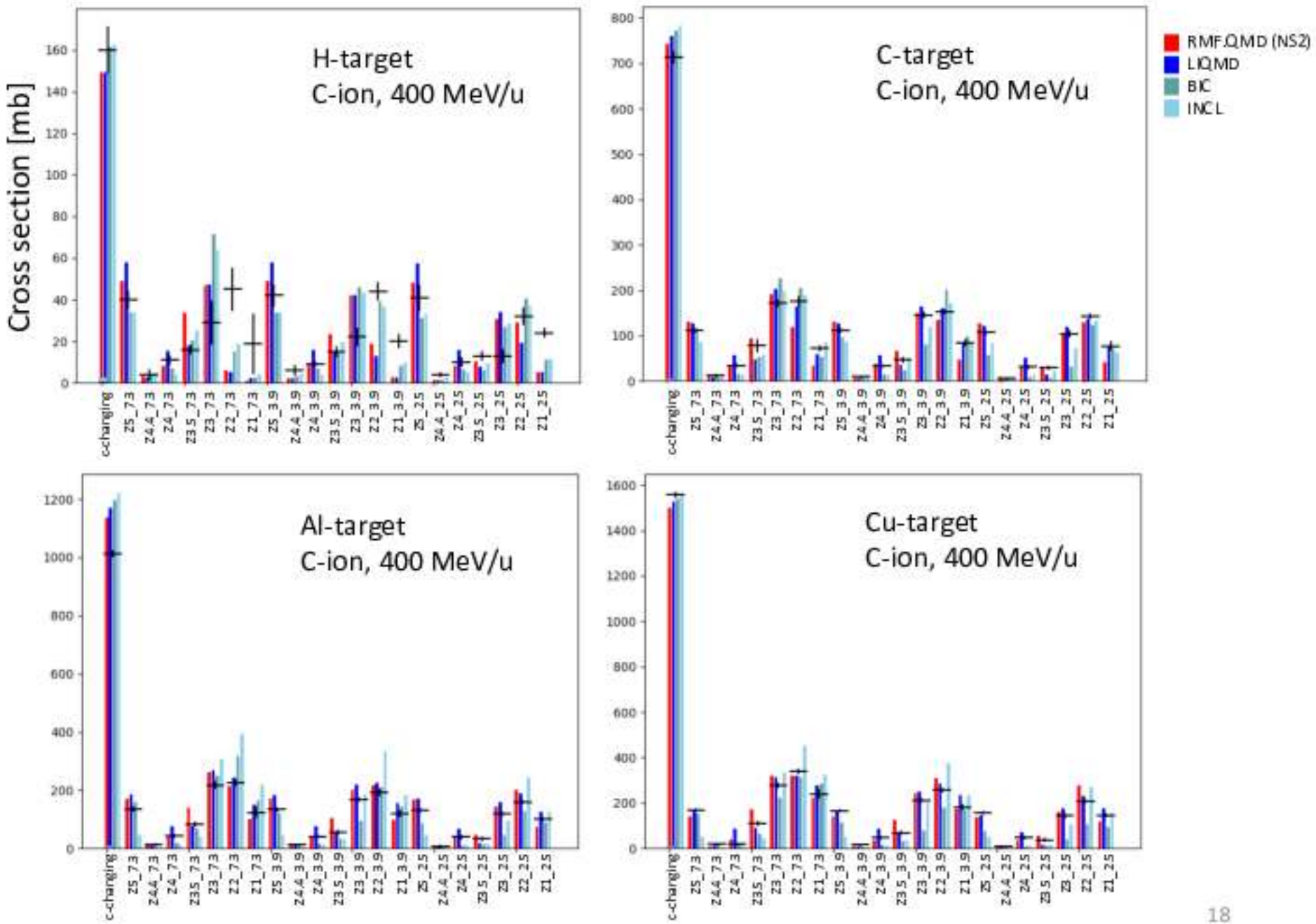
Carbon ions 95 MeV/u

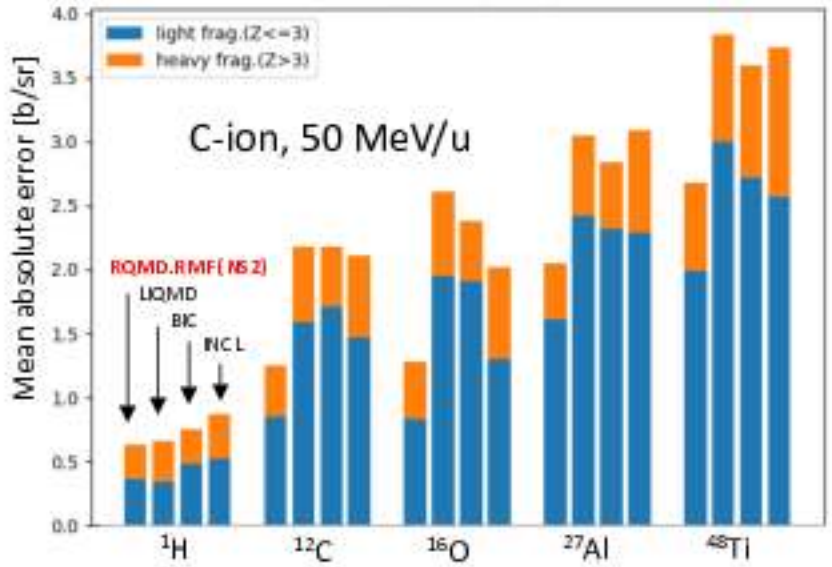


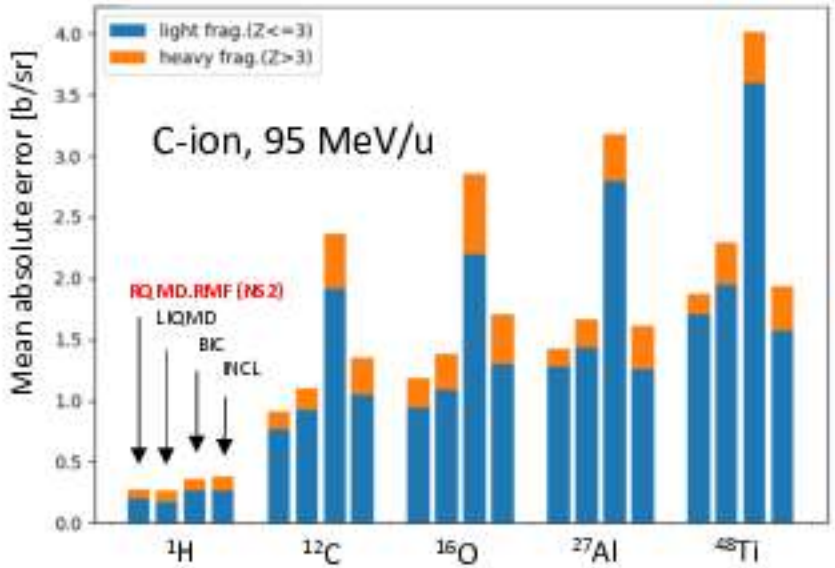
Details
290 MeV/u

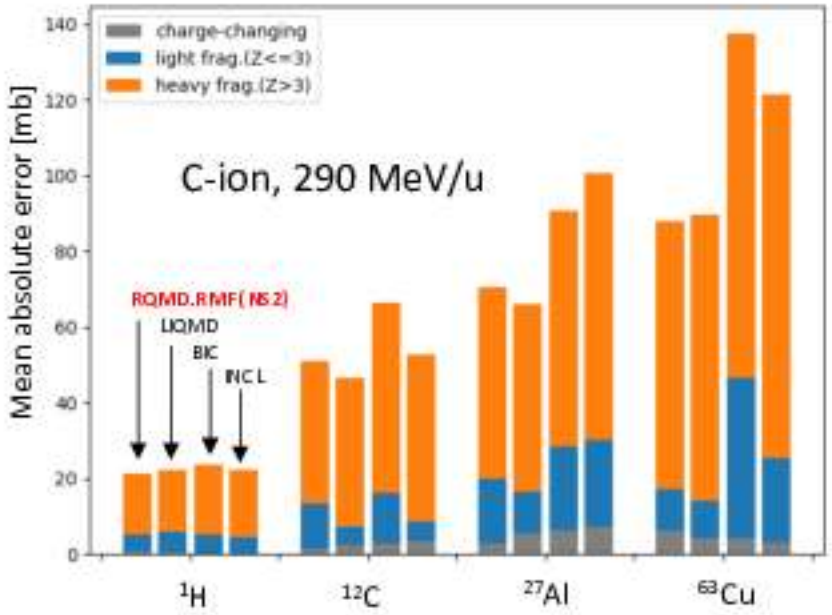


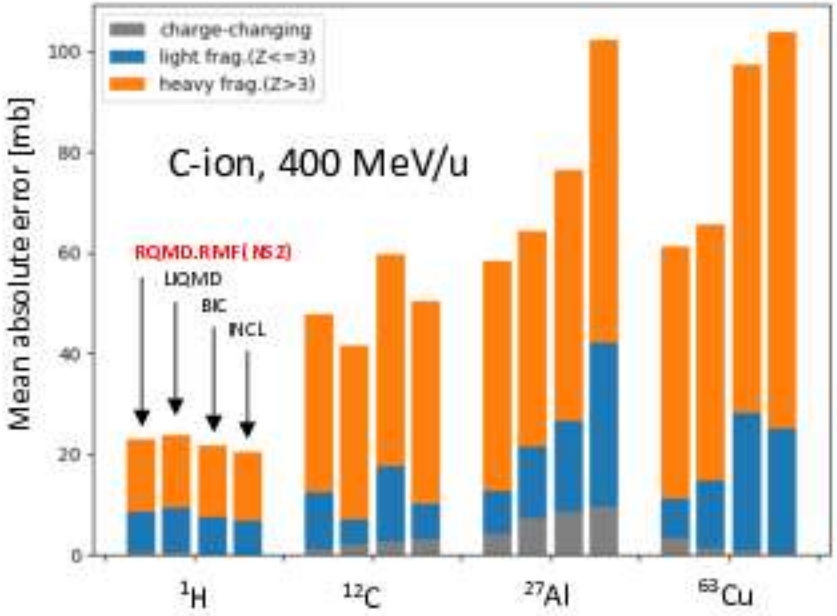
Details
400 MeV/u




C-ion, 50 MeV/u
Mean absolute error [b/sr]
light frag.(Z<=3)
heavy frag.(Z>3)
RQMD.RMF(NS2)
LIQMD
BIC
INCL
1H
12C
16O
27Al
48Ti


C-ion, 95 MeV/u
Mean absolute error [b/sr]
light frag.(Z<=3)
heavy frag.(Z>3)
RQMD.RMF(NS2)
LIQMD
BIC
INCL
1H
12C
16O
27Al
48Ti


C-ion, 290 MeV/u
Mean absolute error [mb]
charge-changing
light frag.(Z<=3)
heavy frag.(Z>3)
RQMD.RMF(NS2)
LIQMD
BIC
INCL
1H
12C
27Al
63Cu


C-ion, 400 MeV/u
Mean absolute error [mb]
charge-changing
light frag.(Z<=3)
heavy frag.(Z>3)
RQMD.RMF(NS2)
LIQMD
BIC
INCL
1H
12C
27Al
63Cu

Summary

- RQMD.RMF model can simulate the fragmentation very well for hadron therapy energy range and considering target mass range.

- This study shows that the RQMD.RMF model give us a valuable framework for advancing the precision and effectiveness of hadron therapy.

- The present study used only NS2 parameter set for fragmentation analysis. However, other parameter sets are also applicable for the various research purposes. This model is expected to be implemented in the next future release of Geant4 version.

PHITSを用いた
フォトンカウンティングCT検査の
臓器被ばく線量計算について

齊藤柚季(1), 古場裕介(2), 張維珊(1), 勝沼泰(3), 吉田亮一(3), 平井悠大(1), 眞正浄光(1)

(1)東京都立大学　(2)量子科学技術研究開発機構　(3)東海大学医学部付属病院

目次

背景と目的　CT検査での被ばく

他国に比べCT検査が多い
CT検査は1回の線量が高い

患者の被ばく線量評価、管理が重要！

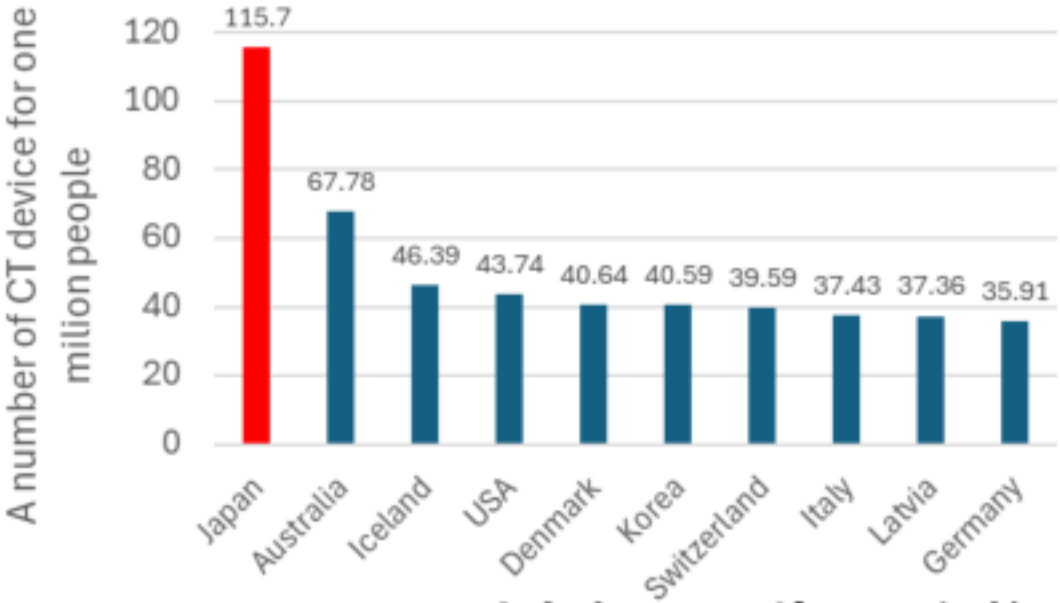


図１ 人口100万人当たりのCT装置の台数
（OECD 2022）

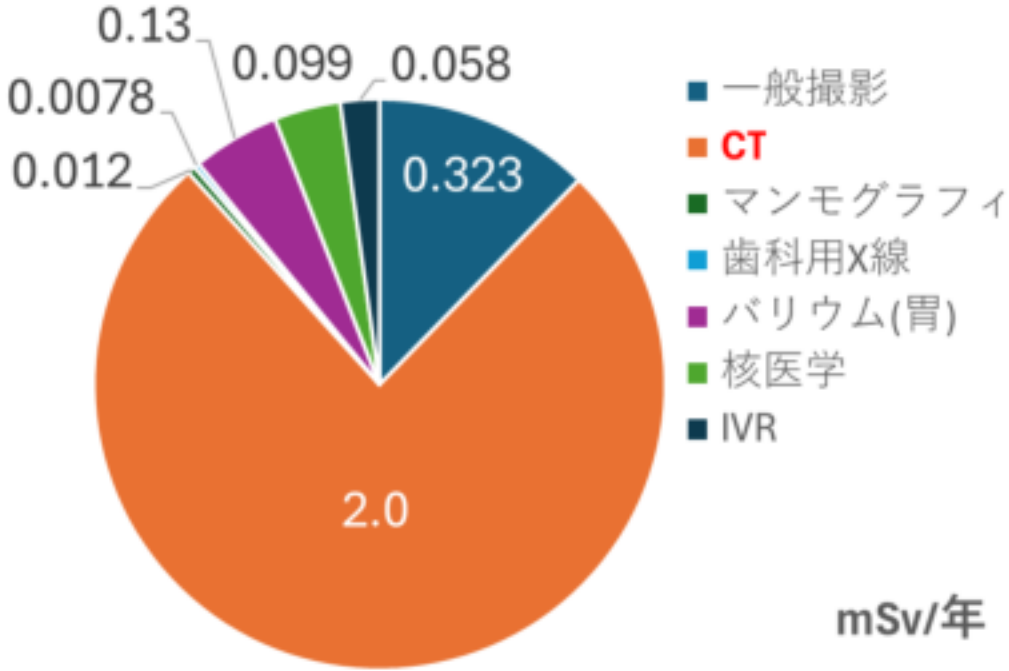


図2　検査ごとの国民1人当たりの平均実行線量
（生活環境放射線（国民線量の算定）第3版 2020）

背景と目的　WAZA-ARIについて

Waza-ari
-A web-based CT dose calculator-
WAZA-ARIv2
- CT撮影による被ばく線量を評価するWEBシステム -

計算用人体ファントムを使用したPHITSでの計算結果を利用し、実際の撮影条件を入力して臓器被ばく線量を計算する。

- □CT装置のメーカー、機種
- □フィルタ
- □管電圧
- □回転時間
- □ピッチファクタ
- □性別、体型
- □AEC　　など

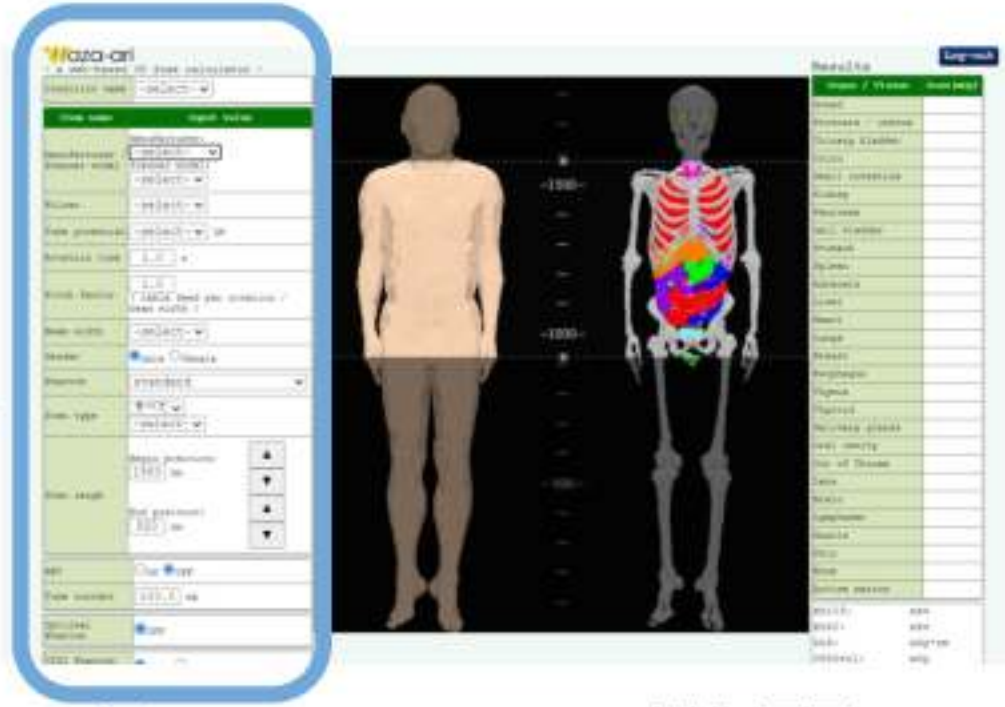


図３ WAZA-ARIv2の操作画面

背景と目的　WAZA-ARIについて

- ファントムボクセル：1 mm x 1 mm x 1 mm
- カットオフエネルギー：光子1 keV 、電子10 keV
- 1スライスのビーム幅：5 mm
- スライス数：95(0歳男女)から367(成人男性)
- 光子発生数：200,000から300,000 x 10 baches/slice

背景と目的　フォトンカウンティングCTについて

NAEOTOM Alpha(Siemens Healthieers社)

- フォトンカウンティングCTでは唯一の販売機種
- 検出器に**CdTe半導体検出器**を利用している

従来のCT装置(**エネルギー積分型検出器CT**)よりも

- X線利用効率が良い
- 低線量で高画質

NAEOTOM Alphaの外観

https://www.siemens-healthineers.com/jp/computed-tomography/naeotom/naeotom-alpha　より引用

