

DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2026.07.013

基于 OpenMC 的 BNCT 剂量计算研究

郭鑫¹, 林辉¹, 卢棚², 伍秋染³, 梁立振³

(1. 合肥工业大学 物理学院, 安徽 合肥 230601; 2. 合肥综合性国家科学中心能源研究院(安徽省能源实验室) 中子技术应用研究中心, 安徽 合肥 230031; 3. 中国科学院合肥物质科学研究院 等离子体物理研究所, 安徽 合肥 230031)

摘要: 硼中子俘获治疗(boron neutron capture therapy, BNCT)是通过中子与 ^{10}B 反应产生 α 、 ^7Li 重离子杀死癌细胞的二元疗法,其剂量成分较为复杂,包含快中子、热中子、 α 与 ^7Li 、 γ 射线,各成分的相对生物学效应不尽相同,开展 BNCT 剂量计算方法研究对临床照射剂量的评估具有重要应用价值。文章基于 OpenMC 蒙特卡洛粒子输运程序进行剂量计算方法研究,并验证其在 BNCT 剂量计算中应用的可行性和有效性。建立 Snyder 人体头部的解析几何模型;利用质子与锂反应获得中子能谱、强度和角度等中子源项数据,提供 OpenMC 源项建模;基于 OpenMC 网格计数统计 BNCT 中子剂量,并与 MCNPX 和 FLUKA 程序进行比较。利用 OpenMC 程序计算 BNCT 的剂量分布结果,与 MCNPX 模拟计算结果相比,粒子通量误差为 0.59%;与 FLUKA 计算结果相比,粒子通量误差为 9.18%,硼剂量最大误差为 2.30%。尽管与 MCNPX 和 FLUKA 在仿真参数设置及数据后处理上存在差异,但 OpenMC 在 BNCT 剂量计算方面是可行且有效的,可为未来发展的 BNCT 治疗计划系统剂量的精确计算与治疗策略的优化选取提供可靠的软件工具。

关键词: OpenMC 程序;硼中子俘获治疗;剂量计算;蒙特卡洛

中图分类号: TL99

文献标志码: A

文章编号: 1003-5060(2026)07-0951-06

Study on OpenMC-based BNCT dose calculation

GUO Xin¹, LIN Hui¹, LU Peng², WU Qiuran³, LIANG Lizhen³

(1. School of Physics, Hefei University of Technology, Hefei 230601, China; 2. Neutron Technology Application Research Center, Institute of Energy, Hefei Comprehensive National Science Center(Anhui Energy Laboratory), Hefei 230031, China; 3. Institute of Plasma Physics, Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

Abstract: Boron neutron capture therapy(BNCT) is a binary therapy that kills cancer cells through the reaction of neutrons with ^{10}B which produces α and ^7Li heavy ions. Its dose components are complex, including fast neutrons, thermal neutrons, α and ^7Li particles, and γ -rays. The relative biological effectiveness of each component differs. Therefore, research on BNCT dose calculation methods holds significant application value for the evaluation of clinical irradiation doses. This paper investigates the dose calculation method based on the OpenMC Monte Carlo particle transport code and validates its feasibility and effectiveness for BNCT dose calculations. An analytical geometric model of the Snyder human head phantom was established. Neutron source term data, including neutron energy spectrum, intensity, and angular distribution, were obtained using the proton-lithium reaction to provide source term modeling for OpenMC. BNCT neutron doses were tallied using OpenMC's mesh-based counting and compared with those from the MCNPX and FLUKA codes. Compared with the MCNPX simula-

收稿日期: 2024-04-02; **修回日期:** 2024-05-05

基金项目: 安徽省自然科学基金资助项目(2308085MA22);合肥综合性国家科学中心能源研究院(安徽省能源实验室)资助项目(21KZS202)

作者简介: 郭鑫(1988—),男,山西大同人,合肥工业大学硕士生;

林辉(1973—),女,安徽合肥人,博士,合肥工业大学教授,硕士生导师;

