České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra dozimetrie a aplikace ionizujícího záření Obor: Jaderné inženýrství



Optimalizace kalibračních postupů terénních spektrometrů záření gama

DISERTAČNÍ PRÁCE

Vypracovala: Ing. Kamila Johnová Vedoucí práce: RNDr. Lenka Thinová, Ph.D. Rok: 2022

Bibliografický záznam

Název práce:

Optimalizace kalibračních postupů terénních spektrometrů záření gama

Autorka:	Ing. Kamila Johnová České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Studijní program: Obor: Druh práce:	Aplikace přírodních věd Jaderné inženýrství Disertační práce
$\check{S}kolitelka:$	RNDr. Lenka Thinová, Ph.D. České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Akademický rok:	2022/2023
Počet stran:	127 + 20stran dodatků
Klíčová slova:	gama spektrometrie, Monte Carlo, kalibrace, kalibrační základna

Bibliographic Entry

Title of Dissertation: **The optimalization of calibration principles in field gamma spectrometery**

Author:	Ing. Kamila Johnová Czech Technical University in Prague Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Degree Programme: Field of Study: Supervisor:	Applications of Natural Sciences Nuclear Engineering RNDr. Lenka Thinová, Ph.D. Czech Technical University in Prague Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Academic Year:	2022/2023
Number of Pages:	127+20
Keywords:	gamma spectrometry, Monte Carlo, calibration, calibration facility

Abstrakt

česky: Předkládaná disertační práce se zabývá problematikou kalibrací terénních gamma spektrometrů se zaměřením na možnosti využití kalibrační základny ve Stráži pod Ralskem. Tato kalibrační základna je jedním z mála zařízení na světě a kalibrační standardy v ní umístěné byly konstruovány s výjimečnou pečlivostí. Nicméně současná metodika kalibrace a tím pádem i současný způsob využití základny pochází z dob uranového průzkumu v ČR a přestože všechny původně zavedené postupy jsou stále platné, nabízí se možnost jejich rozšíření. S rozvojem detekční techniky a nových metod detekce - zejména s rozvojem monitorování pomocí bezpilotních leteckých prostředků - vzniká požadavek na moderní nástroje umožňující kalibrace této metody. Dle našeho názoru základna ve Stráži pod Ralskem tyto nástroje vlastní, ovšem pro plné využití jejich potenciálu je třeba získat podrobný popis pole záření uvnitř základny. Pro získání tohoto popisu byl vytvořen podrobný model pro výpočty metodou Monte Carlo. V rámci práce budeme prezentovat výsledky výpočtů, které z našeho současného pohledu různými způsoby popisují pole záření na základně. Nicméně s existencí modelu bude v budoucnu možno kdykoliv dopočítat libovolné veličiny či opravné faktory, které pro nás momentálně zajímavé nejsou. Předpokládáme, že model bude v budoucnu dále využíván a dle potřeby i zdokonalován v návaznosti na požadavky plynoucí z praxe.

english: This thesis covers the topic of calibration of field gamma spectrometers and focuses on possibilities of utilization of calibration facility in Stráž pod Ralskem. This calibration facility is one of few such facilities in the world and calibration standards were constructed with special precision. The present-day methodology and the way the standards are used today was invented in the era of uranium exploration in CR. Even though the methodology and all procedures are still valid, there is a potential for extension of the facility's possibilities. With expanding possibilities of detection and data processing - especially with the development of unmanned aerial vehicles - there is an urgent need of tools for their calibration. We are confident that the calibration facility in Stráž pod Ralskem is equipped to meet this demand, if there an accurate description of gamma radiation field is provided. This description was obtained by creating an accurate model of the whole facility for Monte Carlo simulation. We present a result of calculations using our model that are relevant for us in the present moment. However, the model can be used in the future for any calculation that may be relevant and needed for practical application.

Obsah

Ú	vod			1
1	Spe	ktrom	etrie gamma přírodních radionuklidů	5
	1.1	Přírod	ní radioaktivita	. 5
		1.1.1	Radioaktivita hornin	. 8
	1.2	Spekti	rometrie záření gama	. 11
		1.2.1	Důležitá specifika spektrometrie přírodních radionuklidů	. 12
	1.3	Teréni	ní spektrometrie gama	. 18
	1.4	Kalibr	ace v terénní spektrometrii	. 19
		1.4.1	Obecný popis kalibračního postupu	. 19
		1.4.2	Kalibrační základny ve světě	. 21
		1.4.3	Kalibrační základna ve Stráži pod Ralskem	. 24
		1.4.4	Moderní přístupy ke kalibracím spektrometrů	. 28
		1.4.5	Motivace	. 31
2	Met	oda N	Ionte Carlo	33
_	2.1	Záklac	lní princip metody	. 33
	2.2	MCNF	г г " Э	. 35
		2.2.1	Tally	. 36
		2.2.2	Statistika skórování	. 38
		2.2.3	Metody redukce variance	. 40
3	Tvo	rba mo	odelu	52
-	3.1	První	verze modelu	. 53
	0	3.1.1	Geometrie	. 53
		3.1.2	Definice zdroje záření	. 57
	3.2	Verifik	ace první verze modelu	. 64
	-	3.2.1	Experimentální část verifikace	. 64
		3.2.2	Výpočetní část verifikace	. 66
		3.2.3	Porovnání	. 68
	3.3	Iterači	ní postup zpřesňování modelu	. 76
3.4 Finální verifikace		Fináln	í verifikace	. 88
		3.4.1	Ověření přesnosti modelu směrem do výšky	. 88
		3.4.2	Ověření přesnosti modelu směrem do místnosti	. 94
		3.4.3	Ověření přesnosti modelu nad pozemními standardy	. 95
			•	_
		3.4.4	Porovnání různých detektorů na pozici PU0	. 98

4	Mož	žnosti výpočtů s modelem 102	2
	4.1	Dávkové veličiny	2
		4.1.1 Parametry výpočtů	2
		4.1.2 Výsledky	3
	4.2	Spektra	0
	4.3	Porovnání příspěvků různých stavebních prvků k celkové fluenci částic 11	3
Zá	věr	119	9
Li	terat	ura 12	1
Př	ílohy	<i>V</i>	i

Úvod

Hlavním cílem této disertační práce je vytvoření nástroje, který umožní rozšíření využitelnosti kalibrační základny pro terénní spektrometry ve Stráži pod Ralskem. Práce vznikla na základě požadavku přímo z praxe, nicméně nejedná se čistě o jednostranně zaměřený aplikovaný výzkum. K celé problematice jsme přistoupili co nejobecněji tak, aby bylo v budoucnu možné práci rozšířit či upravit podle aktuálních požadavků z praxe.

Metodika využití základny pochází z dob uranového průzkumu a přestože všechny zavedené postupy jsou stále platné, setkáváme se stále častěji s případy nových detekčních technologií či postupů, pro které chybí nástroje pro kalibraci či ověřování. Věříme, že základna je vybavena tak, aby tyto potřeby uspokojila, nicméně k jejímu plnému využití je třeba získat podrobný popis pole záření uvnitř základny.

V rámci práce jsme vytvořili maximálně přesný Monte Carlo model celé základny s rozložením přírodních radionuklidů, které věrně odpovídá realitě. Celá základna je totiž komplexní zdroj záření a přestože kalibrační standardy jsou hlavními zdroji záření zde, nejsou zdaleka jedinými zdroji.

Samotná práce má dvě hlavní části. V teoretické sekci budeme věnovat prostor zejména přírodním radionuklidům a některým specifikům jejich spektrometrie. Největší část kapitoly se zabývá otázkou kalibrace terénních spektrometrů a tím pádem i detailnímu popisu kalibrační základny ve Stráži pod Ralskem, která je jedním z mála podobných zařízení na světě. V rešeršní části této kapitoly dále představíme některá další podobná zařízení ve světě. Součástí kapitoly je také popis stávající metodiky kalibrace terénních spektrometrů a rešerše některých dalších přístupů ke kalibracím, včetně využití stále více se uplatňující metody Monte Carlo.

V druhé polovině teoretické části pak představíme metodu samotnou Monte Carlo - od obecného principu po popis konkrétního výpočetního kódu MCNP a jeho možností, které budeme využívat.

V úvodu praktické části nejprve ukážeme motivační experiment, kterým dokážeme, že při popisu pole záření na základě, je nezbytné uvažovat komplexní zdroj záření, nikoliv pouhé standardy. Budeme dále pokračovat popisem tvorby celého modelu a následně jeho verifikací. Jak uvidíme, první verze modelu neposkytla dostatečně uspokojivou shodu experimentálních a simulovaných dat. Přistoupili jsme tedy k postupnému zpřesňování modelu. Závěrem této části jsme dostali ověřený model, který s velmi vysokou přesností aproximuje reálnou kalibrační základnu. Tento bod byl hlavním cílem naší práce. Jeho další využití bude otázkou konkrétních požadavků z praxe.

Přestože hlavním cílem práce bylo vytvoření modelu, představíme i některé možnosti výpočtů, které lze s hotovým modelem provádět. Budeme prezentovat popis pole z hlediska dozimetrických veličin i z hlediska spektrometrického. Podíváme se také, jak velký vliv mají přírodní radionuklidy obsažené v konstrukčních prvcích základny (budovy) na měření na vybraných pozicích uvnitř.

