



Masterarbeit

Konformitätsuntersuchungen an Monte-Carlo-basierten
Dosisleistungsberechnungen zur Dosisleistungsreduktion
im Außenraum eines gepackten Konrad-Containers

B.Sc. Tim Ramaker

Matrikelnummer: 10002336

Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
Fakultät für Mathematik und Physik
Institut für Radioökologie und Strahlenschutz

29. September 2023

Erstprüfer: Prof. Dr. Clemens Walther
Zweitprüfer: Dr. Jonny Birkhan

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit bestätige ich, dass die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet wurden. Alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht. Tabellen und Abbildungen sind, soweit nicht mit einer Quelle gekennzeichnet, selbst erstellt worden.

Hannover, den 29. September 2023

Tim Ramaker

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Aktivierung von Baumaterialien am Reaktor und Dosimetrie	9
2.1	Aktivierung im Kernreaktor	9
2.2	Dosimetrie	13
2.2.1	Dosisgrößen	13
2.2.2	Grenzwerte	15
3	Konfiguration der Dosisleistungssimulationen	17
3.1	Transportcodes und Monte-Carlo Methode	17
3.2	FLUKA	18
3.2.1	Aufbau	18
3.2.2	flair	21
3.2.3	Dosisleistungsmessung in FLUKA	22
3.2.4	Volumenquellen in FLUKA	22
3.2.5	VOXELS	22
3.2.6	Benutzer-Routine source	26
3.2.7	TIME-CUT	27
3.3	Resultierende Bedingungen	29
4	Simulationsdauer in Abhängigkeit der Voxelzerlegung	31
5	Interpolation von Aktivitätsverteilungen	39
5.1	Idee der Interpolation	39
5.2	Implementierung	44
5.3	Eigenschaften der Interpolation	48
6	Vergleich zwischen Simulation und Messung	53
6.1	automess 6150AD6	53
6.2	Punktquellen	56

6.2.1	Ergebnisse der Messungen	56
6.2.2	Simulationsergebnisse	57
6.2.3	Vergleich der Daten	58
6.3	Überprüfung der Voxelgeometrie mit mehreren Quellen	63
6.3.1	Messwerte	64
6.3.2	Simulationsdaten	64
6.3.3	Vergleich der Daten	66
6.4	Mit radioaktivem Abfall gefülltes Fass	67
6.4.1	FLUKA Volumenquelle	68
6.4.2	FLUKA Voxel-Geometrie	70
6.4.3	Vergleich der Methoden	71
6.5	Inhomogene Aktivitätsverteilung	74
7	Zusammenfassung und Ausblick	79
8	Die Ergebnisse im Kontext von DABKO	83
9	Anhang	85
9.1	Hardwarespezifikation	85
9.2	Zusätzliche Tabellen	93

1. Einleitung

Mit der Abschaltung der letzten Kernkraftwerke Deutschlands im April 2023 stehen die Kraftwerksbetreiber vor ihrer vorerst letzten großen Aufgabe: dem Rückbau der Kraftwerke. Dabei fallen zusätzlich zu den hochradioaktiven Abfällen, die in einem noch zu findenden Endlager untergebracht werden sollen, schwach- und mittlradioaktive Abfälle an, von denen die Hälfte zukünftig im ehemaligen Bergwerk Schacht Konrad gelagert werden soll[1]. Um den Rückbau von kerntechnischen Anlagen wie z.B. Kernkraftwerken zu unterstützen, wurde durch das Bundesamt für Bildung und Forschung das Förderkonzept „Forschung zum Rückbau kerntechnischer Anlagen“ (FORKA) ins Leben gerufen. Im Rahmen dieser Förderkampagne sollen erprobte Verfahren optimiert oder neue Verfahren entwickelt und erprobt werden [2].

Zu den schwach- und mittlradioaktiven Abfällen gehört auch der biologische Schild eines Kernkraftwerks. Er ist um den Reaktordruckbehälter platziert und dient dazu, die ionisierende Strahlung aus dem Inneren des Reaktors gegenüber der Umgebung abzuschirmen und die Radioaktivität sicher einzuschließen. Das durch FORKA geförderte Forschungsprojekt „Digital optimierte Verpackungsplanung von aktivierten Betonstrukturen in Konrad-Container beim Rückbau kerntechnischer Anlagen“ (DABKO) (Förderkennzeichen: 15S9436A-C) hat das Ziel, den Rückbau des biologischen Schildes durch den Einsatz digitaler Werkzeuge wie Building Information Modeling (BIM) und Monte-Carlo-Simulationen zu optimieren und durch eine Reduktion der benötigten Container die Kosten zu reduzieren[3].

In anderen Teilen des Projektes DABKO (vergleiche Abbildung 1.1) wird dafür unter anderem die automatisierte Simulation der Zerschneidung des biologischen Schildes und die Platzierung im Container untersucht. Die dadurch entstehende Kombination aus Container und Schnittelementen muss die Annahmebedingungen des Endlagers Konrad erfüllen. Zu diesen zählen die Beschränkungen bezüglich der Ortsäquivalentdosisleistung im Außenraum der Konrad-Container, die mithilfe des Monte-Carlo-Codes FLUKA [4, 5] zu überprüfen sind. In Rahmen dieser Arbeit wurde eine Methode entwickelt, die die Geometrien der Schnittelemente innerhalb der Container und die Aktivitätsdaten an FLUKA übergibt und mithilfe dieser Dosisleistungssimulationen durchführt.

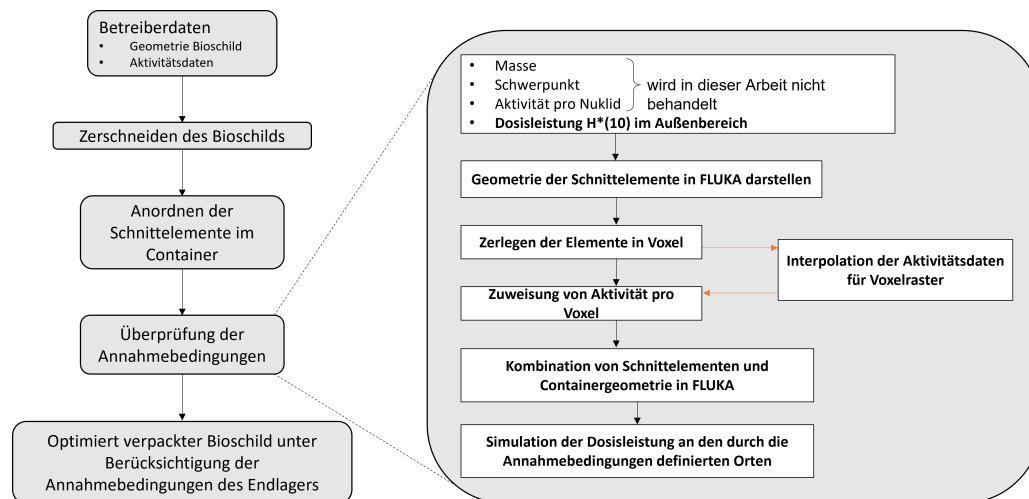


Abbildung 1.1: Prozessschema des Projektes DABKO. Die in dieser Arbeit erarbeitete Methode behandelt die fett geschriebenen Aufgaben innerhalb der Überprüfung der Annahmebedingungen [6].

Um die Geometrie der Schnittelemente automatisch in FLUKA darzustellen, wurde die Möglichkeit FLUKAs genutzt, ganze Geometrien durch Voxel zu beschreiben. Mit der Nutzeroutine „Source“ werden in der Folge jedem Voxel orts aufgelöst Aktivitäten verschiedener Isotope zugeordnet. An diesem Punkt ist im Rahmen dieser Arbeit deutlich geworden, dass eine Interpolation der von den Kraftwerksbetreibern bereitgestellten Aktivitätsdaten unabdingbar ist, damit jedem Voxel Aktivitätsdaten zugeordnet werden können. Ohne dies wäre keine ausreichende Ortsauflösung der Aktivität für die Simulationen möglich. Mit den so bereitgestellten Daten für Geometrie und Aktivität können die Schnittelemente in FLUKA in einen zuvor modellierten Container eingefügt werden und die Simulation gestartet werden.

Diese entwickelte Methode, Strukturen in FLUKA darzustellen, ist hinsichtlich ihrer Konformität mit experimentellen Messungen untersucht worden. Die Implementierung des radioaktiven Zerfalls in FLUKA wurde durch die Vermessung und Simulation von Punktquellen verschiedener Isotope überprüft. Die Simulation mehrerer Quellen und der Darstellung durch Voxel wurde mit Hilfe eines Gestells überprüft, in das mehrere Proben in verschiedenen Positionen eingehängt wurden. Zusätzlich wurde die Dosisleistung im Umfeld eines Fasses mit radioaktivem Abfall simuliert.

Alle Simulationen und Berechnungen wurden dabei in einer virtuellen Maschine durchgeführt. Die Spezifikation der Hardware ist im Anhang zu finden.

2. Aktivierung von Baumaterialien am Reaktor und Dosimetrie

Verschiedene Gesetze müssen eingehalten werden, um die Annahmekriterien für das Endlager Konrad zu erfüllen[6]. Die festgelegten Grenzwerte hängen von der Form des Abfalls ab. Bei zylindrischen Gebinden darf die Dosisleistung auf der Oberfläche des Gebindes $2 \frac{\text{mSv}}{\text{h}}$ im Durchschnitt nicht überschreiten. In lokalen Maxima darf sie allerdings bis zu $10 \frac{\text{mSv}}{\text{h}}$ betragen. Außerdem darf die Dosisleistung in einem Abstand von 1 m nicht über $0.1 \frac{\text{mSv}}{\text{h}}$ liegen. Für quaderförmige Gebinde gilt die Oberflächenregelung analog, allerdings darf die Dosisleistung in 2 m Abstand noch $0.1 \frac{\text{mSv}}{\text{h}}$ betragen. Um diese Vorgaben zu verstehen, wird nun auf die Aktivierungsreaktionen im Reaktor und anschließend kurz auf die Dosimetrie eingegangen.

2.1 Aktivierung im Kernreaktor

Durch die kontrollierte Spaltung von schweren Atomkernen wird in Kernreaktoren Energie freigesetzt, die zur Stromerzeugung genutzt wird. Ein thermisches Neutron trifft dabei auf einen ^{235}U -Kern und initiiert dessen Spaltung. Es entstehen Spaltfragmente, die selbst radioaktiv sind, und durchschnittlich 2.43 schnelle Neutronen [7]. Diese schnellen Neutronen können, sofern sie abgebremst werden, neue Spaltungen hervorrufen. Diese nötige Abbremsung wird durch einen Moderator sichergestellt.

Jede Kernreaktion besitzt einen eigenen Wirkungsquerschnitt σ , der als die Wahrscheinlichkeit zu verstehen ist, mit der die spezifische Reaktion stattfindet, sollten die Reaktionspartner aufeinander treffen. Der Wirkungsquerschnitt einer Kernreaktion wird in barn = b = 10^{-24} cm^2 angegeben und ist im allgemeinen abhängig von der Energie der Reaktionspartner. Mögliche Kernreaktionen sind z.B. der Neutroneneinfang durch einen Atomkern oder die Spaltung eines Atomkerns. Sofern es mehrere Möglichkeiten gibt, wie das Neutron mit dem Kern interagieren kann, wird dies durch verschiedene Indizes am σ verdeutlicht. Zum Beispiel besitzt ^{238}U einen Wirkungsquerschnitt von $\sigma_n = 2.7 \text{ b}$ für den Einfang von thermischen Neutronen und einen

Wirkungsquerschnitt von $\sigma_f = 3 \cdot 10^{-6}$ b für die Spaltung durch thermische Neutronen. Das bedeutet, dass es für einen ^{238}U -Kern deutlich wahrscheinlicher ist, dass er das Neutron einfängt und ein ^{239}U -Kern entsteht, als dass eine Spaltung initiiert wird [8]. Die durch die ^{235}U -Spaltung ausgesandten Neutronen müssen allerdings nicht im Reaktorkern mit anderen Atomkernen interagieren sondern können ihn auch verlassen. Dort können sie mit der umgebenden Materie interagieren und diese aktivieren: Dies bedeutet, dass sie von zuvor stabilen Kernen aufgenommen werden, wodurch diese radioaktiv werden.

Zu den erzeugten Radionukliden gehören im biologischen Schild unter anderem die Isotope ^{60}Co , ^{133}Ba und ^{152}Eu . Diese Nuklide werden hier im Speziellen genauer betrachtet, da sie aufgrund ihrer Halbwertszeiten (zwischen 5.2 a und 13.6 a) und Emissionswahrscheinlichkeiten der verschiedenen γ -Quanten die für die Endlagerung dosisrelevanten Nuklide sind [9, 10]. Diese Relevanz bezieht sich in diesem spezifischen Fall auf den Prozess der Anlieferung zur Endlagerstätte. Für die langfristige Sicherheit des Endlagers werden wesentlich mehr Nuklide betrachtet, wie die auf Basis von Störfallanalysen ermittelten Grenzwerte der einzelnen Gebinde in den Endlagerungsbestimmungen [6] zeigen. Obwohl im biologischen Schild auch andere Radionuklide gebildet werden, sind die durch sie hervorgerufenen Dosisleistungen während der Anlieferung zum Endlager im Vergleich zu den genannten Isotopen vernachlässigbar. Im Folgenden werden die benannten Isotope und ihre Erzeugung näher beschrieben.

^{60}Co ist ein β^- -Strahler mit einer Halbwertszeit von 5.2 a [8]. Zusätzlich besitzt ^{60}Co zwei dominante γ -Folgelinien bei 1332 keV und 1173 keV, die der noch angeregte Tochterkern ^{60}Ni beim Übergang in den Grundzustand aussendet (vgl. Abbildung 2.1).

Das in der Stahlarmierung des biologischen Schildes in Spuren vorhandene ^{59}Co [11] kann durch die Neutronen aus dem Reaktor zu ^{60}Co aktiviert werden. Der Kern besitzt für thermische Neutronen einen Einfangquerschnitt von 20.4 b für die Aktivierung in den metastabilen Zustand ^{60m}Co und von 16.8 b für die Aktivierung in den Grundzustand ^{60}Co . Da der angeregte Zustand mit 10.5 min eine im Vergleich geringe Halbwertszeit besitzt, akkumuliert sich das erzeugte ^{60}Co im Grundzustand.

^{133}Ba ist ein Radionuklid, das sich durch Elektroneneinfang mit einer Halbwertszeit von 10.6 a zu ^{133}Cs umwandelt [8]. Nach dem Elektroneneinfang liegt das ^{133}Cs noch in einem angeregten Zustand vor und kann wie in Abbildung 2.2 zu sehen ist, auf verschiedenen Wegen durch Abgabe eines oder mehrerer γ -Quanten in den Grundzustand übergehen. Es wird durch die Neutronenaktivierung des stabilen Bariumisotops ^{132}Ba mit einem Einfangquerschnitt von 8.2 b für thermische Neutronen [9] erzeugt. ^{132}Ba hat nur einen Anteil von 0.1 % am natürlichen Barium. Durch die Nutzung von Baryt (BaSO_4) im Beton ist aber eine große Menge Barium im Schild vorhanden[13, 14].

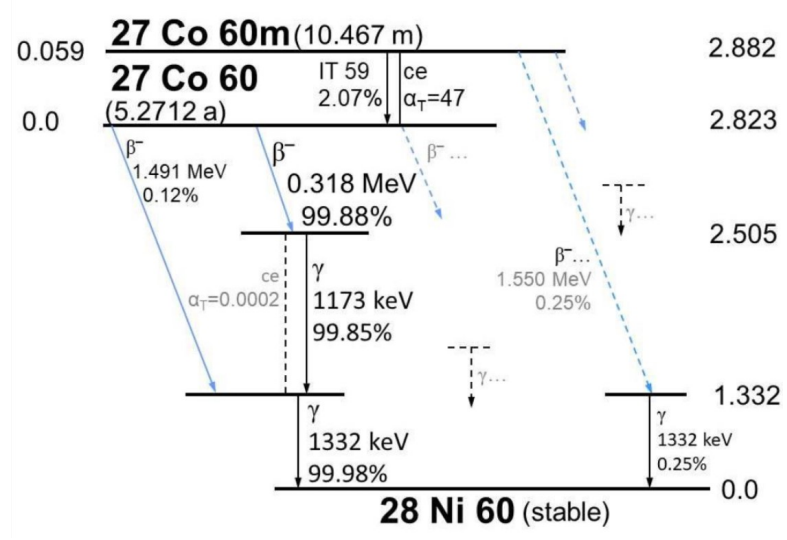


Abbildung 2.1: Zerfallsschema von ⁶⁰Co [12]

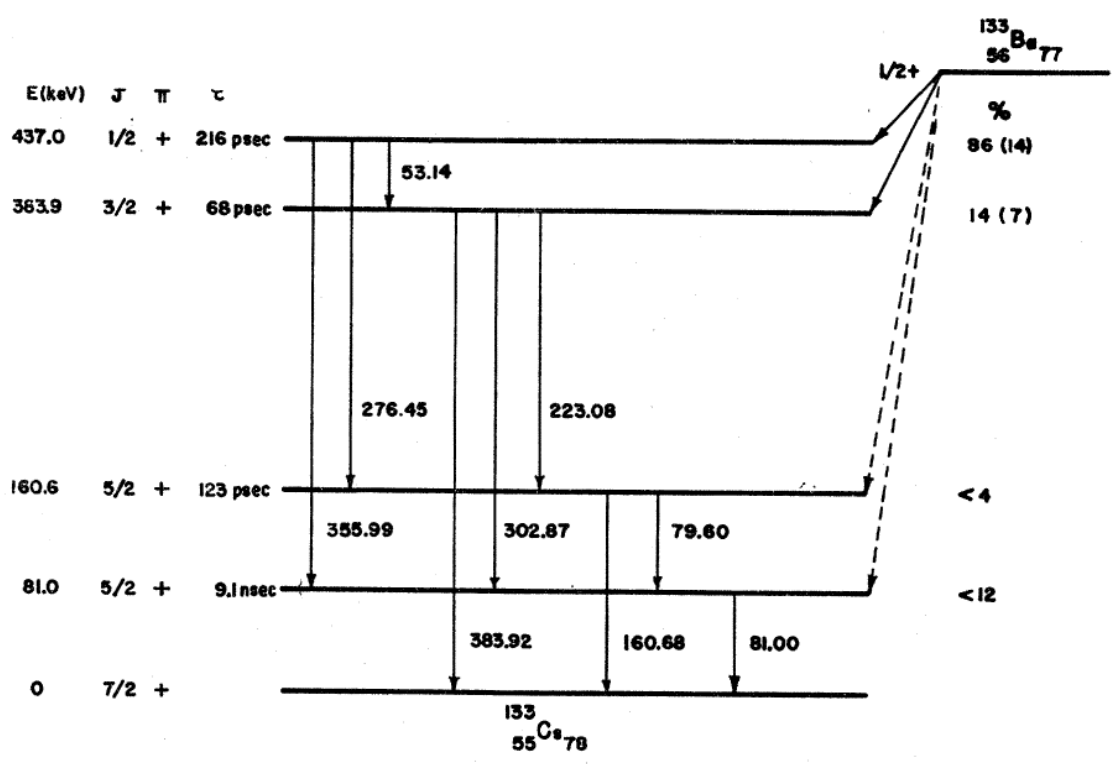


Abbildung 2.2: Zerfallsschema von ¹³³Ba [15]

¹⁵²Eu besitzt drei Isomere, von denen allerdings nur der Grundzustand mit einer Halbwertszeit von 13.517 a für Endlagerprojekte zu betrachten ist. ¹⁵²Eu zerfällt mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 27.9% durch einen β⁻-Zerfall zum nahezu stabilen ¹⁵²Gd und zu etwa 72.1% über Elektroneneinfang zum stabilen ¹⁵²Sm[9]. In Abbildung 2.3 ist zu sehen, dass beide möglichen Tochterkerne in verschiedenen angeregten Zuständen entstehen können. Dadurch ergeben sich auch bei ¹⁵²Eu viele verschiedene γ-Folgelinien.

^{152}Eu wird erzeugt, wenn das stabile ^{151}Eu mit einem Gesamtwirkungsquerschnitt¹ von $\sigma = 5924 \text{ b}$ ein thermisches Neutron einfängt und im zweiten metastabilen Zustand ^{152}Eu oder direkt im Grundzustand endet.

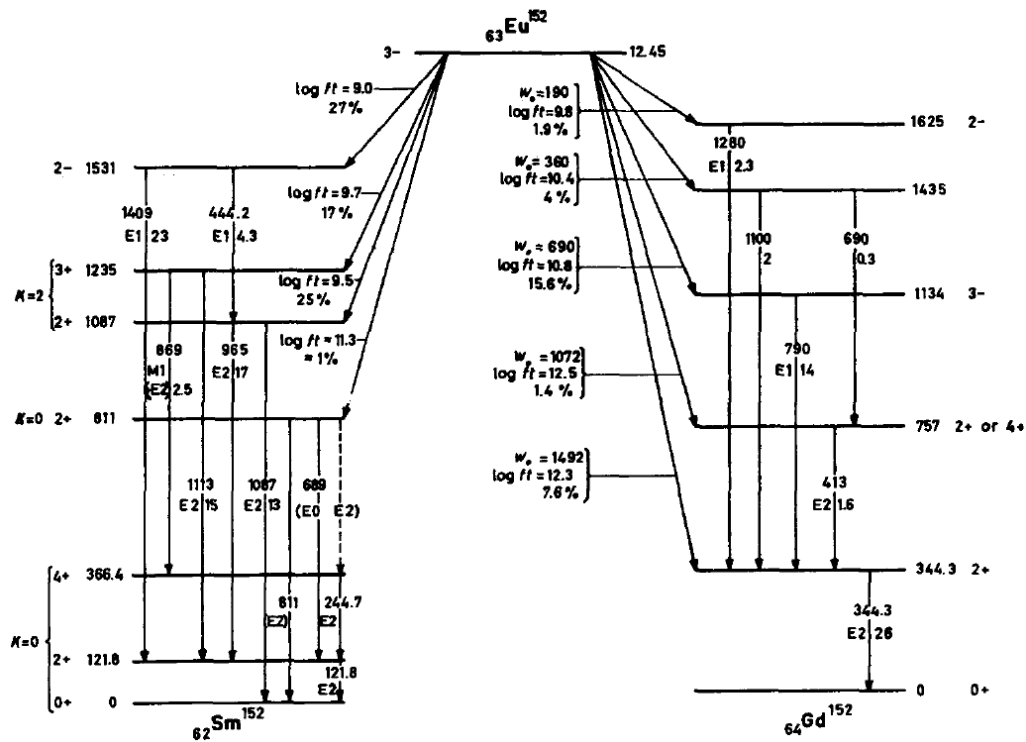


Abbildung 2.3: Zerfallsschema für ^{152}Eu [16]

¹ ^{152}Eu im zweiten metastabilen Zustand mit $J^\pi = 8^-$ geht mit einer Halbwertszeit von 96 min in den Grundzustand über, sodass beide Wirkungsquerschnitte aufgrund der deutlich größeren Zeitspanne, in der die Vorbereitung zur Endlagerung stattfindet, zusammengefasst werden können [16].

2.2 Dosimetrie

Damit ein Container im Endlager Konrad eingelagert werden darf, muss er verschiedene Bedingungen erfüllen. Neben geometrischen Bedingungen wie zum Beispiel der Lage des Abfalls im Container, die in einem anderen Teilprojekt DABKO behandelt werden, gibt es zusätzlich Grenzwerte, die die radioaktiven Eigenschaften des Abfalls beschränken [6]. Diese Grenzwerte umfassen unter anderem an verschiedenen Stellen um einen Container die Ortsdosisleistung, die bereits zum Eingang dieses Kapitels genannt wurden.

Damit die vorliegenden Grenzwerte korrekt eingeordnet werden können, soll die relevante Messgröße der Umgebungsäquivalentdosis $H^*(10)$ im Folgenden dargestellt werden.

2.2.1 Dosisgrößen

Im Strahlenschutz gibt es verschiedene Dosisgrößen, von denen ein Teil nun behandelt werden soll, um zur Ortsäquivalentdosis, die zu den sogenannten Messgrößen gehört, zu gelangen. Sie wird im betrachteten Fall als Maß für die effektive Dosis, eine sogenannte Schutzgröße, genutzt. Diese Näherung wird genutzt, da die effektive Dosis selbst nicht messbar ist².

Eine Dosis ist im Strahlenschutz eine Größe, die ausdrückt, welche Energie auf eine bestimmte Masse übertragen wurde. Die einfachste Dosisgröße, die genau dieser Definition folgt, ist die der Energiedosis D

$$D = \frac{\Delta E}{\Delta M} \tag{2.1}$$

Sie wird in der Einheit Gray = Gy = $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$ angegeben.

Da der Energieübertrag und damit die biologische Wirkung der Strahlung, vom Energieübertragungsvermögen L abhängt und sich dieses für verschiedene Strahlungsarten unterscheidet, wird die Größe der Mess-Äquivalentdosis eingeführt. Diese ist eine Energiedosis, die mit Qualitätsfaktoren (siehe Tabelle 2.1) der verschiedenen Strahlungsarten gewichtet wurde [18].

$$H = Q \cdot D \tag{2.2}$$

Tabelle 2.1: Definition des Qualitätsfaktors Q als Funktion des Energieübertragungsvermögen L [17].

L (keV/ μm)	$Q(L)$
$L < 10$	1
$10 \leq L \leq 100$	$0.32 \cdot L - 2.2$
$L > 100$	$300/\sqrt{L}$

²Diese Näherung kann nach [17, §65] durch die jeweils zuständige Behörde zugelassen werden.

Die Einheit der Mess-Äquivalentdosis ist das Sievert = Sv = $\frac{\text{J}}{\text{kg}}$. Auch wenn dies formell die gleiche Einheit wie das Gray ist, wird das Sievert verwendet, um zu signalisieren, dass die Strahlungsqualität berücksichtigt ist.

Die Mess-Äquivalentdosis kann nun entweder für einen Raumpunkt oder direkt an einer Person bestimmt werden. Es ergibt sich eine Unterteilung auf Ortsäquivalentdosis und Personenäquivalentdosis.

Die ICRU³ hat die sogenannte ICRU-Kugel entwickelt, die aus gewebeähnlichem Material mit einer Dichte von $1 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ besteht und einen Durchmesser von 30 cm besitzt, um mit Hilfe dieser die Ortsäquivalentdosis für verschiedene Anwendungsfälle spezifischer definieren zu können.

Einerseits gibt es für Strahlung geringer Eindringtiefe (α - und β -Strahlung) die Größen der Richtungsäquivalentdosis $H'(0.07, \vec{\Omega})$ und $H'(3, \vec{\Omega})$ und andererseits für durchdringende Strahlung (γ - und Neutronenstrahlung) die Größe der Ortsäquivalentdosis $H^*(10)$. In den Bezeichnungen stehen die Angaben 0.07, 3 und 10 für die angenommenen Eindringtiefen der Strahlung in Millimetern. In der Bezeichnung der Richtungsäquivalentdosis signalisiert der Strich ' die Richtungsabhängigkeit der Größe. In der Bezeichnung der Ortsäquivalentdosis steht das Sternchen dafür, dass die Größe unabhängig von der Einfallsrichtung der Strahlung ist. $H'(0.07, \vec{\Omega})$ und $H'(3, \vec{\Omega})$ sind für diese Arbeit aber von keiner weiteren Relevanz, da die α - und β -Strahlung direkt innerhalb des Containers abgeschirmt werden.

Im Gegensatz dazu ist die γ -Strahlung und damit die Größe $H^*(10)$ außerhalb des Containers von besonderer Bedeutung, da die γ -Quanten durch den Container nur abgeschwächt und nicht abgeschirmt werden. In dieser Arbeit ist aus diesem Grund mit Dosis vom nächsten Kapitel an immer $H^*(10)$ gemeint, wenn sie nicht genauer spezifiziert wird.

Die Schutzgrößen berücksichtigen grundlegend die Einwirkungen der Strahlung auf verschiedene Organe. Von der Organ-Energiedosis $D_{T,R}$ ausgehend, die für jedes Organ bzw. jeden Körperteil T eine gemittelte Energiedosis bezüglich einer Strahlungsqualität R angibt, ist die Organ-Äquivalentdosis $H_{T,R}$ durch

$$H_{T,R} = w_R \cdot D_{T,R} \quad (2.3)$$

definiert. Dabei wird durch die Strahlungswichtungsfaktoren w_R eine Gewichtung des biologischen Schadenspotentials verschiedener Strahlungsarten vorgenommen.

Bei mehreren Strahlungsarten ergibt sich die gesamte Organ-Äquivalentdosis als Summe der einzelnen Organ-Äquivalentdosen für jede Strahlungsqualität.

Die Effektive Dosis E ist abschließend eine Summe über alle Organ-Äquivalentdosen, in der die einzelnen Organe durch Gewebewichtungsfaktoren gemäß der Strahlenempfindlichkeit der verschiedenen Organe gewichtet werden. Sie wird genutzt, um die Wahrscheinlichkeit zu bestimmen, mit der eine stochastische Strahlenwirkung auftritt[18].

³ICRU steht für International Commission on Radiation Units and Measurements

2.2.2 Grenzwerte

Durch natürliche Strahlung erfährt jeder Mensch im Durchschnitt eine jährliche effektive Dosis von 2.1 mSv [19]. Der Gesetzgeber hat durch das Strahlenschutzgesetz (StrlSchG) [20] und die Strahlenschutzverordnung (StrlSchV) [17] für verschiedene Personengruppen und verschiedene Aufenthaltsbereiche Grenzwerte festgelegt. Als Beispiele seien die Submersion in einem direkten Strahlungsfeld oder für die Inkorporation von Radionukliden genannt.

Für Personen der Bevölkerung ist eine zusätzliche Exposition von 1 mSv durch genehmigungs- oder anzeigebedürftige Tätigkeiten nach StrlSchG oder Atomgesetz (AtG) [21] zulässig. Zu den Tätigkeiten zählen die Verwahrung von Kernbrennstoffen gemäß dem AtG, die Errichtung, der Betrieb und die Stilllegung von Zwischen- und Endlagern für radioaktive Abfälle oder das Arbeiten mit radioaktiven Bodenschätzen gemäß dem Bundesberggesetz. Dabei sind generell medizinische Anwendungen ausgenommen [20, §80].

Zusätzlich dazu gibt es als Teilgruppe der Bevölkerung die Gruppe der beruflich exponierten Personen. Wenn Personen durch berufliche Tätigkeiten gegenüber Strahlung exponiert werden und dadurch eine effektive Dosis von mehr als 1 mSv erhalten, sind sie als beruflich exponierte Personen einzustufen. Diese wird weiter unterschieden in die Gruppen A und B, die im Kalenderjahr 20 mSv (A) bzw. 6 mSv (B) erfahren dürfen [17].

Bei genehmigungspflichtigen Tätigkeiten nach dem StrlSchG [20, §12 Absatz 1], dem AtG [21, §§ 6, 7, 9 oder 9b] oder anzeigepflichtigen Tätigkeiten gemäß StrlSchG [20, §§17,19], müssen entsprechend der unten angegebenen Bedingungen Strahlenschutzbereiche ausgewiesen werden [17, §52].

- Überwachungsbereich: Jeder Bereich, in dem eine effektive Dosis von 1 mSv im Jahr⁴ überschritten werden kann, muss als Überwachungsbereich eingerichtet werden.⁵
- Kontrollbereich: Jeder Bereich, in dem eine effektive Dosis von 6 mSv im Jahr nicht ausgeschlossen werden kann, muss als Kontrollbereich gekennzeichnet werden
- Sperrbereich: Wenn in einem Kontrollbereich eine Dosisleistung von mehr als $3 \frac{\text{mSv}}{\text{h}}$ herrschen kann, ist dieser Bereich als Sperrbereich auszuweisen.

Im Umfeld eines Konrad-Containers mit der höchsten erlaubten Dosisleistung von $0.1 \frac{\text{mSv}}{\text{h}}$ in 2 m Abstand dürften beruflich exponierte Personen der Gruppe A laut der im StrlSchG festgelegten Grenzwerte maximal 200 h arbeiten⁶. Diese Rechnung berücksichtigt dabei lediglich die Dosisleistung in 2 m Entfernung. Wenn Arbeiten notwendig werden, die einen geringeren Abstand zum Container erfordern oder die Gegebenheiten einen geringeren Abstand nötig machen,

⁴Für berufliche Exposition ist ein Jahr als ein Arbeitsjahr mit 2000 Arbeitsstunden zu verstehen.

⁵Es existieren weitere mögliche Bedingungen zur Einrichtung der Strahlenschutzbereiche, die die Organ-Äquivalentdosen für verschiedene Körperteile berücksichtigen. Die Vorgaben sind ebenfalls in [17, §52] zu finden.

⁶Zum Vergleich: An der Ortsdosisleistungs-Messstelle Osterwald/Stadt Garbsen lag der natürliche Untergrund im Jahr 2022 zwischen $0.063 \frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ und $0.081 \frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ [22].

reduziert sich die erlaubte Aufenthaltszeit, solange keine weiteren Maßnahmen zum Schutz der Personen getroffen werden. Diese Begrenzungen sind nicht so zu verstehen, dass sie die Sicherheit im Endlager selbst gewährleisten sollen, sondern zum Schutz des Personals, das am Transport und dem aktiven Prozess des Einlagerns beteiligt ist. Der Schacht Konrad wird nach der Einlagerung der Container verfüllt und verschlossen, sodass sich zu diesem Zeitpunkt keine Menschen mehr im Umfeld der Container befinden, die durch die Einhaltung dieser Grenzwerte geschützt werden müssen.

