

**Weiterentwicklung der
Ansätze zur Berechnung
der grundlegenden
Aktivitätsgrenzwerte der
Transportvorschriften**

Weiterentwicklung der Ansätze zur Berechnung der grundlegenden Aktivitätsgrenzwerte der Transportvorschriften

Abschlussbericht

Arbeitspaket 5

Janis Endres
Holger Eberhardt

Oktober 2017

Anmerkung:

Das diesem Bericht zu Grunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) unter dem Kennzeichen 3614R03343 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

Deskriptoren

A-Werte, BerQATrans, MCBAS, Monte-Carlo Simulationen, Q-System, Transportsicherheit, Transportvorschriften

Kurzfassung

Im Rahmen des Arbeitspakets 5 des Vorhabens 3614R03343 wurden die Ansätze zur Berechnung der grundlegenden Aktivitätsgrenzen der Transportvorschriften weiterentwickelt. Dazu wurde zunächst das Tool zur Berechnung von Q- und A-Werten, BerQATrans, erweitert. Zusätzlich wurde die Arbeit innerhalb einer internationalen Arbeitsgruppe intensiviert, um die Überarbeitung des aktuellen Q-Systems zu unterstützen. Diese Überarbeitung soll aktuelle Nuklidaten der neuen ICRP 107, sowie Dosisleistungskoeffizienten der ICRP 116 verwenden. Zusätzlich sollen Berechnungsmethoden angewendet werden, die dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. Auf dieser Grundlage wurde mit der Entwicklung einer neuen Codes begonnen, mit dessen Hilfe basierend auf Monte-Carlo Simulationen neue Q-Werte und A_1 -Werte berechnet werden sollen. Erste vorläufige Ergebnisse werden in diesem Bericht präsentiert und diskutiert.

Abstract

Within the scope of work package 5 of this project 3614R03343, basic approaches of calculations for activity limits related to transport regulations have been developed further. Firstly, the calculation tool BerQATrans has been upgraded. This tool has been developed in order to calculate Q- and A-values according to the current Q-system. Secondly, an international working group has been supported that is currently reviewing the current Q-system on the basis of new nuclear data from ICRP 107 and conversion coefficients from ICRP 116. Furthermore, the calculation method is under review regarding state of the art Monte-Carlo simulation tools. Hence, GRS started the development of a code for calculating Q- and A_1 -values based on this new basis. First preliminary results as well as discussions are presented in this report.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
1	Einleitung	1
2	Das Q-System	3
3	Weiterentwicklungen von BerQATrans	7
4	Vorgehen der internationalen Arbeitsgruppe	13
4.1	Ergebnisse der Arbeitsgruppe.....	19
5	Programmentwicklung und Ergebnisse	25
5.1	Grundlegende Geometrie und Annahmen	25
5.1.1	Geometrie.....	25
5.1.2	Festlegungen für die Simulationen.....	26
5.2	Monte-Carlo Based A-value Simulator (MCBAS)	31
5.3	Ergebnisse.....	35
5.3.1	Analyse der berechneten Q_A Werte	36
5.3.2	Analyse der berechneten Q_B Werte	39
6	Diskussion und Ausblick	43
6.1	Fehlerrechnung	43
6.2	Umfang der Datenbank an Fluss-Spektren	44
6.3	Anwendung der Dosisleistungskoeffizienten	47
6.4	Neutronen und Neutronenquellen	47
6.5	Tochternuklide	48
6.6	Betastrahler	48
6.7	Freigrenzen	49
	Literatur	51
	Abkürzungsverzeichnis	57

Abbildungsverzeichnis.....	59
Tabellenverzeichnis.....	61

1 Einleitung

Gemäß dem abgestuften Sicherheitskonzept der Transportvorschriften werden die Aktivitätsgrenzwerte für Versandstücke so festgelegt, dass die radiologischen Folgen sowohl beim normalen (unfallfreien) Transport als auch bei Unfällen begrenzt sind. Hierzu wurde von der Internationalen Atomenergieorganisation (IAEO) das sogenannte Q-System eingeführt, das auf Basis von festgelegten radiologischen Kriterien die zu ihrer Einhaltung maximal zulässigen Aktivitätswerte (sogenannte A -Werte) bestimmt /IAEA 14/. Auf diese Weise wurden die in den Transportvorschriften angegebenen Aktivitätsgrenzwerte für radioaktive Stoffe in besonderer Form¹ (A_1 -Wert) sowie für alle anderen radioaktiven Stoffe, die nicht in besonderer Form vorliegen (A_2 -Wert), festgelegt. Die nuklidspezifischen A_1/A_2 -Werte begrenzen dabei diejenige Aktivitätsmenge, die mit einem Versandstück vom Typ A befördert werden darf.

Die von der IAEO veröffentlichten Tabellen beinhalten eine sehr umfangreiche Nuklidliste in der die Grenzwerte für die bisher relevanten Nuklide aufgeführt sind. Es bestehen jedoch der Bedarf und damit auch die Notwendigkeit, für nicht aufgelistete Nuklide die entsprechenden Grenzwerte berechnen zu können.

Im Rahmen des Vorläuferforschungsvorhabens 3611R03300, Arbeitspaket 4, Teilarbeitsgebiete 2, 3 und 4 wurde daher das Rechentool BerQATrans entwickelt, das in Anlehnung an die Methodik der IAEO die Bestimmung von Aktivitätsgrenzwerten auf Basis des Q-Systems ermöglicht /BÜT 14/. Ziel war hierbei die Bereitstellung eines Analyseinstrumentariums, das die Anwendung der Methodik sowohl für Standardszenarien erlaubt als auch die Möglichkeit einer späteren Erweiterung für flexiblere Randbedingungen bietet.

Zum damaligen Zeitpunkt beschäftigte sich nicht nur die GRS mit diesem Thema, sondern es wurde auch international bearbeitet. Daher traten Mitglieder des Transport Safety Standards Committee der IAEO (TRANSSC) an BfS, GRS, das Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), die Japan Nuclear Energy Safety Organisation (JNES), Public Health England (PHE) und das World Nuclear Transport Institute

¹ Ein radioaktiver Stoff in besonderer Form ist gemäß den Transportvorschriften /IAEA 12/ entweder a) ein nicht dispergierbarer fester radioaktiver Stoff oder b) eine dichte Kapsel, die radioaktive Stoffe enthält.

(WNTI) heran und schlugen ein Treffen zur Erörterung von Fragestellungen in Bezug auf die Transportvorschriften der IAEO /IAEA 12/, /IAEA 14/ vor. Hauptthemen waren das Q-System und die Berechnung von Q- und A-Werten sowie die Beförderung von LSA-III-Stoffen. Dieses Treffen fand im September 2013 mit 12 Teilnehmern aus den o. g. Organisationen sowie einem Consultant bei der GRS in Köln statt. Als Ergebnis dieses Treffens wurde eine internationale Arbeitsgruppe zur Bearbeitung des Themenkomplexes Q-System gegründet. Ziel ist die Bereitstellung einer gemeinsamen wissenschaftlich fundierten und dokumentierten Basis für die Berechnung der grundlegenden Aktivitätsgrenzwerte in den Transportvorschriften, die den Schutz nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik gewährleistet.

Der vorliegende Bericht dokumentiert die Entwicklung von Programmen für die Berechnung von A-Werten sowie die Arbeit innerhalb der internationalen Arbeitsgruppe. Kapitel 2 gibt eine Einführung in das aktuelle Q-System. Kapitel 3 beschreibt die Weiterentwicklungen des Tools BerQATrans, das der Berechnung von Q- und A-Werten nach dem aktuellen Q-System dient. Kapitel 4 behandelt die Entwicklungen innerhalb der internationalen Arbeitsgruppe und dessen Vorgehensweise. Weiterhin werden hier die bisherigen Ergebnisse der Arbeitsgruppe vorgestellt. Kapitel 5 beschreibt die in der Arbeitsgruppe beschlossenen Eingangsparameter sowie das sich in Entwicklung befindliche Programm MCBAS (Monte-Carlo Based A-value Simulator). Die ersten vorläufigen Ergebnisse werden ebenfalls in diesem Kapitel präsentiert und diskutiert. Eine weiterführende Diskussion und ein Ausblick werden in Kapitel 6 gegeben. Insbesondere werden hier ausstehende Entwicklungen des MCBAS-Codes, aber auch zu treffende Entscheidungen der Arbeitsgruppe behandelt.

2 Das Q-System

Das heutige Q-System wurde in den 1980er Jahren zur Berechnung von A_1 - und A_2 -Werten für Typ A-Versandstücke entwickelt und mit den IAEA-Transportvorschriften 1985 eingeführt /IAEA 86/, /IAEA 90/, es löste die bisherige Berechnung der A-Werte nach dem „ A_1/A_2 -System“ von 1973 /IAEA 73/ ab. Seit dem wurde es beständig weiterentwickelt und ist in seiner derzeit gültigen Form in /IAEA 08/, Appendix I wiedergegeben.

Die betrachteten Expositionspfade im Q-System sind

- äußere Exposition durch Gamma- und Röntgenstrahlung (Q_A),
- äußere Exposition durch Betastrahlung (Q_B),
- innere Exposition durch Inhalation (Q_C),
- Kontamination der Haut sowie innere Exposition durch Ingestion (Q_D) und
- Submersion (Q_E).

Zusätzlich wird für die äußere Exposition durch Alphastrahler der Pfad Q_F betrachtet. In Abb. 2.1 sind die Pfade Q_A bis Q_E schematisch dargestellt. Diese werden jeweils gesondert betrachtet, d. h. theoretisch könnte über jeden betrachteten Pfad der Grenzwert (z. B. 50 mSv) erreicht werden. Dies wäre jedoch laut /IAEA 08/ nur für eine kleine Anzahl von Nukliden der Fall, weshalb die gesonderte Betrachtungsweise der Q-Werte beibehalten wird.

Für jeden dieser Expositionspfade wird eine solche nuklidspezifische maximale Aktivität Q berechnet, die zu einer effektiven Dosis von 50 mSv bzw. zu einer Organdosis (inkl. Haut) von 500 mSv oder zu einer Dosis der Augenlinse von 150 mSv bei Personen führen, die sich in der Umgebung eines durch einen Unfall beschädigten Versandstückes befinden. Dabei ist es unwahrscheinlich, dass eine Person sich in einem Abstand von einem Meter zum beschädigten Versandstück länger als 30 Minuten aufhält. Aus dem kleineren Wert von Q_A und Q_B (sowie ggf. Q_F) wird der A_1 -Wert für Stoffe in besonderer Form ermittelt; der A_2 -Wert ergibt sich aus dem kleinsten Wert aller betrachteten Q-Werte.

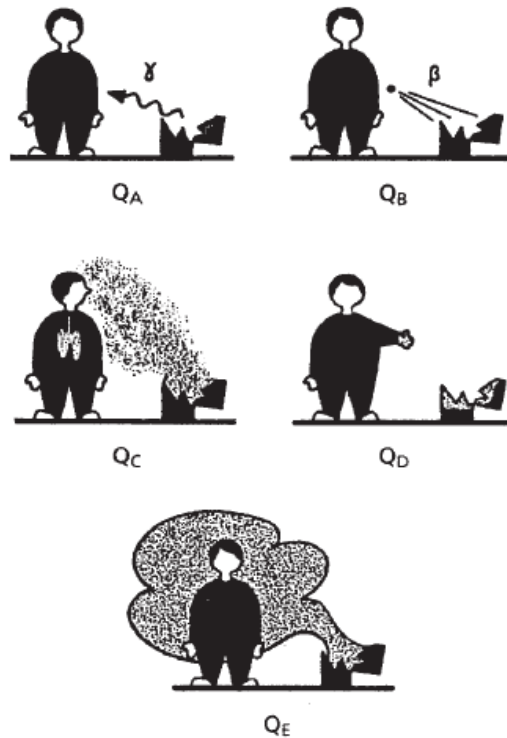


Abb. 2.1 Schematische Darstellung der Expositionspfade, Quelle: /IAEA 08/

Bei der Festlegung des Referenzwertes der effektiven Dosis von 50 mSv wurde unterstellt, dass die Wahrscheinlichkeit nach einem Transportunfall ionisierender Strahlung ausgesetzt zu sein für eine einzelne Person sehr klein ist. Weiterhin wird angenommen, dass dies praktisch nur einmal im Leben einer Person stattfindet.² Diese Annahme stimmt überein mit Erfahrungen aus erfassten Unfällen, bei denen Typ A-Versandstücke involviert waren. Solche Unfälle sind selten und führten nur zu sehr geringen Strahlenexpositionen.

Eine detaillierte Übersicht über die Berechnungen und Gleichungen des aktuellen Q-Systems sind in /BÜT 14/ gegeben. Hier finden sich ebenfalls Diskussionen über die Probleme, die bezüglich des Q-Systems identifiziert wurden.

Aus den berechneten Q-Werten werden die A-Werte gebildet. Diese werden berechnet für radioaktive Stoffe in besonderer Form durch

² Bei der Einführung des Q-Systems orientierte sich die Bestimmung der Referenzdosis von 50 mSv an dem damaligen Grenzwert der zulässigen Jahresdosis für beruflich strahlenexponierte Personen.

$$A_1 = \begin{cases} \min\{Q_A, Q_B, Q_F\} & \text{für Alphastrahler} \\ \min\{Q_A, Q_B\} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.1)$$

und für radioaktive Stoffe nicht in besonderer Form durch

$$A_2 = \begin{cases} \min\{Q_C, Q_E, A_1\} & \text{für Edelgase} \\ \min\{Q_C, Q_D, A_1\} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.2)$$

Für einige Nuklide werden die A-Werte nicht mit den angegebenen Formeln berechnet, sondern aufgrund zusätzlicher Annahmen festgelegt. Diese Ausnahmen sind ebenfalls in /BÜT 14/ diskutiert.

3 Weiterentwicklungen von BerQATrans

Um bis zu einer eventuellen Erneuerung des bisherigen Q-Systems und einer damit verbundenen Neuberechnung aller Q- und A-Werte trotzdem auch neue Nuklide im Bedarfsfall (Anfragen durch Anwender, TRANSSEC, BMUB etc.) gemäß dem derzeitigen Q-System berechnen zu können, wurde das Rechentool BerQATrans erweitert. In der derzeit vorliegenden Version 1.2 ist es nun in der Lage, Werte für Q_A auch mit aktuellen Daten der ICRP 116 /PET 10/ für ein isotropes (ISO) Strahlungsfeld zu berechnen (Abb. 3.1). Ein Vergleich der in /PET 10/ veröffentlichten Dosiskonversionsfaktoren für Photonen bei verschiedenen Strahlungsfeldern (siehe Abb. 3.2) ist in Abb. 3.3 gezeigt.

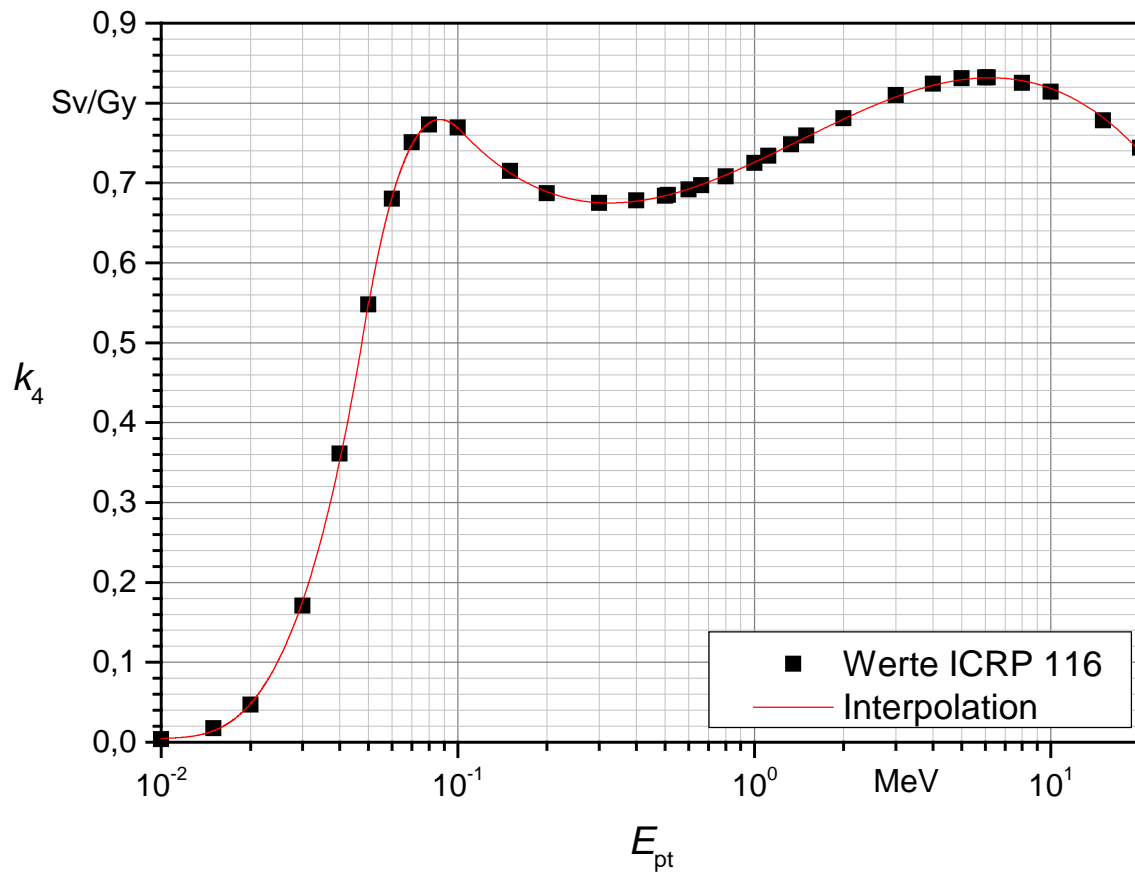


Abb. 3.1 Werte für den Dosiskonversionsfaktor k_4 nach /PET 10/, isotropes Strahlungsfeld

