

Novel user interface for PHITS using an Excel macro

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2017-10-04 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/2297/40399

Excel マクロを用いた PHITS 用インターフェースの開発

中山 和也, 坂口 健吾, 福島 誠, 中野 祥賢

要 旨

放射線は病気の診断、治療に有益であるが、放射線によって人体へ悪影響が発生することもある。そのため、その取り扱いには細心の注意が必要である。線源から放出された放射線の空間的な挙動を求めることは非常に重要である。PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) は放射線の空間的な挙動をシミュレーションするアプリケーションであるが、その使用には専門的な知識が必要で、設定ファイルの作成には時間がかかる。そこで、PHITS をより容易に使用できるよう、新たなユーザーインターフェースを開発した。その結果、例えば 80 個のパラメータの設定が必要な場合でも、本インターフェースを用いると、18 個のパラメータですむなど、必要な記述数を削減することができた。

KEY WORDS

PHITS, Excel macro, User interface, Simulation, VBA

はじめに

近年、医療現場では CT (Computed Tomography) など放射線を利用する検査装置や放射線を用いた治療(放射線治療)が普及している。放射線治療には、X線や電子線などが主に使用されているが、治療効果を向上させるべく、陽子線や重粒子線を用いた治療も実施されつつある。放射線は、体を切ることなく体内の様子を調べることができ、さらに病気の治療にも活用できるため、人類にとって極めて有益なものとなっている。しかしながら、放射線によって人体へ悪影響が発生することもある。そのため、その取り扱いには細心の注意が必要である。

PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) とは、任意の体系中における様々な放射線の挙動を、核反応モデルや核データを用いて模擬するモンテカルロ計算コードであり、日本原子力研究開発機構 (JAEA : Japan Atomic Energy Agency) などが開発しているアプリケーションである^{1,2)}。この PHITS は原子力工学、加速器工学、宇宙工学だけでなく、放射線防護、放射線医学の分野³⁾でも利用されるようになってきている。例えば、陽子線を用いたガン治療においては、患部には有効に照射し、それ以外の正常部位には照射されないよう照射方法を検討する必要がある。この検討手段として、PHITS の利用が考えられている。しかしながら、PHITS を使用するには専門的な知識が必要で、計算(シミュレ-

ーション)に必要な設定項目も多く、使いこなすには時間がかかる。特にインプットファイルと呼ばれている計算条件を記述したファイルの作成には、専門的な知識と時間を要する。

そこで、容易に PHITS を使用できるよう、Microsoft 社製の Excel のマクロ (VBA: Visual Basic for Application) を用いて、主に大学生向けの教育(実験、実習など)での利用を想定した、新たなユーザーインターフェースを開発した。エディタを使用してインプットファイルを作成する代わりに、Excel の表にパラメータを記入し、Excel から PHITS が実行できるようマクロを作成した。また、スペルミスなどの誤入力を防ぐため文字列は極力選択式とした。本論文では、PHITS の概要、作成したユーザーインターフェース、エディタを使用した通常の PHITS 使用方法との比較などについて報告する。なお、本研究では、OS として Microsoft 社製 Windows 7 Professional を使い、Excel 2013 で開発をおこなった。使用した VBA のバージョンは 7.1 である。また使用した PHITS のバージョンは 2.670 である。