3. Konfiguration der Dosisleistungssimulationen

Das zentrale Ziel dieser Arbeit ist es, eine Methode zu entwickeln, mit der die Simulation der Dosisleistung außerhalb eines Containers automatisiert durchzuführen und die Überprüfung dieser. In diesem Kapitel werden die Funktionen des genutzten Monte-Carlo-Codes FLUKA und deren Verwendung erläutert.

3.1 Transportcodes und Monte-Carlo Methode

Um eine Dosis außerhalb eines Containers deponieren zu können, müssen die beim radioaktiven Zerfall im Inneren des Containers erzeugten Teilchen zunächst aus dem radioaktiven Abfall austreten und das Containermaterial durchdringen. Auf diesem Weg gehen die Teilchen verschiedene Wechselwirkungen mit dem Material des Abfalls und des Containers ein und werden dadurch beeinflusst.

Um das Strahlungsfeld und die resultierende Dosis ohne Messung abzuschätzen, bietet es sich an, Monte-Carlo-Transportcodes zu nutzen, die all diese Wechselwirkungen physikalisch korrekt simulieren. In einem Monte-Carlo Code wird eine vorgegebene Anzahl an Zufallsexperimenten simuliert, deren Ergebnisse genutzt werden, um einen Schätzwert für die gesuchte Größe zu bestimmen. Die Standardabweichung der ermittelten Messwerte sinkt dabei, je größer die Anzahl der simulierten Zufallsexperimente ist[23].

Um einen gefüllten Container korrekt abzubilden und die herrschende Dosisleistung zu bestimmen, gibt es noch einige weitere Anforderungen an den zu nutzenden Monte-Carlo-Code. Es muss möglich sein, die Simulation variabel in einem größeren Algorithmus automatisiert aufzurufen. Für die Simulation muss die zugrundeliegende Geometrie und die inhomogene Aktivitätsverteilung des radioaktiven Abfalls während des Durchlaufs des übergeordneten Algorithmus automatisiert generiert werden können.

3.2 FLUKA

Das vom CERN entwickelte Monte-Carlo Softwarepaket FLUKA (FLUktuierende KAskade)[24] simuliert den Teilchentransport von verschiedenen Partikeln und deren Interaktion mit der umgebenden Materie basierend auf physikalischen Modellen und erfüllt alle oben aufgeführten Bedingungen.

FLUKA-Simulationen sind direkt von der Kommandozeile bzw. durch ein Skript aufrufbar, wodurch die Implementation im übergeordneten Algorithmus kein Problem darstellt. FLUKA bietet die Möglichkeit, Teile der Geometrie durch Voxel erzeugen zu lassen. Dies kann ebenfalls direkt im Durchlauf des übergeordneten Algorithmus passieren. Durch die Möglichkeit des Nutzers, eigene spezifische Quellen zu definieren, ist auch die Bedingung erfüllt, dass eine inhomogene Aktivitätsverteilung implementierbar sein muss. Für den radioaktiven Zerfall ist eine Datenbank mit Nuklideigenschaften hinterlegt, sodass auch dieser in FLUKA direkt simuliert werden kann.

FLUKA ist als Paket für Linux und MacOS verfügbar, sodass für die Verwendung unter Windows eine virtuelle Maschine nötig ist. Die Ergebnisse dieser Arbeit wurden mit der FLUKA Version 4-2.2 erzielt.

Wie die zuvor genannten Funktionen von FLUKA funktionieren und kombiniert wurden, wird in den folgenden Abschnitten erläutert.

3.2.1 Aufbau

FLUKA ist ein in Fortran77 geschriebenes Programm, das durch stetige Weiterentwicklung auch mit Fortran90 kompatibel ist. Die Simulationen in FLUKA werden durch Eingabedateien gesteuert, in denen alle Parameter der Simulation vorgegeben werden müssen. Diese Eingabedateien bestehen aus aneinandergereihten „Karten“. Eine solche Karte ist eine Zeile Text, in der Name der Karte und in sechs Bereichen („What(1)“ bis „What(6)“) die Optionen der Karte festgelegt werden und zuletzt einen Bereich („SDUM“) in dem potentiell ein String gespeichert werden kann, um einen weiteren kartenspezifischen Parameter zu bestimmen.

Anhand der in Abbildung 3.1 dargestellten Eingabedatei werden die Funktionen der Karten erläutert. Karten, die mit einem „*“ beginnen, sind Kommentarkarten, die lediglich dem Verständnis der Eingabedatei dienen.

Die Karte „TITLE“ kann genutzt werden, um in jeder Ausgabedatei einen Namen für die Simulation zu hinterlegen. Dieser wird auf der nächsten Karte angegeben und wäre in diesem Fall „Punktquelle“. Mit der Karte „DEFAULTS“ wird ausgewählt, mit welchen Standardvorgaben FLUKA arbeitet. Es gibt aktuell 9 verschiedene Vorgaben, von denen „PRECISIO“ gewählt wurde, da sie die genaueste Physik ermöglicht. In der Karte „BEAM“ werden die Eigenschaften der Teilchenquelle und der Teilchen festgelegt. Wie der Name BEAM vermuten lässt, ist sie

```

TITLE
Punktquelle
* Set the defaults for precision simulations
DEFAULTS                                     PRECISIO
* Define the beam characteristics
* WARNING: Beam Energy/momentum per nucleon
BEAM                                         10000.0       ISOTOPE
* Ion Definition
HI-PROPE          95          241
* Define the beam position
BEAMPOS           0          0          0
GEOBEGIN                                                 COMBNAME
0 0
* Black body
SPH blkbody      0.0 0.0 0.0 10000.
* Void sphere
SPH void         0.0 0.0 0.0 1000.
* Air sphere
SPH air          0.0 0.0 0.0 100
* detector 1 in a distance of 10cm
RPP det1         9.5 10.5 -0.5 0.5 -0.5 0.5
* detector 2 in a distance of 20cm
RPP det2         -0.5 0.5 19.5 20.5 -0.5 0.5
* detector 3 in a distance of 40cm
RPP det3         -40.5 -39.5 -0.5 0.5 -0.5 0.5
END
* Black hole
BLKBODY          5 +blkbody -void
* Void around
VOID             5 +void -air
* Air around
AIR              5 +air -det1 -det2 -det3
* detector 1 region
DETECT1         5 +det1
* detector 2 region
DETECT2         5 +det2
* detector 3 region
DETECT3         5 +det3
END
GEOEND
* ..+...1....+...2....+...3....+...4....+...5....+...6....+...7..
ASSIGNMA        BLCKHOLE  BLKBODY
ASSIGNMA        CARBON   VOID
ASSIGNMA        AIR      AIR
ASSIGNMA        AIR      DETECT1  DETECT3
RADDECAY        2
USRBIN          12      DOSE-EQ    -54          det1
USRBIN          DETECT1
USRBIN          12      DOSE-EQ    -55          &
USRBIN          DETECT2
USRBIN          12      DOSE-EQ    -56          det2
USRBIN          DETECT3
DCYSCORE        -1          det1    det3    USRBIN
* Set the random number seed
RANDOMIZ         1. 5135587
* Set the number of primary histories to be simulated in the run
START           200000          0
STOP

```

Abbildung 3.1: Beispielingabedatei für FLUKA. Hier die Simulation einer ^{60}Co -Punktquelle mit drei Detektorregionen in 10 cm, 20 cm und 40 cm Abstand von der Quelle.

ursprünglich für verschiedenste Teilchen*strahlen* gedacht. Die hier angegebene Option 10000.0 gibt zum Beispiel das Signal, die Bewegungsrichtungen der Teilchen isotrop über den gesamten Raum zu verteilen.

Durch die Angabe „ISOTOPE“ in Kombination mit der Karte „HI-PROPE“ lassen sich auch radioaktive Isotope als Quelle definieren. Statt ihnen können auch Photonen, Elektronen, Neutronen etc. ausgewählt werden. In der „HI-PROPE“-Karte werden dann die Ordnungs- und Massenzahl des zu simulierenden Isotops festgelegt (hier ^{60}Co). Um den radioaktiven Zerfall von instabilen Kernen zu simulieren, muss zusätzlich allerdings noch die Karte „RADDECAY“ verwendet werden, die später besprochen wird. Die Karte „BEAMPOS“ legt fest, von welchem Ort aus der Teilchenstrahl startet. Theoretisch könnte hier auch die Richtung des Strahls definiert werden, wenn zuvor nicht bereits eine isotrope Verteilung ausgewählt worden wäre.

Die „GEOBEGIN“-Karte bestimmt mit der Option „COMBNAME“, dass die in den nächsten Zeilen definierte Geometrie nicht nur durch Zahlen, sondern auch durch die gewählten Namen der Geometriebestandteile referenziert werden kann. Die Körper „blkbody“, „void“ und „air“ sind Kugeln (Name „SPH“ für Sphere) um den Ursprung mit verschiedenen Radien, die als letzte Option angegeben sind. Anschließend werden drei Quader („RPP“) durch ihre Grenzflächen definiert.

Die so definierten Körper können nun durch boolesche Operationen zu Regionen kombiniert werden, um die genaue Geometrie zu definieren. Dies geschieht nach der ersten „END“-Karte in den Karten „BLKBODY“ bis „DETECT3“. In der Karte „AIR“ wird als beispielsweise zunächst der Körper „air“ hinzugefügt und von diesem anschließend die drei Körper „det1“, „det2“ und „det3“ abgezogen. So entsteht die Region „AIR“ mit drei Lücken an den Positionen der Detektoren. Die Definition der Regionen wird durch die zweite „END“- und die „GEOEND“-Karte markiert.

In den „ASSIGNMAT“-Karten wird jeder zuvor definierten Region ein Material zugeordnet. Die nutzbaren Materialien beschränken sich dabei nicht nur auf die durch FLUKA vordefinierten Materialien, da es die Möglichkeit gibt, eigene Materialien zu definieren. Dazu müssen die Dichte und die atomare Zusammensetzung angegeben werden. Die äußerste Region muss dabei immer vom Material „BLCKHOLE“ bzw. „Schwarzes Loch“ sein, damit alle Teilchen, die sich zu weit von der relevanten Geometrie entfernen, aus der Simulation entfernt werden.

Die bereits zuvor angesprochene Karte „RADDECAY“ ermöglicht die Simulation von radioaktiven Zerfällen. Wenn radioaktive Isotope selbst als Quellen genutzt werden sollen, muss wie in [Abbildung 3.1](#) die Option 2 für den „semi-analogue mode“ ausgewählt werden. Option 1 wäre im Gegensatz dazu für Aktivierungsstudien zu wählen.

Mit den „USRBIN“-Karten werden Bereiche in der Geometrie als Detektoren definiert, mit denen eine bestimmte Messgröße gemessen werden soll. „USRBIN“-Karten werden meist zu zweit verwendet, um mit der zweiten Karte weitere Informationen zur Detektorgröße anzugeben. Die ersten beiden „USRBIN“-Karten besagen, dass in der zuvor definierten Region „DETECT1“ die

Ortsäquivalentdosis $H^*(10)$ gemessen und in die Datei 54 ausgegeben werden soll und diese „USRBIN“-Kombination den internen Namen „det1“ erhält. Diese internen Namen der Detektoren sind für die nächste Karte „DCYSCORE“ relevant, da in dieser festgelegt wird, dass die „USRBIN“-Detektoren „det1“ bis „det3“ auch die Teilchen detektieren sollen, die aus radioaktiven Zerfällen stammen¹. Die Karte „RANDOMIZE“ initialisiert den Startwert für den Zufallszahlengenerator, bevor die „START“-Karte die Simulation mit der angegebenen Zahl an primären Teilchen (im Folgenden „primary“ bzw. „primaries“ genannt) startet.

Bis auf einige wenige Vorgaben können die Karten an beliebiger Position in der Eingabedatei stehen.

Um eine Simulation auszuführen, wird in der Kommandozeile ein Befehl der Form

```
/pathtofluka/bin/rfluka -N0 -M5 Beispiel
```

aufgerufen. Der Parameter „M5“ lässt 5 unabhängige Simulationen der Eingabedatei „Beispiel.inp“ durchführen und „N0“ lässt die Simulation beim ersten Zyklus beginnen. Mit einer anderen Zahl statt 0 lässt sich auch eine zuvor beendete Simulation in weiteren Zyklen fortführen.

3.2.2 flair

Um die Nutzung von FLUKA einfacher zu gestalten wurde vom CERN zusätzlich die grafische Oberfläche „flair“ entwickelt [25]. In dieser können die Eingabedateien durch einen einfachen Editor erstellt werden, da er spezifisch auf den Code Aufbau mit Karten zugeschnitten ist und ein Großteil der Argumente der Karten durch Drop-down-Menüs ausfüllbar sind. Außerdem ermöglicht flair die Visualisierung der verwendeten Geometrien sowohl in 2D- als auch 3D-Ansichten, die Organisation und Durchführung der Simulationsläufe sowie die anschließende Verarbeitung verschiedener Ausgabedateien und das Darstellen der Ergebnisse durch ein gnuplot bzw. matplotlib Interface. In einem extra Reiter „compile“ der Oberfläche ist es möglich, verschiedene Fortranprogramme, die spezifisch für FLUKA gedacht sind, zu kompilieren und auch direkt zu linken. Diese Funktion kann insbesondere für Nutzer-Routinen, die in Abschnitt 3.2.6 beschrieben werden, genutzt werden. Die in der Oberfläche erzeugten Eingabedateien können trotzdem weiterhin von der Kommandozeile aus ausgeführt werden und verlangen nicht dauerhaft die Nutzung der Oberfläche. Dies ermöglicht es, vorbereitende Arbeiten in flair durchzuführen, und die erstellten Dateien auch in automatisiert aufgerufenen Simulationen zu verwenden. Außerdem liefert flair eine deutlich erweiterte Materialbibliothek als FLUKA allein. In dieser Arbeit wurde die flair Version 3.2-1 verwendet.

¹Wird diese Karte nicht verwendet, werden keinerlei Größen für Teilchen gemessen, die durch radioaktiven Zerfall entstanden sind. Dosis aus z.B. entsandten γ -Quanten würde dann nicht detektiert werden.

3.2.3 Dosisleistungsmessung in FLUKA

Die Äquivalentdosis lässt sich in FLUKA als eine der möglichen Größen mit der Karte „USRBIN“ bestimmen, indem „DOSE-EQ“ als What(2) angegeben wird. Dadurch werden die simulierten Teilchenflüsse mit den entsprechenden Dosiskoeffizienten aus dem ICRP-Bericht 74 [26] gewichtet. Die Ausgabegröße H_F von FLUKA besitzt die Einheit pSv/(primary · unit-volume). Das Ergebnis muss noch bezüglich des Detektorvolumens V_D korrigiert werden, da FLUKA für alle Detektoren ein Volumen von 1 cm^3 annimmt. Die „Einheit“ primary wird durch die Multiplikation mit der Aktivität A der untersuchten Probe gekürzt. Mit diesen Korrekturen ergibt sich die Größe $\frac{\text{pSv}}{\text{s}}$, sodass noch ein Faktor $3600 \frac{\text{s}}{\text{h}}$ benötigt wird. Insgesamt ergibt sich als Umrechnungsformel:

$$\dot{H}^*(10) = \frac{H_F \cdot A \cdot 3600 \text{ s/h}}{V_D} \quad (3.1)$$

3.2.4 Volumenquellen in FLUKA

FLUKA bietet die Möglichkeit ausgedehnte Quellen zu definieren. Diese können als Kugel, Quader und Zylinder definiert werden. Wird eine solche „Volumenquelle“ verwendet, so kann jeder primary an einem beliebigen Ort innerhalb des Volumens generiert werden. Die Volumenquelle wird durch eine zweite „BEAMPOS“-Karte mit einem der drei Befehle „SPHE-VOL“, „CART-VOL“ oder „CYLI-VOL“ als „SDUM“ definiert und durch die erste „BEAMPOS“-Karte im Raum platziert. Beispielsweise wird für eine zylindrische Quelle auf dieser zweiten Karte die Höhe und der Radius angegeben.

Zusätzlich muss die Geometrie noch durch die FLUKA Geometrie aufgebaut werden, damit dem Bereich ein Material zugewiesen werden kann. Ansonsten würden Selbstabsorptionseffekte der Quelle nicht berücksichtigt werden.

3.2.5 VOXELS

Bei der Definition der Körper und Regionen in FLUKA ist festzustellen, dass eine automatisierte Definition der Körper und aus diesen kombinierten Regionen durch einen Algorithmus nur schwer zu realisieren ist. Das automatisierte Erkennen der unterschiedlichen Formen durch einen Algorithmus und die anschließende Erzeugung dieser Geometrie aus den in FLUKA verfügbaren Körpern wäre zu aufwendig.

Eine Möglichkeit solche Formen anzunähern, ist der Aufbau der Struktur aus vielen kleinen Körpern. FLUKA bietet mit der „VOXELS“-Karte die Möglichkeit eine solche aus Voxeln bestehende Geometrie zu definieren bzw. einzulesen. Ein Voxel ist dabei das dreidimensionale Analogon zum zweidimensionalen Pixel und im einfachsten Fall ein einfacher Würfel. Die am weitesten verbreitete Nutzung der Möglichkeit, die Geometrie der Simulation durch Voxel aufzubauen, liegt in der Nuklearmedizin, in der die Daten für die Voxel meist aus CT Scans stammen

[27, 28]. Außerhalb dieses Feldes wird diese Möglichkeit nur selten genutzt.

Eine Voxelgeometrie kann nur einen zusammenhängenden Bereich der Geometrie darstellen und die Voxel müssen alle die gleichen Kantenlängen besitzen. Der beschriebene Bereich muss die Form eines Quader besitzen und wie ein anderer Körper von der umgebenden Region abgezogen werden. Der Quader wird automatisch durch FLUKA erzeugt und erhält als Körper den Namen „voxels“, der dann für die Definition der Regionen verwendet werden kann.

Die „VOXELS“-Karte besitzt vier potentiell genutzte „WHATs“. Die ersten drei Einträge definieren den „Ursprung“ der Voxelgeometrie. Die Geometrie wird von dort aus gemäß der Eigenschaften der Voxel aufgebaut. Mit dem vierten „WHAT“ gibt es die in dieser Arbeit nicht verwendete Möglichkeit, eine Drehung des gesamten Voxelquaders durchzuführen. Das „SDUM“ der „VOXELS“-Karte gibt den Namen einer zusätzlichen Binärdatei an, die die Endung „.vxl“ besitzt, eingelesen wird und die Informationen zu den Voxel enthält. Eine Beispieldatei ist in lesbarer Version in 3.2 zu sehen.

In der Binärdatei steht in der ersten Zeile ein Titel, gefolgt von der Anzahl der Voxel in jede Richtung (x,y,z) und zwei mal der Anzahl der verschiedenen Materialien in der zweiten Zeile. Warum die Anzahl der Materialien zwei mal notiert wird, wird später unter „Das Programm VoxelActivity“ erklärt. Anschließend werden die Kantenlängen der Voxel in jede Richtung festgelegt und ab Zeile 4 steht in jeder Zeile nur die Kennung des Materials, das ein bestimmtes Voxel besitzt. Die Materialien werden in der Datei dabei lediglich durch Zahlen repräsentiert und erst in FLUKA mit einem Material verknüpft.

```
Voxel
 2  2  2  3  3
0.500 0.500 0.500
0
1
2
0
2
2
3
2
1
2
3
```

Abbildung 3.2: Formatierte Version der Binärdatei, die an FLUKA übergeben wird. In diesem Beispiel existieren 8 Voxel mit insgesamt 4 (0 bis 3) verschiedenen FLUKA-Materialien. Jeder Voxel ist ein Würfel mit einer Kantenlänge von 0.5

Um die Zuordnung des Materials zu einem Voxel zu ermöglichen, sind die Voxel in der Datei in einer bestimmten Reihenfolge zu durchlaufen. Es wird als erstes die x-Koordinate, dann die y-Koordinate und dann die z-Koordinate durchlaufen. Die erste Zeile der Materialdefinitionen in Abbildung 3.2 beinhaltet nur die Materialinfo „0“ für das Voxel (0,0,0) und die zweite Zeile nur die Info „1“ für das Voxel (1,0,0). Die letzten N Zeilen, wobei N die Anzahl der verschiedenen Materialien ist, die in Zeile 2 benannt wurde, gehen einmal alle Zahlen (bzw. Materialien) in der Reihenfolge durch, in der sie in der Datei auftreten.

Um diese .vxl-Datei zu erzeugen wird ein Fortranprogramm benötigt, das in einer Grundversion „writegolem.f“ im FLUKA-Handbuch angegeben ist. Beim Kompilieren dieses Programms müssen spezifische Optionen gewählt werden, die durch den Aufruf des „FLUKA-Compilers“

„*fff*“ an den installierten Fortrancompiler übergeben werden. Nach dem Linken mittels des FLUKA-eigenen Linkers *lfluka* kann das Programm dann ausgeführt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine von „*writegolem.f*“ abgewandelte Version „*VoxelActivity.f*“ entwickelt, die die Voxeldatei direkt in Zusammenhang mit der für die im nächsten Abschnitt [3.2.6](#) besprochenen User-Routine „*Source.f*“ nötige Eingabedatei erzeugt. Die Änderungen bezüglich der Voxelfunktionalität sind:

- Auslesen der Voxeldaten (Anzahl und Dimension) aus der vom Code eingelesenen Datei
- Keine Neuordnung der Kennzahlen der Materialien durch *VoxelActivity.f*

Das Programm *VoxelActivity*

Die bereitgestellte Version „*writegolem.f*“ benötigt die explizite Angabe der Eigenschaften der Voxelgeometrie im Code bevor er kompiliert wird. Damit die Geometrie automatisiert in das für FLUKA verständliche Format übersetzt werden kann, müssen diese Angaben allerdings während der Laufzeit des kompilierten Programms übergeben werden können. Da bis zum Standard Fortran2003 keine einheitliche Methode zum Einlesen von Argumenten von der Kommandozeile existierte und FLUKA auf Fortran77 (und einigen Fortran90-Passagen) basiert, wurde sich aus Gründen der Kompatibilität auf die Nutzung dieser älteren Standards beschränkt.

Um die Voxelspezifikationen einzulesen und die Größe der erzeugten Arrays den Anforderungen direkt anpassen zu können, werden die Arrays allozierbar erzeugt. Nachdem die ersten beiden Zeilen der Ursprungsdaten eingelesen wurden, sind die Informationen zur Anzahl und Größe der Voxel bekannt und die benötigten Arrays können entsprechend der Anzahl der Voxel allokiert werden.

Anschließend können die Daten aus der zu verarbeitenden Datei ausgelesen und die fünf allokierten Arrays für x-, y-, z-, Material- und Aktivitätsdaten gefüllt werden. Die Daten in der zu verarbeitenden Datei müssen dabei im Format (3f9.3,i9,f9.3) vorliegen. Es werden also 5 Bereiche in der Datei erwartet. Zunächst drei neun-Zeichen breite Felder, in denen Dezimalzahlen mit drei Nachkommastellen stehen, dann ein neun-Zeichen breites Feld mit einer ganzen Zahl und dann noch ein neun-Zeichen breites Feld für eine Dezimalzahl. Durch diese Art der Definition ist keine Trennung durch Kommata nötig, die Zahlen können allerdings wirklich nur in exakt dieser Darstellung eingelesen werden. Weitere Zeichen in den Feldern kann das Programm nicht verarbeiten. Die Materialdaten werden nach jeder eingelesenen Zeile überprüft und falls ein neues Material eingelesen wurde, wird dieses in die Arrays *kreg* und *ireg* eingetragen. In „*writegolem.f*“ wird davon ausgegangen, dass die Materialien beliebige Zahlen zwischen 1 und 32767 besitzen und die Materialien anschließend durch „*writegolem.f*“ so neuen Zahlen zugeordnet werden, dass diese möglichst gering sind. Da dies zu Problemen der Zuordnung der Materialien führen kann, wurde in „*VoxelActivity.f*“ diese Neuordnung der Materialkennungen entfernt. Dadurch können in FLUKA die Materialien einfacher zugeordnet werden, da sie fest mit den Nummern verbunden sind.

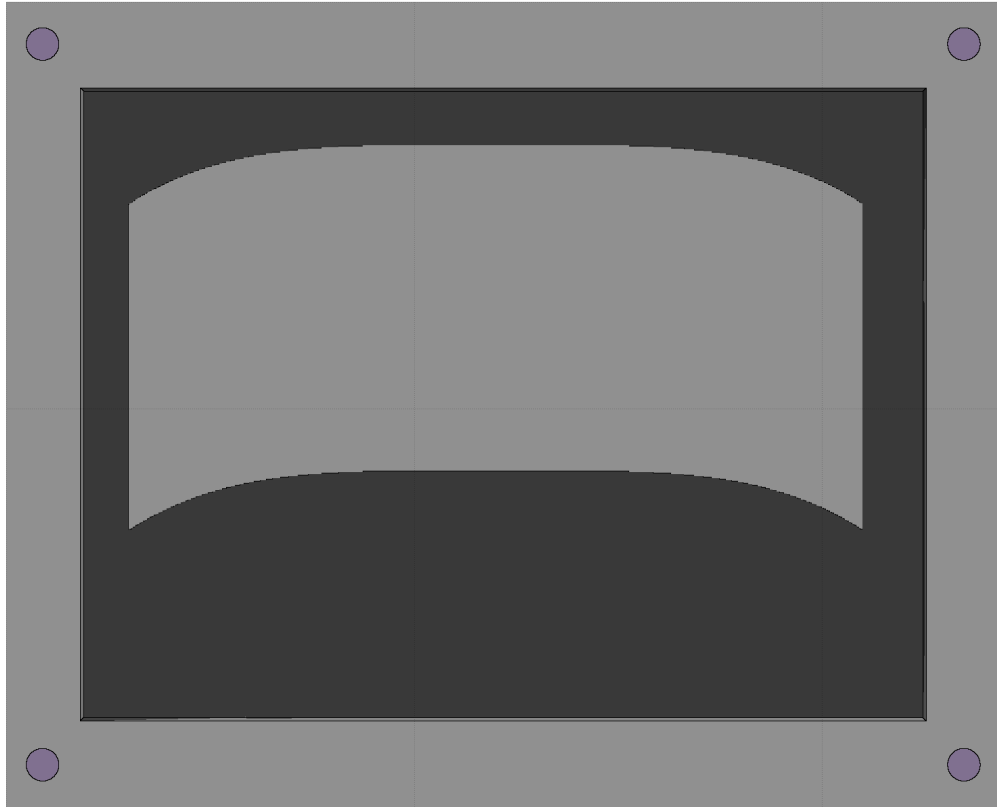


Abbildung 3.3: Darstellung eines Schweizer LC84 Endlagercontainers durch FLUKA-interne Geometrie, in dem ein weiter Betonblock mittels Voxelgeometrie platziert ist. Die grauen Strukturen bestehen aus Beton, die violetten Kreise in den Ecken repräsentieren verstärkende Stahlstangen. Im dunklen Bereich im Container ist Luft, durch die man auf den Containerboden schauen könnte. Dies ist durch die Darstellung in flair nicht möglich.

Die Aktivitätsdaten (Koordinaten und Aktivitäten) werden zur weiteren Verarbeitung mit der Source-Routine formatiert in eine neue Datei *activitypositions.dat* geschrieben. Neben der Ausgabe einiger Informationen zu den verarbeiteten Daten auf die Kommandozeile werden abschließend die Materialdaten wie in Abbildung 3.2 aber unformatiert ausgegeben.

In der vorliegenden Version des Programms muss es mit der Datei, die die Eingangsdaten enthält, im gleichen Ordner wie die FLUKA-Eingabedatei liegen, damit direkt im Anschluss das FLUKA-Program ausgeführt werden kann.

In Abbildung 3.3 ist ein Beispiel für die Nutzung von „VoxelActivity“ zu sehen. Dabei wurde ein Schweizer Endlagercontainer vom Typ LC84plus [29] händisch modelliert und in diesem ein Betonblock platziert, der durch Voxel dargestellt wird.

3.2.6 Benutzer-Routine source

In FLUKA lassen sich auf verschiedene Weisen Quellen definieren. Die einfachste Variante ist die in Abbildung 3.1 gezeigte, die lediglich die BEAM-Karte und die BEAMPOS-Karte verwendet. Mit der „BEAMPOS“ Karte kann wie zuvor erklärt eine Volumenquelle definiert werden, allerdings ist diese auf drei Formen eingeschränkt. Die größtmögliche Flexibilität zum Einstellen der Eigenschaften der Quelle bietet die Benutzer-Routine *source* beziehungsweise *soure_newgen*. *soure_newgen* ist dabei die erneuerte und deutlich benutzerfreundliche Version von *source* und sollte aus diesem Grund immer verwendet werden. Mit der „Source-Routine“ ist deshalb von nun an immer die „*soure_newgen*“ gemeint. In der Source-Routine können eigene Variablen und Funktionen definiert werden, die dann dazu genutzt werden können die verschieden Parameter der Quellen und Teilchen zu beschreiben. In dieser Arbeit wird die Möglichkeit genutzt, dass mit Hilfe einer vordefinierten Subroutine „*read_phase_space_file*“ in der „*source.inc*“ Datei alle Daten der Quellen aus einer Phasenraumdatei eingelesen werden können. Diese Subroutine ist allerdings darauf ausgelegt, dass alle der folgenden Parameter benötigt werden:

- Teilchencode: Jede Teilchenart besitzt in FLUKA eine zugewiesene Zahl.
- Teilchen Impuls bzw Energie: Jedes Teilchen besitzt eine Energie bzw. einen Impuls. Die Interpretation der Daten als Impuls oder Energie wird durch einen Parameter beim Aufruf der Subroutine bestimmt.
- Koordinaten: Die Startkoordinaten x_0 , y_0 , z_0 der Quelle.
- Richtungskosinuswerte: Dem Teilchenstrahl wird durch Angabe der Richtungskosinuswerte in x -, y - und z -Richtung die Flugbahn vorgegeben.
- Teilchengewicht: In FLUKA besitzt jedes Teilchen ein statistisches Gewicht, das angibt, wie stark die Ergebnisse aus der Simulation dieses Teilchens berücksichtigt werden sollen.

Die Einträge werden von der Source-Routine entweder zufällig oder der Reihe nach ausgewählt, dies lässt sich mit einem Parameter auswählen.

Für den Zweck dieser Arbeit und der Simulation radioaktiver Isotope sind die Daten zum Teilchencode, zur Teilchenenergie, den Richtungskosinuswerten und dem Teilchengewicht nicht von Bedeutung. Der Teilchencode würde jedes Mal die Information „Isotop“ beinhalten. Die Energie der simulierten Teilchen wird durch das zerfallende Isotop bestimmt, die Richtungen werden aufgrund der Simulation eines isotrop strahlenden Isotops von FLUKA zufällig generiert und die Teilchen sollen ebenfalls alle gleich gewichtet werden.

Aus diesem Grund wird eine veränderte Version „*read_phase_position_file*“[\[30\]](#) verwendet, die zusätzlich zur Datei „*source.inf*“ hinzugefügt wurde. In dieser werden lediglich die Teilchenkoordinaten und die Aktivität an diesem Ort bzw. dem umgebenden Voxel angegeben. Die

Koordinaten werden so eingelesen wie in der originalen „read_phase_space_file“ Subroutine. Das Auswählen des Ortes findet allerdings auf eine andere Weise statt. Um die unterschiedlichen Aktivitäten an den verschiedenen Orten abzubilden, werden diese intern durch Wahrscheinlichkeiten repräsentiert.

Der Ort, an dem das Teilchen erzeugt und dessen Zerfall simuliert wird, wird dadurch ausgewählt, dass eine zufällige Zahl generiert und mit den Wahrscheinlichkeiten verglichen wird, die den Orten zugeordnet sind.

Die Definition des Isotops findet bei Nutzung der neuen Subroutine fest im Code der Source-Routine statt und nicht durch die Subroutine „read_phase_position_file“.

Die Source-Routine muss, damit sie genutzt werden kann, genau wie das Programm „VoxelActivity“ mithilfe des „FLUKA-Compilers“ *fff* an den installierten Fortrancompiler übergeben und mittels des FLUKA-eigenen Linkers *lfluka* gelinkt werden. Dazu muss sie zusammen mit der aktualisierten Version der „source.inc“ im Projekt Ordner der FLUKA-Simulation liegen, da sonst kein Zugriff auf die Subroutine „read_phase_position_file“ besteht und FLUKA im Anschluss keinen Zugriff auf die kombinierte Source-Datei ausführt. Die ausführbare Datei muss dann abschließend im gleichen Ordner wie die FLUKA-Datei existieren.

Um die Simulation dann mit den Zusätzen aus einer Benutzer-Routine *routine* auszuführen, muss an den normalen Aufruf in der Kommandozeile eine „-e *routine*“ angehängt werden.

Wenn die FLUKA-Simulation in *flair* organisiert und ausgeführt wird, ist im „Run“-Reiter die erzeugte *routine* als ausführbare Datei auszuwählen.

3.2.7 TIME-CUT

Um den radioaktiven Zerfall zu simulieren, muss wie bereits unter 3.2.1 erwähnt die Karte „RADDECAY“ angegeben und im semi-analogen Modus verwendet werden. Dieser semi-analoge Modus integriert allerdings über die Zeit bis unendlich. Das bedeutet, dass jede Zerfallskette bis zum stabilen Isotop an ihrem Ende durchlaufen wird, auch wenn auf dem Zerfallspfad Isotope mit Halbwertszeiten von z.B. 10^{15} a liegen.