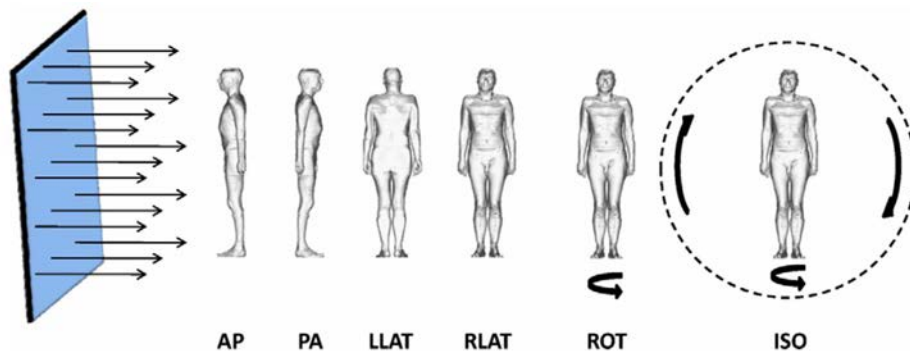


Abb. 3.2 Strahlungsfelder gemäß ICRP 116, Quelle: /PET 10/

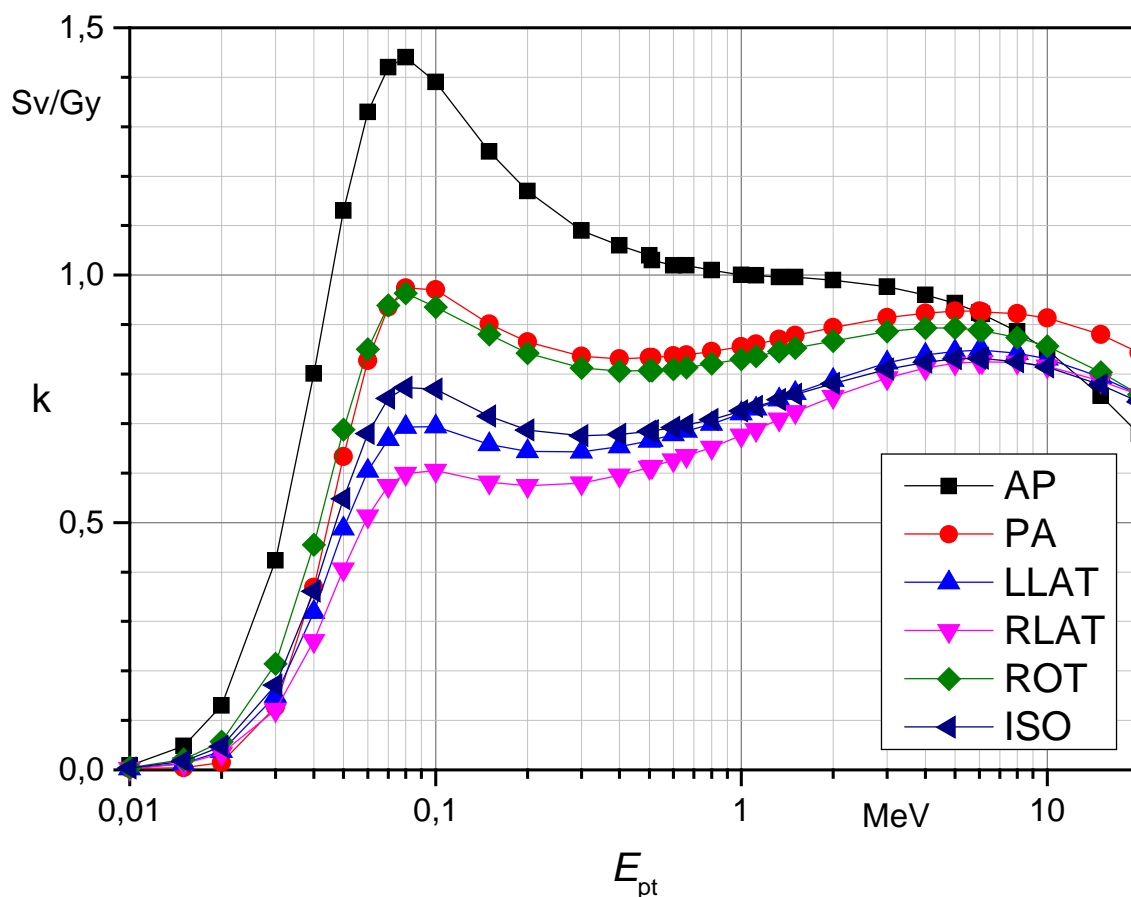


Abb. 3.3 Vergleich von Dosisumwandlungsfaktoren aus /PET 10/ für verschiedene Strahlungsfelder

Die Interpolationsfunktionen (vgl. dazu auch /BÜT 14/) für den Dosisumwandlungsfaktor k_4 wurden für Photonenenergien E_{pt} von 10 keV bis 20 MeV erstellt.

Für den Energiebereich 10 keV bis 50 keV wurde die Funktion

$$k_4 = a_3 \cdot x^3 + a_2 \cdot x^2 + a_1 \cdot x + a_0 \tag{3.1}$$

genutzt mit $x = \lg E_{\text{pt}}$, $[E_{\text{pt}}] = \text{MeV}$, $[k_4] = \frac{\text{Sv}}{\text{Gy}}$ und den Parametern in Tab. 3.1.

Tab. 3.1 Parameterwerte zur Interpolationsfunktion für den Dosiskonversionsfaktor k_4 , Energiebereich 10 keV bis 50 keV

Parameter	Wert
a_3	1,68343
a_2	10,01917
a_1	19,89208
a_0	13,17968

Für den Energiebereich 50 keV bis 100 keV wurde die Funktion

$$k_4 = b_3 \cdot x^3 + b_2 \cdot x^2 + b_1 \cdot x + b_0 \quad (3.2)$$

genutzt mit $x = \lg E_{\text{pt}}$, $[E_{\text{pt}}] = \text{MeV}$, $[k_4] = \frac{\text{Sv}}{\text{Gy}}$ und den Parametern in Tab. 3.2.

Tab. 3.2 Parameterwerte zur Interpolationsfunktion für den Dosiskonversionsfaktor k_4 , Energiebereich 50 keV bis 100 keV

Parameter	Wert
b_3	3,36512
b_2	7,52364
b_1	4,60732
b_0	1,21753

Für den Energiebereich 100 keV bis 20 MeV wurde die Funktion

$$k_4 = c_3 \cdot x^3 + c_2 \cdot x^2 + c_1 \cdot x + c_0 \quad (3.3)$$

genutzt mit $x = \lg E_{\text{pt}}$, $[E_{\text{pt}}] = \text{MeV}$, $[k_4] = \frac{\text{Sv}}{\text{Gy}}$ und den Parametern in Tab. 3.2.

Tab. 3.3 Parameterwerte zur Interpolationsfunktion für den Dosiskonversionsfaktor k_4 , Energiebereich 100 keV bis 20 MeV

Parameter	Wert
c_3	-0,14829
c_2	0,0679
c_1	0,17275
c_0	0,72585

Für Energien kleiner 10 keV wurde $k_4 = 0,0038 \frac{\text{Sv}}{\text{Gy}}$ gesetzt, das entspricht dem Wert für eine Energie von 10 keV. Ein Vergleich der Dosiskonversionsfaktoren k_2 und k_3 (beide in /BÜT 14/ dokumentiert) mit k_4 ist in Abb. 3.4 gezeigt. Die Daten zu k_2 stammen aus /WIL 84/, zu k_3 aus /ICRP 96/ und zu k_4 aus /PET 10/.

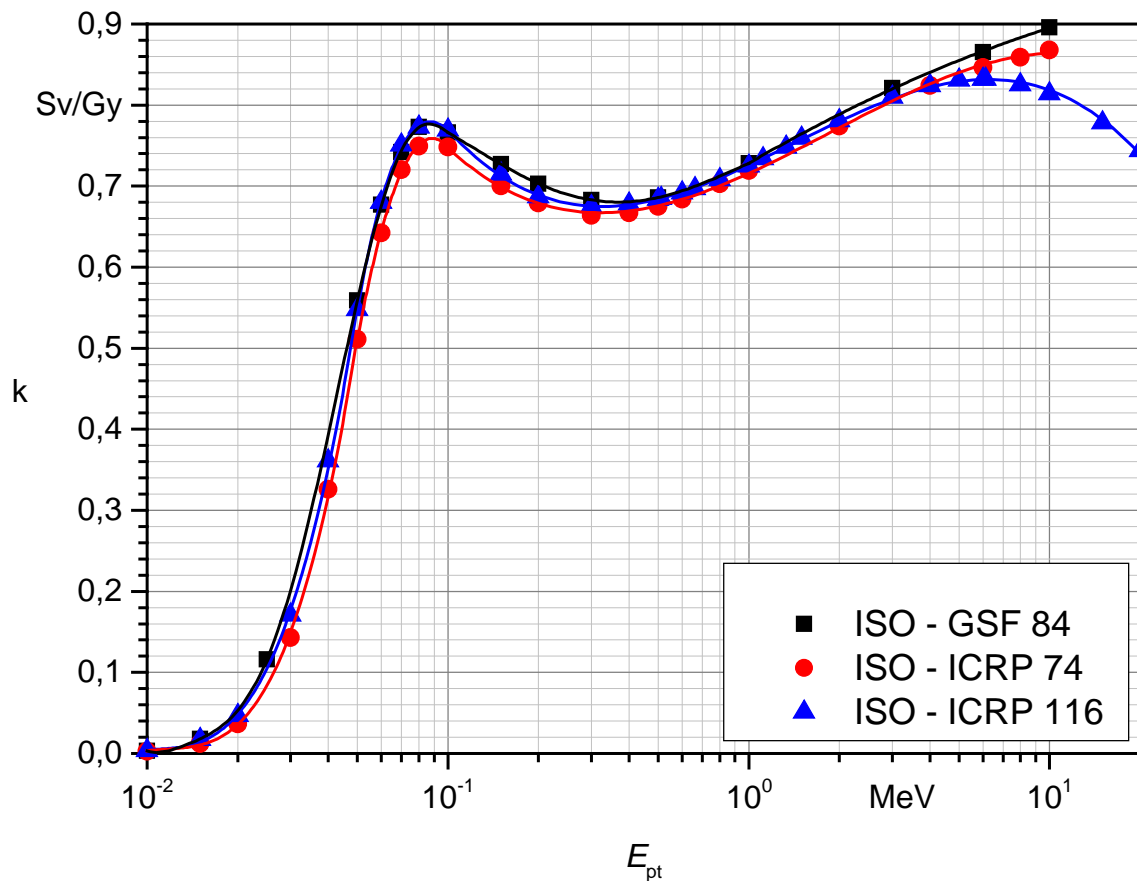


Abb. 3.4 Vergleich der Dosiskonversionsfaktoren k_2 , k_3 und k_4 , isotropes Strahlungsfeld

Damit ist es möglich, unter Beibehaltung der bisherigen Rechenmethodik, Änderungen in den Q- und A-Werten allein durch Nutzung unterschiedlicher neuer Datenbibliotheken zu untersuchen.

Neben einigen kleineren programmtechnischen Verbesserungen verfügt BerQATrans jetzt auch über die Möglichkeit, mit gerundeten Zwischenergebnissen weiterzurechnen. Aufgrund der Rechenmethoden im Q-System führen schon kleinste Änderungen von Zwischenergebnissen, beispielsweise Dosisleistungskoeffizienten und Dosiskoeffizienten, im Nachkommabereich zu sichtbaren Änderungen im Ergebnis der Q- und A-Werte. Jedoch waren diese Änderungen aufgrund der durch das Programm erzeugten Ausdrücke nicht immer nachvollziehbar, da in Anlehnung an die Ergebnisdarstellung in /IAEA 12/ und /IAEA 14/ auch in BerQATrans Ergebnistabellen gerundete Ergebnisse zeigen. Mit der neuen Funktion wird auch mit diesen gerundeten Werten weitergerechnet, um eine spätere Nachvollziehbarkeit zu gewährleisten. Zusätzlich wurden im Auswahlbildschirm für Optionen (Abb. 3.5) die Auswahlfelder gelb hinterlegt, mit denen die bestehenden Q- und A-Werte am besten nachgerechnet werden können. Sie entsprechen Parametern die entweder im Q-System dokumentiert oder aufgrund von Recherchen vermutet bei der Berechnung der Q- und A-Werte verwendet wurden.

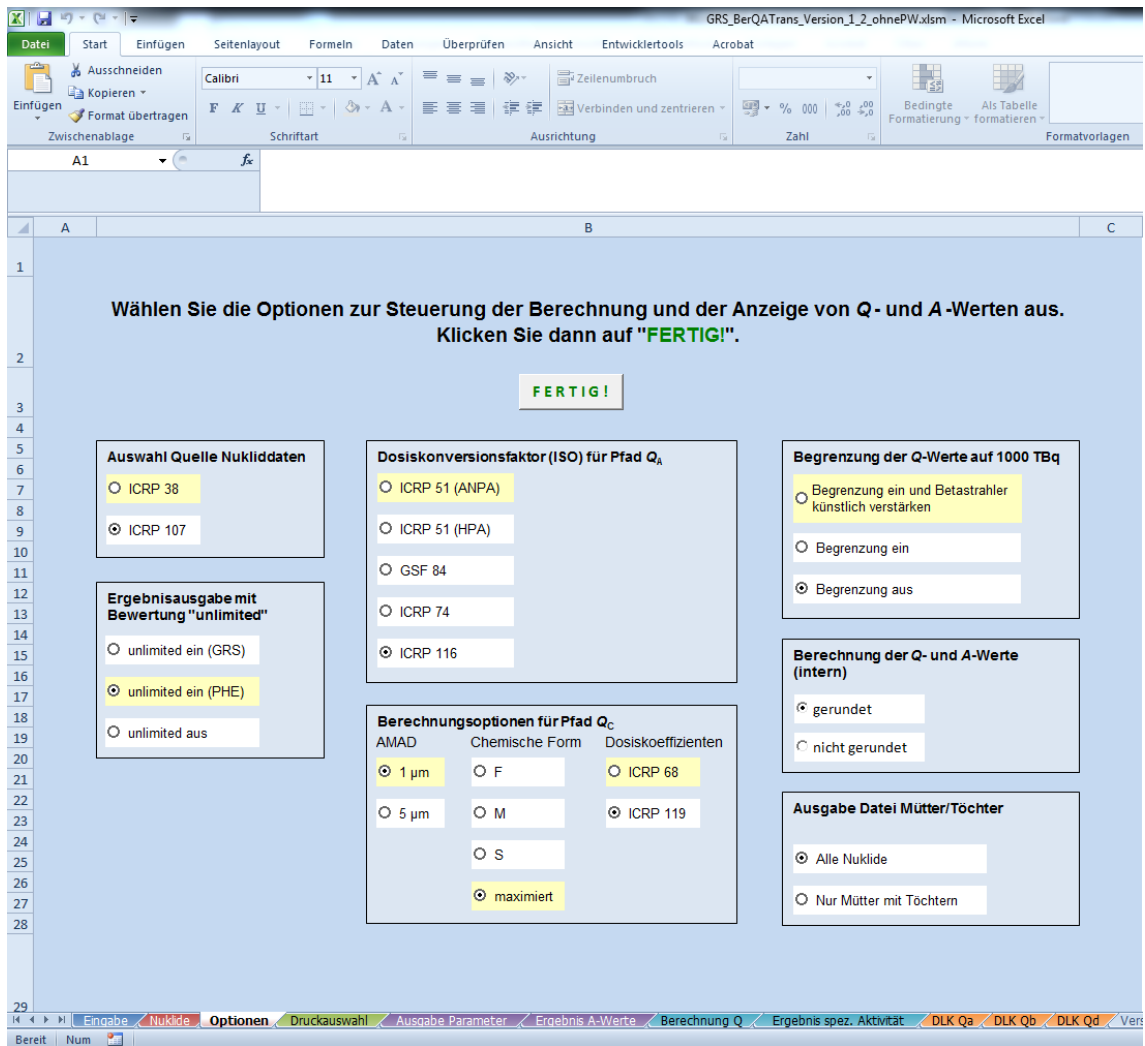


Abb. 3.5 Optionsauswahl von BerQATrans in der Version 1.2

4 Vorgehen der internationalen Arbeitsgruppe

Die „International Working Group on Basic Radionuclide Values for the IAEA Transport Regulations“ traf sich erstmalig im Juli 2014 bei IRSN in Fontenay-aux-Roses, Frankreich, und trifft sich seitdem mehrfach im Jahr. Eine Übersicht der bisherigen Meetings ist in Tab. 4.1 zusammengefasst. Den Kern der Arbeitsgruppe bilden die GRS für Deutschland, IRSN für Frankreich, PHE für UK, sowie NRA, NMRI und MHI NSENG für Japan. Für weitere Teilnehmer war die Arbeitsgruppe jederzeit offen wodurch Fluktuationen durch nicht-ständige Mitglieder entstanden.

Tab. 4.1 Meetings der internationalen Arbeitsgruppe

Meeting	Datum	Ort	Teilnehmende Organisationen
1	17.-18. Juli 2014	IRSN, Paris	ASN, GRS, IRSN, NRA, PHE, WNTI
2	20.-21. November 2014	PHE, Chilton	GRS, IRSN, NRA, PHE
3	23.-24. Februar 2015	IAEO, Wien	GRS, IRSN, NRA, PHE, WNTI
4	19. Juni 2015	IRSN, Paris	GRS, IRSN, MHI, NMRI, NRA, PHE
5	2.-4. September 2015	GRS, Köln	BfS, BMUB, GRS, IRSN, MHI, NMRI, NRA, PHE, US DOT (via Telefon), WNTI
6	10.-11. Mai 2016	IRSN, Paris	GRS, IRSN, NMRI, NRA, PHE, US DOT (via Telefon)
7	14.-15. Dezember 2016	IAEO, Wien	GRS, IRSN, Lorenz Consulting, MHI, NRA, NMRI, PHE, WNTI
8	10.-11. Juli 2017	IAEO, Wien	BMUB, GRS, IRSN, Lorenz Consulting, MHI, NRA, PHE

Obwohl es sich um keine direkte Arbeitsgruppe von TRANSSC handelt, wird TRANSSC aber regelmäßig über die Ergebnisse und den Diskussionsverlauf informiert. Zudem wurde die Arbeitsgruppe 2016 zu einer „Special Group“ der IAEO ernannt. Dies ermöglicht es, kostenlos die Sitzungsräume der IAEO für die Besprechungen zu nutzen. Seit dem wurde beschlossen, die Sitzungen bei der IAEO in Wien abzuhalten. Da einige Teilnehmer zudem Vertreter oder Unterstützer bei der TRANSSC

sind, wurde beschlossen, die Treffen mit den Terminen der TRANSSC zu verbinden. Seit der 7. Sitzung der Arbeitsgruppe finden daher die Meetings direkt vor den TRANSSC Sitzungen statt.

