

氘氘中子源超热中子场优化设计

姜泉旭^{1,2}, 韩正^{1,2}, 林兴洋^{1,2}, 杨尚晖^{1,2}, 代雨奇^{1,2},

张天骄^{1,2}, 陈田^{1,2}, 马宝龙^{1,2}, 王盛^{1,2,3}

(1. 西安交通大学核科学与技术学院, 710049, 西安; 2. 西安交通大学湖州中子科学实验室, 313000, 浙江湖州;

3. 华硼中子科技(杭州)有限公司, 310000, 杭州)

摘要: 为获得适用于硼中子俘获治疗中子探测器性能验证的超热中子场, 利用蒙特卡罗模拟和多目标优化算法, 设计了基于氘氘中子源的束流整形体。首先, 通过 Geant4 程序计算, 确定了能量为 200 keV 氘离子轰击氘钛靶的中子源项特性; 其次, 以超热中子通量最大化、快中子污染和热中子占比最小化为优化目标, 结合 MCNP6 程序和遗传算法对基于氘氘中子源的束流整形体进行多目标优化; 最后, 采用三维水箱评价了束流的分布特性。研究表明: 优化后的超热中子通量达 $2.65 \times 10^6 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 快中子污染降至 $5.5 \times 10^{-13} \text{ Gy} \cdot \text{cm}^2$, 热中子占比为 0.0134, 均优于预期指标; 束流整形体出口的中子场在空间分布上具有良好的对称性和指向性。该研究为探测器研制与标定提供了可靠的实验条件, 同时也为硼中子俘获治疗装置的小型化设计奠定了基础。

关键词: 氘氘中子源; 蒙特卡罗模拟; 遗传算法; 超热中子场; 束流整形体

中图分类号: TL99 **文献标志码:** A

Optimization Design of Epithermal Neutron Field Based on D-D Neutron Source

JIANG Quanxu^{1,2}, HAN Zheng^{1,2}, LIN Xingyang^{1,2}, YANG Shanghui^{1,2}, DAI Yuqi^{1,2},

ZHANG Tianjiao^{1,2}, CHEN Tian^{1,2}, MA Baolong^{1,2}, WANG Sheng^{1,2,3}

(1. School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

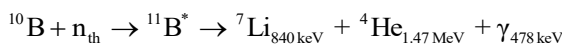
2. XJTU-Huzhou Neutron Science Laboratory, Huzhou, Zhejiang 313000, China;

3. HBNCT Co., Ltd., Hangzhou, Zhejiang 310000, China)

Abstract: To obtain an epithermal neutron field suitable for the performance validation of neutron detectors used in boron neutron capture therapy (BNCT), a beam shaping assembly (BSA) based on a deuterium-deuterium (D-D) neutron source was designed using Monte Carlo simulation and a multi-objective optimization algorithm. First, the neutron source characteristics were determined by calculating the interaction of 200 keV deuteron ions with a deuterated titanium target using the Geant4 code. Second, with the objectives of maximizing the epithermal neutron flux and minimizing the fast neutron contamination and thermal neutron fraction, the BSA based on the D-D neutron source was optimized using the MCNP6 code combined with a genetic algorithm. Finally, the beam distribution characteristics were evaluated using a three-dimensional water phantom. The results show that the optimized epithermal neutron flux reaches $2.65 \times 10^6 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, the fast neutron contamination is reduced to $5.5 \times 10^{-13} \text{ Gy} \cdot \text{cm}^2$, and the thermal neutron fraction is 0.0134, all of which are better than the expected indicators. The neutron field at the exit of the BSA exhibits good symmetry and directionality in spatial distribution. This study provides reliable experimental conditions for the development and calibration of detectors and lays the foundation for the miniaturization design of BNCT devices.

Keywords: deuterium-deuterium neutron source; Monte Carlo simulation; genetic algorithm; epithermal neutron field; beam shaping assembly

硼中子俘获治疗技术 (BNCT) 是一种二元精准靶向治疗肿瘤的新方法, 其基本原理为将含有硼-10 元素的含硼药物注射到病人体内, 在肿瘤细胞内聚积足够量的硼-10, 再用中子束照射肿瘤部位, 发生如下反应^[1]



(1)

式中: ^{10}B 为硼-10 元素; n_{th} 为热中子; $^{11}\text{B}^*$ 为处于激发态的硼-11 元素; $^7\text{Li}_{840 \text{ keV}}$ 、 $^4\text{He}_{1.47 \text{ MeV}}$ 为反应生成的 840 keV 的锂-7 粒子和 1.47 MeV 的氦-4 粒子; $\gamma_{478 \text{ keV}}$ 为退激发释放出的 478 keV 能量的伽马光子;

其中 ^7Li 和 ^4He 粒子的射程均小于典型细胞尺度 ($10 \mu\text{m}$), 电离辐射损伤主要局限于含硼药物聚集的肿瘤区域, 因而可实现精准杀伤癌细胞, 同时最大程度保护周边正常组织^[2-4]。

用于 BNCT 临床治疗的束流整形体 (BSA) 出口处的中子能谱分布具有显著特点, 如图 1 所示^[5]。由图可见, 中子能量主要集中在超热中子能区 (约 0.5~10 keV), 其目的是提高低能中子与 ^{10}B 的反应率, 保证治疗效果; 快中子和热中子对治疗无增益效果, 为污染项, 因而占比较少。

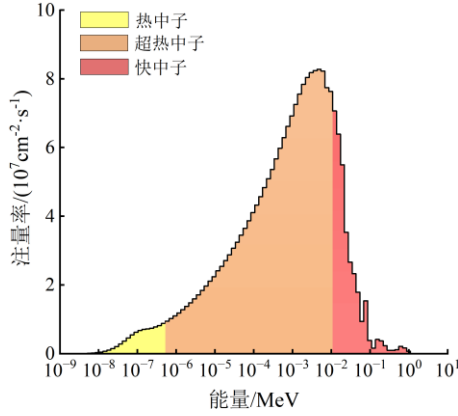


图1 一种典型的 BNCT 束流整形体出口能谱结构^[5]

Fig.1 A typical energy spectrum structure at the exit of a beam shaping assembly for BNCT

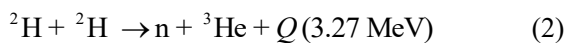
在 BNCT 治疗过程中, 准确测量超热中子的通量、占比等信息, 对于确保治疗的安全性和有效性至关重要。要实现对中子束流参数的准确测量, 探测器的开发与测试是关键环节, 只有性能优良且经过精确标定的探测器, 才能保证测量结果的可靠性。目前, BNCT 中子探测器的校准和性能验证面临诸多挑战, 主要体现在缺乏标准化的、可控的中子源^[6-10]。传统同位素中子源, 如 Am-Be 中子源, 虽然易于获取, 但其中子通量一般不超过 $10^6 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 难以满足探测器测试的需要; 反应堆中子源虽能提供稳定的中子束流, 但反应堆设施建设和维护成本高、可供研究者获取的束流时间稀缺。

基于氘氘 (D-D) 反应的中子发生器具有体积小、成本低、灵活性强、中子产额可观等优点^[11-13]。可通过调节氘离子的入射能量、强度、增设慢化体等方式调整中子能量和通量, 有潜力作为适用于 BNCT 探测器测试的中子源。然而, D-D 中子源产生的中子能量较高, 以快中子为主, 这与 BNCT 所需的超热中子场存在较大差异, 需要设计 BSA 结构对 D-D 中子源初始能谱进行慢化和整形, 获得适用于 BNCT 中子探测器测试需求的中子能谱与超热中子通量水平。