Mit der Karte „TIME-CUT“ ist es möglich die simulierte Zeit² zu reduzieren. Dadurch kann die Simulation je nach Verhältnis der Halbwertszeiten nur auf das Mutternuklid beschränkt werden und die Töchter vollkommen aus der Simulation entfernt werden. Die Karte besitzt fünf Whats, die folgende Bedeutungen haben. In What(1) ist die zu simulierende Zeit in ns anzugeben. What(2) enthält einen potentiellen Versatz in ns ab dem die zu simulierende Zeit aus What(1) anzuwenden ist. What(4) und What(5) geben an, für welche Partikeltypen die Simulationsbegrenzung angewendet werden soll. What(4) gibt dabei die untere Grenze bezüglich der Teilchencodes und What(5) die obere Grenze an. Mit What(6) können die Schritte angegeben werden, in denen die Teilchentypen durchlaufen werden sollen. Für diese Arbeit sind

²Es ist zwischen simulierter Zeit und Simulationszeit zu unterscheiden. Die Simulationszeit ist die Zeit, die benötigt wird, um die Simulation durchzuführen. Die simulierte Zeit ist die Zeit, die innerhalb der Simulation vergeht.

lediglich die Whats 1, 4 und 5 relevant, wobei die Whats 4 und 5 so eingestellt werden, dass die Begrenzung für alle Teilchen gilt (What(4) = 4-Helium, What(5) = @LASTPART).

Im Fall von ^{241}Am , der in dieser Arbeit noch relevant wird, ist es so zum Beispiel möglich, die Zerfallskette von ^{237}Np bis ^{205}Tl auszuschließen, da diese Töchter aufgrund der Erzeugung von ^{241}Am durch den Menschen noch nicht im Gleichgewicht vorliegen können.

3.3 Resultierende Bedingungen

Die Simulation soll wie zuvor beschrieben mit der Kombination aus der VOXEL-Karte und der Source-Routine durchgeführt werden, um eine automatisierte Generierung der Geometrie und Zuordnung von Aktivitäten an die einzelnen Voxel zu ermöglichen. Dazu soll nur eine Datei mit Daten an „VoxelActivity“ übergeben werden.

Aufgrund der Vorgaben seitens FLUKA, liegen die Voxel der Geometrie auf einem gleichmäßigen kartesischen Raster. Bei den Daten allerdings, die vom Kraftwerk geliefert werden, kann nicht von einer solchen Anordnung und insbesondere einer Anordnung auf dem Voxelraster ausgegangen werden (siehe Abbildung 3.4). Dadurch war es nötig, eine Interpolation der Aktivitätsverteilung, die vom Kraftwerksbetreiber bereitgestellt wird, vorzunehmen. Damit wird sichergestellt, dass die Aktivitäten an den Positionen der Voxel zur Verfügung stehen. Der dafür implementierte Interpolationsalgorithmus wird im Kapitel 5 erklärt.

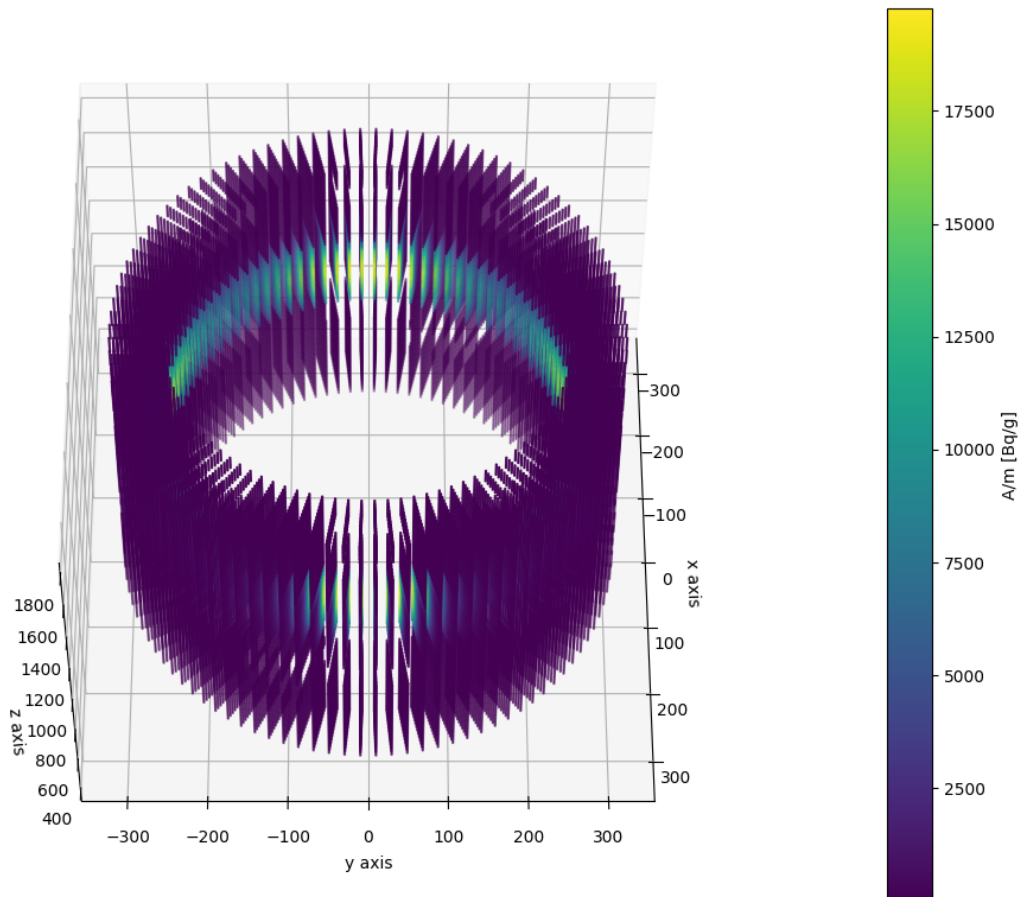


Abbildung 3.4: Beispieldaten, wie sie von den Kraftwerksbetreibern geliefert würden. Die ursprünglich in Zylinderkoordinaten angegebenen Daten sind hier in kartesischen Koordinaten dargestellt. Je größer der Abstand vom Ursprung wird, desto weiter entfernen sich die Punkte auf einer Entfernung voneinander.

4. Simulationsdauer in Abhängigkeit der Voxelzerlegung

Je realistischer die Geometrie und die Aktivität aufgelöst werden können, desto näher sollten auch die Ergebnisse zur Dosisleistung an der Realität liegen. Eine exakte Darstellung ist allerdings aufgrund der endlichen Voxelgröße in FLUKA, der vorhandenen Hardware und der Notwendigkeit für eine Laufzeitminimierung, um die Zeit für die gesamte Optimierung zu reduzieren, nicht möglich. Daher werden im folgenden der Einfluss der Anzahl der Voxel und der Anzahl der potentiellen Quellen auf die Simulationszeit untersucht, um sinnvolle Bereiche für diese Simulationsparameter festzulegen. Die Erzeugung der Voxelgeometrie und die Initialisierung der Source Routine benötigen im Vergleich zur Verwendung einer Standardgeometrie in FLUKA zusätzliche Zeit.

Um die Simulationszeit in Abhängigkeit von der Voxelzerlegung mit möglichst geringem programmiertechnischem Aufwand zu untersuchen, wird ein Skalierungsfaktor F eingeführt, der die Anzahl und Größe der Voxel beeinflusst. Für $F = 1$ besitzen die Voxel eine Kantenlänge von 1 cm. Während die Anzahl der Voxel in jede Richtung mit F multipliziert wird, wird die Kantenlänge der Voxel mit $\frac{1}{F}$ multipliziert, damit weiterhin der gleiche Raum ausgefüllt wird. Die Simulationsdauern wurden den FLUKA-Ausgabedateien der Simulationen entnommen, in denen sowohl die Gesamtsimulationszeit als auch die durchschnittliche Simulationszeit pro primary angegeben werden. Zwischen der Gesamtsimulationszeit und der Simulationszeit pro primary die Anzahl der simulierten primaries, die hier jeweils einen einzelnen Zerfall darstellen. Um die Vergleichbarkeit aller Ergebnisse zu gewährleisten und die Variable der Anzahl der primaries zu eliminieren. Durch eine Verringerung der primaries könnte die Simulationszeit sehr einfach reduziert werden, wodurch das Ergebnis der folgenden Untersuchungen verfälscht würde.

Für die folgenden Untersuchungen wurde der Zerfall von ^{60}Co simuliert.

Einfluss der Voxelanzahl Um den Einfluss der Anzahl der Voxel auf die Simulationsdauer zu untersuchen, wurde eine Betonstruktur in einem Konrad-Container mit $F = 0.5$ in FLUKA erzeugt, und anschließend der Faktor F variiert, während die Quellenpositionen für $F = 0.5$ konstant blieben. Es wurden Geometrien mit den Faktoren 0.1, 0.125, 0.25, 0.5, 1, 2 und 4 erzeugt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 aufgeführt. Der Verlauf der Daten legt eine Anpassung mit einer exponentiellen Funktion wie bei der Ladekurve eines Kondensators nahe, die für wachsende Werte gegen eine Konstante konvergiert:

$$f(x) = a \cdot (1 - e^{-b \cdot x}) + c \quad (4.1)$$

Für die Kurvenanpassung wurde gnuplot [31] verwendet, das die Parameter a, b und c variiert, bis die Summe der gewichteten Residuenquadrate minimiert ist [32]. Daraus gingen die Parameter der Tabelle 4.2 mit einem Bestimmtheitsmaß von $r^2 = 97.83\%$ hervor, womit es keinen Grund gibt, die Kurvenanpassung abzulehnen.

Tabelle 4.1: Ergebnisse der Simulationen mit konstanter Punktanzahl und zunehmender Voxelanzahl.

Voxelanzahl	Voxelgröße (cm)	Aktivitätspunkte	Rechenzeit (s)	Zeit pro Primary (ms)
1728	10	181240	$7.8 \cdot 10^1$	$3.9 \cdot 10^{-1}$
3300	8	181240	$7.3 \cdot 10^1$	$3.6 \cdot 10^{-1}$
27000	4	181240	$7.6 \cdot 10^1$	$3.8 \cdot 10^{-1}$
216000	2	181240	$8.0 \cdot 10^1$	$4.0 \cdot 10^{-1}$
1728000	1	181240	$9.2 \cdot 10^1$	$4.6 \cdot 10^{-1}$
13824000	0.5	181240	$9.6 \cdot 10^1$	$4.8 \cdot 10^{-1}$
110592000	0.25	181240	$1.2 \cdot 10^2$	$5.9 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 4.2: Funktionsparameter für die Anpassung an Funktion 4.1. Das Bestimmtheitsmaß r^2 beträgt 97.83%.

Parameter	Wert	Standardabweichung
a	$1.9 \cdot 10^{-4} \text{ s}$	$4 \cdot 10^{-5} \text{ s}$
b	$5.5 \cdot 10^{-8}$	$2.9 \cdot 10^{-8}$
c	$3.92 \cdot 10^{-4} \text{ s}$	$1.5 \cdot 10^{-5} \text{ s}$

In Abbildung 4.1 ist die Simulationszeit eines Zerfalls gegenüber der Anzahl der Voxel aufgetragen und zusätzlich Funktion 4.1 in grün dargestellt. Die Funktionen $g(x)$ und $h(x)$ dienen der Darstellung des Unsicherheitsbands. In der Grafik und Tabelle ist zu erkennen, dass die Simulationsdauer bis ca. 200.000 Voxel bei maximal 80 s und bei größeren Voxelanzahlen stark

steigt. Aus dieser Voxelanzahl kann die minimale Voxelgröße berechnet werden, die angibt, wie groß die kleinste Schichtdicke sein kann, die unter der gegebenen Zeit simuliert werden kann. Diese so definierte Auflösung beträgt in diesem Fall etwa 2 cm. Strukturen, die kleiner als diese 2 cm sind, können bei dieser Voxelanzahl folglich nicht durch die Voxelgeometrie dargestellt werden. Müssen feinere Strukturen aufgelöst werden, ist mit signifikant größeren Rechenzeiten zu rechnen.

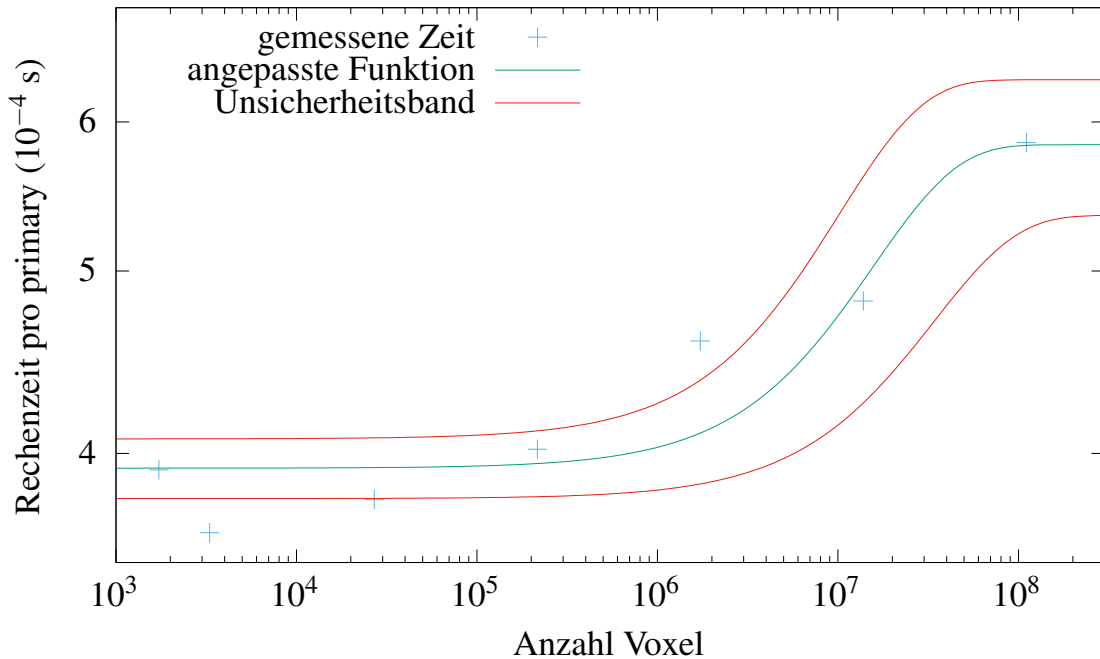


Abbildung 4.1: Abhängigkeit der Simulationszeit von der Anzahl der Voxel dargestellt mit logarithmisch skaliertem x-Achse. Das Unsicherheitsband für interpolierte Werte mit einer Breite der zweifachen Standardabweichung ist mit roten Linien dargestellt. Es sind keine Unsicherheitsbalken für die Messwerte eingezeichnet, da die Anzahl der Voxel exakt vorgegeben wurde und die Auflösung der Zeitmessung des PCs ungefähr ein Tausendstel des Messwertes beträgt und damit vernachlässigt werden kann [33].

Einfluss der Punktdichte der Aktivitätsverteilung Um den Einfluss der Punktdichte der Aktivitätsverteilung auf die Simulationsdauer zu untersuchen, wurde eine Betonstruktur in einem Konrad-Container mit $F = 0.5$ generiert, während die Punktdichte verändert wird (siehe Tabelle 4.2). Die grafische Darstellung der Messwerte ist in Abbildung 4.2 zu sehen. Der Verlauf des Graphen legt einen linearen Zusammenhang nahe. Als Modell für die Anpassung wurde eine lineare Funktion verwendet:

$$f(x) = \alpha \cdot x^2 + \beta \cdot x + \gamma \quad (4.2)$$

Für die Kurvenanpassung wurde gnuplot verwendet, das die Parameter α , β und γ variiert, bis die Summe der gewichteten Residuenquadrate minimiert ist. Daraus gingen die Parameter der Tabelle 4.4 mit einem Bestimmtheitsmaß von $r^2 = 100.7\%$ hervor. Der über 100% liegende

Wert ist durch eine geringfügige Überschätzung der Simulationszeit für eine hohe Anzahl von Aktivitätspunkten begründet.

In Abbildung 4.2 ist die Simulationsdauer eines Zerfalls gegenüber der Anzahl der Aktivitätspunkte dargestellt. Auf Basis der erhobenen Daten und der angepassten Funktion lässt sich keine Empfehlung für die Anzahl der Aktivitätspunkte geben, außer dass sie möglichst gering gehalten werden sollte.

Tabelle 4.3: Ergebnisse der Simulationen mit konstanter Voxelzahl und zunehmender Anzahl von Aktivitätspunkten. Der angegebene Abstand liegt zwischen den einzelnen Aktivitätspunkten.

Voxelanzahl	Punktanzahl	Abstand (cm)	Rechenzeit (s)	Simulationszeit pro Primary (s)
216000	1448	10	$6.04 \cdot 10^1$	$3.02 \cdot 10^{-4}$
216000	2710	8	$6.33 \cdot 10^1$	$3.17 \cdot 10^{-4}$
216000	22660	4	$6.58 \cdot 10^1$	$3.29 \cdot 10^{-4}$
216000	181240	2	$8.04 \cdot 10^1$	$4.02 \cdot 10^{-4}$
216000	1449920	1	$2.76 \cdot 10^2$	$1.38 \cdot 10^{-3}$
216000	11598720	0.5	$2.20 \cdot 10^3$	$1.10 \cdot 10^{-2}$
216000	110592000	0.25	$2.51 \cdot 10^3^*$	$1.26 \cdot 10^{-1}$

* Diese Simulation wurde nur mit einem Zehntel der primaries durchgeführt, um die Gesamtzeit gering zu halten.

Tabelle 4.4: Anpassung einer quadratischen Funktion an den Zusammenhang: Rechenzeit-Aktivitätspunktdichte. Das Bestimmtheitsmaß r^2 beträgt 101 %.

Parameter	Wert	Standardunsicherheit
α	$3.74 \cdot 10^{-18} \text{ s}$	$7 \cdot 10^{-20} \text{ s}$
β	$7.24 \cdot 10^{-10} \text{ s}$	$8 \cdot 10^{-12} \text{ s}$
γ	$2.6 \cdot 10^{-4} \text{ s}$	$4 \cdot 10^{-5} \text{ s}$

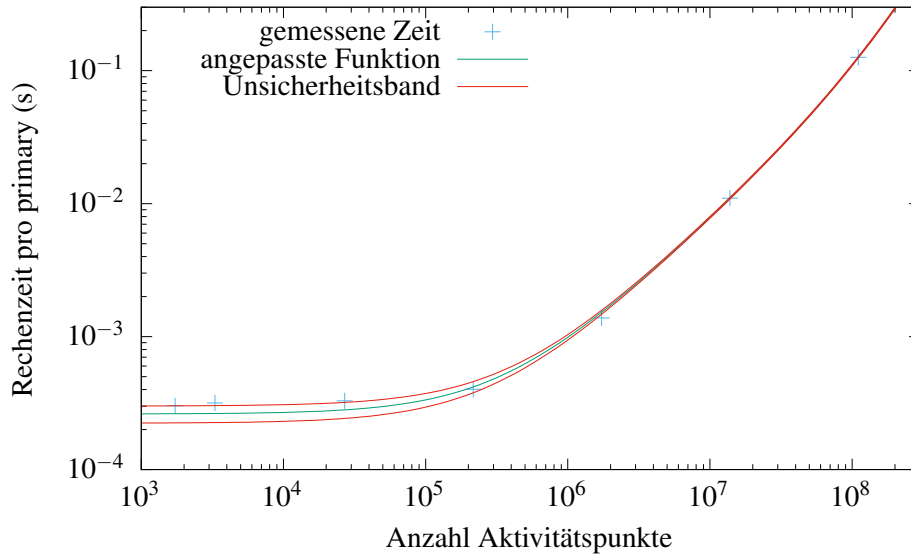


Abbildung 4.2: Abhängigkeit der Simulationszeit von der Anzahl der Punkte der Aktivitäten. Die Simulationszeit für einen primary steigt linear mit der Anzahl der Punkte. Es sind keine Unsicherheitsbalken für die Messwerte eingezeichnet, da die Anzahl der Punkte exakt vorgegeben wurde und die Auflösung der Zeitmessung des PCs ungefähr ein Tausendstel des Messwertes beträgt und damit vernachlässigt werden kann [33].

Erst in einer kombinierten Darstellung für die Abhängigkeit der Simulationsdauer von der Voxellanzahl und der Anzahl der Aktivitätspunkte (siehe Abbildung 4.3) lässt sich eine Empfehlung für die Anzahl der Punkte und Voxel liefern. Der Verlauf der Messwerte ergibt einen Schnittpunkt, sodass für geringere Anzahlen von Voxel und Aktivitätspunkten die Anzahl der Voxel die Simulationszeit dominiert und für höhere Anzahlen von Voxel und Aktivitätspunkten die Anzahl der Aktivitätspunkten die Simulationszeit dominiert. Der Einfluss der Aktivitätspunkte überwiegt für hohe Anzahlen von Voxel und Aktivitätspunkten über zwei Größenordnungen den Einfluss der Voxel.

Der Schnittpunkt ist in Abbildung 4.4 genauer dargestellt und liegt etwa bei einer Simulationszeit von $3.939 \cdot 10^{-4}$ s und 182 500 Voxel bzw. Aktivitätspunkten. Diese Anzahl von Voxel entspricht für die genutzte Geometrie einer Auflösung von 2.12 cm, während diese Anzahl an Aktivitätspunkte etwa einer Auflösung von 2.02 cm entspricht.

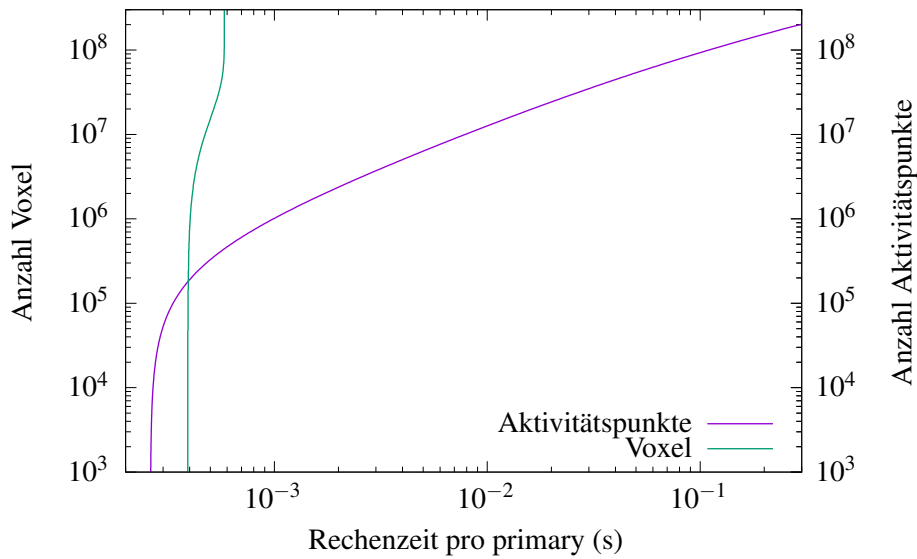


Abbildung 4.3: Kombinierte Darstellung der Ergebnisse zur Abhängigkeit der Simulationszeit von der Anzahl der und der Aktivitätspunkte. Simulationszeit auf der x-Achse, Anzahl der Voxel auf der linken y-Achse, Anzahl der Aktivitätspunkte auf der rechten y-Achse. Die dargestellten Kurven entsprechen den in den Abbildungen 4.2 und 4.1 grün dargestellten Kurven.

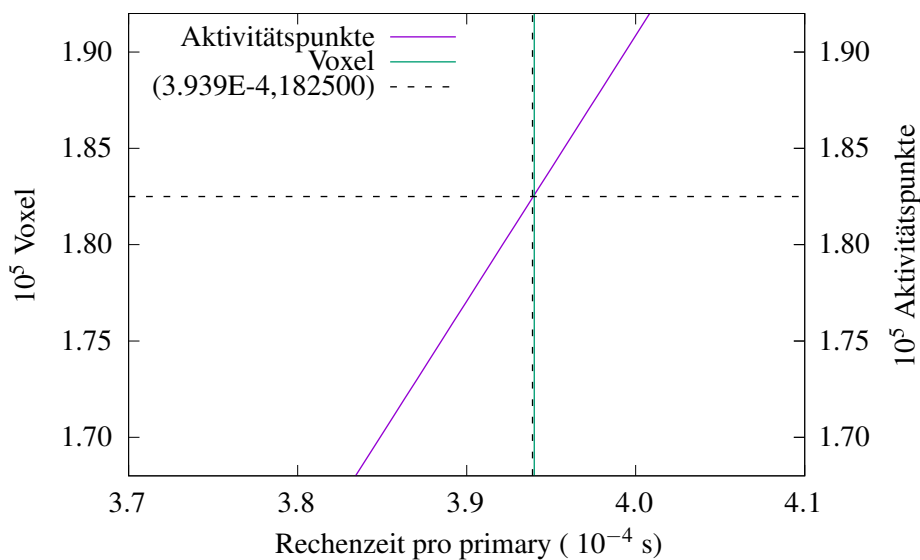


Abbildung 4.4: Zoom auf den Schnittpunkt aus Abbildung 4.3 zur klareren Darstellung. Die Achsen sind hier linear skaliert.

Für die Simulation der Schnittelemente lässt sich daraus schließen, dass, falls die Geometrie genauer aufgelöst werden soll, dies nur dann sinnvoll ist, wenn die Anzahl der Quellen nicht in gleichem Maße gesteigert wird. Dies könnte zum Beispiel dadurch erreicht werden, dass ein Aktivitätspunkt nicht die Mittelung für einen Voxel darstellt, sondern für 8 oder sogar 27 Voxel. Dabei könnte es allerdings dazu kommen, dass ein solches Cluster von 8 bzw. 27 Voxeln zum Teil aus Schnittelement-Material und zum Teil aus Luft bestehen könnte, wodurch die Zerfälle auch in der Luft simuliert werden könnten. Für diese Zerfälle würde die Abschirmwirkung der Schnittelemente selbst vernachlässigt. Alternativ könnten die Aktivitätsdaten für die Cluster, die zum Teil aus Luft bestehen auf Null gesetzt werden, wodurch die Gesamtaktivität der Schnittelemente unterschätzt würde. Dafür wäre zudem eine Überprüfung der Materialinformationen für jeden einzelnen Aktivitätspunkt und das durch ihn repräsentierte Voxelcluster nötig, was wiederum eine erhöhte Rechenzeit im Vorlauf der Simulation bedeuten würde. Welcher dieser Wege im allgemeinen geringere Abweichungen erwarten lässt, muss noch untersucht werden.

5. Interpolation von Aktivitätsverteilungen

Als Eingangsdaten für die spätere FLUKA Simulation stehen diskrete Aktivierungsdaten zur Verfügung. Diese Daten werden zuvor seitens der Kraftwerksbetreiber durch Simulationen aus den im Reaktor gemessenen Neutronenflüssen simuliert. Die Daten werden allerdings, wie in Abbildung 3.4 zu sehen ist, nicht genau an den Punkten vorhanden sein, die für die FLUKA-Simulation und das Voxel-Raster benötigt werden. Aus diesem Grund muss vor der Simulation eine Interpolation der Daten durchgeführt werden.

5.1 Idee der Interpolation

Bei Interpolationen werden aus gegebenen Datenpunkten, auch Stützstellen genannt, Funktionswerte an Zwischenstellen bestimmt. Für diese Arbeit wurde ein Algorithmus zur linearen Interpolation in drei Dimensionen entwickelt und implementiert. Ausgehend vom 1D Problem soll die Berechnung in 3D erklärt werden. Dabei werden die Koordinaten im Raum mit x, y und z benannt, während der Funktionswert immer mit f bezeichnet wird.

In einer Dimension liegt der gesuchte Funktionswert $f(x_{\vec{P}}) = f_{\vec{P}}$ an der Stelle $x_{\vec{P}}$ wie in Abbildung 5.1 zwischen zwei bekannten Punkten $(x_{\vec{A}}, f(x_{\vec{A}}) = f_{\vec{A}})$ und $(x_{\vec{B}}, f(x_{\vec{B}}) = f_{\vec{B}})$. Dieser lässt sich durch Lineare Interpolation nach dem Newton-Verfahren durch Gleichung 5.1 bestimmen [34]:

$$f(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \cdot (x - x_0) + f(x_0) \quad (5.1)$$

Die Gerade zwischen den Punkten A und B ist als Vektorgleichung durch

$$\vec{X} = \alpha \cdot \vec{AB} + \vec{A} \quad (5.2)$$

gegeben. Dabei sind

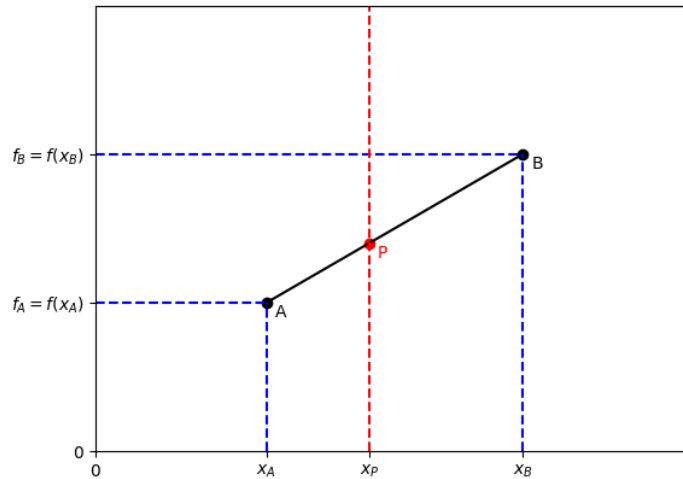


Abbildung 5.1: Visualisierung des 1D Problems. Die Punkte A und B sind bekannt, für P mit $x_{\vec{A}} \leq x_{\vec{P}} \leq x_{\vec{B}}$ ist der Funktionswert $f_{\vec{P}}$ unbekannt.

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} x_{\vec{X}} \\ f_{\vec{X}} \end{pmatrix} \quad \vec{A} = \begin{pmatrix} x_{\vec{A}} \\ f_{\vec{A}} \end{pmatrix} \quad \vec{B} = \begin{pmatrix} x_{\vec{B}} \\ f_{\vec{B}} \end{pmatrix} \quad \vec{AB} = \begin{pmatrix} x_{\vec{AB}} \\ f_{\vec{AB}} \end{pmatrix} = \vec{B} - \vec{A}$$

und $0 \leq \alpha \leq 1$. Durch eine geeignete Wahl von α gilt folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} x_A + \alpha \cdot x_{\vec{AB}} &= x_P \\ f_A + \alpha \cdot f_{\vec{AB}} &= f_P \end{aligned} \tag{5.3}$$

Umgestellt ergibt dies

$$\begin{aligned} \alpha \cdot x_{\vec{AB}} &= x_P - x_A \\ \alpha \cdot f_{\vec{AB}} - f_{\vec{P}} &= -f_A \end{aligned}$$

und lässt sich auch durch eine Matrixmultiplikation ausdrücken (Gleichung 5.4). Das linksseitige Multiplizieren mit dem Inversen M_1^{-1} von M_1 aus Gleichung 5.4 ergibt Gleichung 5.5, durch die der Funktionswert $f_{\vec{P}}$ bestimmbar ist.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} x_{\vec{AB}} & 0 \\ f_{\vec{AB}} & -1 \end{bmatrix}}_{=M_1} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ f_{\vec{P}} \end{pmatrix}}_{=U_1} = \underbrace{\begin{pmatrix} x_{\vec{P}} - x_{\vec{A}} \\ -f_{\vec{A}} \end{pmatrix}}_{V_1} \tag{5.4}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ f_{\vec{P}} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} x_{\vec{A}\vec{B}} & 0 \\ f_{\vec{A}\vec{B}} & -1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} x_{\vec{P}} - x_{\vec{A}} \\ -f_{\vec{A}} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Dieser einfache 1D Fall lässt sich auf zwei beziehungsweise drei Dimensionen erweitern, indem ein beziehungsweise zwei weitere bekannte Punkte hinzugefügt werden.

Im ersten Schritt beim Übergang zu zwei Dimensionen bilden die zwei bereits verwendeten Punkte A und B mit einem dritten Punkte C ein Dreieck, innerhalb dessen der Punkt P liegt, dessen Funktionswert zu ermitteln ist.