Teilweise werden innerhalb der Arbeitsgruppe unterschiedliche Meinungen vertreten, die einen Konsens bei diversen Detailfragen erschweren. Beispielsweise konnte bislang keine endgültige Einigung bezüglich der zu verwendenden Strahlungsgeometrie erreicht werden. Dennoch wurde im Anschluss an die 5. Sitzung der Arbeitsgruppe ein Positionspapier entwickelt, das die grundlegenden gemeinsamen Ziele definiert. Dabei konnten insbesondere folgende Einigungen erzielt werden:

- Nutzung der neuen ICRP 107 Nuklidaten sowie Dosiskoeffizienten der ICRP 116
- Fokussierung auf die Berechnung von Q_A und Q_B , während Q_C , Q_D und Q_E bis zur Veröffentlichung entsprechender ICRP Werte zurückgestellt werden
- Nutzung von Monte-Carlo-Methoden
- Die Überprüfung des Q-Systems soll unter Einhaltung der bisherigen Szenarien erfolgen, soweit möglich.
- Einbeziehen aller verfügbaren Strahlungsarten
- Ersetzen der Q_A und Q_B Werte durch $Q_{ext,eff}$ and $Q_{ext,skin}$ wodurch alle Strahlungsarten einen Beitrag zur effektiven Dosis und zur Hautdosis leisten können.

Die offenen Fragen erschwerten den Beginn der beschlossenen rechenzeit-intensiven Monte-Carlo Simulationen, da diverse Eingangsparameter nicht festgelegt werden konnten. Während der 6. Sitzung in Paris schlug die GRS eine Aufteilung der Arbeitsgruppe in eine Hauptgruppe und eine „Calculators Group“ vor. Diese Untergruppe wurde mit den Programmierern der Simulationen besetzt und noch während der 6. Sitzung eingesetzt. Das Ergebnis war die Entwicklung einer Vorgehensweise für die Simulationen, die von den Entscheidungen der Hauptgruppe entkoppelt ist. Diese Vorgehensweise beinhaltete folgende Einigungen:

- Geometrie
- Zu verwendende Codes und Datenbanken
- Simulation von Fluss-Spektren

Als Geometrie wurde eine punktförmige Quelle beschlossen, die sich im Ursprung einer Kugel aus Luft mit einem Radius von 1 m befindet. Der Fluss aller Teilchen, die

durch ein Primärteilchen verursacht durch die Oberfläche der Kugel gelangen, sollte simuliert werden. Dabei sollten verschiedene Codes und Datenbanken zum Einsatz kommen, um die Ergebnisse gegenseitig zu verifizieren. Diese gemeinsame zukünftige Vorgehensweise der Arbeitsgruppe hatte den Vorteil, Ergebnisse vergleichen zu können, ohne von weiteren Entscheidungen der Hauptgruppe abhängig zu sein, da der Vergleich der Fluss-Spektren lediglich die fundamentalen Wechselwirkungen der Primärteilchen mit der Materie beinhaltet. Darin ist zwar der größte Anteil des Simulationsaufwands enthalten, weiterführende Berechnungen für die Q -Werte können jedoch in einem zweiten Schritt erfolgen. Somit konnte erfolgreich die genannte Entkopplung erzielt werden.

In den folgenden Sitzungen wurden die Zwischenergebnisse diskutiert und auch der Einfluss einer Restabschirmung untersucht. Auf der 8. Sitzung konnte sich innerhalb der AG geeinigt werden, für alle Nuklide eine Restabschirmung von 0,5 mm Stahl zu verwenden. Damit wird zum einen der Verwendung einer Restabschirmung im aktuellen Q -System Rechnung getragen, aber auch den typischen Einhausungen aktuell auf dem Markt verfügbaren Quellen. Mit dieser Festlegung konnten alle für die Simulationen der Fluss-Spektren relevanten Parameter fixiert werden. Auf der nächsten AG-Sitzung können somit die Ergebnisse für eine definierte Liste an Nukliden verglichen werden. Dabei handelt es sich um die folgenden Nuklide:

- F-18
- Co-60
- Kr-85
- Sr-90
- Tc-99m
- Ru-106
- Cs-134
- Cs-137
- Eu-154
- Ir-192

Sobald die Fluss-Spektren simuliert sind, können die Dosisleistungskoeffizienten der ICRP 116 verwendet werden, um die Q_A und Q_B Werte zu berechnen. Dabei ist ein weiterer Vorteil der Methode, dass die selben Fluss-Spektren sowohl für die Berechnung von effektiven Dosen, der Hautdosis oder auch der Augenlinse genutzt werden können. Außerdem kommt erst bei der Wahl der Koeffizienten die Frage nach der

Strahlungsgeometrie zu tragen, die zum aktuellen Zeitpunkt wie beschrieben noch nicht endgültig geklärt ist. Auch hier zeigt sich der Vorteil der Entkopplung und der Fokussierung auf die Berechnung der Fluss-Spektren.

Ein zentraler Aspekt der Arbeit der internationalen Arbeitsgruppe liegt in der Dokumentation. Da bei der Dokumentation des aktuellen Q-Systems einige Probleme identifiziert wurden, siehe auch /BÜT 14/, soll bei einer Präsentation von neuen Q-Werten eine nachvollziehbare und transparente Dokumentation vorliegen. Um die Arbeiten der AG entsprechend zu dokumentieren, wurde ein lebendiges technisches Dokument erzeugt, das die Aktivitäten und einzelnen Ergebnisse der verschiedenen beitragenden Institutionen der AG zusammenfasst. Somit sind auch rückblickend die Zwischenergebnisse oder Vorgehensweisen nachvollziehbar, da das Dokument fortgeführt und nicht überschrieben wird. Dieses Dokument kann demnach als Basis für einen abschließenden Bericht verwendet werden. Mit der Gestaltung und Ausarbeitung des Berichts ist die GRS betraut. Diese Bearbeitung und regelmäßige Aktualisierung des Dokuments ist entsprechend arbeitsintensiv. Zudem ist diese Arbeit abhängig von den Zuarbeiten der jeweiligen Institutionen.

Ein weiteres zentrales Element der Arbeitsgruppe ist ein „Activity Plan“, der die geplanten Leistungen der AG beschreibt sowie einen Zeitplan angibt. Dieser Plan definiert die grobe Struktur der anstehenden Arbeiten und legt die nächsten Schritte fest, wobei Deadlines und Verantwortlichkeiten ebenfalls festgelegt sind. Dabei sind 17 Aktionen definiert, die in Tab. 4.2 mit ihrem Status aufgeführt sind. Ein Zeitplan ist in Abb. 4.1 gezeigt. Erst nach Abschluss der Arbeiten zu den A-Werten wird sich die internationale Arbeitsgruppe mit den Freigrenzen befassen. Die Wichtigkeit dieses Themas wurde in mehreren Sitzungen betont. Dennoch kann die Arbeitsgruppe nicht zwei arbeitsintensive Themen parallel behandeln.

Um den Informations- und Datenaustausch innerhalb der Arbeitsgruppe zu optimieren, wurde eine Seite auf dem SharePoint „NUCLEUS“ der IAEA eingerichtet. Hier werden alle Dokumente, Ergebnisse, Präsentationen, Protokolle, etc. abgelegt, um sie den anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe zur Verfügung zu stellen.

Tab. 4.2 Aktionen des „Activity Plans“

Nr.	Aktion	Status
1	Bereitstellung eines überarbeiteten Texts für SSR-6 (A-Werte für 5 neue Radionuklide)	Abgeschlossen
2	Bereitstellung eines überarbeiteten Texts für SSG-26	Abgeschlossen
3	Erstellung eines Activity Plans	Abgeschlossen
4	Statuspräsentation bei TRANSSC Meetings	Bei jedem TRANSSC Meeting
5	Erstellung und Bearbeitung eines generellen technischen Reports zur Dokumentation der Parameter und Ergebnisse	Erstellung abgeschlossen, Aktualisierung erfolgt regelmäßig durch GRS
6	Präsentationen bei der PATRAM Konferenz	Abgeschlossen
7	Festlegung eines Strahlenfeldes	Eingrenzung auf ROT und ISO erfolgt. Festlegung ausstehend
8	Berechnungsmodell für Betastrahlung	Abgeschlossen durch die Festlegung einer Restabschirmung
9	Kumulative Dosisberechnung	Abgeschlossen. Die Mitglieder stimmen dem Prinzip zu, alle Strahlungsarten zu berücksichtigen und deren Beiträge zu summieren.
10	Tochternuklide	Die detaillierte Behandlung von Tochternukliden muss noch entschieden werden.
11	Augenlinse	Die detaillierte Behandlung bei den Augenlinsen muss noch entschieden werden.
12	Berechnungsmethode für über 700 Radionuklide (A_1 -Werte)	Vorschlag zur Geschwindigkeitsoptimierung von der GRS eingereicht. Entscheidung steht noch aus.
13	Begutachtung von Q_G , Q_D und Q_E	Ausstehend. ICRP Publikationen werden abgewartet.
14	Kumulative Dosen aus Multipfaden	Für November 2018 geplant
15	Berechnungsmethode für über 700 Radionukliden für A_2 -Werte	Für September 2020 geplant
16	Vorlage der Methode und Ergebnisse bei dediziertem IAEO Meeting	Für November 2020 geplant
17	Einreichen des Vorschlags für neue A-Werte bei den Mitgliedsländern der IAEO	Für Februar 2021 geplant

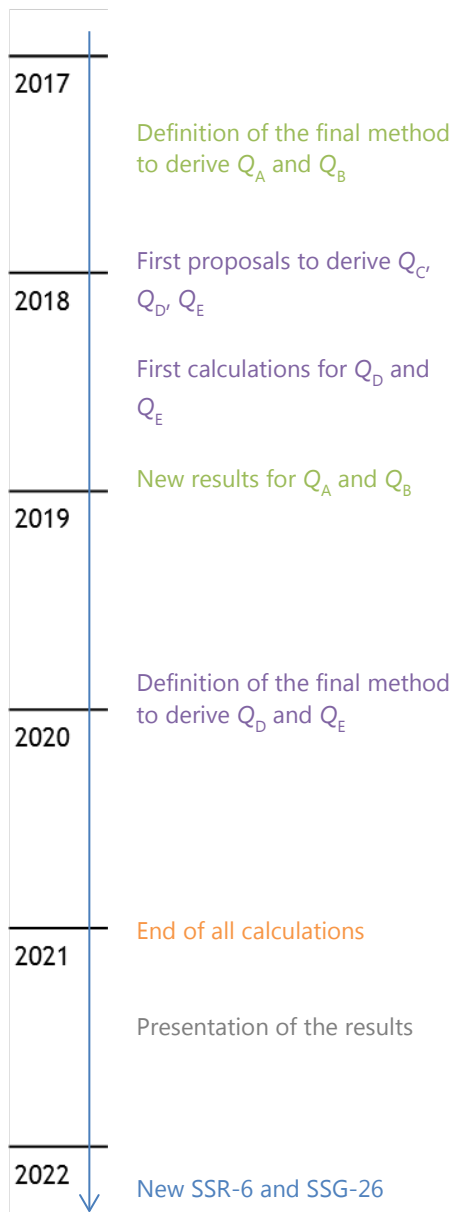


Abb. 4.1 Zeitplan der internationalen Arbeitsgruppe

4.1 Ergebnisse der Arbeitsgruppe

Der enge Kontakt zur TRANSSC führte während der fünften Sitzung der Arbeitsgruppe im September 2015 in Köln dazu, dass die TRANSSC um Stellungnahme bis zur außerordentlichen Sitzung der TRANSSC vom 21. bis zum 25. September 2015 zu eingereichten Änderungsvorschlägen der IAEO-Transportvorschriften bat, die Bezug zu Q- und A-Werten sowie Freigrenzen hatten. Neben den Stellungnahmen reichte die Arbeitsgruppe zudem einen ersten Statusbericht zu ihrer Arbeit mit konkreten Änderungsvorschlägen bezüglich des Q-Systems ein.

PHE und GRS haben Ende 2015 und Anfang 2016 für die TRANSSC (ausgelöst durch die Vorschläge CDN/2015/21 und USA/2015/09) Q- und A-Werte für fünf noch nicht in den Transportvorschriften gelistete Radionuklide (Ba-135m, Ge 69, Ir-193m, Ni-57 und Sr-83) berechnet. PHE hat dafür sein Rechenprogramm SEAL /HPA 10/, /JON 11/ verwendet, bei der GRS kam BerQATrans (in der neuen Version 1.2) zum Einsatz. Die Ergebnisse sind in Tab. 4.3, Tab. 4.4 und Tab. 4.5 enthalten. Die japanische Nuclear Regulation Authority (NRA) kam mit ihrem Programm BRACSS /NRA 15/ ebenfalls zu gleichen Resultaten; die Ergebnisse aller drei Organisationen weichen bei einigen Nukliden nur geringfügig voneinander ab, bedingt durch im Detail unterschiedliche Berechnungsmethoden.

Tab. 4.3 Ergebnisse von BerQATrans, Datengrundlage ICRP 38 /ICRP 83/ sowie ICRP 51 /ICRP 87/ für Q_A und ICRP 68 /ICRP 94/ für Q_C

Nuklid	Q_A (TBq)	Q_B (TBq)	Q_C (TBq)	Q_D (TBq)	A_1 (TBq)	A_2 (TBq)
Ba-135m	$1,6 \cdot 10^1$	$1,0 \cdot 10^3$	$3,3 \cdot 10^2$	$5,9 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^1$	$6 \cdot 10^{-1}$
Ge-69	$1,3 \cdot 10^0$	$7,1 \cdot 10^0$	$1,7 \cdot 10^2$	$4,5 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$
Ir-193m	– a)	– a)	$4,2 \cdot 10^1$	– a)	– a)	– a)
Ni-57	$5,9 \cdot 10^{-1}$	$2,0 \cdot 10^1$	$8,9 \cdot 10^1$	$3,3 \cdot 10^0$	$6 \cdot 10^{-1}$	$6 \cdot 10^{-1}$
Sr-83	$1,4 \cdot 10^0$	$1,4 \cdot 10^1$	$1,5 \cdot 10^2$	$8,7 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$

a) für Ir-193m keine Daten in ICRP 38 enthalten, daher keine Berechnung von Q_A , Q_B , Q_D , A_1 und A_2 möglich

Tab. 4.4 Ergebnisse von BerQATrans, Datengrundlage ICRP 107 /ICRP 08/ sowie ICRP 51 /ICRP 87/ für Q_A und ICRP 68 /ICRP 94/ für Q_C

Nuklid	Q_A (TBq)	Q_B (TBq)	Q_C (TBq)	Q_D (TBq)	A_1 (TBq)	A_2 (TBq)
Ba-135m	$1,6 \cdot 10^1$	$1,0 \cdot 10^3$	$3,3 \cdot 10^2$	$5,9 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^1$	$6 \cdot 10^{-1}$
Ge-69	$1,1 \cdot 10^0$	$1,6 \cdot 10^1$	$1,7 \cdot 10^2$	$9,6 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$
Ir-193m	$8,3 \cdot 10^2$	$1,0 \cdot 10^3$	$4,2 \cdot 10^1$	$4,2 \cdot 10^0$	$4 \cdot 10^1$	$4 \cdot 10^0$
Ni-57	$5,9 \cdot 10^{-1}$	$1,6 \cdot 10^1$	$8,9 \cdot 10^1$	$2,8 \cdot 10^0$	$6 \cdot 10^{-1}$	$6 \cdot 10^{-1}$
Sr-83	$1,3 \cdot 10^0$	$1,3 \cdot 10^1$	$1,5 \cdot 10^2$	$7,1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$

Tab. 4.5 Ergebnisse von BerQATrans, Datengrundlage ICRP 107 /ICRP 08/ sowie ICRP 116 /PET 10/ für Q_A und ICRP 119 /ECK 12/ für Q_C

Nuklid	Q_A (TBq)	Q_B (TBq)	Q_C (TBq)	Q_D (TBq)	A_1 (TBq)	A_2 (TBq)
Ba-135m	$1,7 \cdot 10^1$	$1,0 \cdot 10^3$	$3,3 \cdot 10^2$	$5,9 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^1$	$6 \cdot 10^{-1}$
Ge-69	$1,1 \cdot 10^0$	$1,6 \cdot 10^1$	$1,7 \cdot 10^2$	$9,6 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$
Ir-193m	$7,7 \cdot 10^2$	$1,0 \cdot 10^3$	$4,2 \cdot 10^1$	$4,2 \cdot 10^0$	$4 \cdot 10^1$	$4 \cdot 10^0$
Ni-57	$5,9 \cdot 10^{-1}$	$1,6 \cdot 10^1$	$8,9 \cdot 10^1$	$2,8 \cdot 10^0$	$6 \cdot 10^{-1}$	$6 \cdot 10^{-1}$
Sr-83	$1,3 \cdot 10^0$	$1,3 \cdot 10^1$	$1,5 \cdot 10^2$	$7,1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$

Als finale Ergebnisse wurden die jeweils kleinsten Werte gewählt, die sich aus den verschiedenen Berechnungstools ergaben, siehe Tab. 4.6. Die Ergebnisse wurden im Februar 2016 über die internationale Arbeitsgruppe an TRANSSC weitergeleitet, um Vorschläge zur Aufnahme dieser fünf Nuklide aus Kanada und den USA zu überprüfen. Die durch GRS und PHE berechneten Q - und A -Werte der fünf neuen Nuklide werden mit der nächsten Revision in die internationalen Transportvorschriften aufgenommen.

Ebenfalls in Tab. 4.6 aufgenommen sind die Ergebnisse für zwei Terbium Isotope (Tb-149, Tb-161), deren Berechnung über das ENSI, Schweiz, im Oktober 2016 angefragt wurde (Proposal CH/2016/13). Hier lieferten BerQATrans und SEAL gleiche Werte, sodass die Ergebnisse eindeutig waren und nicht auf das jeweilige Minimum zurückgegriffen werden musste.