1 计算模型与数值方法

1.1 基于 D-D 中子源的 BSA 模型

D-D 中子源是一种基于 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 聚变反应的中子发生装置, 其核心系统包括离子源、微波发生器、分子泵、加速腔和钛靶等^[14-15]。离子源产生的氘离子束经加速腔加速至几百 keV 的能量后, 轰击含氘钛靶, 产生中子。其核反应式为



式中: ^2H 为氢-2 元素, 即俗称的氘 (D) 元素; n

和 ^3He 为反应生成的中子和氦-3 粒子; Q 为反应释放出的 3.27 MeV 能量。模拟工作基于西安交通大学的 DD110.2M 型中子发生器, 其最大中子产额可达 10^{10} s^{-1} 以上^[16], 结构如图 2 所示。其加速腔直径为 38.23 cm, 离子源末端距离氘钛靶 68.5 cm, 分子泵直径为 11.6 cm, 整体长度为 23 cm。

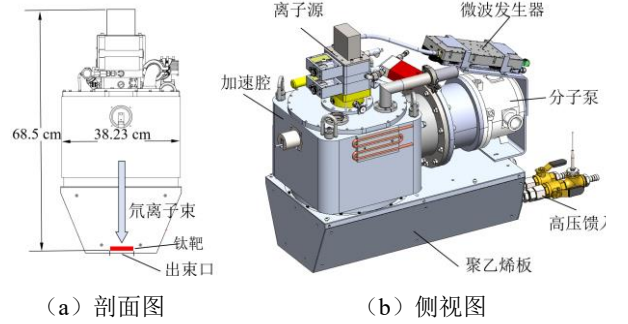


图2 DD110.2M 中子发生器结构

Fig.2 DD110.2M neutron generator structure

通过调用 Geant4 程序中强子的弹性碰撞和非弹性碰撞、离子的弹性碰撞和非弹性碰撞、电离等物理过程库, 获取 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应的中子能谱和空间分布情况, 其中氘离子输运和中子输运截面库分别选用 G4TENDL1.3.2 和 G4NDL4.6^[17]。

用于 D-D 中子源的 BSA 基准结构如图 3 所示, 模型的左侧为 D-D 中子发生器的主要部件, 其中包围在钛靶外的聚乙烯慢化体为 D-D 中子源主体结构的一部分, 在 BSA 设计中需考虑其影响。模型右侧为 BSA 结构, 主要由慢化体、反射体、热中子吸收层等部分组成。基于 ENDF/B-VII.1^[18]数据库, 采用 MCNP6 软件的 F1、F2、F4 计数器统计 BSA 出口处的中子通量、剂量率和能谱, 每次计算运行的粒子数为 1×10^7 , 统计结果误差控制在 $\pm 3\%$ 以内。

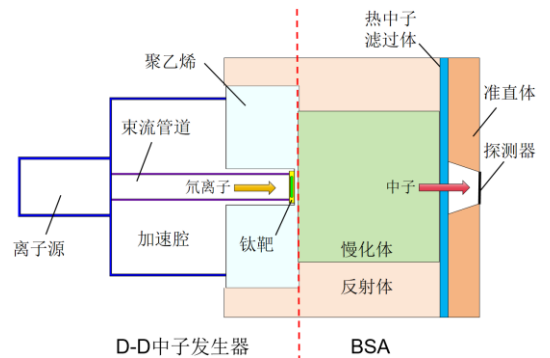


图3 BSA 结构示意图

Fig.3 Structure of BSA

1.2 束流评价指标

在 BSA 的优化设计过程中, 需要一个明确的指标指导并评估优化结果。国际原子能机构 (IAEA) 2023 年 6 月发布的综述性文件《Advances in Boron

Neutron Capture Therapy》^[19]中，给出了用于临床治疗中子束流的相关参数，详见表 1。

表 1 中子束流参数 IAEA 推荐值
Table 1 Recommended values of neutron beam parameters by IAEA

中子束流参数	IAEA 推荐值
超热中子通量 $\Phi_{\text{epi}}/(\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1})$	$>5\times 10^8$
快中子污染 $D_f\cdot\Phi_{\text{epi}}^{-1}/(\text{Gy}\cdot\text{cm}^2)$	$<7\times 10^{-13}$
γ 光子污染 $D_\gamma\cdot\Phi_{\text{epi}}^{-1}/(\text{Gy}\cdot\text{cm}^2)$	$<2\times 10^{-13}$
热中子占比 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$	<0.05
流量通量比 J/Φ	>0.7
快中子能区	$E>10\text{ keV}$
超热中子能量	$0.5\text{ eV}<E<10\text{ keV}$
热中子能量	$E<0.5\text{ eV}$

表 1 中： Φ_{epi} 为超热中子通量；快中子污染 $D_f\cdot\Phi_{\text{epi}}^{-1}$ 和 γ 光子污染 $D_\gamma\cdot\Phi_{\text{epi}}^{-1}$ 分别为快中子、 γ 光子的吸收剂量率 D_f 、 D_γ 与超热中子通量 Φ_{epi} 的比值；热中子占比 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ 为 BSA 出口处热中子通量 Φ_{th} 与超热中子通量的比值；流量通量比 J/Φ 为中子流量 J 和中子通量 Φ 的比值，代表中子束的方向性； E 为中子能量。结合表 1 的推荐值和 BNCT 中子探测器的需求，本文确定了基于 D-D 中子源的 BSA 的优化参数：

- (1)为满足中子探测器的良好响应，超热中子通量 Φ_{epi} 不低于 $10^6\text{ cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ ；
- (2)快中子污染 $D_f\cdot\Phi_{\text{epi}}^{-1}$ 小于 $7\times 10^{-13}\text{ Gy}\cdot\text{cm}^2$ ；
- (3)热中子占比 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ 小于 0.05。

由于 γ 光子污染和流量通量指标的提出主要基于病人治疗的实际需求，对于中子探测器的测试影响较小，因此不在此次模拟的考虑范围内。

1.3 多目标优化算法

基于 D-D 中子源的 BSA 优化设计的核心挑战源于多变量耦合效应。传统的 BSA 设计通常是先初步筛选材料再逐步调整结构尺寸，最终对比试算大量算例才能得出一个相对优选的设计方案^[20-23]。这种方式的工作量较大，易陷入局部最优解，很难实现多参数协同优化。为突破传统方法的局限性，本研究采用遗传算法（GA）与 MCNP 6 程序相结合的方法，将 BSA 设计转化为多变量-多目标协同优化问题，通过同步优化材料类型、排布及几何尺寸，实现预期的中子束流目标参数。

GA 算法作为一类启发式全局优化方法，以达尔文进化论为理论基础，能够有效应对高维参数空间中的复杂寻优问题^[24-26]。具体而言，GA 算法依据预设的参数，通过模拟自然的选择、交叉和变异等遗传操作过程，迭代地生成新的参数组合，并调整优化参数，系统地引导整个搜索过程向收敛方向进行，逼近全局最优解。

