·蒙特卡罗方法及其应用·



基于 MCPT 解法器库的专用辐射探测 模拟软件研发与应用

朱剑钰1, 黄 孟1, 彭 玄2, 拓 飞2, 李 刚3

(1.中国工程物理研究院 战略研究中心,北京 100088; 2.中国疾病预防控制中心 辐射防护与核安全医学所,北京 100088;3.北京应用物理与计算数学研究所,北京 100088)

摘 要: 甲状腺内¹³¹I放射性活度与辐射探测结果的比例关系与甲状腺几何尺寸、探测距离等因素相关, 是估算甲状腺内¹³¹I含量与其可能造成的辐照损伤的关键参数。基于 MCPT 辐射输运数值模拟算法器库开发了 用于开展 NaI 探测器伽马辐射测量模拟的应用程序,进而建立了多组具有不同容积的甲状腺型容器和不同探测 距离的物理模型,最终通过蒙特卡罗数值计算得到了不同测量状态下探测器的探测效率。在甲状腺型容器与 探测器距离较远时,数值模拟给出的结果与理论计算结果一致,证明此应用程序可用于定量分析 NaI 的探测效 率。数值模拟结果表明,小距离模型的结果受甲状腺样容器的大小和距离的显著影响,模拟给出的探测效率表 为开展深入细致的实验研究奠定了基础。

关键词: 辐射输运; MCPT 解法器库; 甲状腺; 辐射剂量测量; I-131 中图分类号: O571.53 文献标志码: A doi: 10.11884/HPLPB202234.210327

Development and application of simulation code for radiation detection based on MCPT solver library

Zhu Jianyu¹, Huang Meng¹, Peng Xuan², Tuo Fei², Li Gang³

(1. Center for Strategic Studies, CAEP, Beijing 100088, China;

2. National Institute for Radiological Protection, Chinese Center for Disease Control and Prevention, Beijing 100088, China;
 3. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: The relationship between ¹³¹I activity in the thyroid and radiation detection results is related to the thyroid geometry, detection distance and other factors, which is a key parameter for estimating the ¹³¹I content in the thyroid and its possible irradiation damage. We developed an application for gamma radiation measurement simulation of NaI detectors based on the MCPT radiation transport numerical simulation algorithm library. Then several physical models with different volumes of thyroid containers and different detection distances were established. Finally, the detection efficiency of detectors were obtained under different measurement states by Monte Carlo numerical calculations. The results of the numerical simulation are consistent with that of the theoretical calculation when the distance between the thyroid-like container and the detector is large, which proves that the application could be used to quantitatively analyze the detection efficiency of NaI detectors. It is indicated that the detection efficiency for the detector with small distances is significantly influenced by the size of the thyroid-like container and the distance. The detection efficiency table given by the simulations provides a basis for an in-depth experimental study.

Key words: radiation transport; MCPT solver library; thyroid; radiation dose measurement; I-131

甲状腺是人体重要器官,由于其与核事故主要放射性核素¹³¹I的结合能力较强,因此成为¹³¹I危害人体健康的 重要因素之一¹¹。在评估甲状腺放射性疾病伤害和治疗方案选择时,需要对甲状腺辐射伤害与放射性活动进行有

 ^{*} 收稿日期:2021-07-28; 修订日期:2021-12-31
 基金项目:中国疾病预防控制中心辐射防护与核安全医学所财政项目 联系方式:朱剑钰,zhujyu@126.com。
 通信作者:黄 孟,hm.max@126.com。

效刻度^[2]。1986年切尔诺贝利核电站事故后的人体甲状腺内¹³I放射性活度测量和后续分析表明,放射性活度与 辐射探测结果关系参数是¹³I含量与其可能造成的辐照损伤评估中的重要参数^[3]。为了开展放射性活度与辐射探 测结果关系参数评估,中国疾病预防控制中心辐射防护与核安全医学研究所提出了在标定不同探测距离下 NaI 探 测器探测效率的甲状腺¹³I辐射剂量测量的实验设想^[4]。本文基于 MCPT 辐射输运数值模拟解法器库构建了通过 统计在探测器有效区域内沉积能量光子个数,确定探测效率的专用数值模拟程序,并设计了具有不同容积的甲状 腺型容器物理模型,并对探测器相对探测效率进行了数值模拟研究。