Tab. 4.6 Ergebnisse für neu berechnete Nuklide

Nuklid	A_1 (TBq)	A_2 (TBq)	Freigrenze spezifische Aktivität (Bq/g)	Freigrenze Aktivität (Bq)
Ba-135m	$2 \cdot 10^1$	$6 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^6$
Ge-69	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^6$
Ir-193m	$4 \cdot 10^1$	$3 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^7$
Ni-57	$6 \cdot 10^{-1}$	$6 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^6$
Sr-83	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^6$
Tb-149	$8 \cdot 10^{-1}$	$8 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^6$
Tb-161	$3 \cdot 10^1$	$7 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^6$

Die präsentierten Ergebnisse spiegeln die aktuellen Berechnungsmethoden für A-Werte wieder und konnten daher offiziell bei der IAEO eingereicht werden. Eine weitere Vielzahl an Ergebnissen wurde innerhalb der Arbeitsgruppe generiert, um die Entwicklungen der einzelnen Institutionen zu vergleichen. Da viele Abstimmungen erforderlich sind, um diverse Detailfragen zu klären, wurden regelmäßig Zwischenergebnisse ausgetauscht. Diese Abstimmungen sind arbeitsintensive aber notwendige Maßnahmen, um einheitliche Grundlagen für die Simulationen zu schaffen. Unterschiede in den Datenbanken für die verschiedenen Wirkungsquerschnitte von Wechselwirkungen der Teilchen mit Materie sind unvermeidbar und stellen den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik dar. Es existieren einige international anerkannte Datenbanken, deren Entwicklung fortlaufend ist. Darunter befinden sich beispielsweise die Datenbanken Evaluated Nuclear Data File (ENDF) aus den USA mit verschiedenen Versionen (z. B. ENDF/B-VII.1 /CHA 11/), Joint Evaluated Fission and Fusion File (JEFF, z. B. JEFF-3.1.1 /SAN 09/) aus Europa oder auch Japanese Evaluated Nuclear Data Library (JENDL, z. B. JENDL-4.0 /SHI 11/) aus Japan. Wie es auch in den aktuellen ICRP Publikationen üblich ist, sollen die Werte mit verschiedenen Codes und Datenbanken berechnet bzw. verifiziert werden. Daher berechnen die verschiedenen Institutionen der Arbeitsgruppe eigene Werte mit ihren jeweiligen Codes. Aufgrund der Verbreitung des Codes MCNP /PEL 05/, der auch die Basis der Codes aller anderen Institutionen der Arbeitsgruppe ist, wurde die Nutzung eines unabhängigen Codes durch die GRS begrüßt. Der von der GRS verwendete Code ist Geant4 /AGO 03/, der am CERN entwickelt wurde und intensiv für Simulationen in der Kern- und Teilchenphysik angewendet wird. Seit dem 6. Meeting der internationalen Arbeitsgruppe haben sich im Wesentlichen folgende Aufgaben ergeben, die mit arbeitsintensiven Simulationen und Analysen verbunden waren:

- Berechnung von Fluss-Spektren für die Nuklidliste (6. Meeting)
- Untersuchung des Einflusses verschiedener Abschirmungen (7. Meeting)
- Simulationen der Nuklidliste für 0,5 mm Stahl (8. Meeting)

Bei den ersten Simulationen von Fluss-Spektren, die im 6. Meeting beschlossen wurden lag der Fokus auf dem Vergleich der angewendeten Codes. Hier wurden auch grundlegende Spektren wie z. B. reine Elektronenspektren verglichen. Es stellte sich heraus, dass der Geant4 Code einen anderen Verlauf insbesondere im niederenergetischen Bereich aufwies als die MCNP Ergebnisse. Intensive Vergleiche und Diskussionen haben Unterschiede in den Programmierungen und in den Codes selbst aufgezeigt, die sukzessive angeglichen wurden. Unter anderem nutzen die in den Codes hinterlegten Funktionen zur Flussbestimmung unterschiedliche Methoden. Für die Berechnung des Teilchenflusses muss die Anzahl der auftreffenden Teilchen mit der Fläche und dem Auftreffwinkel normiert werden. Wie in /BOO 03/ beschrieben, besteht die Winkelnormierung aus der Division durch den Betrag des Cosinus des Winkels zwischen Teilchen und der Normalen zur Oberfläche (θ). Streift ein Teilchen die Oberfläche mit nahezu 90° zur Normalen der Oberfläche, so strebt der Faktor $1/\cos(\theta)$ gegen Unendlich und führt somit zu hohen Fluss-Beiträgen. Um diese Ausreißer zu verhindern, verwendet MCNP die folgende Annahme zur Glättung:

Wenn $|\cos(\theta)| < 0,1$ dann setze $|\cos(\theta)| = 0,05$.

Das MCNP Manual kommentiert die Konsequenz dieser Näherung entsprechend als nicht korrekte Darstellung des Flusses. Dennoch führt diese Methode zu einer Glättung der Spektren und zu einer praktikablen Lösung. Im Gegensatz dazu verwendet Geant4 diese Annahme nicht. Nach der Identifizierung dieses Unterschieds wurde beschlossen, diese Methode manuell auch bei Geant4 zu implementieren und für eine bessere Vergleichbarkeit in Zukunft zu verwenden. Ein Vergleich von dem Elektronenfluss-Spektrum, das durch 1 MeV Primärelektronen erzeugt wird ist in Abb. 4.2 zu sehen. Während für den Geant4 Code das physikalische Modell PENELOPE (PENetration and Energy Loss of Positrons and Electrons, /SAL 01/) verwendet wurde, ist bei MCNP auf die Datenbank ENDF-B/VII zurückgegriffen worden. Trotz einer generell guten Übereinstimmung zeigen sich in manchen Energiebereichen sichtbare Unterschiede, die auf die verschiedenen Datenbanken zurückzuführen sind. Da sich ein Fluss-Spektrum für ein Radionuklid aus vielen dieser einzelnen Fluss-Spektren zusammensetzt (für jede Energielinie des Nuklids ist ein entsprechendes Fluss-Spektrum zu addieren), kann an diesem Beispiel schon erkannt werden, dass keine identischen Ergebnisse zu erwarten

sind. Dennoch ist die Übereinstimmung hinreichend gut und somit akzeptabel, da keine grundlegenden Unterschiede in den Simulationen erkennbar sind. Diese dennoch sichtbaren Unterschiede bestätigen die Arbeitsgruppe in ihrer Vorgehensweise, verschiedene Codes zu verwenden.

Während des 7. Meetings der Arbeitsgruppe wurde beschlossen, die Untersuchungen auf verschiedene Abschirmungseffekte auszudehnen, um eine wissenschaftliche Basis für die Restabschirmung zu erarbeiten. Diese Ergebnisse wurden für das 8. Meeting erzeugt und diskutiert. Das Ergebnis war die Beibehaltung einer Restabschirmung, die jedoch im Detail nicht reproduziert werden kann, da genaue Angaben nicht dokumentiert sind. Die Arbeitsgruppe konnte übereinkommen, in Zukunft eine Abschirmung von 0,5 mm Stahl 316L mit einer Dichte von 7,8 g/cm³ zu verwenden. Die genaue Zusammensetzung kann dem Dokument PNNL-15870 Rev. 1 des U.S. Department of Homeland Security /MCC 11/ entnommen werden. Die Ergebnisse der weiteren Mitglieder der Arbeitsgruppe lagen zum Ende des Forschungsvorhabens noch nicht vor und können daher hier nicht diskutiert werden. Die Ergebnisse der GRS sind in Abschnitt 5.3 präsentiert.

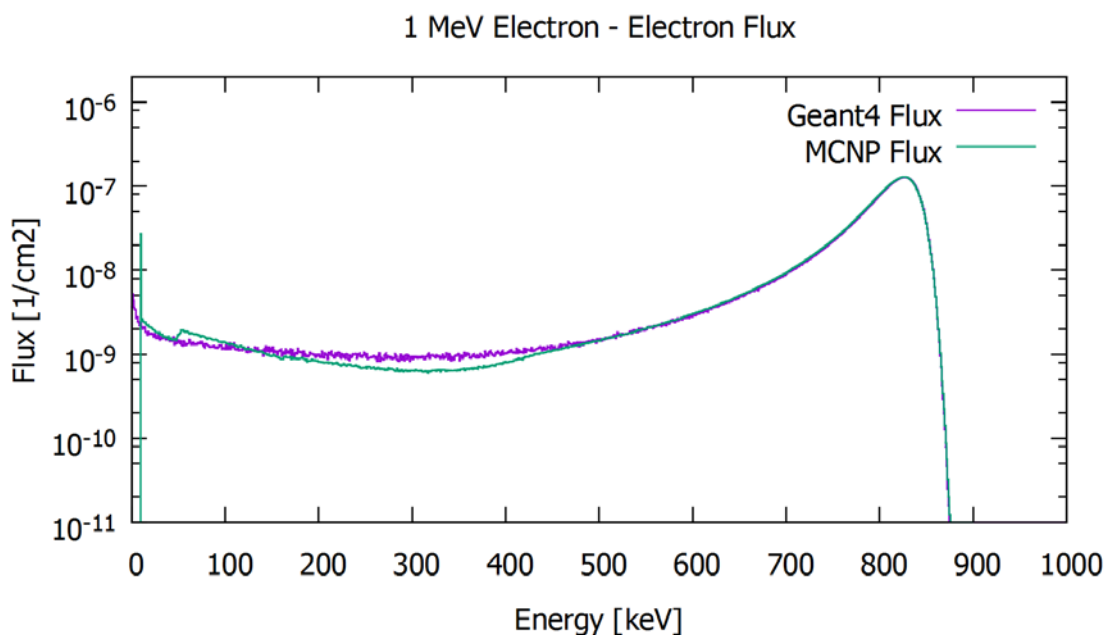


Abb. 4.2 Vergleich der Elektronenflüsse von 1 MeV Primärelektronen von MCNP und Geant4

5 Programmentwicklung und Ergebnisse

5.1 Grundlegende Geometrie und Annahmen

Wie bereits in Kapitel 4 beschrieben, konnten grundlegende Parameter innerhalb der internationalen Arbeitsgruppe festgelegt werden, die für die Simulationen zu verwenden sind. Da die GRS ebenfalls Simulationen durchführt, wurden diese in Abstimmung mit der Arbeitsgruppe angepasst. Dieses Kapitel befasst sich mit der verwendeten Geometrie, beschreibt die entscheidenden Größen und gibt alle festgelegten Eingangsgrößen an.

5.1.1 Geometrie

Um möglichst wenige Änderungen im Vergleich zum aktuellen Q-System vorzunehmen, wird für A_1 - und A_2 -Werte nicht von einer Punktquelle abgewichen und weiterhin ein Abstand zur exponierten Person von 1 m angenommen, siehe Abb. 5.1.

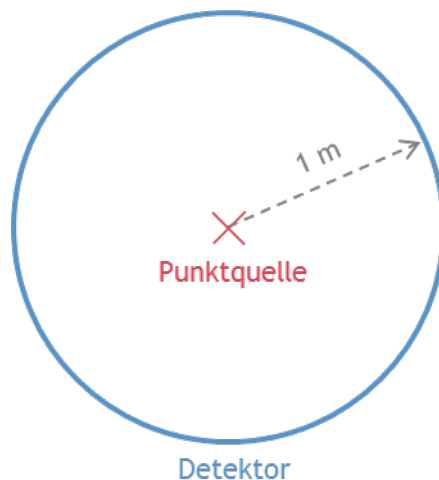


Abb. 5.1 Grundlegende Geometrie für das aktuelle und aktualisierte Q-System

Die Monte-Carlo Simulationen sind 3D Simulationen, sodass eine Kugeloberfläche mit einem Radius von 1 m angenommen wird. Die Kugeloberfläche fungiert als Detektor. Zum Einsatz kommt die Fluss-Methode, die im Gegensatz zur Energiedepositionsmethode lediglich den Teilchenfluss durch eine Fläche, hier die Oberfläche der Kugel, bestimmt, unabhängig davon, welche Wechselwirkungen und Energiedepositionen die Teilchen am Detektor verursachen. Im Gegensatz dazu steht die Energiedepositionsmethode, die durch die Wahl geeigneter geometrischer Körper, z. B. ein menschliches

Phantom, die Energiedosen für einzelne Körperteile simuliert. Durch die Anwendung entsprechender Dosiskoeffizienten kann eine Umrechnung vom Teilchenfluss auf die Dosis erfolgen. Da diese Koeffizienten in der ICRP 116 /PET 10/ veröffentlicht sind, wurde hier auf die komplexe Simulation des menschlichen Körpers verzichtet und die einfachere Geometrie für die Fluss-Methode verwendet. Die Kugel selbst besteht im Inneren aus Luft und außen endet die Welt der Simulation, um Rückstreuungseffekte zu vermeiden. Die Zusammensetzung der Luft wurde mit Air, Dry (near sea level) und einer Dichte von $0,001205 \text{ g/cm}^3$ nach PNNL 15870 Rev. 1 des U.S. Department of Homeland Security /MCC 11/ festgelegt.

Der Teilchenfluss wird über die gesamte Kugeloberfläche vermessen. Daher wird im Folgenden der Begriff Detektor hierfür verwendet.

Wie bereits beschrieben wird dieser Geometrie eine Restabschirmung bestehend aus 0,5 mm Stahl 316L mit einer Dichte von $7,8 \text{ g/cm}^3$ hinzugefügt, siehe PNNL-15870 Rev. 1. Diese wird als Kugel um die Punktquelle platziert.

5.1.2 Festlegungen für die Simulationen

Neben der Geometrie gibt es diverse Eingangsparameter, die in der Arbeitsgruppe festgelegt wurden und in den Codes der GRS übernommen wurden, darunter fallen die Nuklidaten, die Dosiskoeffizienten und die Behandlung von Tochternukliden.

Aktuelle Nuklidaten, die den Stand der Wissenschaft repräsentieren, sind essentielle Eingangsgrößen in die Berechnungen. Die Arbeitsgruppe hat daher beschlossen, die aktuellen Daten aus der ICRP 107 „Nuclear Decay Data for Dosimetric Calculations“ /ICRP 08/ zu verwenden. Diese Publikation stellt Daten für 1252 Radionuklide von 97 Elementen digital zur Verfügung und enthält Informationen u.a. zur Halbwertszeit, zu den Zerfallslinien und deren Intensitäten. Die Daten sind auf verschiedene Files verteilt. Dabei enthält das „Radiation File“ insbesondere für jede Zerfallslinie einen Integer Code (ICODE) und ein Kürzel über den Strahlungstyp sowie die Intensität pro Zerfall und Energie der Linie. Die Zuordnung der ICODE Variable zu den Kürzeln und entsprechenden Strahlungstypen ist in Tab. 5.1 zusammengefasst.

Ein Auszug aus dem „Radiation File“ ist für einen Teil der Co-60 Daten als Beispiel in Tab. 5.2 gezeigt.

Tab. 5.1 Zuordnung der ICODE Variablen

ICODE	Kürzel	Beschreibung
1	G	Gammastrahlen
	PG	Prompte Gammastrahlen*
	DG	Verzögerte Gammastrahlen*
2	X	Röntgenstrahlen
3	AQ	Annihilationsquanten
4	B+	Beta-plus Teilchen
5	B-	Beta-minus Teilchen
	BD	Verzögerte Beta Teilchen*
6	IE	Konversionselektronen
7	AE	Auger Elektronen
8	A	Alphateilchen
9	AR	Alpha-Rückstoßkerne
10	FF	Spaltfragmente
11	N	Neutronen

* Prompte und verzögerte Strahlung aus spontaner Spaltung

Tab. 5.2 Auszug aus dem „Radiation File“ für einen Teil von Co-60

ICODE	Intensität Pro Zerfall	Energie (MeV)	Kürzel
2	3,35E-09	8,29E-03	X
2	4,87E-09	8,29E-03	X
1	7,50E-05	3,47E-01	G
1	7,60E-05	8,26E-01	G
1	9,99E-01	1,17E+00	G
1	1,00E+00	1,33E+00	G
1	1,20E-05	2,16E+00	G
1	2,00E-08	2,51E+00	G
5	9,99E-01	9,59E-02	B-
5	1,20E-03	6,26E-01	B-
7	5,84E-04	4,80E-05	AE
7	7,33E-05	7,88E-05	AE

Ähnliche Strukturen weisen die anderen Daten-Files auf, insbesondere das „Beta Spectra File“, das die diskretisierten Daten für die kontinuierlichen Beta-Spektren enthält, oder das „Neutron Spectra File“, das die entsprechenden Neutronen-Daten aus spontaner Spaltung enthält. Somit können alle Strahlungsarten und deren Intensitäten in den Simulationen berücksichtigt werden. Durch die modernen Monte-Carlo Simulationscodes ist es weiterhin möglich, diverse Wechselwirkungen dieser jeweiligen Primärteilchen zu berücksichtigen. Die entsprechenden Wirkungsquerschnitte für die Wechselwirkung mit Materie beinhalten auch die Wahrscheinlichkeiten für die Bildung sekundärer Strahlung, also auch andere Strahlungsarten. So kann beispielsweise durch ein primäres Elektron auch Bremsstrahlung (Photonen) entstehen. Oder die Annihilation von Positronen führt ebenfalls zur Entstehung von Photonen. Umgekehrt führt die Wechselwirkung von Photonen mit Materie zur Ionisation, wodurch Elektronen als Sekundärteilchen entstehen. Ebenso führt Paarbildung zur Entstehung von Elektronen. Es ist demnach wichtig und technisch möglich, alle Prozesse in der Simulation zu erfassen und auch Sekundärteilchen zu verfolgen und zu dokumentieren. Entsprechend sind durch die Simulationen für jede Strahlungsart der Primärteilchen die Fluss-Spektren aller möglichen Strahlungsarten am Detektor zu generieren.

Die generierten Fluss-Spektren gilt es durch Dosiskonversions-Koeffizienten in eine Dosis zu überführen. Hierfür hat sich die internationale Arbeitsgruppe entschlossen, auf die ICRP 116 „Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures“ /PET 10/ zurückzugreifen. Diese Publikation beinhaltet eine Vielzahl verschiedener energieabhängiger Koeffizienten für diverse Organdosen oder effektive Dosen. Weiterhin sind die Koeffizienten für unterschiedliche Strahlungsfelder, siehe Abb. 3.2, angegeben. Neben einer tabellarischen Darstellung in gedruckter Form stehen die Daten digital zur Verfügung. Eine Auswahl der benötigten Daten kann über ein Excel-Tool erstellt werden. Auszüge aus dem Excel-Tool sind in Abb. 5.2 und Abb. 5.3 gezeigt, wobei ersteres das Auswahlmenü der verschiedenen Optionen und die graphische Darstellung der Werte abbildet. Das zweite Bild (Abb. 5.3) stellt einen Auszug aus den entsprechenden numerischen Werten dar.