卢棚(1988—),男,重庆市人,博士,合肥综合性国家科学中心能源研究院(安徽省能源实验室)副研究员,硕士生导师,通信作者, E-mail: peng.lu@ie.ah.cn.

tion results, the particle flux error of the BNCT dose distribution calculated by the OpenMC code is 0.59%; compared with the FLUKA results, the particle flux error is 9.18%, and the maximum error of the boron dose is 2.30%. Despite differences in simulation parameter settings and data post-processing relative to MCNPX and FLUKA, OpenMC proves to be feasible and effective for BNCT dose calculations. It can provide a reliable software tool for accurate dose calculation in future BNCT treatment planning systems and for the optimization of treatment strategies.

Key words: OpenMC; boron neutron capture therapy(BNCT); dose calculation; Monte Carlo

硼中子俘获治疗(boron neutron capture therapy, BNCT)是通过中子与 ^{10}B 反应产生 α 、 ^7Li 重离子杀死癌细胞的二元疗法。含硼的药物在进入人体后会选择性富集于肿瘤组织中,经热中子照射,发生 $^{10}\text{B}(\text{n}, \alpha)^7\text{Li}$,并产生 α 粒子和 ^7Li 粒子。而这些粒子具有高传能线密度(linear energy transfer, LET)、高相对生物效应(relative biological effectiveness, RBE)、短射程,可以在对正常组织有极小伤害的前提下,更有针对性地摧毁肿瘤组织^[1-2]。鉴于在放疗领域的独特优势,世界各国都非常重视 BNCT 的研究,如美国、日本等均做过非常多的临床试验并有良好的效果,而伊朗、荷兰、芬兰等国也有非常不错的进展^[2]。

BNCT 治疗需要合适的中子源。目前,反应堆和加速器是 BNCT 最常使用的中子源。但因为反应堆在安装成本、后期维护及核安全管制等方面限制较高,难以满足临床普及使用的条件,所以加速器中子源凭借高安全性和低成本等特点,成为更具临床研究价值的中子源。采用 Li 或 Be 作为加速器中子源时,经加速的带电粒子(如质子、氘等)轰击靶核后,利用核反应 $^7\text{Li}(\text{p}, \text{n})^7\text{B}$ 或 $^9\text{Be}(\text{p}, \text{n})^9\text{B}$ 产生中子束。Li 靶的反应阈能较低,为 1.880 MeV,而 Be 靶为 2.057 MeV,在质子能量较低时, ^7Li 的中子产额更高。由此,本文基于 2.5 MeV 的质子加速器,使用锂靶产生的中子进行模拟^[3-4]。

在 BNCT 治疗中,中子束的参数(如强度、角度等)至关重要,对治疗效果具有关键影响。由于热中子与 ^{10}B 的反应截面最高,从能量角度看,热中子具有良好的治疗效果。本研究通过中子源的整流器对加速器出口的中子进行慢化,以筛选出符合能量条件的中子。因为人体组织对中子的穿透有较强影响,对于深部肿瘤,中子束照射至人体后,在到达治疗位置的路径中能量衰减严重,所以需要入射中子的能量由热中子水平提高到超热中子水平^[5]。

治疗计划系统是剂量计算、放疗规划等必不可少的工具。目前,针对 BNCT 的治疗计划系统

已有美国开发的 NCTplan^[6]和 SERA^[7]、日本的 JCDS^[8]等,其中剂量计算是治疗计划系统(treatment planning system, TPS)的核心部分。中子与物质反应过程繁多,因此采用蒙特卡洛粒子运输的方法来完成剂量计算。蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)方法是以概率现象为研究对象,以概率和统计理论方法为基础的数值模拟方法,故 MC 方法是 BNCT 剂量模拟计算最可行的工具。由美国麻省理工学院计算堆反应物理组开发的 OpenMC 是开源的蒙特卡洛程序,能够实现中子和光子的输运模拟^[9-10]。

本文基于蒙特卡洛方法的 OpenMC 程序,采用 Snyder 人体头部模型进行 BNCT 的剂量计算,并与 MCNPX^[11]和 FLUKA^[12]两种 MC 程序的计算结果进行对比,验证 OpenMC 作为 BNCT 剂量计算的内核程序的可行性和有效性。