γ辐射探测效率计算是典型的辐射输运数值模拟问题。目前基于蒙特卡罗方法求解辐射输运方程的软件已经 商业化, 典型的数值模拟软件包括: 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室开发的中子/光子输运程序 MCNP 系列软件^[5], 欧 洲核子中心等机构研发的 Geant4 软件^[6], 中国科学院核能安全技术研究所研发的 SuperMC 软件^[7], 以及由北京应用 物理与计算数研究所与中国工程物理研究院高性能软件中心研发的 JMCT 软件^[8]等。这些软件在辐射输运计算、 辐射沉积能量评估、反应堆临界计算与辐射探测数值模拟研究等领域得到广泛应用^[9-10], 但不能直接给出针对探测 器计数统计和探测器效率的计算结果。为了对 NaI 闪烁体探测器的测量过程进行模拟, 需要对通用粒子输运数值 模拟软件进行二次开发。国内学者在掺 TI 的 NaI 闪烁谱仪模拟领域开展了大量研究工作, 南华大学的程品晶、吉 林大学的马玉刚、武汉大学的张小龙等人分别基于 Geant4, MCNP, LABVIEW 等软件实现了掺 TI 的 NaI 闪烁谱仪 模拟, 并开展了数值模拟研究工作^[11-13]。

本文开展 Nal 探测器探测效率计算的应用程序基于由北京应用物理与计算数学研究所和中物院高性能数值 模拟软件中心联合研发的 MCPT 粒子输运模拟解法器库开发。MCPT 是在 JMCT 中子-光子耦合输运数值模拟软 件的基础上,通过提取输运算法共用解法器建立,封装了开展非结构网格蒙特卡罗粒子输运算法的主要算法程序, 可支持开发用于任意复杂几何系统的中子、光子及中子-光子耦合输运问题的专用数值模拟软件。MCPT 解法器 库支持可视化建模的几何输入方式,采用基于德国西门子公司 UG 三维建模软件平台开发的 JLAMT 平台^[14]。 JLAMT 平台实现了在 UG 软件中可视化生成与核物理反应粒子输运有关的几何基本体,并定制了一些特殊的基本 体与几何体操作,具有较强的几何处理能力。

本文针对甲状腺辐射剂量测量与探测效率评估需求,利用 MCPT 解法器库实现对γ辐射测量模拟,参考实验 系统建立了甲状腺型辐射源物理模型,开展数值模拟研究,并利用理论分析结果检验了数值模拟结果的可靠性。 数值模拟得到的在不同条件下的探测器探测效率可为深入开展实验研究提供基础。

1 模拟软件与物理模型

MCPT 解法器库提供了基于蒙特卡罗算法可计算任意复杂几何系统的中子、光子及中子-光子耦合输运问题, 包括:临界本征值问题、固定源问题、多群伴随问题等。目前该解法器已广泛用于反应堆燃耗与核素计算、大型 复杂装置辐射屏蔽计算、辐射探测数值模拟等领域。

1.1 辐射输运数值模拟

γ辐射在介质中的传播可由非定常玻耳兹曼 (Boltzmann) 方程表示。中子输运方程有微分-积分形式和积分形 式两种, 它们互为等价。确定论方法通过对微分-积分方程进行离散求解, 而 MC 方法则以积分方程为求解对象。 玻耳兹曼方程的微分-积分形式可表示为

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)}{\partial t} + \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) + \Sigma_{t}(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = S(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) + \int_{0}^{E_{max}} \int_{\Omega} \Sigma_{s}(\mathbf{r}; E', \mathbf{\Omega}' \to E, \mathbf{\Omega}) \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}', t) dE' d\mathbf{\Omega}'$$
(1)