Photons (fluence)

Select irradiation conditions and organs

	Condition 1	Condition 2	Condition 3	Condition 4
Irradiation Geometry	AP	ISO	AP	ROT
Tissue or Organ	Brain	Liver	Effective dose	Effective dose
Gender	Male	Female	Male	Female
Remarks			Effective dose is sex-averaged value	Effective dose is sex-averaged value

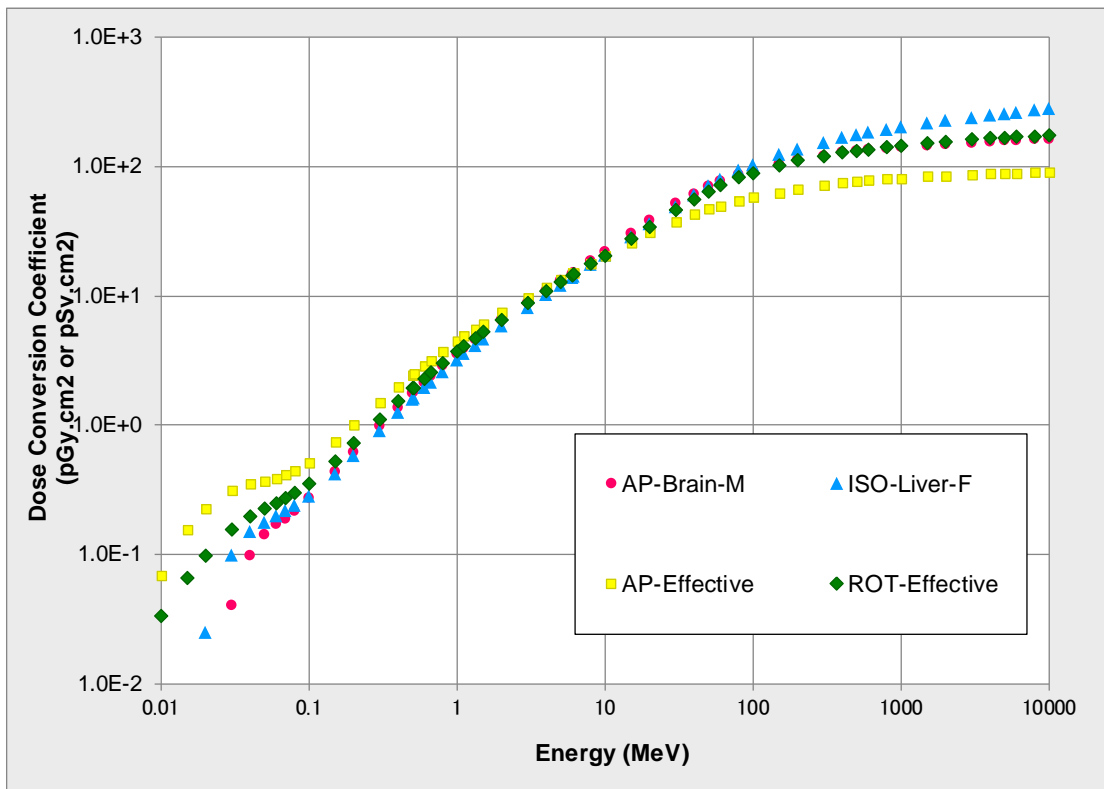


Abb. 5.2 Auszug aus dem Excel-Tool der ICRP 116 /PET 10/

Numerical Data for Dose Conversion Coefficient				
Energy (MeV)	AP-Brain-M (pGy cm ²)	ISO-Liver-F (pGy cm ²)	AP-Effective (pSv cm ²)	ROT-Effective (pSv cm ²)
0.01	3.60E-07	6.60E-06	6.85E-02	3.37E-02
0.015	9.70E-05	3.10E-03	1.56E-01	6.64E-02
0.02	2.20E-03	2.48E-02	2.25E-01	9.86E-02
0.03	4.00E-02	9.84E-02	3.13E-01	1.58E-01
0.04	9.88E-02	1.49E-01	3.51E-01	1.99E-01
0.05	1.41E-01	1.77E-01	3.70E-01	2.26E-01
0.06	1.70E-01	1.98E-01	3.90E-01	2.48E-01
0.07	1.88E-01	2.17E-01	4.13E-01	2.73E-01
0.08	2.19E-01	2.36E-01	4.44E-01	2.97E-01
0.1	2.74E-01	2.83E-01	5.19E-01	3.55E-01
0.15	4.32E-01	4.20E-01	7.48E-01	5.28E-01
0.2	6.12E-01	5.73E-01	1.00E+00	7.21E-01
0.3	9.90E-01	9.05E-01	1.51E+00	1.12E+00
0.4	1.38E+00	1.25E+00	2.00E+00	1.52E+00
0.5	1.77E+00	1.59E+00	2.47E+00	1.92E+00
0.511	1.81E+00	1.62E+00	2.52E+00	1.96E+00
0.6	2.15E+00	1.92E+00	2.91E+00	2.30E+00
0.662	2.38E+00	2.12E+00	3.17E+00	2.54E+00
0.8	2.87E+00	2.56E+00	3.73E+00	3.04E+00
1	3.56E+00	3.17E+00	4.49E+00	3.72E+00
1.117	3.94E+00	3.52E+00	4.90E+00	4.10E+00
1.33	4.61E+00	4.12E+00	5.59E+00	4.75E+00
1.5	5.12E+00	4.58E+00	6.12E+00	5.24E+00

Abb. 5.3 Auszug der numerischen Daten aus dem Excel-Tool der ICRP 116 /PET 10/

Tab. 5.3 Zu verwendende Tabellen mit Dosiskoeffizienten der ICRP 116 /PET 10/

Strahlungsart	Effektive Dosis	Hautdosis	Augenlinse
Photonen	Tabelle A.1	Mittelwert aus Tabellen B.12 und B.26	Tabelle F.1
Elektronen	Tabelle A.3	Tabelle G.1	Tabelle F.2
Positronen	Tabelle A.4	Tabelle G.1	Tabelle F.2
Neutronen	Tabelle A.5	Mittelwert aus Tabellen C.12 und C.26	Tabelle F.3

Durch Multiplikation der Koeffizienten mit den Teilchenflüssen und Summation über die Energie-Intervalle kann die gewünschte Dosis berechnet werden. Hier zeigt sich erneut der Vorteil der Fluss-Methode, da die Multiplikation der Koeffizienten keine nennenswerte Computer-Leistung beansprucht. Wird ein anderer Koeffizient verlangt, so sind keine neuen Simulationen durchzuführen, sondern die bereits simulierten Flüsse können auf andere Koeffizienten angewendet werden. Die Arbeitsgruppe hat die zu ver-

wendenden Tabellen aus der ICRP 116 für die effektive Dosis, die Hautdosis und die Augenlinse festgelegt. Eine Übersicht ist in Tab. 5.3 gegeben.

Die bereits diskutierten Parameter legen die Grundlagen für die Berechnung einzelner Nuklide fest. Ein teilweise offener und weiterhin in der Arbeitsgruppe diskutierter Punkt bezieht sich auf die Behandlung von radioaktiven Tochternukliden. Dabei ist zwischen den Fragen zu unterscheiden welche Nuklide berücksichtigt werden sollen und wie sie zu berücksichtigen sind. Die geltende Regel des aktuellen Q-Systems soll dabei so weit wie möglich weiter Bestand haben. Welche Nuklide betroffen sind, ist im Folgenden definiert und soll auch in einem überarbeiteten Q-System angewendet werden.

- Bei Radionukliden, deren Töchter eine Halbwertszeit kleiner 10 Tagen haben und die Halbwertszeiten dieser Töchter kleiner oder gleich der Halbwertszeit des Mutternuklids sind, sind die Beiträge der Töchter bei den A-Werten des Mutternuklids mit zu berücksichtigen.
- Bei Radionukliden mit Töchtern, bei denen obige Bedingungen nicht zutreffen, sind die Beiträge der Töchter über die Berechnung als Nuklidgemisch zu berücksichtigen.

Offen ist die Frage, wie die Berücksichtigung erfolgen soll. Es gibt verschiedene Ansätze, z. B. die Annahme eines säkularen Gleichgewichts, die jedoch innerhalb der Arbeitsgruppe zum Zeitpunkt der Berichtserstellung noch nicht abschließend geklärt werden konnten.

5.2 Monte-Carlo Based A-value Simulator (MCBAS)

Die GRS hat im Rahmen des Forschungsvorhabens unter Berücksichtigung der Entscheidungen der internationalen Arbeitsgruppe mit der Entwicklung von Computer-Programmen begonnen, die der Berechnung von A-Werten dienen. Ein entscheidender Faktor bei der Programmierung war die Minimierung der rechenintensiven Monte-Carlo Simulationen. Bisherige Vorschläge und Verfahrensweisen innerhalb der Arbeitsgruppe waren zeitintensive Berechnungen, die bei einer Skalierung auf über 700 Nuklide zu mehrmonatigem Rechenaufwand führen würden. Die gängige Methode basierte auf der Verwendung jeder Energie-Linie, die in der ICRP 107 für jedes Nuklid aufgeführt wird. Dies hat zur Folge, dass Linien, die sich energetisch nur minimal unterscheiden oder sogar identisch sind, mehrfach simuliert werden, ohne Kredit voneinander zu nehmen, z. B. in dem die Statistik erhöht wird. Eine weitere Einschränkung ist die Tat-

sache, dass neue Nuklide wieder einer neuen Simulation bedürfen. Ziel der GRS war es, eine Methode zu entwickeln, die eine Entkopplung von Rechenzeit intensiven Simulationen ermöglicht und zugleich die Berechnung neuer Nuklide ohne zusätzliche Simulationen erlaubt. Das Ergebnis ist das mit C/C++ programmierte und weiterhin in der Entwicklung befindliche Programm „Monte-Carlo Based A-value Simulator“ (MCBAS). Dieses Programm ist selbst kein MC-Code und führt daher keine Simulationen aus, sondern greift auf eine Datenbank zurück, die mit dem MC-Code Geant4 erzeugt wird. Diese Datenbank besteht aus Fluss-Spektren für die aus diskreten Primärenergien resultierenden Sekundärteilchen. Die Diskretisierung der Primärenergien erfolgte bisher in 1 keV- bzw. 5 keV-Schritten. Die 5 keV-Schritte wurden für Primärenergien von 10 keV bis 10 MeV durchgeführt. Zusätzlich wurde für die Energien der Nuklidliste Fluss-Spektren in 1 keV-Schritten erzeugt, um den Einfluss des dadurch auftretenden Fehlers zu untersuchen. Steht diese Datenbank zur Verfügung, können auch neue Nuklide berechnet werden, bzw. Änderungen der Nuklidliste schnell einbezogen werden ohne alle Simulationen zu wiederholen. Jede Energie der ICRP 107 wird von MCBAS eingelesen und entsprechend auf die zur Verfügung stehende Schrittweite der Datenbank gerundet. Als Beispiel bedeutet dies eine Rundung der 1332,49 keV Linie von Co-60 auf das 1330 keV Fluss-Spektrum der Datenbank, falls eine 5 keV Schrittweite vorliegt. Die Entscheidung, welche Schrittweite die Datenbank am Ende der Entwicklung haben wird, hängt von der Fehleranalyse ab. Es darf keine größere Abweichung durch die Schrittweite entstehen, da sonst der Einfluss dieser Methode auf die Genauigkeit der Ergebnisse zu groß wäre. Ein Nachteil an einer kleinen Schrittweite ist die Vergrößerung der Datenbank. Jedes Fluss-Spektrum ist in einer eigenen Datei abgelegt. Dabei ist eine eindeutige Nomenklatur für die Dateien vorgegeben, die folgende Aspekte enthält:

- Strahlungsart des Primärteilchens
- Energie des Primärteilchens
- Strahlungsart des Sekundärteilchens

Somit stehen beispielsweise für ein primäres Photon mit einer Energie von 1330 keV drei Fluss-Spektren zur Verfügung, entsprechend der drei möglichen Sekundärteilchen (Photonen, Elektronen, Positronen). Zur Simulation dieser Spektren wurde das C++ basierte Framework Geant4 verwendet, ein Monte-Carlo Simulationstool das am CERN für die Kern- und Teilchenphysik entwickelt und auch im Rahmen der ICRP 116 bereits verwendet wurde. Neben der bereits beschriebenen Geometrie und anderen Randbedingungen wurde ein entsprechendes Modell mit Geant4 programmiert und die

entsprechenden Energien simuliert. Dabei wurde für den aktuellen Satz an Spektren für Photonen 10 Millionen Primärteilchen simuliert und für Elektronen sowie Positronen 1 Millionen. Aufgrund der höheren Anzahl an Wechselwirkungen sind die Simulationen von Elektronen und Positronen deutlich zeitintensiver als für Photonen. Die Statistik und damit die Genauigkeit der Ergebnisse skaliert mit der Anzahl der simulierten Teilchen und damit mit der Rechenzeit. Für intensive Rechenoperationen steht der GRS ein Computercluster zur Verfügung. Dieser Cluster besteht aus 41 Knoten, die jeweils mit zwei Intel 10-Kern Prozessoren bestückt sind. Insgesamt stehen 820 Kerne zur Verfügung und 5,7 TB Arbeitsspeicher. Die aktuelle Datenbank zum Zeitpunkt der Berichtserstellung umfasste über 57.000 Fluss-Spektren, deren Erzeugung mit Geant4 über 20.000 CPU-h benötigte. Dabei wurden teilweise über 100 Kerne des Clusters parallel verwendet, um die Wartezeit zu verkürzen. Eine Visualisierung der Simulationen ist in Abb. 5.4 gezeigt. Zu sehen ist der Detektor und in dessen Ursprung der Entstehungspunkt der Primärteilchen. In rot sind die Spuren von Elektronen zu sehen, wobei die gelben Punkte Wechselwirkungspunkte darstellen. In diesem Beispiel wurden Elektronen mit einer Energie von 5 MeV erzeugt, die in einem Fall zur Entstehung eines Photons führten, dessen Trajektorie in grün dargestellt ist.

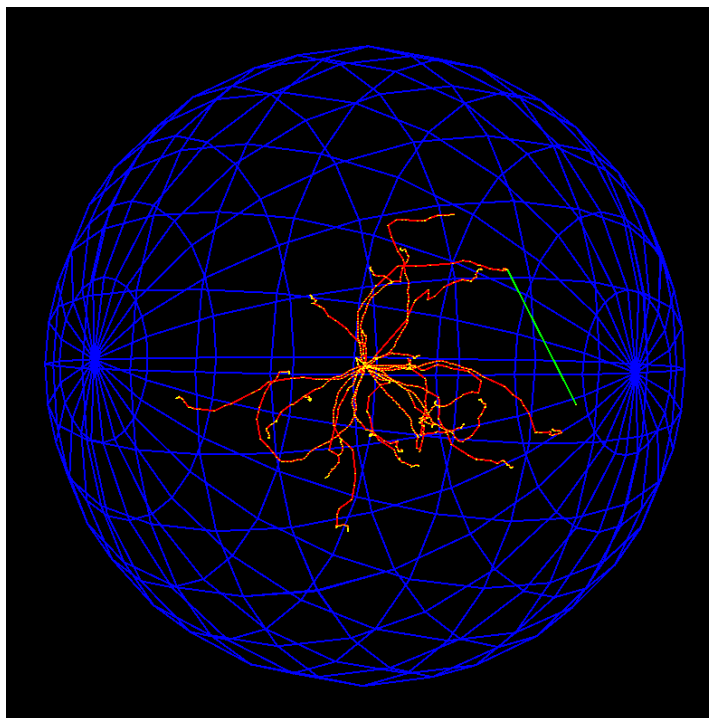


Abb. 5.4 Visualisierung einer Geant4 Simulation

Die Datenbank aus Fluss-Spektren bildet ein zentrales Element des MCBAS-Codes, der im Wesentlichen folgender Vorgehensweise folgt:

- Einlesen der Nukliddaten aus der ICRP 107
- Einlesen der Dosiskoeffizienten der ICRP 116
- Einlesen der benötigten Fluss-Spektren aus der Datenbank
- Normierung der Fluss-Spektren auf die Intensität der Linie
- Summation der einzelnen Fluss-Spektren für jede Strahlungsart
- Erweiterung um die relevanten Tochternuklide
- Output der finalen Fluss-Spektren für das aktuelle Nuklid
- Multiplikation der summierten Fluss-Spektren mit den Dosiskoeffizienten
- Integration über die Energie der erhaltenen Produkte (entspricht der Dosis)
- Summation über die Dosisbeiträge der einzelnen Strahlungsarten
- Berechnung der Q-Werte
- Output der Q-Werte und Dosisbeiträge

Die einzelnen Schritte in MCBAS sind modular aufgebaut, sodass Änderungen oder Anpassungen an neue Eingangsparameter einfach durchgeführt werden können. Da der Code selbst keine Simulationen mehr durchführen muss, stellt er eine geschwindigkeitsoptimierte Methode dar, sodass ein Nuklid wie Co-60 lediglich eine Sekunde zur Berechnung benötigt. Die Berechnungszeit skaliert mit der Anzahl an Zerfallslinien und Tochternukliden. Die Vorteile von MCBAS sind im Folgenden zusammengefasst:

- Entkopplung von zeitaufwändigen MC Simulationen
- Installation ohne komplexe weitere Programme wie MC Codes
- MCBAS führt selbst keine MC Simulationen durch: sehr schnelle Berechnungen
- Modularer Aufbau: Einfaches Erneuern oder Ergänzen von Nukliddaten
- Einfaches Ein-/Ausschalten von Effekten, z. B. Bremsstrahlung durch Elektronen
- Schnelle Berechnung neuer Nuklide
- Schnelle Berechnung von Nukliden, die nicht in der ICRP geführt sind, z. B. n-Quellen
- Schnelle Berechnung für neue Strahlenfelder
- Keine Schwellen für kleine Intensitäten notwendig

Insbesondere eignet sich die in MCBAS verwendete Methode zu Analysezwecken während der Entwicklung eines überarbeiteten Q-Systems. Ein zentraler Aspekt ist der Vergleich mit den aktuell gültigen Werten und der Frage nach dem Ursprung möglicher Veränderungen. Sollten sich durch die neuen Annahmen und Berechnungsverfahren

starke Änderungen von Q - oder A -Werten ergeben, so ist der Grund für diese Änderungen zu analysieren. Dies erhöht zum einen die Transparenz der neuen Methoden und führt andererseits zu einer höheren Akzeptanz der TRANSSC, der Behörden und insbesondere der Anwender, falls neue Werte Einzug in die Regelwerke erhalten.

Der aktuelle Status der Entwicklungen von MCBAS erlauben diverse Analysen und die Berechnung von A_1 -Werten auf der Basis der in der Arbeitsgruppe beschlossenen Grundlagen. Die Möglichkeiten der Analyse werden im Abschnitt 5.3 mit den Ergebnissen präsentiert.