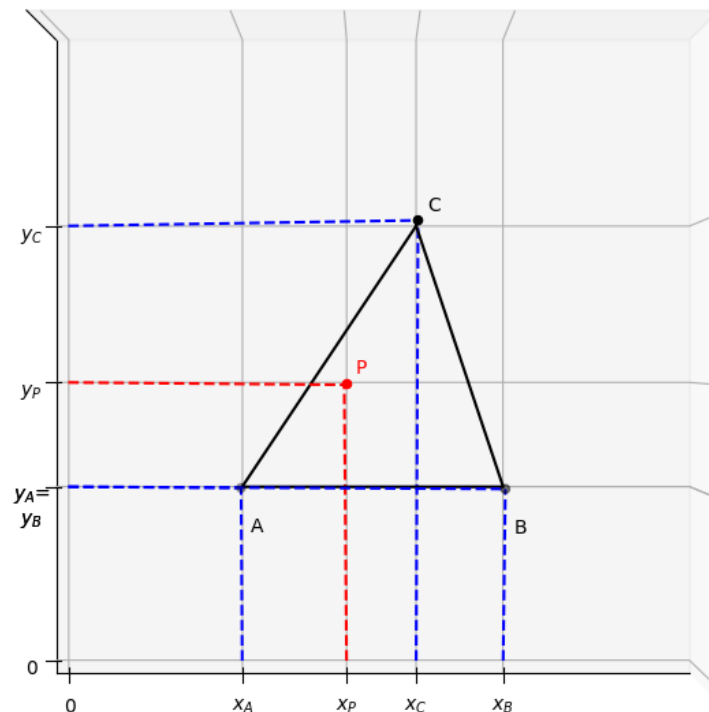


Abbildung 5.2: Visualisierung des 2D Problems. Die Punkte A , B und C sind bekannt, für den Punkt P , der im Dreieck ABC liegt, ist der Funktionswert f_P unbekannt. Die dritte Dimension des Funktionswertes f ist in dieser Darstellung nicht zu sehen.

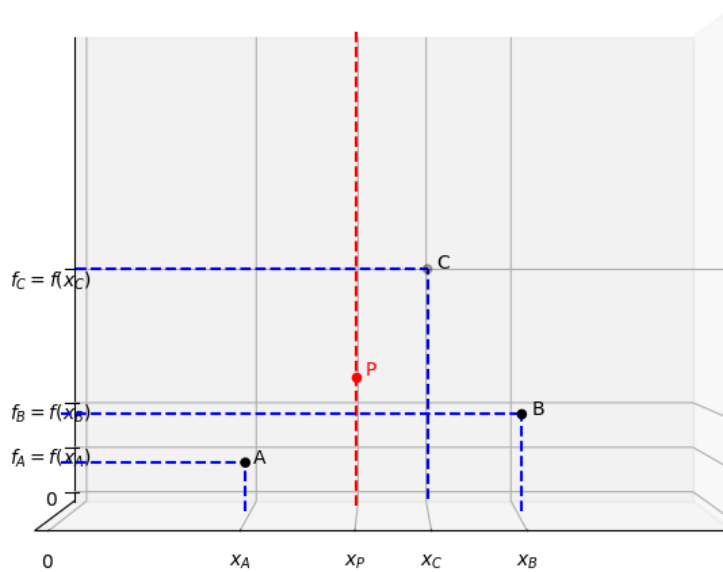


Abbildung 5.3: Projektion der Abbildung 5.2 in die xf -Ebene. Es sind die Funktionswerte an den Punkten A , B und C zu erkennen, die eine schiefe Ebene im 3-dimensionalen Raum der Koordinaten x , y und f aufspannen. Die Abszisse gibt den x -Wert, die Ordinatenachse gibt in dieser Darstellung den Funktionswert, der den Punkten zugeordnet wird, an.

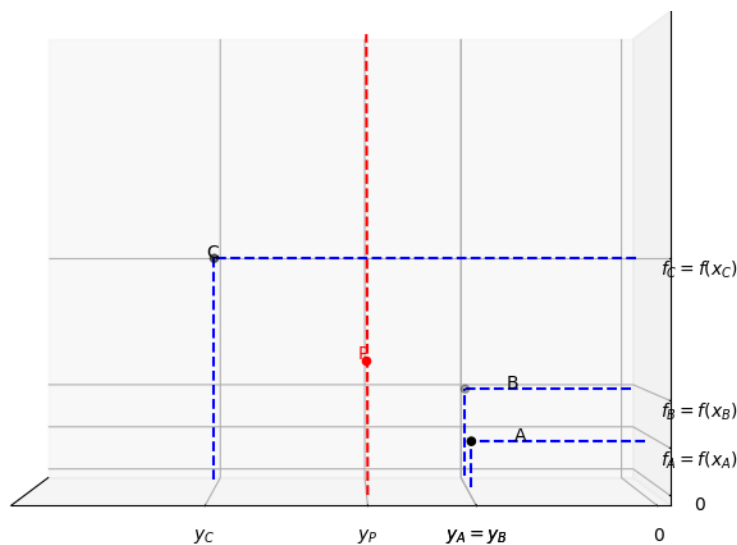


Abbildung 5.4: Projektion der Abbildung 5.2 in die yf -Ebene. Es sind die Funktionswerte an den Punkten A , B und C zu erkennen, die eine schiefe Ebene im 3-dimensionalen Raum der Koordinaten x , y und f aufspannen. Die Abszisse gibt den y -Wert, Die Ordinatenachse gibt in dieser Darstellung den Funktionswert, der den Punkten zugeordnet wird, an.

Im Gleichungssystem ergibt sich durch die Erweiterung auf zwei Dimensionen eine zweite Zeile für die y -Koordinate und durch den neuen Punkt C eine dritte Spalte für die Komponenten des Richtungsvektors \vec{AC} auf der linken Seite.

$$\begin{aligned}
x_{\bar{A}} + \alpha \cdot x_{\bar{A}B} + \beta \cdot x_{\bar{A}C} &= x_{\bar{P}} \\
y_{\bar{A}} + \alpha \cdot y_{\bar{A}B} + \beta \cdot y_{\bar{A}C} &= y_{\bar{P}} \\
f_{\bar{A}} + \alpha \cdot f_{\bar{A}B} + \beta \cdot f_{\bar{A}C} &= f_{\bar{P}}
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Wird das Gleichungssystem 5.6 analog zum 1D Fall umgeformt und in eine Matrixmultiplikation umgeschrieben, ergibt sich:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} x_{\bar{A}B} & x_{\bar{A}C} & 0 \\ y_{\bar{A}B} & y_{\bar{A}C} & 0 \\ f_{\bar{A}B} & f_{\bar{A}C} & -1 \end{bmatrix}}_{=M_2} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ f_{\bar{P}} \end{pmatrix}}_{=U_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} x_{\bar{P}} - x_{\bar{A}} \\ y_{\bar{P}} - y_{\bar{A}} \\ -f_{\bar{A}} \end{pmatrix}}_{V_2}$$

Durch linksseitige Multiplikation mit M_2^{-1} ergibt sich Gleichung 5.7, mit der der Funktionswert $f_{\bar{P}}$ nun auch in zwei Dimensionen bestimmt werden kann.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ f_{\bar{P}} \end{pmatrix}}_{=U_2} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_{\bar{A}B} & x_{\bar{A}C} & 0 \\ y_{\bar{A}B} & y_{\bar{A}C} & 0 \\ f_{\bar{A}B} & f_{\bar{A}C} & -1 \end{bmatrix}^{-1}}_{=M_2^{-1}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} x_{\bar{P}} - x_{\bar{A}} \\ y_{\bar{P}} - y_{\bar{A}} \\ -f_{\bar{A}} \end{pmatrix}}_{V_2} \tag{5.7}$$

Der Übergang in den dreidimensionalen Fall verläuft vollkommen analog zum 2D Fall. Es wird eine dritte Koordinate z und damit auch ein vierter Punkte \bar{D} eingeführt. Mit diesem vierten Punkt bildet das zuvor aufgespannte Dreieck ein Tetraeder. Es ist im Vergleich zum Gleichungssystem 5.6 eine vierte Zeile für die z -Komponente sowie eine vierte Spalte für die Komponenten des Richtungsvektors $\vec{A\bar{D}}$ hinzuzufügen.

$$\begin{aligned}
x_{\bar{A}} + \alpha \cdot x_{\bar{A}B} + \beta \cdot x_{\bar{A}C} + \gamma \cdot x_{\bar{A}D} &= x_{\bar{P}} \\
y_{\bar{A}} + \alpha \cdot y_{\bar{A}B} + \beta \cdot y_{\bar{A}C} + \gamma \cdot y_{\bar{A}D} &= y_{\bar{P}} \\
z_{\bar{A}} + \alpha \cdot z_{\bar{A}B} + \beta \cdot z_{\bar{A}C} + \gamma \cdot z_{\bar{A}D} &= z_{\bar{P}} \\
f_{\bar{A}} + \alpha \cdot f_{\bar{A}B} + \beta \cdot f_{\bar{A}C} + \gamma \cdot f_{\bar{A}D} &= f_{\bar{P}}
\end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} x_{\bar{A}B} & x_{\bar{A}C} & x_{\bar{A}D} & 0 \\ y_{\bar{A}B} & y_{\bar{A}C} & y_{\bar{A}D} & 0 \\ z_{\bar{A}B} & z_{\bar{A}C} & z_{\bar{A}D} & 0 \\ f_{\bar{A}B} & f_{\bar{A}C} & f_{\bar{A}D} & -1 \end{bmatrix}}_{=M_3} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ f_{\bar{P}} \end{pmatrix}}_{=U_3} = \underbrace{\begin{pmatrix} x_{\bar{P}} - x_{\bar{A}} \\ y_{\bar{P}} - y_{\bar{A}} \\ z_{\bar{P}} - z_{\bar{A}} \\ -f_{\bar{A}} \end{pmatrix}}_{V_3}$$

Nach erneutem Umstellen, Umschreiben in eine Matrixmultiplikation und der linksseitigen Multiplikation mit M_3^{-1} ergibt sich diejenige Gleichung 5.9, die für den Interpolationsalgorithmus genutzt wird, um mit ihr den Wert von $f_{\vec{P}}$ zu bestimmen.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ f_{\vec{P}} \end{pmatrix}}_{=U_3} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_{\vec{A}\vec{B}} & x_{\vec{A}\vec{C}} & x_{\vec{A}\vec{D}} & 0 \\ y_{\vec{A}\vec{B}} & y_{\vec{A}\vec{C}} & y_{\vec{A}\vec{D}} & 0 \\ z_{\vec{A}\vec{B}} & z_{\vec{A}\vec{C}} & z_{\vec{A}\vec{D}} & 0 \\ f_{\vec{A}\vec{B}} & f_{\vec{A}\vec{C}} & f_{\vec{A}\vec{D}} & -1 \end{bmatrix}^{-1}}_{=M_3^{-1}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} x_{\vec{P}} - x_{\vec{A}} \\ y_{\vec{P}} - y_{\vec{A}} \\ z_{\vec{P}} - z_{\vec{A}} \\ -f_{\vec{A}} \end{pmatrix}}_{V_3} \quad (5.9)$$

5.2 Implementierung

Um die Gleichung 5.9 in einem Algorithmus anwenden zu können, müssen zuvor aus der gesamten Datengrundlage von bekannten Punkten diejenigen vier Punkte eines Tetraeders um den interessanten Punkt P gefunden werden, die dann in die Gleichung eingesetzt werden können. Damit die Interpolation möglichst genau durchgeführt wird, müssen die Punkte einen möglichst geringen Abstand vom Punkt P haben.

Die Funktionen des Algorithmus werden in den folgenden Abschnitten beschrieben. Die Implementierung wurde in der Programmiersprache Python (Version 3.9.16) durchgeführt. Es wurden Funktionen aus den Bibliotheken *time*, *math*, *os*, *itertools*, *numpy*[35], *matplotlib*[36] und *scipy*[37] verwendet. Wie genau sie genutzt werden, wird in dem entsprechenden Abschnitten der Funktionen erklärt. Sowohl die Punkte der Datengrundlage als auch die Koordinaten der zu interpolierenden Punkte werden durch numpy-Arrays repräsentiert.

Der grundlegende Ablauf des Interpolationsprogramms ist:

- 1 Auswahl des zu interpolierenden Punkts P
- 2 Raumbereich R um P finden, der mindestens vier Punkte R_i der Datengrundlage enthält
- 3 alle möglichen Kombinationen von jeweils vier R_i in R speichern
- 4 für jede Punkt Kombination überprüfen, ob es sich um ein Tetraeder handelt
- 5 falls ja, überprüfen, ob der Punkt innerhalb des Tetraeders liegt
- 6 falls ja, überprüfen, ob das Volumen des Tetraeders kleiner als das des zuletzt gefundenen Tetraeders ist
- 7 Berechnen des Funktionswertes des Punktes P

Schritt 1: Auswahl eines Punktes

Die Auswahl des Punktes, für den der Funktionswert bestimmt werden soll, wird durch eine einfache Schleife über das Array der zu interpolierenden Punkte ausgeführt.

Schritt 2: Raumbereich definieren

Im zweiten Schritt wird der Raumbereich R bestimmt. In diesem sollen nur diejenigen Punkte aus der Datengrundlage liegen, die P am nächsten liegen. Anstatt diese allerdings über den kürzesten Abstand zu bestimmen, wird ein Würfel mit einer Kantenlänge $2 \cdot r$ und dem Punkt P als Mittelpunkt aufgespannt und die Liste der Datengrundlage durchlaufen, um für jeden Punkt zu überprüfen, ob dieser im Würfel liegt. Liegen weniger als 6 Punkte im Raumbereich oder konnte in den folgenden Schritten kein passendes Tetraeder für die Interpolation gefunden werden, wird r um einen Faktor¹ erhöht und die Suche neu gestartet.

Durch eine weitere Abfrage des aktuellen Wertes von r wird der Algorithmus für den aktuellen Punkt gestoppt, wenn ein festgesetzter Wert² für die Entfernung vom zu interpolierenden Punkt überschritten wird.

Liegen zu einem Zeitpunkt mehr Datenpunkte in R als durch die Variable *maxpoints* gefordert, so wird die Suche für den aktuellen Punkt ebenfalls gestoppt.

Schritt 3: Kombinationen der Punkte erzeugen

Im dritten Schritt werden durch die *itertools*-Funktion *combinations* alle möglichen Kombinationen der Punkte R_i ohne Wiederholung einzelner Punkte erzeugt, die vier Punkte enthalten. Die Anzahl der zu bildenden Tetraeder lässt sich gemäß des Binomialkoeffizienten

$$N_{\text{Tetraeder}} = \binom{|R|}{4} = \frac{|R|!}{4!(|R| - 4)!} \quad (5.10)$$

bestimmen. Durch die Eigenschaften der zugrundeliegenden Fakultät steigt die Anzahl der Tetraeder enorm mit der Anzahl der im Raumbereich enthaltenen Punkte R_i . Da die folgenden Schritte für jedes Tetraeder durchgeführt werden müssen, sollte die Anzahl der Punkte im Raumbereich möglichst gering gehalten werden, was durch eine entsprechende Wahl der Kantenlänge r des Würfels in Schritt 2 gesteuert werden kann.

Schritt 4: Überprüfung, ob eine Kombination ein Tetraeder ist

Aus dieser Liste an Vier-Punkt-Kombinationen muss für jeden Eintrag T überprüft werden, ob die enthaltenen Punkte ein Tetraeder aufspannen.

Dazu wird die Tatsache ausgenutzt, dass ein Tetraeder aus 4 Punkten (A, B, C, D) besteht, von denen drei beliebig ausgewählt werden können und eine Ebene ergeben, in der der vierte Punkt allerdings nicht enthalten sein darf.

¹Der Faktor ist im Code als Variable *r_incr* hinterlegt.

²Im Code ist dieser Wert in der Variable *cutoffdist* gespeichert.

Um diese Eigenschaft zu überprüfen, wird die Normalenform für die durch A , B und C aufgespannte Ebene genutzt.

Ein Punkt X ist Teil der durch A , B und C aufgespannten Ebene, wenn die Gleichung

$$\left(\vec{X} - \vec{A}\right) \cdot \vec{n} = 0 \tag{5.11}$$

mit

$$\vec{n} = \vec{AB} \times \vec{AC}$$

erfüllt wird. Umgekehrt gilt, dass, wenn ein Punkt diese Gleichung 5.11 nicht erfüllt, er nicht in der Ebene liegt.

Mithilfe der entsprechenden *numpy*-Funktionen wird das Kreuz- beziehungsweise das Skalarprodukt ausgeführt und das Ergebnis anschließend darauf überprüft, ob es zwischen -10^{-5} und 10^{-5} liegt.

Es wird keine Gleichheit mit 0 gefordert, da durch die Darstellungsfehler von Gleitkommazahlen auch Zahlen, die nicht als exakt 0 ausgegeben werden, eigentlich den Wert 0 besitzen könnten. In diesen Fällen würde Gleichung 5.11 fälschlich als „nicht erfüllt“ und 4 Punkte, die eine Ebene bilden, als Tetraeder angesehen würden.

Wenn das Ergebnis des Skalarprodukts in Gleichung 5.11 also kleiner als -10^{-5} oder größer als 10^{-5} ist, handelt es sich bei der Punktombination um ein Tetraeder, mit dem weitergearbeitet wird.

Schritt 5: Lage des Punktes P relativ zum Tetraeder

Für das bestimmte Tetraeder muss im Anschluss überprüft werden, ob sich der Punkt P im Inneren des Tetraeders befindet und sich mit diesem Tetraeder somit eine Interpolation durchführen lässt.

Um diese Bedingung zu prüfen, werden die Funktionen *Tetrahedron* und *pointInside* genutzt [38]. *Tetrahedron* erzeugt ein neues Koordinatensystem relativ zum Punkt A und den Richtungsvektoren $A\vec{B}'$, $A\vec{C}'$ und $A\vec{D}'$ als neue Basisvektoren. *Tetrahedron* gibt die Basiswechsellmatrix für diese Basis zurück.

Die Funktion *pointInside* überführt den Punkt P in diese neue Basis und prüft anhand der neuen Einträge P'_i , ob der Punkt innerhalb des Tetraeders oder außerhalb von diesem liegt. Damit der Punkt innerhalb des Tetraeders liegt, müssen die Einträge zwischen 0 und 1 liegen. Die Summe aller Einträge darf allerdings ebenfalls einen Wert von 1 nicht überschreiten. Wenn für alle $P'_i = 1$ gelten würde, würde die erste Bedingung zwar erfüllt werden, aber der Punkt P läge auf dem A' gegenüberliegenden Punkt des Parallelepipeds, das durch die Richtungsvektoren $A\vec{B}'$, $A\vec{C}'$ und $A\vec{D}'$ aufgespannt wird und damit nicht im Tetraeder.

Schritt 6: Volumen eines Tetraeders

Je näher die Punkte am gesuchten Punkt liegen, desto genauer ist die Interpolation. Als Maß dafür wird das Volumen des aufgespannten allgemeinen Tetraeders genutzt.

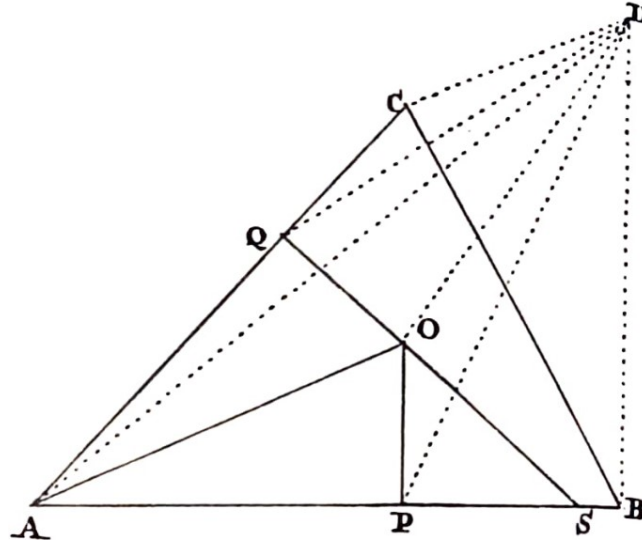


Abbildung 5.5: Ein allgemeines Tetraeder mit den Punkten A , B , C und D . Die Bezeichnungen der Strecken sind $AB = a$, $AC = b$, $BC = c$, $AD = d$, $BD = e$ und $CD = f$. Die Punkte O , P , Q und S werden hier nicht benötigt [39, 40]

Das Volumen des allgemeinen Tetraeders lässt sich nach Euler [39, 40] mit den Bezeichnungen wie in Abbildung 5.5 mit folgender Gleichung bestimmen.

$$V = \frac{1}{12} \cdot \sqrt{c^2 \cdot d^2 \cdot \alpha + b^2 \cdot e^2 \cdot \beta + a^2 \cdot f^2 \cdot \gamma - \delta} \quad (5.12)$$

wobei

$$\begin{aligned} \alpha &= a^2 + b^2 + e^2 + f^2 - c^2 - d^2 \\ \beta &= a^2 + c^2 + d^2 + f^2 - b^2 - e^2 \\ \gamma &= b^2 + c^2 + d^2 + e^2 - a^2 - f^2 \\ \delta &= a^2 \cdot b^2 \cdot c^2 + c^2 \cdot e^2 \cdot f^2 + b^2 \cdot d^2 \cdot f^2 + a^2 \cdot d^2 \cdot e^2 \end{aligned}$$

gilt. Mithilfe einer weiteren Abfrage kann die Suche der Tetraeder gestoppt werden, wenn ein Tetraeder mit einem für ausreichend gehaltenen Volumen gefunden wurde.³

Schritt 7: Bestimmung der Aktivität

Die Gleichung 5.9 zur Bestimmung der Aktivität ist mithilfe verschiedener *numpy*-Funktionen zu Manipulation der *numpy*-Arrays implementiert. Der Rückgabewert ist der Punkt P mit dem interpolierten Funktionswert f_P als viertem Eintrag.

³Dieses Volumen wird im Code in der Variable „cutoffvolume“ gespeichert.

Liegt ein Punkt außerhalb des Bereichs der bekannten Datenpunkten, versucht der Algorithmus die obigen Schritte der Interpolation durchzuführen, wird aber an einem vorgegebenen Wert für r abgebrochen. Es wird dann eine Fehlermeldung auf der Konsole ausgegeben, welcher Punkt übersprungen wurde, und für den entsprechenden Punkt `numpy.nan` als „interpolierter“ Wert in die Ausgabedatei geschrieben.

Sind für alle Punkte die Funktionswerte interpoliert worden, werden die Punkte in einer Datei gespeichert, die vom im Abschnitt 3.2.5 beschriebenen Programm `VoxelActivity` verarbeitet werden kann.

5.3 Eigenschaften der Interpolation

Der so geschaffene Algorithmus musste anschließend auf seine Eigenschaften untersucht werden.

Dabei wurde als erstes untersucht, wie genau die Ergebnisse der Interpolation sind. Dazu wurden in einem Raumbereich von $(-20,140;-20,220;-20,100)$ 500 bis 5000 Punkte erzeugt und diesen gemäß der Funktion

$$f(x, y, z) = 0.1x - 0.02y + 0.8z + 3 \quad (5.13)$$

Werte zugeordnet. In den Abbildungen 5.6 und 5.7 sind zwei solche Aktivitätsverteilungen dargestellt.

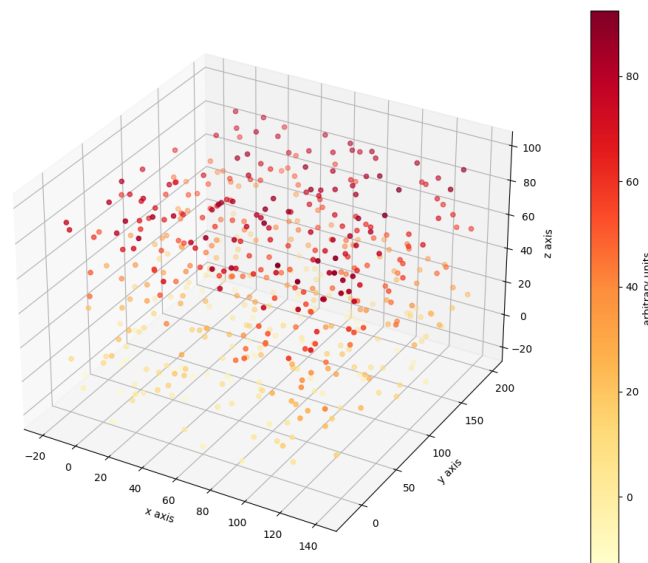


Abbildung 5.6: Eine beispielhafte Datengrundlage mit 500 Punkten.

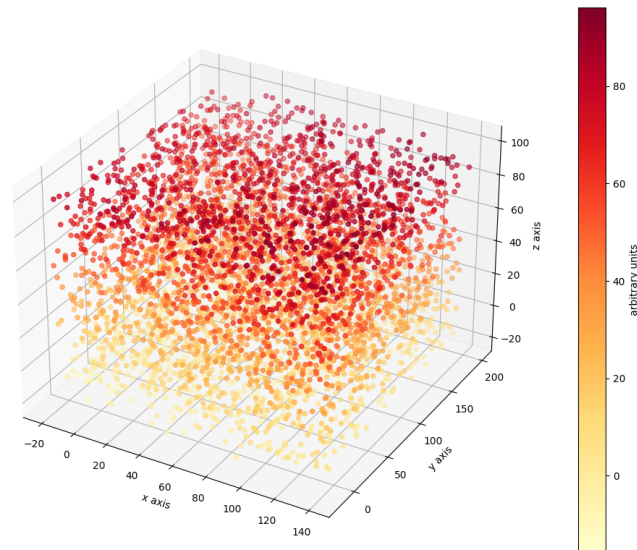


Abbildung 5.7: Eine beispielhafte Datengrundlage mit 5000 Punkten.

Diese Daten wurden anschließend genutzt, um sie als Basis für Interpolationen auf einem gleichmäßigen Raster von 11600 bis 181.240 Voxel im Bereich $(0,120; 0,180; 0,80)$ durchzuführen, wobei jedem dieser Voxel dabei ein Punkt im Inneren zugeordnet wird. Dass der Raumbereich der gesuchten Punkte kleiner als der mit bekannten Daten ist, soll sicherstellen, dass für alle gesuchten Punkte Daten in der Umgebung vorhanden sind und die Interpolation durchgeführt werden kann. Um die Genauigkeit der Interpolation zu bestimmen, wurden die Ergebnisse mit den echten Funktionswerten an den Punkten verglichen. Es wurden die folgenden Größen untersucht:

- die durchschnittliche positive Abweichung, der Durchschnitt aller Werte, für die die Interpolation größer oder gleich dem Funktionswert ist: avgPos
- die durchschnittliche negative Abweichung, der Durchschnitt aller Werte, für die die Interpolation kleiner dem Funktionswert ist: avgNeg
- die durchschnittliche Abweichung insgesamt, der Durchschnitt der Beträge für alle Daten; avgRes
- die maximale Abweichung nach oben; posRes
- die maximale Abweichung nach unten; negRes

Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle 5.1 aufgeführt.⁴

⁴Bei der Interpolation waren folgende Einstellungen zu Beginn aktiv: *cutoffdist*=50, *cutoffvolume*=100, *r_incr*=1.1, *r*=4.

Tabelle 5.1: Ergebnisse der Untersuchung der Residuen der Interpolation. „Daten“ bezeichnet die Anzahl der gegebenen Aktivitätspunkte als Basis für die Interpolation. „Interpolationspunkte“ bezeichnet die Anzahl der Punkte, die mit der Interpolation bestimmt werden müssen. Die Darstellung der Zahlen ist der Übersicht halber einheitlich gestaltet.

Daten	Zielpunkte	avgPos (%)	avgNeg (%)	avgRes (%)	posRes (%)	negRes (%)
500	11600	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$-2.8 \cdot 10^{-5}$	$4.1 \cdot 10^{-5}$	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$-9.1 \cdot 10^{-2}$
1000	11600	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$-3.5 \cdot 10^{-5}$	$5.7 \cdot 10^{-5}$	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$-2.6 \cdot 10^{-2}$
2500	11600	$2.8 \cdot 10^{-5}$	$-2.5 \cdot 10^{-5}$	$5.3 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$-1.4 \cdot 10^{-2}$
5000	11600	$8.1 \cdot 10^{-5}$	$-2.5 \cdot 10^{-5}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-1}$	$-1.1 \cdot 10^{-2}$
500	22660	$5.3 \cdot 10^{-5}$	$-4.7 \cdot 10^{-5}$	$9.9 \cdot 10^{-5}$	$4.0 \cdot 10^{-2}$	$-3.7 \cdot 10^{-2}$
1000	22660	$6.1 \cdot 10^{-5}$	$-8.0 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$3.0 \cdot 10^{-2}$	$-2.7 \cdot 10^{-2}$
2500	22660	$4.5 \cdot 10^{-5}$	$-5.0 \cdot 10^{-5}$	$9.5 \cdot 10^{-5}$	$3.2 \cdot 10^{-2}$	$-5.3 \cdot 10^{-2}$
5000	22660	$3.7 \cdot 10^{-5}$	$-5.4 \cdot 10^{-5}$	$9.1 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-2}$	$-3.3 \cdot 10^{-2}$
500	181240	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$-4.1 \cdot 10^{-5}$	$7.5 \cdot 10^{-5}$	$1.9 \cdot 10^{-1}$	$-3.5 \cdot 10^{-2}$
1000	181240	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$-4.8 \cdot 10^{-5}$	$6.8 \cdot 10^{-5}$	$4.0 \cdot 10^{-2}$	$-5.0 \cdot 10^{-2}$
2500	181240	$5.0 \cdot 10^{-5}$	$-2.5 \cdot 10^{-5}$	$7.5 \cdot 10^{-5}$	$1.0 \cdot 10^{-1}$	$-5.2 \cdot 10^{-2}$
5000	181240	$3.9 \cdot 10^{-5}$	$-5.3 \cdot 10^{-5}$	$9.2 \cdot 10^{-5}$	$6.8 \cdot 10^{-2}$	$-8.1 \cdot 10^{-2}$

Die Daten zeigen, dass die interpolierten Werte mit einer durchschnittlichen Abweichung in der Größenordnung von 10^{-5} % im Allgemeinen sehr nah an den tatsächlichen Werten liegen. Die maximalen Abweichungen sowohl in positive als auch in negative Richtung sind mit Werten im Bereich von 10^{-2} % ebenfalls sehr gering. Die positiven Abweichungen im Bereich von 10^{-1} % sind als Ausreißer zu betrachten.

Außerdem wurde in einem weiteren Versuch die Laufzeit der Interpolation in Abhängigkeit der gegebenen Punkte untersucht. Dazu wurde genauso verfahren wie im obigen Beispiel, allerdings waren die zu interpolierenden Punkte in einem Volumen von $80 \cdot 80 \cdot 80$ und die Datengrundlage war auf ein Volumen von $100 \cdot 100 \cdot 100$ beschränkt. Die Laufzeiten wurden durch das Modul *tqdm* aufgenommen und sind in der Tabelle 5.2 aufgeführt bzw. in Abbildung 5.8 dargestellt. In dieser zeigt sich ein quadratischer Zusammenhang zwischen der Interpolationsdauer und der Dichte der Punkte, auf Basis derer die Interpolation durchgeführt wird.

Dass die Interpolationsdauer bei einer größeren Datengrundlage steigt, ist in der Suche der richtigen Punkte für die Interpolation begründet. Es liegen dann mehr Punkte im gleichen Volumen, wodurch mehr potentielle Tetraeder im Raumbereich R gebildet werden können und für die die Eigenschaften 4 bis 6 überprüft werden müssen.

Tabelle 5.3: Funktionsparameter für die Anpassung der Funktion 5.14. Das Bestimmtheitsmaß r^2 beträgt 112 %.

Parameter	Wert	Standardabweichung
a	$7.71 \cdot 10^5$	$35 \cdot 10^4$
b	$-4.1 \cdot 10^3$	$1.5 \cdot 10^2$
c	$4.86 \cdot 10^2$	9

Tabelle 5.2: Messwerte zur Interpolationsdauer in Abhängigkeit der Dichte der Eingangsdaten

Dichte der Eingangspunkte	Interpolationsdauer (s)
$9.8 \cdot 10^{-4}$	$4.8 \cdot 10^2$
$2.0 \cdot 10^{-3}$	$4.9 \cdot 10^2$
$4.9 \cdot 10^{-3}$	$4.7 \cdot 10^2$
$9.8 \cdot 10^{-3}$	$5.3 \cdot 10^2$
$2.0 \cdot 10^{-2}$	$7.1 \cdot 10^2$
$3.9 \cdot 10^{-2}$	$1.5 \cdot 10^3$

Da der Verlauf einen quadratischen Zusammenhang nahelegt, wird für die Anpassung ein allgemeines Polynom zweiten Grades verwendet:

$$f(x) = a \cdot x^2 + b \cdot x + c \quad (5.14)$$

Für die Kurvenanpassung wurde gnuplot verwendet, das die Parameter a , b und c variiert, bis die Summe der gewichteten Residuenquadrate minimiert ist. Daraus gingen die Parameter der Tabelle 5.3 mit einem Bestimmtheitsmaß von $r^2 = 112\%$ hervor. Dies bietet einen Grund zum Ablehnen der Anpassung, bei Betrachtung von Abbildung 5.8 wird aber deutlich, dass die Punkte im Unsicherheitsband der Anpassung liegen.