Jak jsme zmínili v úvodním odstavci, prezentujeme výsledky výpočtů, které jsou z našeho momentálního pohledu zajímavé. Za nejdůležitější výstup celé práce však stále považujeme samotný model, který bude i v budoucnu umožňovat dopočet libovolných veličin na libovolných pozicích, které si praxe vyžádá. Příkladem takové budoucí aplikace může být právě kalibrace a ověřování spektrometrů umístěných na bezpilotních letadlech. Teoretická část

Kapitola 1

Spektrometrie gamma přírodních radionuklidů

1.1 Přírodní radioaktivita

Hovoříme-li o přírodní radioaktivitě, máme obvykle na mysli celý soubor zdrojů záření, které jsou přírodního původu - tedy těch, které nejsou plánovaným či neplánovaným důsledkem lidské činnosti. V rámci tohoto souboru zdrojů pak můžeme odlišit dva hlavní původce přírodní radioaktivity - prostor mimo naši planetu (kosmické záření a jím vytvářené kosmogenní radionuklidy) a zemskou kůru (radionuklidy obsažené v horninách).

V této práci se budeme věnovat zejména druhému zdroji záření s tím, že první zdroj má pouze zanedbatelný vliv na měření a simulace, která jsou předmětem našeho zkoumání. V teorii se tedy zaměříme pouze na radionuklidy s původem v zemské kůře. Zde rozlišujeme tzv. primordiální a sekundární radionuklidy. Primordiální radionuklidy jsou radionuklidy, které vznikly při syntéze prvků v raných fázích vesmíru a díky velmi dlouhým poločasům přeměny jsou dosud přítomny v detekovatelné míře. Jmenujme pro nás nejvýznamnější ⁴⁰K, ²³⁸U, ²³²Th, ²³⁵U. Druhou jmenovanou skupinu, tj. radionuklidy sekundární, tvoří dceřinné produkty přeměny primordiálních radionuklidů - v naší práci jsou nejdůležitější dceřinné produkty radionuklidů: ²³⁸U, ²³²Th a ²³⁵U. O záření vznikajícím při přeměně těchto radionuklidů se často hovoří jako o terestrickém záření.

Koncentrace zmíněných přírodních radionuklidů jsou pro různé horniny rozdílné. Ještě předtím než se ve stručnosti podíváme na některá fakta ohledně vztahu typů hornin a přírodní radioaktivity, popíšeme stručně způsob, jakým se koncentrace přírodních radionuklidů vyjadřují, a některé obecné poznámky ohledně K, U, Th jako prvků.

Draslík V přírodě se vyskytují celkem tři izotopy draslíku. Izotopy ³⁹K a ⁴¹K jsou stabilní. Jediný radioaktivní izotop draslíku je ⁴⁰K. Poslední jmenovaný izotop je zastoupen v konstantním dílu 0,012 % z celkového množství. Průměrný obsah draslíku v zemské kůře se často uvádí jako jako 2-2,5 % draslíku [IAEA 2003]. Draslík je

prvek z řady alkalických kovů a je též hojně zastoupen ve vodě (mořské i minerálních vodách) i živých organismech, je to tzv. makrobiogenní prvek, tedy nezbytný pro život. V lidském těle se vyskytuje v množství >0,005 %. Přeměna ⁴⁰K je popsána přeměnový schématem v obrázku 1.1.



Obrázek 1.1: Přeměnové schéma ${}^{40}K$, přeloženo z [LNHB online].

Uran Uran je radioaktivní prvek, tzn. nemá žádný stabilní izotop. Dominantním radioizotopem v přírodě je ²³⁸U s poločasem přeměny 4,46x10⁹ let, kdy jeho zastoupení v přírodní směsi je 99,276 %. V menším množství (0,718 % a 0,004%) jsou zastoupeny izotopy ²³⁵U a ²³⁴U. Průměrný obsah uranu v zemské kůře je v rozsahu 2-3 ppm (= parts per million, tj. 1µg uranu v 1 g horniny). V práci budeme často slučovat ²³⁸U a ²³⁵U pod souhrnné označení U. Opravňuje nás k tomu fakt, že ve většině přírodních materiálů platí pevné izotopické zastoupení ²³⁸U a ²³⁵U, zjištěná aktivita ²³⁸U bude vždy jednoznačně určovat aktivitu ²³⁵U. Radionuklidy ²³⁸U a ²³⁵U jsou mateřskými radionuklidy svých přeměnových řad. Schéma obou přeměnových řad je ukázáno v obrázku 1.2. Znázorněny jsou pouze přeměnové větve s významnějšími výtěžky z hlediska spektrometrického.

Thorium U thoria je situace izotopického zastoupení o něco jednodušší, jelikož 100% přírodního thoria je tvořeno izotopem ²³²Th. Jeho průměrný obsah v zemské kůře je uváděn 8-12 ppm [IAEA 2003]. Radionuklid thoria ²³²Th má poločas přeměny 1,39x10¹⁰ let a je výchozím prvkem tzv. thoriové přeměnové řady, jejíž schématické zobrazení opět připojujeme v obrázku 1.2. Jediné avšak důležité větvení v této řadě představuje přeměna ²¹²Bi, které se z cca 64 % promění na ²¹²Po (bez měřitelného gamma zářeí) a z pouhých 36 % na ²⁰⁸Tl (měřitelná gamma). Na toto větvení upozorníme i v další podkapitole při rozboru linek gamma vhodných ke spektrometrii gama přírodních radionuklidů.



Obrázek 1.2: Schéma přeměnových řad $^{238}\mathrm{U},~^{235}\mathrm{U}$
a $^{232}\mathrm{Th}$.

-7

V předchozím výčtu jsme uvedli příklady koncentrací K, U a Th v zemské kůře, kde jsme použili jednotky obvyklé spíše pro geofyziku, tj. (%) a (ppm). V radiační fyzice je častěji používanou jednotkou (Bq/kg). Vztah mezi oběma jednotkami je jednoznačně určen za předpokladu přírodního izotopického zastoupení. Převodní koeficienty je možné snadno odvodit na základě znalosti izotopického zastoupení, molárních hmotností a poločasu přeměny, jejich hotový přehled je uveden v tabulce 1.1.

Tabulka 1.1: Konverzní faktory pro převod mezi koncentrací a hmotnostní aktivitou [IAEA 2003].

1%K	=	313	$Bq \cdot kg^{-1}$ ⁴⁰ K
1 ppm U	=	$12,\!35$	$Bq \cdot kg^{-1}$ ²³⁸ U
1 ppm U	=	0,575	$Bq \cdot kg^{-1}$ ²³⁵ U
1 ppm Th	=	$4,\!06$	$Bq \cdot kg^{-1}$ ²³² Th

1.1.1 Radioaktivita hornin

V předchozím textu jsme řekli, že původcem tzv. terestrického záření jsou radionuklidy obsažené v horninách, které vznikly při formování Země a mají velmi dlouhé poločasy přeměny. Jsou to tzv. primordiální radionuklidy a v horninách je jich obsaženo více než 20. Kromě již zmíněných ⁴⁰K, ²³⁸U, ²³⁵U a ²³²Th jsou to například ⁸⁷Rb, ¹⁴⁷Sm, ¹⁷⁶Lu, ¹⁸⁷Re atd., které jsou ovšem jen těžko detekovatelné (z důvodu nízkých výtěžků či energií emitovaného záření nebo/a nízkým koncentracím). Budeme se tedy zabývat pouze prvními čtyřmi zmíněnými a dále v této práci o nich budeme hovořit pouze jako o K, U a Th. Radionuklidy ²³⁸U a ²³⁵U tedy sloučíme pod jedno označení a budeme předpokládat přírodní izotopické zastoupení.

Střední hodnoty hmotnostních koncentrací K, U, Th v zemské kůře se uvádějí [MATOLÍN A CHLUPÁČOVÁ 1997]:

- 2.0-2.5 % K
- 2-3 ppm U
- 8-12 ppm Th

Podíváme-li se na typické koncentrace K, U, Th v horninách na území ČR [MATOLÍN 1970], uvidíme, že koncentrace K se pohybují v rozsahu 0-5 % K (s extrémy do 8 %). Koncentrace U měříme obvykle v rozsahu 0-12 ppm (s extrémy v řádech stovek ppm) a koncentrace Th jsou obvykle v rozmezí 0-50 ppm (s extrémy v řádech tisíců ppm). Je známo, že radioaktivita (obsah K, U, Th) souvisí s typem hornin. Jednotlivé typy hornin, a pochopitelně ani celé skupiny hornin, nelze na základě míry jejich radioaktivity, určovat ani charakterizovat. Nicméně je celá řada pozorování, které lze ohledně vztahů jednotlivých typů hornin a jejich radioaktivity vyslovit. Podívejme se na velmi stručný přehled některých těchto základních poznatků. Pro detailnější rozbor lze doporučit texty [MAREŠ 1979], [MATOLÍN A CHLUPÁČOVÁ 1997] případně anglický [DURRANCE 1986], které se zabývají problematikou radioaktivity hornin obecně a pro podrobný rozbor radioaktivity hornin na území ČR doporučujeme práci: [MATOLÍN 1970] pro horniny Českého Masivu a [MATOLÍN 1970] pro horniny Západních Karpat.