式中:介质中的γ辐射通量密度用 $\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$ 表示,具有 (cm⁻²·s⁻¹)的量纲;位置为 \mathbf{r} (cm);方向 $\mathbf{\Omega}$ 无量纲,习惯用散射极角余弦 μ 和方位角 φ 表示;能量为E(MeV);时间为 $t(\mu$ 或shake);宏观截面为 Σ_{ι} (cm⁻¹)。

中子角通量密度的微分-积分形式可以转换为等价的积分形式,用于 MC 方法求解。中子角通量密度方程的 积分形式具有以下形式

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = S_{c}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) + \int_{0}^{E_{max}} \int_{\Omega} \int_{0}^{+\infty} e^{-\int_{0}^{t} \Sigma_{s}(\mathbf{r}' + l' \mathbf{\Omega}, E) dl'} \Sigma_{s}(\mathbf{r}; E', \mathbf{\Omega}' \to E, \mathbf{\Omega}) \phi(\mathbf{r}', E', \mathbf{\Omega}', t') dE' d\mathbf{\Omega}' dl$$
(2)

$$S_{c}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \int_{0}^{+\infty} e^{-\tau} S\left(\boldsymbol{r} - l\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}, t - \frac{l}{v}\right) dl$$
(3)

$$\tau = \int_0^l \Sigma_t(\mathbf{r} - l'\mathbf{\Omega}, E) dl'$$
(4)

式中:*l为r*/到r的距离; **r**为粒子光学厚度或自由程数,为首次碰撞源,它是源经过了一次空间输运的结果,称为源对 中子角通量密度的直穿贡献。

MC方法要求建立单个中子在给定几何结构中的真实运动历史,通过对大量中子历史的跟踪,得到充足的随机试验值(或称抽样值),然后用统计方法作出随机变量某个数值特征的估计量,用该估计量作为问题的解。这些解可以是中子通量密度、剂量率、沉积能或各种反应率等。一个中子的历史是指该中子从源发出,在介质中随机地经过各种核反应作用,直到中子历史结束或称中子"死亡"。"死亡"是指中子被吸收、穿出系统、被热化或达到能量、权下限或时间上限。其中时间、能量的截断是无条件的,而权截断是有条件的,由俄罗斯轮盘赌决定。

当问题的几何形状、材料成分、初始源参数确定后,输运方程的解就唯一地确定了。通常产生一个中子历史的主要步骤概括如图1所示。从步骤(2)到步骤(5)循环直到中子参数满足预设结束条件为止。这些参数主要有: 边界条件、能量限、时间限和权截断限。这是一个中子历史的循环过程,通过对大量中子历史的跟踪,进而给出中 子行为的统计平均,以此作为问题的解。





为了实现 NaI 探测器探测效率模拟,本文对程序进行了改造,通过统计进入 NaI 探测器有效探测区域内的光 子触发探测信号的数量与总光子数目之比确定探测器探测效率。由于γ光子在探测区域内多次发生能量沉积经 过的时间仅有几 ns,而探测器内γ光子沉积能量,产生荧光,触发电子学信号的时间尺度达到 ms 量级,光子在探测 区域内发生多次能量沉积时一般只能触发一个电子学信号,因此可以认为光子在探测区域内次数与测量结果无

关。因此在模拟过程中,可以通过统计在有效探测区域内 碰撞次数 (n_c)大于1的光子数目,给出探测器信号数 (D)。 探测信号统计流程框图如图 2所示。

由于探测器的电子信号处理过程中也会对信号进行 进一步筛选,实际探测效率可能略小于模拟得到的探测 效率。

2 甲状腺型容器几何建模

根据中国疾病预防控制中心辐射防护与核安全医学所 提出的甲状腺¹³¹I辐射剂量测量实验中的辐射源、屏蔽体和 探测器方案设计^[4]。本文利用 JLAMT 可视化建模工具建立 了由椭球、圆柱、立方体组成的甲状腺容积物理模型。容 积 3.5 mL 甲状腺形状容器结构模型如图 3 所示。

甲状腺型容器由括2个椭球体、1个长方体和2个圆柱体组成,颈部模型由圆柱体构成,探测器模型有圆柱形探测 介质和柱壳组成。模拟使用的γ射线源项能量为364.49 keV, 该射线是开展¹³I临床测量与实验研究所针对的主要特征 γ射线^[15]。γ射线出射位置在甲状腺容器内部空间均匀分 布,发射方向为4π均匀发射。

