

PHITS

Aplikacija PHITS (engl. *Particle and Heavy Ion Transport code System*) simulacijski je kod Monte Carlo transporta iona opće namjene. Izračunava transporte svih čestica širokog energetskeg ranga koristeći knjižnice nuklearnih podataka i različite modele nuklearnih reakcija. Namijenjen je za područja povezana s fenomenom transporta čestica i teških iona, radioterapije, kozmičkog zračenja i sl.

Na računalnom klasteru Isabella PHITS je kompajliran s Fortran kompajlerima te koristi Open MPI knjižnice. Podržava serijsko i paralelno izvođenje poslova, odnosno izvođenje na jednojezgrenim i višejezgrenim procesorima.

Moduli

Moduli koji dopremaju PHITS u Vašu okolinu definirani su u tablici niže:

Verzija	Modul	Kompajler	Izvršna datoteka
3.290	phits/3.290	GNU	phits_LinGfort_MPI
3.31	phits/3.31	Intel	phits_LinIfort_MPI
3.33	phits/3.33	Intel	phits_LinIfort_MPI

Primjer korištenja

Primjer serijskog korištenja

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N phits
#$ -cwd

module load phits/3.290

phits_LinGfort_MPI phits.in
```

Primjer paralelnog korištenja

run_parallel.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N phits
#$ -cwd
#$ -pe *mpi 4

module load phits/3.290

mpirun -np ${NSLOTS} phits_LinGfort_MPI phits.in
```

Primjer input datoteke



U PHITS verziji 3.31 ne treba koristiti liniju koja definira PHITS *root* direktorij:

```
file(1) = /apps/phits/3.290/phits    # PHITS install folder name
```

phits.in

```
[ T i t l e ]
minimized input file

[ P a r a m e t e r s ]
icntl      =      0                # (D=0) 3:ECH 5:NOR 6:SRC 7,8:GSH 11:DSH 12:DUMP
maxcas     =      50              # (D=10) number of particles per one batch
maxbch     =      2               # (D=10) number of batches
file(1)    = /apps/phits/3.290/phits # PHITS install folder name
file(6)    = phits.out            # general output file name

[ S o u r c e ]
s-type = 1          # mono-energetic axial source
proj = proton       # kind of incident particle
dir = 1.0           # z-direction of beam [cosine]
r0 = 0.             # radius [cm]
z0 = 0.             # minimum position of z-axis [cm]
z1 = 0.             # maximum position of z-axis [cm]
e0 = 150.           # energy of beam [MeV/u]

[ M a t e r i a l ]
mat[1]  H 2 0 1

[ S u r f a c e ]
10 so      10.

[ C e l l ]
100      1 -1.0 -10
101     -1      10

[ T - T r a c k ]
mesh = xyz          # mesh type is xyz scoring mesh
x-type = 2          # x-mesh is linear given by xmin, xmax and nx
nx = 200            # number of x-mesh points
xmin = -20.         # minimum value of x-mesh points
xmax = 20.          # maximum value of x-mesh points
y-type = 1          # y-mesh is given by the below data
ny = 1              # number of y-mesh points
      -5.0 5.0
z-type = 2          # z-mesh is linear given by zmin, zmax and nz
nz = 200            # number of z-mesh points
zmin = -20.         # minimum value of z-mesh points
zmax = 20.          # maximum value of z-mesh points
t-type = 2          # t-mesh is linear given by tmin, tmax and nt
nt = 1              # number of t-mesh points
tmin = 0.0          # minimum value of t-mesh points
tmax = 1.0          # maximum value of t-mesh points
part = all
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]
axis = xz           # axis of output
file = track_xz.out # file name of output for the above axis
title = Track Detection using [T-track] tally
gshow = 3           # 0: no 1:bnd, 2:bnd+mat, 3:bnd+reg 4:bnd+lat
epsout = 1          # (D=0) generate eps file by ANGEL

[ E n d ]
```