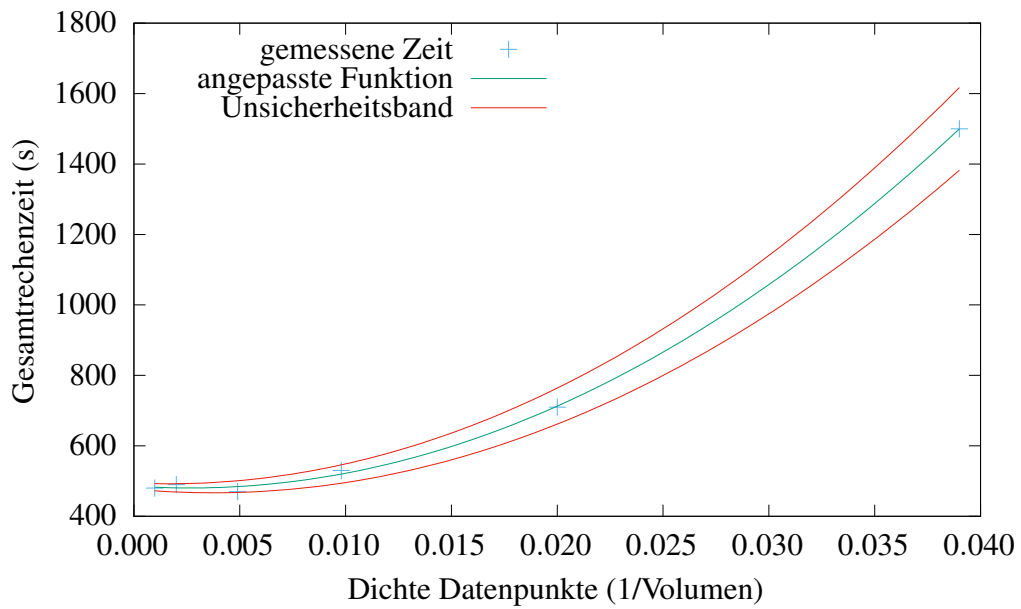


Abbildung 5.8: Dargestellt ist die Interpolationsdauer in Abhängigkeit der durchschnittlichen Dichte von bekannten Punkten im Raum.

6. Vergleich zwischen Simulation und Messung

Um die entwickelten Methoden zur Voxelgeometrie zu überprüfen, wurden reale Messwerte mit den simulierten Messwerten verglichen.

6.1 automess 6150AD6

Für die Messungen wurde ein Dosisleistungsmessgerät des Typs automess 6150AD6 in Kombination mit einer Szintillatorsonde des Typs automess 6150AD-b/E verwendet. Das 6150AD6 wird in der Kombination nur zur Steuerung und Anzeige verwendet, da die einfallende Strahlung nur in der Szintillatorsonde detektiert wird. Die Sonde ist ein zylinderförmiger organischer Oszillator mit einer Höhe und einem Durchmesser von 76 mm und misst die Größe $H^*(10)$ bzw. $\dot{H}^*(10)$. Der geeichte Messbereich liegt zwischen $100 \frac{\text{nSv}}{\text{h}}$ und $100 \frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$.

Der Nenngebrauchsbereich der Sonde liegt bei Photonenenergien von 20 keV bis 7 MeV. Da die Sonde für die Messungen ohne die Schutzhaube aus Aluminium verwendet wurde, liegt die höchstmögliche, durch die Energieabhängigkeit des Ansprechvermögens begründete Abweichung der Messwerte bei 20 % (siehe Abbildung 6.1).

In Abbildung 6.2 ist zu erkennen, dass für die Energie mit dem geringsten Ansprechvermögen (25 keV) die maximale Abweichung der Messwerte, die durch die Kombination aus Energie- und Richtungsabhängigkeit der Sonde vorliegen kann, $\pm 37\%$ beträgt.

Die Sonde besitzt einen apparativen Nulleffekt von $1 \frac{\text{nSv}}{\text{h}}$, der durch die Hintergrundkorrektur berücksichtigt wurde [41, 42].

In der Standardeinstellung wird die aktuelle Ortsdosisleistung angezeigt, allerdings können auch die gesamte eingefallene Dosis oder die gemittelte Ortsdosisleistung seit dem letzten Einschalten des Geräts ausgewählt werden. Bei der Aufnahme der folgenden Messwerte wurde Anzeige die durchschnittliche Ortsdosisleistung seit dem Einschalten genutzt. In dieser Einstellung blinkt die Anzeige solange, bis die statistische Unsicherheit der Messung unter 5 % fällt. Die Messwerte werden auf dem automess 6150AD6 mit 4 Stellen angezeigt. Das bedeutet,

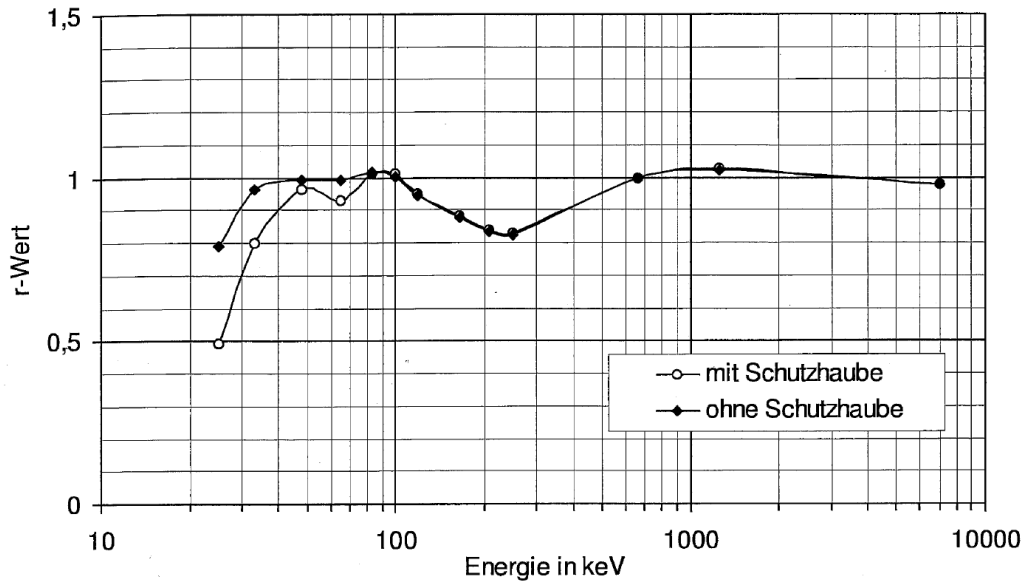


Abbildung 6.1: Die Darstellung zeigt die PTB-bauartgeprüfte Energieabhängigkeit des Ansprechvermögens der verwendeten Szintillatorsonde 6150AD-b/E bezüglich der Größe $\dot{H}^*(10)$. Die Werte sind auf das Ansprechvermögen für ^{137}Cs bei senkrechter Einstrahlung (Vorzugsrichtung) normiert[41].

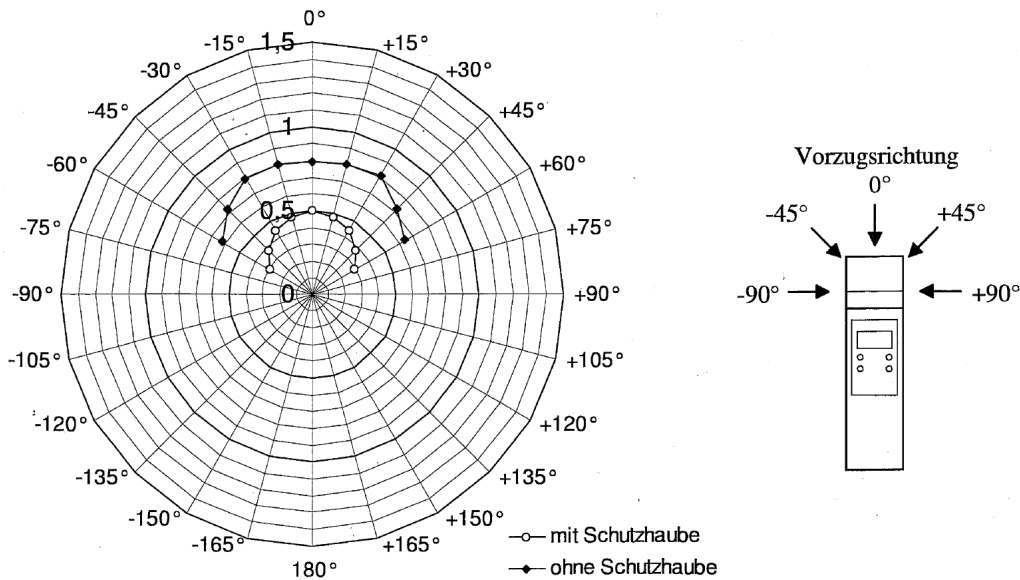


Abbildung 6.2: Die Darstellung zeigt die Richtungsabhängigkeit des Ansprechvermögens der verwendeten Szintillatorsonde 6150AD-b/E bezüglich der Größe $\dot{H}^*(10)$. Die Werte gehören zu einer mittleren Energie von 25 keV und sind auf das Ansprechvermögen für ^{137}Cs bei senkrechter Einstrahlung (Vorzugsrichtung) normiert[41].

dass die Anzeige bei Messwerten zwischen $1 \frac{\text{nSv}}{\text{h}}$ und $9.999 \frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ auf $1 \frac{\text{nSv}}{\text{h}}$ genau ist und bei Messwerten zwischen $10 \frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ und $99.99 \frac{\text{nSv}}{\text{h}}$ auf $10 \frac{\text{nSv}}{\text{h}}$ genau ist.

Die kombinierten Unsicherheiten werden gemäß

$$u(y) = \sqrt{\sum_i u^2(x_i)} \quad (6.1)$$

bestimmt.

6.2 Punktquellen

Um die Simulation von Radionukliden in FLUKA zu überprüfen, wurden die folgenden Punktquellen (Tabelle 6.1) mit der automess Sonde in 10 cm, 20 cm und 40 cm gemessen, um die erzielten Messwerte mit den Simulationsergebnissen aus FLUKA zu vergleichen.

Tabelle 6.1: Punktstrahler-Präparate für den Funktionstest des radioaktiven Zerfalls in FLUKA

Strahler	Isotop	$T_{1/2}$ (d)	Aktivität Kalibrier- datum (Bq)	Kalibrier- datum	Messdatum	Aktivität Messdatum (Bq)
Cs-137-29	^{137}Cs	$1.10 \cdot 10^4$	$9.25 \cdot 10^5$	31.12.1961	27.04.2023	$2.26 \cdot 10^5$
Cs-137-37	^{137}Cs	$1.10 \cdot 10^4$	$3.46 \cdot 10^4$	01.03.2008	27.04.2023	$2.44 \cdot 10^4$
Co-60-27	^{60}Co	$1.92 \cdot 10^3$	$4.13 \cdot 10^4$	01.02.2005	27.04.2023	$3.73 \cdot 10^3$
Co-60-07	^{60}Co	$1.92 \cdot 10^3$	$3.70 \cdot 10^8$	10.06.1969	03.05.2023	$3.03 \cdot 10^5$
Eu-152-01	^{152}Eu	$4.94 \cdot 10^3$	$3.01 \cdot 10^4$	31.12.2004	08.05.2023	$1.18 \cdot 10^4$
Am-241-13	^{241}Am	$1.58 \cdot 10^5$	$1.85 \cdot 10^8$	31.12.1967	08.05.2023	$1.69 \cdot 10^8$
Am-241-16	^{241}Am	$1.58 \cdot 10^5$	$3.70 \cdot 10^5$	31.12.1975	08.05.2023	$3.43 \cdot 10^5$

Zusätzlich wurden mit der Formel

$$\dot{H}_{\gamma}^*(10) = \frac{\Gamma_{\gamma} \cdot A}{r^2} \quad (6.2)$$

die theoretischen Photonendosisleistungen der Punktquellen berechnet, um einen weiteren Vergleichswert zu erhalten. Die Dosisleistungskonstanten wurden dem Buch „Praktischer Strahlenschutz“ [18] entnommen.

6.2.1 Ergebnisse der Messungen

Zur Messung wurden die einzelnen Präparate in eine Stativklemme geklemmt und in der jeweiligen Entfernung von der Referenzmarkierung auf der Sonde positioniert. Diese befindet sich 4 cm von der vorderen Kante der Sonde entfernt.

Die erhobenen Messwerte wurden um den Untergrund korrigiert und sind in Tabelle 6.2 aufgeführt. Die Hintergrund-Dosisleistung wurde über zwei Messungen zu Beginn der eigentlichen Messreihe und am Ende dieser über jeweils 10 Minuten bestimmt.

Tabelle 6.2: Ergebnisse der Dosisleistungsmessungen der Punktstrahler. Die Unsicherheit ist die kombinierte Unsicherheit aus der möglichen energieabhängigen Abweichung und der statistischen Unsicherheit der Messung.

Strahler	Abstand (cm)	ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	Unsicherheit ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)
Cs-137-29	10	2.02	$1.1 \cdot 10^{-1}$
Cs-137-29	20	$4.76 \cdot 10^{-1}$	$2.6 \cdot 10^{-2}$
Cs-137-29	40	$1.25 \cdot 10^{-1}$	$7 \cdot 10^{-3}$
Cs-137-37	10	$2.62 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$
Cs-137-37	20	$6.3 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-3}$
Co-60-27	10	$1.63 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-2}$
Co-60-27	20	$3.70 \cdot 10^{-2}$	$2.6 \cdot 10^{-3}$
Co-60-07	10	$1.07 \cdot 10^1$	$8 \cdot 10^{-1}$
Co-60-07	20	2.94	$2.1 \cdot 10^{-1}$
Co-60-07	40	$7.3 \cdot 10^{-1}$	$5 \cdot 10^{-2}$
Eu-152-01	10	$2.4 \cdot 10^{-1}$	$5 \cdot 10^{-2}$
Eu-152-01	20	$5.7 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$
Am-241-13	10	$6.6 \cdot 10^1$	4
Am-241-13	20	$1.40 \cdot 10^1$	$8 \cdot 10^{-1}$
Am-241-13	40	3.2	$2 \cdot 10^{-1}$
Am-241-16	10	$5.2 \cdot 10^{-1}$	$3 \cdot 10^{-2}$
Am-241-16	20	$1.05 \cdot 10^{-1}$	$6 \cdot 10^{-3}$

6.2.2 Simulationsergebnisse

Um die Punktquellen zu simulieren, wurde das unter Abschnitt 3.2.1 erklärte FLUKA Programm verwendet und mit 10 statistisch unabhängigen Simulationen parallel in flair ausgeführt.¹ Bei den Isotopen ^{152}Eu und ^{241}Am wird allerdings zusätzlich die Karte „TIME-CUT“ verwendet. Dies ist in den Tochterkernen der beiden Isotope begründet, die in keinem Gleichgewicht zum Mutterkern liegen können. Bei ^{152}Eu ist das auf den ersten Blick unnötig, allerdings ist ^{152}Gd für FLUKA auch ein instabiler Kern, wodurch sich auch hier eine Zerfallskette bis ^{140}Ce ergibt. Diese würde ohne die Karte „TIME-CUT“ bei jedem β^- -Zerfall zum ^{152}Gd komplett simuliert werden. In diesen beiden Fällen wurde das zehnfache der Halbwertszeit des Mutternuklids in What(1) eingetragen. Bei einem Faktor von 10 konnten die Mutternuklide korrekt simuliert werden, ohne dass die Tochternuklide einen Einfluss zeigen. Für ^{60}Co und ^{137}Cs ist die Karte „TIME-CUT“ nicht zu verwenden, da sie beide in ein stabiles Isotop zerfallen.

¹Es wurde die Funktion mehre „spawns“ zu erzeugen und diese gleichzeitig auf mehreren Prozessorkernen auszuführen verwendet.

Die Ergebnisse der Simulationen sind in Tabelle 6.3 zu sehen.

Tabelle 6.3: Ergebnisse der $H^*(10)$ Simulation der Punktstrahler. Die angegebenen, kombinierten Unsicherheiten wurden aus der von FLUKA angegebenen statistische Unsicherheit der Ergebnisse und einer angenommenen Unsicherheit von 5 % bezüglich der angegebenen Aktivität für das Präparat ermittelt.

Strahler	Abstand (cm)	ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	Unsicherheit ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)
Cs-137-29	10	2.12	$1.2 \cdot 10^{-1}$
Cs-137-29	20	$5.1 \cdot 10^{-1}$	$3 \cdot 10^{-2}$
Cs-137-29	40	$1.58 \cdot 10^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$
Cs-137-37	10	$2.29 \cdot 10^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$
Cs-137-37	20	$5.5 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-3}$
Co-60-27	10	$1.32 \cdot 10^{-1}$	$7 \cdot 10^{-3}$
Co-60-27	20	$3.27 \cdot 10^{-2}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$
Co-60-07	10	$1.07 \cdot 10^1$	$6 \cdot 10^{-1}$
Co-60-07	20	2.65	$1.4 \cdot 10^{-1}$
Co-60-07	40	$6.9 \cdot 10^{-1}$	$5 \cdot 10^{-2}$
Eu-152-01	10	$2.15 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$
Eu-152-01	20	$5.2 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-3}$
Am-241-13	10	$8.4 \cdot 10^1$	6
Am-241-13	20	$1.91 \cdot 10^1$	2.1
Am-241-13	40	5.4	1.1
Am-241-16	10	$1.70 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$
Am-241-16	20	$3.9 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-3}$

6.2.3 Vergleich der Daten

Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung gemäß Gleichung 6.2 und der Simulation werden in den folgenden Abbildungen zum direkten Vergleich miteinander dargestellt.

In den Ergebnissen für die ^{60}Co -Präparate ist zu erkennen, dass die Messung in allen Fällen über Rechnung und Simulation liegt. Die größte Abweichung der Simulation von der Messung tritt im Fall der Co-60-27 Messung mit einer Abweichung von -19.3% auf. Bei den anderen drei Messungen beträgt die Abweichung maximal -9.8% . Die Ergebnisse der Simulation weichen allerdings nur um maximal 3% von denen der Gleichung 6.2 ab, stimmen also insbesondere im Rahmen der Unsicherheit mit diesen überein.

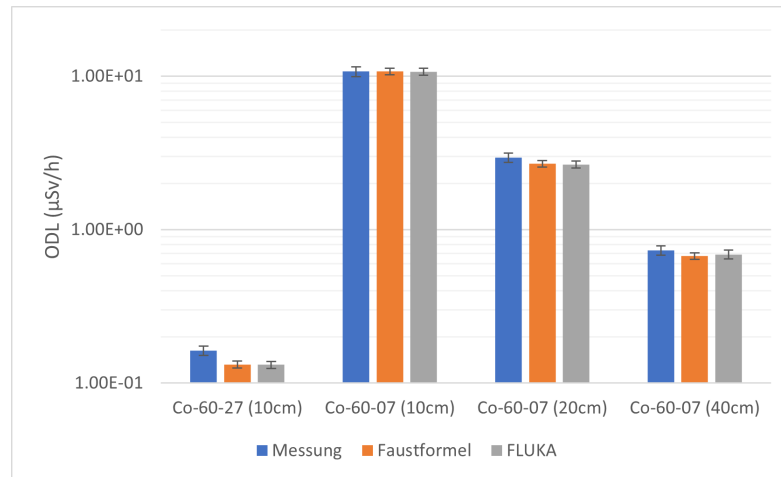


Abbildung 6.3: Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung gemäß der Faustformel 6.2 und der Simulation für die ^{60}Co Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt. Die Daten für Co-60-27 (20 cm) sind nicht dargestellt, da sie unterhalb des geeichten Messbereichs liegen.

Durch diesen Umstand liegt die Vermutung nahe, dass der Unterschied zwischen Messung und Simulation in denjenigen Wechselwirkungen begründet liegt, die auch vom einfachen Modell hinter Gleichung 6.2 nicht berücksichtigt werden. Zu diesen nicht berücksichtigten Effekten gehören die Wechselwirkungen mit der Umgebung, die in der Simulation genau wie durch Gleichung 6.2 nicht berücksichtigt wurde. Dies betrifft z.B. die Streuung am umgebenden Material (z.B. einer nahe liegenden Wand, Tischplatte, etc.). Durch Streuung an dieser Materie können γ -Quanten, die auf ihrer normalen Flugbahn den Detektor nicht treffen würden, auf eine neue Bahn in Richtung des Detektors umgelenkt werden und so zusätzliche Dosis erzeugen. Außerdem sind Interaktionen der ebenfalls ausgesandten, aber durch die Szintillatorsonde nicht direkt detektierbaren, β -Teilchen besonders in Gleichung 6.2 nicht bedacht. In FLUKA wird die abschirmende Eigenschaft der Luft zwar simuliert, Wechselwirkungen mit der sonstigen Materie (Halterung, Wand, Hülle des Szintillators etc.) und die dadurch entstehende Röntgenstrahlung wird allerdings nicht berücksichtigt, da diese in der Simulationsgeometrie nicht definiert wurden.

Für die ^{137}Cs Präparate ist in Abbildung 6.4 festzustellen, dass die Simulation Abweichungen zwischen -13.1% und 26.6% gegenüber der Messung ergibt. Dabei wird die Messung durch Simulation und Gleichung 6.2 für den Strahler Cs-137-29 konsequent überschätzt, während die Messung für das Präparat Cs-137-37 unterschätzt wird.²

²Dies trifft ebenfalls für die Messung in 20 cm Entfernung zu, auch wenn diese unter dem Nenngebrauchsbereich liegt und die Aussagekraft dieser spezifischen Messung in Frage zu stellen ist.

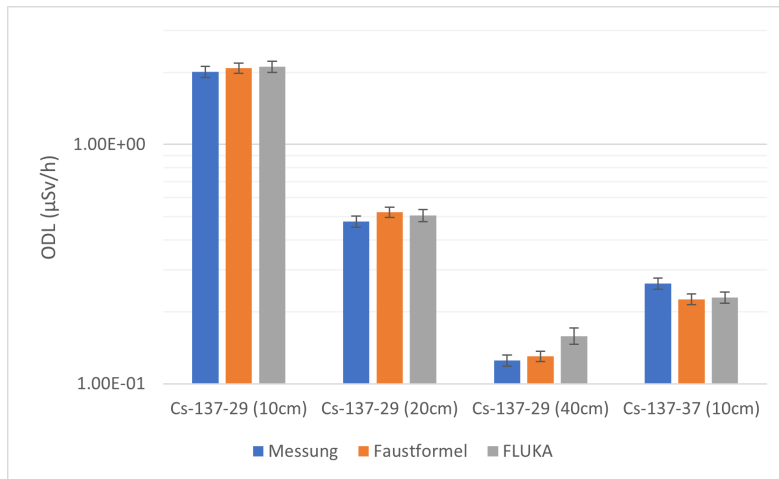


Abbildung 6.4: Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung und der Simulation für die ^{137}Cs Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt. Die Daten für Cs-137-37 (20 cm) sind nicht dargestellt, da sie unterhalb des geeichten Messbereichs liegen.

Dieser Wechsel zwischen Über- und Unterschätzen der Dosisleistung vom einen zum anderen Präparat tritt auch bei der Auswertung von Gleichung 6.2 auf. Dieser Unterschied ist durch die Halterungen der Präparate begründet. Das Präparat Cs-137-29 ist in einer wenige mm tiefen Vertiefung an der Oberseite eines Kegelstumpfes aus Aluminium eingelassen, während die Probe Cs-137-37 in einer 25 mm Kunststoffscheibe eingeschlossen ist. Durch die Vertiefung ist das Präparat Cs-137-29 seitlich abgeschirmt und die Effekte der Streuung durch Wand und Tischplatte sind deutlich reduziert. Dadurch wird die gemessene Ortsdosisleistung verringert. Das ^{152}Eu Präparat wird durch die Simulation wie in Abbildung 6.5 dargestellt um bis zu 12 % gegenüber der Messung unterschätzt. Diese Unterschätzung ist durch die gleichen Effekte wie für das ^{60}Co zu begründen. Wechselwirkungen der β - und γ -Strahlung in umgebender Materie werden nicht berücksichtigt.

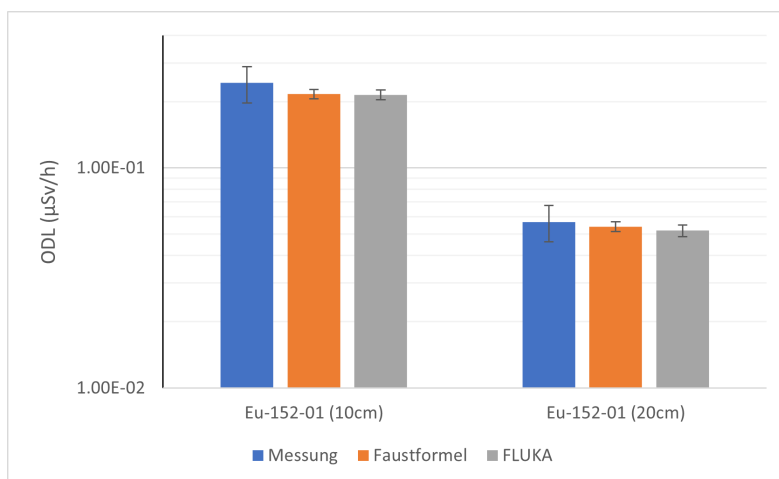


Abbildung 6.5: Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung und der Simulation für die ^{152}Eu Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt. Die Messung für eine Entfernung von 20 cm liegt außerhalb des Nenngebrauchsbereichs der Sonde und kann nur als Indiz, nicht aber als belastbares Ergebnis angesehen werden.

Für ^{241}Am ergibt sich das Diagramm 6.6. Auffällig ist, dass die Ergebnisse der Gleichung 6.2 zwischen 3 % und 25 % über den Simulationsergebnissen liegen und die geringste Abweichung beim größten Abstand vorliegt. Die Simulationsergebnisse zum Präparat Am-241-16 besitzen eine Abweichung bis zu 60 % gegenüber den Messergebnissen, während die Abweichungen für Am-241-13 zwischen 50 % und 136 % liegen.

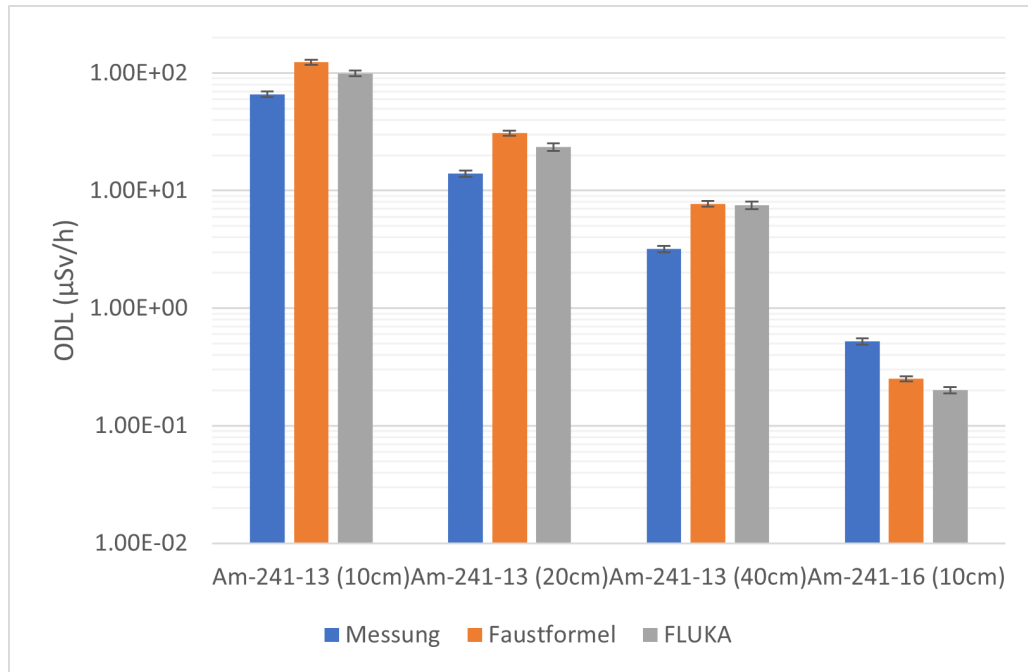


Abbildung 6.6: Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung und der Simulation für die ^{241}Am Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt.

Die Unterschätzung wäre durch die gleichen vernachlässigten Effekte von Reflektion und Sekundärstrahlung wie bei den zuvor behandelten Isotopen zu begründen. Die Sekundärstrahlung würde dabei nicht durch β -Strahlung erzeugt werden, sondern beim Abbremsen der vom ^{241}Am ausgesandten α -Teilchen entstehen.

Ein möglicher Grund für die Überschätzung des Messergebnisses für den Strahler Am-241-13 durch die theoretischen Ansätze ist ebenso die Vernachlässigung verschiedener umgebender Materialien. Hier bleibt eine Abschwächung der vom ^{241}Am ausgesandten γ -Quanten unbeachtet. Diese tritt für die γ -Quanten des ^{241}Am stärker auf, als bei den γ -Quanten der anderen untersuchten Isotope, da sie nur über eine Energie von 60 keV verfügen und dadurch einfacher abgeschwächt werden. Diese Abschwächung kann in der Probe Am-241-13 selbst und ihrer Umarmung stattfinden, da sich eventuelle Einflüsse durch die Schutzkappe der Sonde und die Luft zwischen Probe und Detektor auf die Messung beider Präparate auswirken. Die Probe Am-241-13 besitzt eine zusätzliche Kunststoffhalterung, die ebenfalls zur Reduktion der ODL führen kann.

Die Ergebnisse der Isotope ^{60}Co , ^{137}Cs und ^{152}Eu zeigen mit einer Ausnahme (Cs-137-29 , 40 cm) Abweichungen von maximal 19 %. Diese Diskrepanz liegt im Rahmen der bei Monte-Carlo-

Simulationen üblichen und zu erwartenden Abweichungen [43, 44]. Für ^{241}Am liegen die Abweichungen mit mindestens 50 % deutlich höher und deshalb sind die Ergebnisse für dieses Isotop infrage zu stellen. Insbesondere das unterschiedliche Verhalten der beiden Präparate wirft weitere Fragen auf, da diese Abweichungen nicht allein durch die Streuung oder die Abschirmung durch die umgebende Materie zu erklären ist.

6.3 Überprüfung der Voxelgeometrie mit mehreren Quellen

Ein weiterer Test war die Messung mehrerer Volumenquellen in einer vorgegebenen Geometrie. Dazu wurden sechs Röhren mit 5 mL der folgenden Lösung gefüllt:

Tabelle 6.4: Verwendete Stammlösung zur Befüllung der Röhren.

Strahlerkennung	Isotop	Aktivitätskonzentration	Halbwertszeit	Kalibration
xEu152-01	^{152}Eu	$5.2 \cdot 10^4 \text{ Bq/mL}$	$4.27 \cdot 10^8 \text{ s}$	01.12.2001

In Abbildung 6.7 ist die Acrylplatte mit den Positionen zu sehen, in die die Röhren eingesetzt werden können.

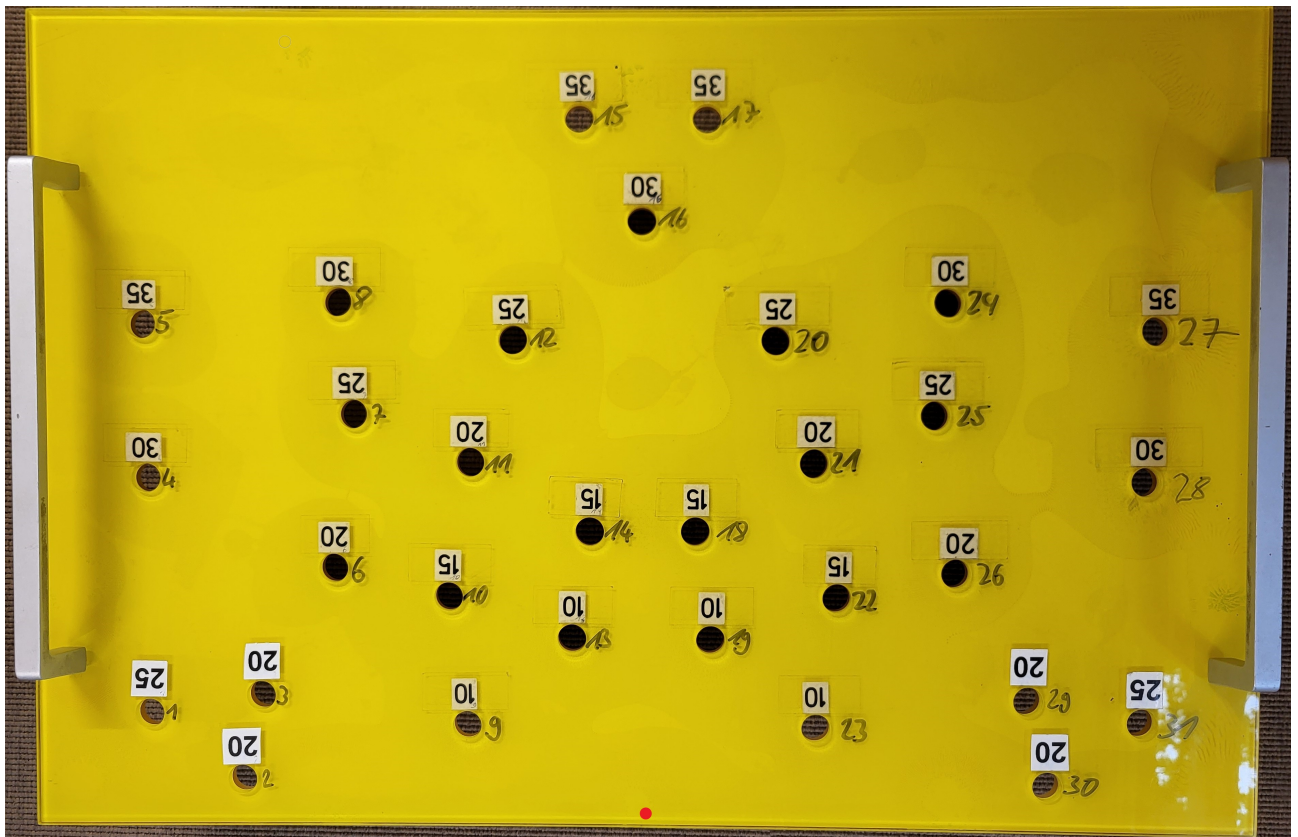


Abbildung 6.7: Für die Versuche mit mehreren Quellen verwendete Acrylplatte. Per Hand aufgetragene Zahlen auf dem gelben Untergrund geben die für die folgende Beschreibung verwendete Nummerierung an. Auf dem Kopf stehende Zahlen geben den Abstand zur Mitte am unteren Ende der Platte (rote Markierung) an.