Horniny obecně dělíme na **magmatické (vyvřelé), sedimentární (usazené) a metamorfované (přeměněné)**. V rámci každé z těchto skupin dělíme celou řadu typů, které se mezi sebou odlišují (nejen) obsahem K, U a Th. A i v rámci těchto skupin mohou být rozsahy K, U, Th velmi široké. Podívejme se nyní ve stručnosti na každou z těchto skupin zvlášť, čerpáme z publikace [KDAIZ FJFI a SÚRO 2018].

Horniny magmatické vznikly utuhnutím magmatu pod povrchem Země (hlubinné a žilné) nebo na jejím povrchu (výlevné). Jejich radioaktivita obvykle roste s obsahem SiO₂ (kyselostí magmatických hornin), neboli u kyselých magmatitů (například granity) obvykle pozorujeme vyšší radioaktivitu než u bazických (například gabro). Nicméně obsah U v daném typu horniny může kolísat v rámci lokality. Nehomogenní pak může být i obsah U v rámci jednoho tělesa, může například narůstat směrem k jejich okraji. Magmatické horniny podléhají chemickému a mechanickému větrání, jehož produkty jsou písčitá složka (obvykle vykazuje nízkou aktivitu přírodních radionuklidů), jílovité minerály (se zvýšeným obsahem zejména K) a akcesorické minerály (se zvýšenými obsahy U a Th). Velmi vysoké aktivity (zejména v důsledku vysokého obsahu U) a zároveň široké rozsahy v obsahu U v rámci jednotlivých těles často vykazují syenity.

Horniny sedimentární vznikly mechanickým usazením úlomků a částic horninového materiálu transportovaného vodou nebo vzduchem, chemickou sedimentací látek z nasycených roztoků a kupením organických hmot. Jejich radioaktivita je pak do velké míry dána obsahem radionuklidů v původním materiálu a možnosti jeho loužení a migrace během procesu transportu a usazování. Obvykle pozorujeme vyšší radioaktivitu s rostoucím podílem jílových materiálů. Jíly obvykle vykazují vyšší radioaktivitu (zejména díky vysokému obsahu K) než například pískovce nebo vápence. Speciální skupinou jsou potom známé plážové písky (například Ramsar v Iránu či Guarapari v Brazílii), které obsahují ve vysokých koncentracích monazit s vysokým obsahem Th a i U.

Horniny metamorfované vznikají z původních hornin působením vysokého tlaku a teploty. Jejich radioaktivita tak silně závisí na radioaktivitě původní horniny a stupni a způsobu metamorfózy. Některé radionuklidy mohou být během metamorfních procesů separovány např. v roztocích a transportovány na různé vzdálenosti. Mezi aktivnější metamorfované horniny patří obvykle migmatit či ortorula, málo aktivní jsou pak obvykle hadce či amfibolity. Extrémně vysoké obsahy U (stovky a ž tisíce ppm U) se pak vyskytují u černých břidlic z oblastí Norska a Švédska a také jílovité břidlice z Estonska.

S obsahem přírodních radionuklidů v horninách se pochopitelně v závislosti na geologii mění i dávkový příkon ve vzduchu nad zemí. Při terénním měření se obvykle měří dávkový příkon v 1 m nad zemí. Tento fakt souvisí zejména s dozimetrickým hlediskem, kdy nás z hlediska zdravotních účinků zajímá zejména pole záření v oblasti středu těla (nikoliv těsně nad zemí). Celosvětový průměr dávkového příkonu gama je uváděn 55 nGy/h, průměr na území ČR je brán 66 nGy/h. Běžně se uvádí rozsah dávkových příkonů na území ČR jako 6-250 nGy/h, přičemž 90 % hodnot spadá do užšího intervalu: 31-88 nGy/h. Všechny tyto statistiky byly prezentovány v [UNSCEAR 1988]. Různé dávkové příkony na území ČR nejlépe ilustruje Radiometrická mapa ČR české geologické služby, která je k dostání v tištěné podobě nebo v měřítku 1:200000 na internetu prostřednictvím služby WMS (Web map service). Ukázka radiometrické mapy je v obrázku 1.3



Obrázek 1.3: Ukázka radiometrické mapy ČR dostupná v online aplikaci https://geoportal.gov.cz/

A pro porovnání ještě uvedeme geologickou mapu ČR v obrázku 1.4, která je opět dostupná v tištěné či online podobě na protálu WMS (Web map service).

Při známém obsahu K, U, Th v hornině lze samozřejmě dávkový příkon od těchto radionuklidů ve vzduchu dopočítat. Výpočet lze čistě teoreticky provést i analyticky (při známém lineárním součiniteli zeslabení) a to integrováním příspěvku od bodového zdroje přes celý zájmový objem (pro polorovinu obvykle uvažujeme polokouli zeminy). Současné technologie však umožňují mnohem snazší stanovení pomocí metody Monte Carlo. Při zavedení série předpokladů pak lze spočítat i dávkový příkon na základě konverzních koeficientů uvedených v tabulce 1.2. Použití těchto přepočetních koeficientů předpokládá nekonečnou polorovinu s homogenním rozložením



Obrázek 1.4: Ukázka geologické mapy ČR. Detailní mapa včetně vysvětlivek je dostupná v online aplikaci https://geoportal.gov.cz/.

radionuklidů a existencí radioaktivní rovnováhy v přeměnových řadách. Výpočet těchto koeficientů byl poprvé prezentován v publikaci [LøVBORG 1984].

Tabulka 1.2: Koeficienty pro přepočet koncentrace radionuklidů na dávkový příkon [IAEA 2003].

Koncentrace radionuklidu	Dávkový příkon v 1 m $[\rm nGy/h]$
1%K	$13,\!078$
1 ppm U	$5,\!675$
1 ppm Th	2,494

1.2 Spektrometrie záření gama

Na úrovni této práce nepovažujeme za nutné popisovat celý princip gama spektrometrie a budeme předpokládat jeho, alespoň zběžnou, znalost. Uvedeme tedy jen velmi stručný přehled základních kroků, které vedou k určení koncentrace radionuklidů ve vzorku (nebo v případě terénní spektrometrie v měřeném objemu) a pro zájemce o hlubší rozbor můžeme doporučit velmi dobře zpracovanou publikaci [GILMORE 2008]. Po tomto stručném úvodu se budeme o něco podrobněji zabývat některými specifiky spektrometrie přírodních radionuklidů, která nemusejí být vždy úplně zřejmá a mohou působit komplikace při vyhodnocení.

Základní úkolem gama spektrometrie bude stanovit druh a množství radionuklidů ve zkoumaném vzorku nebo objemu. Umožní nám to přístroje (detektory) se spektrometrickými vlastnostmi, tj. takové které mají jednoznačně definovaný vztah mezi energií absorbovaného záření a signálem na výstupu z detektoru. Z gama spektrometrické teorie víme, že emisní spektrum (tak jak jsou fotony vyzařovány při přeměně) je čárové s diskrétními linkami, jejichž energie odpovídá jednotlivým přechodům mezi energetickými hladinami a jejich intenzita odpovídá pravděpodobnosti daného přechodu. Spektrum, které budeme detektovat, je ale odlišné. Projeví se celá řada efektů vznikajících interakcí fotonů v samotném detektoru nebo na dráze částice ze zdroje k detektoru. Spektrum má mnoho prvků, které souvisí s různými interakcemi [GILMORE 2008]. S ohledem na cíle této práce se zde omezíme pouze na konstatování, že předmětem našeho zájmu budou vždy píky úplné absorpce. Jedná se o útvary Gaussovského tvaru, které odpovídají situaci, kdy foton zanechal veškerou svou energii v detektoru. Tento jev pak mohl nastat jedinou interakcí či sérií interakcí.

Plocha píku úplné absorpce bude vždy přímo úměrná aktivitě zdroje. Jaká je konstanta této úměrnosti je otázka pro tzv. účinnostní kalibraci, kdy na základě zdroje o známé aktivitě zkoumáme právě vztah mezi aktivitou a plochou píku úplné absorpce. Účinnost detekce je závislá na energii záření a je tedy třeba ji určovat pro každou měřenou energii, případně pokrýt požadovaný energetický rozsah bodovými měření a pak provést fit zjištěné závislosti. Tento postup je obvyklý v laboratorní gama spektrometrii a zjištěná křivka se nazývá účinnostní. Fotopíková detekční účinnost pro energii E, kterou značíme $\eta(E)$, se stanovuje podle vztahu 1.1, kde N je počet impulzů v píku energie E, A značí aktivitu daného radionuklidu, Y je radiační výtěžek této energetické linky E a t je doba nabírání spektra.

$$\eta(E) = \frac{N}{A \cdot Y(E) \cdot t} \tag{1.1}$$

Učinnostní křivka je vždy funkcí geometrie zdroj-detektor. Samozřejmě nejpřesnější by bylo určit účinnost pro každý možný měřený případ (tvar zdroje, složení a hustota materiálu...). V praxi toto však není realizovatelné a proto se obvykle určují křivky pro různé tvary zdroje (v laboratorní spektrometrii tvary nádoby) a následně se zavádějí opravy na odlišnosti od standardu - zejména hustota a prvkové složení. Nástrojů pro řešení této problematiky je celá řada, v naší práci jsme použili vlastní metodu stanovení těchto korekcí, kterou jsme prezentovali v [JOHNOVÁ 2016].