背景と目的

近年低線量で高分解能の画像が撮影可能なフォトンカウンティングCT装置が注目されているが、被ばく評価は**CTDI**のみ

↓

フォトンカウティングCT装置での**臓器被ばく線量**を計算したい！

↓

CT装置によって発生するX線の線質や分布は異なるため
フォトンカウンティングCT装置固有の線源モデルが必要

方法１　線源データの取得

図2のように治具に乗せた検出器を傾けながら、X線のエネルギー別の**吸収線量[mGy]**および**Al半価層[mm]**の**左右分布**を4回測定した。

照射・測定条件

- X線管位置：270°固定
- **管電圧：80, 90, 100, 120, 140 kV**
- 管電流：200 mAs
- ビーム幅：144 x 0.4 mm
- シェイプフィルタ：スタンダード
- スペクトルフィルタ：なし
- **測定位置：ボア中心高さで水平方向に3°毎になる位置(θ = 0°から21°)**

図4　半導体検出器Piranha (RTI社),CT装置NAEOTOM Alpha (Siemens Heltheneer社)および測定体系

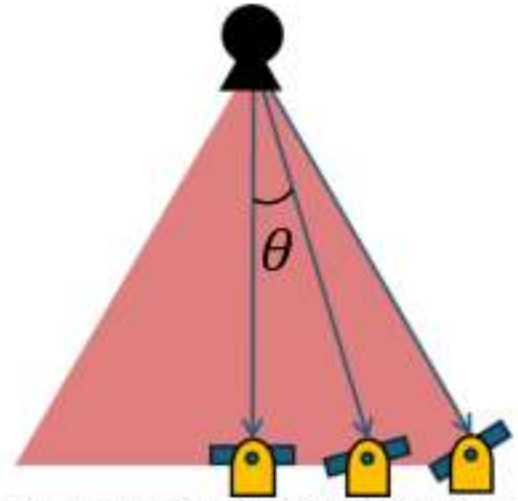


図5　左右方向の線量分布測定の様子

結果1　取得した線源データ

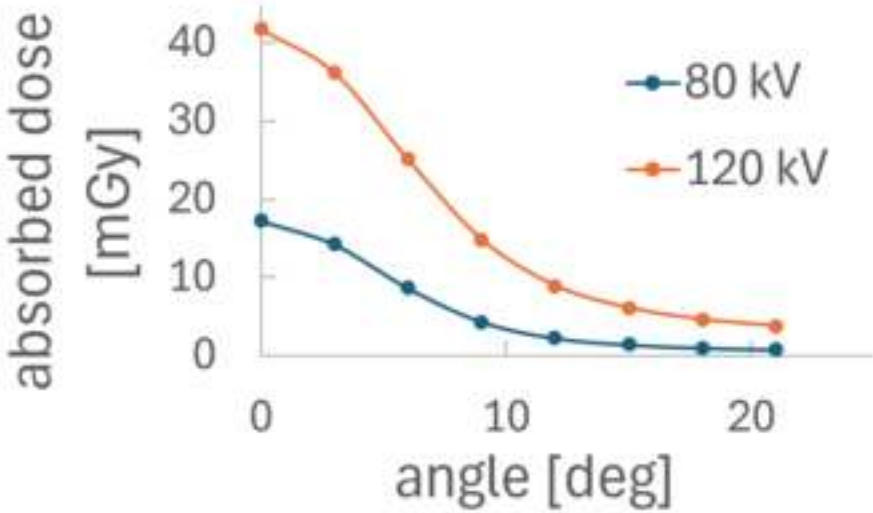


図6　測定角度と吸収線量の関係

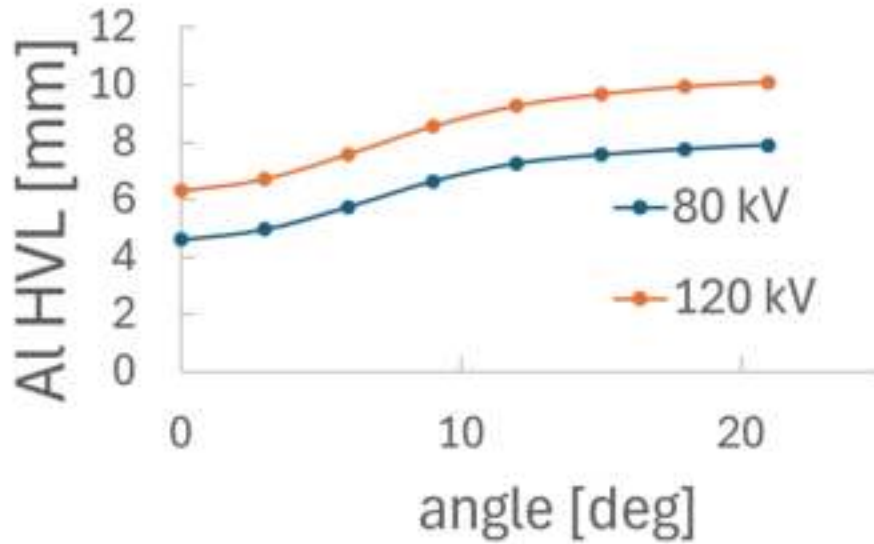


図7　測定角度とAl半価層の関係

- 吸収線量は角度が大きくなるほど小さくなった。
- Al半価層は長くなり実効エネルギーが高くなった。

Bow-tieフィルタにより、左右方向の分布の外側ではX線が通過するAlが厚いため。

方法2　線源モデルの作成

線源モデル

1. エネルギースペクトル
   → **X線の線質**(Al半価層や総ろ過)

2. Bow-tieフィルタの形状
   → 水平方向の**線量分布**

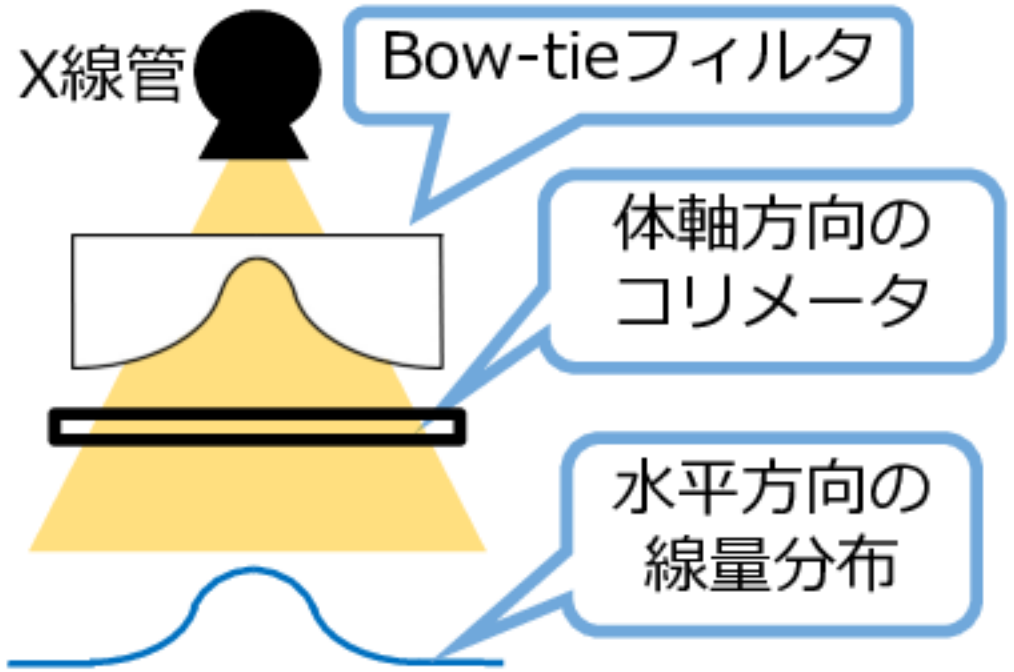


図8　CT装置のX線管の構造

方法2　線源モデルの作成

1. 線質

中心軸のAl半価層から**Bow-tieフィルタの中心軸のAl厚**を決定

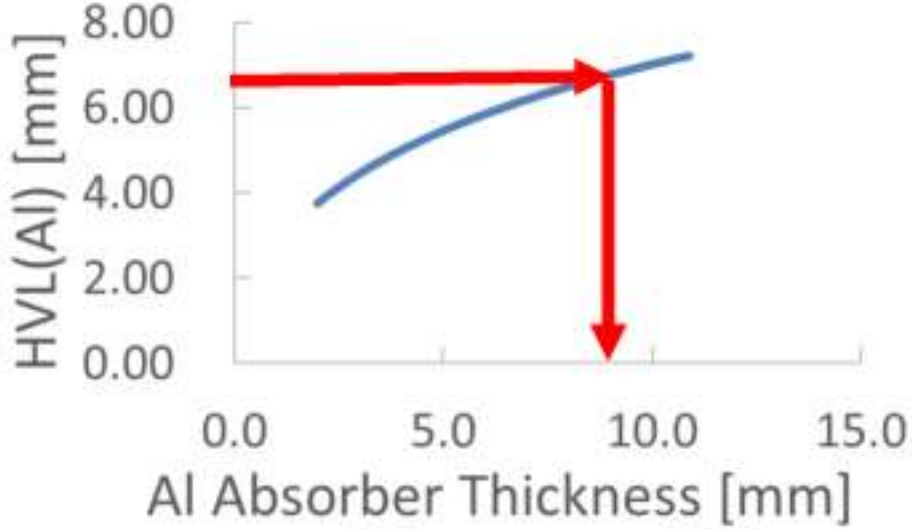


図9　Al半価層とAl厚関係

Bow-tieフィルタの中心軸の厚さから**エネルギースペクトル**を計算[1)]

ref. 1) XCOMP5R ref. R. Nowotny, A. Hyfer, Ein (1985)

2. 左右方向の線量分布

実測結果からX線束の傾きθに対するBow-tieフィルタ厚さを計算

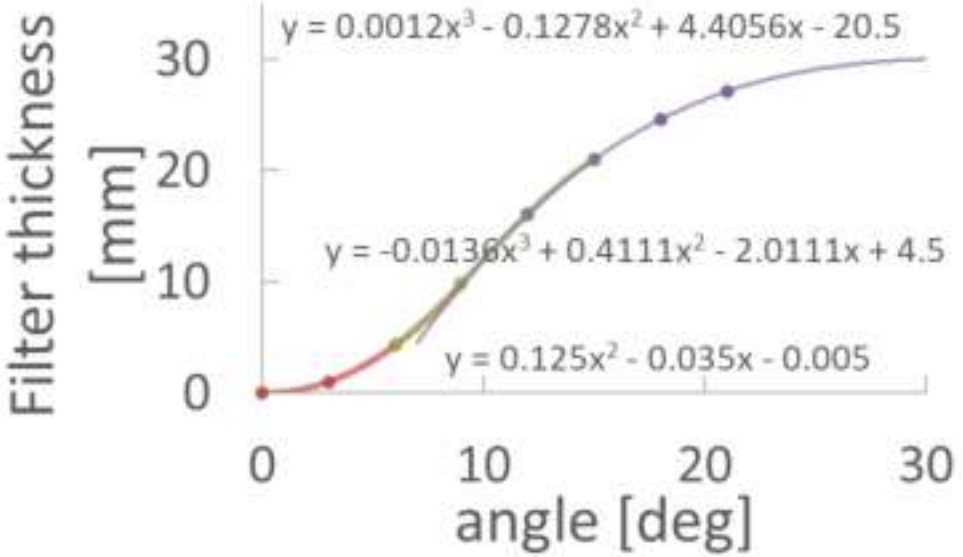


図10　測定位置と2次フィルタ厚

適当な関数でフィッティングして**Bow-tieフィルタの形状**を推定

結果2　作成した線源モデル

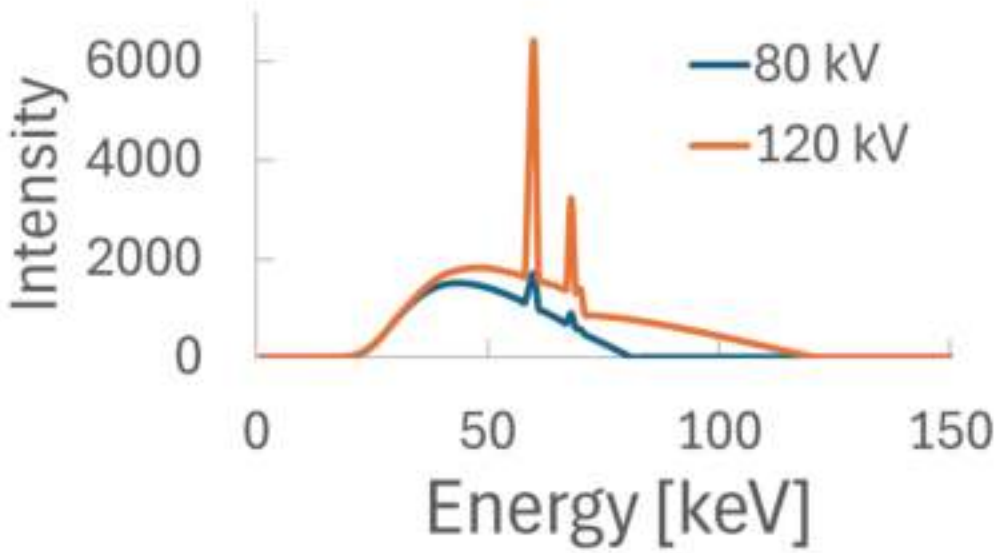


図11　線源モデルのエネルギースペクトル

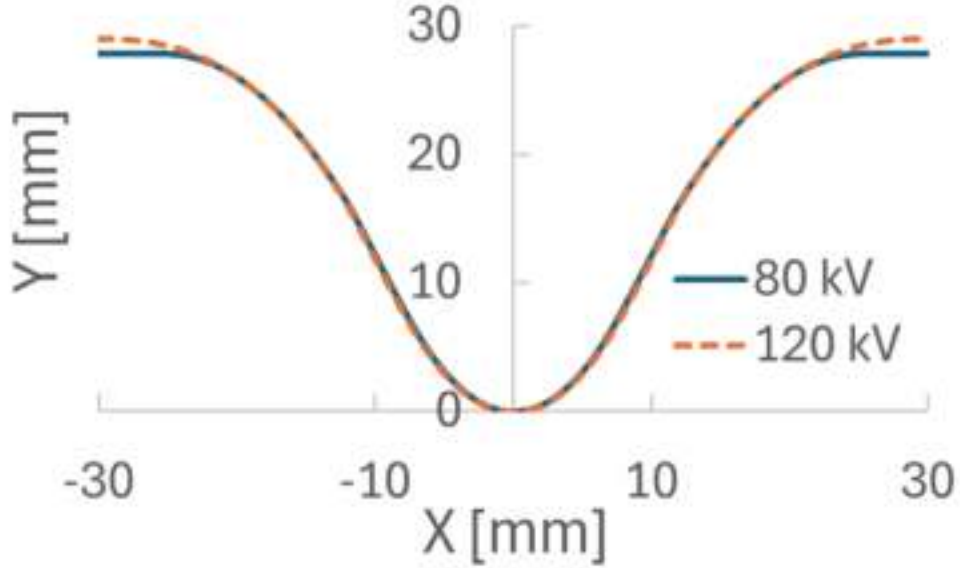


図12　推定したBow-tieフィルタの形状

方法3　PHITSを用いた線源モデルの検証

作成したBow-tieフィルタの形状などをもとに、
PHITSにて中心軸のエネルギースペクトルや左右方向の線量分布を計算した。

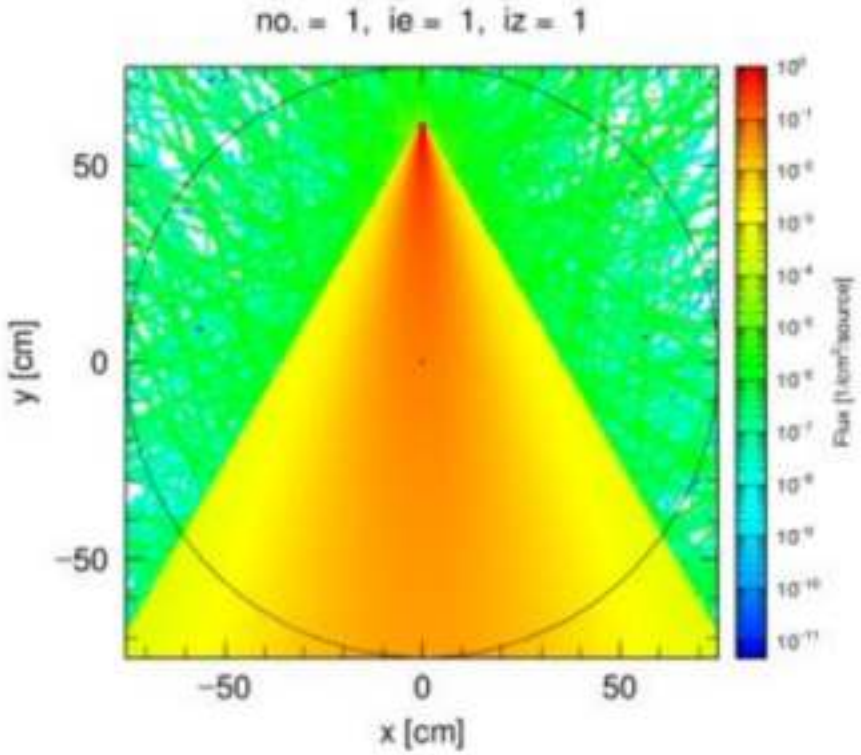
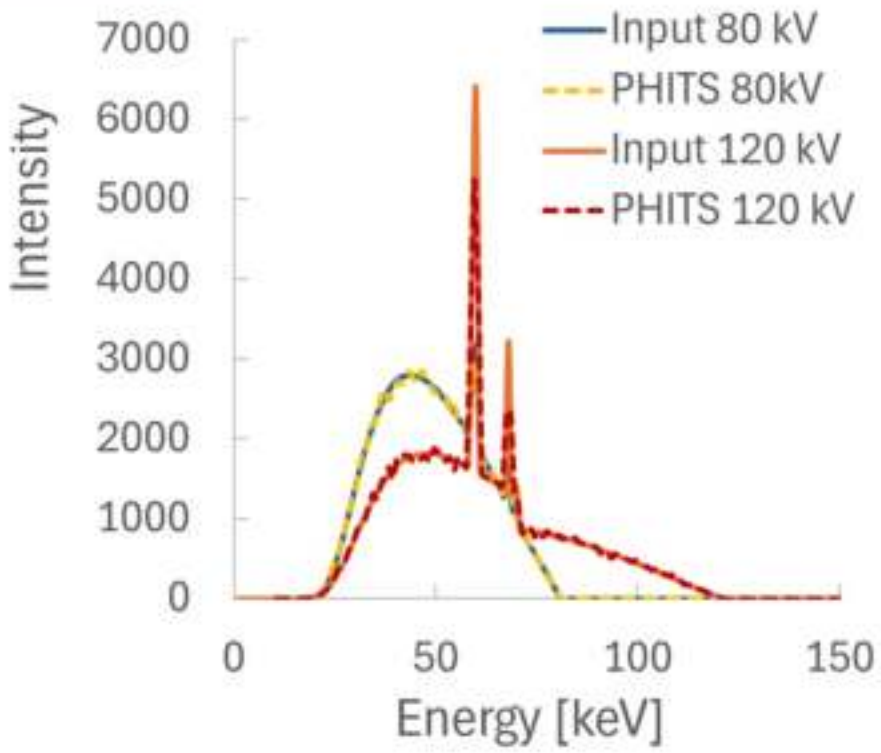