MCNP 6 程序作为核心的粒子输运计算工具，

可接收 GA 算法生成的每一组参数组合（材料种类、几何尺寸等），并基于这些参数进行详细的蒙特卡罗模拟计算，获取该参数组合下的超热中子通量、快中子污染、热中子占比等关键目标值。

为了评价当前参数组合的优劣程度，将所有子目标值转化成一个可以直接被量化和对比的适应度函数值。GA 算法正是基于这些适应度值来执行选择、交叉和变异操作，淘汰劣质个体，保留并改良优质个体。整个优化流程详见图 4 所示。

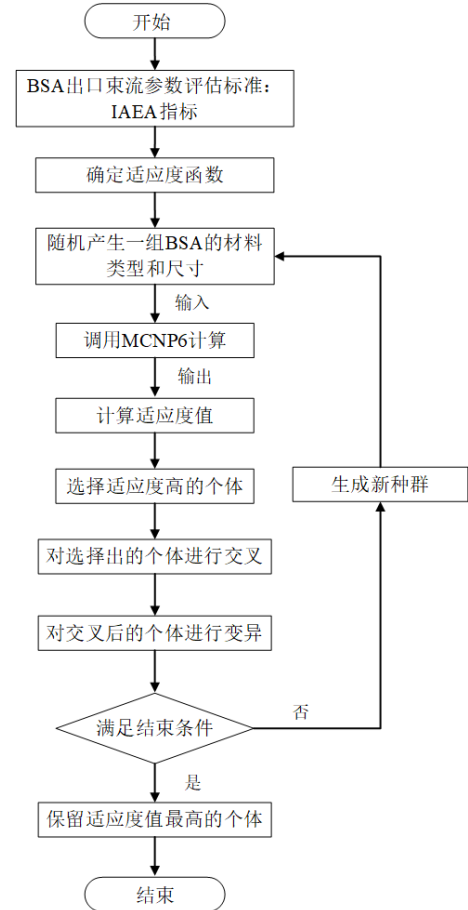


图 4 遗传算法结合 MCNP6 优化流程图

Fig.4 Flowchart of genetic algorithm combined with MCNP6 for Optimization

2 中子源项分布计算

2.1 中子产生过程计算模型

对 D-D 中子源的中子辐射场进行精细化计算，精准获得 D-D 中子源的中子产额、能谱和角分布，作为后续 BSA 设计中子输入的条件。计算采用的 DD110.2M 型中子发生器的最大入射氘束流能量为 225 keV，最大束流强度为 45 mA，靶上束斑直径为 20 mm。

Geant4 程序中的计算模型如图 5 所示。设置感兴趣的 world 空间为半径 50 cm 的球体，球心在坐标原点，构建体球面坐标系。氘靶靶面垂直于 z

轴方向，中心与坐标原点重合。氦离子源为直径为 20 mm 的面源，氦离子在束流横截面上均匀分布。氦靶为圆盘状，直径为 4 cm，厚度为 4 μm ，密度为 3.79 g/cm³。钛元素的质量分数为 96.74%，氦元素的质量分数为 3.26%，氦、钛的原子比为 1.6:1。将 world 边界球面上统计到的中子按照等立体角区域分割，计算中子产额的立体角分布作为后续 MCNP6 的中子源项输入。

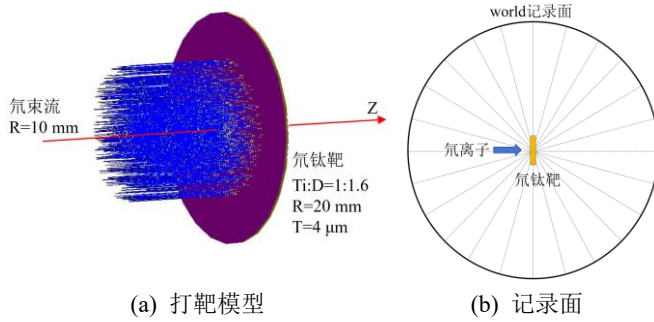


图 5 Geant4 模拟的束靶几何模型
Fig.5 Geant4 simulation beam-target model geometry

2.2 中子靶束流性质分析

采用 Geant4 程序模拟能量为 100~240 keV 的入射氦离子发生 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应得到的积分中子产额，结果如图 6 所示。氦离子能量步长取 20 keV，每次运算设置的运行粒子数为 2×10^9 ，结果归一化为 1 mA 的氦离子。计算结果表明，在 100~240 keV 的能量区间内， $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应的中子产额随着入射氦离子能量的增加近似呈线性增长，能量为 240 keV 时，中子产额达到最高，为 $1.22 \times 10^9 \text{ mA}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

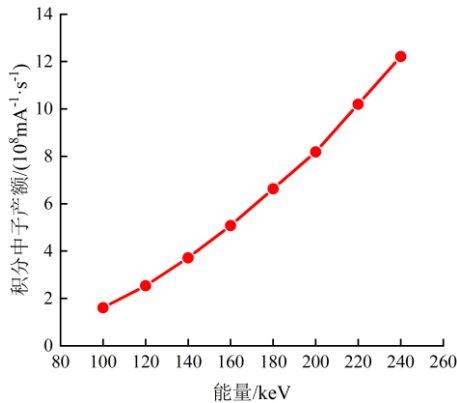
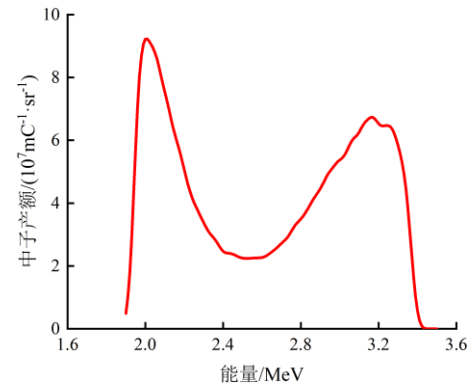


图 6 不同能量下 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应的积分中子产额
Fig.6 Integral neutron yield of the $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ reaction at different energies

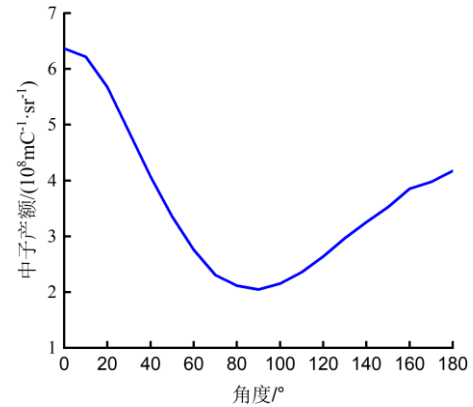
为确保中子发生器设备的束流稳定性，最终选定氦离子能量为 200 keV、流强为 40 mA 这一入射条件进行后续分析和模拟，此时单位流强下的中子产额为 $8.15 \times 10^8 \text{ mA}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ，总产额为 $3.26 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 。

为了更细致研究中子-能量-角度的关系，将产额计算结果归一化为单位立体角 (sr^{-1}) 产生的中子。能量为 200 keV 的氦离子入射得到的中子能谱如图

7(a)所示，从中可见，产生的中子最大能量约为 3.42 MeV。能谱曲线在 2.0 MeV 和 3.1 MeV 附近存在两个峰值，2.5 MeV 处的中子产额最低。图 7(b)给出了中子产额的立体角分布，可以看出，单位立体角的中子产额随角度先降低后增加，90° 时中子产额最低。