1 计算模型与方法

1.1 Snyder 人体头部模型

目前,对于人体物理剂量的理论计算基准问题,国际通用的计算模型是 Snyder 人体头部解析模型^[13]。此模型由 3 层椭球面构成,分别用来模拟空气与头皮、头皮与头骨、头骨与大脑之间的分界面,其中头骨与大脑的分界面在 z 轴上有 1 cm 的偏心,如图 1 所示。本文使用的是加入了肿瘤组织后的模型,即在模型中心处设置了半径为 3 cm 的球体来模拟脑部肿瘤组织。

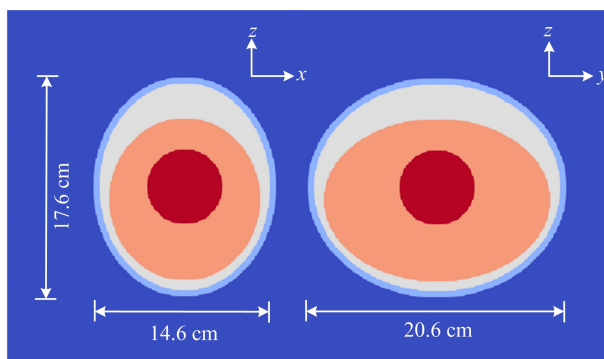


图 1 含肿瘤组织的 Snyder 头部解析模型示意图

Snyder 头部解析模型的数学表达式为:

$$\left(\frac{x}{7.3}\right)^2 + \left(\frac{y}{10.3}\right)^2 + \left(\frac{z}{8.8}\right)^2 = 1 \quad (1)$$

$$\left(\frac{x}{6.8}\right)^2 + \left(\frac{y}{9.8}\right)^2 + \left(\frac{z}{8.3}\right)^2 = 1 \quad (2)$$

$$\left(\frac{x}{6}\right)^2 + \left(\frac{y}{9}\right)^2 + \left(\frac{z-1}{6.5}\right)^2 = 1 \quad (3)$$

式(1)、式(2)、式(3)分别表示头皮与空气分界面、颅骨与头皮分界面、大脑与颅骨分界面。由每个分界面得出的不同区域分别代表了人体头部的基本组织,即大脑($\rho=1.040 \text{ g/cm}^3$)、颅骨($\rho=1.610 \text{ g/cm}^3$)和头皮组织($\rho=1.090 \text{ g/cm}^3$)以及空气($\rho=1.293 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$),其成分及质量分数由 ICRU46^[14]给出,见表 1 所列。

表 1 人体头部各组织元素质量分数 %

原子序数	元素	空气	颅骨	大脑	头皮
1	H	0	5.0	10.7	10.0
6	C	0.01	21.2	14.5	20.4
7	N	75.53	4.0	2.2	4.2
8	O	23.18	43.5	71.2	64.5
11	Na	0	0.1	0.2	0.2
12	Mg	0	0.2	0	0
15	P	0	8.1	0.4	0.1
16	S	0	0.3	0.2	0.2
17	Cl	0	0	0.3	0.3
19	K	0	0	0.3	0.1
20	Ca	1.28	17.6	0	0

采用 OpenMC 内置的材料和几何函数,使用 Python 语言编写代码,建立头部模型用于计算。

1.2 源项设置

基于 MCNPX 程序计算加速器中质子与锂的反应,并通过束流整形和屏蔽,模拟计算出适用于 BNCT 束流要求的出口照射束流。该出口中子能谱如图 2a 所示。

从图 2a 可以看出:出口中子以超热中子为主占比 62.1%;一部分快中子和少量热中子占比分别为 37.1%和 0.9%。少量的快中子和热中子有助于减少头皮、头骨及大脑等正常组织受到的辐照损伤。