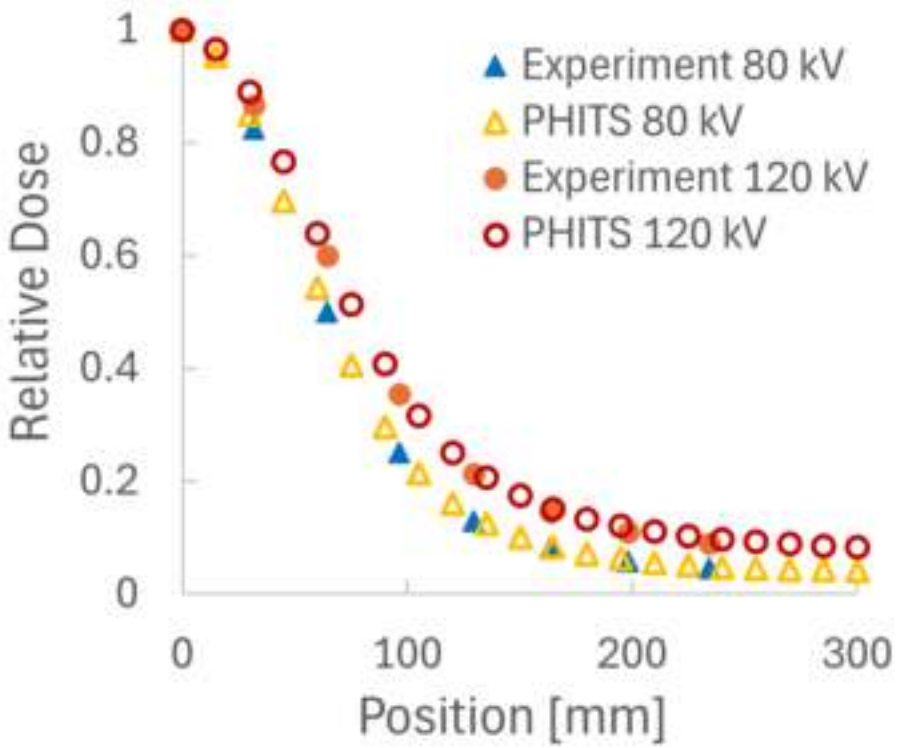
図14　PHITSでの線量分布計算

実測値とPHITSの計算結果を比較
線源モデルが実際の線源を再現できているかを確認

結果3　PHITSでの検証結果



(a)エネルギースペクトル

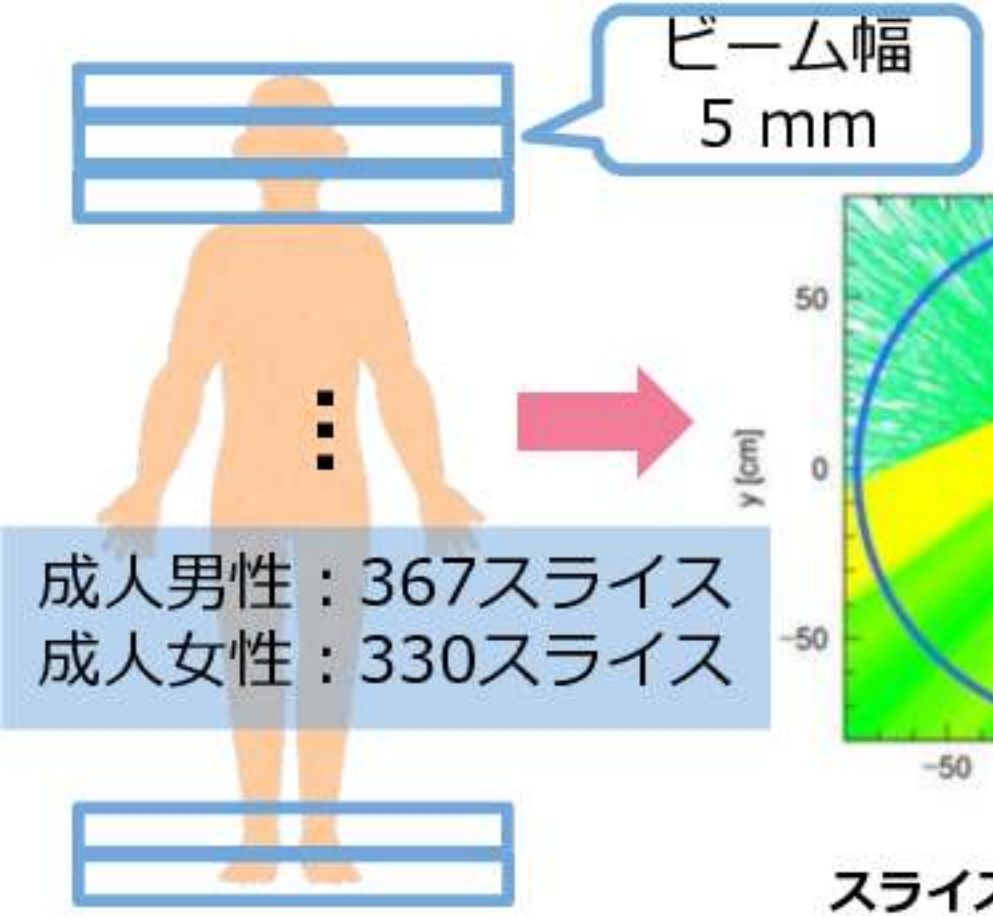


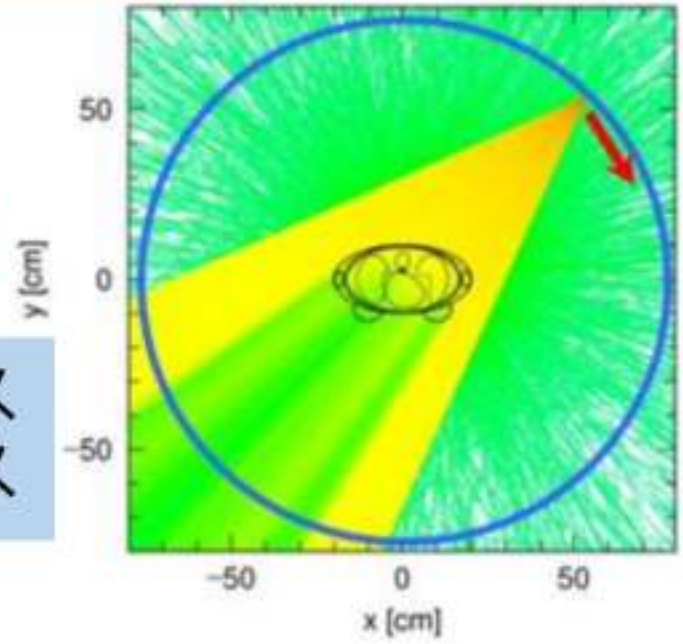
(b) 水平方向の線量分布

図15　実測値とPHITSの計算結果の比較

方法4　臓器被ばく線量計算

線源モデルと計算用人体ファントムを用いて、
成人の男女におけるCT検査での臓器被ばく線量を計算した。





スライス毎にPHITS計算

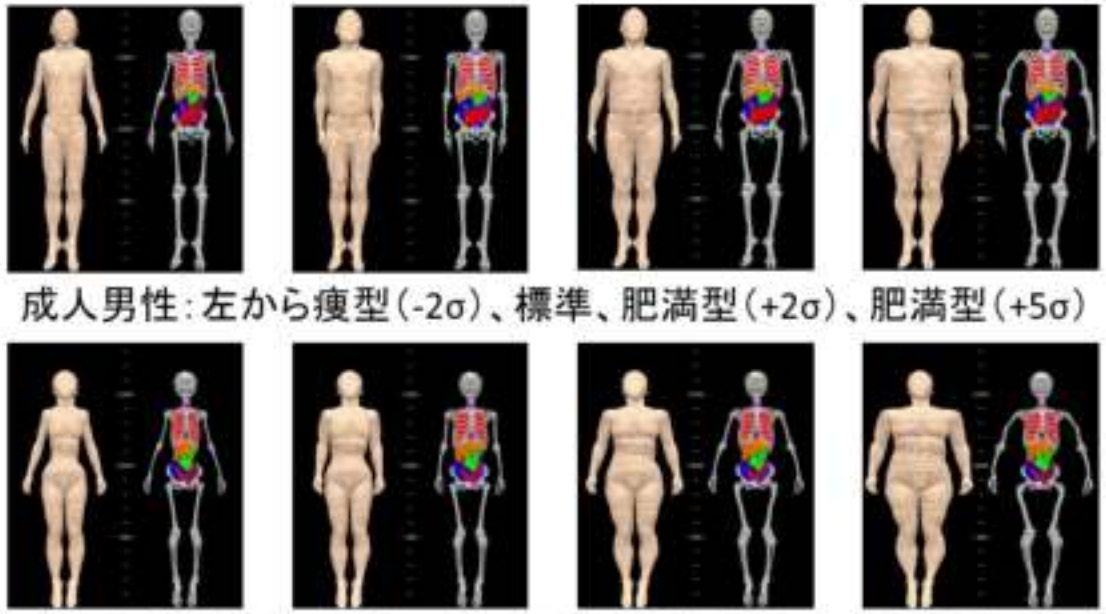


図16　使用した計算用人体ファントム(JM、JF)[2)]

ref. 2) K. Sato, et al., Radiat. Prot. Dosim. Vol. 123, No. 3, 337-344, 2007

結果4　臓器被ばく線量の計算結果

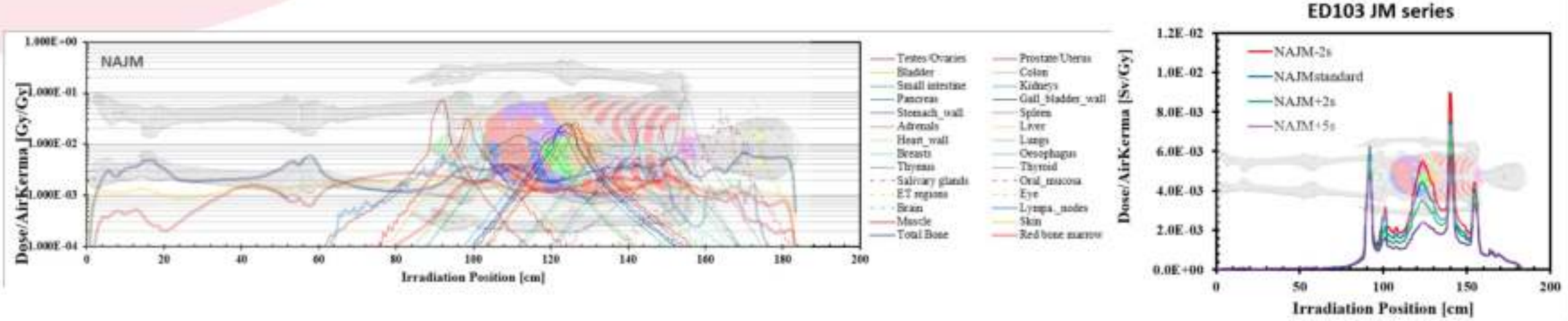


図17　成人男性の臓器被ばく線量

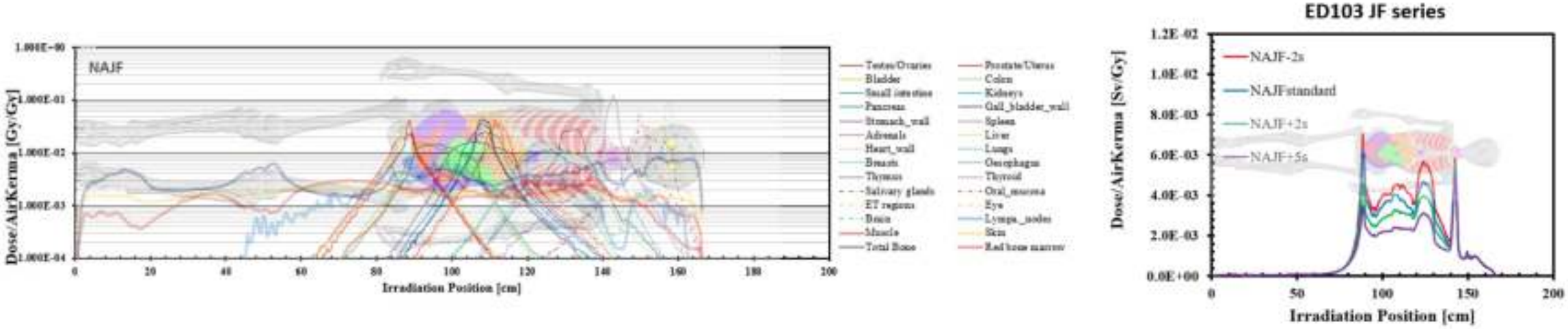


図18　成人女性の臓器被ばく線量

実際の線量を計算する場合

Relation of $D(T,K)$

$$D(T,K)[\mathrm{mGy}]$$

$$= {}_nD(T,K)[\mathrm{mGy/mGy}] \cdot {}_nCTDI_{free\ air}[\mathrm{mGy/mAs}] \cdot \frac{I \cdot t}{pitch}[\mathrm{mAs}]$$

${}_nD(T,K)[\mathrm{mGy/mGy}]$: Dose per Air Kerma of the tissue(T) at slice position(K)

${}_nCTDI_{free\ air}[mGy/mAs]$: $CTDI_{free\ air}$ per mAs values.

$$\frac{I \cdot t}{pitch} = 1 \quad \Rightarrow \quad CTDI_w = CTDI_{vol}$$

$CTDI_{vol}$当たりの線量

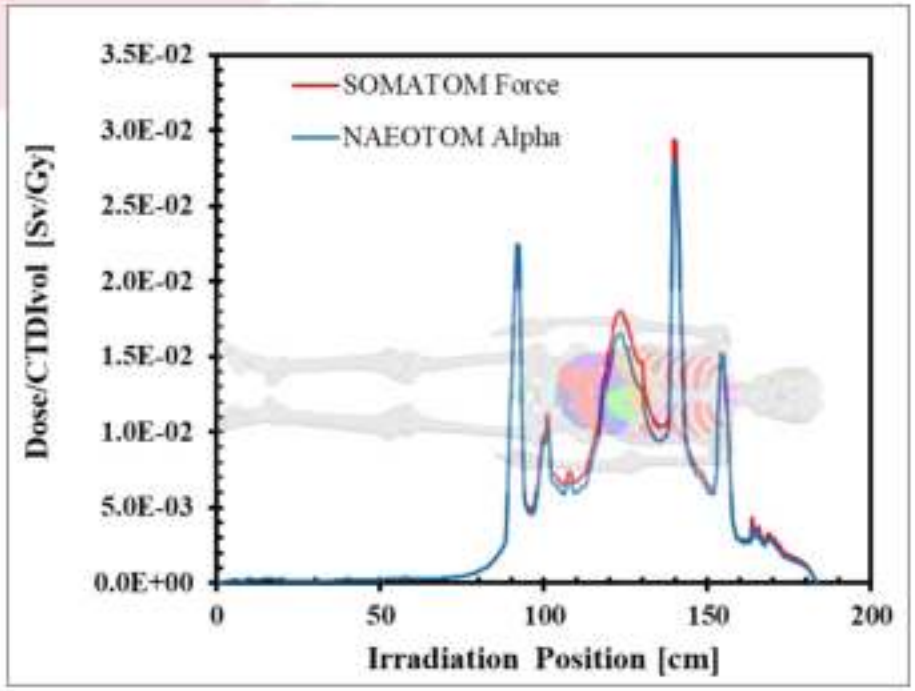


図19　標準体型の成人男性の$CTDI_{vol}$当たりの被ばく線量[Gy/Gy]

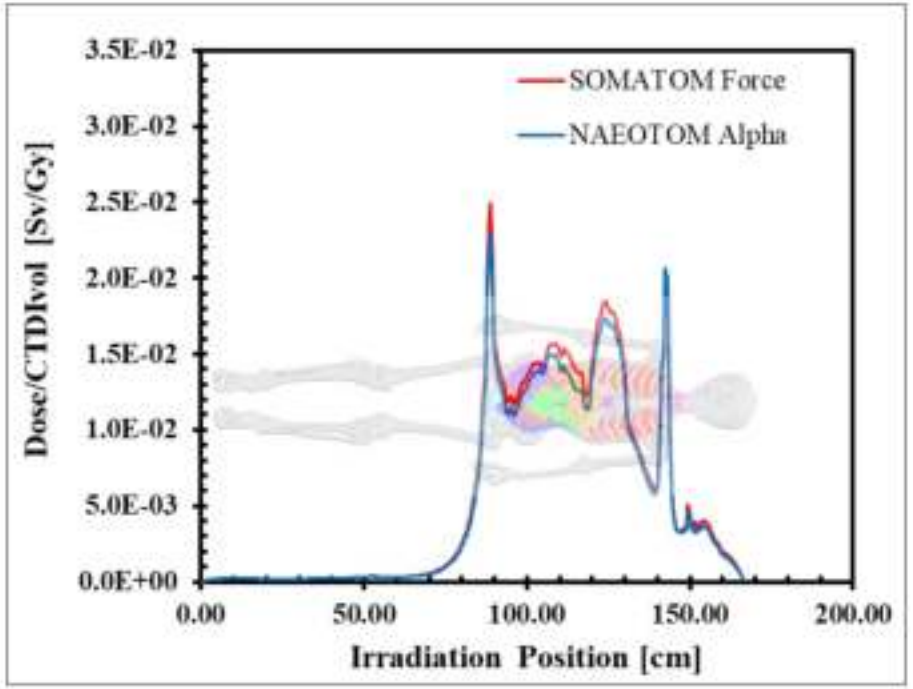


図20　標準体型の成人女性の$CTDI_{vol}$当たりの被ばく線量[Gy/Gy]

表1　標準体型の成人男性が胸部CT検査を受けた場合の一部臓器の$CTDI_{vol}$当たりの吸収線量 [Gy/Gy]

CT device name	Adult male				
	Red bone marrow	Lung	Breast	Stomach	Colon
SOMATOM Force	0.683	1.68	1.21	1.74	0.880
NAEOTOM Alpha	0.613	1.55	1.20	1.61	0.799

まとめ

- フォトンカウンティングCTの臓器被ばく線量を算出できた。

- 今後は他の検査内容にも対応する臓器被ばく線量計算ツールを開発していきたい。

Geant4-DNAへの応用を目的とした OHラジカルによるDNA損傷の 分子動力学計算

[1]平野 祥之、[2]阿蘇 司、[3]藤原 進、[4]原 正憲

[1]名古屋大学 医学系研究科 総合保健学専攻
[2]富山高専 電子情報工学科
[3]京都工芸繊維大学 材料化学系
[4]富山大学 研究推進機構

背景・放射線影響

治療効果、被ばく

放射線影響（治療効果）は各レベルを経て進展し、その総体として現れる。
各レベルでの理解は必要不可欠である。

- 生体分子の損傷構造をシミュレーションや実験で特定する
- 放射線を照射された細胞の遺伝子発現の解析
- 放射線を照射された細胞の行動（タイムラプス解析）
- 原子・分子レベルから細胞レベルをつなげる