PHITS を用いたシミュレーション

1. シミュレーションの手順

PHITS を用いたシミュレーションの手順を図 1 (a) に示す。PHITS 自体は、Fortran 言語で記述されたプログラ

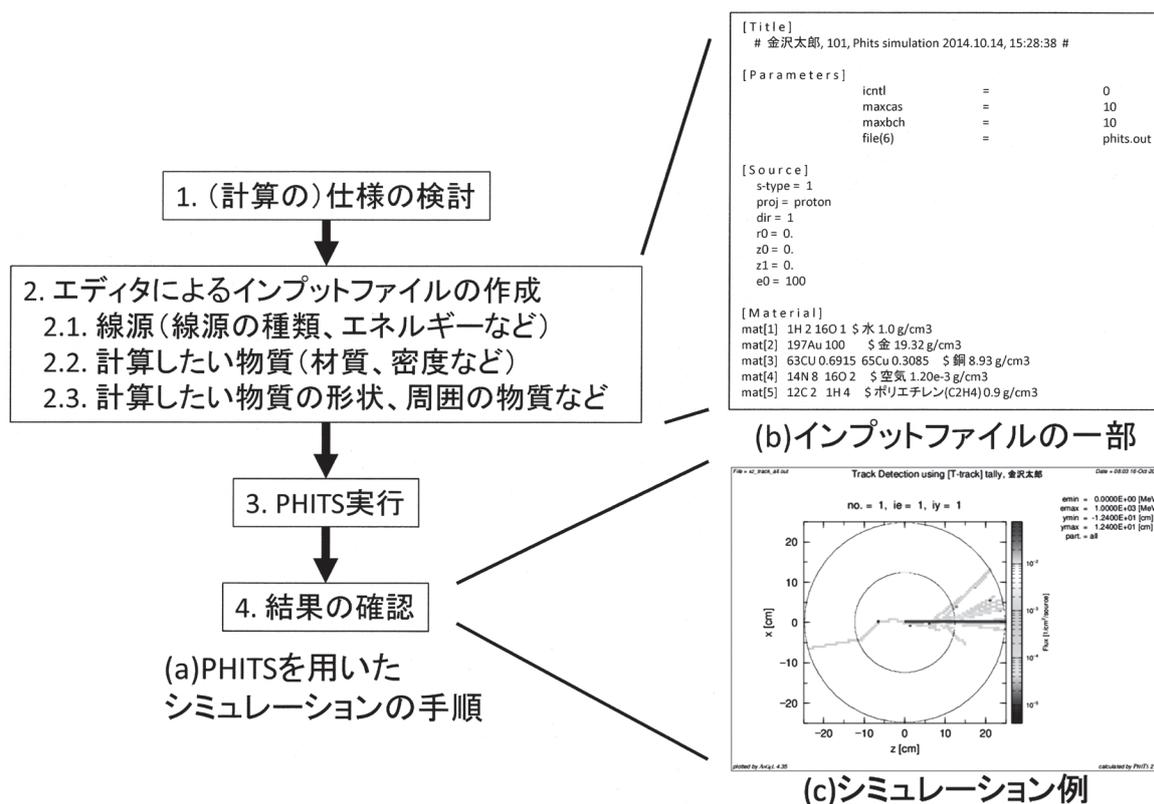


図1 PHITS を用いたシミュレーションの手順

ムであるが、ユーザーがFortran言語でプログラムを書く必要はない。ユーザーは、放射線の線源、計算したい物体の物質と幾何学形状などを記述したテキストファイル(図1 (b))を、エディタなどを用いて作成する。PHITS実行時に、作成したファイルをPHITSに読み込ませることで、粒子フルエンス、発熱量、核反応生成粒子、電離密度分布などがシミュレーションできる。シミュレーション結果はテキストファイルやEPS(Encapsulated PostScript)ファイルとして出力される。EPSファイルを見ることで(図1 (c))、放射線の分布などが視覚的に確認することが出来る。Microsoft Windows、Apple Mac、Linuxなど幅広いプラットフォームで動作可能である。

Microsoft Windowsを使用した場合、実際の実行は、作成した入力ファイルをマウスで右クリックし"送る"を選択し、さらに"PHITS"を選択すれば実行されるが、PHITSは基本的にはコマンドプロンプト上で動作するプログラムである。そのためいささか使い勝手が悪い。なお、図1 (b)と(c)の例は、今回開発したユーザーインターフェースを用いた実行結果である。