通过中子源信息生成 OpenMC 程序中模拟所需的源项数据。该源项数据的中子分布包含中子能谱、强度和角度信息。源强设定为半径 5 cm、厚 1 cm、粒子均匀分布的圆柱形薄面源。为使 MC 程序在模拟计算时可以对中子进行采样,将源项的中子分布编译成可链接到 OpenMC

的外部开源库。源中子通过抽样并输出可视化图像,如图 2b 所示,其中指定射束方向指向 z 轴负方向,使之与模体位置对应。

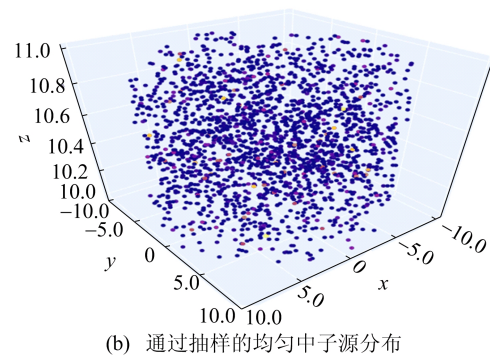
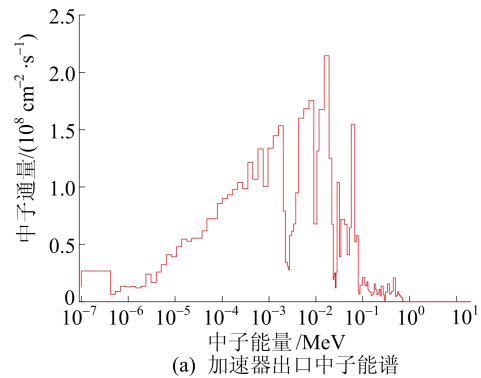


图 2 中子能谱和中子源分布

1.3 计数方法

为了更有效地模拟计算,在 Snyder 模型的中心位置,设计一个以原点为中心、3 cm 为半径的球体,用于模拟脑部肿瘤区域,其组织成分与大脑相同。根据模体大小沿 z 轴方向设计了 90 个 mesh 计数网格,用于测定模体内随深度变化的相关数据,网格大小为 $1.2 \text{ cm} \times 1.2 \text{ cm} \times 0.2 \text{ cm}$,在 OpenMC 中使用 Settings. entropy-mesh 属性进行设定,如图 3 所示。计算时总计模拟 100 万粒子数。

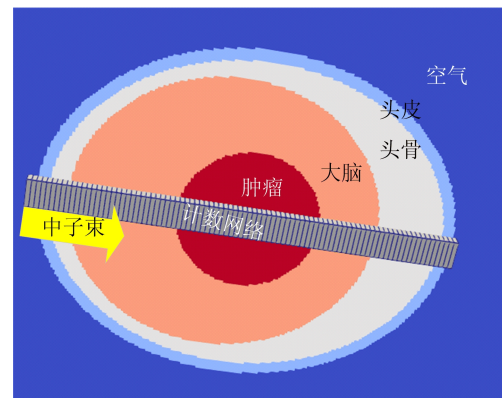
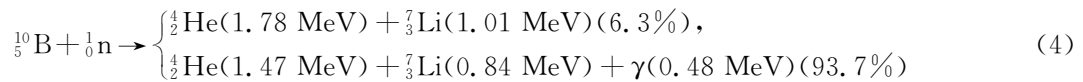


图 3 计数网格与中子束示意图

1.4 剂量计算

在 BNCT 治疗中,硼剂量、热中子剂量、快中子剂量以及光子剂量是人体组织吸收的几乎所有剂量来源。其中:就地沉积能量的是产生硼剂量和中子剂量的反应;逐步沉积能量的是经多次康普顿散射与光电效应的光子;部分光子可能会逃逸出系统^[13]。



虽然硼在体内的浓度非常小,但因为硼对热中子的吸收截面高达 $3.480 \times 10^{-25} \text{ m}^2$,所以从中释放的能量也非常大,是肿瘤靶区最主要的剂量,同时也是杀伤肿瘤细胞的关键因素。

2) 热中子剂量 D_{th} 。热中子剂量主要由热中子参与的 ${}^{14}\text{N}(\text{n}, \text{p}){}^{14}\text{C}$ 反应产生,其能量就地沉积。