↓

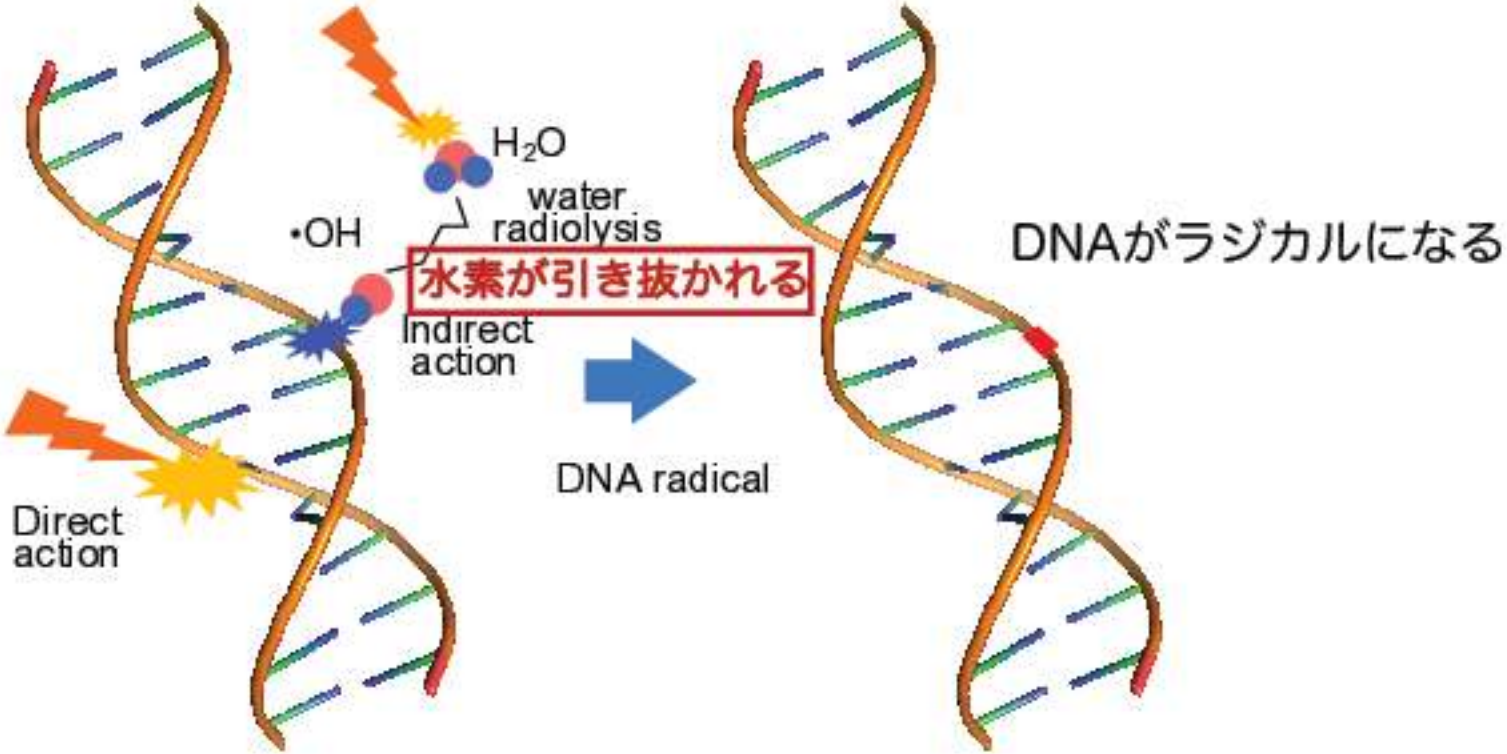
- 医療被ばくの理解
- 放射線治療の高精度化（生物学的効果モデルの作成）

につながると考える

背景・初期過程（原子・分子レベル）

直接作用
放射線がDNAなどの標的分子自体に直接エネルギーを与えて損傷を引き起こす作用

間接作用
放射線が水分子をイオン化し、そこから生じた活性酸素種（ROS）などが間接的にDNAを損傷する作用

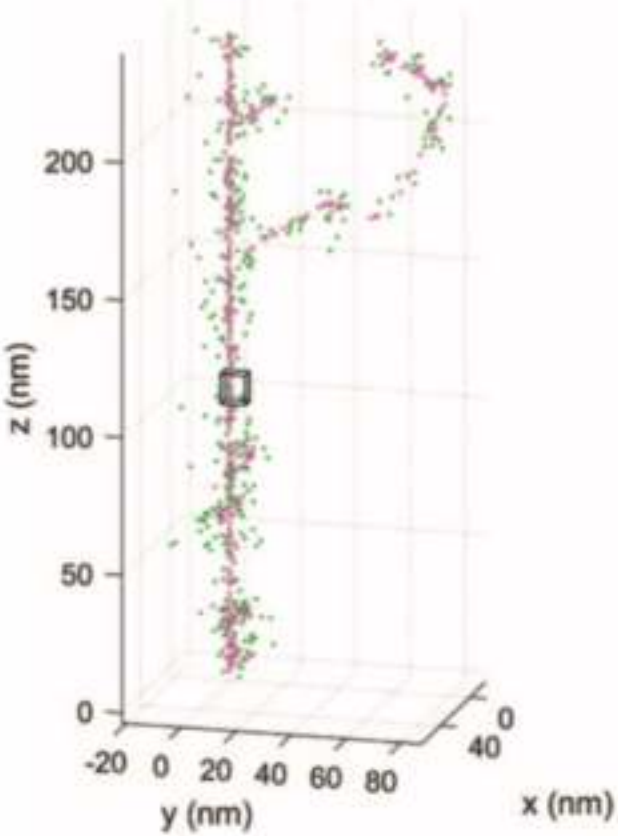


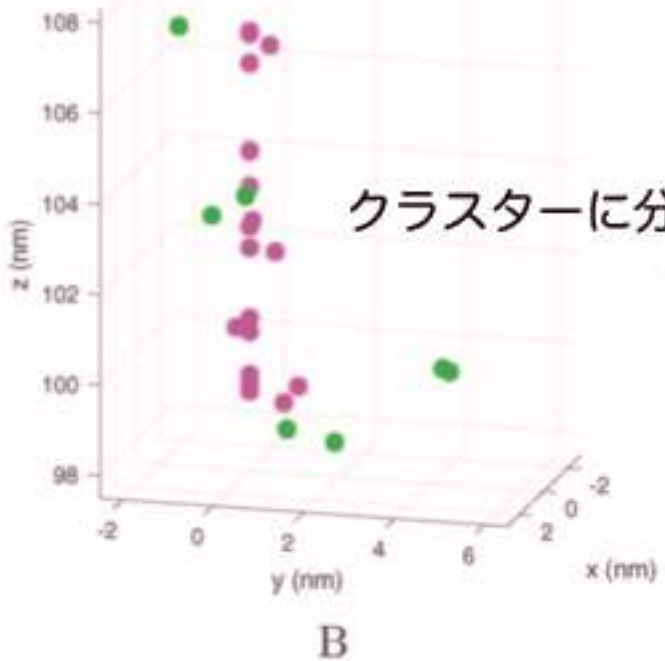
X線照射の場合、間接作用が7~8割と考えられている

背景・Forster et alの方法における間接作用

- OHラジカルが生成して2.5ns経ったところが間接作用した場所
- エネルギー付与が10.8eV以上あったところが直接作用した場所
- DNAは一様にあると仮定

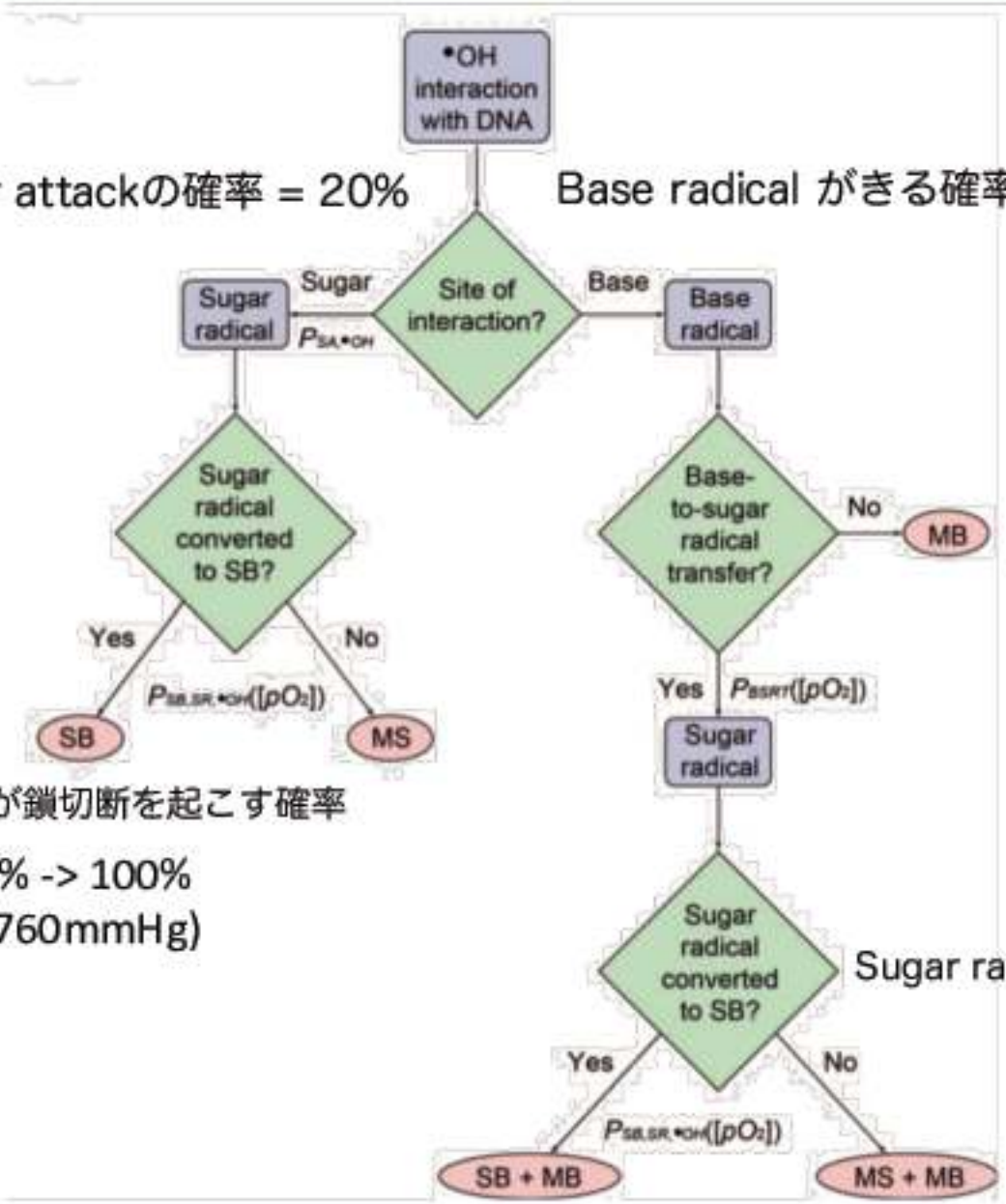
相互作用した場所
●が直接相互作用点
●が間接相互作用点





クラスターに分ける

背景・間接作用でStrand breakがおきる過程



Sugar attackの確率 = 20%

Base radical がきる確率= 80%

Base radical が
Sugar radicalになる確率

0% -> 3%
(0-760mmHg)

Sugar radicalが鎖切断を起こす確率

28% -> 100%
(0-760mmHg)

Sugar radicalが鎖切断を起こす確率

28% -> 100%
(0-760mmHg)

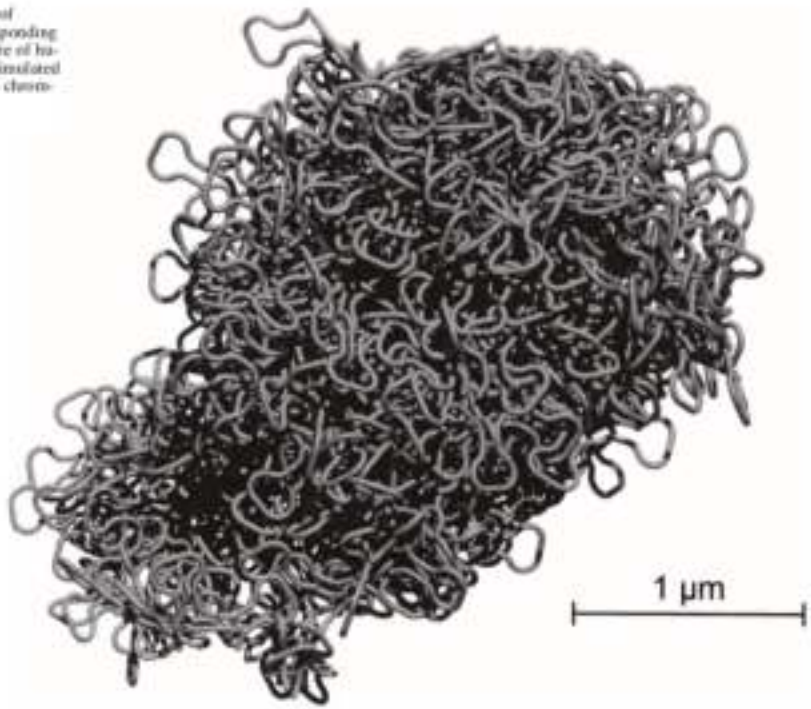
背景・PATRACでの間接作用

OHラジカルがReaction radiusに入ったら相互作用する

Reaction radii

Deoxyribose	0.085 nm
Adenine	0.29 nm
Cytosine	0.29 nm
Guanine	0.43 nm
Thymine	0.30 nm

Fig. 2 DNA fragment of 100 Mbp length (corresponding approximately to the size of human chromosome 15) simulated by 1100 interconnected chromatin fibre loops



またStrand breakはOHラジカルが
sugar moietyと相互作用したら起きる

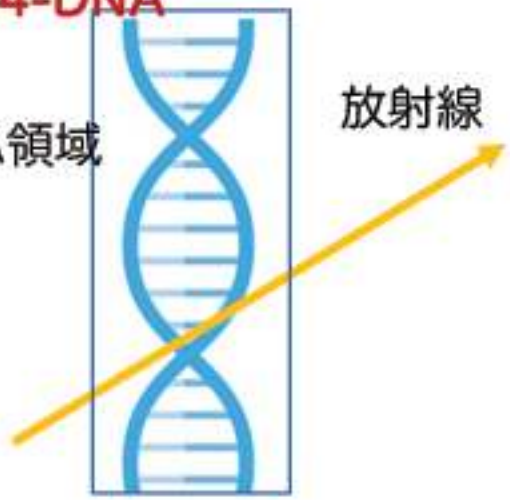
DNAのジオメトリーが必要
損傷構造までは分からない

目的

- 間接作用のメカニズムを理解する
- DNAの損傷構造を明らかにしたい
  その後、修復できるかの評価に必要
- この結果をパラメータとしてGeant4-DNAに組み込みたい

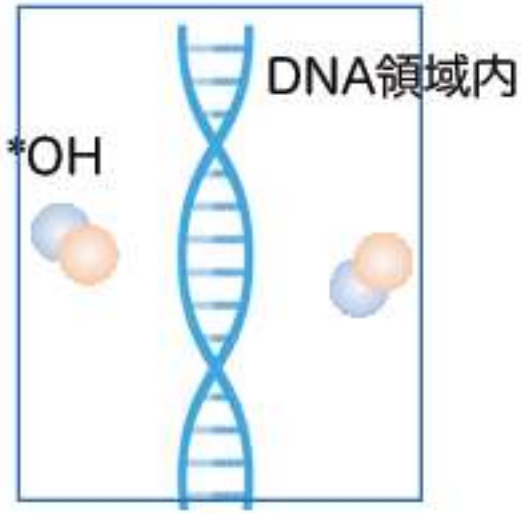
方法・マルチスケールシミュレーション

Geant4-DNA



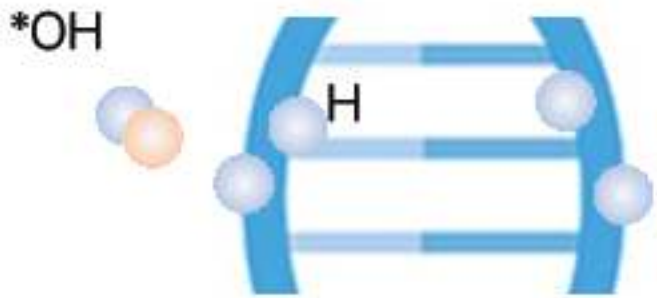
- DNAのそばに放射線を通過させる
- OHラジカルの生成と輸送を**Geant4-DNA**で計算

LAMMPS



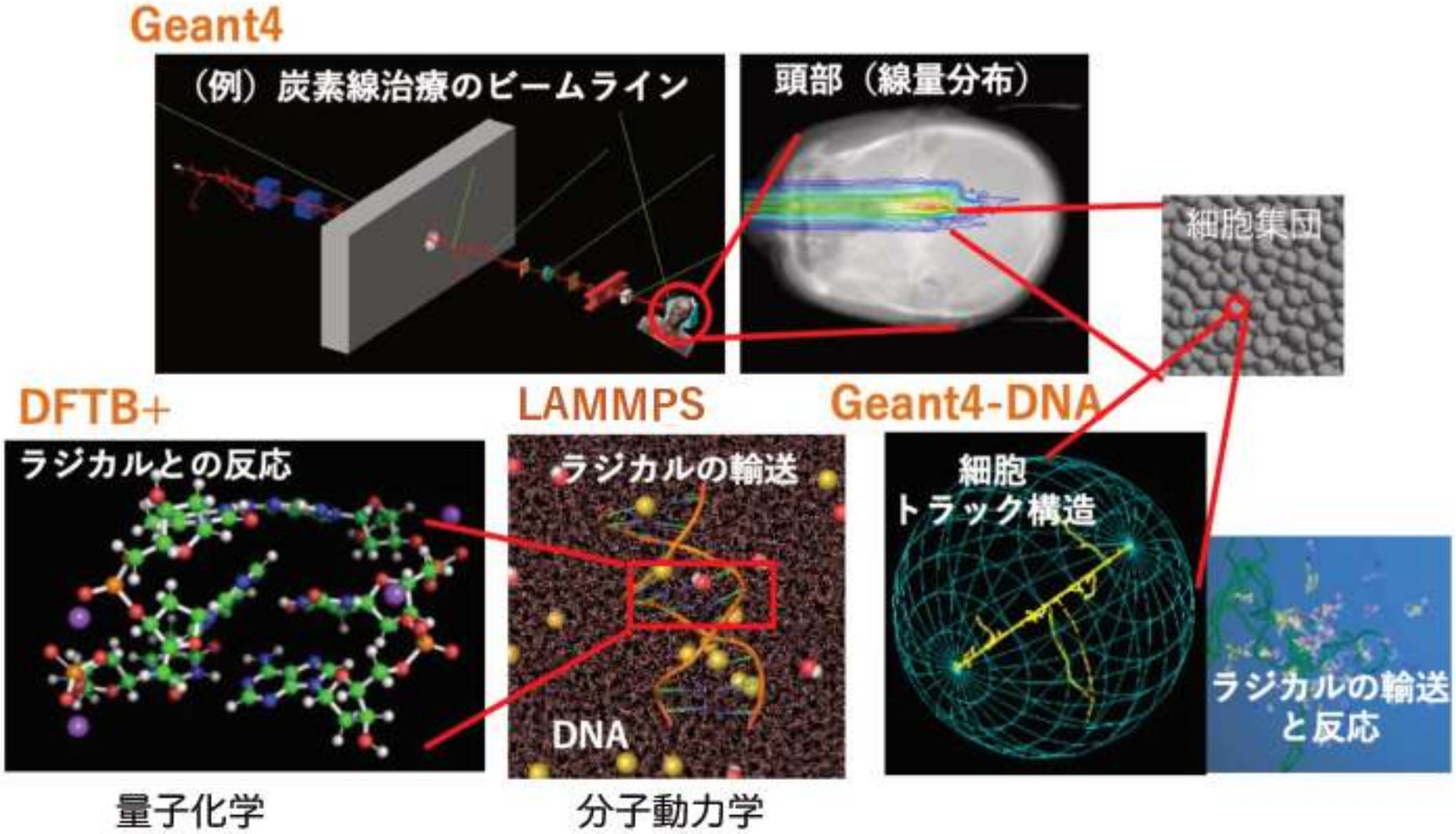
- DNA領域に入ったOHラジカルの振る舞いを**分子動力学(LAMMPS)**で計算
- どの水素にアクセスしやすいかを計算