Laboratorní měření samozřejmě byla součástí této práce, nicméně způsoby zpracování a vyhodnocení dat považujeme za běžnou laboratorní praxi a nepovažujeme za nutné je zde podrobněji rozvádět. Pro podrobný přehled o celé metodě doporučujeme nastudovat [GILMORE 2008]. Konkrétní postupy v laboratořích se mohou mírně lišit, nicméně základ metody stanovení koncentrace radionuklidů by měl být vždy v souladu v normou [ČSN IEC 1452].

1.2.1 Důležitá specifika spektrometrie přírodních radionuklidů

Než přejdeme na terénní spektrometrii, podíváme se některá, né vždy plně známá, specifika spektrometrie přírodních radionuklidů. V předchozí části práce jsme stručně představili radionuklidy ⁴⁰K, ²³⁵U, ²³⁸U, a ²³²Th a ukázali jsme i schémata přeměnových řad posledních tří jmenovaných. Již jsme také zmínili, že mezi radionuklidy ²³⁵U

a ²³⁸U budeme vždy očekávat konstantní izotopické zastoupení a že ve všech třech řadách budeme očekávat existenci radioaktivní rovnováhy. Případy, kdy dochází vlivem chemických procesů k narušení radioaktivní rovnováhy v řadách, samozřejmě existují. K těmto případům je třeba přistupovat individuálně obvykle za využití polovodičového detektoru, případně alternativních metod zpracování spektra. V naší práci se případy narušené rovnováhy zabývat nebudeme. Příčiny a klasifikace různých druhů nerovnováhy se zabývá starší, ale stále aktuální článek [ROSHOLT 1959]. Ze spektrometrického hlediska lze tuto problematiku řešit individuálně po důkladném nastudování principů a postupů v gama spektrometrii, například [GILMORE 2008].

Existence přeměnových řad a rovnováhy v nich nám do jisté míry zjednodušuje detekci přítomnosti a stanovení aktivity přírodních radionuklidů. Jednak je k dispozici celá řada energetických linek, ze kterých je teoreticky možné aktivitu stanovit a jednak při předpokladu rovnováhy stačí teoreticky stanovit aktivitu jednoho z prvků řady. V praxi samozřejmě raději přistupuje ke stanovení aktivity více prvků řady (je-li to možné) a následně k váženému průměrování jednotlivých aktivit.

Přítomnost všech dceřinných produktů v přírodních přeměnových řadách a komplikovaná přeměnová schémata (a tedy velké množství energetických linek) představují i hlavní zdroj komplikací spektrometrie přírodních radionuklidů. Velmi často dochází k interferencím linek různých radionuklidů, které komplikují nebo dokonce znemožňují využití těchto linek pro spektrometrii. Typickým příkladem je pík 186 keV.

Pík 186 keV

U píku, který označujeme jako 186 keV v přírodních vzorcích totiž detekujeme multiplet (více píků jejichž vzájemný energetický rozdíl je pod energetickou rozlišovací schopností detekčního systému). Zde se konkrétně jedná o energie 185,72 keV od ²³⁵U, 186,21 keV od ²²⁶Ra (přibližně stejně četné píky) a energii 186.05 keV od ²³⁰Th (pouze minimální příspěvek k celkové četnosti v multipletu). Problém interference linek je teoreticky řešitelný strippingovou metodou, kdy by se stanovila aktivita jedno z radionuklidů z jeho další linky (či dalších linek) a celé spektrum takto stanoveného radionuklidu by se odečetlo od spektra součtového. Postup by se případně opakoval pro další radionuklidy, které jsou součástí multipletu. Zde by se tedy nabízelo určit aktivitu ²³⁵U z jeho linky 143,76 keV (s radiačním výtěžkem 10,96%) a provést dekonvoluci součtového spektra. Bohužel tato energetická linka také podléhá interferenci a to s energiemi 144,23 keV (²²³Ra) a v malé míře přispívá i 143,87 keV (²³⁰Th). Pro radionuklid ²³⁵U tedy zbývá pouze linka 163,33 keV, která má ovšem radiační výtěžek pouhých 5,08 %, vlivem čehož bude stanovení aktivity z této linky zatíženo významnou nejistotou.

Předchozí postup může být jediným možným řešením pro vzorky, kde bylo narušeno přírodní izotopické zastoupení ²³⁸U a ²³⁵U nebo/a došlo k narušení radioaktivní rovnováhy v přeměnových řadách. Pokud si ovšem můžeme být jisti, že k žádnému z předchozích případů nedošlo (alespoň né ve významné míře), je možné využít právě izotopického poměru a výtěžků jednotlivých linek ke stanovení přepočetního koeficientu. Koeficienty pro multiplety 186 keV a 143 keV shrnujeme v tabulce 1.3.

Tabulka	1.3: Multiplety	186 keV	a 143	keV :	a způsob	jejich	vyhodn	ocení za	před-
pokladu	radioaktivní ro	vnováhy v	v řadác	ch a p	řírodního	izotoj	oického	poměru	²³⁸ U a
235 U.									

radionuklid	řada	energie	radiační výtěžek	podíl v
		$[\mathrm{keV}]$	[%]	$\operatorname{multipletu}$
186 keV mul	tiplet			
$^{235}\mathrm{U}$	$^{235}\mathrm{U}$	185,72	57,2	0,428
226 Ra	$^{238}\mathrm{U}$	186, 21	3,555	0,571
$^{230}\mathrm{Th}$	$^{238}\mathrm{U}$	$186,\!05$	0,0088	$0,\!001$
143 keV mul	tiplet			
$^{235}\mathrm{U}$	$^{235}\mathrm{U}$	143,76	$10,\!96$	0,720
$^{230}\mathrm{Th}$	$^{238}\mathrm{U}$	$143,\!87$	0,049	0,069
²²³ Ra	$^{235}\mathrm{U}$	$144,\!23$	3,22	0,211

Poslední sloupec tabulky 1.3 tedy říká jaké procento impulzů v píku 186 keV, resp. 143 keV, přísluší kterému radionuklidu. Korekci pak lze aplikovat přímo na počet impulzů v píku a pokračovat ve výpočtu aktivity podle vzorce 1.1 s korigovaným počtem impulzů. Případně je možné provést vyhodnocení s předpokladem, že všechny impulzy v píku patří pouze jednomu z radionuklidů, a aplikovat korekci až na výslednou aktivitu.

Větvení v přeměnových řadách

Druhým faktem, který je v tomto místě nutné zmínit, je existence větvení v rámci přeměnových řad, jejíž přehlédnutí může způsobit zásadní nadhodnocení aktivity radionuklidů, které jsou součástí větve. U přírodních radionuklidů se tento případ týká zejména u stanovování aktivity ²³²Th z dceřinného ²⁰⁸Tl a případně u ²³⁸U použitím ²³⁴Pa . Většina tabulek radionuklidů ([LNHB online], [LUND ONLINE] či další) prezentuje výtěžky radionuklidu ²⁰⁸Tl vztažené přímo na přeměnu samotného ²⁰⁸Tl bez upozornění, že tento radionuklid vzniká z mateřského ²¹²Bi pouze v cca 35% přeměn. Tedy při použití linky 2614 keV a výtěžku 99 %, který vrací většina tabulek, dostaneme aktivitu ²⁰⁸Tl, kerá odpovídá 35% aktivity původního radionuklidu řady, tedy ²³²Th. Každý z výtěžků linky ve větvení, chceme-li ho použít ke stanovení aktivity původního radionuklidu řady, tedy musíme přenásobit podílem této větve.

Stejné pravidlo potom platí u případu ²³⁴Pa při určování aktivity radionuklidu ²³⁸U. Některé z tabulek uvádějí velmi zjednodušeně situaci přeměny ²³⁴Th a několika následujících radionuklidů z počátku ²³⁸U přeměnové řady. Zjednodušená prezentace členů přeměnové řady může vést k chybné interpretaci přítomnosti ²³⁴Pa. V obrázku 1.5 vidíme detail přeměnového schématu na počátku ²³⁸U přeměnové řady. Tedy výtěžky linek přeměny ²³⁴Pa, které získáme z tabulek, je opět nutné přenásobit pravděpodobností celé větve - tedy 0,16% - čímž se pro nás tento radionuklid stává v běžných podmínkách nedetekovatelným. Nicméně součástí spektrometrického vyhodnocení radionuklidů ²³⁸U řady bývá radionuklid ^{234m}Pa, jehož linka 1001 keV je za běžných podmínek detekovatelná (zejména v polovodičové spektrometrii). Podrobně se touto částí přeměnové řady zabývá článek [YÜCEl ET AL. 1998], kde jsou mimo jiné podrobně rozebrány jednotlivé přeměnové větve z obrázku 1.5.



Obrázek 1.5: Detail přeměnového schématu počáteční části ²³⁸U přeměnové řady.

Při použití linky 1001 keV ve spektrometrii je však třeba postupovat opatrně z důvodu relativně vysoké nepřesnosti s jakou jsou v tabulkách uváděny hodnoty jejího výtěžku. My se v naší práci budeme soustředit na terénní spektrometrii a pro naše účely bude hodnota radiačního výtěžku 1,07 % dostatečně přesná. Podrobněji se studiem výtěžku této linky zabývá článek [ADSLEY ET AL. 1998], který podrobněji vysvětluje zdroj nejasností kolem výtěžku této linky a dále potom novější článek [KHATER A EBAID 2017], kde byla prezentována nejnovější data (námi používaná, výše zmíněná hodnota) ohledně hodnoty tohoto výtěžku.