5.3 Ergebnisse

Auf Basis der in den Abschnitten 5.1 und 5.2 beschriebenen Grundlagen und Methoden wurden die Q - und A -Werte für die ausgewählte Nuklidliste mit Dosiskoeffizienten für das isotrope Strahlungsfeld (ISO) berechnet. Außerdem wurden die relevanten Tochternuklide unter der Annahme eines säkularen Gleichgewichts berücksichtigt. Dosiskoeffizienten der ICRP 116 wurden linear interpoliert. Die Ergebnisse für die berechneten Q -Werte aus dem aktuellen Q -System nach BerQATrans sind im Vergleich zu den Ergebnissen mit MCBAS in Tab. 5.4 dargestellt, während sich die resultierenden A -Werte in Tab. 5.5 befinden. Die jeweils dominierenden Q -Werte sind fett gedruckt dargestellt. In beiden Tabellen sind zusätzlich jeweils die Verhältnisse der Ergebnisse zwischen MCBAS und BerQATrans angegeben, um die Veränderungen hervorzuheben. Es handelt sich bei den angegebenen Werten nicht um finale Ergebnisse, da sich sowohl die Code-Entwicklung nicht abgeschlossen ist, als auch Änderungen der Eingangsparameter durch die internationale Arbeitsgruppe vorgenommen werden können. Im Folgenden werden die einzelnen Ergebnisse im Detail analysiert. Für den Vergleich der Werte ist zu berücksichtigen, dass für MCBAS die Einflüsse aller Strahlungsarten summiert werden. Während das aktuelle Q -System für Q_A lediglich die durch Photonen verursachte Dosis berücksichtigt, summiert MCBAS die Beiträge von Photonen, Elektronen und Positronen. Für Q_B wird aktuell nur der Elektronenbeitrag verwendet, während MCBAS ebenfalls alle drei Beiträge summiert. Zur Analyse der Beiträge gibt MCBAS für jeden einzelnen Dosisbeitrag den entsprechenden theoretischen Q -Wert aus. Für Q_A werden entsprechend $Q_{A,p}$, Q_{A,e^-} , Q_{A,e^+} für Photonen, Elektronen und Positronen ausgegeben. Analog gilt dies für $Q_{B,p}$, Q_{B,e^-} , Q_{B,e^+} . Daraus folgt, dass die aktuellen Q_A Werte von den berücksichtigten Beiträgen dem neuen $Q_{A,p}$ entsprechen und die aktuellen Q_B Werte dem von MCBAS berechneten Q_{B,e^-} . Es ist darauf

hinzuweisen, dass der resultierende Q-Wert nicht die Summe der Beiträge ist, sondern sich die gesamte Dosisleistung durch Summation der einzelnen Dosisleistungsbeiträge ergibt. Der Grund liegt in der Berechnung des Q-Werts, die aus Dosislimit durch Dosisleistung erfolgt.

Tab. 5.4 Errechnete Q-Werte für die Nuklidliste

Nuklid	Chem. Form	Halbwertszeit		BerQATrans		MCBAS (Abschirmung 0,5 mm Stahl)		MCBAS / BerQATrans	
				Q _A (TBq)	Q _B (TBq)	Q _A (TBq)	Q _B (TBq)	Q _A Ratio	Q _B Ratio
Co-60	S	5,2713	a	4,5E-01	4,5E+02	4,4E-01	1,8E+00	97,3%	0,4%
Cs-134	F	2,0648	a	7,1E-01	3,4E+00	6,8E-01	2,3E+00	95,8%	68,9%
Cs-137	F	30,167	a	1,9E+00	6,7E+00	1,9E+00	6,1E+00	98,8%	91,0%
Eu-154	M	8,593	a	9,1E-01	1,5E+00	8,7E-01	2,1E+00	95,2%	140,7%
F-18	S	109,77	min	1,1E+00	3,4E+01	1,0E+00	3,6E+00	92,8%	10,6%
Ir-192	S	73,827	d	1,3E+00	4,5E+01	1,3E+00	5,3E+00	101,0%	11,9%
Kr-85		10,756	a	4,8E+02	1,6E+01	3,0E+02	1,3E+03	63,0%	8063,6%
Ru-106	S	373,59	d	5,3E+00	2,3E-01	1,2E+00	1,6E-01	23,4%	71,1%
Sr-90	S	28,79	a	1,0E+06	3,2E-01	5,3E+00	2,7E-01	0,0%	83,4%
Tc-99m	M	6,015	h	1,0E+01	2,3E+13	9,2E+00	7,4E+01	92,0%	0,0%

Tab. 5.5 Errechnete A-Werte für die Nuklidliste

Nuklid	BerQATrans	MCBAS	MCBAS / BerQATrans
	A ₁ (TBq)	A ₁ (TBq)	A ₁ Ratio
Co-60	4,5E-01	4,4E-01	97%
Cs-134	7,1E-01	6,8E-01	96%
Cs-137	1,9E+00	1,9E+00	99%
Eu-154	9,1E-01	8,7E-01	95%
F-18	1,1E+00	1,0E+00	93%
Ir-192	1,3E+00	1,3E+00	101%
Kr-85	1,6E+01	3,0E+02	1889%
Ru-106	2,3E-01	1,6E-01	71%
Sr-90	3,2E-01	2,7E-01	83%
Tc-99m	1,0E+01	9,2E+00	92%

5.3.1 Analyse der berechneten Q_A Werte

Die einzelnen Beiträge Q_{A,p}, Q_{A,e-}, Q_{A,e+} sowie der resultierende A-Wert sind für MCBAS und im Vergleich zu den aktuellen Werten die mit BerQATrans berechnet wurden, in Tab. 5.6 für die Nuklidliste dargestellt. Wie bereits in Tab. 5.5 zu erkennen ist, stimmen

die Werte der meisten Nuklide im Rahmen von 10 % mit den aktuellen Werten überein. Hier dominieren auch die Beiträge durch Photonen, sodass der Einfluss der veränderten Berechnung, bzw. zusätzlichen Beiträge, vernachlässigbar ist. Ausnahmen bilden Kr-85, Ru-106 sowie Sr-90. Diese Nuklide werden daher in diesem Abschnitt im Detail besprochen. Für eine detaillierte Analyse können daher sowohl die Einzelbeiträge der verschiedenen Strahlungsarten betrachtet werden, sowie separat die Dosisbeiträge durch Bremsstrahlung, siehe Tab. 5.7.

Für Kr-85 zeigt sich bereits in Tab. 5.4, dass der A -Wert aus unterschiedlichen Q -Werten resultiert. Während der aktuelle A -Wert durch Q_B gegeben ist, errechnet MCBAS eine Dominanz durch Q_A . Aber auch der reine Vergleich der Q_A -Werte beider Berechnungsverfahren zeigt lediglich eine Übereinstimmung von 63,0 %. Dieser Unterschied kann ebenfalls nicht durch einen hohen Elektronen- oder Positronenbeitrag erklärt werden, da Q_A bei MCBAS von dem Photonenbeitrag $Q_{A,p}$ dominiert ist. Dieser Beitrag ist jedoch stärker ausgeprägt als im aktuellen Q -System. Die Erklärung liegt in der Entstehung von signifikant mehr Photonen bei der Verwendung von Monto-Carlo Methoden unter Verwendung der bekannten Wechselwirkungen. In diesem Fall führt die durch Elektronen erzeugte Bremsstrahlung zu der erhöhten Dosisleistung, siehe Tab. 5.7. In dieser Tabelle sind die Dosisleistungen angegeben, die insgesamt durch sämtliche Photonen erzeugt werden, sowie der Anteil, der aus der Bremsstrahlung stammt. Der aktuelle Stand der Entwicklungen von MCBAS erlaubt jedoch keine Unterscheidung der Photonen durch Annihilation und Bremsstrahlung, sodass für F-18 kein Wert angegeben ist. Weiterhin ist in Tab. 5.7 der Q_A -Wert angegeben, der sich ohne Bremsstrahlung ergeben würde. Wie sich zeigt, ist der Anteil an Bremsstrahlung für Kr-85 mit ca. 36 % signifikant und führt zu einem Q_A -Wert ohne Bremsstrahlung ($Q_{A \text{ ohne BS}}$) von 472 TBq im Vergleich zu 480 TBq aus dem aktuellen Q -System. Dies entspricht einer Übereinstimmung von ca. 98 %. Dieses Beispiel zeigt eindrucksvoll die Reproduzierbarkeit der aktuellen Werte, wenn die Berechnungen auf das damals angewendete Maß reduziert werden. Durch Hinzufügen der nun berücksichtigten Strahlungsarten und Wechselwirkungen ergeben sich wie im Fall von Kr-85 veränderte Werte, die jedoch analysiert und erklärt werden können.

Mit Ru-106 kommt ein anderer Effekt zum Tragen, da hier der Q_A -Wert in MCBAS nicht durch den Photonenbeitrag $Q_{A,p}$, sondern durch den Elektronenbeitrag $Q_{A,e}$ dominiert ist. Somit liegt der Hauptunterschied der Werte in der Tatsache, dass die Arbeitsgruppe entschieden hat, alle Strahlungsarten in die effektive Dosis mit einzubeziehen, an-

statt wie im aktuellen Q-System lediglich die Photonen zu berücksichtigen. Es zeigt sich zusätzlich wie im Fall von Kr-85, dass sich der aktuelle Q_A -Wert jedoch auch mit MCBAS reproduzieren lässt, indem ein Vergleich zwischen dem aktuellen Q_A -Wert und $Q_{A,p}$ gezogen wird. Hier kann schon eine Übereinstimmung von 86 % gefunden werden, siehe Tab. 5.6. Wird zusätzlich der Beitrag der Bremsstrahlung berücksichtigt, siehe Tab. 5.7, so weist der Q_A -Wert von MCBAS ohne den Beitrag von Bremsstrahlung eine Übereinstimmung von ca. 97 % auf (5,16 TBq für MCBAS im Vergleich zu 5,3 TBq für BerQATrans). Auch dieses Beispiel zeigt demnach den Ursprung der Veränderungen durch die neuen Methoden.

Bei Sr-90 ist eine Änderung der Werte zu erwarten und wird in Tab. 5.6 bestätigt. Der Grund liegt im Wesentlichen an den Nuklideigenschaften dieses Radioisotops und seiner Tochter Y-90. Während Sr-90 ein reiner Beta-Strahler ist, weist der Zerfall von Y-90 schwache Intensitäten von Röntgenstrahlung, sowie einer Gamma-Linie mit niedriger Intensität (ca. $1,4 \cdot 10^{-6}$) auf. Diese Beiträge sind jedoch nahezu vernachlässigbar, wodurch in BerQATrans ein Limit von $1 \cdot 10^6$ TBq gesetzt wurde. Die neue Methodik in MCBAS berücksichtigt jedoch die Beiträge anderer Strahlungsarten und somit dominiert in diesem Fall der Beitrag der Elektronen, siehe $Q_{A,e}$ in Tab. 5.6. Allerdings ist auch der $Q_{A,e}$ -Wert um Größenordnungen verschieden. Dies resultiert aus der Entstehung von Bremsstrahlung. Wie in Tab. 5.7 zu sehen ist, kann der Beitrag der Photonen zu nahezu 100 % auf Bremsstrahlung zurückgeführt werden. Daraus resultiert ein theoretischer Q-Wert ohne Bremsstrahlung von $1 \cdot 10^7$ TBq und weist damit einen Einfluss um mehrere Größenordnungen auf.

Zusammenfassend konnte für die Q_A -Werte gezeigt werden, dass unter Anpassung der Bedingungen die aktuellen Werte aus BerQATrans reproduziert werden können. Dies ist essentiell, da nur kleine Abweichungen bei grundsätzlich gleichen Annahmen akzeptabel sind. Für große Abweichungen wäre insbesondere in der Entwicklungsphase des Codes von Fehlern auszugehen. Die Übereinstimmungen bestätigen somit die korrekte Funktionsweise des Codes. Ein wichtiger Vorteil von MCBAS besteht in der Ausgabe verschiedener Größen und Beiträge, die zu Analysezwecken herangezogen werden können, um auftretende Unterschiede zu untersuchen. Diese Möglichkeiten konnten an den Beispielen Kr-85, Ru-106 sowie Sr-90 gezeigt werden. In allen Fällen wurde eine Erklärung für die Abweichungen gefunden und somit kann dokumentiert werden, aus welchem Grund eine Änderung von Werten auftritt. Wie bereits beschrieben stellt

dies eine grundlegende Voraussetzung für die Dokumentation dar, die von der internationalen Arbeitsgruppe gefordert ist.

Tab. 5.6 Errechnete Einzelbeiträge von Q_A für die Nuklidliste

Nuklid	$Q_{A,p}$	$Q_{A,e-}$	$Q_{A,e+}$	Q_A MCBAS	Q_A BerQATrans
	TBq	TBq	TBq	TBq	TBq
Co-60	4,39E-01	1,20E+02	1,13E+06	4,38E-01	4,50E-01
Cs-134	6,81E-01	4,55E+02	8,19E+07	6,80E-01	7,10E-01
Cs-137	1,88E+00	1,45E+03	/	1,88E+00	1,90E+00
Eu-154	8,72E-01	1,36E+02	6,78E+06	8,67E-01	9,10E-01
F-18	1,02E+00	1,44E+03	/	1,02E+00	1,10E+00
Ir-192	1,31E+00	3,00E+03	1,47E+11	1,31E+00	1,30E+00
Kr-85	3,02E+02	6,33E+05	/	3,02E+02	4,80E+02
Ru-106	4,56E+00	1,70E+00	2,08E+06	1,24E+00	5,30E+00
Sr-90	6,15E+01	5,81E+00	4,72E+11	5,31E+00	1,00E+06
Tc-99m	9,20E+00	3,24E+05	/	9,20E+00	1,00E+01

Tab. 5.7 Dosisbeiträge durch Bremsstrahlung

Nuklid	Total	Bremsstr.	Ratio	MCBAS		BerQATrans
				Q_A ohne BS	Q_A incl. BS	Q_A
				TBq	TBq	TBq
Co-60	2,28E-13	1,58E-17	0,01%	4,39E-01	4,38E-01	4,50E-01
Cs-134	1,47E-13	6,65E-17	0,05%	6,81E-01	6,80E-01	7,10E-01
Cs-137	5,32E-14	1,24E-16	0,23%	1,88E+00	1,88E+00	1,90E+00
Eu-154	1,15E-13	1,64E-16	0,14%	8,73E-01	8,67E-01	9,10E-01
F-18	9,79E-14	Annihilation! Keine reinen BS Spektren!				1,10E+00
Ir-192	7,61E-14	8,05E-17	0,11%	1,32E+00	1,31E+00	1,30E+00
Kr-85	3,31E-16	1,19E-16	35,98%	4,72E+02	3,02E+02	4,80E+02
Ru-106	2,20E-14	2,55E-15	11,63%	5,16E+00	1,24E+00	5,30E+00
Sr-90	1,63E-15	1,63E-15	100,00%	1,00E+07	5,31E+00	1,00E+06
Tc-99m	1,09E-14	3,91E-17	0,36%	9,24E+00	9,20E+00	1,00E+01

5.3.2 Analyse der berechneten Q_B Werte

Die Berechnungsgrundlage für die Q_B -Werte unterscheidet sich zwischen dem aktuellen System und MCBAS grundlegender als für die Q_A -Werte. Zum einen ist die Berücksichtigung aller Strahlungsarten wie bei den Q_A -Werten ein zentrales Element, jedoch hat auch die Restabschirmung einen wesentlichen Einfluss auf die Elektronen. Die Dokumentation des aktuellen Q-Systems weist lediglich auf eine Restabschirmung mit einer Dicke von 150 mg/cm² hin. Die zu verwendende Abschirmung, die in der internationalen Arbeitsgruppe entschieden wurde, entspricht ca. 390 mg/cm². Somit besteht

hier ein wesentlicher Aspekt, der zu Änderungen der Werte führt, die in einer Analyse schwer zu quantifizieren ist. Weiterhin ist die Berechnungsgrundlage im aktuellen Q-System komplex und wesentlich unähnlicher zur neuen Methodik als im Vergleich zu den Q_A -Werten. Somit besteht weder die Anforderung noch der Anspruch, die aktuellen Werte reproduzieren zu können. Ein Vergleich der Werte ist teilweise nicht sinnvoll.

Die Q_B -Werte sowie die einzelnen Beiträge der verschiedenen Strahlungsarten sind in Tab. 5.8 zusammengefasst, wobei dominierende Beiträge fett gedruckt sind. Es ist auffällig, dass nur für Ru-106, Sr-90 und Tc-99m ein dominanter Beitrag zu identifizieren ist. Bei allen anderen Nukliden sind die Beiträge von Elektronen und Photonen in der gleichen Größenordnung und tragen beide zum resultierenden Q_B -Wert bei.

Tab. 5.8 Errechnete Einzelbeiträge von Q_B für die Nuklidliste

Nuklid	$Q_{B,p}$	Q_{B,e^-}	Q_{B,e^+}	Q_B MCBAS	Q_B BerQATrans
	TBq	TBq	TBq	TBq	TBq
Co-60	4,57E+00	3,05E+00	1,93E+04	1,83E+00	4,5E+02
Cs-134	6,11E+00	3,80E+00	1,39E+06	2,34E+00	3,4E+00
Cs-137	1,65E+01	9,66E+00	/	6,09E+00	6,7E+00
Eu-154	8,44E+00	2,81E+00	1,46E+05	2,11E+00	1,5E+00
F-18	8,68E+00	6,13E+00	/	3,59E+00	3,4E+01
Ir-192	1,09E+01	1,05E+01	2,09E+09	5,36E+00	4,5E+01
Kr-85	2,49E+03	2,69E+03	/	1,29E+03	1,6E+01
Ru-106	3,96E+01	1,64E-01	1,01E+05	1,64E-01	2,3E-01
Sr-90	4,61E+02	2,67E-01	2,25E+10	2,67E-01	3,2E-01
Tc-99m	7,69E+01	2,50E+03	/	7,46E+01	2,3E+13

Dennoch stehen Analysemöglichkeiten zur Verfügung. Beispielsweise kann untersucht werden, welcher Anteil des Q_B -Werts in MCBAS durch sekundäre Elektronen erzeugt wird, die von primären Photonen z. B. durch Ionisation entstehen. Dieser Anteil ist lediglich für Ru-106, Sr-90 sowie Tc-99m vernachlässigbar, bzw. für F-18 nicht direkt analysierbar. Für alle anderen Nuklide liegt der Anteil zwischen 36 % (Eu-154) und 61 % (Cs-134) und ist damit signifikant. Die Tatsache, dass sowohl die Photonenflüsse als auch die Elektronenflüsse häufig ähnliche Beiträge liefern und sekundäre Prozesse wie Elektronen durch Ionisation von Photonen ebenfalls signifikante Beiträge liefern, zeigt, dass es sich hier um eine Verkettung mehrerer Einflüsse handelt. Dies erschwert eine detaillierte Analyse zur Reproduktion der aktuellen Q_B -Werte zusätzlich.