DFTB+



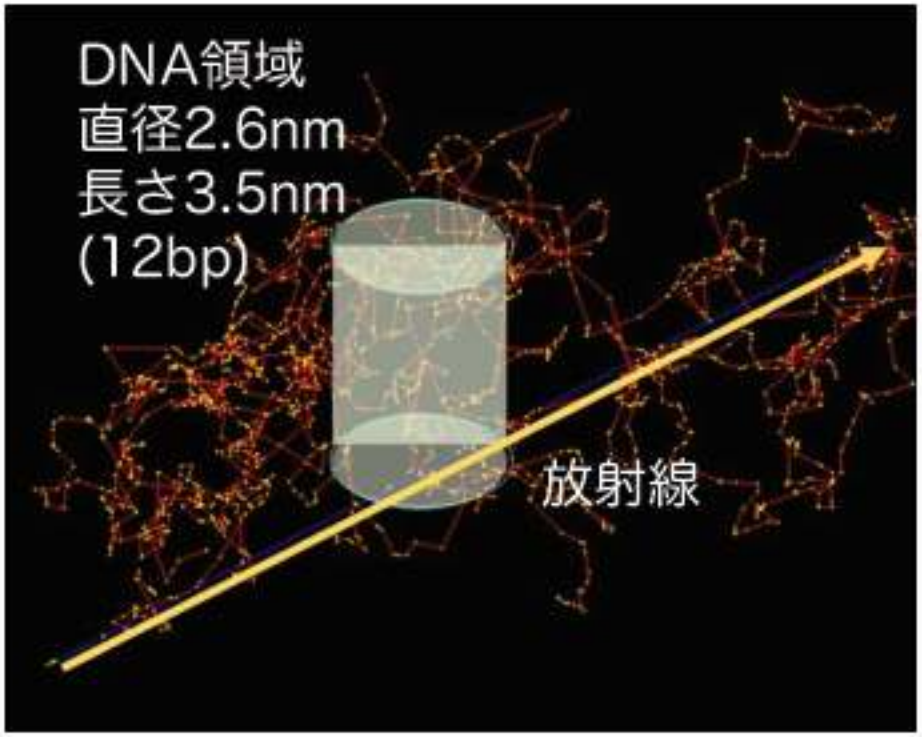
DFTB (量子化学計算)で水素を引き抜くかを計算

方法・マルチスケールシミュレーション



結果・Geant4-DNA

Geant4-DNAでDNA領域内に入る*OHを計算



DNAから1nmはなれたところを通過した場合

^{12}C：23MeV/u (=80keV/μm)
8 *OH / 入射

電子：10keV
0.4 *OH /入射

結果：分子動力学（LAMMPS）DNA 12 bp

LAMMPSでDNA領域内に入った*OHがどこの水素にアクセスするかを計算（アクセス条件：4Å以内）　2.5nsまでの計算を10回実施

エネルギー最小化

↓

平衡化 — SHAKE法・OHラジカル制限

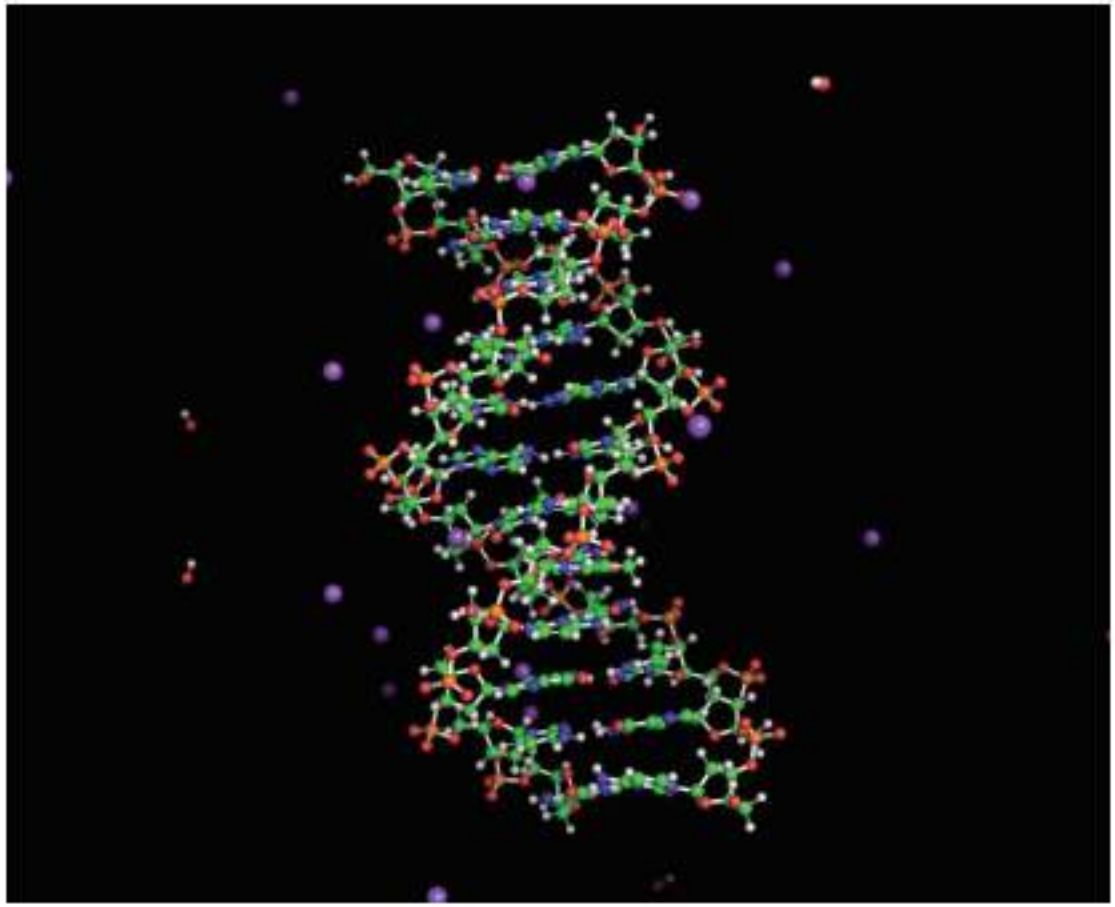
昇温
200 ps：NVT 0 K → 310 K
C4、Cα（k = 15）

気圧設定
200 ps：NPT 310 K、1 atm
C4、Cα（k = 5）

↓

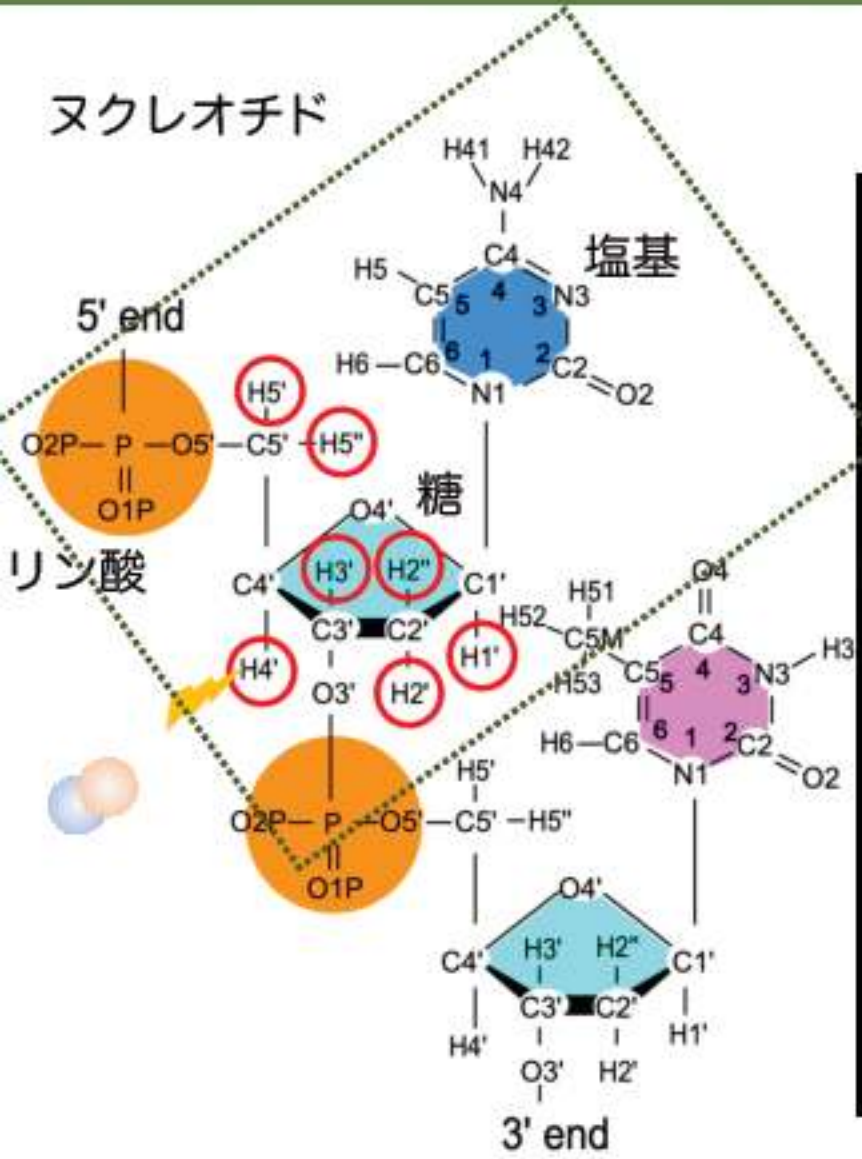
プロダクトラン

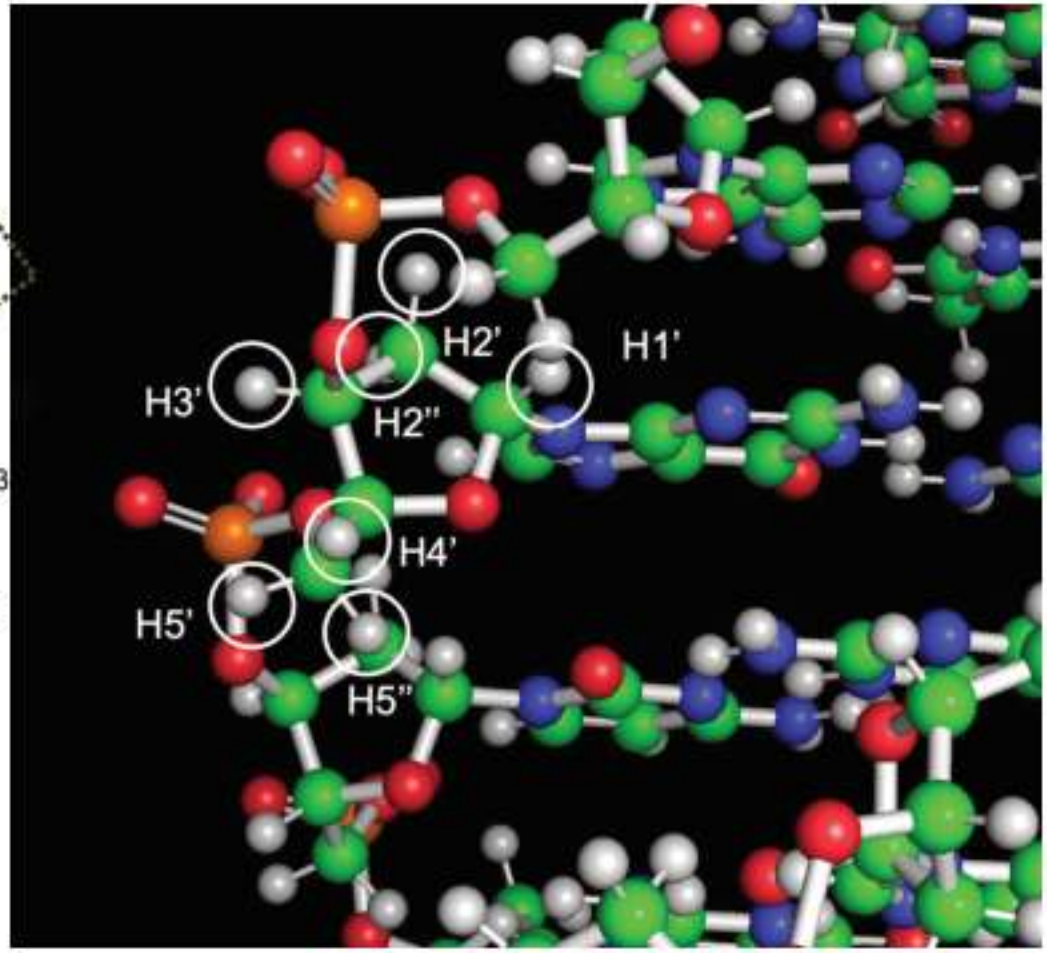
2.5 ns：NPT 310 K、1 atm（生体内）
DNA鎖末端のC4 (k = 5)