Přírodní pozadí

Při stanovení koncentrace přírodních radionuklidů má velmi významný podíl stanovení pozadí měřených spekter.

U laboratorní spektrometrie lze vliv pozadí poměrně účinně omezit a to odečtením pozaďového spektra od měřeného. Prakticky se provádí jako součást vyhodnocovací sekvence měřených spekter, kdy laboratoř má uložené pozaďové spektrum daného detektoru a při vyhodnocení je proveden odečet ploch píků pozaďových píků přírodních radionuklidů. Pozaďové spektrum by mělo být nabíráno po dobu několikanásobně delší než je obvyklá doba měření spekter vzorků (z důvodu eliminace fluktuací pozadí). Dále je doporučeno provést porovnání pozaďových spekter z různých denních dob a různých ročních období z důvodu možné fluktuace koncentrace radonu v laboratoři. V terénní spektrometrii je tato problematika těžko řešitelná. V případech, kdy měříme malé lokalizované jevy (kontaminace či geologické jevy) je možné nabrat věrohodné pozadí v místě mimo tento jev. Obvykle se nejprve provádí hrubý průzkum měřením dávkového příkonu, který lokalizuje daný jev a zároveň určí vhodné místo pro nabrání pozaďového spektra. S rostoucí plochou oblasti, kterou budeme v terénu měřit, pak samozřejmě klesá přesnost stanovení pozadí, jelikož se pro jeho nabrání musíme více a víc vzdálit od měřené oblasti. S eliminací vlivu pozadí v terénní spektrometrii pak souvisí i výběr měřících bodů. Měření v terénu mohou snadno narušit umělé i přírodní terénní nerovnosti, jako budovy, výchozy hornin, skalní stěny apod. Tato problematika je pak otázkou nejen měření pozadí, ale i narušení kalibrační geometrie. Podrobněji se touto problematikou a možnostem jejího řešení zabývá Diplomová práce [JOHNOVÁ 2014].

Narušení radioaktivní rovnováhy v řadách

Již několikrát jsme zmínili, že budeme vždy předpokládat existenci radioaktivní rovnováhy. Nicméně pro kompletnost zmíníme ještě stručně způsoby, kterými může docházet k narušení této rovnováhy v přírodě. Z praktického hlediska nejčastějším mechanismem tohoto narušení je **únik radonu ze systému**. Každá z přírodních přeměnových řad zahrnuje jeden z izotopů radonu. Radon jako inertní plyn může měřený systém opustit. Bez vnějšího narušení dochází pouze k emanaci z povrchu vzorku, která je obvykle velmi malá. Zrychlení úniku radonu ze systému/vzorku ovšem dochází při vnějším zásahu. Nejvýznamněji se s tímto jevem setkáváme při odběru vzorků, kdy je únik radonu zjednodušen samotným odběrem, drcením, sítování atd. Toto narušení se řeší tzv. hermetizací (vzduchotěsným uzavřením) a vyčkáním na opětovné ustálení radioaktivní rovnováhy (obvykle více než 20 dní). V terénu se s tímto problémem setkáváme zřídka - únik radonu z podloží může být například urychlen v těsné blízkosti tektonických zlomů. Ovšem terénní spektrometrie je v těchto oblastech silně ovlivněna změnou složení horniny ve výplni zlomu oproti okolí a čistě za pomoci terénní spektrometrie lze jev úniku radonu ze systému posuzovat jen těžko. Problematikou terénní spektrometrie i měření koncentrace radonu v oblasti tektonických zlomů jsme se zabývali v práci [JOHNOVÁ ET AL. 2014].

Narušením rovnováhy pak dochází i přírodními jevy. Příkladem je vliv podzemních vod, kdy dochází k selektivnímu rozpouštění některých prvků a jejich následnému transportu. Příkladem je ^{210}Pb , které se právě tímto způsobem může dostat do lokalit vzdálených od původního zdroje. Z tohoto důvodu není doporučeno používat ^{210}Pb pro stanovení koncentrace 238 U v horninách. Na druhou stranu může být dobrým nástrojem pro studium pohybu podzemních vod.

Výběr linek vhodných pro gamma spektrometrii přírodních radionuklidů

K výběru energetických linek pro účely spektrometrie přírodních radionuklidů je tedy třeba přistupovat obezřetně. V tabulce 1.4 uvedeme přehled linek a jejich výtěžků, které budeme v naší práci při stanovování aktivity přírodních radionuklidů používat. Součástí simulací pak budou i další linky, které sice nejsou obvykle používané ke stanovení aktivity přírodních radionuklidů, nicméně jsou součástí kompletního spektra přírodních radionuklidů U a Th. Součástí tabulky jsou i komentáře ohledně možných interferencí či možnosti sumací pro jednotlivé linky.

Tabulka 1.4: Energetické linky vybrané pro stanovení aktivity přírodních radionuklidů v této práci [GILMORE 2008], kapitola Gamma Spectrometry of Naturally Occurring Radioactive Materials.

Radionuklid	Energie [keV]	Výtěžek [%]	$\mathrm{koment} \mathrm{\acute{a}} \mathrm{\check{r}}$
⁴⁰ K	1460.82	10.66	možná interference s ²²⁸ Ac
$\mathbf{\tilde{R}ada}^{-235}\mathbf{U}^{-1}$			
$^{235}\mathrm{U}$	185.72	57.2	viz komentář výš
	143.76	10.96	viz komentář výše
	163.33	5.08	viz komentář výše
227 Th	235.96	12.6	-
	256.23	6.8	-
223 Ra	269.46	13.7	možná interference s $^{228}{\rm Ac}$ a $^{219}{\rm Rn}$
219 Rn	271.23	10.8	možná interference s $^{228}\mathrm{Ac}$ a $^{223}\mathrm{Ra}$
	401.81	6.4	-
$\mathbf{\tilde{R}ada}^{238}\mathbf{U}$			
234 Th	63.28	4.8	-
234m Pa	1001.03	1.02	-
226 Ra	186.21	3.56	viz komentář výše
$^{214}\mathrm{Pb}$	351.93	35.6	-
	295.22	18.41	-
	242.00	7.268	interference s ²¹² Pb
$^{214}\mathrm{Bi}$	609.31	45.49	pravé sumace
	1764.49	15.31	-
	1120.29	14.91	pravé sumace
	1238.11	5.83	pravé sumace
	2204.21	4.91	-
$^{210}\mathrm{Pb}$	46.54	4.25	nízká energie
Řada ²³² Th			
^{228}Ac	911.28	25.8	pravé sumace
	968.97	15.8	pravé sumace
	338.32	11.27	pravé sumace
$^{212}\mathrm{Pb}$	238.63	43.6	interference s ²¹⁴ Pb
$^{212}\mathrm{Bi}$	727.33	6.74	pravé sumace, interference s ²²⁸ Ac
$^{208}\mathrm{Tl}$	2614.51	99.7 (35.85)*	pravé sumace
	583.19	85.0 (30.6) [*]	- pravé sumace
*Výtěžek opr	avený na větver	ní, viz komentái	ř výše

1.3 Terénní spektrometrie gama

Po přehledu nejdůležitějších faktů z oboru gama spektrometrie obecně se nyní zaměříme čistě na spektrometrii terénní.

Počátky terénní spektrometrie sahají do 50. let minulého století, kdy byl v článku [HOFSTADTER 1948] uveden popis scintilačních vlastností nového materiálu NaI. Na tuto práci navázal [JOHANSSON 1950] s ukázkou konstrukce prvního scintilačního spektrometru. Prvotní využití těchto spektrometrů v terénu byla zejména pro monitorování spadu umělých radionuklidů v důsledku testů jaderných zbraní. Většina těchto prací byla tajná a v terénu byly detektory používány pouze k měření úhrnného počtu impulzů. První terénní použití spektrometru gamma se zabudovaným jednokanálovým analyzátorem prezentoval [ADAMS 1961]. Velký rozmach této metody nastal v průběhu šedesátých letech minulého století v souvislosti s jejím využitím v uranovém průzkumu. Jedním z prvních použití v této oblasti byla práce [ADAMS AND FRYER 1964].

Velmi krátce po prvních pozemních spektrometrických měřeních byla představena i letecká spektrometrie. Jednou z raných prací v tomto oboru je [HAND 1964]. Letecká spektrometrie byla hojně vyžívána při monitorování terestrického záření, v uranovém průzkumu i monitorování okolí jaderných zařízení.

První využití polovodičových detektorů v terénní spektrometrii byla prezentováno v práci [BECK ET AL. 1971], zde se jednalo o využití staršího typu Ge(Li). Dnes častější HPGe se v terénu používají od 80. let minulého století.

Od svých počátků metoda terénní gama spektrometrie zaznamenala velký rozmach, jehož kompletní popis je mimo rozsah této práce. Jedním z nejdůležitějších milníků metody bylo nahrazení původních jenokanálových analyzátorů analyzátorem multikanálovým, které zkrátilo potřebnou dobu měření a podstatně zjednodušilo samotné měření. Z hlediska technického vývoje byly postupně představovány nové typy scintilačních krystalů Cs(I), BGO, LaBr, CeBr, YAP, YAG a mnoho dalších. Kromě zmíněných Ge(Li) a HPGe bylo rozšířeno i portfolio scintilačních detektorů - zejména o CZT detektor, který na rozdíl od předchozích dvou jmenovaných nevyžaduje chlazení a je tak pro terénní měření ideální.

