

Dump機能の改良によるPHITSの高度化

仕様書

1. 件名

Dump機能の改良によるPHITSの高度化

2. 作業目的及び概要

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、任意の形状・物質内における多様な放射線の挙動を解析可能な汎用モンテカルロ計算コードであり、工学・医学・理学の多様な分野で利用されている。本件では、3. 作業内容に示す dump 機能の改良等を行って PHITS を高機能化する。

3. 作業内容

本件では、下記の項目を実施する。

- ・コードの改良
- ・テスト計算
- ・報告書の作成

以下に、具体的な作業内容を説明する。

3.1 コードの改良

3.1.1 [t-track]、[t-deposit]、[t-point]、[t-interact]、[t-dpa] タリーへの dump 機能の追加

PHITS の [t-cross]、[t-product]、[t-time] など、いくつかのタリーセクションには、タリーされた粒子情報をすべて書き出す「dump 機能」が備わっている。この機能を、[t-track]、[t-deposit]、[t-point]、[t-interact]、[t-dpa] タリーにも追加する。ただし、追加するのは、mesh = reg の場合に限定する。新たに追加される出力情報の種別として、以下を含める：

- 直前の粒子 ([t-product]の場合は始状態) の kf コード (ID=21)、位置 (ID=22, 23, 24)、方向ベクトル (ID=25, 26, 27)¹、エネルギー (ID=28)、ウェイト (ID=29)、時間 (ID=30)
- タリー値 (ID=31)²
- 反応種類 (ID=32)³
- 領域番号・物質番号 (ID=33, 34)

これらの ID は、既存の dump 機能でも使えるようにする。出力ファイル名の命名規則は、既存の dump 機能に準じる。また、[t-time]は、現状、output = cutoff のみ dump 機能が使えるが、他の output でも動作するように改良する。なお、これらの出力に関しては、既存の dump 機能と併せて共通のサブルーチンを使って出力するようにし、各タリールーチン内に write 文は追加しないようにプログラミングする。その際、共通 Write 文のフォーマットは 100(es24. 15)とする。

また、[t-deposit] かつ output=deposit、あるいは [t-interact] かつ MorP=prob の場合は、以下の情報のみを出力対象とする：

- バッチ番号 (ID=19)

¹ ソースコード内の変数としては存在しないため粒子の新旧位置情報から計算する

² プログラム中の tlv に相当する値。[t-track]では飛跡長、[t-deposit]では付与エネルギー、[t-point]ではフラックス、[t-interact]ではウェイト、[t-dpa]ではDPAを表す。

³ Jcoll 及び atmrc から 1 つの反応種類を決める新たな function を発注者側で作成して提供する

- ヒストリー番号 (ID=18)
- タリー値 (ID=31)

これらはヒストリー終了時に出力されるが、すべてのタリー値が 0 の場合は出力を行わない。例えば、タリー領域を 2 つ定義し、1 バッチ 2 ヒストリー目のタリー値がそれぞれ 2.0 及び 3.0 の場合、

```
dump = 3
```

```
19 18 31
```

と定義すれば、出力結果が

```
1 2 2.0 3.0
```

となるようにする。

3.1.2 Dump 機能のヒストリーカウンター対応

現行の dump 機能は、ヒストリーカウンターによる制御を行うことができない。これは、dump 処理がタリー時点で即座に情報を出力するため、ヒストリー終了時のカウンター値を事前に予測できないためである。この問題への対策として、タリーに dump パラメータと chmin または chmax が同時に指定されている場合、出力すべき情報を一時的にメモリに保存し、ヒストリー終了時にカウンター値を参照して、出力の可否を判断する処理に変更する。一時保存用のメモリ dumphist は OpenMP ノード及びタリーごとに allocate で確保し、そのサイズは [parameters] セクションに新たに導入するパラメータ ndumpmax により設定可能とする (デフォルト値: 10000)。例えば、OpenMP が 4 並列、dump とヒストリーカウンターを併用するタリーが 3 つ、ndumpmax=50000 とした場合、確保される配列は dumphist (50000, 3, 4) となる。配列を超えた場合は、warning を出してそれ以降の情報は切り捨てる。