(a) 总中子能谱



(b) 中子产额立体角分布

图 7 200 keV 氦离子轰击氦钛靶的中子能谱及中子角分布
Fig.7 Neutron energy spectrum and emitted neutron angular distribution from 200 keV D+ bombarding TiD_{1.6} target

图 8 展示了能量为 200 keV 氦离子轰击氦钛靶时，得到的中子产额-能量-出射角之间的三维分布关系。由图可见， $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应的产生中子非单能，而是存在一定展宽，且不同出射角中子的能谱展宽不一样。0° 和 180° 方向，中子能谱展宽较大；90°~120° 方向，中子能谱展宽较小，表明在此角度区域，中子源的单能性较好。

由以上分析可知，在实际利用 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应产生中子的过程中，中子能量总是存在一定的展宽，且随角度变化存在差异。因此，在后续 BSA 的设计工作中，选择图 8 所示的中子能谱作为二次源项输入，而非近似采用 2.5 MeV 各向同性的中子源，以提高模拟计算的精确度。此外，由于 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应产生的中子能量较高，需 BSA 慢化和整形后，才

能用于 BNCT 中子探测器的性能验证。

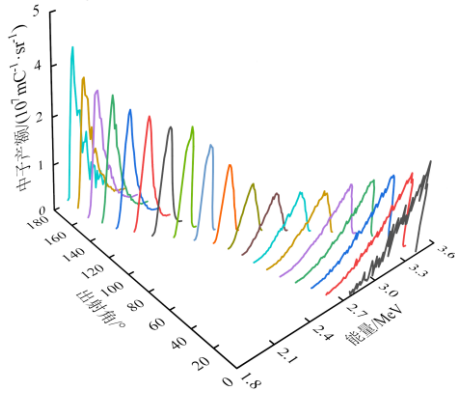


图 8 $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ 反应的中子能谱和角分布

Fig.8 Neutron energy spectrum and angular distribution for the $^2\text{H}(\text{d}, \text{n})^3\text{He}$ reaction

3 BSA 的设计与束流评价

3.1 慢化材料评估

慢化体位于靶体的后方，通常由一种或几种材料组成，其作用是将中子源产生的快中子慢化成超热中子。本文选取了 BSA 中常见的 12 种慢化吸收材料^[27-28]，分别为氟化钛（ TiF_3 ）、氟化镁（ MgF_2 ）、氟化铝（ AlF_3 ）、氟化锂（ LiF ）、氟化钙（ CaF_2 ）、FluentalTM（其中 AlF_3 、 Al 、 LiF 的质量分数分别为 69%、30%和 1%）、聚四氟乙烯（PTFE）、铝（ Al ）、石墨（ C ）、铁（ Fe ）、聚乙烯（ PE ）、重水（ D_2O ）。取固定慢化材料半径为 20 cm，分别计算了超热中子通量、热中子占比、快中子污染随慢化体厚度的变化，其中慢化体的厚度范围为 5~35 cm，步长为 5 cm，得到的结果如图 9 所示。通过分析可得：

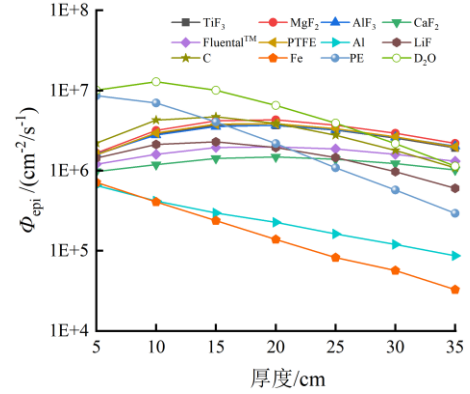
（1）图 9(a)的超热中子通量计算结果表明，除 Fe 、 Al 、 PE 这 3 种材料的超热中子通量 Φ_{epi} 随慢化体厚度的增加逐渐降低，其他材料的 Φ_{epi} 均随材料厚度的增加先增大后减小，并存在一个最优值；

（2）轻质材料（ PE 、 D_2O 、 C ）弹性散射截面大、吸收截面低，能有效将快中子逐级减速至超热中子而不被俘获，其 Φ_{epi} 在 5~15 cm 的厚度下即可达到峰值，产生的快中子污染 D_f/Φ_{epi} 也最少，此时中子慢化效果大于吸收；超过一定厚度后，中子吸收占主导，超热中子通量逐渐衰减；

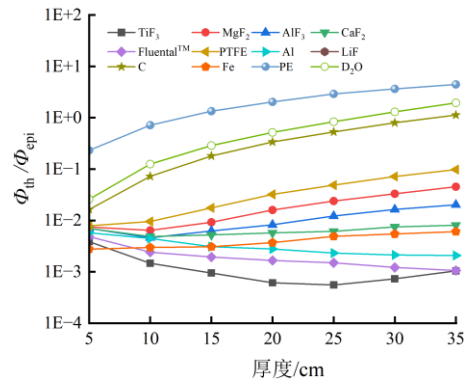
（3）所有材料的快中子污染 D_f/Φ_{epi} 均随厚度的增大而降低，在 5 cm 时，多数材料位于 10^{-8} ~ 10^{-9} 量级，25 cm 时下降至 10^{-11} ~ 10^{-12} 量级； Al 、 Fe 单质对快中子的散射能力较弱，产生超热中子的效率较低，不适合作为主慢化体；

（4）在厚度增大时，除 FluentalTM、 Al 、 TiF_3 的 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ 略微降低外，其他材料的 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ 均随厚

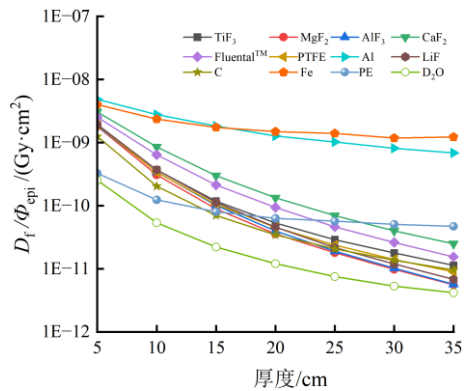
度的增加而上升； LiF 材料的热中子吸收截面大，在较小的厚度下 Φ_{th} 即降为 0，因此未在图中展示；轻核材料慢化吸收过程中产生的热中子份额高于其他材料，随着厚度的增加，热中子占比也逐渐增加。



(a) 超热中子通量



(b) 热中子占比



(c) 快中子污染

图 9 不同慢化材料对 D-D 中子源慢化能力的对比

Fig.9 Comparison of moderation capabilities of different materials for D-D neutron sources

综上所述，不同慢化材料的中子散射和吸收机制不同，采用单一材料作为慢化体，难以同时满足超热中子、快中子和热中子等多目标的优化需求。因此有必要采取多层材料组合，实现高 Φ_{epi} 、低 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ 与低 D_f/Φ_{epi} 的协同优化。