- DNA領域に入った*OHのうち平均1.5ps滞在し、84%は水素には近づかずに領域から出る
- 残り(16%)が水素にアクセスする。

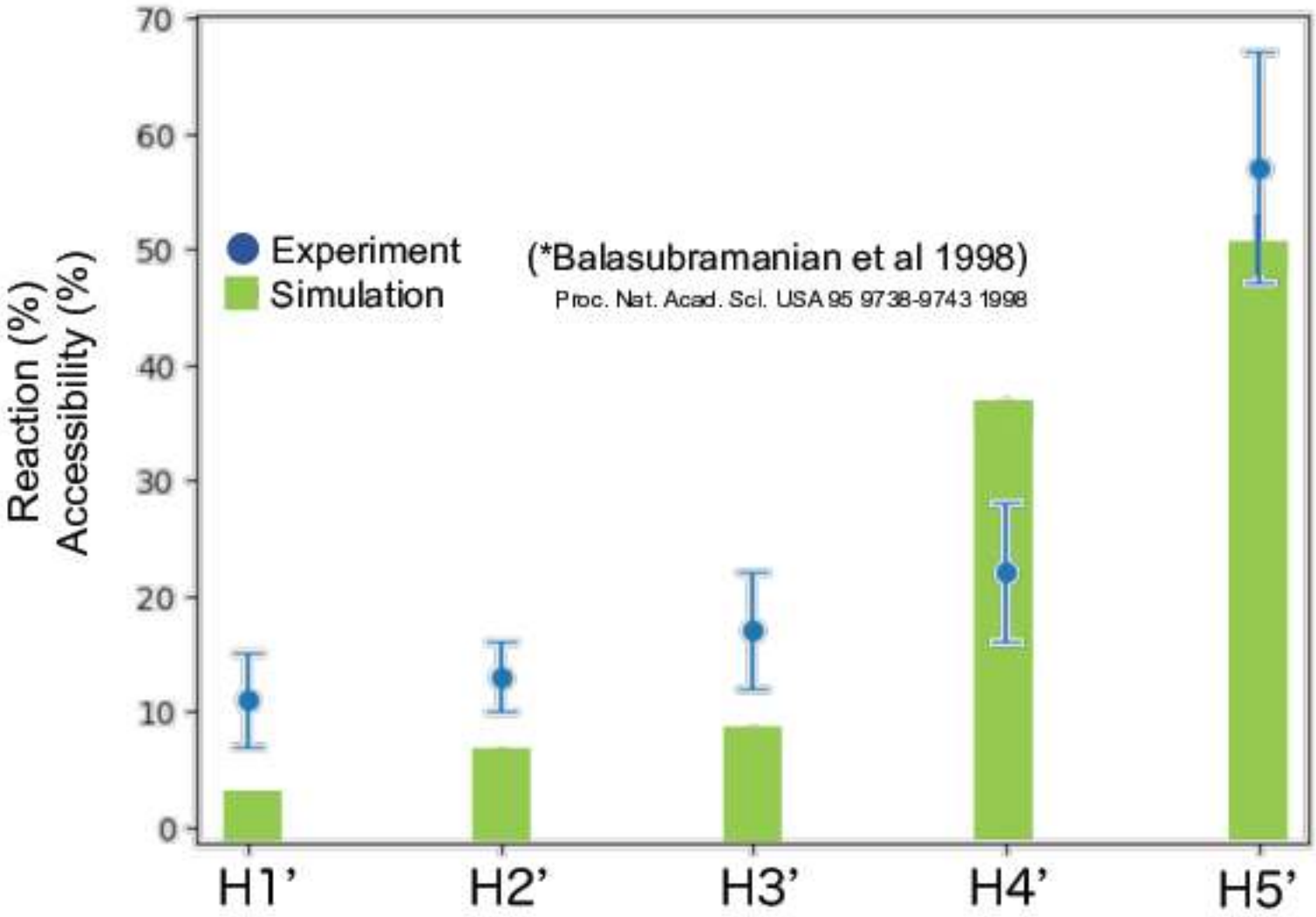
方法・解析した水素の位置





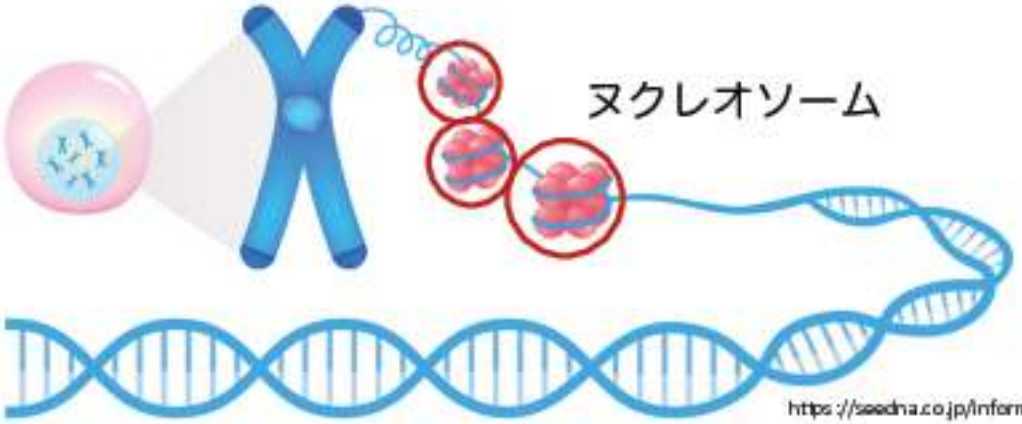
DNA：ヌクレオチドのポリマー

結果・アクセスされやすい水素

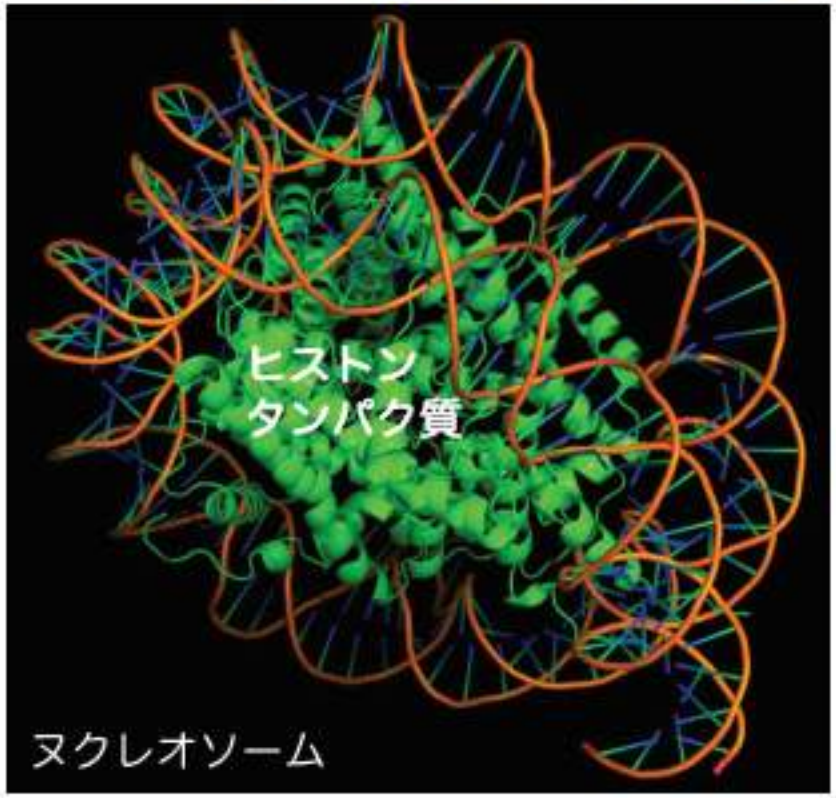


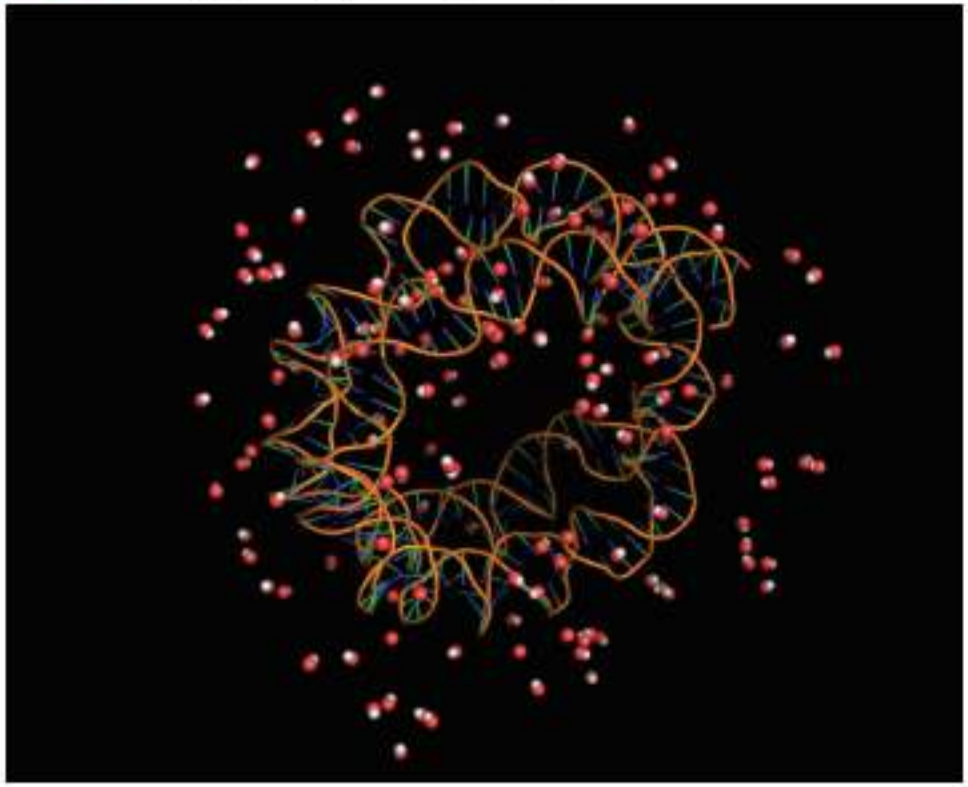
水素引き抜き反応が起こる場所は一様ではないと予想される

結果・ヌクレオソームについても計算



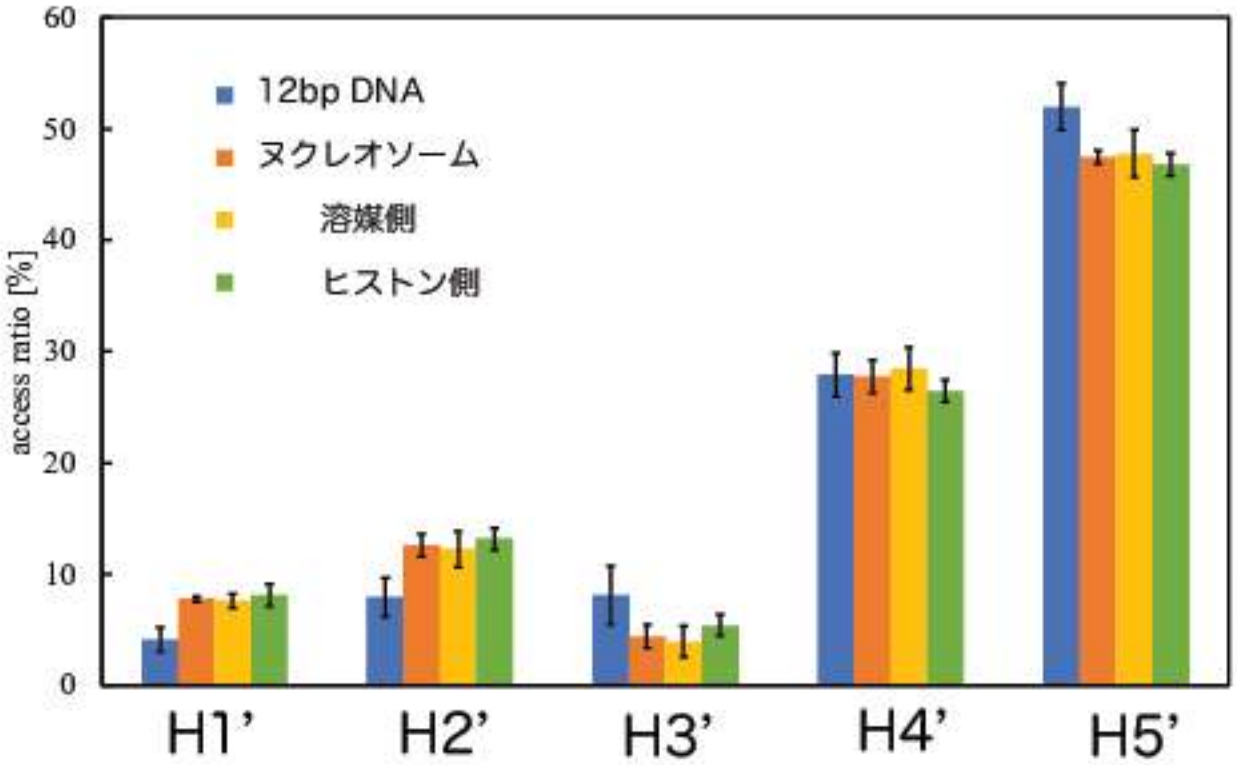
https://seedna.co.jp/information/post-48562/

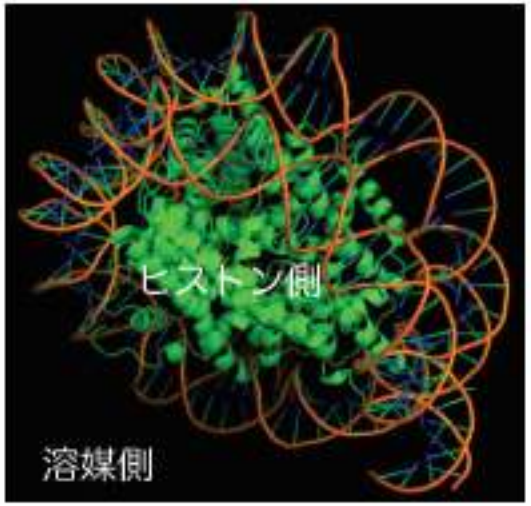


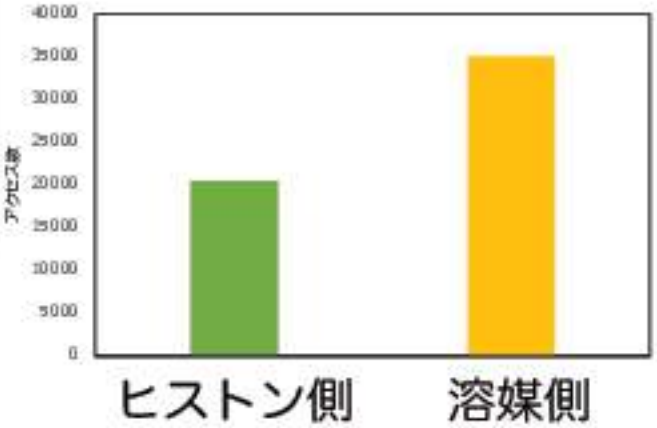


結果・ヌクレオソームについても計算

- ヌクレオソームについても同じ傾向が得られた
- しかしヒストン側と溶媒側ではアクセス数は異なる

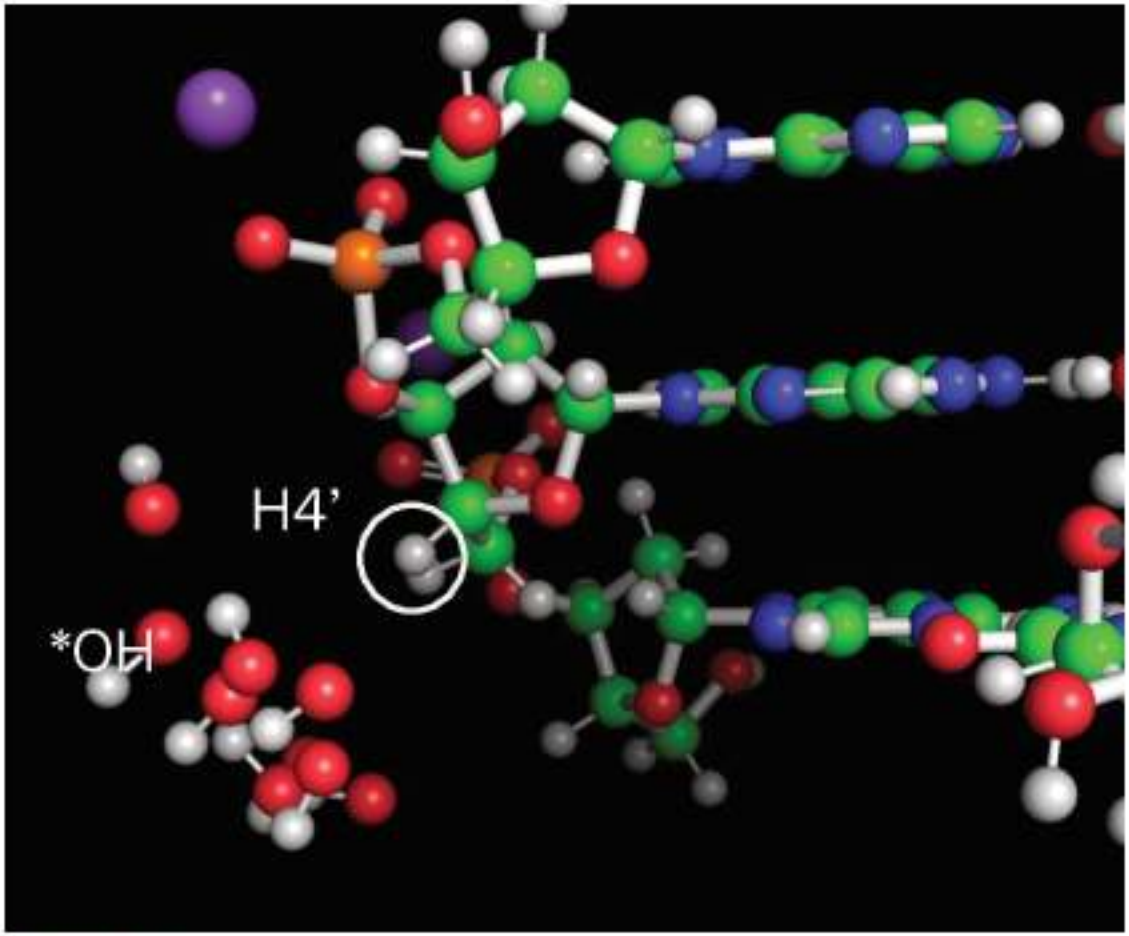






結果・DFTBによる水素引き抜き反応

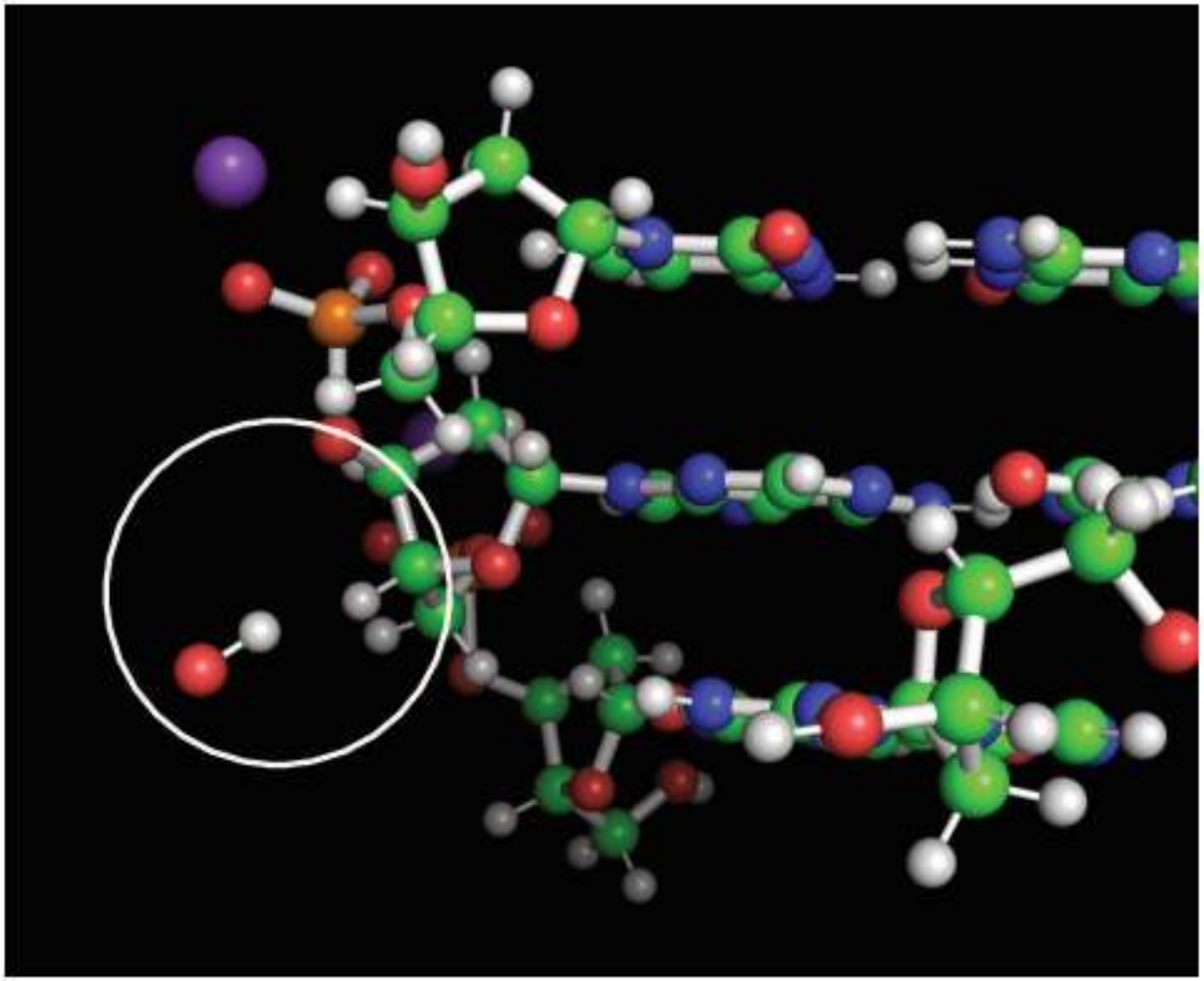
分子動力学計算によって得られた近接したときの*OHの位置



DFTB+で、水素引抜き反応が起きるか計算した
(1fs stepで2psまで計算)

結果・DFTBによる水素引き抜き反応

水素原子に近づいた(4Å以内) *OHのうち、24.6%が水素を引き抜いた



水素引抜き反応が起きたケース

まとめ

DNAから1nmはなれたところを通過した場合、DNA領域(10bp)に
^{12}C（23MeV/u）の場合は、 8 *OH /入射
電子(10keV）の場合は、　0.4 *OH /入射　がDNA領域(10bp)に入る。
そのうち16%が水素に近づき、そのうち25%が水素を引き抜く。

^{12}C（23MeV/u）の場合：0.32個 /入射/10bp の水素が引き抜かれる
電子（10keV）の場合　：0.016個/入射/10bp の水素が引き抜かれる
引き抜かれやすい水素は H1'< H2' < H3 '< H4 '< H5'

Geant4-DNA, LAMMPS, DFTB+を用いて、DNA損傷（水素引抜き）の定量評価ができた。

鎖切断が起きるか？

周囲の環境も考慮して鎖切断が起きるかを検討するのが今後の課題

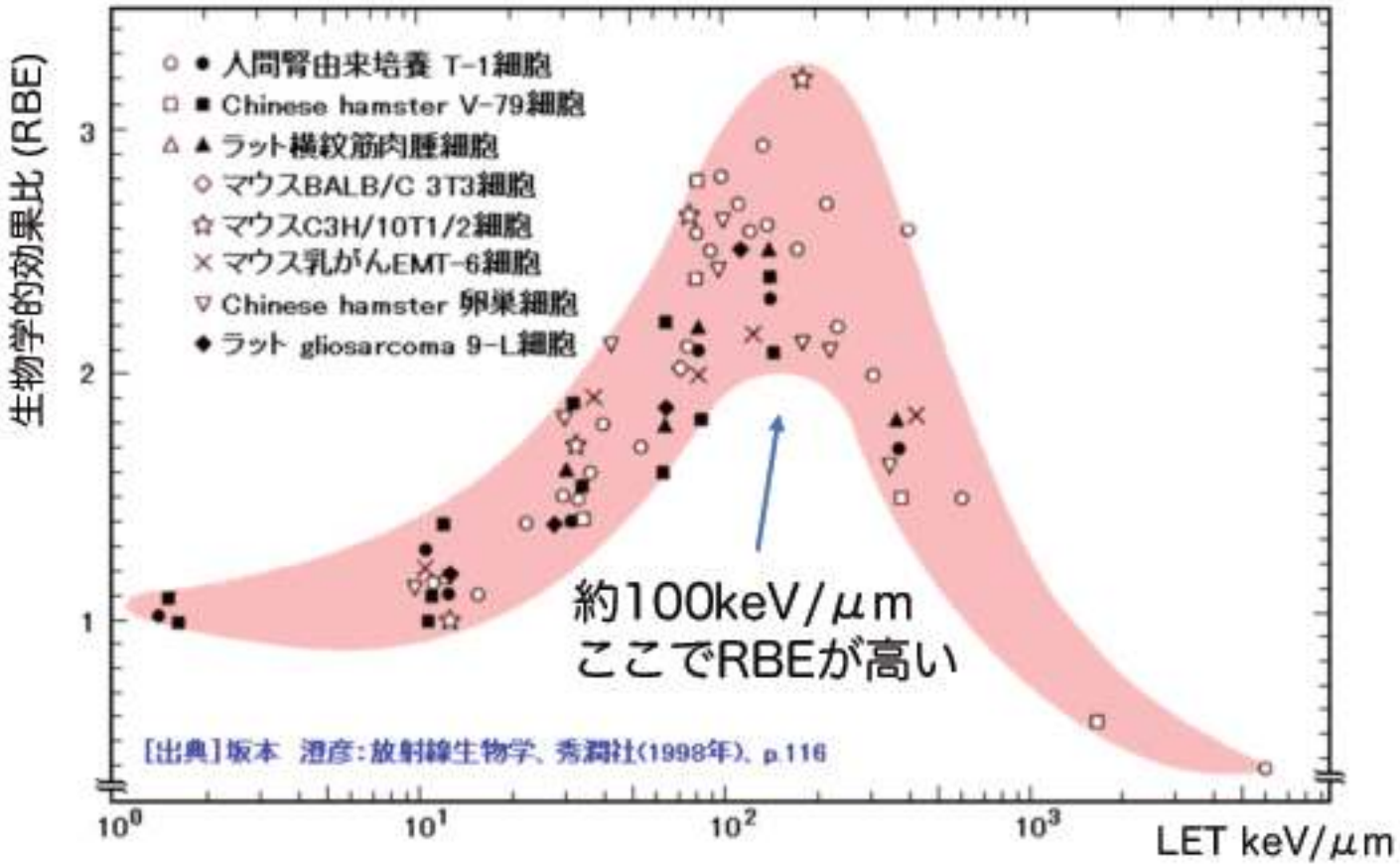
- DNAラジカルはチノール基をもつグルタチオン等によって修復される
- その前に酸素と結合すると、損傷が固定される
- 特にH4'が引き抜かれた場合、鎖切断が誘発されるという報告もある
- 直接作用の影響

ご清聴ありがとうございました。

背景・生物学的効果比（放射線治療）

- Relative biological effectiveness : RB
- 効率よく細胞を殺傷する能力

$$\text{RBE} = \frac{\text{ある生物学的効果を起こすのに必要な基準放射線の吸収線量}}{\text{同じ生物学的効果を起こすのに必要な当該放射線の吸収線量}}$$