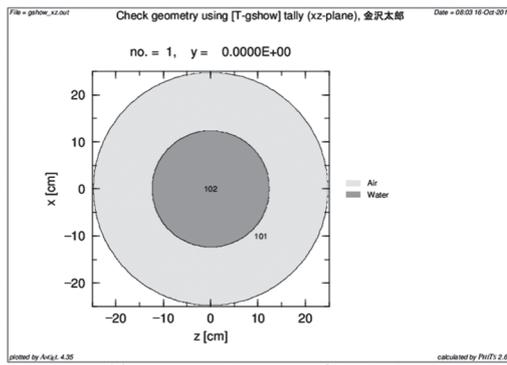
表1 主なセクション

セクション名	概要
[Title]	計算のタイトルを記述する。
[Parameters]	計算項目、計算回数などを記述する。
[Source]	放射線の線源などを記述する。
[Material]	計算する物質の材料を記述する。
[Surface]	計算する物質の(表面)形状、位置などを記述する。
[Cell]	計算する物質の配置、材料などを記述する。
[T-track]	観察(計算)範囲などを記述する。
[T-gshow]	観察(計算)範囲などの表示に関する設定を記述する。
[End]	入力ファイルの最後を示す。

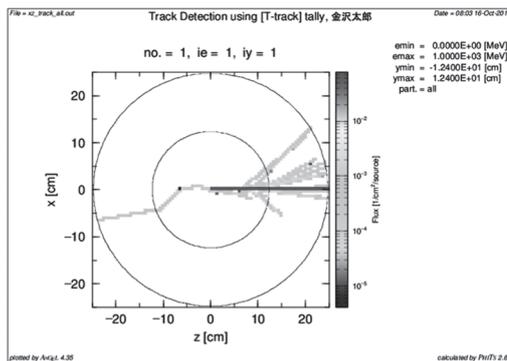
2. 入力ファイル

シミュレーションに必要な設定は多岐にわたる。そこで、PHITSの場合、設定項目のそれぞれを"セクション"という名称で分類し、ファイルに記述する。主な(よく利用する)セクションを表1に示す。セクション(設定項目)の数は40以上あるが、シミュレーション条件(仕様)によっては、不要なものも少なくない。そこで本研究では、よく利用する、表1に示した項目を生成するインターフェースを作成した。

セクション内の設定方法は、"設定項目(パラメータ)=数字(又は文字列)"が基本である(図1 (b))。例えば、セ



(a)計算領域の3次元幾何学形状



(b)シミュレーション結果例

```
[Surface]
10 10 24.8 5 circle 外側の大きな円
11 100 62.62 62.62 5 square 5 正方形, 1辺の長さ(cm)=12.4

[Cell]
100 1 10 5大きな円の内部(正)
101 1 1 10 11 5大きな円の内部かつ小さな円の外部の長さ 次(H2O)
102 2 10 10 -11 5小さな円の内部の指定(内部なので値の負の値) 金(197Au)

[T-gshow]
title = Check geometry using [T-gshow] tally (xy-plane), 金沢太郎
mesh = xyz # mesh type is xyz scoring mesh
x-type = 2 # x-mesh is linear given by xmin, xmax and nx(2:部数, 最小, 最大値指定, 線形等分)
xmin = -25 # minimum value of x-mesh points
xmax = 25 # maximum value of x-mesh points
nx = 96 # number of x-mesh points(分割数)
y-type = 2 # y-mesh is linear given by ymin, ymax and ny(2:部数, 最小, 最大値指定, 線形等分)
ymin = -25 # minimum value of y-mesh points
ymax = 25 # maximum value of y-mesh points
ny = 96 # number of y-mesh points
z-type = 1 # z-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
nz = 1 # z-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
-12.4 12.4
axis = xy # axis of output
file = gshow_xy.out # file name of output for the above axis
output = 6 # (D-2) 1:band, 2:bandmat, 3:bandnum, 4:bandmatnum
epsout = 1 # (D-0) generate eps file by ANGEL

[T-gshow]
title = Check geometry using [T-gshow] tally (xz-plane), 金沢太郎
mesh = xyz # mesh type is xyz scoring mesh
x-type = 2 # x-mesh is linear given by xmin, xmax and mx(2:部数, 最小, 最大値指定, 線形等分)
xmin = -25 # minimum value of x-mesh points
xmax = 25 # maximum value of x-mesh points
mx = 96 # number of x-mesh points(分割数)
y-type = 1 # # y-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
ny = 1 # y-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
-12.4 12.4
z-type = 2 # z-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
zmin = -25 # minimum value of z-mesh points
zmax = 25 # maximum value of z-mesh points
nz = 96 # number of z-mesh points(分割数)
axis = xz # axis of output
file = gshow_xz.out # file name of output for the above axis
output = 6 # (D-2) 1:band, 2:bandmat, 3:bandnum, 4:bandmatnum
epsout = 1 # (D-0) generate eps file by ANGEL

[T-track]
mesh = xyz # mesh type is xyz scoring mesh
x-type = 2 # x-mesh is linear given by xmin, xmax and mx(2:部数, 最小, 最大値指定, 線形等分)
xmin = -25 # minimum value of x-mesh points
xmax = 25 # maximum value of x-mesh points
mx = 96 # number of x-mesh points(分割数)
y-type = 1 # # y-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
ny = 1 # y-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
-12.4 12.4
z-type = 2 # z-mesh is given by the below data(1:部数, 分点)
zmin = -25 # minimum value of z-mesh points
zmax = 25 # maximum value of z-mesh points
nz = 96 # number of z-mesh points(分割数)
part = all # part = all
ne-type = 1
ne = 1
0.0 1000.0
unit = 1
axis = xz # axis of output
file = xz_track_all.out # file name of output for the above axis
title = Track Detection using [T-track] tally, 金沢太郎
gshow = 1 # (D-0) 1:band, 2:bandmat, 3:bandnum, 4:bandmat
epsout = 1 # (D-0) generate eps file by ANGEL
```