Die automess-Sonde wurde in einem Abstand von 1.8(1) cm unten in der Mitte an die gelochte Platte platziert. Zwischen Acrylplatte und der Sonde wurde eine weitere 1.6(1) cm Acrylplatte zur Abschirmung der β -Strahlung eingesetzt.

6.3.1 Messwerte

Für die folgenden Konfigurationen wurden Messwerte aufgenommen.

Tabelle 6.5: Die durchgeführten Messungen mit einem „E“ an derjenigen Position, die für die Messung mit einer Probe belegt wurden.

Messung Nr.	Loch											
	5	6	8	12	13	15	17	19	20	24	26	27
1					E							
2					E				E			
3					E				E		E	
4	E		E			E	E			E		E
5									E			
6		E		E	E			E	E		E	

Die aufgenommenen Daten wurden untergrundkorrigiert und sind in Tabelle 6.6 aufgeführt.

Tabelle 6.6: Die Ergebnisse der Messungen mit den Proben im Acrylbrett.

Messung Nr.	ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	Unsicherheit ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)
1	0.78	0.34
2	0.99	0.42
3	1.31	0.53
4	0.84	0.36
5	0.21	0.13
6	2.57	0.99

6.3.2 Simulationsdaten

In FLUKA wurde der oben beschriebene Aufbau durch eine Kombination von FLUKA-interner Geometrie (die Abschirmung für β -Teilchen und die Sonde) und einer variablen Voxelgeometrie nachgebildet (das Acrylbrett und die eingelassenen Proberöhrchen). Zusätzlich ist eine 1 mm dicke PET³-Schicht vor der Acrylplatte platziert. Diese dient dazu, die Abschwächung durch die Röhrchen zu berücksichtigen und ist nötig, da die Acrylplatte mit den Löchern und den darin eingelassenen Fläschchen durch Voxel dargestellt wird. Um allerdings die Röhrchen mit einer Wandstärke von 1 mm durch Voxel darzustellen, müssten alle Voxel eine Kantenlänge kleiner oder gleich 1 mm besitzen. Das wiederum würde zu einer größeren Anzahl Voxeln insgesamt

³Polyethylenterephthalat

und insbesondere zu einer Erhöhung der Anzahl der Aktivitätspunkte führen, wodurch die Rechenzeit deutlich ansteigen würde (siehe Kapitel 4).

Die gefüllten Löcher werden in der Simulation durch Wasser dargestellt, wie es in den folgenden 2 Abbildungen 6.8 und 6.9 durch die blauen Zylinder dargestellt ist.

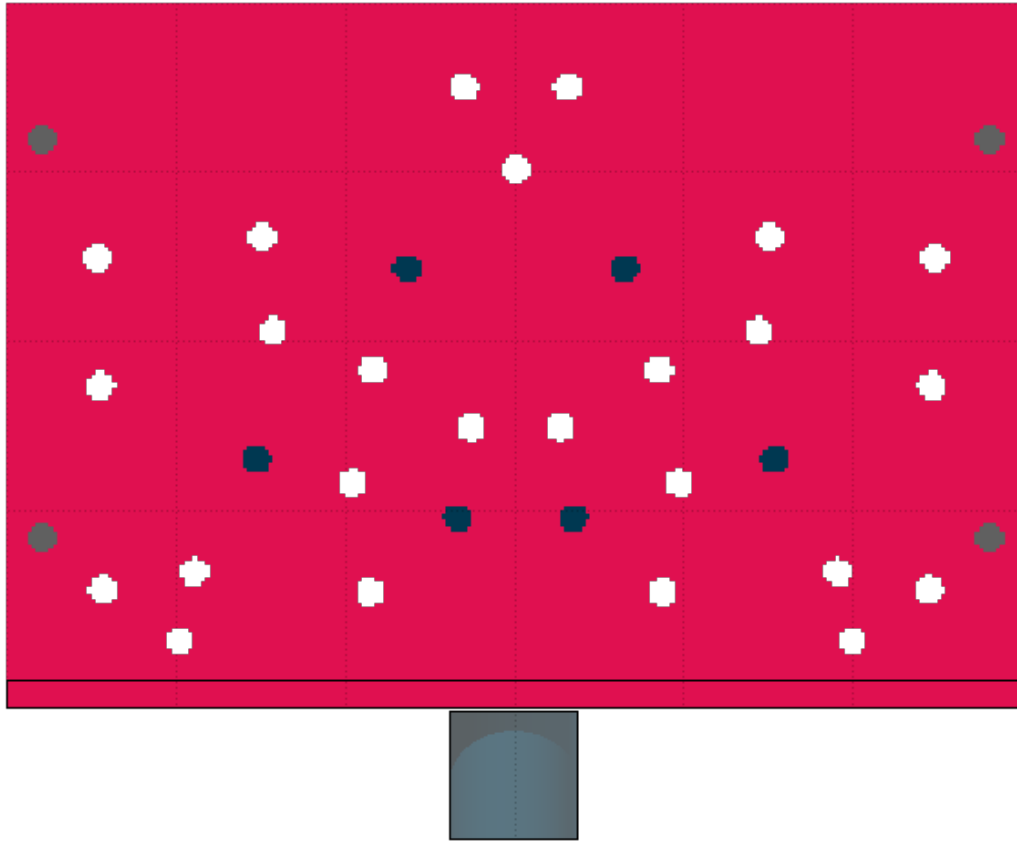


Abbildung 6.8: Die in FLUKA genutzte Geometrie als Draufsicht mit belegten Löchern 6,12,13,19,20 und 26. Die Auflösung der Geometrie beträgt 0.25 cm.

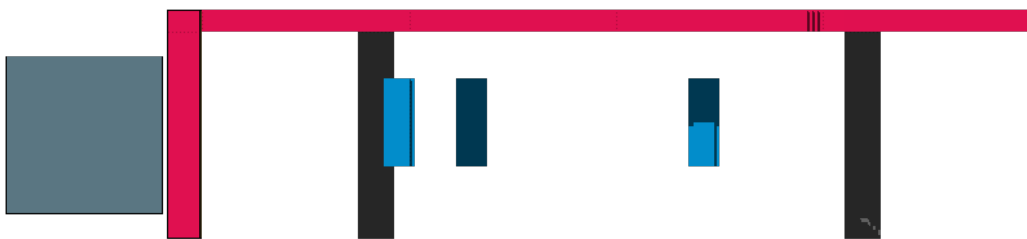


Abbildung 6.9: Die in FLUKA genutzte Geometrie als Seitenansicht mit belegten Löchern 6,12,13,19,20 und 26. Die hellen Flecken an der rechten Stütze sowie die unterschiedlichen Farben der blauen Blöcke sind durch die Bleuchtung und Darstellung in flair bedingt. Die Auflösung der Geometrie beträgt 0.25 cm.

Die in Tabelle 6.5 angegebenen Kombinationen wurden simuliert und die Ergebnisse in Tabelle 6.7 erzielt.

Tabelle 6.7: Die Ergebnisse der Simulationen. Die Unsicherheiten wurden als kombinierte Unsicherheiten aus den statistischen Unsicherheiten laut FLUKA und einer angenommenen Unsicherheit von 5 % bestimmt.

Messung Nr.	ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	Unsicherheit ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)
1	0.56	0.03
2	0.693	0.003
3	0.914	0.006
4	0.546	0.002
5	0.146	0.001
6	1.801	0.008

6.3.3 Vergleich der Daten

In Abbildung 6.10 sind die Ergebnisse der Messung und der Simulation zum Vergleich nebeneinander dargestellt.

Die Ergebnisse zeigen, dass die FLUKA Simulationen die Messung durchweg unterschätzen. Zur genaueren Betrachtung der Unterschätzung lässt sich Abbildung 6.11 betrachten.

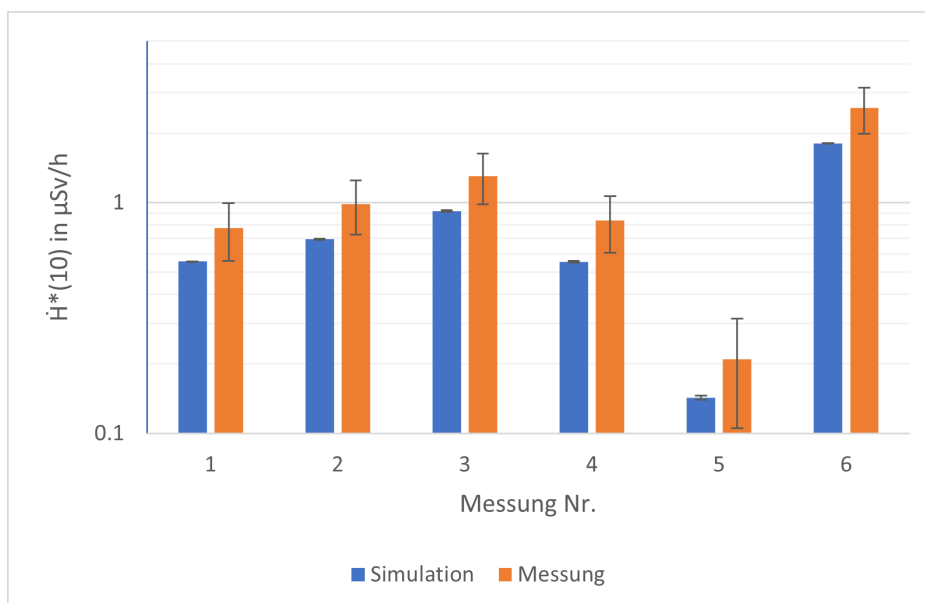


Abbildung 6.10: Gegenüberstellung Dosisleistungsmessung und -Simulation der variablen Geometrie.

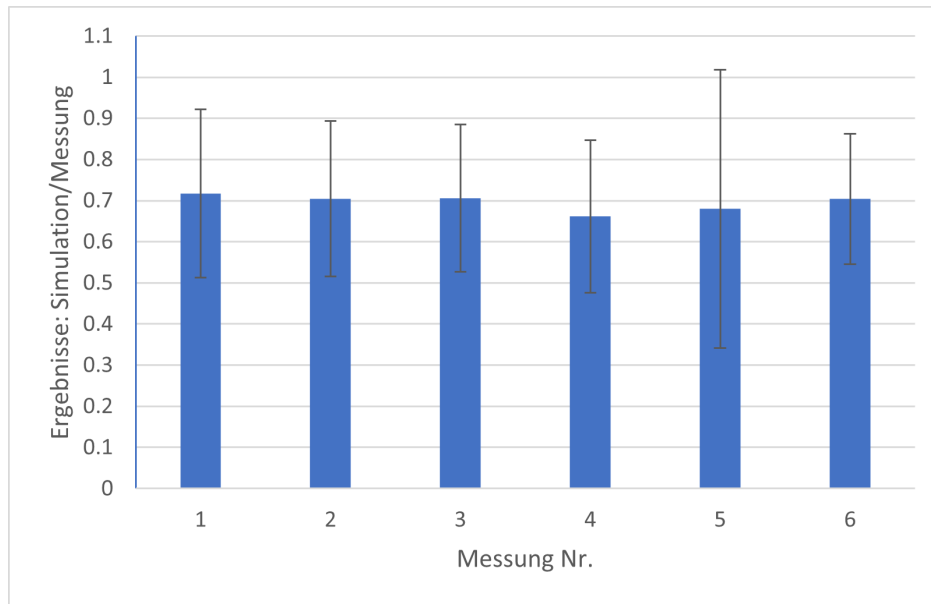


Abbildung 6.11: Die Simulationsergebnisse sind hier auf die Messwerte normiert dargestellt. Die Unsicherheitsbalken liegen zwischen 20 und 30 % mit Ausnahme von Messung 5 (50 %). Es zeigt sich insgesamt eine Unterschätzung um 30 %.

Diese Ergebnisse zeigen, dass Simulationen mit Hilfe der entwickelten Voxel-Methode Resultate liefern, die konstant um etwa 30(5) % unterschätzt werden.

Wie bereits im Abschnitt 6.2 erklärt, führen vernachlässigte Umgebungsstrukturen, wie Wände oder auch der Tisch, auf dem der Versuch durchgeführt wurde zu nicht simulierter Streuung, die in der Realität zu höheren Dosisleistungen am Ort der Sonde führt.

Für die zukünftige Nutzung der Voxelgeometrie ist besonders darauf zu achten, die Umgebung des „betrachteten“ Geometriebereichs bestmöglich in FLUKA darzustellen. Diese wird dabei nahezu immer händisch durch eine FLUKA interne Geometrie beschrieben werden müssen, um diese wirklich präzise darzustellen.

Bei Betrachtung der Ergebnisse zu den Punktquellen und der Kombination mehrerer Quellen ist festzustellen, dass bei den vorliegenden Problemstellungen die Realität durch FLUKA um bis zu 30 % unterschätzt.

6.4 Mit radioaktivem Abfall gefülltes Fass

Die Voxeldarstellung in Kombination mit der Source_Routine wurde des Weiteren an einem mit homogenisierten Abfällen befüllten Stahlfass überprüft. Die realen Messwerte dazu wurden von der Kerntechnischen Entsorgung Karlsruhe (KTE)⁴ zur Verfügung gestellt und beinhalten sowohl Dosisleistungswerte in 10 cm und 1 m Entfernung als auch die Gesamtaktivitäten verschiedener enthaltener Isotope. Von den angegebenen Isotopen⁵ lagen lediglich die vier ⁶⁰Co,

⁴Das Fass besitzt die KTE-interne Fassnummer MS038654 und wurde am 07.10.2019 vermessen.

⁵Es handelt sich konkret um ⁵⁴Mn, ⁶⁰Co, ¹³⁴Cs, ¹³⁷Cs, ¹⁵²Eu, ¹⁵⁴Eu, ²¹²Pb, ²¹²Bi, ²¹⁴Pb, ²¹⁴Bi, ²²⁸Ac, ^{234m}Pa, ²³⁵U und ²⁴¹Am.

^{137}Cs , ^{154}Eu und ^{241}Am über einer der charakteristischen Grenzen, im Dokument als Nachweisgrenze (NWG) angegeben. Diese Daten sind in Tabelle 9.1 zu finden. Es ist zu beachten, dass die gegebenen Aktivitäten nur näherungsweise berechnet wurden und es dadurch zu Abweichungen kommen kann.

Tabelle 6.8: Dimensionen des Abfallfasses

Höhe.	Radius	Wandstärke	Boden/Deckel
858(4) mm	280(2) mm	1.5 mm	1.66 mm

Die von der KTE gemessenen Dosisleistungswerte sind in Tabelle 6.9 aufgeführt. Hier ist direkt zu erkennen, dass der Abfall zwar homogenisiert wurde, es aber trotzdem einzelne Hotspots geben muss. Da allerdings keine Informationen über die Position dieser Hotspots existiert, ist es nicht möglich die maximale Ortsdosisleistung zu überprüfen und es muss sich auf die durchschnittliche Ortsdosisleistung beschränkt werden.

Tabelle 6.9: Die Dosisleistungsmesswerte der KTE für das Abfallfass

Entfernung	max ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	mittlere ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)
0.1 m	67	34
1 m	14	5.7

Aufgrund der fehlenden Aussagekraft der Daten, wurden die Isotope, die unterhalb der angegebenen charakteristischen Grenze liegen, nicht simuliert. Die Simulationen wurden für die vier Nuklide durchgeführt und das Ergebnis anschließend mit der in Tabelle 9.1 angegebenen Aktivität korrigiert.

6.4.1 FLUKA Volumenquelle

Aufgrund der einfachen zylindrischen Form des Fasses kann die Voxelgeometrie zusätzlich zur Messung auch gegenüber der FLUKA eigenen Möglichkeit Volumenquellen zu erstellen erprobt werden. Dazu wurde ein Zylinder mit den Maßen in Tabelle 6.8 erstellt und als Material der in FLUKA vordefinierte Portlandbeton befüllt. Der Fassmantel und der Boden und der Deckel wurden mit Eisen modelliert. Für die Messung der Dosisleistung wurden zwei Detektoren implementiert, die nur einzeln verwendet werden, damit sie sich nicht gegenseitig beeinflussen.

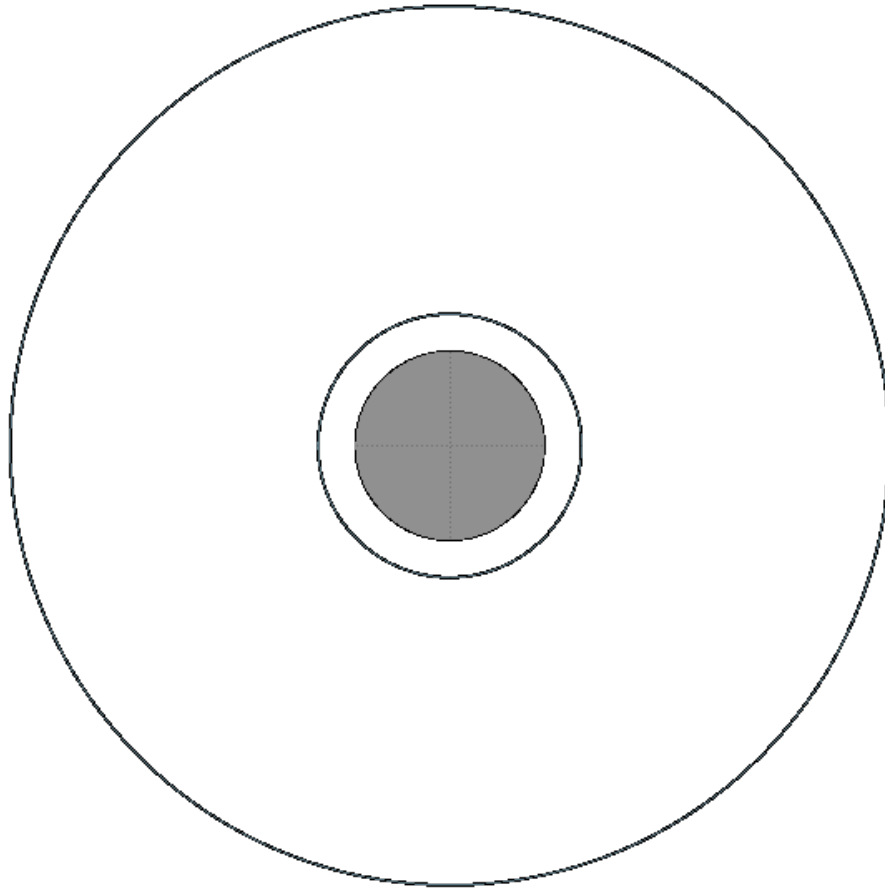


Abbildung 6.12: Die genutzte Geometrie in der Draufsicht für die Simulation mit der FLUKA eigenen Volumenquelle. Die beiden äußeren Ringe sind die Detektoren und der innere Kreis ist das Fass.

Die Simulationsergebnisse sind in Tabelle 6.10 zu sehen.

Tabelle 6.10: Die Ergebnisse der Simulationen für das Fass mit radioaktiven Abfällen mit der Volumenquelle

Nuklid	ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	Unsicherheit ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	detector
^{60}Co	3.3	$1.3 \cdot 10^{-3}$	10 cm
^{137}Cs	$2.2 \cdot 10^1$	$3.0 \cdot 10^{-2}$	10 cm
^{154}Eu	$5.0 \cdot 10^{-2}$	$9.4 \cdot 10^{-5}$	10 cm
^{241}Am	1.3	$3.1 \cdot 10^{-3}$	10 cm
^{60}Co	$5.0 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-4}$	1 m
^{137}Cs	2.9	$2.0 \cdot 10^{-3}$	1 m
^{154}Eu	$6.4 \cdot 10^{-3}$	$5.9 \cdot 10^{-6}$	1 m
^{241}Am	$1.7 \cdot 10^{-1}$	$5.3 \cdot 10^{-4}$	1 m

6.4.2 FLUKA Voxel-Geometrie

Für die entsprechende Voxelgeometrie ist es nicht möglich, den Stahlmantel des Fasses darzustellen, da dafür zu kleine Voxel nötig wären, was wiederum zu zu vielen Voxel führen würde.

Die genaue Grenze für die mögliche Anzahl der Voxel wurde nicht untersucht. Die Datei mit den Informationen für die „VOXELS“-Karte für diese Geometrie ist bei einer Auflösung von 0.2 cm und damit etwa $3.7 \cdot 10^7$ Voxeln bereits 74 MB groß. Dabei gilt es zu bedenken, dass diese Datei lediglich ein Zeichen pro Voxel enthält. Die Datei, die mit „VoxelActivity“ verarbeitet wird, also die Informationen für die „VOXELS“ Karte und die Source_Routine enthält, ist bei dieser Anzahl an Voxeln bereits 1.7 GB groß. Damit zeigt sich allerdings mit der Dateigröße ein weiterer Aspekt, der für die Nutzung im Algorithmus zu beachten ist.

Aus diesen Gründen wurde der Mantel des Stahlfasses aus dem Voxelbereich herausgehalten und direkt außerhalb des durch Voxel dargestellten Bereichs platziert. Dies ist in [Abbildung 6.13](#) durch das Quadrat zwischen dem Fass und dem inneren Detektor zu erkennen. [Abbildung 6.14](#) zeigt den gevoxelten Bereich noch einmal genauer. Da der Voxelkörper ein Quader sein muss, kann der innere Detektor nicht in einer Entfernung von 10 cm platziert werden. Aus diesem Grund ist hat der innere Detektor in dieser Simulation einen Abstand von 13 cm.

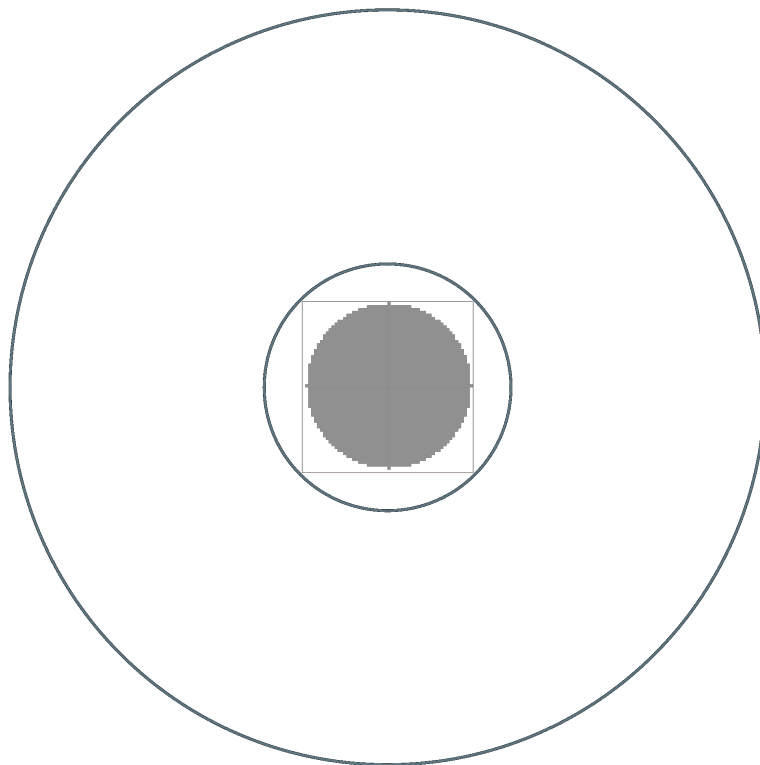


Abbildung 6.13: Die genutzte Voxelgeometrie in der Draufsicht für die Simulation. Die beiden äußeren Ringe sind die Detektoren und der innere Kreis ist erneut das Fass. Das Quadrat um das Fass ist der Stahlmantel des Fasses. Die Auflösung beträgt 1 cm.

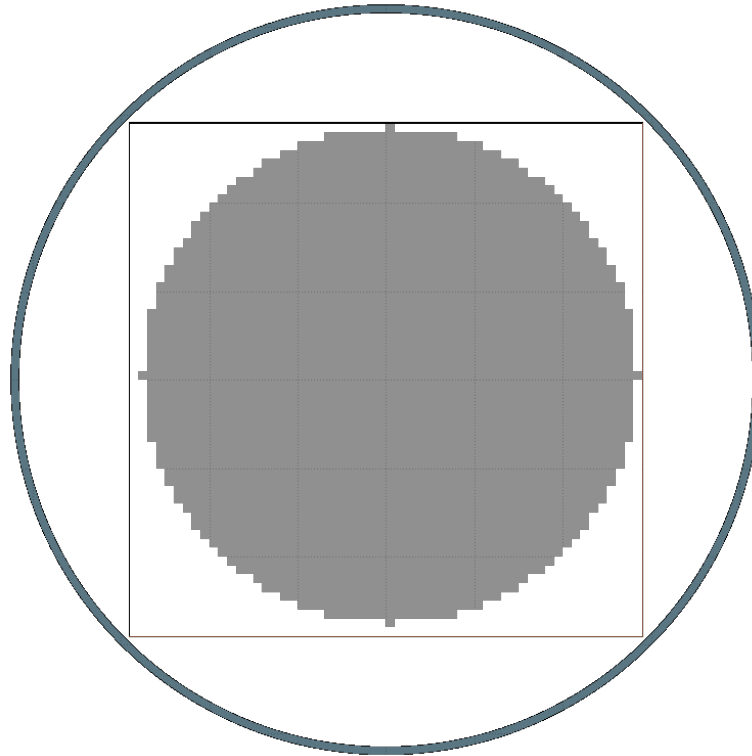


Abbildung 6.14: Die genutzte Voxelgeometrie in der Draufsicht für die Simulation. Die beiden äußeren Ringe sind die Detektoren und der innere Kreis ist das Fass. Die Auflösung beträgt 1 cm.

Die Ergebnisse der Simulation mit der Voxelquelle sind in Tabelle 6.11 zu sehen.

Tabelle 6.11: Die Ergebnisse der Simulationen mit Voxelquelle für das Fass mit radioaktiven Abfällen.

Nuklid	ODL ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	Unsicherheit ($\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$)	detector
^{60}Co	3.1	$1.7 \cdot 10^{-3}$	13 cm
^{137}Cs	$2.1 \cdot 10^1$	$3.9 \cdot 10^{-2}$	13 cm
^{154}Eu	$4.8 \cdot 10^{-2}$	$7.4 \cdot 10^{-5}$	13 cm
^{241}Am	1.2	$3.7 \cdot 10^{-3}$	13 cm
^{60}Co	$5.2 \cdot 10^{-1}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	1 m
^{137}Cs	3.1	$4.2 \cdot 10^{-3}$	1 m
^{154}Eu	$6.6 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-6}$	1 m
^{241}Am	$1.7 \cdot 10^{-1}$	$5.4 \cdot 10^{-4}$	1 m

6.4.3 Vergleich der Methoden

Die Ergebnisse der betrachteten vier Isotope oberhalb der NWG sind im Folgenden zusammen aufgetragen, um die Volumenquelle mit der Voxelquelle zu vergleichen.

In den folgenden Abbildungen werden statt der Werte für Entfernungen die Begriffe „far“ und „close“ verwendet. „far“ steht für die Simulationen der Messung in 1 m Abstand. „close“ steht bei der FLUKA-Volumenquelle für den Abstand 10 cm und bei der Voxelquelle für den Abstand 13 cm (siehe 6.4.2).

Abbildung 6.15 zeigt, dass die Ergebnisse der beiden Simulationswege die gleichen Ergebnisse liefern. Die Daten für „far“ weichen lediglich um 2% voneinander ab, für „close“ weichen die Ergebnisse konstant um 5% bis 6% voneinander ab. Diese Abweichung ist durch den unterschiedlichen Abstand der Detektoren zu erklären.

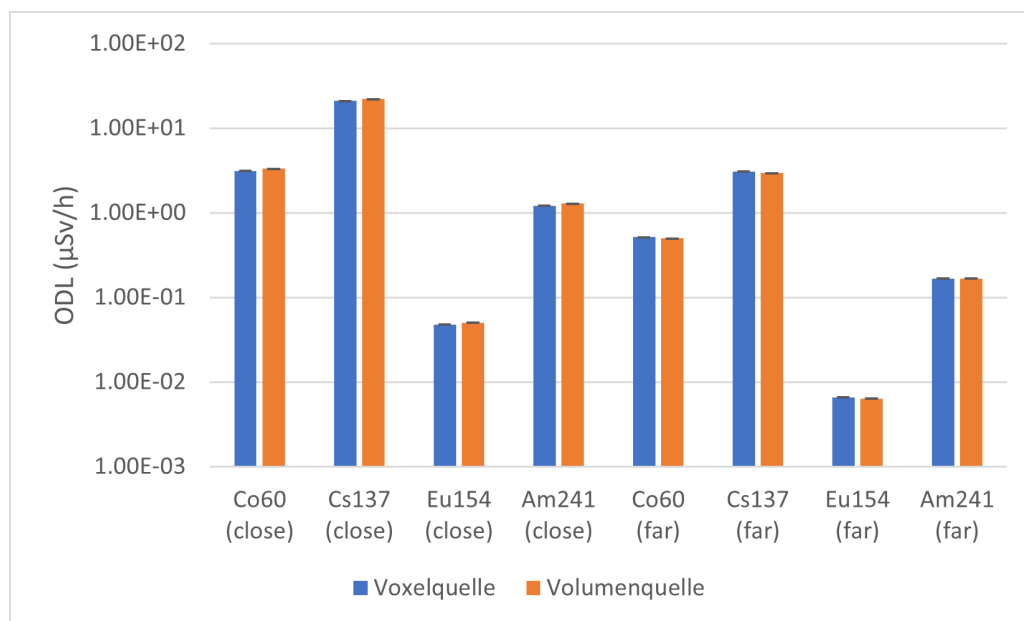


Abbildung 6.15: Vergleich der $H^*(10)$ -Ergebnisse der VOXEL-Geometrie und der FLUKA-eigenen Volumenquelle für die Simulation des Abfallfasses.

In Abbildung 6.16 wird die Gesamtdosisleistung der Simulationen der real gemessenen Dosisleistung (siehe Tabelle 6.9) gegenübergestellt. Auf der linken Seite zeigt sich für die „close“-Simulationen erneut die Diskrepanz von 5.3% zwischen der Voxelquelle und der FLUKA-Volumenquelle aufgrund des erhöhten Abstands des Detektors zur Voxelquelle. Die offizielle Messung der KTE wird allerdings auch von der FLUKA-Volumenquelle mit 25.4% unterschätzt. Für die Simulationen im Abstand „far“ zeigt sich, dass die Voxelquelle ein um 4% höheres Ergebnis als die Volumenquelle liefert. Die offizielle Messung wird in diesem Fall durch die Volumenquelle um 36.7% unterschätzt.

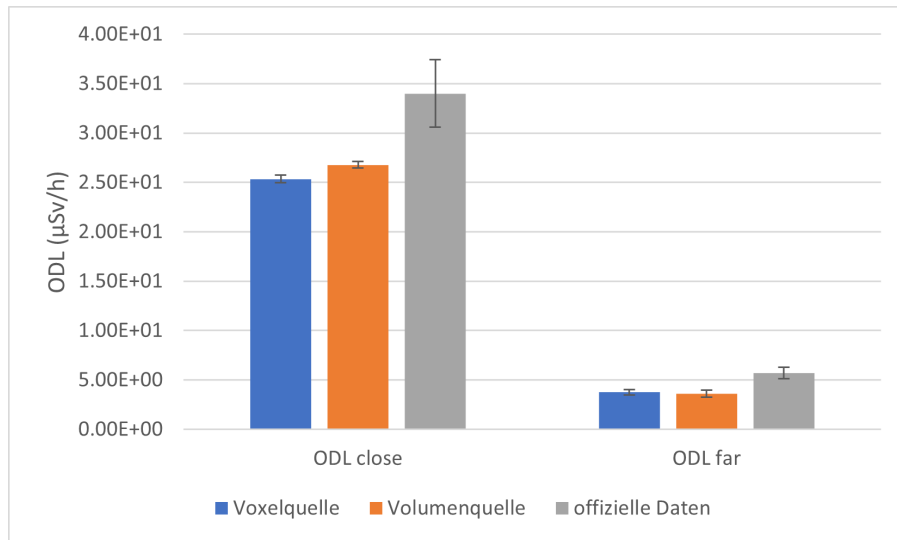


Abbildung 6.16: Vergleich der $H^*(10)$ -Ergebnisse der FLUKA-Volumenquelle, der VOXEL-Quelle und des Messergebnisses der KTE. Zu beachten ist, dass nur für ^{60}Co , ^{137}Cs , ^{154}Eu und ^{241}Am die gegebenen Daten oberhalb der charakteristischen Grenze lagen und in diese „Gesamtdosisleistung“ eingeflossen sind. Da es für die Unsicherheiten zur Messung der KTE keine Angaben gibt, wurden Unsicherheitsbalken für 10% eingefügt.

Die entwickelte Methode liefert Ergebnisse, die mit denen der in FLUKA bereits implementierten Volumenquelle weitestgehend übereinstimmen. Zwischen den Ergebnissen der beiden Varianten liegt ein Unterschied von weniger als 5%. Diese geringe Abweichung zeigt, dass die Darstellung durch Voxel zur FLUKA-Volumenquelle konsistente Ergebnisse produziert. Eine Abweichung ist quasi unausweichlich, da die Voxelgeometrie keine exakte Repräsentation der realen Geometrie ermöglicht, sondern lediglich eine Annäherung an diese.