- 物理量（LET）が生物効果を予測する指標になっている

北海道大学

PHITS飛跡構造シミュレーションに基づくDNA損傷推定

DNA damage estimation based on PHITS track-structure simulation

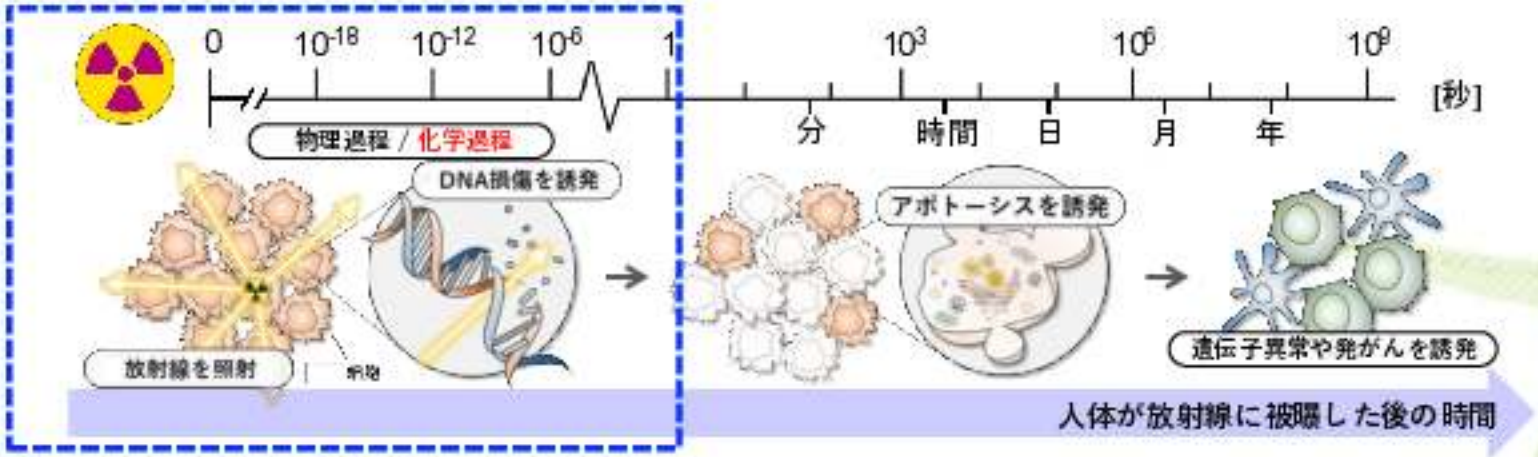
第2回EGS5-Geant4-PHITS合同研究会
2025年5月16日（金）14:40-15:00

松谷悠佑[1,2], 赤松憲[3], 小川達彦[1], 中野敏彰[3],
鹿園直哉[3], 甲斐健師[1], 佐藤達彦[1]

[1]日本原子力研究開発機構, [2]北海道大学保健科学研究院,
[3]量子科学技術研究開発機構

Introduction

- 電離放射線により発生する初期のDNA損傷は，放射線の飛跡構造（種類・エネルギー）に依存し，物理と化学過程後に発生する。
- 多くのDNA損傷は修復されるが，一部の損傷は修復されず，細胞死や染色体異常などの後発の放射線影響を引き起こす。



物理過程～生物初期過程

放射線の飛跡構造に基づき，DNA損傷発生メカニズムを解明できれば，
後発の放射線影響（細胞死・染色体異常・発がん）の正確な理解につながる

Introduction

- 医療・生命科学・防護分野への応用を目指す場合，様々な条件下で照射された細胞を効率的に予測する必要がある。

<従来の方法の問題点>

① 細胞核内のDNAの体系を考慮する場合，
DNAに放射線がヒットせず，計算コストが莫大

② 化学過程（ラジカルとDNAの反応）を計算する場合，
ケミカルコードの計算コストが莫大

➡ 効率よくDNA損傷の発生数を予測する計算モデルの開発が必要！

Purpose

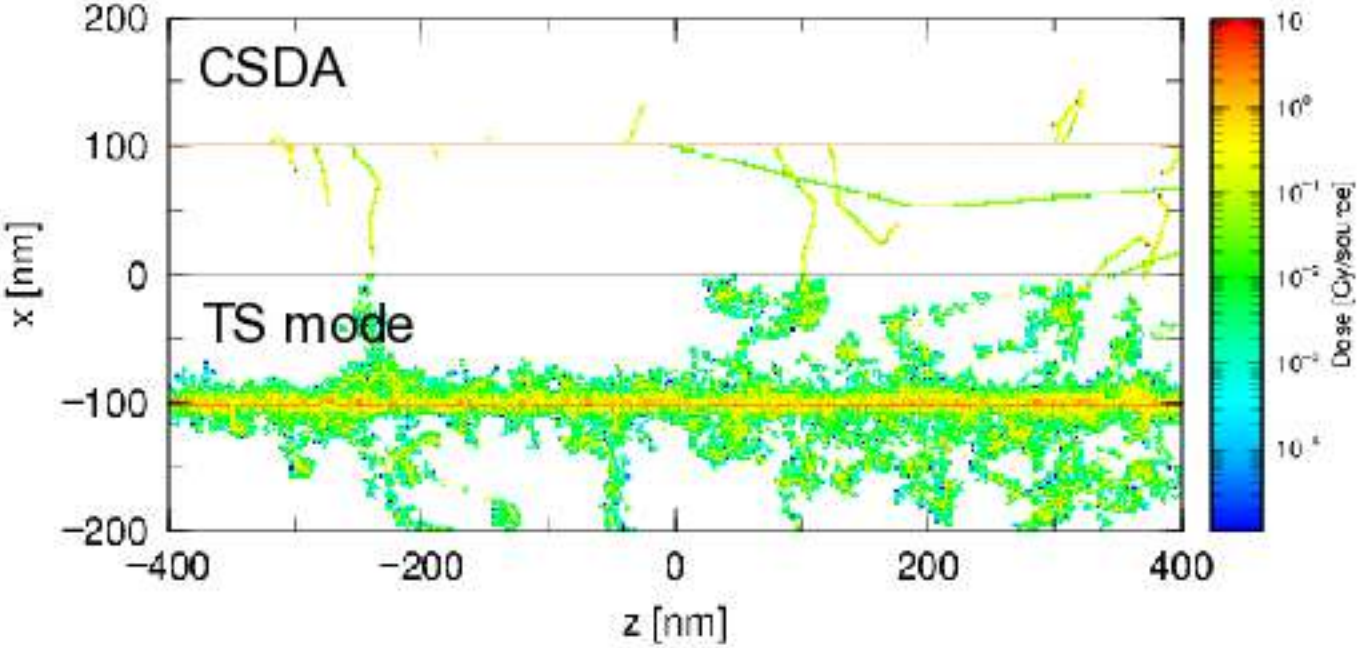
PHITSを用いてDNA損傷収量を効率的に推定できる解析モデルを開発

* Model was depicted by the PHITS code (https://phits.jaea.go.jp/indexj.html)

PHITS Track-Structure modeとは?

PHITSの中での電離・励起の扱い

- ✓ 連続エネルギー損失近似(CSDA): 数多くのイベントを1つにまとめて再現
- ✓ 飛跡構造解析モード(TS mode): 個別のイベントを全て再現



5 MeV/nの炭素イオン周辺の付与エネルギーをCSDAとTS modeで計算した結果

DNA損傷や発光応答などミクロスケールでの放射線影響メカニズム研究に応用

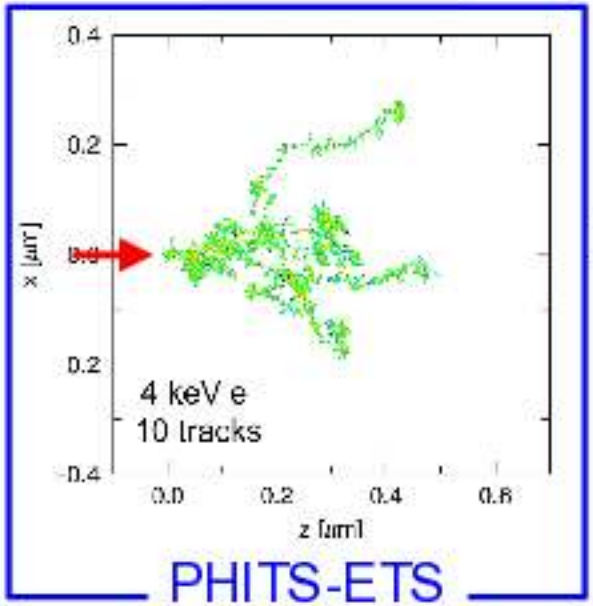
Y. Matsuya et al. Phys. Med. Biol. 66, 06NT02 (2021)

PHITS-TS modeの種類

水中の原子相互作用のシミュレーションを可能にするモード

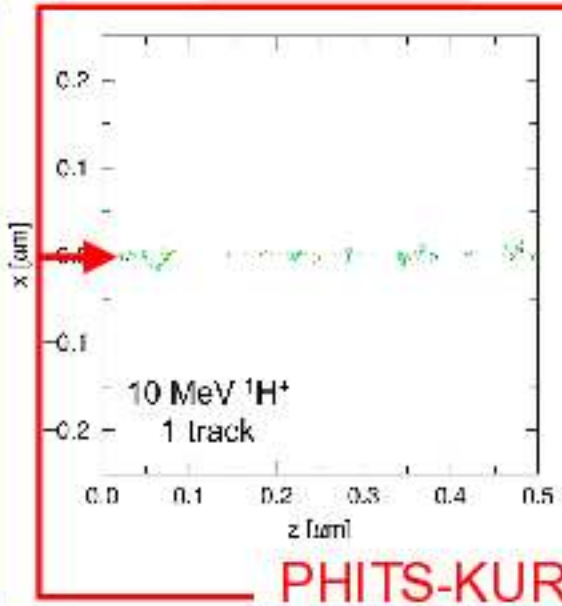
- ✓ PHITS-ETS: 電子飛跡構造モード（PHITSオリジナルモデル）液相水専用
- ✓ PHITS-KURBUC: KURBUCアルゴリズムに基づくイオン飛跡構造モード液相水専用
- ✓ ITSART: 任意物質や任意放射線に対応したイオン飛跡構造モード

Electron e^-

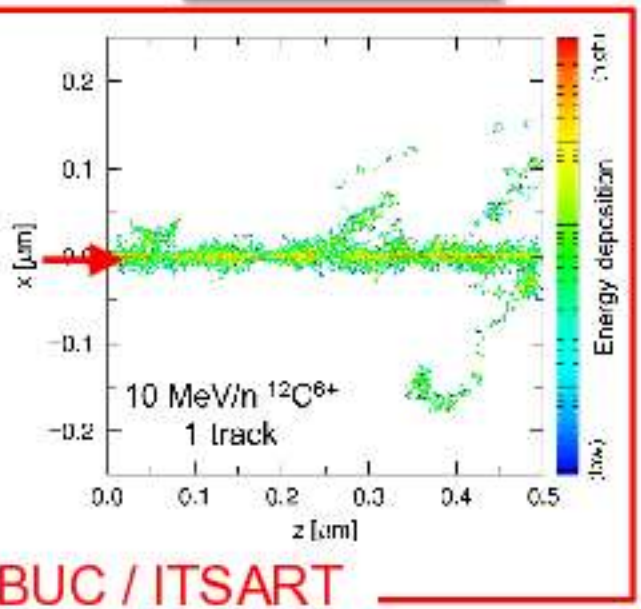


PHITS-ETS

Proton $^1H^+$



Carbon $^{12}C^{6+}$



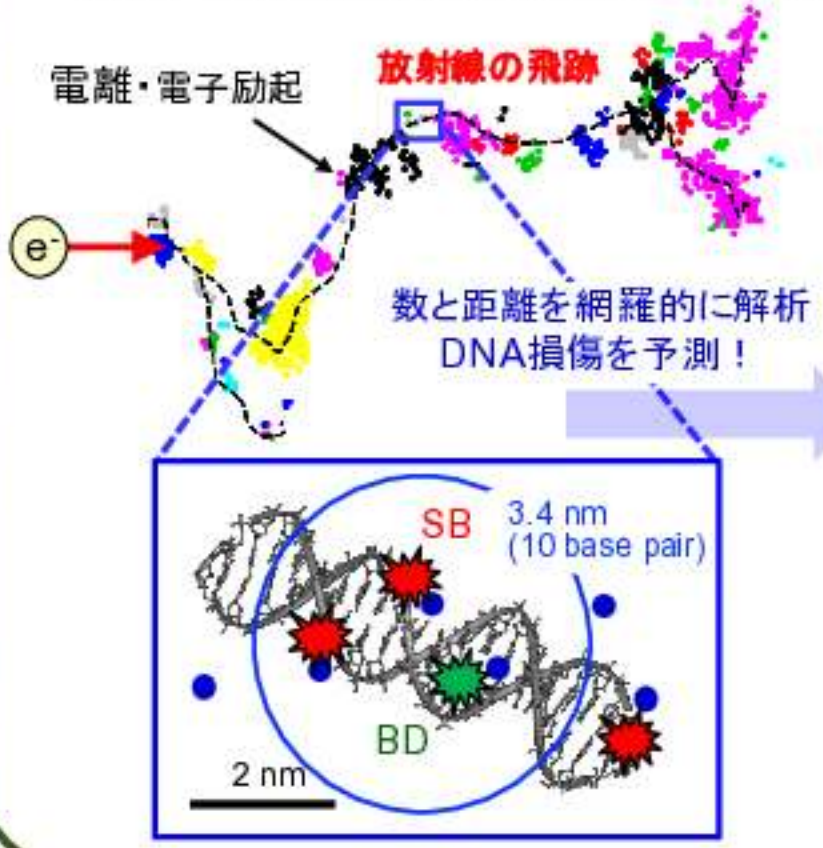
PHITS-KURBUC / ITSART

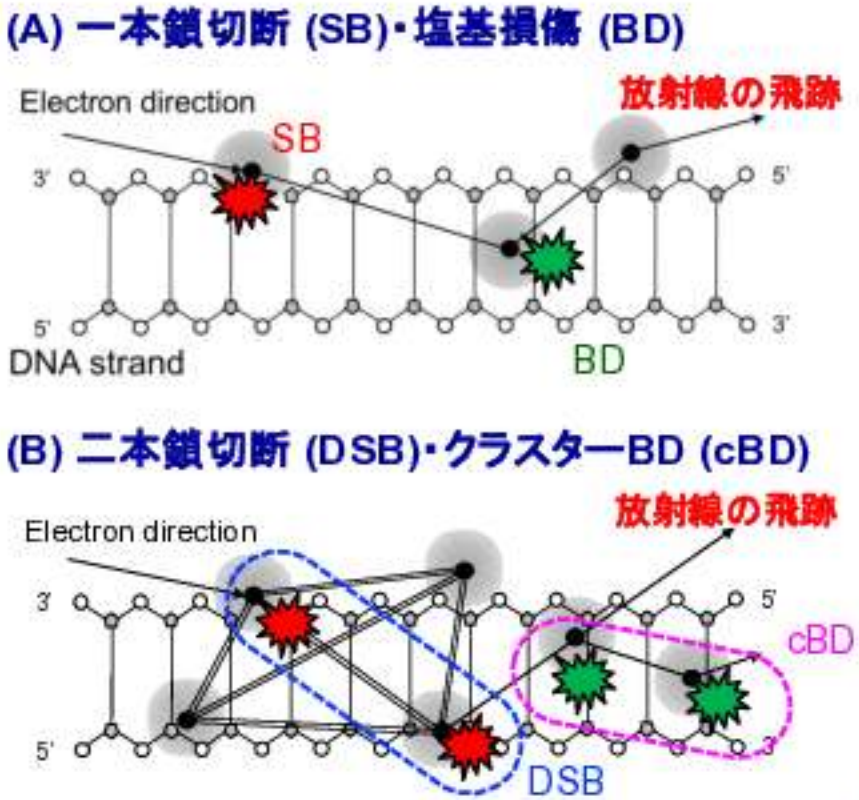
生体（液相水）中の電子線やイオン線の放射線の飛跡が計算可能

Y. Matsuya et al. *Int. J. Radial. Biol.* 98(2), 148-157 (2019)

Methods (1): DNA損傷予測モデルの開発

電離・励起の座標のみを使用してDNA損傷数を推定するモデルを開発！





イオン化（電離）と電子励起の空間パターン → DNA損傷推定
飛跡上で網羅的に解析するため，効率的にDNA損傷推定が可能に

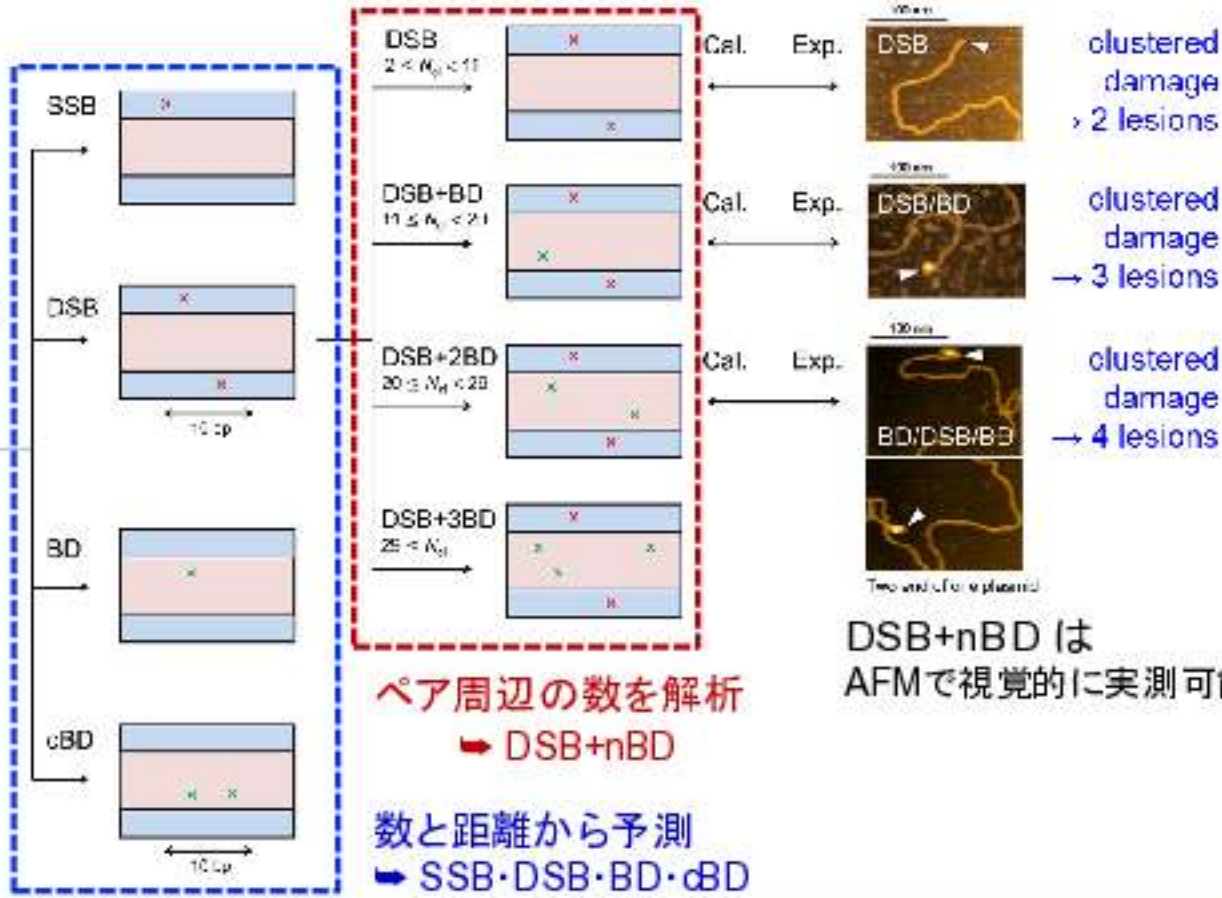
Matsuya Y., Kai T., Sato T et al. *J. Appl. Phys.* 126, 124701 (2019) doi:10.1063/1.5115519

Methods (2): 複雑なDNA損傷予測モデルの開発

DSBサイト周辺の電離・電子励起数を追加解析して，複雑なDSBも推定

飛跡構造解析モードを
使用した出力結果

※ DNA構造は考慮なし
(わかりやすさのために記載)