(c)インプットファイルの一部

図2. シミュレーションに必要な設定例と結果

クシオン [Source] 内で、放射線の線源として、陽子線 (proton) を指定する場合、式(1)のように記述する。

$$\text{proj} = \text{proton} \quad (1)$$

ここで、左辺の”proj”は入射粒子(線源の種類)を示すパラメータであり、右辺の”proton”は”陽子線”を示す。なおパラメータによっては右辺が数字である場合や、右辺が複数ある場合もある。

設定に最も時間を要するのが、[Surface]、[Cell]、[T-Track] などといった、計算領域の3次元的な形状(3次元体系)の設定である。どの位置にどのような物質を配置し、どここの値を計算で求めるかを設定する項目は多く、記述に時間がかかる。図2(a)に設定した形状例を示す。この例では2つの同心円の球が存在する。半径10 cmの内側の球が102番で定義されており、その外側に半径20 cmの球が101番で定義されている。シミュレーション結果例を図2(b)に示す。この時使用したインプットファイルの形状に関する記述部分を図2(c)に示す。

図2の例では2つの球状物体があるだけだが、より複雑な形状の記述も可能である。しかし形状の複雑さにしたがつて設定も複雑になる(必要なコンピュータのメモリ、

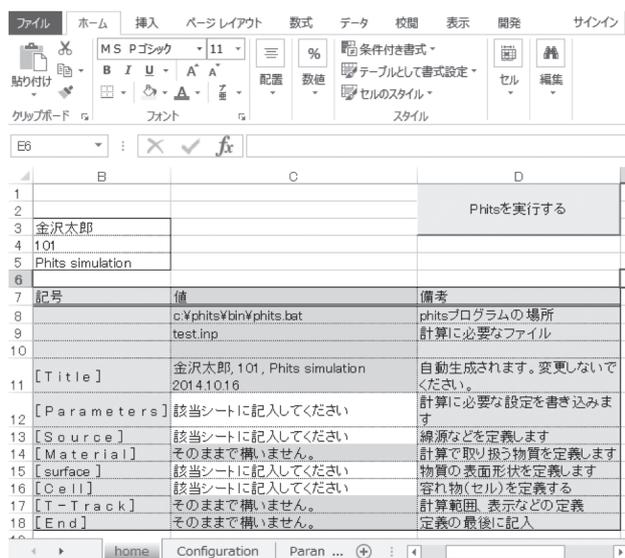
計算時間も増加する)。また説明を省略したが、発熱量などのシミュレーションも可能であるが、その分設定項目も増える。なお、図2の例は、今回開発したユーザーインターフェースを用いた実行結果である。

