

PHITS動作検証用インプットファイル群の作成

仕様書

国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構
原子力基礎工学研究センター
放射線挙動解析研究グループ

1. 件名

PHITS動作検証用入力ファイル群の作成

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。近年、AI コーディング技術の進展により、PHITS における新機能開発や既存機能の改良が加速している。一方で、開発速度の向上に伴い、追加・修正された機能が既存機能に予期しない副作用を及ぼしていないかを継続的に検証する仕組みの重要性が高まっている。このため、PHITS の多様な機能を網羅的に用いた多数の入力ファイルを定期的に実行し、過去の計算結果との差分を確認することで、コード改良に伴う意図しない計算結果の変化や不具合の発生を検出する検証システムの整備を進めている。本件では、この検証システムにおいて実行するための PHITS 入力ファイル群を作成する。作成する入力ファイル群は、PHITS の主要機能を可能な限り広く含むものとし、今後の継続的な開発・保守における動作確認及び品質保証に資することを目的とする。

3. 作業内容

本件では、下記の項目を実施する。

- ・既存入力ファイルからの選択
- ・新規入力ファイルの作成
- ・連続実行スクリプトの作成
- ・報告書の作成

以下に、具体的な作業内容を説明する。

3.1 既存入力ファイルからの選択及び検証用への調整

PHITS パッケージに既に含まれている入力ファイルの中から、検証に有用と考えられるものを選択する。以下に、そのおおまかな選択方法を示すが、最終的には、受注者が候補を選別し、発注者が確認することにより決定する。

- ・recommendations : 原則として全て選択する。
- ・lecture : advanced、basic、exercise、therapy から選択する。一連の演習で段階的に機能を追加している場合は、原則として最終段階の入力ファイルを選択する。ただし、途中段階で独立した機能を扱っている場合 (options、sourceA など)、または前段階の出力ファイルを後段階で読み込む場合 (sourceB、DCHAIN など) には、必要な複数の入力ファイル及び関連ファイルを選択する。
- ・sample : tally を除いて全て選択する。tally に関しては、1 つのファイルに全ての mesh タイプ (reg、r-z、xyz、tet) を含むように作り直す。また、現状ではタリー値が全て 0 になる場合があるため、各タリーを用いた現実的な照射条件や計算条件となるように設定を変更する。さらに、dump 出力に対応しているタリーについては、可能な範囲で dump 機能を有効化し、通常のタリー出力に加えて粒子情報出力の検証にも利用できるようにする。[t-deposit]のカーマ近似・荷電粒子エネルギー損失モード、[t-interact]のMorP など、パラメータにより挙動が大きく変わるタリーについては、それぞれの設定に対応したサンプルを準備

する。また、istdev=-2 を指定することにより、再開始計算モードのテストも実施できるようにする。

・utility : 再コンパイルを要するサンプル (UserDefinedModel、usranatal、usrally) を除き、基本的に選択する。

3.2 新規インプットファイルの作成

上記でカバーできない機能については、新規のサンプルインプットを作成する。特に[source]に関しては、サンプルインプットが十分に整備されていないため、主要な s-type 及び e-type を可能な限り網羅するインプットファイル群を作成し、sample フォルダに追加する。それ以外にも、既存のサンプルインプットファイルで使用されていないセクションや機能（例えば、[temperature], [mat time change], [repeated collisions], [elastic options], [libout], [delta-ray], 重力場の設定、デフォルト以外の核反応モデルなど）がある場合は、サンプルインプットファイルを新規作成した上で、sample フォルダに適宜追加する。ただし、PHITS に含まれる全ての機能に対してサンプルインプットファイルを作ることは現実的ではないため、詳細は、PHITS 利用に関する知識や経験をもとに受注者が提案し、発注者が確認することにより決定する。

3.3 連続実行スクリプトの作成

上記の過程で選択・作成したサンプルインプットファイル群を連続で実行するスクリプトを作成する。スクリプトは、各インプットファイル名を記載したリストを入力ファイルとして読み込み、それらのインプットファイルを指定した作業フォルダにコピーして連続実行する形式とする。その際、過去のタリー結果を読み込んで実行する場合は、1行に複数インプットファイルを指定する形で適宜対応させる。また、計算時間を短縮するため、maxcas の最大値は 10000、maxbch の最大値は 2 とする。tally に関するサンプルについては、2 回実行して再開始計算のテストを行う。さらに、計算の進捗を報告するログを作成し、そのログには標準出力ファイル (phits.out) から読み取った計算時間を出力する。その際、標準出力ファイルに「phits simulation was properly finished ...」の文字がない場合は、エラーが途中で発生したと考えられるため、計算失敗の旨をログファイルに記録する。

3.4 報告書等の作成

上記作業に関する報告書を作成する。

4. 要件

上記過程で作成した連続実行スクリプトをテストし、結果が正しく出力されることを確認する。

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) 開発したサンプルインプットファイル群及びスクリプトの電子ファイル (CD-ROM)

1 枚

7. 納期、納入場所及び納入条件

納期：令和 8 年 11 月 30 日（月）

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、本仕様書に定める提出図書（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