探测器由外壳 (Al) 与探测介质 (Nal) 组成, 位于 x 轴负 半轴方向, 探测介质母线位于 y 轴负半轴之上。模拟过程 中的溶液、甲状腺容器、颈部模型、探测器采用的主要材料 如表1所示。







 Fig. 3
 Detection system of 3.5 mL thyroid type container

 图 3
 容积为 3.5 mL 甲状腺形状容器的探测系统模型

Table 1 Compositions of the main material in detection system							
material	main composition and density of nucleon number/ (10 ²⁴ cm ⁻³)						
solution	Na: 6.305 68E-005	O: 0.035	H: 0.0700643				
container	C: 0.0144453	O: 0.0361133	H: 0.0577813				
detector	Na: 0.00983491	I: 0 009 834 91	A1: 0.060.261.6				

表1 探测系统主要材料成分

2.1 不同体积甲状腺结构模型

根据中国疾病预防控制中心辐射防护与核安全医学所 给出的容积 V=3.5 mL 甲状腺形状容器结构模型,分别建立 了容积为 0.65, 1.00, 2.00, 3.00, 4.00, 5.00, 6.00, 7.00, 8.00, 9.00, 10.00 mL 的甲状腺结构模型。几个典型结构如图 4 所 示。在改变甲状腺容器体积的同时,根据模型比例调节了颈 部模型的大小与甲状腺型容器在颈部模型中的相对位置,尽 量与实际结构保持一致。

甲状腺型容器中椭球体尺寸、椭球心位置、矩形尺寸、 圆柱参数与颈部尺寸和位置参数等比例变化。椭球体三轴



 Fig. 4
 Typical models of thyroid type container

 图 4
 典型甲状腺形状容器结构模型

比例 2.5:1.8:0.8, 方向为短轴与 x 轴方向夹角 36.68°。不同体积甲状腺型容器相关参数如表 2 所示, 其中辐射透射 平均距离为椭球球心沿 y 轴负半轴方向出射颈部模型的距离。

表 2 计算采用的甲状腺型容器相关参数

Table 2	Parameters	of thvroid t	vpe container	used in	calculation
		01 01. 1 01. 01. 0	jpe comuner	abea m	cancanation

V/mL	diameter of neck/mm	long axis of ellipsoid/mm	thickness of rectangle/mm	height of rectangle/mm	long axis of cylinder/mm	average distance of radiation transmission/mm
0.65	47.39	13.46	1.62	4.85	1.88	12.35
1.00	54.71	15.54	1.87	5.60	2.18	14.26
2.00	68.93	19.58	2.35	7.05	2.74	17.97
3.00	78.90	22.35	2.69	8.07	3.14	20.57
4.00	86.84	24.67	2.96	8.88	3.45	22.64
5.00	93.55	26.65	3.19	9.57	3.72	24.39
6.00	99.41	28.42	3.39	10.17	3.95	25.91
7.00	104.65	29.75	3.57	10.70	4.16	27.28
8.00	109.41	30.90	4.02	12.05	4.35	28.52
9.00	113.80	32.25	4.02	12.05	4.53	29.66
10.00	117.86	33.50	4.02	12.05	4.69	30.72

2.2 不同探测器距离模型

模拟采用的探测器有限区域直径 54.20 mm, 厚度 53.50 mm, 材料为密度 3.67 g/cm³ 的 NaI 晶体。外壳为厚度 1 mm、密度 2.7 g/cm³ 的金属铝材料。根据模拟要求, 利用颈部模型外侧与探测器前端距离, 确定探测器位置。几个探测器处于不同位置, 甲状腺容器体积不同的典型模型如图 5 所示。

