PHITS コードの開発とそれによる中性子実験装置遮蔽性能の高度化

仁井田 浩二

(高度情報科学技術研究機構)

Development of the PHITS Code and its Application to the Optimum Shielding Design for Neutron Scattering Instruments

Koji Niita

Research organization for Information Science and Technology (RIST)

ABSTRACT

The general purpose Monte Carlo Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) is being developed and widely used in various research and development fields, such as nuclear technology, accelerator design, medical physics, and cosmic-ray research. Particularly for the shielding design of neutron scattering instruments at a 1-MW spallation neutron source facility in J-PARC, the PHITS code has been extensively used so far. In order to optimize the shielding design and estimate the dose correctly, we have introduced some special functions to simulate the optical and mechanical devices (supper mirror, T0 chopper), and to reduce the statistical errors of transport particles in the long beam lines (duct source). We present the overview of the PHITS code and show the simulation results of the neutron scattering instruments.

Keywords: *PHITS, transport code, shielding, neutron scattering instrument, J-PARC*

1. はじめに

かつて、加速器とともに測定器も大型化し、4 π 全方位測定とか全粒子イベント測定とか言われ出した時に、「全てを測定することは全てを測定しないことと同義である」と大型予算に縁のない研究者が皮肉を込めて言っていたが、なかなか名言である。物理では森羅万象の現象を、もしくは、実験という能動的なアクションからの応答を、観測、測定し、その中の特定の情報の関係性に注目して法則を打ち立てる。有意義なシグナルを如何に選別するかが物理のセンスである。シグナル以外の情報は通常バックグラウンドまたはノイズと呼ばれ、上手にこれを低減するのが重要であるが、バックグラウンド自体が物理になることはほとんどない。本稿の主題は、このバックグラウンドを評価するシミュレーションの話である。

数値シミュレーションは、実験が不可能なシチュエーションでの数値実験、実験準備のための事前評価、複雑多体系での挙動解析等、物理の多くの局面で利用されている。特にモンテカルロシミュレーションは、素過程のチャンネルが膨大で、体系の構成要素が巨視的な数、例えばアボガドロ数、で不均一の系を扱う場合、絶大な力を発揮する。そもそも数値シミュレーションとコンピューターの発展の牽引力となった核分裂連鎖体系の解析がその典型であり、以下に紹介するシミュレー

ションコードも放射線挙動解析という点でこの流れをくむものである。

2. PHITS コードの概要

PHITS[1]とは、Particle and Heavy Ion Transport code System の頭文字からつけられた名前、ほぼ全ての粒子と重イオン（原子核）の巨視的物質中の輸送を記述する3次元モンテカルロコードである。豊富なユーティリティーとグラフィカル出力を備えた汎用コードになっている。現在も日本原子力研究開発機構を中心に改良開発、配布、講習会が行われており、国内外で3000名以上の登録ユーザーを持ち、工学、理学、医学の様々な分野で利用されている。汎用輸送コードでは、世界の5大コード（MCNP, FLUKA, GEANT4, MARS, PHITS）のひとつに数えられている。PHITS コードでは、1TeVのような非常に高いエネルギーまで、輸送粒子と物質中の原子核との核反応、また、原子反応、全てを取り扱うことが必要である。そのために反応の物理モデルによるシミュレーションと核データライブラリをコード内で用いている。コードの精度は、これら素過程の記述の精度によるので、数多くのベンチマーク問題を通して PHITS の精度が検証されている[2]。PHITS コードは、ソースコード、データライブラリ、グラフィックユーティリティー、実行ファイル等を全て含んだひとつの

パッケージとして、国内では高度情報科学技術研究機構 (RIST) を通して、国外は OECD/NEA の Data Bank もしくは米国の RSICC (Radiation Safety Information Computational Center) を通して配布されている。プログラムは Fortran で書かれており、Windows, Mac, Linux のプラットフォームで実行可能で、MPI と OpenMP による並列計算も実装されている。PHITS コードの前身は J-PARC の建設に向けて開発されたもので、現在でも多くの加速器施設の遮蔽設計に用いられているが、宇宙・地球惑星科学分野や、最近は特に放射線治療、また、世界の放射線安全基準を策定する ICRP の勧告書 [3] 等の放射線防護研究に精力的に利用されている。