3.2 多层结构的 BSA 优化

采用遗传算法结合 MCNP6 程序，对图 10 所示多层结构的 BSA 进行优化。

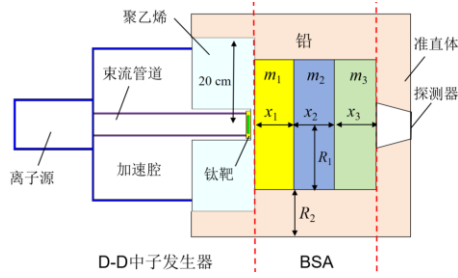


图 10 BSA 优化变量示意图

Fig. 10 Schematic of BSA optimization variables

优化的 BSA 慢化体设计为 3 层，各层厚度分别为 x_1 、 x_2 、 x_3 cm，半径为 R_1 cm。反射体选择常用的铅材料，半径为 (R_1+R_2) cm。慢化体材料从表 2 中随机选取，通过编程建立材料编号和密度之间的映射，在编号 1~12 之间随机选择 3 种材料 m_1 、 m_2 、 m_3 ，不同层材料可以相同。各变量的约束条件如下：

$$\begin{cases} 1 \leq x_i \leq 20, i=1, 2, 3 \\ 1 \leq m_i \leq 12, i=1 \sim 12 \\ 5 \leq R_1 \leq 30 \\ 21 \leq R_1 + R_2 \leq 50 \end{cases} \quad (3)$$

表 2 优化算法中的慢化材料库

Table 2 Material selection in optimization algorithm

编号	材料	密度/(g·cm ³)
1	TiF ₃	2.98
2	MgF ₂	3.10
3	AlF ₃	3.10
4	CaF ₂	3.18
5	Fluental TM	2.96
6	LiF	2.64
7	PTFE	2.20
8	Al	2.70
9	C	2.25
10	Fe	7.87
11	PE	0.93
12	D ₂ O	1.10

为考查慢化体材料的热中子抑制作用，结构设计未包含热中子吸收层。准直通道设计为锥形孔

表 3 不同组合下 BSA 材料种类、厚度优化参数

Table 3 Optimization parameters of BSA material types and thickness under different combinations

编号	权重因子 $\omega_1, \omega_2, \omega_3$	x_1, x_2, x_3 /cm	R_1, R_2 /cm	m_1, m_2, m_3	$\Phi_{\text{epi}}(>10^6)$ /(cm ⁻² ·s ⁻¹)	D/Φ_{epi} (<7×10 ⁻¹³) /(Gy·cm ²)	$\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ (<0.05)
组合 1	1.00, 0, 0	2.4, 6.1, 2.5	19.8, 12.8	D2O, D2O, TiF ₃	8.64×10 ⁶	2.80×10 ⁻¹²	0.1233
组合 2	0.50, 0.50, 0	10.4, 3.9, 10.9	22.4, 10.6	AlF ₃ , AlF ₃ , Fluental TM	4.50×10 ⁶	1.03×10 ⁻¹²	0.0088
组合 3	0.33, 0.33, 0.33	6.9, 10.2, 3.6	23.9, 1.1	LiF, CaF ₂ , MgF ₂	2.32×10 ⁶	3.11×10 ⁻¹²	0.0001
组合 4	0.40, 0.20, 0.20	14.4, 11.2, 14.9	23.9, 11.2	AlF ₃ , CaF ₂ , TiF ₃	2.41×10 ⁶	5.40×10 ⁻¹³	0.0132

道，长度为 10 cm，上径为 10 cm，下径为 18 cm。基于上述配置，该优化问题被简化为一个包含 8 个决策变量的多目标优化问题。

本文通过各子目标的加权，将多目标优化问题转换为单目标优化问题，表示如下

$$\begin{cases} f(x) = \sum \frac{\omega_i f_i(x)}{T_k} = \frac{\omega_1 f_{\text{epi}}(x)}{T_1} + \frac{\omega_2 f_{\text{fast}}(x)}{T_2} + \frac{\omega_3 f_{\text{th}}(x)}{T_3} \\ \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1, \quad \omega_i \geq 0 \\ f_{\text{epi}}(x) = 1/\Phi_{\text{epi}}, \quad T_1 = 1/10^6 \\ f_{\text{fast}}(x) = D_{\text{fast}}/\Phi_{\text{epi}}, \quad T_2 = 7 \times 10^{-13} \\ f_{\text{th}}(x) = \Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}, \quad T_3 = 0.05 \end{cases} \quad (4)$$

式中： $f(x)$ 为适应度函数； x 为优化变量，表示材料的尺寸和种类； ω_i 为权重因子， $i=1, 2, 3$ ； $f_i(x)$ 为 MCNP6 计算得到的子目标值，在本优化问题中代表超热中子通量 $f_{\text{epi}}(x)$ 、热中子占比 $f_{\text{th}}(x)$ 和快中子污染 $f_{\text{fast}}(x)$ ； T_k ($k=1, 2, 3$) 为每个目标函数的目标值，其中 T_1 为超热中子通量下限 $10^6 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 取倒数， T_2 为快中子污染上限 $7 \times 10^{-13} \text{ Gy} \cdot \text{cm}^2$ ， T_3 为热中子占比上限 0.05。为了控制函数收敛方向， $f_i(x)$ 均取最小值，因此对超热中子通量 Φ_{epi} 取倒数总目标函数 $f(x)$ 为 3 个子目标函数值的加权求和， $f_i(x)/T_k$ 可消除各参数值之间数量级的差异，实现多目标参数的同时优化。本文针对 4 种权重因子组合展开优化，具体如下：

(1) 组合 1： $\omega_1=1, \omega_2=\omega_3=0$ ，只关注超热中子通量，越高越好；

(2) 组合 2： $\omega_1=\omega_2=0.5, \omega_3=0$ ，同时关注超热中子通量和快中子污染，二者权重相同；

(3) 组合 3： $\omega_1=\omega_2=\omega_3=0.33$ ，同时关注热中子通量、快中子污染和热中子占比 3 个目标，三者权重相同；

(4) 组合 4： $\omega_1=\omega_2=0.4, \omega_3=0.2$ ，同时关注热中子通量、快中子污染和热中子占比 3 个目标，超热中子通量和快中子污染的权重是热中子的 2 倍。

遗传算法中，设置种群规模为 60，最大迭代次数为 40，变异率为 0.5，交叉概率为 0.4。4 种不同权重组合得到的 BSA 结构参数列于表 3。图 11 给出了 4 种 BSA 结构对应的中子能谱。

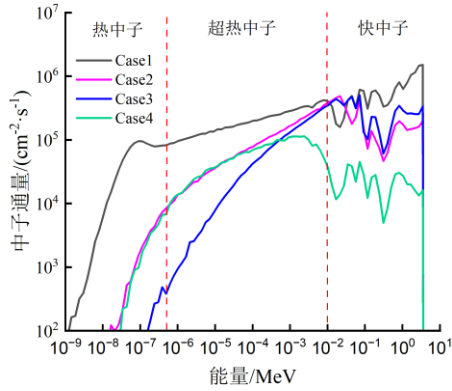


图 11 不同组合优化后的 BSA 出口中子能谱对比

Fig.11 Comparison of neutron energy spectra at the BSA exit optimized under different combinations

结合表 3 和图 11, 分析后得到以下结论。

(1) $\omega_1=1, \omega_2=\omega_3=0$ 的权重因子组合下, 优化过程只关注超热中子通量 Φ_{epi} 。前 2 层慢化体均选择了轻核材料 D_2O , 尽管该结构得到的超热中子通量最高, 但轻核的弹性散射也导致了热中子超标; 此外, 为了过分追求较大的超热中子通量 Φ_{epi} , 3 层慢化体的总厚度为 11 cm, 对快中子组分的慢化不足, 导致 D_f/Φ_{epi} 和 Φ_{th}/Φ_{epi} 的结果均超出了期望值。