3) 快中子剂量 D_{f} 。快中子剂量绝大部分是同核反应而产生的,即 ${}^1\text{H}(\text{n}, \text{n}){}^1\text{H}$, 因为是弹性散射形成,所以不包括热中子产生的其他中子所沉积的能量。

4) 光子剂量 D_{γ} 。光子剂量主要由 2 个部分组成:一部分是次级光子形成的,主要由 ${}^{14}\text{N}(\text{n}, \gamma){}^{15}\text{N}$ 、 ${}^{16}\text{O}(\text{n}, \gamma){}^{17}\text{O}$ 、 ${}^{12}\text{C}(\text{n}, \gamma){}^{13}\text{C}$ 、 ${}^1\text{H}(\text{n}, \gamma){}^2\text{H}$ 子俘获反应产生;另一部分是伴随光子的剂量,反应堆提供中子源时入射中子束有伴随光子的存在。

因为 BNCT 中所涉及的反应种类非常繁杂,还没有相关经验公式可直接用来做剂量的精确计算,所以 MC 方法是现阶段 BNCT 剂量计算的主要方法。

在 OpenMC 中使用能量沉积 E 来计数,数据处理时需要转化成剂量率 D ,即将能量单位 eV 转化为剂量率单位 cGy/min,转化公式如下:

$$D = 9.6 \times 10^{-13} \times (E/m) \quad (5)$$

OpenMC 中使用 heating 能量沉积计数的单位是 eV/source, $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$, $1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg}$ 。

采用光子等效的相对生物效应剂量来计算 BNCT 组织的总物理剂量,其中相对生物效应 RBE 和复合生物效应(combined biological effectiveness, CBE)与辐射种类和组织类型相关。RBE 值参考辐射源(如 X 射线)的吸收剂量与产生相同生物效应的其他辐射源的吸收剂量之比,记为 r_{RBE} ;CBE 值参考实验中相对于光子束的 BNCT 的 RBE 对应的剂量比值(D_{ref}/D^*),记

为 r_{CBE} 。硼剂量由照射的中子与富集在体内的 ${}^{10}\text{B}$ 发生 ${}^{10}\text{B}(\text{n}, \alpha){}^7\text{Li}$ 的中子俘获反应,释放出能量。其中:有 93.7% 的概率产生 1.47 MeV 的 ${}^4\text{He}$ 和 0.84 MeV 的 ${}^7\text{Li}$,同时释放能量为 0.48 MeV 的次级光子;另外有 6.3% 的概率生成 1.78 MeV 的 ${}^4\text{He}$ 和 1.01 MeV 的 ${}^7\text{Li}$ 。具体反应过程表示如下:

为 r_{CBE} 。

头部模型中不同剂量类型对应的 RBE、CBE 值^[15]见表 2 所列。

在人体正常组织和肿瘤组织中 ${}^{10}\text{B}$ 的质量分数之比为 18 : 65,而硼剂量在不同组织中对应的 CBE 值也有所差异,表 1 中 1.3 : 2.5 : 3.8 为硼剂量在脑、皮、肿瘤中的 CBE 比值。

表 2 头部模型中不同剂量类型对应的 RBE、CBE 值

剂量类型	r_{RBE}	r_{CBE}
硼剂量(D_{B})		1.3 : 2.5 : 3.8
热中子剂量(D_{th})	3.2	
快中子剂量(D_{f})	3.2	
光子剂量(D_{γ})	1.0	

注: ${}^{10}\text{B}$ 的质量分数在正常组织和肿瘤中设定为 1.8×10^{-5} 和 6.5×10^{-5} 。

BNCT 总物理剂量计算公式为:

$$D_{\text{total}} = r_{\text{CBE}} D_{\text{B}} + r_{\text{RBE}} D_{\text{th}} + r_{\text{RBEf}} D_{\text{f}} + r_{\text{RBE}\gamma} D_{\gamma} \quad (6)$$