Im Sinne einer konservativen Strahlenschutz Betrachtung sollten deshalb die Ergebnisse der Simulationen mit einem Faktor von ungefähr 1.5 zu multiplizieren.

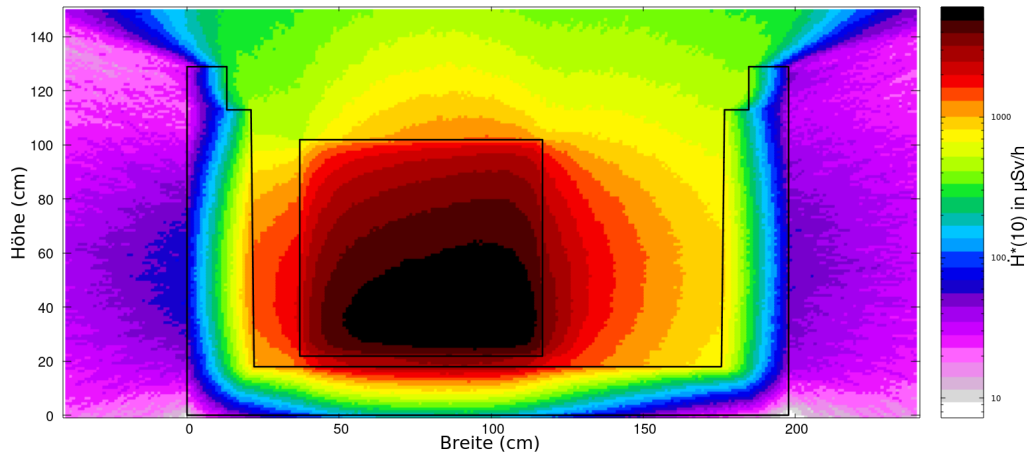


Abbildung 6.17: Darstellung der Ortsdosisleistung um den LC84 Container. Die ODL wurde hier über die Länge (-1,245) des Containers gemittelt.

6.5 Inhomogene Aktivitätsverteilung

Zuletzt wurden noch Simulationen mit inhomogenen Aktivitätsverteilungen durchgeführt. Für diese existiert allerdings kein realer Vergleich, sodass die Simulationsergebnisse nur visuell darauf überprüft werden können, ob die zugrundeliegende Aktivitätsverteilung korrekt zu erkennen ist.

Für diese Simulation wurde erneut ein Schweizer LC84 Container als Grundlage verwendet und in diesem ein Betonblock platziert. Der Betonblock wurde dabei durch eine Voxelgeometrie modelliert und mittels der Source_Routine mit einer inhomogenen Aktivität von insgesamt 10 GBq ^{60}Co versehen. Die Aktivität besitzt innerhalb der Voxelgeometrie einen Verlauf gemäß der linearen Funktion

$$A(x, y, z) = x + 0.1y - 3z + 300$$

wobei die x-Richtung die Breite, die y-Richtung die Länge und die z-Richtung die Höhe des Containers beschreibt. Dies beschreibt die nächsthöhere Ordnung im Vergleich zum konstanten und homogenen Fall.

Der Ursprung dieser Funktion ist im FLUKA System an der Koordinate (35,30,22) gelegen. Das Ergebnis der Simulation ist in den Abbildungen 6.17 und 6.18 zu sehen. In Abbildung 6.17 ist der Container über die Breite zu sehen und die Verteilung der Aktivität ist durch die resultierende Dosisleistung sowohl in der Breite als auch in der Höhe zu erkennen.

In Abbildung 6.18 ist ebenfalls der Verlauf der Aktivität in der Höhe durch die nach oben abnehmende Dosisleistung zu sehen. Die Veränderung über die Länge des Containers ist aufgrund des geringen Vorfaktors für y von lediglich 0.1 nur zu erahnen.

Anhand einer solchen inhomogenen Verteilung, allerdings mit drei Betonblöcken im Container, wurde untersucht, welchen Einfluss die Auflösung der Geometrie und Aktivitätsverteilung auf die Dosisleistungsergebnisse besitzt. Dieser Test konnte nicht für die anderen Versuche

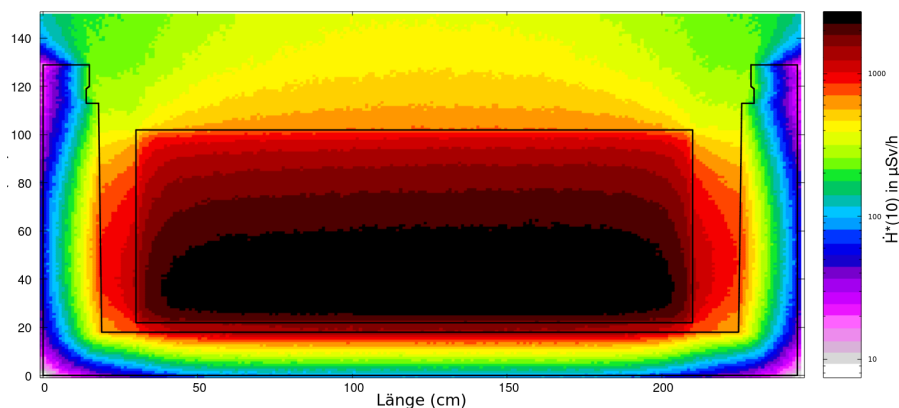


Abbildung 6.18: Darstellung der Ortsdosisleistung um den LC84 Container. Die ODL wurde hier über die Breite (-1,200) des Containers gemittelt.

durchgeführt werden, da der Einfluss bei homogener Aktivitätsverteilung zu gering ist, um ihn repräsentativ festzustellen. Dazu wurden um den Container sechs Detektorvolumina platziert (Abbildung 6.19) und für verschiedene Auflösungen der Geometrie Simulationen mit einer angenommen Gesamtaktivität von 20 MBq ^{60}Co durchgeführt.

Die Verteilung der Aktivität wurde für die drei Blöcke von links nach rechts durch die drei Funktionen

$$f_1 = 0.1 \cdot y$$

$$f_2 = 0.12 \cdot y - 6$$

$$f_3 = -0.1 \cdot y + 18.1$$

vorgegeben. Diese Funktionen wurden so ausgewählt, damit der mittlere Block eine leicht höhere Aktivität besitzt, während der linke und rechte Block den gleichen Aktivitätsgradienten besitze. Die Seite der höheren Aktivität ist für die Blöcke 1 und 3 jeweils zur Mitte des Containers gerichtet ist. Dadurch wird die Abschirmung durch die weniger stark aktivierten Bereiche zusätzlich ausgenutzt. Die aus der Verteilung der Aktivität resultierende Dosisleistung ist in Abbildung 6.20 zu sehen.

Die Ergebnisse für die sechs Detektoren sind in Abbildung 6.21 dargestellt, nachdem sie für jeden Detektor individuell auf die geringste Auflösung normiert wurden. Es zeigt sich eindeutig, dass, je höher die Auflösung wird, die Ergebnisse sich immer weiter in eine Richtung entfernen. Die Werte nähern sich allerdings für die Detektoren 1,2 und 6 dem Wert 80 %, für die Detektoren 3 und 4 dem Wert 130 % und für Detektor 5 dem Wert 110 %.

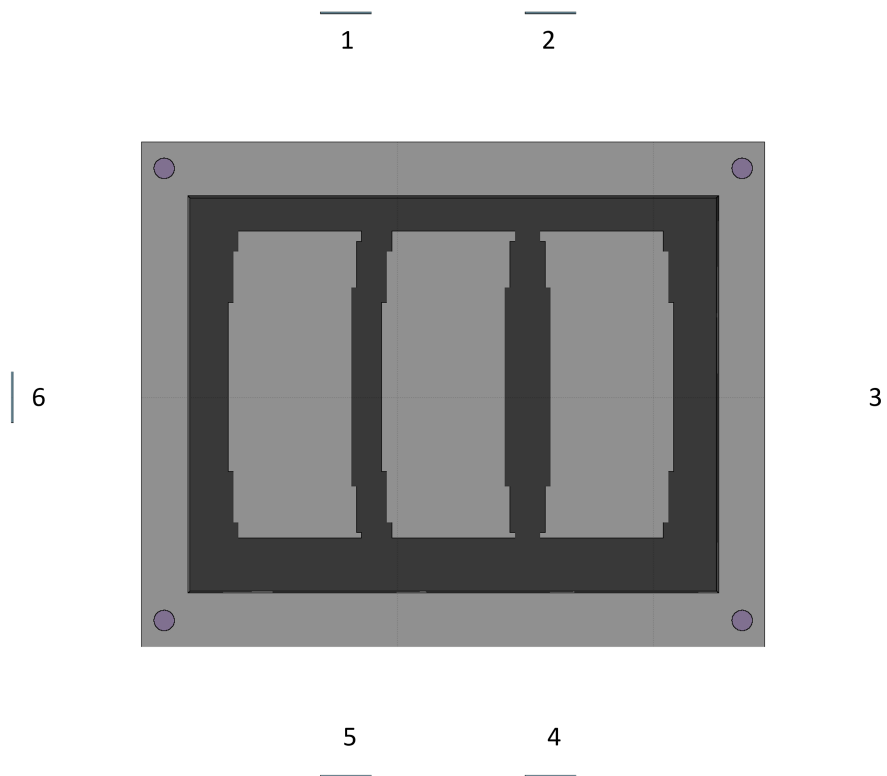


Abbildung 6.19: Die genutzte Geometrie mit Faktor $F = 0.5$ (Auflösung von 2 cm) und den darum platzierten Detektoren. Diese sind im Folgenden im Uhrzeigersinn oben links beginnend von 1 bis 6 durchnummeriert. Es ist zu beachten, dass die drei Betonblöcke über die Breite des Containers nicht vollkommen zentriert liegen, sodass die Detektoren 4 und 5 etwas weiter von den Betonblöcken entfernt sind als die Detektoren 1 und 2.

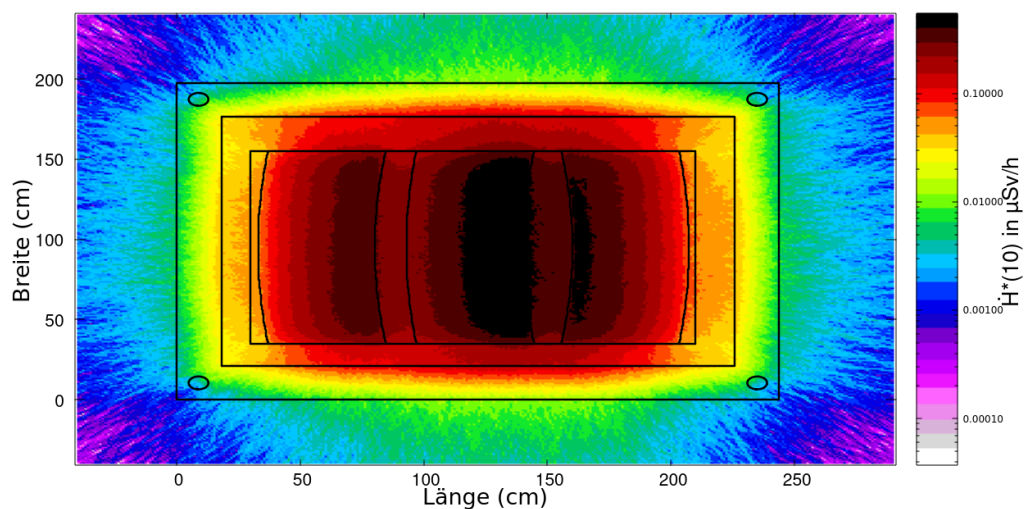


Abbildung 6.20: Die für die Simulation mit $F = 4$ (Auflösung von 0.25 cm) resultierende Dosisleistung. In dieser Darstellung sind die sechs außerhalb angeordneten Detektoren nicht zu sehen.

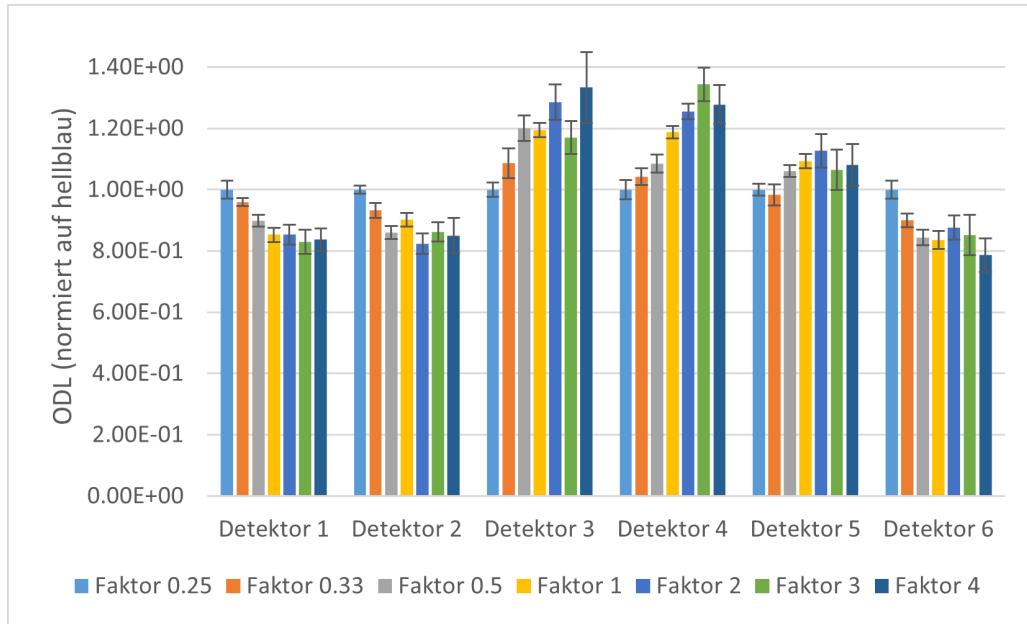


Abbildung 6.21: Darstellung der Simulationsergebnisse für die einzelnen Detektoren und die unterschiedlichen Auflösungen. Alle Werte wurden für den jeweiligen Detektor auf die Simulation mit Faktor $F = 0.25$ normiert.

Wird diese Näherung an diese Werte nun in Verbindung zur jeweils benötigten Simulationszeit (Abbildung 6.22) gesetzt, lässt sich ein Bereich für eine zu akzeptierende Präzision bei einer ausreichend geringen Simulationszeit finden. Dabei wird allerdings unterstellt, dass eine höhere Auflösung der Geometrie und der Aktivitätsverteilung immer zu präziseren Ergebnissen führt. Da dies in diesem Fall nicht durch Experimente überprüft werden kann, sind die folgenden Aussagen folglich mit Vorsicht zu betrachten.

Eine Verdoppelung der Auflösung ($F \rightarrow 2 \cdot F$) führt für $F = 1$ grob zu einer Verachtfachung der Simulationszeit. Für $F \leq 1$ ist der Gewinn an Präzision zu gering, als dass dieser die erhöhte Rechenzeit rechtfertigen würde. In diesem Fall sollte ein Faktor von $F = 0.5$, was einer Auflösung von 2 cm entspricht, oder $F = 1$ verwendet werden, da der Sprung von $F = 0.33$ zu $F = 0.5$ für jeden Detektor eine relevante Änderung darstellt und genutzt werden sollte. Bei der Auswahl der Auflösung ist allerdings zusätzlich zu beachten, wie die Aktivität verteilt ist. Ist die Änderung der Aktivität über große, in sich geschlossene Bereiche sehr gering, könnte eine geringere Auflösung bereits genügend präzise Ergebnisse liefern.

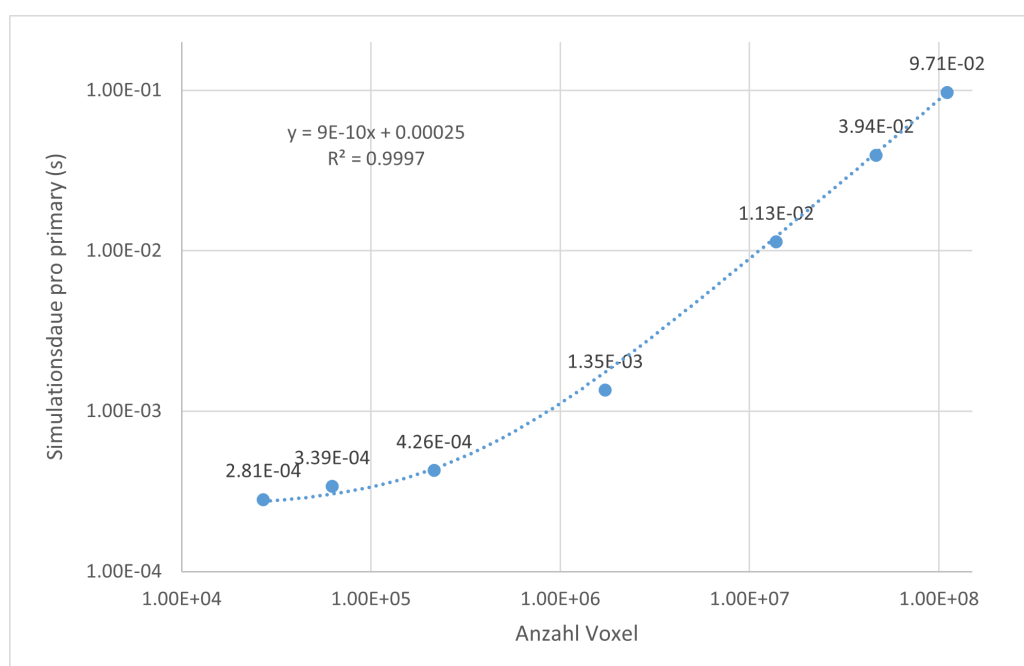


Abbildung 6.22: Der Verlauf der Simulationszeit in Abhängigkeit der Gesamtanzahl der Voxel bzw. der verschiedenen Auflösungen der Geometrie. Bei einer höheren Voxelanzahl ist auch die Auflösung erhöht.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Dosisleistungssimulationen für beliebige, durch Voxel dargestellte Geometrien mit einer direkt zugeordneten, orts aufgelösten Aktivitätsverteilung in FLUKA realisiert. Die Voxeldarstellung der Geometrie vereinfacht die automatisierte Einbindung von FLUKA-Simulationen in Programmabläufe.

Für eine erfolgreiche Simulation in FLUKA sind vor Beginn der Verarbeitung der Daten folgende wichtige Parameter festzulegen. Diese sind:

- **Voxelanzahl/-größe:** Bestimmt die Anzahl und die damit antiproportional zusammenhängende Größe der Voxel, durch die der gegebene Raumbereich beschrieben wird. Die Anzahl der Voxel bestimmt direkt auch die Anzahl der Aktivitätspunkte.
- **What(1) der TIME-CUT Karte:** Bestimmt die zu simulierende Zeit und bricht die Simulation für jedes primary nach dieser Zeit ab.

Tabelle 7.1: Tabelle der Parameter, die bei der FLUKA-Simulation angepasst werden können.

Parameter	Bereich	Auswirkung
Anzahl der Voxel	10^5 bis $4 \cdot 10^5$	Durch die Anzahl der Voxel wird die Auflösung der Struktur und durch die Kopplung mit den Aktivitätspunkten ebenfalls die Auflösung der Aktivitätsdichte in FLUKA bestimmt. Je höher der Wert, desto stärker steigt die Simulationsdauer (siehe Abbildung 4.3).
TIME-CUT	$x \cdot T_{1/2}$	Durch die Beschränkung der simulierten Zeit ist bei der Simulation von radioaktiven Zerfällen die Möglichkeit gegeben, den Zerfall auf das Mutternuklid zu beschränken. Dadurch können langlebige Tochternuklide aus der Simulation entfernt werden.
Beispiel: x für ^{152}Eu	10^7 bis 10^8	Die Zerfallskette ^{152}Gd bis ^{140}Ce wird aus der Simulation ausgeschlossen.

Außerdem wurde ein Interpolationsalgorithmus entwickelt und getestet. Mithilfe dieses Algorithmus können die vom Kraftwerksbetreiber bereitgestellten Aktivitätsdaten auf ein beliebiges Voxelraster übertragen werden.

Das entwickelte Interpolationsprogramm liefert sehr gute Ergebnisse für lineare Verteilungen. Die Werte weichen im Durchschnitt weniger als $2 \cdot 10^{-4} \%$ vom wahren Wert ab (Abschnitt 5.3). Im Rahmen dieser Arbeit wurden verschiedene Parameter definiert, anhand derer die Rechenzeit der Interpolation angepasst werden kann. Die Parameter sind im Folgenden sowie Tabelle 7.2 wiedergegeben und genauer erläutert:

- *r_start*: Bestimmt den Abstand, in dem zu Beginn der Tetraedersuche nach Datenpunkten gesucht wird.
- *r_incr*: Bestimmt den Faktor, mit dem der Parameter *r* vergrößert wird, wenn keine Tetraeder gefunden werden konnten.
- *maxpoints*: Bestimmt die maximale Anzahl von Punkten, die untersucht werden, um ein Tetraeder zu bilden.
- *cutoffdist*: Bestimmt den maximalen Wert von *r*.
- *cutoffvolume*: Bestimmt das Volumen des Tetraeders, welches als ausreichend klein angesehen und mit dessen Informationen die eigentliche Interpolation durchgeführt wird.

Tabelle 7.2: Die Parameter, die bei der Interpolation angepasst werden können. Die angegebenen Werte beziehen sich insbesondere auf den Fall

Parameter	Bereich	Auswirkung
r		r sollte etwas geringer gewählt werden, als der durchschnittliche Abstand zwischen den Datenpunkten.
r_incr	1.1 bis 1.5	Ein kleines r_incr führt dazu, dass häufiger nach neuen Punkten gesucht wird und potentiell aus den gleichen Punkten mehrfach Tetraeder bestimmt werden. Ein größerer Wert führt dazu, dass die Gefahr besteht, dass der optimale Wert für r übergangen wird, da durch die größeren Schritte mehr Punkte auf einmal in den untersuchten Raumbereich aufgenommen werden und mehr Tetraeder gebildet werden, bis ein passendes gefunden wird.
$maxpoints$	15 bis 30	Ein kleines $maxpoints$ führt dazu, dass die Suche nach einem Tetraeder schneller abgebrochen wird, da mit dieser Anzahl an Datenpunkten kein Tetraeder gefunden werden konnte. Für höhere Werte von $maxpoints$ verwendet der Algorithmus im Maximum mehr Punkte, um passende Tetraeder für den gesuchten Punkt zu finden, was zu einer erhöhten Rechenzeit führt.
$cutoffdist$	20 bis 60	Der Parameter $cutoffdist$ bestimmt die Entfernung, in der maximal nach Datenpunkten gesucht wird. Bei der Wahl sollte bedacht werden, bis in welche Entfernung die Datenpunkte eine realistische Korrelation zum zu interpolierenden Punkt aufweisen. Ein geringer Wert wirkt sich in früherem Abbrechen der Interpolation ohne Ergebnis aus, während ein höherer Wert den Algorithmus in einer höheren Entfernung zum gesuchten Punkt nach Datenpunkten suchen lässt, was zu einer Verlängerung der Berechnungszeit führt.
$cutoffvolume$	100 bis 500	$cutoffvolume$ führt zu einem einem frühzeitigen Abbruch der Suche, wenn für ein bestimmtes r ein als ausreichend klein eingeschätztes Tetraeder gefunden wurde. Dieses Volumen sollte am durchschnittlichen Abstand der Punkte orientiert abgeschätzt werden, zum Beispiel indem der Abstand der Datenpunkte als Seitenlänge eines Würfels oder Radius einer Kugel verwendet wird.

Mithilfe der optimierten FLUKA- und Interpolationsparameter konnten erfolgreich Simulationen von aktivierten Strukturen durchgeführt werden. Diese wurden mit realen Messwerten verglichen und überprüft. Der Vergleich von Messungen und Simulationen hat dabei gezeigt, dass die simulierten Ergebnisse in guter Übereinstimmung mit den realen Messwerten stehen, jedoch wird je nach Detailgrad (Genauigkeit der beschriebenen Umgebung) der Simulation der reale Messwert um bis zu 40% unterschätzt. Deshalb sollten die simulierten Ergebnisse im

Sinne der konservativen Abschätzung für Strahlenschutzbetrachtungen mit einem Faktor von 1.5 multipliziert werden.

Die im Rahmen dieser Arbeit erhaltenen Daten stellen somit einen wichtigen Beitrag für die Überprüfung der Dosisleistung im Außenraum von gepackten Konrad-Containern dar. Mithilfe der entwickelten Codes können in Zukunft Verpackungsprozesse optimiert und kosteneffizienter gestaltet werden. Sie bieten außerdem eine fundierte Grundlage, auf der für potentielle Weiterentwicklungen und Spezialisierungen aufgebaut werden kann.

Zum Beispiel könnte zur Vorbereitung der FLUKA-Simulationen die Definitionen der für die Simulation benötigten Materialien am Ende der Verpackungsplanung automatisiert erstellt werden und anschließend in die FLUKA-Eingabedatei integriert werden.

Eine weitere Möglichkeit wäre die Reduktion der Simulationszeit bei der Dosisleistungsabschätzung. Dies könnte erreicht werden, indem ein effizienterer binärer Auswahlalgorithmus[45] für den Ort des Zerfalls in der Subroutine „read_phase_position_file“ für die Source_Routine verwendet wird. Weiterhin könnte der Interpolationsalgorithmus auf mehreren CPU-Kernen parallel ausgeführt werden, was eine deutliche Reduktion der Laufzeit zur Folge hätte.

8. Die Ergebnisse im Kontext von DABKO

Das Ziel der Arbeit war die Untersuchung der Möglichkeit, im Rahmen des DABKO-Projekts durch Monte-Carlo Simulationen die Dosisleistung im Außenraum eines Konrad-Containers, der mit aktivierten Schnittlelementen eines biologischen Schildes bepackt ist, zu bestimmen. Diese Simulation soll in einem übergeordneten Algorithmus zur Reduktion der Anzahl der benötigten Konrad-Container aufgerufen werden können, um die Dosisleistungsgrenzwerte gemäß der Endlagerbestimmungen automatisiert zu überprüfen.

An diese Simulation sollen Geometrie- und Aktivitätsinformationen der Schnittlelemente übergeben werden müssen, auf Basis derer dann die Dosisleistung simuliert werden kann und eine Rückmeldung bezüglich der Einhaltung der Grenzwerte gegeben werden kann.

Teile dieses Vorhabens wurden in dieser Arbeit entwickelt und auf ihre Konsistenz mit der Realität überprüft. Damit die Berechnung automatisiert aufgerufen und durchgeführt werden kann, muss für die Betonbauteile innerhalb der Container auf die FLUKA-interne Geometrie verzichtet und auf eine Näherung mit Hilfe einer Voxeldarstellung zurückgegriffen werden (siehe 3.2.5). Durch die unterschiedlichen Neutronenflüsse an verschiedenen Positionen im biologischen Schild liegt eine inhomogene Aktivitätsverteilung in den Schnittlelementen vor, die ebenso in der Simulation dargestellt werden muss. Zu diesem Zweck wird jedem Voxel eine Punktquelle zugeordnet, die durch die Source-Routine und die Funktion `read-phase-position-file` mit einer eigenen Aktivität ausgestattet wird.

Mit dem Programm `VoxelActivity` ist die Übergabe der (Voxel-)Geometrieinformationen an FLUKA und der Aktivitätsdaten an die Source-Routine in einem Programm gebündelt. Nach der Verarbeitung durch dieses Programm kann die Simulation durchgeführt und die Ergebnisse weiterverarbeitet werden. Durch die aktuelle Beschränkung der Auflösung auf knapp 2 cm, wird es nötig sein, feinere Strukturen (wie zum Beispiel das Stahlblech des Containers) entweder zuvor in FLUKA händisch mit der FLUKA-internen Geometrie darzustellen oder bei der Definition der Voxel und deren Material durchschnittliche Zusammensetzungen zu verwenden. Eine Interpolation wurde entwickelt, die vor der Verarbeitung der Daten mittels `VoxelActivity` durchgeführt werden muss, da die Daten zur Aktivität im Biologischen Schild allerdings nicht für jeden in FLUKA benötigten Voxel vorliegen.

Die vorliegende Methode liefert die für DABKO nötige skalierbare Schnittstelle von komplexen Geometrien mit einer realitätsnahen Modellierung der Aktivitätsverteilung (DABKO Arbeitspaket 3.1[3]).

Der übergeordnete Algorithmus soll unter Windows-Betriebssystemen laufen, FLUKA aber kann nur unter Linux oder MacOS ausgeführt werden. Aus diesem Grund ist noch eine einheitliche Installation einer Linux-VM¹ und die Übergabe von Daten zwischen den beiden Systemen zu definieren bzw. entwickeln.

Im Zuge des Projektes DABKO könnte in Zukunft außerdem eine Überprüfung der Darstellung von inhomogenen Aktivitätsverteilungen durchgeführt werden. Dazu könnte ein Behälter so mit radioaktivem Material gefüllt werden, dass die Aktivitätsverteilung inklusive möglicher Hotspots bestmöglich bekannt ist und die Dosisleistung an verschiedenen Punkten um den Behälter bestimmt werden.

Für die Einbettung in den übergeordneten Algorithmus fehlen letztlich noch Skripte, die die Interpolation, die Verarbeitung mittels VoxelActivitiy, die Durchführung der FLUKA-Simulation und die Verarbeitung der FLUKA-Ergebnisse inklusive der Rückmeldung an den übergeordneten Algorithmus aus Windows heraus anstoßen. Die Verarbeitung und Auswertung der Simulationsergebnisse wurde noch händisch durchgeführt und wäre für die Verwendung im Algorithmus ebenfalls noch zu automatisieren.

¹Hierfür bietet sich das im Windows-Paket enthaltene [Windows-Subsystem für Linux \(WSL\)](#) an, für das eine eigene [FLUKA-Installationsanleitung](#) auf der FLUKA-Homepage zur Verfügung steht.