(2) $\omega_1=\omega_2=0.5, \omega_3=0$ 的权重因子组合同时关注超热中子通量 Φ_{epi} 与快中子污染 D_f/Φ_{epi} , 忽略了热中子占比。优化过程在超热中子通量和快中子污染之间寻求平衡。此组合选用了 AlF_3 和 $Fluental^{TM}$ 作为慢化体材料, D_f/Φ_{epi} 进一步下降, 表明快中子污染得到了一定控制, 但仍不满足设定的目标值。由于优化后的第 3 层慢化材料选择了 10.9 cm 的 $Fluental^{TM}$, 其成分中含有质量分数为 1% 的 LiF , 对热中子的吸收截面较大, 因此尽管热中子占比的优化权重 $\omega_3=0$, 但由于 LiF 的存在, 热中子占比较组合 1 反而更低。

(3) $\omega_1=\omega_2=\omega_3=0.33$ 的权重因子组合下, 优化过程在 3 个目标间寻求均衡。热中子占比的权重被考虑在内, 因此优化结果中出现了 LiF 作为热中子吸收材料。 LiF 中锂核具有很强的热中子吸收能力, 使 Φ_{th}/Φ_{epi} 降至 0.0001 的极低水平, 远低于 0.05 的目标值; 但从组合 2 的优化结果来看, 许多慢化体材料本身就具有一定的热中子吸收截面, 因此热中子占比的目标值较容易达标, 过度考虑热中子组分的降低同时也会造成一部分较低能的超热中子组分被吸收, 导致超热中子通量 Φ_{epi} 的过度损失和快中子污染 D_f/Φ_{epi} 的上升。

(4) 综合前 3 种情况, 组合 4 的优化过程更注重降低快中子污染和维持适中的热中子占比, 因此采用了 $\omega_1=\omega_2=0.4, \omega_3=0.2$ 的权重因子组合。优化结果为 AlF_3 、 CaF_2 和 TiF_3 这 3 种材料组合, 有效降低了快中子能量, 使 D_f/Φ_{epi} 降至 $5.4 \times 10^{-13} \text{ Gy} \cdot \text{cm}^2$ 的较低水平。慢化体总厚度增加到 40.5 cm, 厚度远大

于其他权重组合, 表明为了显著减少快中子污染, 慢化体厚度被大幅加厚, 过厚的慢化体导致超热中子通量 Φ_{epi} 降低至 $2.41 \times 10^6 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$; 热中子占比 Φ_{th}/Φ_{epi} 为 0.0095, 因 ω_3 权重相对不高, 未被特别优化, 但仍能通过材料自身的吸收作用, 保持在极低水平。从图 11 的能谱结果来看, 组合 4 表现出超热中子通量适中、快中子污染和热中子占比较低的特征, 整体性能偏向低污染而非刻意追求高通量, 体现了优化策略的优越性。

经过慢化后的中子束流较为发散, 需要设置一个准直体以控制中子束流的形状、方向和束斑大小, 并进一步提高 BSA 出口处的超热中子通量。因此, 在组合 4 优化结果的基础上对准直孔进一步优化, 固定 BSA 出束口的半径为 5 cm, 研究准直锥孔的下径尺寸和准直孔道长度的变化对出口束流性能的影响, 得到的结果如图 12 所示。

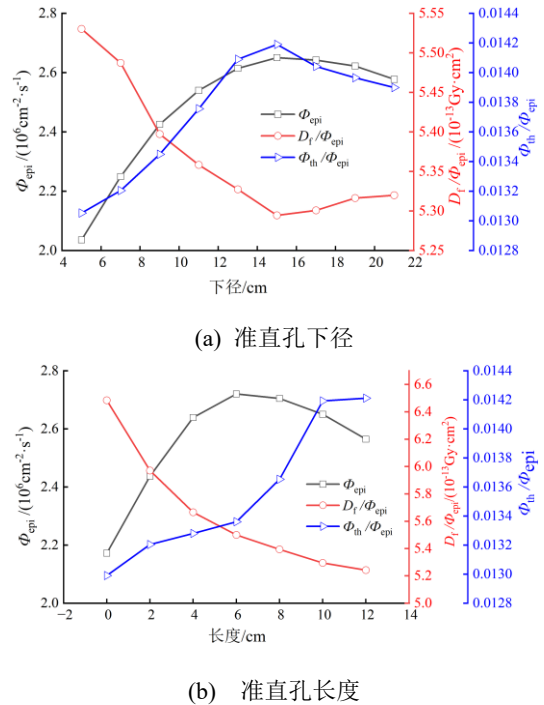


图 12 束流参数随准直孔下径和长度的变化

Fig.12 Beam parameters variation with collimator lower diameter and channel length

图 12(a)的结果表明, 在 5~21 cm 范围内, 随着准直孔下径的增加, Φ_{epi} 先增加后减少, 在 15 cm 时达到峰值 $2.65 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 相较组合 4 的结果提高了 9.96%, 同时 D_f/Φ_{epi} 逐渐降低, 在 15 cm 时达到最低值 $5.29 \times 10^{-13} \text{ Gy} \cdot \text{cm}^2$, 此时 Φ_{th}/Φ_{epi} 也达到最高, 但仍保持在较低水准。选择 15 cm 的准直器下径继续优化准直孔道的长度, 范围为 0~12 cm。图 12(b)显示, 随着准直孔长度的增加, Φ_{epi} 先增加后减少, 在孔道长度为 6 cm 时达到最大值 $2.65 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 此时 Φ_{th}/Φ_{epi} 为 0.0134, D_f/Φ_{epi} 为 $5.5 \times 10^{-13} \text{ Gy} \cdot \text{cm}^2$, 均低于初设目标值。因此, 最终固定准直锥孔下径

为 15 cm、准直孔道长度为 6 cm。

综合 3.2 节的计算结果，给出一种 BSA 结构，如图 13 所示。由图可见，3 层慢化体分别为 AlF_3 、 CaF_2 、 TiF_3 ，厚度分别为 14.4、11.2、14.9 cm，半径均为 23.9 cm。3 层慢化体和准直孔道整体包裹在铅反射体内，反射体半径为 35.1 cm，准直孔道长度 6 cm，上径固定为 5 cm，下径为 15 cm。

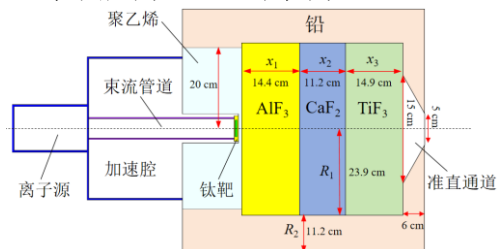


图 13 优化后的 BSA 结构示意图

Fig.13 Schematic diagram of optimized BSA structure

优化后的 BSA 出束口的中子能谱如图 14 所示，束流参数如表 4 所示。从中可见，优化后的 Φ_{epi} 、 D_f/Φ_{epi} 、 $\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$ 均优于设计目标，束流参数可满足 BNCT 中子探测器性能验证的需要。