Většina zmíněných detektorů představuje spíše různé alternativy pro specifické případy měření. Dodnes nejčastěji používaným terénním detektorem je NaI(Tl) spektrometr spojený s klasickým fotonásobičem. Tento systém má relativně vysokou detekční účinnost a dostatečně dobré energetické rozlišení umožňující spektrometrické určení koncentrace přírodních radionuklidů (v případě existence rovnováhy). Pro případy nerovnováhy, studie kontaminace nebo obecně spektrometrii s vysokým rozlišením je pak nejčastější volbou HPGe detektor s přenosným chlazením (obvykle malá Dewarova nádoba, nebo elektronické chlazení). Cena za lepší rozlišení u HPGe detektoru je většinou horší detekční účinnost, komplikovanější transport a vyšší cena zařízení. Za poslední desítky let se tedy samotná metoda příliš nezměnila, stejné tvrzení platí i o mechanismu kalibrace, kterému se budeme věnovat v následující části.

1.4 Kalibrace v terénní spektrometrii

Kalibrací přístroje budeme rozumět postup vedoucí k určení vztahu mezi výstupem ze spektrometru - typicky počet impulzů v jednotlivých kanálech (či oknech) a hledanou veličinou, kterou je v případě terénních spektrometrů aktivita radionuklidů v měřeném objemu.

Při práci se spektrometry bývá obvykle prvním krokem kalibrace energetická. Ta je však poměrně jednoduchou otázkou nalezení (obvykle lineárního) vztahu mezi číslem kanálu a energií za pomoci známých zdrojů záření. Přestože většina praktických úkolů v této práci zahrnovala určení energetické kalibrace, v práci tento krok uveden není. Jedná se o běžnou gamaspektrometrickou praxi.

1.4.1 Obecný popis kalibračního postupu

Základní metodikou, ze které se vychází při kalibraci terénní spektrometrů, je postup popsaný v Doporučení IAEA [IAEA 2003]. Toto doporučení kromě postupu měření a zpracování výsledků uvádí i doporučení jakým mají být konstruovány kalibrační standardy. Zde navržená konstrukce věrně odpovídá standardům dostupným na české kalibrační základně. Což není překvapující s ohledem na fakt, že čeští vědci byli jedni ze spoluautorů celé metodiky.

Metodika tedy předpokládá existenci čtyř betonových standardů se známými koncentracemi K, U a Th. Tři z nich jsou aktivní standardy - každý se zvýšenou koncentrací jednoho z radionuklidů K, U a Th. Čtvrtý je pozaďový (s minimálním obsahem zmíněných radionuklidů). O jaké koncentrace konkrétně se jedná popíšeme až u konkrétního případu, nyní nám postačí tato informace.

Kromě standardů máme energeticky kalibrovaný spektrometr, jehož energetický rozsah máme rozdělený do jednotlivých energetických oken. U současných spektrometrů obvykle pracujeme s celým spektrem a okna jsou obvykle nahrazena kanály, které pokrývají celý energetický rozsah spektrometru. Nicméně tato metodika byla, jak jsme již zmínili, vytvořena pro starší spektrometry, kde zpracování celých spekter nebylo nutné a uživateli stačilo vymezit tři energetická okna, každé pro jeden ze zájmových radionuklidů.

Počet impulsů od daného radionuklidu v konkrétním energetickém okně je přímo úměrný koncentraci radionuklidu v měřeném objemu. Nechť n_i je počet impulsů v i-tém energetickém okně, c_j koncentrace j-tého prvku v měřeném objemu a $s_{i,j}$ citlivost spektrometru k detekci j-tého prvku v i-tém okně. Počet impulsů od pozadí v i-tém okně nechť je n_{ibg} . Pro index j pro měření koncentrace našich zájmových radionuklidů tedy platí $\{K, U, Th\}$ a lze psát:

$$n_i = s_{iK}c_K + s_{iU}c_U + s_{iTh}c_{Th} + n_{ibq} \tag{1.2}$$

Při výpočtech se obvykle používá maticový zápis rovnice 1.2 v podobě 1.3.

$$\mathbf{N} = \mathbf{SC} \tag{1.3}$$

kde N je vektor počtů impulsů v oknech s odečteným pozadím v každém okně $n_i - n_{ibg}$. C je vektor koncentrací jednotlivých radionuklidů a S je matice citlivostí.

Právě pro určování citlivostí $s_{i,j}$ jsou využívány výše zmíněné kalibrační standardy. Na každém válcovém standardu je naměřen počet impulsů pro všechna tři požadovaná okna a od každého okna je odečten počet impulsů pozadí a rovnice 1.2 přejde na tvar 1.4:

$$n_i - n_{ibg} = s_{iK} \Delta c_K + s_{iU} \Delta c_U + s_{iTh} \Delta c_{Th} \tag{1.4}$$

kde Δc_j značí rozdíl mezi koncentrací j-tého prvku v daném kalibračním standartu a koncentrací v pozaďovém standartu.

Publikace [IAEA 2003] dále definuje tzv. strippingové poměry (stripping ratios) a to následujícím způsobem:

$$\alpha = \frac{s_{2Th}}{s_{3Th}} \quad \beta = \frac{s_{1Th}}{s_{3Th}} \quad \gamma = \frac{s_{1U}}{s_{32U}} \quad a = \frac{s_{3U}}{s_{2U}} \quad b = \frac{s_{3K}}{s_{1K}} \quad g = \frac{s_{2K}}{s_{1K}} \tag{1.5}$$

Jedná se v podstatě o poměry příspěvku daného radionuklidu do některého z oken ku příspěvku do jeho "vlastního okna". Podávají také informaci o rozlišovací schopnosti detektoru. Čím jsou menší, tím lepší rozlišovací schopnost máme k dispozici.

Jelikož kalibrační pad není nekonečný prostor, je třeba dále zavést geometrickou korekci. Tento opravný faktor závisí na rozměrech standartu, jeho hustotě a výšce sondy nad povrchem země. Příklady konkrétních hodnot pro vybrané typy kalibračních standardů jsou uvedeny v [IAEA 2003].

Zpracování dat Po naměření počtu impulsů N_i pro každé okno je tato hodnota převedena na četnost, tj. počet impulsů za jednotku času $n_i = \frac{N_i}{t}$, vydělením čistým časem měření (tj. po odečtení mrtvé doby). Dále lze použít tzv. strippingovou metodu, kdy jsou určeny čisté příspěvky j-tého radionuklidu do konkrétního i-tého okna. Počty impulsů každého radionuklidu v jeho vlastním okně s využitím strippingových faktorů jsou pak následující:

$$n_{3Th} = \frac{n_3 - n_{3bg} - a(n_2 - n_{2bg})}{1 - \alpha a}$$
$$n_{2U} = n_2 - n_{2bg} - \alpha n_{3Th}$$
$$n_{1K} = n_1 - n_{1bg} - \beta n_{3Th} - \gamma n_{2U}$$

Odtud lze už pak jednoduše dopočítat koncentrace jednotlivých radionuklidů v ppm pro U a Th a v % pro K.

$$c_K = \frac{n_{1K}}{s_{1K}}$$
 $c_U = \frac{n_{2U}}{s_{2U}}$ $c_{Th} = \frac{n_{3Th}}{s_{3Th}}$

1.4.2 Kalibrační základny ve světě

V metodice kalibrace z předchozího oddílu jsme zmínili nutnost existenci kalibračních betonových padů s koncentracemi K, U a Th známými s dostatečnou přesností a distribuovanými dostatečně homogenně.

S rozmachem metody terénní spektrometrie vznikala postupně po světě celá řada kalibračních zařízení, která různými prostředky a s různou přesností konstruovala podobné kalibrační pady. Přestože se většina týmů spravujících tato kalibrační zařízení při konstrukcích padů držela původního agenturního doporučení [IAEA 1976], vznikala řada nejistot a otázek, zejména následující:

- možnost úniku radonu z padů,
- krátkodobé variace pole záření gama v důsledku vlhkosti padu,
- problémové určení koncentrace radionuklidů v padech komplikované zejména nehomogenitami v rozložení radioaktivního materiálu,
- nedostatek ověřených referenčních materiálů pro tvorbu padů.

Pro objasnění předchozích bodů bylo provedeno rozsáhlé mezilaboratorní porovnání, jehož metodika, výsledky a závěry jsou velmi detailně a obsáhle zpracovány v publikaci [LøVBORG 1984]. Součástí porovnání bylo celkem 12 zařízení v deseti zemích. Jmenovitě to byly: Argentina (Villa 25 de Mayo - San Rafael), Austrálie (CSIRO, Sydney), Brazílie (I.R.D., Rio de Janeiro), Canada (voj. letiště Uplands, Ottawa a Bells Corners nedaleko Ottawy), Dánsko (Riso National Laboratory, políž Roskilde), Finsko (letiště Vantaa, Helsinki), Israel (Soreq, voj. letiště), Jihoafrická republika (letiště Lanseria, nedaleko Johannesburgu), Švédsko (Borlange a Mala) a USA (letiště Walker Field, Colorado).