2 结果与讨论

因为模拟计算是以中子加速器束流整形组件 (beam shaping assembly, BSA) 出口处的中子为研究对象,不包含里面的光子,所以没有统计光子剂量。

由 OpenMC 计算的中子通量随模体深度变化的趋势与 MCNPX 和 FLUKA 计算的结果基本相同。对于快中子,3 个程序计算的结果几乎相同;对于中子总通量,OpenMC 的计算结果相较于 MCNPX,最大误差在 2% 以内,而相较于 FLUKA,最大误差约为 11.5%;对于热中子,情况则类似。

OpenMC 计算的中子通量随模体深度的分布如图 4 所示。图 4a、图 4b、图 4c 分别展示了快中子、热中子和所有中子在进入模体后的通量分

布,可以看出,不同中子在模体中达到的通量峰值位置不尽相同。

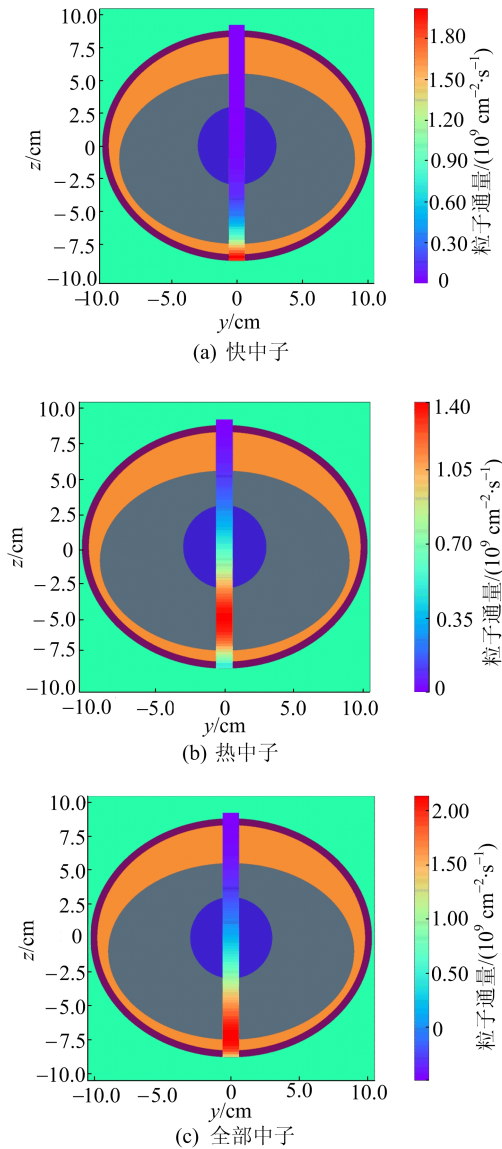
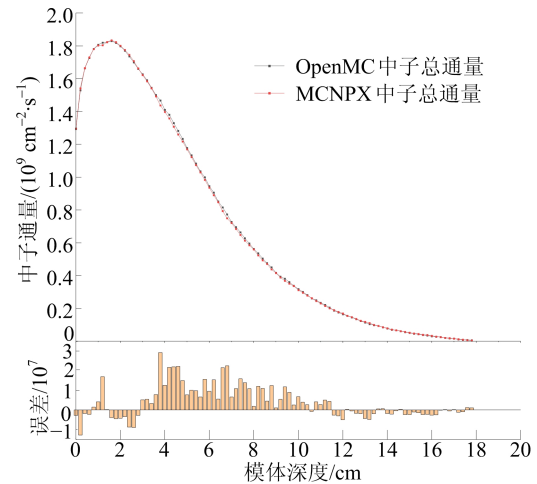