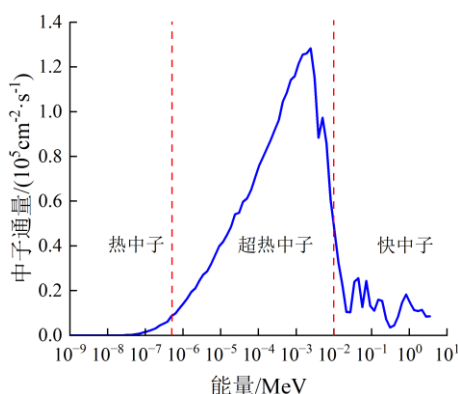


图 14 优化后的 BSA 出口处中子能谱

Fig.14 Optimized neutron energy spectrum at the exit of BSA

表 4 D-D 中子源 BSA 出口中子束流参数目标值与优化值的对比

Table 4 Comparison of target and optimized beam parameters at the BSA exit of the D-D neutron source

中子束流参数	目标值	优化值
$\Phi_{\text{epi}}/(\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1})$	$> 1 \times 10^6$	2.65×10^6
$D_f \cdot \Phi_{\text{epi}}^{-1}/(\text{Gy}\cdot\text{cm}^2)$	$< 7 \times 10^{-13}$	5.5×10^{-13}
$\Phi_{\text{th}}/\Phi_{\text{epi}}$	< 0.05	0.013 4

3.3 束流性能评价

为准确评估优化后的 BSA 产生的中子辐射场通量分布特性，采用尺寸为 20 cm×20 cm×20 cm 的三维水箱测量 BSA 出口的中子空间分布测量，如图 15 所示。

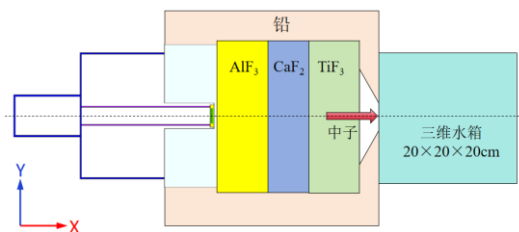
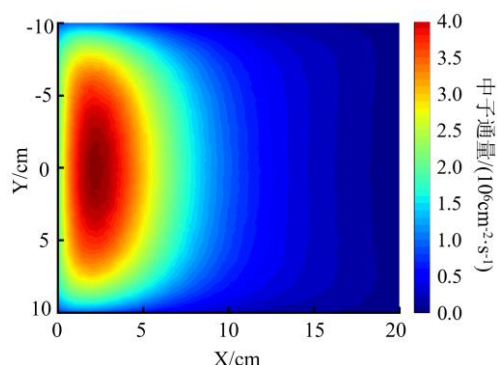


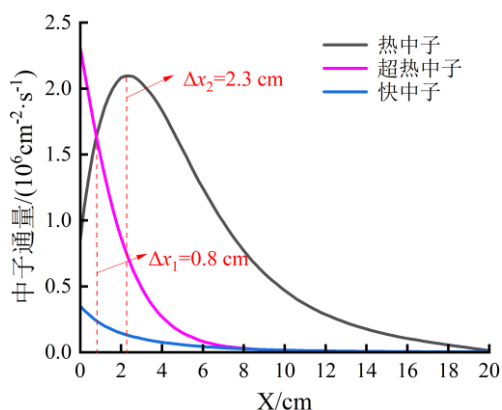
图 15 BSA 出口处三维水箱布置示意图

Fig.15 Schematic diagram of the 3D water tank layout at the BSA exit

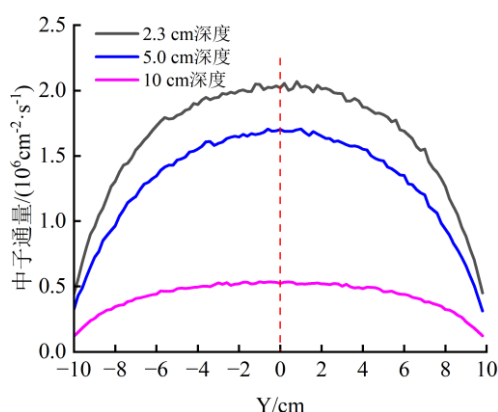
图 16 展示了三维水箱内中子通量的空间分布。通过分析图 16(a)水箱内部的二维通量分布可以看出，中子束在横向（沿 Y 轴）具有良好的集中性，通量呈现近似对称分布，在纵向（沿 X 轴）随传播距离逐渐衰减。图 16(b)沿 X 轴的中子通量变化表明，热中子通量在深度为 2.3 cm 时达到峰值 2.094×10^6 n/cm²/s，随后缓慢下降，符合中子在水中慢化后的空间分布特性。相比之下，超热中子通量在水箱中快速下降，在深度为 0.8 cm 时即降低到热中子以下水平，快中子通量在整个区域保持较低水平。图 16(c)展示了热中子通量在深度为 2.3、5.0、10.0 cm 时沿 Y 轴的横向分布特性。由图可见，在不同深度下，热中子均呈现出良好的对称性，—10~10 cm 范围内，通量变化平缓，边缘下降明显，表明束流具有良好的横向聚焦性能。



(a) 热中子通量二维分布



(b) 中子通量沿 X 轴的分布



(c) 热中子通量沿 Y 轴的分布

图 16 三维水箱中中子通量的空间分布

Fig.16 Spatial distribution characteristics of neutron flux in the 3D water phantom

综上所述,优化得到的 BSA 能够有效输出高通量、指向性良好的中子束,可满足后续应用需求。三维水箱测量为 BSA 性能评估和优化设计提供了重要依据,对于提升中子束质量、满足特定应用场景具有重要意义。

4 结论

本研究针对 D-D 中子源在 BNCT 探测器性能验证中的应用需求,开展了超热中子场的优化设计,得到如下主要结论。

(1) 通过 Geant4 程序模拟 $^2\text{H}(\text{d},\text{n})^3\text{He}$ 反应随入射氘离子能量的变化规律以及随角度分布的分布特性,结果表明:当能量为 200 keV 的氘离子轰击氘靶时,中子能量集中在 1.8~3.4 MeV,产额随角度呈现非均匀分布。该结果为后续 BSA 设计提供了准确的中子源参数,有效提高了模拟精度。

(2) 采用遗传算法结合 MCNP6 的方法解决了 BSA 设计中高维参数耦合的多目标优化问题,通过计算不同权重因子组合时的 BSA 结构和中子束流参数,探究了关注不同的优化目标时,优化结果呈现的特点和趋势。结果表明,当权重因子侧重超热中子通量与快中子污染控制时,优化后的 3 层慢化体 (14.4 cm AlF_3 /11.2 cm CaF_2 /14.9 cm TiF_3) 组合能有效降低快中子能量,同时维持合理的超热中子通量。该方法相比传统试错法,显著提高了设计效率。

(3) 优化后的 BSA 出束口参数优于预设标准值,超热中子通量较目标值提高了 2.65 倍,快中子污染和热中子占比均低于限值。通过准直通道参数优化,进一步提升了束流集中度,三维水箱测量显示:中子通量的横向对称性和纵向衰减均符合预期,验证了束流整形效果能够满足探测器的测试需求。

本研究提出的针对 D-D 中子源的 BSA 优化方案,为 BNCT 中子探测器的性能验证提供了易获取、低成本且性能可靠的超热中子场,解决了当前应用

于 BNCT 的探测器缺少合适中子源的问题。后续可进一步结合优化方法,减小反射体材料和装置体积,或结合含硼药物的剂量分布特性,探索临床治疗级 BSA 的工程化设计。研究中提出的优化方法和思路也可相似的为中子源慢化系统优化提供参考。