Jedním ze zásadních problémů, na které tato práce upozornila, byla neexistence jednotného standardu pro vyhodnocení K, U a Th v laboratorní spektrometrii. Laboratorní spektrometrie se využívala při tvorbě padů, nejprve k ověření aktivity vstupního radioaktivního materiálu, používaného k tvorbě padů. A dále pro kontrolu homogenity obsahu K, U a Th v jednotlivých vrstvách, ze kterého se pady slévaly. Na popud této práce byla pod vedením agenturní Analytical Quality Control Services vytvořena sada tří referenčních materiálů označovaných jako RG set (RGU-1, RGK-1 a RGTh-1). Na základě závěrů srovnání [LøVBORG 1984] byla vytvořena kompletní metodika [IAEA 1989] pokrývající všechny body od tvorby standardů (rozměry, materiály a způsob odlévání atd.) přes jejich udržování až po způsob kalibrování spektrometrů s jejich pomocí. Metodika obecně doporučuje konstrukci 4 válcových padů o rozměrech 3 m x 0,5 m pro pozemní spektrometry a rozměrech 8 m x 0,5 m pro leteckou spektrometrii. Později [GRASTY ET AL. 1991] přestavil možnost využití menších transportovatelných kvádrových padů o rozměrech (1x1x0,3) m, pomocí kterých lze kalibrovat přenosné i letecké spektrometry. Tyto kalibrace však už vyžadují geometrickou korekci vzhledem k malým rozměrům padu. Analytický způsob odvození těchto korekcí je součástí zmíněného článku.

Od vydání publikace [LøVBORG 1984] bylo po světě vybudováno více než 40 zařízení vhodných pro kalibrace terénních spektrometrů, z nichž některé umožňují kalibrace spektrometrů leteckých. Základny jsou vesměs vybaveny standardy, které následují doporučení prezentovaná v [IAEA 1989], případně nověji shrnutá a v [IAEA 2003]. Zařízení se vzájemně mírně liší rozměry padů, jejich umístěním (venkovní prostředí - letiště apod., nebo uvnitř hal) a použitím různých radioaktivních materiálů pro tvorbu standardů. Nejčastěji používanými materiály pro tvorbu padů jsou:

- K: draselná hnojiva, draselný živec,
- U: uraninit, syenit, fosforit, černá břidlice (Švédsko), rula (albite-pyroxene)...,
- Th¹ monazitový písek, diorit, thorit ,
- Pozaďové: říční a plážové písky, Bushvelský norit, stavební písek, vápenec, sklářský písek.

Uveď me jen stručný výběrový výčet některých zajímavých zařízení ve světě:

- Risø National Laboratory, Dánsko. Jedno z prvních kalibračních zařízení na světě bylo vybudováno pod vedením RiSø National Laboratory - jedné z největších výzkumných institucí v Dánsku. Zařízení bylo umístěno v areálu nedaleko Roskilde, pod správou Nuclear Geophysics Group. Původní 4 pady byly odlity na místě již v roce 1971 a o několik let později doplněny o další dva, které byly dovezeny již hotové. Všechny pady jsou válcové o průměru 3 m tloušťce 0.5 m a jsou umístěny v otevřeném prostoru. Celý proces konstrukce padů je popsán v [LøVBORG ET AL. 1981].
- Walker Field Airport, Grand Junction, Colorado, USA. Další z nejstarších základen nalezneme v USA v areálu letiště Walker Field, Grand Junction v Coloradu. Tvorba standardů je popsána v práci [WARD 1978] a následná analýza stability (zejména možností změn vlivem vlhkosti) byla prezentována v [STROMSWOLD 1978]. Pady byly zrestaurovány v roce 2017, došlo zejména k obnovení povrchu padů a pochopitelně úpravě certifikovaných koncentrací. Podrobnosti jsou dostupné v reportu [DOE 2017].

¹Mnohé z materiálů jmenovaných u U byly používány i pro tvorbu Th padů, jelikož jsou kromě U bohaté i na Th. Pro zlepšení poměru Th/U se pak přidávaly jmenované příměsi.

- letiště Helsinki-Vantaa, Finsko. V roce 1981 byla publikována práce [MULTALA 1981] představující tvorbu standardů pro kalibrace primárně leteckých spektrometrů umístěných na letišti Vantaa nedaleko Helsinek. byly zkonstruovány 4 pady o rozměrech (8x8x0,5) m. Geometrie těchto standardů umožnuje překrytí vrstvou vody (autoři doporučují výšku hladiny 3 cm), čímž dojde ke korekci na zeslabení ve vzduchu pro nominální výšku letu 30 m.
- North Ryde, Austrálie. Jedna z prvních základen ve světě byla pod vedením SCIRO Institute of Energy and Earth Resources vybudována v North Ryde, které je dnes předměstím Sydney. Základna byla vybavena 4 klasickými standardy (pozaďový, K, U a Th). Shrnutí informací o konstrukci a ověřování je k dispozici v původní publikaci [DICKSON A LøVBORG 1984].
- Coopers Plains, Brisbane. Nově vybavenou kalibrační základnu je možné nalézt v areálu kampusu univerzity v Brisbane v Austrálii. Publikace [WALLACE 2016] uvádí všechny detaily z tvorby i testování padů. Pady jsou betonové o průměru 5 m. Na povrchu padů je nanesena vrstva epoxidové pryskyřice, která pomáhá udržení stabilní vlhkosti, minimalizuje únik radonu z povrchu a tím pomáhá k udržení maximální míry radioaktivní rovnováhy v přírodních řadách. Autoři navrhují využití těchto padů (kromě kalibrací spektrometrů v módu stanovení koncentrací K, U, Th) také pro kalibrace přístrojů stanovujících Kermu ve vzduchu.
- Nagpur, Indie. Další z nově vybavených kalibračních zařízení je indická základna v Nagpuru. Původní sada padů z roku 1984 byla již náročná na údržbu a měření na nich vykazovalo řadu nejistot. Nově bylo vytvořeno 5 menších transportních padů o rozměrech (1x1x0,3) m, které jsou pevně spojeny s přepravními vozíky. Součástí testování kvality nových padů bylo provedeno měření homogenity a také test vyluhování radionuklidů vodou, kdy byly pady umístěny na 28 dní v nádržích s vodou a následně byly pady spektrometricky proměřeny a byla provedena analýza vody. Všechny podrobnosti konstrukce a testování hotových padů jsou prezentovány v publikaci [SHARMA ET AL. 2018].

Síť kalibračních zařízení po světě je rozsáhlá, ovšem pro uživatele často málo přehledná. Při snaze kalibrovat své detektory na více zařízeních pak uživatelé často narážejí také na lehce odlišné přístupy ke korekcím atd. Pro zlepšení této situace představili autoři [TIJS ET AL. 2016] zajímavou iniciativu, v rámci které vytvářejí aplikační síť, která umožní porovnávat data ze základen po celém světě. Ve své práci využívají data z přístrojů, které byly kalibrovány na více zařízeních ve světě, většinou v rámci mezilaboratorních porovnání. Autoři se prozatím zaměřují na porovnání standardů pro karotážní přístroje, nicméně myšlenka je snadno přenositelná i na standardy pro přístroje pozemní.

Nejaktuálnější shrnutí problematiky kalibračních základen ve světě bylo prezentováno v [IAEA 2010], kde nalezneme mimo jiné i informace o proměřenosti území většiny významných zemí světa z pohledu letecké spektrometrie. V dodatku této publikace pak nalezneme i soupis všech kalibračních základen, které nabízejí službu kalibrace veřejně. Další standardy pak samozřejmě vlastní firmy vyrábějící spektrometry, kalibrace na svý standardech ovšem pro uživatele obvykle nenabízejí. IAEA tedy v roce 2010 evidovala celkem 8 základen s pevnými standardy pro pozemní spektrometrii, 10 základen se standardy pro leteckou spektrometrii, 18 základen s menšími transportními pady a pouhých 6 základen s vybavením pro karotážní spektrometrii. Česká základna ve Stráži pod Ralskem je součástí první i poslední skupinky, patří tedy k několika málo podobným zařízením na světě.

1.4.3 Kalibrační základna ve Stráži pod Ralskem

V CR je pro kalibraci terénních spektrometrů k dispozici kalibrační základna ve Stráži pod Ralskem [DIAMO]. Základna se nachází v areálu státního podniku DIAMO, který základnu spravuje a zajišťuje uživatelům možnost měření.

První kalibrační základna byla v ČR vybudována již v roce 1975 v Bratkovicích u Příbrami. Při výběru původní lokace bylo přihlédnuto zejména ke geologii (umístění na strukturách vykazujících nízké a homogenní přírodní pozadí), vzdálenosti od možných zdrojů zamoření, dostatečné vzdálenosti od staveb a terénních převýšení ovšem s dobrým přístupem pro automobily s možností zajištění objektu proti neoprávněnému vniknutí.

Standardy a jejich provedení

Při přípravě projektu byly zváženy dvě možnosti provedení standardů a to standardy sypké a standardy pevné (betonové). Zejména s ohledem na komplikace spojené s hermetizací a homogenizací sypkého standardu bylo v závěru přistoupeno k variantě pevných standardů. Vytvořeny byly standardy pro pozemní spektrometry a karotážní spektrometry.