图4 快中子、热中子及中子在模体内通量分布

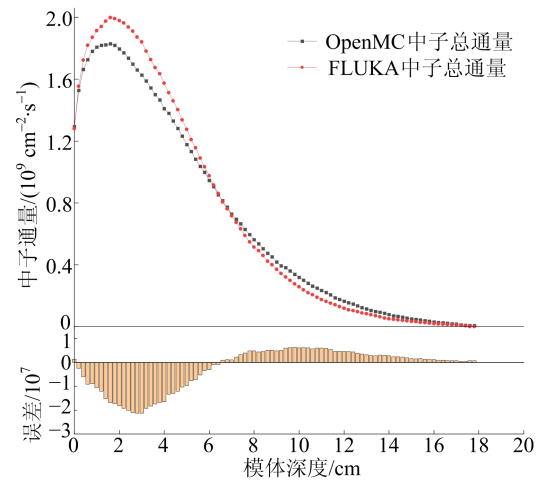
OpenMC、MCNPX、FLUKA 3种MC程序计算的中子通量随深度的变化如图5所示。

从图5a可以看出:OpenMC计算得出表皮处中子通量为 $1.29 \times 10^9 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,进入模体后随表皮深度逐渐升高,在皮下约1.6 cm处达到峰值,为 $1.83 \times 10^9 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,随后逐渐减少;OpenMC与MCNPX的计算结果和趋势相符程度非常高,最大误差在 2.22×10^7 以内。从图5b可以看出,在皮下6.0 cm前,OpenMC计算的结果小于FLUKA,在6.0 cm后则反之。从图5c可以看出:OpenMC计算的热中子与中子总通量趋势相同,区别在于通量峰值在皮下3.4 cm处,

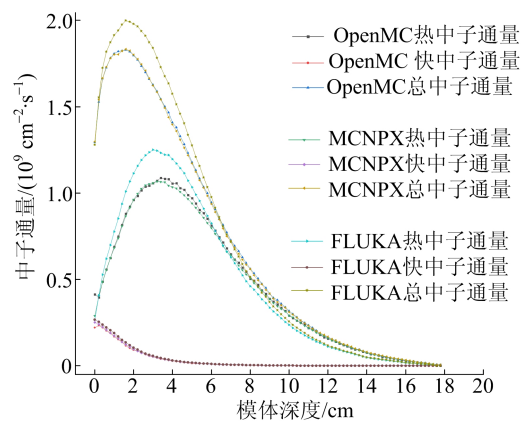
达到 $1.09 \times 10^9 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$;OpenMC的计算结果与MCNPX相符程度高;与FLUKA相比,在皮下6.0 cm前,OpenMC的计算结果小于FLUKA,在6.0 cm后则反之;而快中子在表皮处通量即为最大值,达 $2.34 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,进入模体后随深度逐渐降低,且3个程序的计算结果几乎一致。



(a) OpenMC与MCNPX计算的中子通量及误差随模体深度变化



(b) OpenMC与FLUKA计算的中子通量及误差随模体深度变化



(c) 3种MC程序计算的各类中子通量随深度变化

图5 不同MC程序计算的中子通量随深度的变化

OpenMC 与 FLUKA 计算的各类剂量随深度的变化如图 6 所示。

从图 6 可以看出,由于 ^{10}B 在不同生物组织内的富集度不同,剂量随深度变化时,经过不同的生物组织,硼剂量波动很大。例如,骨组织不含 B,即在骨组织范围内硼剂量极低,而在皮下约 3.0 cm 处进入脑组织后硼剂量出现小幅度增长,而在皮下 6.0 cm 肿瘤区域时,硼剂量激增至脑部的 9 倍,达到峰值为 90.23 cGy/min;峰值处 OpenMC 与 FLUKA 计算的剂量误差为 2.3%;随着中子通量降低,剂量逐渐减少,在肿瘤区内 OpenMC 计算的剂量值跌落幅度小于 FLUKA。