3. 中性子ビームライン用の特殊機能

本誌の読者は、中性子ビームラインのシミュレーションといえば、McStas 等の中性子の ray-tracing シミュレーションコードを思い浮かべる方が多いことと思う。McStas で扱うのは中性子ビームラインの光学と試料による散乱である。それによって、ビームラインの設計と試料周りの測定系の設計を行うことができる。これはシグナルについてのシミュレーションである。一方、PHITS では、ビームラインから漏れた粒子、途中のデバイスや試料で散乱した粒子等、ロスビームを線源とした周辺の漏洩線量の評価、即ちバックグラウンドの評価である。一見、両者は対象が分かれており両立するように見えるが、中性子実験装置では、光学的デバイスやメカニカルデバイスで制御される中性子の量が摂動で扱える量でないことが多く、他の荷電粒子の加速器実験装置と異なり、遮蔽を評価するためにも、これらのデバイスを考慮したシミュレーションが必要になる。そこで PHITS では、スーパーミラー等の光学デバイス、T0 チョッパー等のメカニカルデバイス、磁場等の外場、Bragg edge 効果等のコヒーレント散乱の効果をユーザーが簡単に定義できる新しい機能として実装した。これらの特殊機能の導入により、測定室を含む中性子ビームラインの遮蔽評価が非常に迅速に行えるようになった。この機能は他の汎用コードでは現在も実装されておらず、McStas 等のコードで計算した結果を線源として手間のかかる接続計算等で評価をしているのが現状である。

新しい機能を PHITS に導入した結果、遮蔽の評価の効率は格段に向上したと同時に、シグナルに対する新しいバックグラウンドの評価ができるようになった。中性子ビームラインに曲管のガイド T0 チョッパーの導入は、試料位置に入ってくる高エネルギー成分を排除するためであるが、実際に高エネルギー成分をどれだけ減じることができるかを評価する必要がある。このためには高エネルギー粒子の反応からの 2 次粒子、多重散乱、それらの輸送を全て追う必要がある。例えば、高エネルギー中性子はスーパーミラーでの反射はないが、ガイド管との弾性散乱成分は高エネルギーの場合

Fig. 1. Energy spectra of neutrons inside the guide tube at the entrance and end of the beam line for the straight T0 chopper system and the curved guide system.

Fig. 2. Neutron currents above 10 MeV as a function of the distance from the moderator for the straight guide system without/with T0 chopper and for the curved guide system.

前方ピークなので、それらの寄与も重要である。

Fig. 1 は、中性子のエネルギースペクトルを 2 つのガイド管の出口で比較したものである[4]。ひとつは直管でモデレータから 7.7 m–39 m までで、8.4 m の位置に T0 チョッパーが設定してある。一方曲管は曲率半径 3950 m、モデレータから 7.7 m–32.7 m の部分、最後の 6.3 m (32.7 m–39 m) 部分は直管が配置されている。両者ともガイド管は 3 cm × 8 cm の断面で、スーパーミラーは 3Qc である。モデレータ位置での中性子スペクトルは、J-PARC の結果を用いた[5]。Fig. 1 が示すように、eV 以上の中性子は両者とも 6 桁くらい減じることができるが、非弾性散乱の試料からのシグナルは入射フラックスから 6-7 桁小さいので、これら