参考文献:

- [1] SEKI R, WAKISAKA Y, MORIMOTO N, et al. Physics of epi-thermal boron neutron capture therapy (epi-thermal BNCT)[J]. Radiological Physics and Technology, 2017, 10(4): 387-408.
- [2] BOUMGHAR R, BELGAID M. BNCT dosimetry for brain cancer based on the nuclear research reactor NUR and the modified MIRD phantom by introducing the eye lens: Simulation study[J]. Radiation Physics and Chemistry, 2023, 213: 111209.
- [3] CARPANO M, PERONA M, RODRIGUEZ C, et al. Experimental studies of boronophenylalanine (10BPA) biodistribution for the individual application of boron neutron capture therapy (BNCT) for malignant melanoma treatment[J]. International Journal of Radiation Oncology*biology*physics, 2015, 93(2): 344-352.
- [4] DATTOLI VIEGAS A M, CARANDO D, KOIVUNORO H, et al. Predicting radiotoxic effects after BNCT for brain cancer using a novel dose calculation model[J]. Physica Medica, 2024, 128: 104840.
- [5] QIAO Z, MA B, RONG B, et al. Beam shaping assembly design of $\text{Li}(\text{p},\text{n})$ neutron source with a rotating target for boron neutron capture therapy[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2023, 1052: 168249.
- [6] LIU Z, CHEN J, ZHU P, et al. The 4.438 MeV gamma to neutron ratio for the am-be neutron source[J]. Applied Radiation and Isotopes, 2007, 65(12): 1318-1321.
- [7] 张颂, 魏彪, 刘易鑫, 等. $^{241}\text{Am-be}$ 中子参考辐射的蒙特卡罗模拟研究[J]. 强激光与粒子束, 2020, 32(5): 117-123. ZHANG Song, WEI Biao, LIU Yixin, et al. Monte Carlo simulation research on reference neutron radiation of $^{241}\text{Am-Be}$ radionuclide[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2020, 32(5): 117-123.
- [8] VEGA-CARRILLO H, MARTINEZ-BLANCO M, HERNANDEZ-DAVILA V, et al. Spectra and dose with AN N of 252 cf, $^{241}\text{am-be}$, and $^{239}\text{pu-be}$ [J]. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 2009, 281(3):

615-618.

- [9] 陈军, 李春娟, 李玮, 等. 多球谱仪测量 bncr 医院中子照射器中子束能谱[J]. 原子能科学技术, 2014, 48(11): 2127-2132.
- CHEN Jun, LI Chunjuan, LI Wei, et al. Neutron Spectra Measurement of IHNI-I BNCT Beam With Multi-sphere Spectrometer[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2014, 48(11): 2127-2132.
- [10] BAGHERZADEH-ATASHCHI S, GHAL-EL N, RAHMANI F, et al. Design of beam line for BNCT applications in HEC-1 channel of IRT-T research reactor[J]. Radiation Physics and Chemistry, 2024, 215: 111368.
- [11] PRASTOWO D A. Design of Neutron Activation and Radiography Facilities Based on DD Generator[J]. Indonesian Journal of Physics, 2023, 34(2): 1-7.
- [12] WANG J C, XU W, MENG X, et al. Design and manufacture of the titanium-based neutron target for a compact DD neutron generator[J]. Fusion Engineering and Design, 2023, 192: 113687.
- [13] YANG G, SHI R, YANG J, et al. Optimization and shielding design of a thermal neutron device based on DD neutron generator with Geant4 toolkit[J]. Applied Radiation and Isotopes, 2024, 212: 111483.
- [14] ZHU Z, QIAN Y, LI M, et al. Development of a high-intensity compact DD neutron generator based on RF ion sources[J]. Vacuum, 2025, 232: 113909.
- [15] DONYA H, UMER M. Optimization of dd110 neutron generator output for boron neutron capture therapy[A]. arXiv, 2023.
- [16] MA B, YAN M, LI X, et al. Optimization design for moderator, reflector, and shielding of Deuterium-Deuterium neutron source[J]. Journal of Instrumentation, 2024, 19(5): P05076.
- [17] KONING A J, ROCHMAN D, SUBLET J Ch, 等. TENDL: Complete nuclear data library for innovative nuclear science and technology[J]. Nuclear Data Sheets, 2019, 155: 1-55.
- [18] CHADWICK M B, HERMAN M, AUTHOR: CHADWICK M B, et al. ENDF/B-VII.1 nuclear data for science and technology: Cross sections, covariances, fission product yields and decay data[J]. Nuclear Data Sheets, 2011, 112(12).
- [19] AGENCY I A E. Advances in boron neutron capture therapy[R]//Advances in Boron Neutron Capture Therapy. International Atomic Energy Agency, 2023: 1-416.
- [20] 郭志琦, 刘昌奇, 张炜忠, 等. 基于加速器 ${}^7\text{Li}(\text{p}, \text{n})$ 反应的 BNCT 中子源及慢化体的优化设计[J]. 核技术, 2022, 45(5): 11-19.
- GUO Zhiqi, LIU Changqi, ZHANG Weizhong. Optimization design of BNCT neutron source and moderating body based on accelerator ${}^7\text{Li}(\text{p}, \text{n})$ reaction[J]. Nuclear Techniques, 2022, 45: 11-19.
- [21] 王勇泉, 王泽祯, 李宁, 等. 基于加速器的硼中子俘获治疗装置束流整形体的设计及其临床参数研究[J]. 原子能科学技术, 2022, 56(7): 1440-1447.
- WANG Yongquan, WANG Zezhen, LI Ning, et al. Design of beam shaping assembly for accelerator-based boron neutron capture therapy and study on its clinical parameter[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2022, 56(7): 1440-1447.
- [22] LU L, AN S, GUAN F, et al. The performance research and optimization of the beam shaping assembly (BSA) used for BNCT based on the cyclotron[C]//2023 IEEE Nuclear Science Symposium, Medical Imaging Conference and International Symposium on Room-temperature Semiconductor Detectors (nss Mic Rtsd). 2023: 1-1.
- [23] TAHERI A, SARDARI D, SAYYAREH R, et al. Dose mapping simulation and BSA design for improving the dosimetry accuracy for research reactor BNCT[J]. Journal of Neutron Research, 2020, 22(1): 31-41.
- [24] CHEN Z, ZHANG Z, XIE J, et al. Multi-objective optimization strategies for radiation shielding design with genetic algorithm[J].
- [25] GE Y, ZHONG Y, MURATA I, et al. Efficient optimization of BSA with crucial variables by genetic 2 algorithms: Applications in AB-BNCT[J].
- [26] LIU Y. Multi-objective optimal scheduling of automated construction equipment using non-dominated sorting genetic algorithm (NSGA-III)[J]. Automation in Construction, 2022.
- [27] HIRAGA F, PRATEEPKAEW J. A feasibility study on a small electron linear accelerator-based beam shaping assembly for boron neutron capture therapy[J]. Applied Radiation and Isotopes, 2025, 217: 111658.
- [28] LI G, JIANG W, ZHANG L, et al. Design of beam shaping assemblies for accelerator-based BNCT with multi-terminals[J]. Frontiers in Public Health, 2021, 9: 642561-642571.

(编辑 李慧敏)