開発したユーザーインターフェース

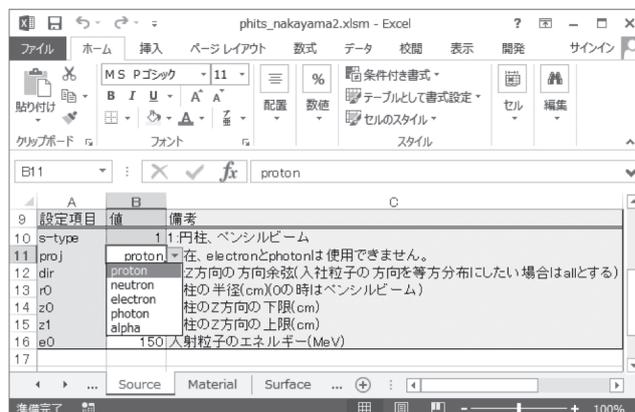
1.仕様

大学生向けの教育(実験、実習など)での利用を想定し、機能を絞り、以下に示す仕様にもとづいて、開発をおこなった。

- a. 設定に必要な文字列、例えば線源の”proton”は、文字列をセルに入力(書き込み)せず、あらかじめ設定した選択肢から選択する。
- b. 必要な数値はExcelのセルに入力する(書き込む)。
- c. 1つのシートには1つのセクションを割り当てる。
- d. 氏名、名列番号、課題名を入力させ(書き込ませ)、[Title]のセクションにこれらの項目と、シミュレーション開始時間を自動で記述する。
- e. Excelシートに設置したボタンを押すと、インプットファイルの生成とPHITSの実行までを自動でおこなう。
- f. 計算対象の物体は座標原点中心に1つとし、形状は立方体か球体とする。
- g. 出力は、計算領域の3次元形状(物質の配置)と粒子フルエンスのみとし、EPS形式で出力する。



(a)シート{home}



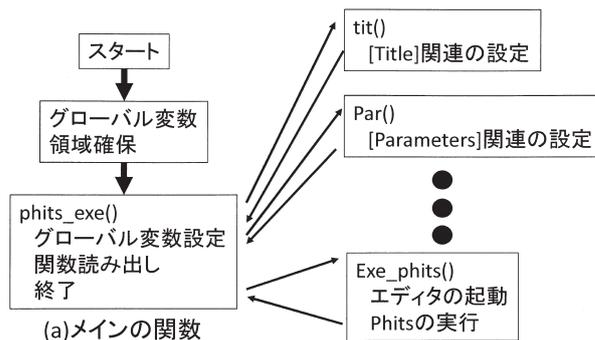
(b)シート[Source]

図3 作成したユーザーインターフェース

2.シートの構成

今回作成したユーザーインターフェースでは、入力(設定)が必要なセッション(シート)は、[Parameters]、[Source]、[Surface]、[Cell] の4つである。[Material] というセッション(シート)は用意してあるが、よく使用される材料が入力済みであり、変更の必要はない。シミュレーションに必要な [T-Gshow]、[T-Track] の2つのセッションは自動生成される。そのため [T-Gshow]、[T-Track] の2つのシートは存在しない。[T-Gshow]、[T-Track] は自動生成されるので、細かな指定は出来ないが、その分入力すべき項目を減らすことが出来る。またセッションに対応していないシートとして、PHITSの実行ボタンを配置した {home}、Excelのマクロ実行に必要な変数を記述する {Configuration} という2つのシートを準備した。なお本論文では、セッション名は [] で囲み、該当するセッションがないシート名は || で囲み区別する。以下にいくつかのシートについて説明する。

図3(a)にシート {home} を示す。ここでは、氏名、名刺番号、課題名の入力欄(図3(a)の左上のセル)、PHITS実行ボタン(図3(a)の右上)、準備したセッション(シート)の説明が書かれている。セッション [Title] は、氏名などをとて自動的に生成される (PHITS実行ボタンを押した時の時刻もinputファイルの [Title] には記述される)。[Source] に関する設定の様子を図3(b)に示す。線源の種類は図3(b)に示すようにプルダウンメニューから選択する方式をとった。これによりスペルミスなどの誤入力を防ぐことが出来る。また入力欄の右側に説明文書を記述し、この説明文が入力の手助けとなっ