のバックグラウンドが無視できるほど小さいわけではない。T0 チョッパーを用いた直管の場合、10 eV から 100 keV までは完全に除去されているが、それ以上の領域では、T0 チョッパーの 30 cm 厚のインコネルの素材を通過した成分が見られる。金属はこのエネルギー領域に共鳴領域があるのでこのような透過成分が出現する。一方、曲管の場合は、eV 以上の成分が一定残るが、これはガイド管との弾性散乱の成分である。Fig. 2 は、10 MeV 以上の中性子のカレントをモデレータからの距離の関数としてプロットしたものである[4]。3 つのケースの結果がプロットされている。まず白抜きのシンボルの線が、直管で T0 チョッパーがない場合の結果である。この場合カレントは線源からの距離 L の 2 乗に反比例する $1/L^2$ の法則に乗っている。黒色シンボルの線がこれに T0 チョッパーが入った場合である。T0 の位置で 2 桁ほど減衰し、その前後は $1/L^2$ の法則に従う。実線だけのものが曲管の場合で、20 m 以上で直達線が見えなくなるあたりから急激に減衰し、最後の 6.3 m の直管部分は $1/L^2$ の法則に従う。これらの関係は、直管、曲管、T0 チョッパーの条件によるので、シミュレーションによって最適解の評価を行うことができることが PHITS の大きな特長である。

4. J-PARC 中性子実験装置の遮蔽設計

J-PARC の中性子散乱施設のように長いビームラインの遮蔽を計算するには、前節で述べたような特殊な物理的デバイス等をシミュレーション計算に実装しなければならない問題の他に、モンテカルロ特有のテクニカルな問題がある。それはモデレータ表面の線源の角分布が等方であるとする、ガイド管内のカレントは、線源からの距離 L

の関数として $1/L^2$ の法則で、遮蔽に関係するガイド管に当たるカレントは $1/L^3$ の法則で減衰する。100 m のガイド管の先の遮蔽を計算する時に、普通に線源を発生させると 10^6 の線源をモンテカルロ的に発生させて 1 個しか 100 m 先のガイド管壁に直達で届かない。このような状況を改善するためにモンテカルロ法では粒子のウエイトを変化させ分散の低減を図る幾つかの方法があるが、ここでは長いガイド管のような特殊な線源に特化したダクトソースというものを考案した。ユーザーがモデレータの位置、大きさ、ガイド管の大きさ、入口と出口の位置を指定すると、ガイド管の入口から出口までの表面にモンテカルロ粒子が均一に当たるように線源位置で粒子を発生させ、その時のモンテカルロ粒子のウエイトを自動調整する機能である。これによって、長いガイド管の周囲はモデレータからの距離に関わらず一定の統計誤差で計算を実行できることになる。原理は簡単であるが、モデレータ近くではより大きいモデレータ表面が見える効果なども自動で取り込まれている。この機能を使うことによって、100 m 先の試料周辺と、15 m 付近のビームラインの根元周辺の遮蔽が同等の統計誤差で一度に計算することができるようになって、大幅な計算時間の短縮を図ることができた。

J-PARC の中性子実験施設は、3 GeV の陽子を核破砕ターゲットに入射させ、そこから発生する中性子をモデレータで減速させ各ビームラインに導いている。モンテカルロ計算で陽子を線源として試料位置までの中性子を毎回計算するには膨大な計算資源が必要である。J-PARC の MLF の中性子施設開発グループは、設計段階で陽子からモデレータ表面までのシミュレーションを行い、モデル

Fig. 3. 3D view of experimental hall No.1 of MLF by PHITS.

Fig. 4. 3D view of experimental hall No.2 of MLF by PHITS.

ータ表面での 23 本の中性子ビームポートに対する中性子スペクトルデータを算出し、データベースとしてホームページに公開している[5]. このデータを線源として 2 ステップの接続計算を行うことがもうひとつの重要な時間短縮の要素である. これらの方法は、実際に J-PARC の中性子実験施設にビームが入り、中性子のフラックスが測定されて PHITS の 2 ステップ計算の予測と比較され検証された. ガイド管がない場合、0.4 eV 以下の中性子の絶対値で $\pm 20\%$ の範囲で一致した[6]. 3 GeV 陽子ビームを出発点としたシミュレーションでこの結果は驚異的な数字である.