9. Anhang

9.1 Hardwarespezifikation

Alle Simulationen und Berechnungen wurden auf einem Rechner mit den folgenden Spezifikationen durchgeführt:

- Betriebssystem: Microsoft Windows 10 Enterprise 10.0.19045
- Prozessor:
 - Typ: Intel[®] Core[™] i7-11850H
 - Taktrate: 2.5 GHz
 - Maximale Boostfrequenz: 4.8 GHz
 - 8 Kerne, 16 Threads
- RAM: 64 GB

Die Ausführung der FLUKA-Simulationen und Python-Programme wurden in einer virtuellen Maschine mit den folgenden Eigenschaften ausgeführt:

- Betriebssystem: Ubuntu 20.04.6 LTS (Focal Fossa)
- Prozessor:
 - Typ: Intel[®] Core[™] i7-11850H
 - Taktrate: 2.5 GHz
 - Maximale Boostfrequenz: 4.8 GHz
 - 12 Threads
- RAM: 52 GB

Abbildungsverzeichnis

1.1	Prozessschema des Projektes DABKO.	8
2.1	Zerfallsschema von ^{60}Co [12]	11
2.2	Zerfallsschema von ^{133}Ba [15]	11
2.3	Zerfallsschema für ^{152}Eu [16]	12
3.1	Beispieleingabedatei für FLUKA.	19
3.2	Formatierte Version der an FLUKA übergebenen Voxelinformationen.	23
3.3	Endlagercontainer LC84 in FLUKA mit durch Voxel dargestelltem Betonblock.	25
3.4	Beispieldaten, wie sie von den Kraftwerksbetreibern geliefert würden. Die ursprünglich in Zylinderkoordinaten angegebenen Daten sind hier in kartesischen Koordinaten dargestellt. Je größer der Abstand vom Ursprung wird, desto weiter entfernen sich die Punkte auf einer Entfernung voneinander.	29
4.1	Abhängigkeit der Simulationszeit von der Anzahl der Voxel dargestellt mit logarithmisch skaliertes x-Achse. Das Unsicherheitsband für interpolierte Werte mit einer Breite der zweifachen Standardabweichung ist mit roten Linien dargestellt. Es sind keine Unsicherheitsbalken für die Messwerte eingezeichnet, da die Anzahl der Voxel exakt vorgegeben wurde und die Auflösung der Zeitmessung des PCs ungefähr ein Tausendstel des Messwertes beträgt und damit vernachlässigt werden kann [33].	33
4.2	Abhängigkeit der Simulationszeit von der Anzahl der Punkte der Aktivitäten. Die Simulationszeit für einen primary steigt linear mit der Anzahl der Punkte. Es sind keine Unsicherheitsbalken für die Messwerte eingezeichnet, da die Anzahl der Punkte exakt vorgegeben wurde und die Auflösung der Zeitmessung des PCs ungefähr ein Tausendstel des Messwertes beträgt und damit vernachlässigt werden kann [33].	35

4.3	Kombinierte Darstellung der Ergebnisse zur Abhängigkeit der Simulationszeit von der Anzahl der und der Aktivitätspunkte. Simulationszeit auf der x-Achse, Anzahl der Voxel auf der linken y-Achse, Anzahl der Aktivitätspunkte auf der rechten y-Achse. Die dargestellten Kurven entsprechen den in den Abbildungen 4.2 und 4.1 grün dargestellten Kurven.	36
4.4	Zoom auf den Schnittpunkt aus Abbildung 4.3 zur klareren Darstellung. Die Achsen sind hier linear skaliert.	36
5.1	Visualisierung des 1D Problems. Die Punkte A und B sind bekannt, für P mit $x_{\bar{A}} <= x_{\bar{P}} <= x_{\bar{B}}$ ist der Funktionswert $f_{\bar{P}}$ unbekannt.	40
5.2	Visualisierung des 2D Problems. Die Punkte A , B und C sind bekannt, für den Punkt P , der im Dreieck ABC liegt, ist der Funktionswert f_P unbekannt. Die dritte Dimension des Funktionswertes f ist in dieser Darstellung nicht zu sehen.	41
5.3	Projektion der Abbildung 5.2 in die xf -Ebene. Es sind die Funktionswerte an den Punkten A , B und C zu erkennen, die eine schiefe Ebene im 3-dimensionalen Raum der Koordinaten x , y und f aufspannen. Die Abszisse gibt den x-Wert, die Ordinatenachse gibt in dieser Darstellung den Funktionswert, der den Punkten zugeordnet wird, an.	42
5.4	Projektion der Abbildung 5.2 in die yf -Ebene. Es sind die Funktionswerte an den Punkten A , B und C zu erkennen, die eine schiefe Ebene im 3-dimensionalen Raum der Koordinaten x , y und f aufspannen. Die Abszisse gibt den y-Wert, Die Ordinatenachse gibt in dieser Darstellung den Funktionswert, der den Punkten zugeordnet wird, an.	42
5.5	Ein allgemeines Tetraeder mit den Punkten A , B , C und D . Die Bezeichnungen der Strecken sind $AB = a$, $AC = b$, $BC = c$, $AD = d$, $BD = e$ und $CD = f$. Die Punkte O , P , Q und S werden hier nicht benötigt [39, 40]	47
5.6	Eine beispielhafte Datengrundlage mit 500 Punkten.	48
5.7	Eine beispielhafte Datengrundlage mit 5000 Punkten.	49
5.8	Dargestellt ist die Interpolationsdauer in Abhängigkeit der durchschnittlichen Dichte von bekannten Punkten im Raum.	52
6.1	Die Darstellung zeigt die PTB-bauartgeprüfte Energieabhängigkeit des Ansprechvermögens der verwendeten Szintillatorsonde 6150AD-b/E bezüglich der Größe $\dot{H}^*(10)$. Die Werte sind auf das Ansprechvermögen für ^{137}Cs bei senkrechter Einstrahlung (Vorzugsrichtung) normiert[41].	54
6.2	Die Darstellung zeigt die Richtungsabhängigkeit des Ansprechvermögens der verwendeten Szintillatorsonde 6150AD-b/E bezüglich der Größe $\dot{H}^*(10)$. Die Werte gehören zu einer mittleren Energie von 25 keV und sind auf das Ansprechvermögen für ^{137}Cs bei senkrechter Einstrahlung (Vorzugsrichtung) normiert[41].	54

6.3	Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung gemäß der Faustformel 6.2 und der Simulation für die ^{60}Co Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt. Die Daten für Co-60-27 (20 cm) sind nicht dargestellt, da sie unterhalb des geeichten Messbereichs liegen.	59
6.4	Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung und der Simulation für die ^{137}Cs Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt. Die Daten für Cs-137-37 (20 cm) sind nicht dargestellt, da sie unterhalb des geeichten Messbereichs liegen.	60
6.5	Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung und der Simulation für die ^{152}Eu Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt. Die Messung für eine Entfernung von 20 cm liegt außerhalb des Nenngebrauchsbereichs der Sonde und kann nur als Indiz, nicht aber als belastbares Ergebnis angesehen werden. . .	60
6.6	Die Ergebnisse der Messung, der Berechnung und der Simulation für die ^{241}Am Präparate im Vergleich. Die Ergebnisse sind in $\frac{\mu\text{Sv}}{\text{h}}$ dargestellt.	61
6.7	Für die Versuche mit mehreren Quellen verwendete Acrylplatte. Per Hand aufgetragenen Zahlen auf dem gelben Untergrund geben die für die folgende Beschreibung verwendete Nummerierung an. Auf dem Kopf stehende Zahlen geben den Abstand zur Mitte am unteren Ende der Platte (rote Markierung) an. . . .	63
6.8	Die in FLUKA genutzte Geometrie als Draufsicht mit belegten Löchern 6,12,13,19,20 und 26. Die Auflösung der Geometrie beträgt 0.25 cm.	65
6.9	Die in FLUKA genutzte Geometrie als Seitenansicht mit belegten Löchern 6,12,13,19,20 und 26. Die hellen Flecken an der rechten Stütze sowie die unterschiedlichen Farben der blauen Blöcke sind durch die Bleuchtung und Darstellung in flair bedingt. Die Auflösung der Geometrie beträgt 0.25 cm.	65
6.10	Gegenüberstellung Dosisleistungsmessung und -Simulation der variablen Geometrie.	66
6.11	Die Simulationsergebnisse sind hier auf die Messwerte normiert dargestellt. Die Unsicherheitsbalken liegen zwischen 20 und 30 % mit Ausnahme von Messung 5 (50 %). Es zeigt sich insgesamt eine Unterschätzung um 30 %.	67
6.12	Die genutzte Geometrie in der Draufsicht für die Simulation mit der FLUKA eigenen Volumenquelle. Die beiden äußeren Ringe sind die Detektoren und der innere Kreis ist das Fass.	69
6.13	Die genutzte Voxelgeometrie in der Draufsicht für die Simulation. Die beiden äußeren Ringe sind die Detektoren und der innere Kreis ist erneut das Fass. Das Quadrat um das Fass ist der Stahlmantel des Fasses. Die Auflösung beträgt 1 cm.	70
6.14	Die genutzte Voxelgeometrie in der Draufsicht für die Simulation. Die beiden äußeren Ringe sind die Detektoren und der innere Kreis ist das Fass. Die Auflösung beträgt 1 cm.	71

6.15 Vergleich der $H^*(10)$ -Ergebnisse der VOXEL-Geometrie und der FLUKA-eigenen Volumenquelle für die Simulation des Abfallfasses.	72
6.16 Vergleich der $H^*(10)$ -Ergebnisse der FLUKA-Volumenquelle, der VOXEL-Quelle und des Messergebnisses der KTE. Zu beachten ist, dass nur für ^{60}Co , ^{137}Cs , ^{154}Eu und ^{241}Am die gegebenen Daten oberhalb der charakteristischen Grenze lagen und in diese „Gesamtdosisleistung“ eingeflossen sind. Da es für die Unsicherheiten zur Messung der KTE keine Angaben gibt, wurden Unsicherheitsbalken für 10 % eingefügt.	73
6.17 Darstellung der Ortsdosisleistung um den LC84 Container. Die ODL wurde hier über die Länge (-1,245) des Containers gemittelt.	74
6.18 Darstellung der Ortsdosisleistung um den LC84 Container. Die ODL wurde hier über die Breite (-1,200) des Containers gemittelt.	75
6.19 Die genutzte Geometrie mit Faktor $F = 0.5$ (Auflösung von 2 cm) und den darum platzierten Detektoren. Diese sind im Folgenden im Uhrzeigersinn oben links beginnend von 1 bis 6 durchnummeriert. Es ist zu beachten, dass die drei Betonblöcke über die Breite des Containers nicht vollkommen zentriert liegen, sodass die Detektoren 4 und 5 etwas weiter von den Betonblöcken entfernt sind als die Detektoren 1 und 2.	76
6.20 Die für die Simulation mit $F = 4$ (Auflösung von 0.25 cm) resultierende Dosisleistung. In dieser Darstellung sind die sechs außerhalb angeordneten Detektoren nicht zu sehen.	76
6.21 Darstellung der Simulationsergebnisse für die einzelnen Detektoren und die unterschiedlichen Auflösungen. Alle Werte wurden für den jeweiligen Detektor auf die Simulation mit Faktor $F = 0.25$ normiert.	77
6.22 Der Verlauf der Simulationszeit in Abhängigkeit der Gesamtanzahl der Voxel bzw. der verschiedenen Auflösungen der Geometrie. Bei einer höheren Voxelanzahl ist auch die Auflösung erhöht.	78

Tabellenverzeichnis

2.1	Definition des Qualitätsfaktors Q als Funktion des Energieübertragungsvermögens $L[17]$	13
4.1	Ergebnisse der Simulationen mit konstanter Punktanzahl und zunehmender Voxelanzahl.	32
4.2	Funktionsparameter für die Anpassung an Funktion 4.1. Das Bestimmtheitsmaß r^2 beträgt 97.83 %.	32
4.3	Ergebnisse der Simulationen mit konstanter Voxelzahl und zunehmender Anzahl von Aktivitätspunkten. Der angegebene Abstand liegt zwischen den einzelnen Aktivitätspunkten.	34
4.4	Anpassung einer quadratischen Funktion an den Zusammenhang: Rechenzeit-Aktivitätspunktdichte. Das Bestimmtheitsmaß r^2 beträgt 101 %.	34
5.1	Ergebnisse der Untersuchung der Residuen der Interpolation. „Daten“ bezeichnet die Anzahl der gegebenen Aktivitätspunkte als Basis für die Interpolation. „Interpolationspunkte“ bezeichnet die Anzahl der Punkte, die mit der Interpolation bestimmt werden müssen. Die Darstellung der Zahlen ist der Übersicht halber einheitlich gestaltet.	50
5.3	Funktionsparameter für die Anpassung der Funktion 5.14. Das Bestimmtheitsmaß r^2 beträgt 112 %.	51
5.2	Messwerte zur Interpolationsdauer in Abhängigkeit der Dichte der Eingangsdaten	51
6.1	Punktstrahler-Präparate für den Funktionstest des radioaktiven Zerfalls in FLUKA	56
6.2	Ergebnisse der Dosisleistungsmessungen der Punktstrahler. Die Unsicherheit ist die kombinierte Unsicherheit aus der möglichen energieabhängigen Abweichung und der statistischen Unsicherheit der Messung.	57

6.3	Ergebnisse der $H^*(10)$ Simulation der Punktstrahler. Die angegebenen, kombinierten Unsicherheiten wurden aus der von FLUKA angegebenen statistische Unsicherheit der Ergebnisse und einer angenommenen Unsicherheit von 5% bezüglich der angegebenen Aktivität für das Präparat ermittelt.	58
6.4	Verwendete Stammlösung zur Befüllung der Röhren.	63
6.5	Die durchgeführten Messungen mit einem „E“ an derjenigen Position, die für die Messung mit einer Probe belegt wurden.	64
6.6	Die Ergebnisse der Messungen mit den Proben im Acrylbrett.	64
6.7	Die Ergebnisse der Simulationen. Die Unsicherheiten wurden als kombinierte Unsicherheiten aus den statistischen Unsicherheiten laut FLUKA und einer angenommenen Unsicherheit von 5% bestimmt.	66
6.8	Dimensionen des Abfallfasses	68
6.9	Die Dosisleistungsmesswerte der KTE für das Abfallfass	68
6.10	Die Ergebnisse der Simulationen für das Fass mit radioaktiven Abfällen mit der Volumenquelle	69
6.11	Die Ergebnisse der Simulationen mit Voxelquelle für das Fass mit radioaktiven Abfällen.	71
7.1	Tabelle der Parameter, die bei der FLUKA-Simulation angepasst werden können.	79
7.2	Die Parameter, die bei der Interpolation angepasst werden können. Die angegebenen Werte beziehen sich insbesondere auf den Fall	81
9.1	Die Aktivitäten der verschiedenen Nuklide im Abfallfass wurden unter der Annahme bestimmt, dass diese homogen verteilt seien. Dadurch kann es zu Über- oder Unterschätzungen dieser gekommen sein. Die „Nachweisgrenzen [A^* wurden] durch Überblendung mit [einer] Lognormalverteilung“ berechnet[46].	93

9.2 Zusätzliche Tabellen

Tabelle 9.1: Die Aktivitäten der verschiedenen Nuklide im Abfallfass wurden unter der Annahme bestimmt, dass diese homogen verteilt seien. Dadurch kann es zu Über- oder Unterschätzungen dieser gekommen sein. Die „Nachweisgrenzen [A^* wurden] durch Überblendung mit [einer] Lognormalverteilung“ berechnet[46].

Nuklid	Aktivität (Bq/Fass)	A^* (Bq/Fass)	2σ -Umgebung (%)	$I_{\gamma, \text{Submersion}}$ (Sv m ² /(s Bq))
⁶⁰ Co	$6.6 \cdot 10^6$	$3.8 \cdot 10^4$	41.7	$8.0 \cdot 10^{-16}$
¹³⁴ Cs	$<9.9 \cdot 10^4$	$9.9 \cdot 10^4$		$5.2 \cdot 10^{-16}$
¹³⁷ Cs	$2.0 \cdot 10^8$	$2.8 \cdot 10^5$	41.6	$1.1 \cdot 10^{-16}$
²¹² Pb	$<5.7 \cdot 10^5$	$5.7 \cdot 10^5$		$4.8 \cdot 10^{-17}$
²¹² Bi	$<1.8 \cdot 10^5$	$1.8 \cdot 10^5$		$2.4 \cdot 10^{-16}$
²¹⁴ Pb	$<3.9 \cdot 10^5$	$3.9 \cdot 10^5$		$1.2 \cdot 10^{-16}$
²¹⁴ Bi	$<1.7 \cdot 10^4$	$1.7 \cdot 10^4$		$4.6 \cdot 10^{-16}$
²²⁸ Ac	$<9.6 \cdot 10^4$	$9.6 \cdot 10^4$		$3.0 \cdot 10^{-16}$
^{234m} Pa	$<1.7 \cdot 10^7$	$1.7 \cdot 10^7$		$3.6 \cdot 10^{-18}$
²³⁵ U	$<9.2 \cdot 10^5$	$9.2 \cdot 10^5$		$4.3 \cdot 10^{-17}$
¹⁵² Eu	$<1.3 \cdot 10^4$	$1.3 \cdot 10^4$		$3.6 \cdot 10^{-16}$
¹⁵⁴ Eu	$2.1 \cdot 10^5$	$1.1 \cdot 10^5$	62.0	$3.9 \cdot 10^{-16}$
²⁴¹ Am	$1.6 \cdot 10^7$	$1.1 \cdot 10^7$	190.0	$8.4 \cdot 10^{-18}$
⁵⁴ Mn	$<4.2 \cdot 10^4$	$4.2 \cdot 10^4$		$2.8 \cdot 10^{-16}$

Literaturverzeichnis

- [1] BUNDESGESELLSCHAFT FÜR ENDLAGERUNG (Hrsg.): *Abfallarten und Entstehung von radioaktiven Abfällen*. <https://www.bge.de/de/abfaelle/abfallarten-und-entstehung/>. Version: 24.07.2023
- [2] BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG UND FORSCHUNG ; BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG UND FORSCHUNG (Hrsg.): *Bekanntmachung: Richtlinie zur Förderung von Projekten zum Förderkonzept FORKA – Forschung für den Rückbau kerntechnischer Anlagen innerhalb des Rahmenprogramms „Erforschung von Universum und Materie – ErUM“*, Bundesanzeiger vom 25.06.2021. https://www.bmbf.de/bmbf/shareddocs/bekanntmachungen/de/2021/06/3681_bekanntmachung.html. Version: 14.06.2021
- [3] TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT, TÜV SÜD ET,AFRY: *Digital optimierte Schnitt- und Verpackungsplanung von aktivierten Betonstrukturen in Konrad-Container beim Rückbau kerntechnischer Anlagen: Projektantrag für Verbundvorhaben*
- [4] AHDIDA, C. ; BOZZATO, D. ; CALZOLARI, D. ; CERUTTI, F. ; CHARITONIDIS, N. ; CIMMINO, A. ; CORONETTI, A. ; D’ALESSANDRO, G. L. ; DONADON SERVELLE, A. ; ESPOSITO, L. S. ; FROESCHL, R. ; GARCÍA ALÍA, R. ; GERBERSHAGEN, A. ; GILARDONI, S. ; HORVÁTH, D. ; HUGO, G. ; INFANTINO, A. ; KOUSKOURA, V. ; LECHNER, A. ; LEFEBVRE, B. ; LERNER, G. ; MAGISTRIS, M. ; MANOUSOS, A. ; MORYC, G. ; OGALLAR RUIZ, F. ; POZZI, F. ; PRELIPCEAN, D. ; ROESLER, S. ; ROSSI, R. ; SABATÉ GILARTE, M. ; SALVAT PUJOL, F. ; SCHOOF, P. ; STRÁNSKÝ, V. ; THEIS, C. ; TSINGANIS, A. ; VERSACI, R. ; VLACHOUDIS, V. ; WAETS, A. ; WIDORSKI, M.: New Capabilities of the FLUKA Multi-Purpose Code. In: *Frontiers in Physics* 9 (2022), 705. <http://dx.doi.org/10.3389/fphy.2021.788253>. – DOI 10.3389/fphy.2021.788253. – ISSN 2296–424X
- [5] BATTISTONI, Giuseppe ; BOEHLEN, Till ; CERUTTI, Francesco ; CHIN, Pik W. ; ESPOSITO, Luigi S. ; FASSÒ, Alberto ; FERRARI, Alfredo ; LECHNER, Anton ; EMPL, Anton ; MAIRANI, Andrea ; MEREGHETTI, Alessio ; ORTEGA, Pablo G. ; RANFT, Johannes ; ROESLER, Stefan ; SALA, Paola R. ; VLACHOUDIS, Vasilis ; SMIRNOV, George:

- Overview of the FLUKA code. In: *Annals of Nuclear Energy* 82 (2015), 10–18. <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2014.11.007>. – DOI 10.1016/j.anucene.2014.11.007. – ISSN 0306–4549
- [6] PETER BRENNECKE (Hrsg.): *Anforderungen an endzulagernde radioaktive Abfälle: (Endlagerungsbedingungen, Stand: Dezember 2014) - Endlager Konrad*. https://www.bge.de/fileadmin/user_upload/Konrad/Wesentliche_Unterlagen/Endlagerungsbedingungen_Konrad/Endlagerungsbedingungen_Konrad_Stand_12_2014.pdf
- [7] MAYER-KUCKUK, Theo: *Kernphysik*. 7., überarbeitete und erweiterte Auflage. Wiesbaden : Vieweg+Teubner Verlag, 2002 (Springer eBook Collection Life Science and Basic Disciplines). <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-84876-5>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-84876-5>. – ISBN 9783322848765
- [8] NUCLEONICA (Hrsg.): *Karlsruhe Nuclide Chart Online: KNCO++*. <https://nucleonica.com/Application/KNCOPlus.aspx>. Version: 13.07.2023
- [9] *Livechart - Table of Nuclides: Nuclear structure and decay data*. <https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html>. Version: 06.06.2023
- [10] *Meßanleitung für die Überwachung der Radioaktivität in der Umwelt und zur Erfassung radioaktiver Emissionen aus kerntechnischen Anlagen*. Stuttgart : G. Fischer, 2001. <http://dx.doi.org/G{ü}nter>. <http://dx.doi.org/G{ü}nter>. – ISBN 3437114565
- [11] THERMO-TECHNIK MÜLLER GMBH (Hrsg.): *Vergleichstabelle von verschiedenen Stahl-sorten: nach Werkstoff-Nummern*. https://www.tetec-mueller.de/Dokumente/Pdf/Common/d/Material1_d.pdf. Version: 2000
- [12] NUCLEONICA ; NUCLEONICA (Hrsg.): *Reduced Decay Schemes: 27 Co 60*. <https://nucleonica.com/Application/ReducedDecaySchemes/Co60.pdf>. Version: 22.03.2022
- [13] KURT WALZ, Gerd W.: *Beton als Strahlenschutz für Kernreaktoren*. Köln und Opladen : Westdeutscher Verlag, 1961 <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-663-04749-0>. – ISBN 978–3–663–04749–0
- [14] PONTAX GMBH ; PONTAX GMBH (Hrsg.): *Strahlenschutzbeton - Spezialzuschläge: Baryt (BaSo₄, Schwerspat)*. <https://www.pontax.de/zuschlaege-strahlenschutzbeton-ballastbeton/baryt-schwerspat.html>
- [15] DONNELLY, D. P. ; REIDY, J. J. ; WIEDENBECK, M. L.: High-Resolution Gamma-Ray Spectroscopic Study of the Decay Ba133 → Cs133. In: *Physical Review* 173 (1968), Nr. 4, S. 1192–1201. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.173.1192>. – DOI 10.1103/PhysRev.173.1192

- [16] SCHNEIDER, Werner: Contributions to the decay of Eu152. In: *Nuclear Physics* 21 (1960), 55–65. [http://dx.doi.org/10.1016/0029-5582\(60\)90031-6](http://dx.doi.org/10.1016/0029-5582(60)90031-6). – DOI 10.1016/0029-5582(60)90031-6. – ISSN 0029-5582
- [17] BUNDESMINISTERIUM DER JUSTIZ: *Verordnung zum Schutz vor der schädlichen Wirkung ionisierender Strahlung: Strahlenschutzverordnung - StrlSchV*. https://www.gesetze-im-internet.de/strlschv_2018/BJNR203600018.html
- [18] VOGT, Hans-Gerrit ; VAHLBRUCH, Jan-Willem: *Grundzüge des praktischen Strahlenschutzes*. 7., überarbeitete Auflage. München : Hanser, 2019
- [19] BUNDESAMT FÜR STRAHLENSCHUTZ (Hrsg.): *Natürliche Strahlung in Deutschland*. https://www.bfs.de/DE/themen/ion/umwelt/natuerliche-strahlung/natuerliche-strahlung_node.html. Version: 18.05.2022
- [20] BUNDESMINISTERIUM DER JUSTIZ: *Gesetz zum Schutz vor der schädlichen Wirkung ionisierender Strahlung: Strahlenschutzgesetz - StrlSchG*. <https://www.gesetze-im-internet.de/strlschg/BJNR196610017.html#BJNR196610017BJNG000100000>
- [21] BUNDESMINISTERIUM DER JUSTIZ: *Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren: Atomgesetz - AtG*. <https://www.gesetze-im-internet.de/atg/BJNR008140959.html>. Version: 04.12.2022
- [22] BUNDESAMT FÜR STRAHLENSCHUTZ (Hrsg.): *ODL-Tagesmittelwerte 2022*. <https://odlinfo.bfs.de/ODL/DE/service/downloadbereich/downloadbereich.html>. Version: 2022
- [23] VASSILIEV, Oleg N.: *Monte Carlo Methods for Radiation Transport: Fundamentals and Advanced Topics*. Cham : Springer International Publishing, 2016 (Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering Ser). <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-44141-2>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-44141-2>. – ISBN 978-3-319-44140-5
- [24] FLUKA TEAM ; CERN (Hrsg.): *History of FLUKA*. <http://www.fluka.org/fluka.php?id=history>. Version: 2008
- [25] VLACHOUDIS V CERN: FLAIR: A POWERFUL BUT USER FRIENDLY GRAPHICAL INTERFACE FOR FLUKA, 2009
- [26] ICRP: *Conversion Coefficients for use in Radiological Protection against External Radiation: ICRP Publication 74. Ann. ICRP 26 (3-4)*. <https://www.icrp.org/publication.asp?id=ICRP%20Publication%2074>

- [27] PARODI, K. ; FERRARI, A. ; SOMMERER, F. ; PAGANETTI, H.: Clinical CT-based calculations of dose and positron emitter distributions in proton therapy using the FLUKA Monte Carlo code. In: *Physics in medicine and biology* 52 (2007), Nr. 12, S. 3369–3387. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/52/12/004>. – DOI 10.1088/0031-9155/52/12/004. – ISSN 0031-9155
- [28] BOTTA, F. ; MAIRANI, A. ; HOBBS, R. F. ; VERGARA GIL, A. ; PACILIO, M. ; PARODI, K. ; CREMONESI, M. ; COCA PÉREZ, M. A. ; DI DIA, A. ; FERRARI, M. ; GUERRIERO, F. ; BATTISTONI, G. ; PEDROLI, G. ; PAGANELLI, G. ; TORRES AROCHE, L. A. ; SGOUROS, G.: Use of the FLUKA Monte Carlo code for 3D patient-specific dosimetry on PET-CT and SPECT-CT images. In: *Physics in medicine and biology* 58 (2013), Nr. 22, S. 8099–8120. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/58/22/8099>. – DOI 10.1088/0031-9155/58/22/8099. – ISSN 0031-9155
- [29] AXPO POWER AG BADEN: *Technischer Bericht TB-094-KG20011: NAGRA, Herstellungsanleitung Abschirmbehälter LC-84-Plus*
- [30] JAVIER ORIVE SOTO: *Programmcodes für "read_phase_position_file": E-Mail*. September 2022
- [31] THOMAS WILLIAMS, COLIN KELLEY UND VIELE WEITERE: *Gnuplot*. <https://sourceforge.net/projects/gnuplot/files/gnuplot/5.4.8/>. Version: 2023
- [32] WOLBERG, John: *Data Analysis Using the Method of Least Squares: Extracting the Most Information from Experiments*. 1st ed. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin / Heidelberg, 2006. <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-31720-1>. <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-31720-1>. – ISBN 3-540-25674-1
- [33] AMISAX: *How to get system time with microsecond Resolution*. <https://unix.stackexchange.com/questions/204796/how-to-get-system-time-with-microsecond-resolution>. Version: 2015
- [34] SCHWARZ, Hans R.: *Numerische Mathematik*. 8., aktualisierte Auflage. Wiesbaden : Vieweg+Teubner Verlag, 2011 (SpringerLink Bücher). <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-8166-3>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-8166-3>. – ISBN 9783834881663
- [35] CASPER DA COSTA-LUIS ; STEPHEN KARL LARROQUE ; KYLE ALTENDORF ; HADRIEN MARY ; RICHARDSHERIDAN ; MIKHAIL KOROBV ; NOAM RAPHAEL ; IVAN IVANOV ; MARCEL BARGULL ; NISHANT RODRIGUES ; GUANGSHUO CHEN ; ANTONY LEE ; CHARLES NEWEY ; CRAZYPYTHON ; JC ; MARTIN ZUGNONI ; MATTHEW D. PAGEL ; MJSTEVENS777 ; MIKHAIL DEKTYAREV ; ALEX ROTHBERG ; ALEXANDER PLAVIN ; DANIEL PANTELEIT ; FABIAN DILL ; FICHTEFOLL ; GREGOR STURM ; HEOHEO ; HUGO

- VAN KEMENADE ; JACK McCRACKEN ; MAPLECCC ; MAX NORDLUND: *tqdm: A fast, Extensible Progress Bar for Python and CLI*
- [36] THOMAS A CASWELL ; ANTONY LEE ; MICHAEL DROETTBOOM ; ELLIOTT SALES DE ANDRADE ; TIM HOFFMANN ; JODY KLYMAK ; JOHN HUNTER ; ERIC FIRING ; DAVID STANSBY ; NELLE VAROQUAUX ; JENS HEDEGAARD NIELSEN ; BENJAMIN ROOT ; RYAN MAY ; PHIL ELSON ; JOUNI K. SEPPÄNEN ; DARREN DALE ; JAE-JOON LEE ; DAMON McDOUGALL ; ANDREW STRAW ; PAUL HOBSON ; HANNAH ; OSCAR GUSTAFSSON ; GREG LUCAS ; CHRISTOPH GOHLKE ; ADRIEN F. VINCENT ; TONY S YU ; ERIC MA ; STEVEN SILVESTER ; CHARLIE MOAD ; NIKITA KNIAZEV: *matplotlib/matplotlib: REL: v3.6.0*
- [37] VIRTANEN, Pauli ; GOMMERS, Ralf ; OLIPHANT, Travis E. ; HABERLAND, Matt ; REDDY, Tyler ; COURNAPEAU, David ; BUROVSKI, Evgeni ; PETERSON, Pearu ; WECKESSER, Warren ; BRIGHT, Jonathan ; VAN DER WALT, Stéfan J. ; BRETT, Matthew ; WILSON, Joshua ; MILLMAN, K. J. ; MAYOROV, Nikolay ; NELSON, Andrew R. J. ; JONES, Eric ; KERN, Robert ; LARSON, Eric ; CAREY, C. J. ; POLAT, İlhan ; FENG, Yu ; MOORE, Eric W. ; VANDERPLAS, Jake ; LAXALDE, Denis ; PERKTOLD, Josef ; CIMRMAN, Robert ; HENRIKSEN, Ian ; QUINTERO, E. A. ; HARRIS, Charles R. ; ARCHIBALD, Anne M. ; RIBEIRO, Antônio H. ; PEDREGOSA, Fabian ; VAN MULBREGT, Paul: SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. In: *Nature methods* 17 (2020), Nr. 3, S. 261–272. <http://dx.doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>. – DOI 10.1038/s41592-019-0686-2
- [38] TOMNORWAY: *How to check whether the point is in the tetrahedron or not?* <https://stackoverflow.com/questions/25179693/how-to-check-whether-the-point-is-in-the-tetrahedron-or-not>. Version: 2014
- [39] LEONARD EULER: *Leonardi Euleri Opera Omnia: Commentationes Geometricae: Volumen Primum*. Bd. 26. Lausanne : Birkhäuser Basel, 1953
- [40] LEONARD EULER: *PROOF OF SOME NOTABLE PROPERTIES WITH WHICH SOLIDS ENCLOSED BY PLANE FACES ARE ENDOWED: Translated by Christopher Francese and David Richeson*. 22.11.2004 <http://eulerarchive.maa.org/docs/translations/E231.pdf>
- [41] AUTOMESS AUTOMATION UND MESSTECHNIK GMBH: *Szintillatorsonde 6150AD-b: Gebrauchsanweisung für die Szintillatorsonden 6150AD-b, 6150AD-b/H, 6150AD-b/E*
- [42] AUTOMESS AUTOMATION UND MESSTECHNIK GMBH: *Dosisleistungsmesser 6150AD: Gebrauchsanweisung für den Dosisleistungsmesser 6150AD in folgenden Ausführungen: 6150AD1 bis 6150AD6, 6150AD1/H bis 6150AD6/H, 6150AD1/E bis 6150AD6/E*. <https://www.manualslib.de/manual/376215/Automess-6150Ad1.html>

- [43] BRUGGER, M. ; FERRARI, A. ; ROESLER, S. ; ULRICI, L.: Validation of the FLUKA Monte Carlo code for predicting induced radioactivity at high-energy accelerators. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 562 (2006), Nr. 2, 814–818. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2006.02.062>. – DOI 10.1016/j.nima.2006.02.062. – ISSN 0168–9002
- [44] SOMMERER, Florian ; PARODI, Katia ; FERRARI, Alfredo ; POLJANC, Karin ; ENGHARDT, Wolfgang ; AIGINGER, Hannes: Investigating the accuracy of the FLUKA code for transport of therapeutic ion beams in matter. In: *Physics in medicine and biology* 51 (2006), Nr. 17, S. 4385–4398. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/51/17/017>. – DOI 10.1088/0031-9155/51/17/017. – ISSN 0031–9155
- [45] VÖCKING, Berthold (Hrsg.) ; ALT, Helmut (Hrsg.) ; DIETZFELBINGER, Martin (Hrsg.) ; REISCHUK, Rüdiger (Hrsg.) ; SCHEIDELER, Christian (Hrsg.) ; VOLLMER, Heribert (Hrsg.) ; WAGNER, Dorothea (Hrsg.): *Taschenbuch der Algorithmen*. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2008 (eXamen.press). <http://dx.doi.org/Helmut>. <http://dx.doi.org/Helmut>. – ISBN 9783540763949
- [46] KERNTECHNISCHE ENTSORGUNG KARLSRUHE: *Fassmessreport Anlage XS08: Fassnummer: MS038654*

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Clemens Walther, für die Möglichkeit, diese anwendungsbezogene Masterarbeit zu schreiben und so zusätzlich zur wissenschaftlichen Arbeit bereits einen kleinen Einblick in die Praxis des kerntechnischen Rückbaus zu erhalten.

Außerdem möchte ich mich bei der AFRY Deutschland GmbH und meinem dortigen Betreuer Dr. Andreas Bauer bedanken, dass ich diese Arbeit im Rahmen des Projektes DABKO anfertigen durfte.

Bei Dr. Jonny Birkhan möchte ich mich ebenfalls ausdrücklich bedanken. Für die Arbeit als Zweitprüfer, als Ansprechpartner für die Arbeit mit FLUKA, für das offene Ohr und auch die ein oder andere spätabendliche Fragestunde.

Bei Sebastian, Tobias und David möchte ich für die diversen mal mehr, mal weniger fachlichen Gespräche bedanken. Und das gelegentliche Rubber Ducking, wenn mal wieder nichts so funktioniert hat, wie ich es wollte.

Vielen Dank auch an Nora, Stefan und Ralf für die Unterstützung bei der Vorbereitung und Durchführung der Messungen.

Abseits der Institutsmitglieder möchte ich auch einen großen Dank an Timo, Christian, Sonja, Daniel und Florian richten. Ihr habt mich in so manchen Situationen aufgefangen und meinen Kopf auch mal an etwas anderes als diese Arbeit denken lassen.

Auch bei meinem ehemaligen Mitbewohner Pascal, bei dem ich mich immer wieder über meine Programmierprobleme auslassen konnte und durch seine Programmiererfahrung direkt Lösungsvorschläge bekommen habe, möchte ich mich bedanken.

Ebenso möchte ich mich bei allen bedanken, die Teile dieser Arbeit zur Korrektur gelesen haben. Es fiel mir wirklich schwer, meine Gedanken in Worte zu fassen, ohne die Hilfe wäre das nichts geworden.

Zum Schluss möchte ich meiner Familie danken, die mich immer, so gut ich es denn zuließ, unterstützt hat.