(a)メインの関数

(b)メインの関数から呼び出される関数

図4 プログラムの構成

ている。数値、例えば入射エネルギーなどは、入力ミスが比較的少ないと考え、数値をセルに入力(記述)するようにした。もちろん線源の種類のように、特定の選択肢(数値)から選択するように変更することもできる。その他のシートも、極力キーボードからの入力を減らすように作成した。

3.プログラムの構成

プログラムの構成を図4に示す。今後プログラムの修正などを実施しやすいように、関数を分割した。Phits_exe() という関数が一番もとの関数であり、エクセルシート上のPHITS実行ボタンを押すときの関数が最初に起動する。ただし、Phits_exe() では演算(処理)はおこなわず、各関数を呼び出している。このPhits_exe() から呼び出される関数群はセッション毎に分けられており、1つの

関数で1つのセクションに関する処理がおこなわれる。例えばPar () という関数では、[Parameters] というシート内の記述を読み出して、必要な設定をインプットファイルに出力している。またPHITS実行ボタンが押されると、設定項目が確認できるよう、生成されたインプットファイルが表示される(エディタで開かれる)。

セクション [Cell] の設定を担当する関数Cel () では、[Material]、[Surface]、[Cell] の3つのシートを読み込み、必要な設定項目を出力する必要がある。そのため今回、計算モデルをシンプルなものとして、以下に示すアルゴリズムで設定を生成することにした。今回、計算対象物体の指定は1つとし、その領域のある種の物質で囲みシミュレーションする。図2(a)の場合、中央の102番が指定された計算対象物体である。シート [Cell] では、形状(立方体か球体か)の指定、対象物体の内部材質と外部の材質を選択肢から選択する。関数Cel () はこのシート [Cell] に書かれた情報をもとに、シート [Material] とシート [Surface] の内容も読み込んで、計算対象物体に関する設定を出力している。この計算対象物体に関する設定は、エディタなどで設定を記述する場合、同一領域に複数の物質を割り当てるといった間違いがおきやすい。しかしながら、シミュレーションをシンプルなモデルとし、開発した設定ファイル生成規則を用いると記述ミス(間違い)を減らすことが出来る。

[T-Gshow]、[T-Track] などといったシートにないセクションについても関数は存在する。これらの関数は [Surface] のシートに記述された設定から、必要な設定を自動で生成している。セクション [T-Gshow] は計算領域の(幾何学形状の確認のための)表示に使用される設定を記述する。このセクションに関する設定は、TgsSur () という関数が担当している。関数TgsSur () は、最初に [Surface] の設定項目を読み取る。例えば図2(a)の場合、中央の102番の領域に関する情報を読み込み、描画範囲を指定するx、y、zの値をこの102番の領域の2倍とし、メッシュ(分割数)を1 cmあたり8個に設定している。また描画(出力されるEPS)ファイルは、xy平面とxz平面が自動で生成されるようにした。シミュレーション結果の出力に関する [T-Track] もほぼ同様な考え方で設定項目を自動生成している。

このように、細かなシミュレーション条件は指定できないものの、必要な入力数を減らし、それに伴い記述(入力)ミスを減らすようにした。また設定するセクション毎に関数を分割し、デバック、今後の改良をおこないやすいようにした。

考察

図1と図2に示した実行例より、エディタでインプットファイルを記述する方法と、今回開発したユーザーインターフェースを使用する方法を比較してみる。生成されたインプットファイルは108行あり、設定されたパラメータ数は80個である。それに対して今回作成したユーザーインターフェースを用いると入力が必要なパラメータは18個である(氏名、名列番号、課題名の3個のパラメータを含む)。入力が必要なパラメータ数を7割以上も削減できた。もちろん、インプットファイルの雛形を用意すれば、記述が必要なパラメータ数も削減できるが、それでもこの削減率は大きいと思われる。