2005 年からこれらの新しい機能を用いて実際の J-PARC 中性子ビームラインの設計のための遮蔽評価を開始した. 他の加速器施設と比較して、J-PARC 中性子ビームラインの特徴は、まず、23 本のビームラインが中心から放射状に伸びている構造のため、中心に近い部分で各ビームラインの遮蔽体が干渉すること、また、23 本のビームラインが同時に建設されるのではなく、順次、独立に設計、建設されていくことである. そこで遮蔽評価を始めるにあたって、単一のビームラインの計算と隣り合うビームラインの計算が自由に選択できるようにするための計算モデルの設計を行った. 具体的には各ビームラインに、計算モデルに必要なセル番号、面番号等の範囲を割り振り、ユニバースという機能を用いて各ビームラインの結合、取り外しを自由にできるようにした. また、どのビームラインの線源を使うかも自由に選択できるようにした. 当初、4 本のプロジェクトで始まった中性子ビームラインの建設も 14 年が経過しほぼ全てのビームラインが実験に利用されている. この間、当初設定した計算モデルの規則は当財団が受注する場合だけでなく、外部の研究グループが遮蔽評価する場合にも踏襲していただいた. このことにより、先行のビームラインのグループが達成した資産を後続のグループも引継ぎ利用することになり、各ビームラインの遮蔽設計が迅速にかつ効率よく達成できた.

Fig. 3, Fig. 4 は J-PARC の MLF 第 1 実験ホールと第 2 実験ホールの計算モデルを PHITS で 3 次元表示したものである. この 2 枚の図の中にこれまで 14 年の遮蔽評価の資産が全て含まれている. ひとつひとつのビームラインの遮蔽体の中には、TO チョッパー等のメカニカルデバイス、スーパーミラー、コリメータが組み込まれており、試料位置には想定された試料が置かれ、どのビームラインをオンにするかを選択でき、建屋全体での線量、各評価点での線量評価、また、高エネルギー中性子の寄与、光子の寄与等、シミュレーションならではの物理量も計算できる. 今後既存のビームラインの改良、置き換えも進むであろうが、これまで培った資産を十分に活用して迅速な遮蔽設計を行ない、中性子散乱による新たな成果が生まれることを期待したい.

5. 最後に

筆者がまだ核物理の核反応理論の研究を行っていたころ、QMD (Quantum Molecular Dynamics) という原子核反応をイベントとしてシミュレートする数値計算コードを作成した[7]. 物理モデルは quantum とついているが半古典的な MD である. 現象論的な核子間の 2 体力を基礎として MD を行うものであるが、広いエネルギー領域の核反応からの 2 次粒子生成、特に中性子の生成断面積をよく再現した. これは PHITS のような工学的な利用には重要であるが、核物理として話題性は小さかった. 核物理としては、やはり断面積の小さい、もしくは、エキゾチックな現象から、その特異性によりこれまでの概念を覆す新しい物理へと導く契機となることを期待するのであろう. これを契機に筆者は、より汎用性、工学的利用の方に舵を切り、PHITS のような工学的な分野に移った. シグナルの物理からバックグラウンドの工学に移籍した. 今回の受賞でバックグラウンドを評価する仕事は少しでもシグナルの物理の手助けになったことが評価されたのであれば幸甚ある.

参考文献

- [1] T. Sato, *et al.*, "Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02", J. Nucl. Sci. Technol. **55**, 684 (2018).
- [2] Y. Iwamoto, *et al.*, "Benchmark study of the recent version of the PHITS code", J. Nucl. Sci. Technol. **54**, 617 (2017).
- [3] ICRP, 2010. Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures. ICRP Publication 116, Ann. ICRP 40(2-5).
- [4] K. Niita, *et al.*, Proc. ICANS-XVII, 640 (2005)
- [5] J-PARC Homepage:
<https://j-parc.jp/researcher/MatLife/ja/instrumentation>
- [6] F. Maekawa *et al.*, Nucl. Instr. Meth. **A620** 159 (2010).
- [7] K. Niita *et al.*, Phys. Rev. **C52** 2620 (1995).