Als Konsequenz ist es wichtig, die Resultate mit den Ergebnissen der anderen Arbeitsgruppen-Mitglieder zu vergleichen, um die Werte und Methodik zu verifizieren. Da beim

Erstellen des Berichts noch keine Ergebnisse der anderen Mitglieder vorlagen, kann dieser Vergleich nicht vollzogen werden.

6 Diskussion und Ausblick

Wie bereits diskutiert, sind die dargelegten Daten lediglich vorläufige Ergebnisse, da sich sowohl der Code MCBAS noch in der Entwicklung befindet, als auch die Arbeitsgruppe unter Umständen Änderungen der Eingangsparameter beschließt. In diesem Abschnitt werden daher die ausstehenden geplanten Entwicklungen vorgestellt.

6.1 Fehlerrechnung

Viele Faktoren beeinflussen die Ergebnisse bei derart komplexen Rechnungen. Daher ist es essentiell und eine grundlegende wissenschaftliche Vorgehensweise, Berechnungen mit einer Fehlerrechnung zu begleiten, um die Unsicherheit der Ergebnisse angeben zu können. Insbesondere bei Monte-Carlo Simulationen kann die statistische Unsicherheit zu großen Fehlern führen. Im Wesentlichen ist die Statistik von der Anzahl an generierten Primärteilchen abhängig. MCBAS verfügt bereits über eine statistische Fehlerrechnung, die auf der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung beruht. Die statistischen Fehler sind in Tab. 6.1 angegeben. Es zeigt sich, dass die relativen Fehler für Q_A unter 0,1 % liegen und für Q_B unter 1 %. Diese sehr kleinen Fehler zeigen, dass die Anzahl an generierten Primärteilchen in den Simulationen ausreichend ist, um eine hohe statistische Genauigkeit zu erreichen.

Tab. 6.1 Statistische Fehler für Q_A und Q_B

Nuklid	Q_A (TBq)	ΔQ_A (TBq)	$\Delta Q_A/Q_A$	Q_B (TBq)	ΔQ_B (TBq)	$\Delta Q_B/Q_B$
Co-60	4,38E-01	9,72E-05	0,02%	1,83E+00	2,52E-03	0,14%
Cs-134	6,80E-01	1,24E-04	0,02%	2,34E+00	3,87E-03	0,17%
Cs-137	1,88E+00	5,82E-04	0,03%	6,09E+00	1,71E-02	0,28%
Eu-154	8,67E-01	1,14E-04	0,01%	2,11E+00	1,27E-03	0,06%
F-18	1,02E+00	1,51E-04	0,01%	3,59E+00	5,97E-03	0,17%
Ir-192	1,31E+00	1,84E-04	0,01%	5,36E+00	1,05E-02	0,20%
Kr-85	3,02E+02	2,51E-01	0,08%	1,29E+03	9,20E+00	0,71%
Ru-106	1,24E+00	3,14E-04	0,03%	1,64E-01	5,60E-05	0,03%
Sr-90	5,31E+00	2,26E-03	0,04%	2,67E-01	1,25E-04	0,05%
Tc-99m	9,20E+00	2,76E-03	0,03%	7,46E+01	1,95E-01	0,26%

Die geringen statistischen Fehler legen nahe, dass die statistische Unsicherheit nicht der dominierende Faktor ist, da bei derart komplexen Rechnungen nicht davon ausgegangen werden kann, dass ein realistischer Fehler kleiner als 1 % ist. Demnach ist es sinnvoll, neben statistischen Unsicherheiten zusätzlich systematische Fehler in Be-

tracht zu ziehen. Diese Erweiterung der Fehlerrechnung steht aus und muss sowohl entwickelt, als auch in MCBAS implementiert werden. Zu untersuchende Fehlerquellen können unter anderem sein:

- Das Binning von Histogrammen, z. B. bei den Fluss-Spektren
- Die Schrittweite der verfügbaren Energien in der Datenbank an Fluss-Spektren
- Die lineare Interpolation der ICRP 116 Koeffizienten
- Die Wahl einer gerundeten Energie für die Zuordnung der ICRP 116 Koeffizienten
- Systematische Fehler der Simulationen, z. B. durch die Wahl der physikalischen Datenbanken

6.2 Umfang der Datenbank an Fluss-Spektren

Eine offene Frage, mit der sich ebenfalls die internationale Arbeitsgruppe befasst, bezieht sich auf den Einfluss von gewählten Energieschritten auf die Ergebnisse. Diese Binnings treten an verschiedenen Stellen der Berechnung auf, z. B. das Energiebinning der Fluss-Spektren als Output der Simulationen oder der summierten Fluss-Spektren für einzelne Nuklide bevor die Dosiskonversionskoeffizienten angewendet werden, oder aber auch die Schrittweite der zur Verfügung stehenden Primärenergien an Fluss-Spektren in der Datenbank. Wie bereits diskutiert bestimmt letzteres auch den Umfang der Datenbank, während das Energiebinning der einzelnen Fluss-Spektren einen Einfluss auf die Rechenzeit von MCBAS hat, da bei kleineren Binnings mehr Daten verarbeitet werden müssen.

Diese verschiedenen Einflüsse auf die Genauigkeit der Ergebnisse müssen daher einzeln betrachtet werden. Die aktuelle Version von MCBAS und der Datenbank weisen ein Energiebinning der Fluss-Spektren von 1 keV auf. Ein feineres Binning ist derzeit in der Arbeitsgruppe nicht diskutiert und daher kann davon ausgegangen werden, dass hier keine signifikante Fehlerquelle liegt. Fraglich ist jedoch der Einfluss der Schrittweite der Datenbank. Daher wurde für die Energien, die für die Nuklidliste notwendig sind, eine 1 keV Schrittweite gewählt. Mit MCBAS wurde in einer Analyse jeweils für Q_A und Q_B die Abhängigkeit der Ergebnisse von der manuell gewählten Schrittweite untersucht. Dazu musste lediglich innerhalb von MCBAS die jeweilige Energie jeder Linie aus den Nuklidaten einem entsprechenden Binning unterzogen werden. Die Abbil-

dungen Abb. 6.1 und Abb. 6.2 zeigen den Einfluss von einem 1 keV-Binning bis zu einem 30 keV-Binning normiert auf den Wert für das 1 keV-Binning.

Die Abbildungen zeigen, dass die Abweichungen im Wesentlichen bis einschließlich einem 10 keV-Binning innerhalb von einem Prozent schwanken. Dieses Ergebnis zeigt eine recht große Robustheit gegenüber diesem kritisch diskutierten Parameter. Es zeigt sich jedoch eine Ausnahme mit Tc-99m, die sowohl für Q_A als auch für Q_B auftritt. Hier zeigt sich insbesondere bei einem 3 keV-Binning eine Überhöhung und deutlich höhere Abweichung als bei den anderen Nukliden. Für gröbere Binnings nimmt die Abweichung wieder ab. Es kann demnach nicht gefolgert werden, dass ein gröberes Binning automatisch zu einer Zunahme der Abweichung führt. Weiterhin kann von einer starken Nuklidabhängigkeit ausgegangen werden. Die Nuklidabhängigkeit erklärt sich dadurch, dass die einzelnen Linien der Nuklide aufgrund des Rundungseffekts unterschiedlich stark betroffen sind. So führt das Binning der Energie zu einer maximalen Abweichung von plus oder minus der Hälfte des Binnings, z. B. 0,5 keV bei einem Binning von 1 keV. Da es sich um eine maximale Abweichung handelt, sind die verschiedenen Linien unterschiedlich stark betroffen. Allerdings zeigte eine detaillierte Analyse, dass die Abweichungen nicht durch die Wahl der unterschiedlichen Fluss-Spektren direkt resultieren, da sich diese bei derart kleinen Unterschieden in der Primärenergie nicht wesentlich voneinander unterscheiden. Die Ursache liegt vielmehr in der teilweise starken Energieabhängigkeit der Dosisleistungskoeffizienten, siehe Abschnitt 6.3. Im Fall Tc-99m ist der Q -Wert durch eine Gamma-Linie bei 140,5 keV dominiert. Bei einem Binning von 1 keV sowie bei 5 keV wird das Fluss-Spektrum für 140 keV zugeordnet. Dieses steht bei einem 3 keV-Binning jedoch nicht zur Verfügung, wodurch das 141 keV Fluss-Spektrum eingelesen wird. Dieser minimale Unterschied führt in diesem Energiebereich zu einem Unterschied der Dosisleistungskoeffizienten für Photonen von ca. 1,4 %, was nahezu der Erhöhung des Q_A -Werts für das 3 keV-Binning entspricht. Die Erklärung liegt in diesem Fall demnach an den stark energieabhängigen Dosisleistungskoeffizienten.

Zusammenfassend zeigt die Analyse, dass das Binning der Datenbank bis ca. 10 keV einen Einfluss auf die Ergebnisse im Prozentbereich hat, und damit ein Binning von 5 keV vertretbar sein kann. Somit hat dieser systematische Fehler einen größeren Einfluss als die bisher berechneten statistischen Unsicherheiten. Aufgrund des Einflusses der Energieabhängigkeit der Dosisleistungskoeffizienten ist die Frage des vertretbaren Binnings jedoch nicht abschließend geklärt und es besteht die Möglichkeit den Umfang

der Datenbank auf ein 1 keV-Binning zu vergrößern. Weiterhin ist eine Untersuchung ausstehend, wie der Einfluss der Dosisleistungskoeffizienten optimiert werden kann.

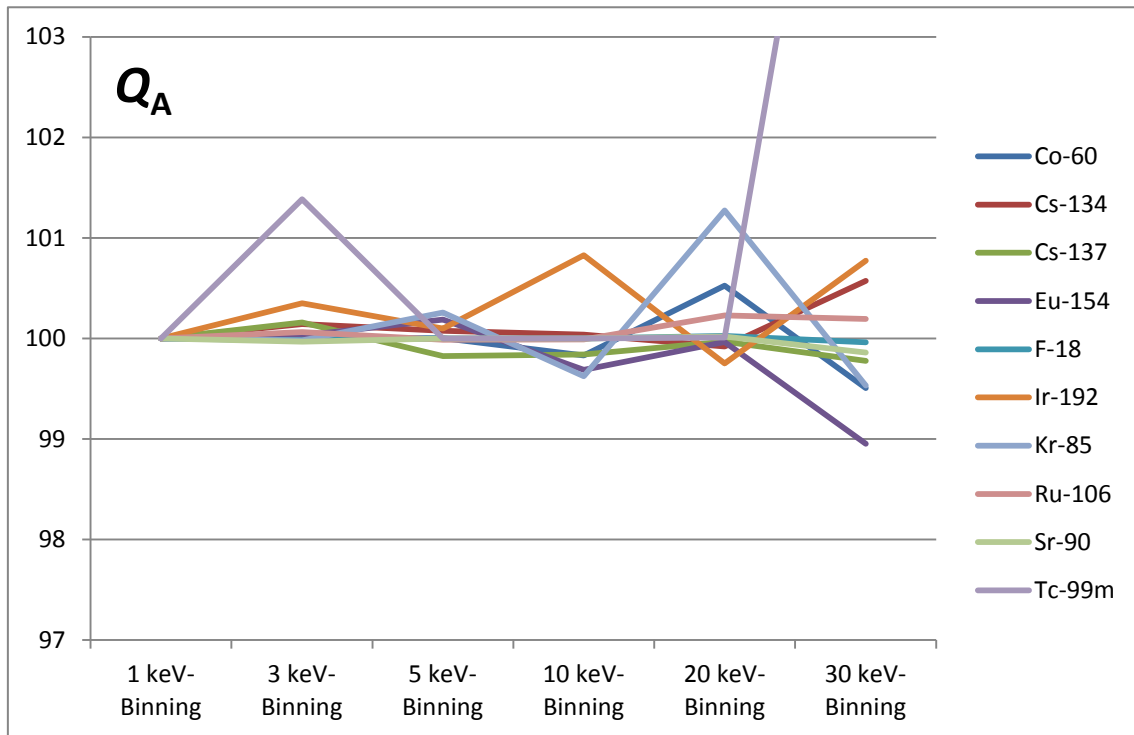


Abb. 6.1 Abhängigkeit der Q_A -Werte vom Binning der Datenbank

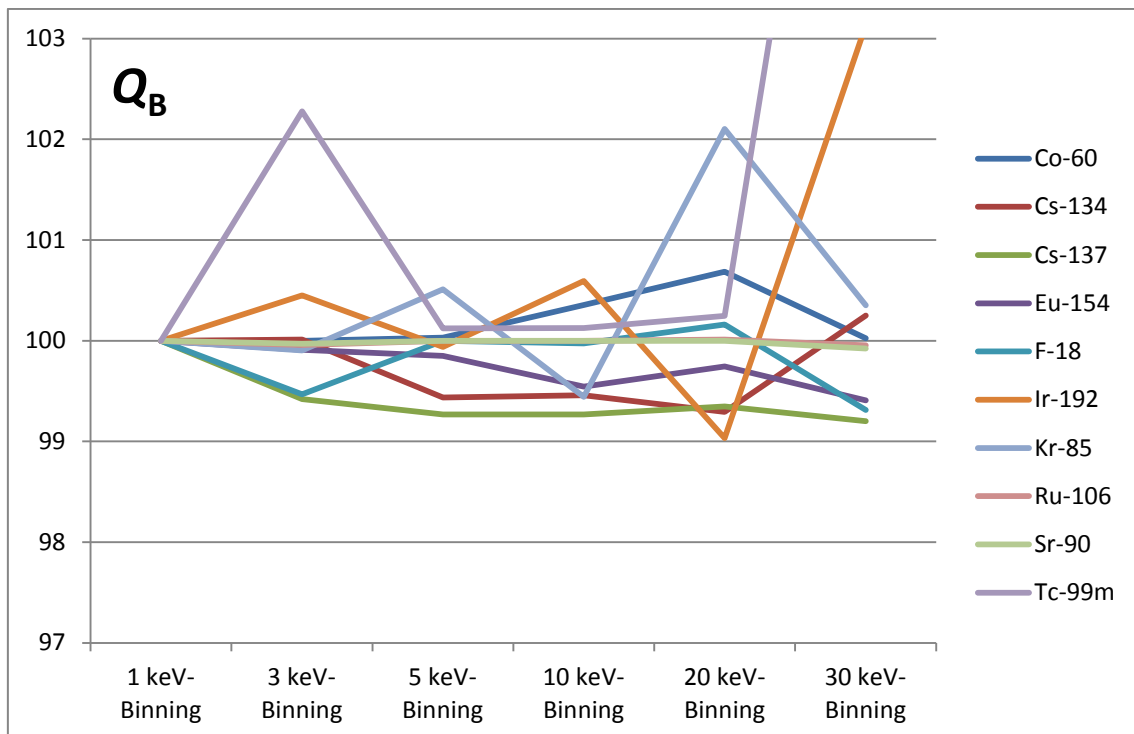


Abb. 6.2 Abhängigkeit der Q_B -Werte vom Binning der Datenbank

6.3 Anwendung der Dosisleistungskoeffizienten

Die Dosisleistungskoeffizienten der ICRP 116 sind für bestimmte Energien angegeben. Diese Stützstellen sind zum einen nicht äquidistant und zum anderen können erheblichen Änderungen der Werte zwischen zwei Energien auftreten. Da naturgemäß die Energien der Zerfallslinien der Radionuklide zwischen zwei Stützstellen liegen, muss eine Methode zur Interpolation angewendet werden. Derzeit nutzt MCBAS eine lineare Interpolation. Dies ist zum einen eine systematische Fehlerquelle und zum anderen stellt diese Methode unter Umständen nicht die optimale Lösung dar. Eine Vorgabe durch die internationale Arbeitsgruppe besteht derzeit nicht. Die vorangegangenen Analysen insbesondere zum Binning der Datenbank, siehe Abschnitt 6.2, zeigen jedoch einen signifikanten Einfluss auf die Ergebnisse.

Für viele Nuklide wird das Ergebnis von einigen wenigen intensiven Linien dominiert. Weisen diese Linien eine ungünstige Energie in Bezug zum gewählten Binning auf, so hat die Rundung einen höheren Einfluss. Andererseits kann die Energie in einem Bereich liegen, in der die Dosisleistungskoeffizienten eine starke Steigung verzeichnen und somit die Abhängigkeit der Energie einen umso größeren Einfluss aufweist. Daher besteht hier Optimierungsbedarf.

Eine Möglichkeit zur Optimierung liegt in der Bestimmung von Fitfunktionen der Dosisleistungskoeffizienten. Werden die energieabhängigen Koeffizienten durch ein Polynom sinnvollen Grades gefittet, so kann eine Funktion in Abhängigkeit der Energie ermittelt werden, die für alle Energien verwendet werden kann. Wenn die Fitparameter eine geringe Unsicherheit aufweisen, wäre diese Methode deutlich präziser als die derzeit gewählte lineare Interpolation. Weiterhin ist es möglich, dass diese Methode auch die Abhängigkeit des Binning reduziert, siehe Abschnitt 6.2.

6.4 Neutronen und Neutronenquellen

Das aktuelle Q-System befasst sich nicht mit Neutronenquellen und daher gibt es derzeit keine verfügbaren A -Werte für diese Art von radioaktiven Quellen. Die Notwendigkeit für deren Berechnung wird jedoch sowohl von den Behörden als auch von der internationalen Arbeitsgruppe gesehen. Daher befasst sich die Arbeitsgruppe bereits mit dem Konzept zur Berechnung dieser Alpha-induzierten Neutronenquellen. Da moderne Monte-Carlo Codes auch Neutronen simulieren können, stellt der Simulationsaufwand keine besonderen Hürden dar. Die Problematik besteht in der Verfügbarkeit zuverlässiger

siger Emissions-Spektren der Quellen. Es konnte innerhalb der Arbeitsgruppe Einigung erzielt werden, diese Spektren ebenfalls selbst zu berechnen. Dafür soll das Programm SOURCES-4C /WIL 02/ verwendet werden, das Neutronen Produktionsraten von (α,n) -Reaktionen bestimmt. In der 8. Sitzung der internationalen Arbeitsgruppe haben Vertreter der IRSN angeboten, erste Rechnungen für eine Auswahl an gängigen Neutronenquellen durchzuführen. Sobald die Arbeitsgruppe entsprechende Spektren erzeugt hat, können die Monte-Carlo Simulationen durchgeführt werden. Die aktuelle Struktur von MCBAS erlaubt bereits die Behandlung von Neutronen, sodass ohne großen Aufwand Neutronenquellen integriert werden können.