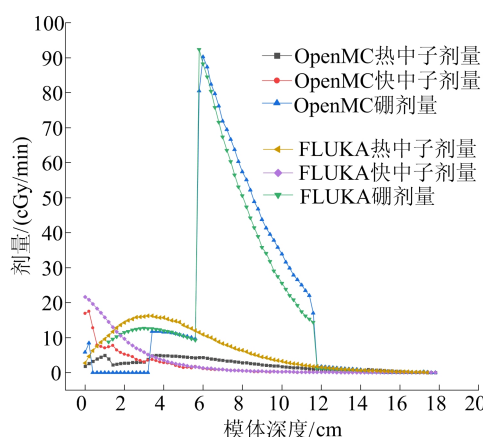


图 6 OpenMC 和 FLUKA 计算的各类剂量随深度的变化

3 结 论

本文基于 OpenMC 程序,针对 Snyder 人体解析头部模型,完成剂量相关计算分析,获得 BNCT 剂量随模体深度的变化规律,并与 MCNPX 及 FLUKA 程序的计算结果进行了比较。中子通量计算结果显示,OpenMC 的计算结果与 MCNPX 相比,最大误差为在 2% 以内,而与 FLUKA 相比最大误差约为 11.5%;RBE、CBE 剂量计算随组织材料的不同变化明显,其中硼剂量峰值处 OpenMC 与 FLUKA 的计算误差为 2.3%,随着深度的增加,OpenMC 计算的硼剂量跌落幅度相对较缓;其余表皮等处误差较大,原因可能在于仿真参数及数据后处理存在差异。本工作总体上验证了 OpenMC 作为 BNCT 剂量计算内核程序的可行性和有效性,可为未来发展 BNCT 治疗计划系统提供精确可靠的剂量计算程序。

[参 考 文 献]

- [1] Dorn R V. Boron neutron capture therapy (BNCT): a radiation oncology perspective[J]. International Journal of Radiation Oncology, Biology, Physics, 1994, 28(5): 1189-201.
- [2] IAEA. Current status of neutron capture therapy: IAEA-TECDOC-1223[R]. Vienna, Austria: IAEA, 2001.
- [3] Bkue T E, Yang J C. Accelerator-based epithermal neutron sources for boron neutron capture therapy of brain tumors[J]. Journal of Neuro-Oncology, 2003, 62: 19-31.
- [4] IAEA. Advances in boron neutron capture therapy[M]. Vienna, Austria: IAEA, 2023.
- [5] 邱有恒. 硼中子俘获治疗(BNCT)的蒙特卡洛模拟[D]. 北京: 中国工程物理研究院, 2004: 15-16.
- [6] Zamenhof R G, Clement S D, Harling O K, et al. Monte Carlo based dosimetry and treatment planning for neutron capture therapy of brain tumors[J]. Neutron Beam Design, Development, and Performance for Neutron Capture Therapy, 1990, 54: 283-305.
- [7] Nievaart V A, Daquino G G, Moss R L. Monte Carlo based treatment planning systems for Boron neutron capture therapy in Petten, the Netherlands[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2007, 74: 021012.
- [8] Kumada H, Yamamoto K, Matsumura A, et al. Development of JCDS, a computational dosimetry system at JAEA for boron neutron capture therapy[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2007, 74: 021010.
- [9] Romano P K, Forget B. The OpenMC Monte Carlo particle transport code[J]. Annals of Nuclear Energy, 2013, 51: 274-281.
- [10] Romano P K, Horelik N E, Herman B R, et al. OpenMC: a state-of-the-art Monte Carlo code for research and development[J]. Annals of Nuclear Energy, 2015, 82: 90-97.
- [11] Waters L S. MCNPX user's manual, Version 2.3.0; LA-UR-02-2607 [R]. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2002.
- [12] Ferrari A, Sala P R, Fasso A, et al. FLUKA: a multi-particle transport code[J/OL]. Physics, Computer Science, 2005. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:57945376>.
- [13] Goorley J T, Kiger W S, Zamenhof R G. Reference dosimetry calculations for neutron capture therapy with comparison of analytical and voxel models[J]. Medical Physics, 2002, 29(2): 145-156.
- [14] ICRU. Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues: ICRU Report 46[R]. Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurement, 1992: 213.
- [15] Hsieh M, Liu Y, Mostafaei F, et al. A feasibility study of a deuterium-deuterium neutron generator-based boron neutron capture therapy system for treatment of brain tumors[J]. Medical Physics, 2017, 44(2): 637-643.

(责任编辑 胡亚敏)