ペア周辺の数を解析
➡ DSB+nBD

数と距離から予測
➡ SSB・DSB・BD・cBD

DSB+nBD は
AFMで視覚的に実測可能！

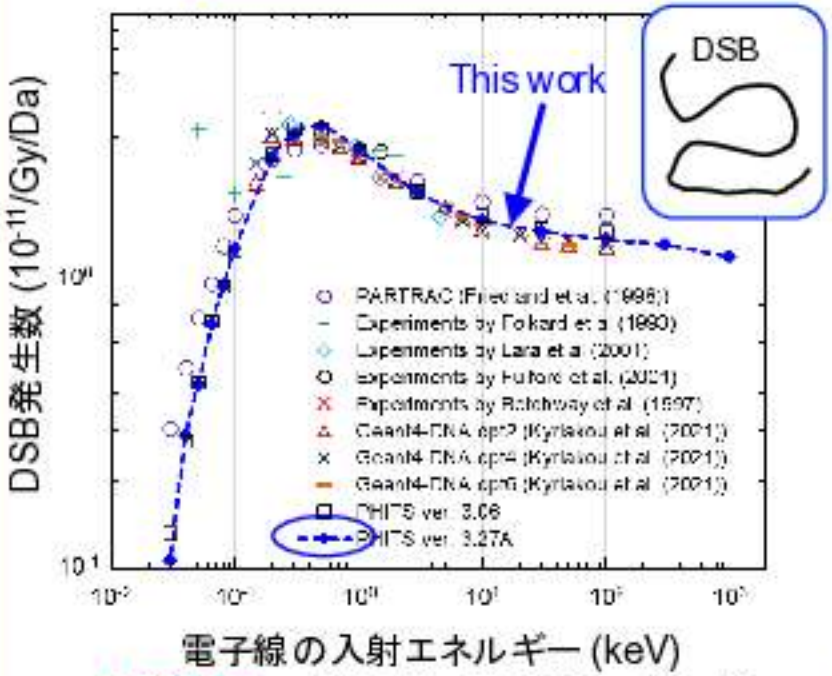
DSB+*n*BDの予測結果を，AFMの実測値と比較して予測モデルを検証

Matsuya Y, Nakano T, Kai T, et al. *Int. J. Mol. Sci.* 2020, *21*(5), 1701

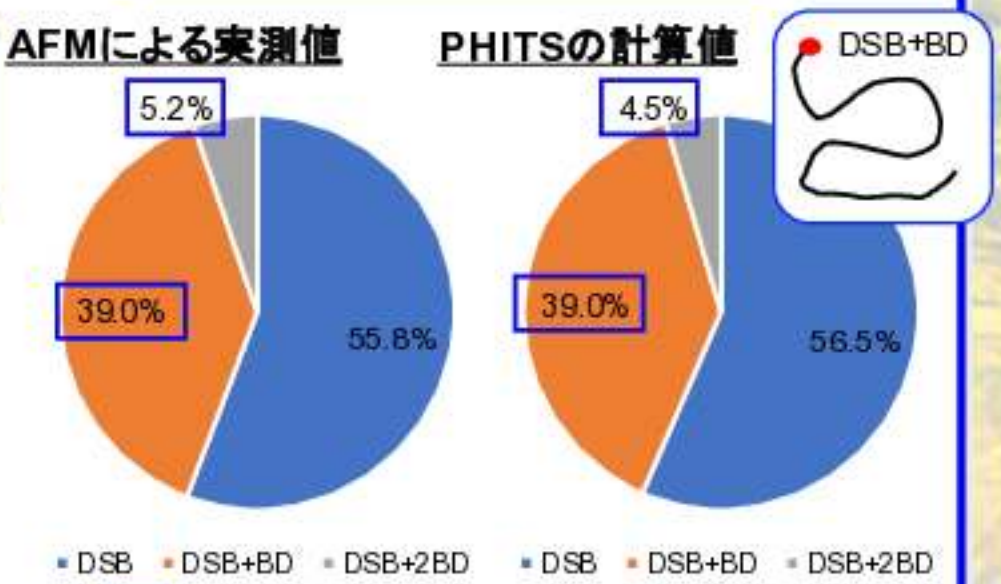
Results (1): 電子線照射後のDNA損傷予測

- PHITS-ETSモードを使用して電子線によるイベント（電離・電子励起）を計算
- DSBとDSB末端にBDがある複雑なDSBを計算し、測定データと比較

DNA二本鎖切断（DSB）



DSB末端にBDがある複雑なDSB



※ □ :DSB末端にBDがある複雑なDSB
（照射条件: 70 kVp X線）

計算時間　従来法: 数週間 ~ 数ヶ月 → 本モデル: < 1日

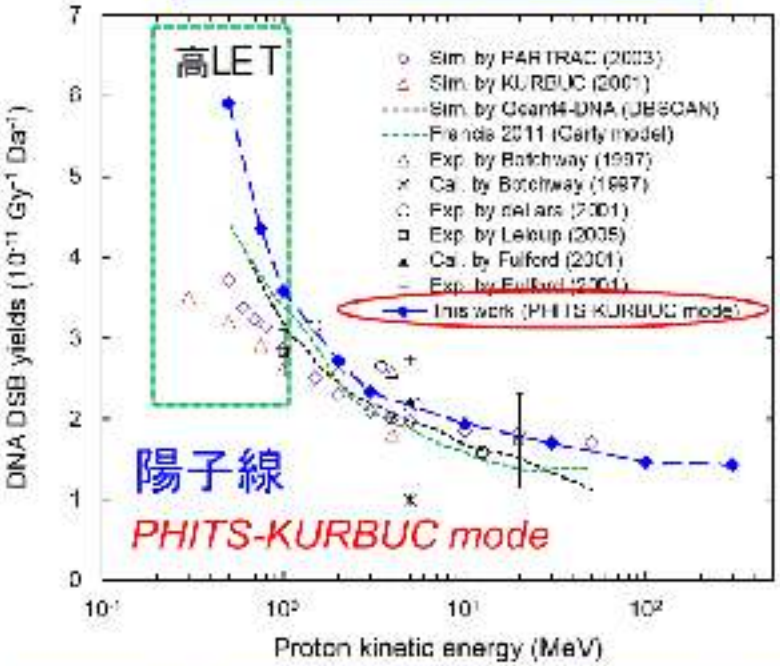
開発したDNA損傷予測モデルは実測値とよく一致し，高速に予測が可能

Matsuya Y., et al. *Phys. Med. Biol.* 67, 215017 (2022); Matsuya Y, et al. *Int. J. Mol. Sci. 2020, 21(5), 1701*

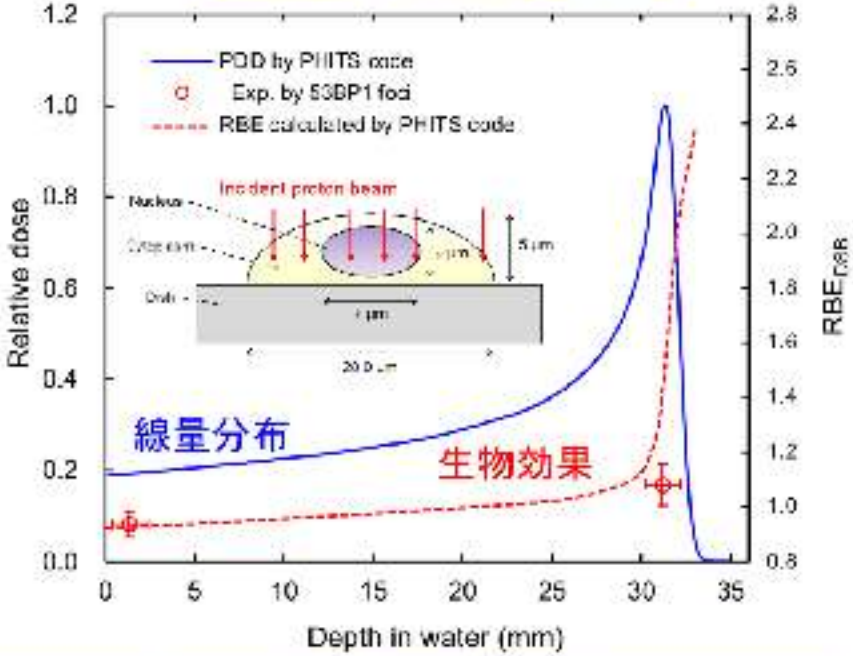
Results (2): 陽子線照射後のDNA損傷予測

- PHITS-KURBUCモードを使用して陽子線による電離と電子励起を計算
- 陽子線のエネルギーとDSB数，DSBの深さ依存性を計算し、実測データと比較

エネルギー vs DSB発生数



深部線量 vs DSB発生数



開発したDNA損傷予測モデルは，陽子線にも適用可能！
1 MeV以下の陽子線（高LETイオン線）への適用には課題あり

PHITS

Matsuya Y., Kai T., Parisi A. et al. *Phys. Med. Biol.* 67, 215017 (2022)

Methods (3): DNA損傷距離の推定と解析

- 予測モデル：電離と励起の距離を解析 → DNA損傷間の距離の予測
- FRETにより2個の脱塩基（APサイト）の距離は測定可能* → 推定値と比較

Case I

$$R_{i,\mathrm{opp}} \cong \sqrt{(0.33i)^2 + 2(a+d)^2\left\{1+\cos\left(\frac{\pi}{5}i\right)\right\}}$$

Case II

$$R_{i,\mathrm{sam}} \cong \sqrt{(0.33i)^2 + 2(a+d)^2\left\{1-\cos\left(\frac{\pi}{5}i\right)\right\}}$$

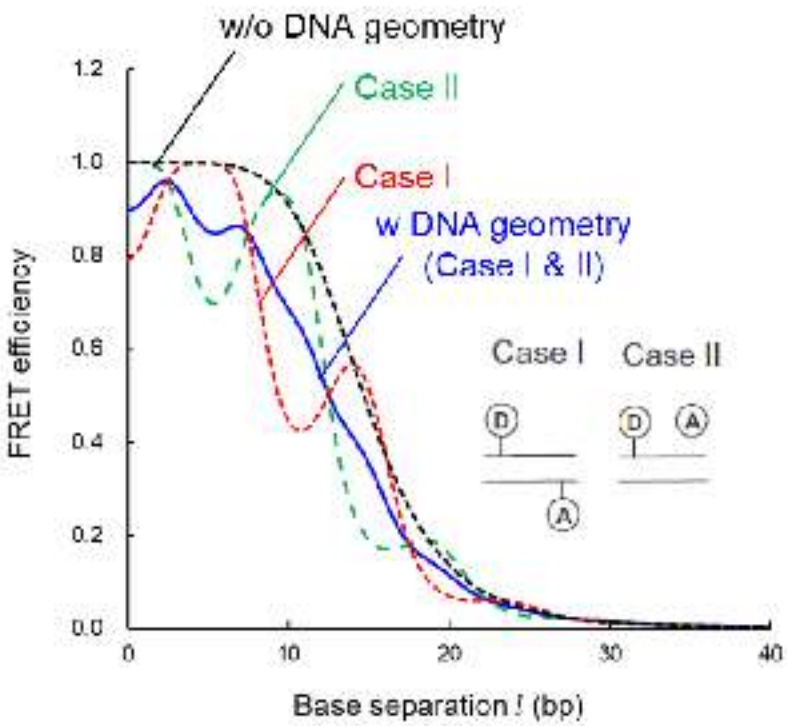
$i = l$: 電離励起の二点間距離

2点間距離 ↔ FERT効率

$$E_* = \frac{1}{1+\left(\frac{R}{R_0}\right)^6}$$

*: opp (case I) or sam (case II)
R_0: Förster distance (i.e., 4.4 nm)

$$E_{\mathrm{obs}} = \sum_{i=0}^{2686}\left(\frac{1}{2}\left(E_{i,\mathrm{opp}} + E_{i,\mathrm{sam}}\right)p_i\right)$$



測定時のコンディションから孤立損傷は周囲のAPサイトと共鳴して微弱に発光すると過程

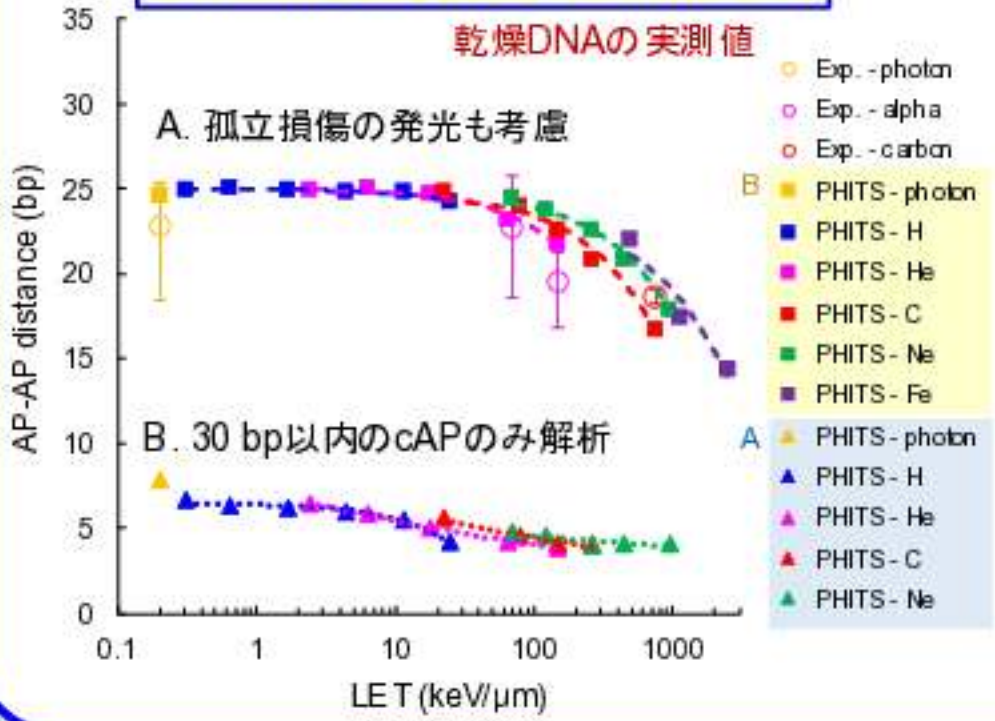
実測のDNA損傷間距離データと飛跡構造解析モードの計算値を直接比較

* Akamatsu K, et al. Radiat Res 183 (2015) 105-113; Akamatsu K, et al. Anal Bioanal Chem 413 (2021) 1185-1192

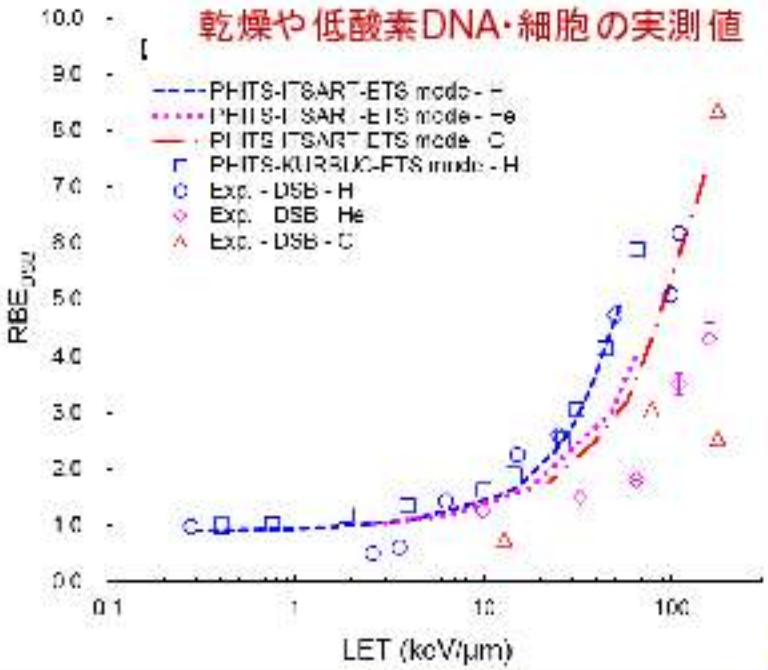
Results (3): APサイト間距離の解析結果

- 電離と励起の距離をサンプリングすることで，APサイト間の距離の予測
- FRETにより2個の脱塩基（APサイト）の距離は測定可能* → 推定値と比較

FRETによる実測値 vs PHITS予測



深部線量 vs DSB発生数

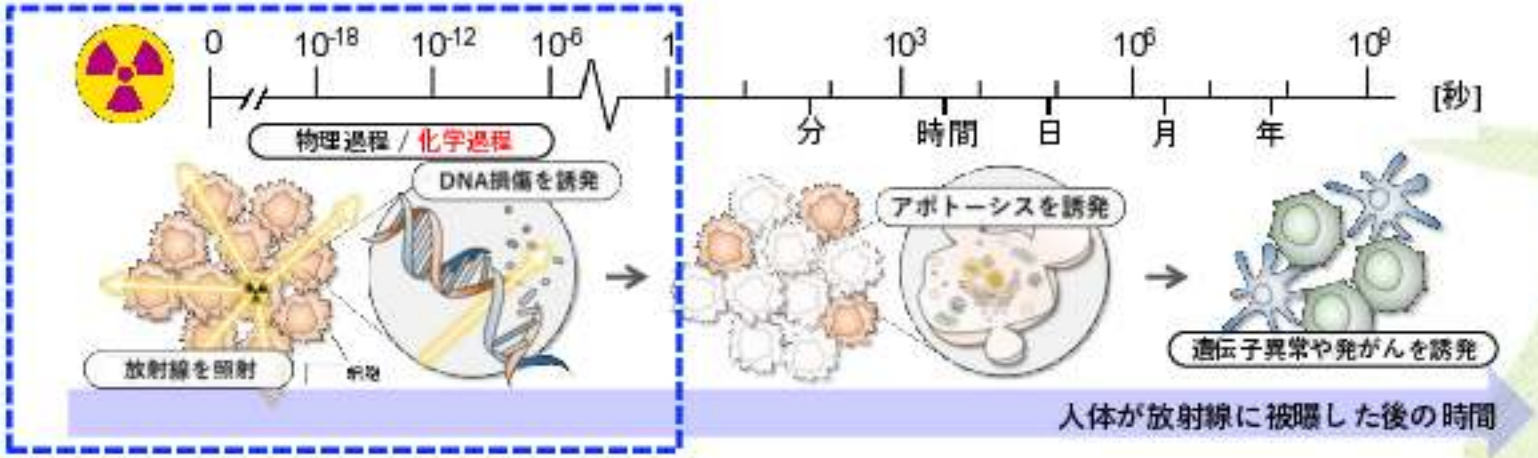


電離と励起の解析により，DNA損傷間距離の予測にも成功
→ 今後，化学過程を考慮した予測モデルの開発も進める

* Akamatsu K, et al. Radiat Res 183 (2015) 105-113; Akamatsu K, et al. Anal Bioanal Chem 413 (2021) 1185-1192

Summary

- ✓ 電離や励起の空間パターンを解析することで，低LET放射線（e^-, H^+)のDNA損傷発生数の再現に成功！ DNA損傷予測モデル開発に成功！
- ✓ 高LET放射線により発生する，乾燥/低酸素条件下のDNA損傷数も電離励起の空間パターンが重要であることがわかった。
- ✓ 今後，化学過程を考慮したDNA損傷予測モデルの開発を進めることで，DNA損傷発生メカニズムの正確な理解へつなげることが期待できる。



物理・化学過程を考慮して効率的に予測するモデル開発へ！
将来的に，DNA損傷から染色体異常や発がんの予測を目指す

北海道大学

JAEA NSEC PHITS

ご清聴頂き誠にありがとうございました

本研究は下記より研究助成頂きました。
この場を借りてお礼申し上げます。

科研費 KAKENHI

令和4年度科学研究費助成事業「放射線飛跡構造の空間パターンに基づくDNA損傷予測システムの開発」(課題番号: 23K2499803)

令和5年度科学研究費助成事業「原子スケールから迫る放射線影響の根源的な理解」(課題番号: 23K0463513)

文部科学省

国家課題対応型研究開発推進事業 令和6年度原子力システム研究開発事業(若手)「水の放射線分解を模擬するシミュレーションコードの開発 」