Derzeit umfasst die Datenbank bereits zu Testzwecken einzelne Neutronenenergien und MCBAS verarbeitet diese Daten. Die Datenbank muss hinsichtlich der Neutronenspektren aus spontaner Spaltung erweitert werden und die Intensitäten für spontane Spaltung entsprechend in MCBAS eingelesen werden. Dies stellt lediglich eine Erweiterung des Codes dar, ohne neue Methoden entwickeln zu müssen. Die bisherige Vorgehensweise deckt bereits die Handhabung von Neutronen ab und erste Tests von MCBAS mit den verfügbaren Fluss-Spektren von primären Neutronen verliefen erfolgreich.

6.5 Tochnernuklide

Die korrekte Behandlung von Tochnernukliden ist in der aktuellen Version von MCBAS noch nicht vollständig implementiert. Der Grund liegt in der Ausstehenden Festlegung eines Verfahrens durch die Arbeitsgruppe. Derzeit verwendet MCBAS ein säkulares Gleichgewicht, jedoch müssen die Bedingungen für die Berücksichtigung von Tochnernukliden implementiert werden. Da dies für die derzeitige Nuklidliste nicht relevant ist, wurde die Programmierung dieser Bedingungen verschoben und ist daher noch ausstehend.

6.6 Betastrahler

Nuklide, die sowohl Beta-Plus als auch Beta-Minus Zerfälle aufweisen, stellen eine Ausnahme dar. Dennoch gibt es diese Nuklide und deren Berechnung ist mit den ICRP 107 Nuklidaten nicht vollständig möglich, da die kontinuierlichen Beta-Spektren der ICRP 107 nicht zwischen Positronen und Elektronen unterscheiden. Die internationale Arbeitsgruppe hat daher beschlossen, eine zusätzliche Datenbank für diese Fälle hin-

zuzuziehen, um sowohl ein Beta-Plus- als auch ein Beta-Minus-Spektrum zur Verfügung zu haben. Dabei handelt es sich um die Java-based Nuclear Information Software (JANIS), Version 4.0, der OECD-NEA /SOP 14/. Diese Abfrage und das Einlesen der Daten aus der JANIS Datenbank ist noch in MCBAS zu implementieren, um alle ca. 700 Radionuklide berechnen zu können. Bisher stellte dies für die aktuelle Nuklidliste keine Einschränkung dar.

6.7 Freigrenzen

Wie im Abschnitt 4 beschrieben, wird sich die internationale Arbeitsgruppe aufgrund der Entscheidung der TRANSSC auf dem 31. Treffen weiterhin intensiv mit den *Q- und A-Werten* beschäftigen. Dadurch wird die ursprünglich geplante Betrachtung der Freigrenzen durch die internationale Arbeitsgruppe auf unbestimmte Zeit verschoben. Da die Zusammenarbeit mit der internationalen Arbeitsgruppe ein wesentlicher Bestandteil dieses Arbeitspunktes darstellt, konnten die Arbeiten nur eingeschränkt durchgeführt werden.

Dennoch konnte unabhängig von der internationalen Arbeitsgruppe das von der GRS entwickelte Berechnungstool BerFg „Programm zur Berechnung von Freigrenzen gemäß RP65“ erweitert werden. Die Weiterentwicklung umfasst eine graphische Oberfläche zur individuellen Auswahl von einzelnen Szenarien oder beliebigen Gruppierungen von Szenarien zur Berechnung von alternativen Freigrenzen. Dabei werden nur die aktivierten Szenarien in die Berechnung mit einbezogen.

Des Weiteren wurde eine Bewertung des IAEA Safety Guide No. RS-G-1.7 /IAEA 04/ auf dessen Relevanz hinsichtlich Transporte durchgeführt. In dem Dokument mit dem Titel „Application of the Concepts of Exclusion, Exemption and Clearance“ sind unter anderem Freigabewerte für große Mengen, sogenannte „bulk materials“, für Massen über einer Tonne veröffentlicht. Die detaillierten Berechnungen und die Beschreibung der einzelnen betrachteten Szenarien sind im IAEA Safety Report Series No. 44 „Derivation of Activity Concentration Values for Exclusion, Exemption and Clearance“ /IAEA 05/ beschrieben. Neben Arbeitern auf Deponien oder in Gießereien werden insbesondere Expositionen für Anwohner betrachtet, die sich in der Nähe von Deponien, Gießereien, auf öffentlichen Plätzen oder in Gebäuden aufhalten, in denen kontaminiertes Material auftreten kann, das auf Grund von Freigaben oder Freigrenzen als unbedenklich eingestuft und daraufhin weiterverarbeitet wird. Weiterhin wird der Trinkwasserpfad betrachtet. Diese Szenarien decken hauptsächlich langfristige Prozesse

ab, die unabhängig von Transporten zu betrachten sind. Daher sind die hier ermittelten Werte nicht für den Transport relevant. Aufgrund dieser Tatsache wurde darauf verzichtet, die einzelnen Berechnungen nachzuvollziehen oder ein Berechnungstool zu entwickeln. Lediglich der Einfluss dieser neuen Szenarien auf die einzelnen Nuklide wurde betrachtet und eine Zuordnung erzeugt, die das ausschlaggebende Szenario für jedes Nuklid erlaubt. Diese Zuordnung wurde im Rahmen des IAEA Dokuments nicht veröffentlicht. Als Ergebnis der 257 untersuchten Nuklide stellt sich heraus, dass für 80 Nuklide keine neuen Werte angegeben werden, da entweder die Halbwertszeit kürzer als einen Tag beträgt oder die Werte höher wären, als die bereits gültigen Freigrenzen. Weitere 8 Nuklide werden durch den Trinkwasserpfad dominiert, 75 Nuklide durch die Annahme von Eingangsparametern mit geringer Wahrscheinlichkeit, sowie 94 Nuklide durch die Annahme von realistischen Eingangsparametern für die verschiedenen oben genannten Szenarien.

Literatur

- /AGO 03/ Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrand, G., Behner, F., Bellagamba, L., Boudreau, J., Broglia, L., et al.: Geant4, A simulation toolkit. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Bd. 506, Nr. 3, S. 250–303, DOI 10.1016/S0168-9002(03)01368-8, 2003.
- /BOO 03/ Booth, T. E., Brown, F. B., Bull, J. S., Forster, R. A., Goorley, J. T., Hughes, H. G., Mosteller, R. D., Prael, R. E., Sood, A., Sweezy, J. E., Zukaitis, A., Boggs, M., Martz, R.: MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory, Report: LA-UR-03-1987. Los Alamos National Laboratory, 2003.
- /BÜT 14/ Büttner, U.: Untersuchungen zur Sicherheit bei der Beförderung radioaktiver Stoffe, Teil 1.1 Berechnung von Aktivitätsgrenzwerten - Q-Modell, Abschlussbericht zum Arbeitspaket 4. GRS-343, 193 S., ISBN 978-3-944161-23-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2014.
- /CHA 11/ Chadwick, M. B., Herman, M., Obložinský, P., Dunn, M. E., Danon, Y., Kahler, A. C., Smith, D. L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D. A., Capote, R., Carlson, A. D., et al.: ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology, Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. Nuclear Data Sheets, Bd. 112, Nr. 12, S. 2887–2996, DOI 10.1016/j.nds.2011.11.002, 2011.
- /ECK 12/ Eckerman, K., Harrison, J., Menzel, H.-G., Clement, C. H.: Compendium of Dose Coefficients based on ICRP Publication 60, ICRP Publication 119, Corrected Version. Annals of the ICRP, Bd. 41, Supplement 1, 2012.
- /HPA 10/ Health Protection Agency (HPA): SEAL, System for calculating Exemption and A_1 and A_2 Limits. Version 1.0, Windows, Revision 180, Database Version 1.1, 2010.

- /IAEA 73/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Advisory Material for the Application of the IAEA Transport Regulations. Safety Series, No. 37, 205 S.: Vienna, Juni 1973.
- /IAEA 86/ International Atomic Energy Agency (IAEA) (Hrsg.): International Studies on Certain Aspects of the Safe Transport of Radioactive Materials, 1980 - 1985, Report of the Co-ordinated Research Programme on Safe Transport of Radioactive Materials Sponsored by the International Atomic Energy Agency. IAEA TECDOC, IAEA-TECDOC-375, 125 S.: Vienna, 1986.
- /IAEA 90/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Explanatory Material for the IAEA Regulations Explanatory Material for the IAEA Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material (1985 Edition). Safety Series No. 7: Vienna, 1990.
- /IAEA 04/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Application of the Concepts of Exclusion, Exemption and Clearance, Safety Guide. IAEA Safety Standards Series, RS-G-1.7, 39 S., 2004.
- /IAEA 05/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Derivation of Activity Concentration Values for Exclusion, Exemption and Clearance. Safety Reports Series, Nr. 44, 141 S.: Vienna, 2005.
- /IAEA 08/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Advisory Material for the IAEA Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material, Safety Guide. IAEA Safety Standards Series, TS-G-1.1 (Rev. 1), 438 S.: Vienna, 2008.
- /IAEA 12/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material 2012 Edition, Specific Safety Requirements. IAEA Safety Standards Series, No. SSR-6, 168 S., ISBN 978-92-0-133310-0: Vienna, 2012.
- /IAEA 14/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Advisory Material for the IAEA Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material (2012 Edition), Specific Safety Guide. IAEA Safety Standards Series, No. SSG-26, 2012. Aufl., 450 S., ISBN 978-92-0-136910-9: Vienna, 2014.

- /ICRP 83/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Radionuclide Transformations - Energy and Intensity of Emissions, ICRP Publication 38. Annals of the ICRP, 11-13, 1983.
- /ICRP 87/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Data for Use in Protection Against External Radiation, ICRP Publication 51. Annals of the ICRP, Bd. 17, 2/3, 1987.
- /ICRP 94/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Dose Coefficients for Intakes of Radionuclides by Workers, ICRP Publication 68, Replacement of ICRP Publication 61. Annals of the ICRP, Bd. 24, Nr. 4, 1994.
- /ICRP 96/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Conversion Coefficients for use in Radiological Protection against External Radiation, ICRP Publication 74. Annals of the ICRP, Bd. 26, 3-4, 1996.
- /ICRP 08/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Nuclear Decay Data for Dosimetric Calculations, ICRP Publication 107. Annals of the ICRP, Bd. 38, Nr. 3, 2008.
- /JON 11/ Jones, K. A., Cabianca, T., Harvey, M. P., Hughes, J. S., Brown, I. K., Anderson, T.: Review of Methodologies to Calculate A_1 and A_2 Values, and Exemption Values. Health Protection Agency (HPA), HPA-CRCE-027, 95 S., ISBN 978-0-85951-707-2: Chilton, Didcot, Oxfordshire, October 2011.
- /MCC 11/ McConn, R. J., JR, Gesh, C. J., Pagh, R. T., Rucker, R. A., Williams III, R. G.: Compendium of Material, Composition Data for Radiation, Transport Modeling, Report: PIET-43741-TM-963, PNNL-15870 Rev. 1. U.S. Department of Homeland Security, 2011.
- /NRA 15/ Nuclear Regulation Authority (NRA): Influence of Monte Carlo Calculation Parameters on Q Values. Präsentation, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 5th Meeting of the International Working Group on review of methods of calculation of A_1 and A_2 Values for the IAEA Transport Regulations, International Working Group on Basic Radionuclide Values for the IAEA Transport Regulations: Cologne, 3. September 2015.

- /PEL 05/ Pelowitz, D. B.: MCNPX User' Manual, Version 2.5.0, Report: LA-CP-05-0369. Los Alamos National Laboratory, 2005.
- /PET 10/ Petoussi-Henss, N., Bolch, W. E., Eckerman, K. F., Endo, A., Hertel, N., Hunt, J., Pelliccioni, M., Schlattl, H., Zankl, M.: Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures, ICRP Publication 116. Annals of the ICRP, Bd. 40, 2-5, S. 1–257, DOI 10.1016/j.icrp.2011.10.001, 2010.
- /SAL 01/ Salvat, F., Fernández-Vara, J. M., Acosta, E., Sempau, J.: PENELOPE - A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Workshop Proceedings, Issy-les-Moulineaux, France, 5-7 November 2001. AEN-NEA, 2001.
- /SAN 09/ Santamarina, A., Bernard, D., Rugama, Y.: The JEFF-3.1.1 nuclear data library, JEFF report 22, validation results from JEF-2.2 to JEFF-3.1.1. Data bank, 61 S., ISBN 978-92-64-99074-6, Nuclear Energy Agency, Organisation for Economic Cooperation and Development: Issy-les-Moulineaux, France, 2009.
- /SHI 11/ Shibata, K., IWAMOTO, O., NAKAGAWA, T., IWAMOTO, N., ICHIHARA, A., KUNIEDA, S., CHIBA, S., FURUTAKA, K., OTUKA, N., OHASAWA, T., MURATA, T., MATSUNOBU, H., ZUKERAN, A., KAMADA, S., KATAKURA, J.-i.: JENDL-4.0, A New Library for Nuclear Science and Engineering. Journal of Nuclear Science and Technology, Bd. 48, Nr. 1, S. 1–30, DOI 10.1080/18811248.2011.9711675, 2011.
- /SOP 14/ Soppera, N., Bossant, M., Dupont, E.: JANIS 4, An Improved Version of the NEA Java-based Nuclear Data Information System. Nuclear Data Sheets, Bd. 120, S. 294–296, DOI 10.1016/j.nds.2014.07.071, 2014.
- /WIL 84/ Williams, G., Zankl, M., Eckerl, H., Drexler, G.: The Calculation of Dose from External Photon Exposures Using Reference Human Phantoms and Monte Carlo Methods, Part II: Organ Doses from Occupational Exposures. Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München (GSF), GSF-Bericht, S-1079, December 1984.

/WIL 02/ Wilson, W. B., Perry, R. T., Shores, E. F., Charlton, W. S., Parish, T. A.,
Estes, G. P., Brown, T. H., Arthur, E. D., Bozoian, M., England, T. R.,
Madland, D. G., Stewart, J. E.: SOURCES 4C: a code for calculating ([al-
pha],n), spontaneous fission, and delayed neutron sources and spectra,
Report LA-UR-02-1839. Los Alamos National Laboratory, 2002.

Abkürzungsverzeichnis

BerQATrans	Programm zur Berechnung von Q- und A-Werten für den Transport
BfS	Bundesamt für Strahlenschutz
BMUB	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit
BRACSS	Basic Radionuclide vAlue Calculation SyStem
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
IAEO	Internationale Atomenergieorganisation
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (Frankreich)
JNES	Japan Nuclear Energy Safety Organisation (Japan)
LSA	Low Specific Activity
MCNP	Monte-Carlo N-Particle Transport Code
MHI	Mitsubishi Heavy Industries
NMRI	National Maritime Research Institute (Japan)
NRA	Nuclear Regulation Authority (Japan)
PENELOPE	PENetration and Energy Loss of Positrons and Electrons
PHE	Public Health England (UK)
SEAL	System for calculating Exemption and A_1 and A_2 Limits
TRANSSC	Transport Safety Standards Committee der IAEO
US DOT	U.S. Department of Transportation (USA)

WNTI

World Nuclear Transport Institute

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Schematische Darstellung der Expositionspfade, Quelle: /IAEA 08/	4
Abb. 3.1	Werte für den Dosiskonversionsfaktor k_4 nach /PET 10/, isotropes Strahlungsfeld.....	7
Abb. 3.2	Strahlungsfelder gemäß ICRP 116, Quelle: /PET 10/	8
Abb. 3.3	Vergleich von Dosiskonversionsfaktoren aus /PET 10/ für verschiedene Strahlungsfelder.....	8
Abb. 3.4	Vergleich der Dosiskonversionsfaktoren k_2 , k_3 und k_4 , isotropes Strahlungsfeld.....	10
Abb. 3.5	Optionsauswahl von BerQATrans in der Version 1.2	12
Abb. 4.1	Zeitplan der internationalen Arbeitsgruppe.....	18
Abb. 4.2	Vergleich der Elektronenflüsse von 1 MeV Primärelektronen von MCNP und Geant4	23
Abb. 5.1	Grundlegende Geometrie für das aktuelle und aktualisierte Q-System	25
Abb. 5.2	Auszug aus dem Excel-Tool der ICRP 116 /PET 10/	29
Abb. 5.3	Auszug der numerischen Daten aus dem Excel-Tool der ICRP 116 /PET 10/	30
Abb. 5.4	Visualisierung einer Geant4 Simulation	33
Abb. 6.1	Abhängigkeit der Q_A -Werte vom Binning der Datenbank	46
Abb. 6.2	Abhängigkeit der Q_B -Werte vom Binning der Datenbank	46

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Parameterwerte zur Interpolationsfunktion für den Dosiskonversionsfaktor k_4 , Energiebereich 10 keV bis 50 keV.....	9
Tab. 3.2	Parameterwerte zur Interpolationsfunktion für den Dosiskonversionsfaktor k_4 , Energiebereich 50 keV bis 100 keV.....	9
Tab. 3.3	Parameterwerte zur Interpolationsfunktion für den Dosiskonversionsfaktor k_4 , Energiebereich 100 keV bis 20 MeV.....	10
Tab. 4.1	Meetings der internationalen Arbeitsgruppe.....	13
Tab. 4.2	Aktionen des „Activity Plans“.....	17
Tab. 4.3	Ergebnisse von BerQATrans, Datengrundlage ICRP 38 /ICRP 83/ sowie ICRP 51 /ICRP 87/ für Q_A und ICRP 68 /ICRP 94/ für Q_C	19
Tab. 4.4	Ergebnisse von BerQATrans, Datengrundlage ICRP 107 /ICRP 08/ sowie ICRP 51 /ICRP 87/ für Q_A und ICRP 68 /ICRP 94/ für Q_C	20
Tab. 4.5	Ergebnisse von BerQATrans, Datengrundlage ICRP 107 /ICRP 08/ sowie ICRP 116 /PET 10/ für Q_A und ICRP 119 /ECK 12/ für Q_C	20
Tab. 4.6	Ergebnisse für neu berechnete Nuklide	21
Tab. 5.1	Zuordnung der ICODE Variablen	27
Tab. 5.2	Auszug aus dem „Radiation File“ für einen Teil von Co-60	27
Tab. 5.3	Zu verwendende Tabellen mit Dosiskoeffizienten der ICRP 116 /PET 10/	30
Tab. 5.4	Errechnete Q-Werte für die Nuklidliste	36
Tab. 5.5	Errechnete A-Werte für die Nuklidliste	36
Tab. 5.6	Errechnete Einzelbeiträge von Q_A für die Nuklidliste	39
Tab. 5.7	Dosisbeiträge durch Bremsstrahlung	39
Tab. 5.8	Errechnete Einzelbeiträge von Q_B für die Nuklidliste.....	40
Tab. 6.1	Statistische Fehler für Q_A und Q_B	43

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-946607-60-1