エディタを用いてインプットファイルを作成した場合、パラメータの大半は、式(1)に示すような方法で設定をおこなう。つまり左辺が文字列となっている場合が多いので、文字列の入力箇所はパラメータ数とほぼ同じ77個である(今回の場合、数字だけの設定箇所は [Cell] の部分に3個存在した)。一方、今回開発したユーザーインターフェースを用いると、(キーボードを用いて)文字を入力する必要がある項目は、3個(氏名、名列番号、課題名)である。また選択肢から選択するタイプのパラメータが5個、数字入力が必要なパラメータが10個となっている。このように、今回開発したユーザーインターフェースを用いることで、キーボードを用いた入力箇所の大幅な削減が可能である。

PHITSの実行に関しても、操作手順の簡素化に成功した。エディタでインプットファイルを記述し、ファイルを保存した後にPHITSを実行するには、Windows上では、インプットファイルのアイコンの上にマウスカーソルを移動させ、右クリックで“送る”を選択した後、“PHITS”を選択する必要がある。今回開発したユーザーインターフェースでは {home} というシート上にある、“PHITSを実行する”というボタンをクリックするだけで、インプットファイルの生成とPHITSの実行が連続しておこなわれる。

PHITSの習熟度が低くても容易にPHITSを実行できるよう、人とコンピュータを橋渡ししてくれる人に優しいユーザーインターフェースの開発に成功した。今回、不慣れなユーザーの使用を前提にしたためPHITSの機能を非常に絞り込んでいる。セクション毎に関数を分割したので機能の追加は比較的容易であるが、機能の追加と操作性は相反するため、今後はユーザーの意見を聞き必要な機能の追加と整理を行いたい。また、通常の使用では設定値を変化させてシミュレーションすることも少なくない。そのため今後、例えば遮蔽材の厚みを変化させた場合の挙動をシミュレーションする機能の追加なども検

討している。

まとめ

PHITSは、任意の体系中における様々な放射線の挙動を、核反応モデルや核データを用いて模擬するモンテカルロ計算コードであり、放射線医学の分野でも利用されるようになってきている。しかしPHITSの実行には専門的知識が必要で、実行に必要なインプットファイルと呼ばれているファイルの作成には時間がかかる。そこでPHITSをより容易に使用できるよう、新たなユーザーインター

フェースをExcelのマクロ (VBA) を用いて開発した。条件により計算に必要な設定項目は変わるが、エディタを用いて記述しなければいけないパラメータが80個ある場合、開発したユーザーインターフェースを用いると18個ですむ。なおこの18個も、選択肢から選択すればよいパラメータが5個存在する。このためスペルミスなどの誤入力などの確率を大幅に低減できる。またPHITSを実行する作業手順も削減し、Excelのシート上のボタンを押すだけで実行できる。このように、人に優しいユーザーインターフェースの開発に成功した。

参考文献

- 1) 日本原子力研究開発機構 (JAEA) : PHITS. [オンライン、<http://phits.jaea.go.jp/indexj.html>] 日本原子力研究開発機構、10.14, 2014
- 2) Sato S, Niita K, Matsuda N, et al: Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS, Version 2.52, J. Nucl. Sci. Technol. 50, 913-923, 2013
- 3) Sato T, Kase Y, Watanabe R, Niita K, et al: Biological Dose Estimation for Charged-Particle Therapy Using an Improved PHITS Code Coupled with a Microdosimetric Kinetic Model, RADIATION RESEARCH 171, 107-117, 2009

Novel user interface for PHITS using an Excel macro

Kazuya Nakayama, Kengo Sakaguchi, Makoto Fukushima, Yoshitaka Nakano

Abstract

Ionizing radiation has two different uses in medicine, i.e., for diagnosis and therapy. Although both are intended to benefit patients, radiation exposure carries some health risks. Therefore, radiation must be used with the greatest care. It is important to simulate the spatial behavior of the radiation emitted from the source. PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) is a simulator of radiation behavior. Technical knowledge is required for use of PHITS and it takes some time to create some of the configuration files. In this study, a novel user interface was developed. For example, to set 80 parameters it will be necessary only to set 18 parameters using this user interface. PHITS can be used easily with this user interface.