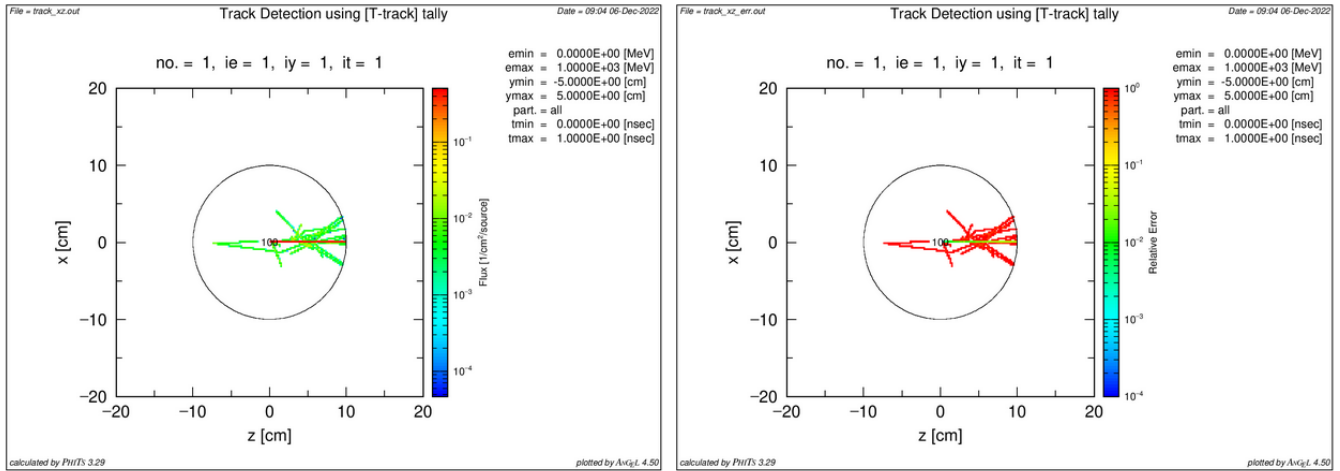
Praktični primjer

Simulacija čestičnog toka oko cilindričnog spremnika vode ozračenog protonskom zrakom energije 290 MeV

PHITS simulira kretanje čestice koristeći Monte Carlo metodu te predviđa njezino ponašanje omogućujući izračun različitih kvantitativnih vrijednosti poput fluksa i depozicije energije u određenoj regiji.

Osnovne komponente *input* datoteke su geometrija, izvor i raboš (engl. *tally*). Geometrija se definira sekcijama 'materijal', 'površina' i 'ćelija', dok je izvor okarakteriziran oblikom, vrstom, energijom i pravcem kretanja čestice. Raboš se koristi za izračun kvantitativnih vrijednosti tijekom kalkulacije radijacijske transporta. Geometrija u 3D virtualnom prostoru (ćelija definirana u Kartezijevom koordinatnom sustavu) te informacije o izvoru čestice ključni su elementi izračuna kvantitativnih vrijednosti tih čestica. Za nedvosmisleno određivanje sekcije 'raboš', potrebno je specificirati koja se vrijednost određuje, gdje, za koju česticu, u kojoj mjernoj jedinici te u kojem se obliku *output* datoteke rezultat ispisuje.

U sekciji izvor definiran je oblik cilindra, dok je čestica proton sa zadanim dimenzijama, smjerom kretanja i energijom u MeV/u. 3D geometrija definira se materijalom i površinom ćelije u sekciji 'ćelija'. Primjer je vodena ćelija rednog broja '100' gustoće 1 gcm^{-3} oblika sfere koja je centrirana na izvoru XYZ koordinatnog sustava s promjerom od 10 cm. Prostor oko sfere pripada drugoj ćeliji rednog broja '101', a definira se kao vanjska praznina bez zadane gustoće. Duljina prolaza (engl. *track length*) evaluira se prilikom prolaska čestice određenom regijom te se suma prolazaka skalira. Dijeljenjem skalirane duljine prolaza s volumenom regije i brojem čestica izvora dobiva se tok u $1/\text{cm}^2/\text{izvor}$. Skaliranje se vrši pomoću XYZ mreže koja je zadana parametrima x, y, z, t (vrijeme) i e (energija) koji su definirani svojim minimumom, maksimumom i brojem točki koje čine mrežu. Parametrom 'epsout' zadan je output u obliku eps datoteke.



Slika 1. 2D graf *output* datoteke PHITS izračuna toka zrake protona u vodenoj cilindričnoj ćeliji. Prikazane su trajektorije protona i vrijednosti čestičnog toka izraženog u $1/\text{cm}^2/\text{izvor}$ (lijevo) te relativne pogreške istog izračuna (desno).