3.1.3 カウンター・カットオフ機能の導入

エネルギーやウェイトと同様に、カウンターの値を参照して、ある閾値以下または以上の粒子をカットオフする機能を導入する。この閾値は、[parameters] セクションに新たに追加する ctmin(1-3) および ctmax(1-3) によって定義し、両者のデフォルト値は 0 (カットオフなし) とする。このカウンター・カットオフ機能は、カウンターの値が変化したタイミングで作動し、条件を満たした粒子は即時に消滅させる。消滅した粒子については、崩壊やエネルギー付与処理は行わない。これはウェイトによるカットオフと同様の扱いとする。なお、ctmin および ctmax は、全ての粒子に対して同一の値とする。

3.1.4 基幹 subroutine の階層化

subroutine ovly12, partrs, nreac, getflt は、PHITS の基幹をなす重要なサブルーチンであるため、できる限り階層化してプログラムの可読性を高める。例えば、ovly12.f の場合、507~593 行目の初期化の部分や、601~703 行目の乱数セットアップ部分はそれぞれ別途サブルーチン化し、ovly12.f からはそれらの新規 subroutine を call するようにする。具体的な subroutine 化の箇所は、受注者が選定の上、適宜、発注者と相談して決定する。

3.2 テスト計算

上記新機能を使ったテスト計算を実施する。その際、Intel Fortran Single 版, Intel Fortran OpenMP

版, Intel Fortran MPI 版、gfortran Single 版でそれぞれ実施する。テスト計算に使用する例題は、インプットファイルを受注者が自作する。特に 3.1.1 や 3.1.2 の改良に関しては、MPI や OpenMP での動作確認を入念に行う。

3.3 報告書等の作成

上記改良に関する報告書を作成する。

4. 要件

開発した機能を用いたテスト計算を行い、Intel Fortran Single 版, Intel Fortran OpenMP 版, Intel Fortran MPI 版の結果が完全に一致することを確認する。また、変数初期化及び領域外参照チェックオプションを利用し、変数定義に関するエラーがないことを確認する。

5. 支給物品または貸与品

必要に応じて、最新版 PHITS コード一式を貸与する。

6. 納入物品

- | | |
|------------------------------|-----|
| 1) 作業報告書 | 1 部 |
| 2) 開発したプログラムの電子ファイル (CD-ROM) | 1 枚 |

7. 納期、納入場所及び納入条件

納期：令和 8 年 1 月 30 日（金）

納入場所：日本原子力研究開発機構 原子力科学研究所 第 1 研究棟 225 号室

納入条件：持込渡し

8. 検収条件

7. に定める納入場所に納品された、6. に定める納入物品の内容及び員数を確認し、3. に定める作業が 4. に定められた要件を満たして実施されていることを確認し、検収とする。

9. 機密保持

受注者は、本業務の実施にあたり知り得た情報を厳重に管理し、本業務遂行以外の目的で第三者への開示、提供を行ってはならない。

10. 協議

本仕様書に定めのない事項、又は疑義が生じた事項に関しては、原子力機構担当者と協議の上、決定すること。

11. グリーン購入法の推進

本契約において、グリーン購入法（国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律）に適

用する環境物品（事務用品、OA機器等）が発生する場合は、これを採用するものとする。また、本仕様に定める提出図書（納入印刷物）については、グリーン購入法の基本方針に定める「紙類」の基準を満たしたものであること。

12. その他

- 1) 受注者は、作業中に原子力機構の担当者と連絡を取り、作業の進行状況を報告すること。
- 2) 本仕様書に定めのない事項、または疑義が生じた事項に関しては、発注担当者と協議の上、決定すること。
- 3) 本作業を受注することにより知り得た事項は第三者に口外しないこと。
- 4) 受注者は異常事態等が発生した場合、原子力機構の指示に従い行動するものとする。また、契約に基づく作業等を起因として異常事態等が発生した場合、受注者がその原因分析や対策検討を行い、主体的に改善するとともに、結果について機構の確認を受けること。

13. 検査員

検査員

- （１）一般検査 管財担当課長

以 上