3 数值模拟结果

根据计算得到的探测效率ε(V,d)绘制探测效率随探测距离变化曲线如图 6 所示。为了验证数值模拟结果的可 靠性,对探测器探测效率进行了理论分析。理想情况的探测器探测效率(ε_t)可由探测器本征探测效率(ε₀),探测器 与颈部容器表面距离(d),辐射源延探测器位置方向到颈部容器表面的平均距离(*ī*)和探测器有效测量区域半径 (r)确定

$$\varepsilon_{\rm t}(d) = \varepsilon_0 \frac{\pi r^2}{4\pi (d+\bar{l})^2} \tag{5}$$



Fig. 5 Typical models of detection systems 图 5 典型探测系统模型

数值模拟和理论计算得到的探测器效率都绘制在图 6 中,各色实线为针对不同甲状腺模型容积计算得到的探测器探测效率(*ε*(*d*))的数值模拟结果,红色圆圈为理论计算得到的探测效率ε_t(*d*)。计算结果表明,在探测距离较远时,数值模拟结果与理论计算结果一致性非常好,说明模拟结果是可靠的。此时,探测效率受甲状腺模型容积等其他因素影响相对较小,探测器效率与探测距离近似呈平方反比关系。当探测器距离甲状腺模型较近时,甲状腺大小等其他因素对探测效率影响较大。

引入探测效率归一化因子 f_e(V,d), 描述甲状腺体积V、距离d时探测效率与甲状腺体积V = 0.65 mL、距离d时的 探测效率比, 以讨论探测效率随甲状腺模型容积变化关系

$$f_{\varepsilon}(V,d) = \frac{\varepsilon(V,d)}{\varepsilon(V_0,d)} \tag{6}$$

式中: $\varepsilon(V,d)$, $\varepsilon(V_0,d)$ 分别为状腺体积V、距离d和体积V = 0.65 mL、距离d时模拟得到的探测器效率。

图 7 为归一化的探测效率随甲状腺模型容积变化关系图。由图 7 可以发现,在探测距离较远时,甲状腺模型 大小对探测结果影响不大;相反,在距离较近情况下,甲状腺模型大的探测效率较低。这与出射探测器的γ辐射穿 透颈部模型的距离和γ入射探测器的方向角有关。在探测器与部件距离较近时,对于体积较大的甲状腺模型,这 两方面因素都会导致探测效率降低。一方面,在模型中距离探测器轴心所在直线距离较远位置出射的γ辐射进入 探测器所需穿透的颈部模型距离大于位于轴心所在直线内的γ辐射。另一方面,距离探测器轴心直线较远位置出 射γ辐射能够进入探测区域的立体角也会小于轴心直线上发射的γ辐射。而在较远距离的情况下,这两种因素的 作用相对较弱。



4 结 论

本文基于 MCPT 辐射输运数值模拟解法器构建了用于计算碘化钠探测器 γ 光子探测效率的模拟程序,实现了 对不同位置碘化钠探测器测量甲状腺辐射的模拟。以简化的实验系统模型为基础,通过缩放和调整,建立了多个 具有不同容积甲状腺型容器和不同探测位置的系列物理模型。通过数值模拟,获得了这些模型中探测器的探测效 率,并分析了探测效率与测量条件直接的关系。数值模拟结果显示,在探测器与甲状腺模型较近时,甲状腺模型大 小对探测器探测效率影响较大,当探测器与甲状腺模型距离较远时,探测器探测效率受甲状腺模型大小影响 降低。

参考文献:

- [1] 刘丽波, 陈强. 放射性甲状腺疾病诊断解析[J]. 中国辐射卫生, 2019, 28(5): 477-479,484. (Liu Libo, Chen Qiang. Diagnostic analysis of radiational thyroid disease[J]. Chinese Journal of Radiological Health, 2019, 28(5): 477-479,484)
- [2] 彭玄, 拓飞. 人体甲状腺中¹³¹I的测量方法进展[J]. 中国辐射卫生, 2020, 29(3): 313-317. (Peng Xuan, Tuo Fei. Progress in measurement of ¹³¹I in human thyroid[J]. Chinese Journal of Radiological Health, 2020, 29(3): 313-317)
- [3] Gavrilin Y I, Khrouch V T, Shinkarev S M, et al. Chernobyl accident: reconstruction of thyroid dose for inhabitants of the republic of Belarus [J]. Health Physics, 1999, 76(2): 105-119.
- [4] 彭玄, 张建峰, 拓飞, 等. 便携式γ谱仪在放射工作人员甲状腺¹³¹I监测中的应用[J]. 中国辐射卫生, 2021, 30(1): 34-37,43. (Peng Xuan, Zhang Jianfeng, Tuo Fei, et al. Application of portable γ-ray spectrometer in monitoring thyroid ¹³¹I in radiation workers[J]. Chinese Journal of Radiological Health, 2021, 30(1): 34-37,43.)
- [5] Goorley T, James M, Booth T, et al. Features of MCNP6[J]. Annals of Nuclear Energy, 2016, 87: 772-783.
- [6] Agostinelli S, Allison J, Amako K, et al. GEANT4—a simulation toolkit[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2003, 506(3): 250-303.
- [7] Hu Liqin, Long Pengcheng, Song Jing, et al. SuperMC cloud for nuclear design and safety evaluation [J]. Annals of Nuclear Energy, 2019, 134: 424-431.
- [8] 李刚, 张宝印, 邓力, 等. 蒙特卡罗粒子输运程序JMCT研制[J]. 强激光与粒子束, 2013, 25(1): 158-162. (Li Gang, Zhang Baoyin, Deng Li, et al. Development of Monte Carlo particle transport code JMCT[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2013, 25(1): 158-162)
- [9] Gao Yi, She Ruogu, Li Jinghong, et al. Numerical simulation and analysis of the pulsed neutron source method measuring the prompt neutron decay constant of a Godiva-like subcritical facility[J]. Progress in Nuclear Energy, 2021, 133: 103627.
- [10] 朱剑钰, 李瑞, 黄孟, 等. 用时序探测事件模拟提升中子多重性计算效率[J]. 强激光与粒子束, 2018, 30: 026003. (Zhu Jianyu, Li Rui, Huang Meng, et al. Improving calculation efficiency of neutron multiplicity counting by sequential detection events simulation [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2018, 30: 026003)
- [11] 程品晶, 凌球. 基于Geant4的NaI(TI)闪烁谱仪模拟[J]. 南华大学学报(自然科学版), 2009, 23(3): 1-4. (Cheng Pinjing, Ling Qiu. Simulation of NaI (TI) scintillation spectrometer with Geant4 toolkit[J]. Journal of University of South China (Science and Technology), 2009, 23(3): 1-4)
- [12] 张小龙, 余海湖. NaI(Tl)单晶γ能谱的蒙特卡罗模拟[J]. 武汉理工大学学报, 2010, 32(13): 41-44. (Zhang Xiaolong, Yu Haihu. Monte Carlo simulation of γ energy spectrum of NaI (Tl) crystal based on LABVIEW[J]. Journal of Wuhan University of Technology, 2010, 32(13): 41-44.
- [13] 马玉刚, 周银行, 赵广义, 等. NaI(TI)探测γ能谱的MCNP模拟[J]. 吉林大学学报 (理学版), 2007, 45(3): 451-454. (Ma Yugang, Zhou Yinhang, Zhao Guangyi, et al. MCNP simulation of γ spectra of NaI(TI) detector[J]. Journal of Jilin University (Science Edition), 2007, 45(3): 451-454)
- [14] 马彦, 付元光, 秦桂明, 等. 面向领域的大规模可视建模工具JLAMT的设计与实现[J]. 计算物理, 2016, 33(5): 606-612. (Ma Yan, Fu Yuanguang, Qin Guiming, et al. Design and development of auto-modeling tool JLAMT for field application of large-scale models[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2016, 33(5): 606-612.)
- [15] 闫学昆,张燕,李洋,等. 便携式γ谱仪对¹³⁷Cs、¹³¹I液样探测效率的刻度[J]. 原子能科学技术, 2018, 52(7): 1341-1344. (Yan Xuekun, Zhang Yan, Li Yang, et al. Detection efficiency calibration of portable γ spectrometer for ¹³⁷Cs and ¹³¹I solution samples[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2018, 52(7): 1341-1344)