Pro kalibrace pozemních spektrometrů slouží čtyři standardy, dle označení používaného na základně je budeme dále nazývat povrchovými standardy a označovat PK, PU, P0 a PTh. V souladu s metodikou popsanou výše obsahuje každý ze standardů radioaktivní materiál s anomálním obsahem jednoho s přírodních radionuklidů ⁴⁰K, ²³⁸U resp. ²³²Th ² a minimálním obsahem radionuklidů ostatních. Standard P0 je nízkoaktivní (pozaďový) s minimálním obsahem všech přírodních radionuklidů.

Standardy PK, PU a PTh tvoří ocelová nádoba o vnitřním průměru 2 m a výšce 0,62 m v níž je uložen samotný radioaktivní materiál. P0 tvoří čtvercová nádoba v rozměrech 2x2 m a výšce 0,8 m naplněná sypkým nízkoaktivním pískem.

Pro karotážní přístroje jsou k dispozici opět tři nasycené a jeden nízkoaktivní standard, opět v souladu s teorií kalibrace [IAEA 2003] a doporučení [IAEA 1989].

²U PTh a PU jsou mateřské radionuklidy ²³²Th a ²³⁸U v trvalé radioaktivní rovnováze se svými dceřinnými produkty a u PU je obsažena i celá přeměnová řada ²³⁵U a to v přírodním izotopickém zastoupení s ²³⁸U.

Pro experimentální účely jsou navíc k dipozici standardy vrstevnaté. Aktivní materiál je opět umístěn v ocelových nádobách o vnitřním průměru 1,4 m a výšce 1,2 m. V každé z nádob je umístěna hliníková trubka o průměru 8 cm a stěně tloušťky 5 mm.

Vrstevnatý standard se skládá z aktivních a neaktivních betonových vrstev tloušťky 10 cm a průměru 90 cm. Každá z vrstev má ve středu otvor průměru 8 cm. Rozmístění vrstev lze pomocí jeřábu měnit na přání zákazníka.

Tvorba standardů

Při tvorbě standardů byl jako radioaktivní materiál použit:

- \bullet uran: rovnovážná uranová ruda o granulaci $0,15~{\rm mm}$ a obsahu uranu 19,78 % (stanoveno chemicky),
- thorium: monazitový písek o granulaci $0,2~\mathrm{mm}$ a stanoveném obsahu Th7,31%,
- draslík: draselné hnojivo (označení Draslo ZP Praha-Ruzyně) o stanoveném obsahu K 48,41 %.

Jako pozaďový materiál byl zvolen nízkoaktivní písek ze Střelče u Turnova.

Kromě výše zmíněných radioaktivních materiálů podléhal kontrole obsahu přírodních radionuklidů i další stavební materiál používaný při výstavbě. Konkrétně písek, cement (použit portlandský cement), voda, štěrk a silniční panely. Detailní postup výroby všech standardů včetně postupů míchání, poměrů ředění apod. je popsán v technickém reportu [ROJKO ET AL. 1975]. Zde uvedeme pouze některé body důležité pro následující práci.

- Standardy PU a PTh (obdobně k KU a KTh) byly vytvořeny mícháním portlansdkého cementu, vody písku a radioaktivního materiálu (v různých poměrech pro U a Th). Jsou tedy skutečně betonové. Beton byl míchán a odléván postupně ve vrstvách, přičemž z každé vrstvy bylo odebráno několik vzorků pro laboratorní analýzu radionuklidů. Výsledky těchto analýz jsou uvedeny v dokumentu [ROJKO ET AL. 1975] a budou vstupovat do prvotních odhadů aktivit v praktické části této práce.
- Draslíkový karotážní standard (KK) byl vytvořen čistým nasypáním a upěchováním draselného hnojiva do připravené nádoby, povrchový draslíkový standard (PK) byl postupně odléván ze směsi draselného hnojiva, písku a vody. Na základě této informace očekáváme rozdílnou hustotu draslíkových standardů ve srovnání s uranovým a thoriovým.

Stěhování základny do nové lokality

Nově vybranou lokalitou byl areál odštěpného závodu Těžba a úprava uranu státního podniku DIAMO ve Stráži pod Ralskem. Z několika navržených objektů byl vybrán zateplený sklad MTZ č. 797 přibližných rozměrů (12x22,4) m. Před zahájením přesunu standardů do tohoto objektu bylo provedeno měření úhrnného záření gama v okolí i uvnitř skladu. Hodnoty naměřeného dávkového příkonu ve vzduchu uvnitř haly byly v rozmezí 75-95 nGy/h a hodnoty dávkového příkonu ve vzduchu v okolí byly 50-100 nGy/h. Přestože se jednalo o hodnoty mírně vyšší než charakteristiky původní lokality Bratkovice, podrobná analýza provedených měření ukázala, že význam toho rozdílu na funkci základny bude zanedbatelný.

Jak je podrobně popsáno v [MATOLÍN ET AL. 2010] str. 12 rozmístění standardů bylo voleno tak, aby bylo zajištěno minimální vzájemné ovlivňování standardů.

Vliv stěn

V rámci přestěhování základny byla též provedena studie vlivu stěn, v rámci které byly stanoveny koncentrace K, U a Th ve stěnách a to gamaspektrometrickým měřením v 1 m nad zemí. Popis konkrétních měření a jejich výsledků je k dohledání v [MATOLÍN ET AL. 2010] na str. 22. Pro naši další práci využijeme zejména informaci o průměrné koncentraci K, U a Th ve stěnách, uvedenou na straně 22, kterou po konfrontaci s výsledky laboratorní spektrometrie použijeme jako vstup do výpočetního modelu v praktické části této práce.

Tabulka 1.5: Koncentrace K, U, Th ve stěnách zjištěná in-situ měřením [MATOLÍN ET AL. 2010].

K [ppm]	U [ppm]	Th [ppm]
$1,\!89$	$4,\!01$	$10,\!80$

Dále byl proveden odhad vlivu záření přicházejícího ze stěn a to měřením terénní spektrometrem na standardech za použití stínění olověnými cihlami. Podrobný popis měření je opět k dipozici v [MATOLÍN ET AL. 2010]. Bylo prokázáno ovlivnění měřených koncentrací na standardech přítomností stěn a to největší měrou u PTh, který je umístěn v bezprostřední blízkosti 2 stěn. Závěrem této studie bylo navržení úprav efektivních koncentrací K, U a Th ve standardech PK, PU a PTh.

Kontrola parametrů karotážních standardů

Čerpáme opět z dokumentu [MATOLÍN ET AL. 2010], str. 28, kde je možnost dohledat detailnější informace. V rámci přestěhování základny bylo též provedeno kontrolní měření karotážních standardů a stejnými spektrometry v roce 2008 před
přestěhováním a v roce 2010 po přestěhování. Závěrem posouzení bylo, že přesun standardů nezpůsobil pozorovatelnou změnu v koncentracích.

Současný stav

V současném uspořádání jsou tedy k dispozici všechny původně vytvořené standardy, tj povrchové PK, PU, P0 a PTh, karotážní KK, K0, KU, KTh a karotážní vrstevnatý standard momentálně rozmístěný do dvou standardů KV1 a KV2 (umožňující přeskládání prstenců dle potřeb uživatele). Standardy jsou v hale základny rozmístěny dle schématu 1.6. Pro kalibraci pozemních spektrometrů jsou doporučeny efektivní koncentrace uvedené v tabulce 1.6.



Obrázek 1.6: Schéma umístění jednotlivých standardů na základně ve Stráži pod Ralskem

Tabulka 1.6: Doporučené efektivní koncentrace K, U, Th pro kalibrace pozemních spektrometrů [DIAMO].

kalibrační standard	K [-]	U [ppm]	Th [ppm]
standard PK	$15,\!33$	2,4	2,1
standard PU	$0,\!24$	29,2	2,4
standard PTh	$0,\!29$	5,1	$94,\! 6$
standard P0	$10,\!02$	0,3	$0,\!9$

Pro karotážní standardy vycházejí doporučené zdánlivé koncentrace z původních dat zjištěných laboratorní spektrometrií s upřesněním na základě dat z mezinárodních srovnávacích měření (IAEA) v letech 1989 a 2008. Údaje jsou shrnuty v tabulce 1.7 a vycházejí z informací uvedených na webových stránkách provozovatele kalibrační základny [DIAMO]. Hodnoty jsou uvedeny s uvážením hliníkových pažnic, údaje vpravo (v závorkách) jsou hodnoty stanovené po odstranění pažnic.

karotážní standard	hloubka [m]	K [-]	U [ppm]	Th [ppm]
standard KK	0,5-0,7	140(142)	0,2	0,5
	0,5		1287(1344)	
standard KU	0,6	0,3	$1323 \ (1381)$	25 (26)
	0,7		$1239\ (1293)$	
	0,5			1529(1586)
standard KTh	0,6	$0,\!3$	59(61)	1445(1498)
	0,7			1441(1494)
standard K0	0,8-1,0	0,02	0,3	0,9

Tabulka 1.7: Doporučené efektivní koncentrace K, U, Th pro kalibrace karotážních spektrometrů [DIAMO].

1.4.4 Moderní přístupy ke kalibracím spektrometrů

Již jsme zmínili, že samotná metodika ani základní přístrojové vybavení pro pozemní gamma spektrometrii se od doby jejího největšího rozmachu v sedmdesátých letech minulého století příliš nezměnily. Základní metodika, jak je uvedena v [IAEA 2003] - budeme jí dále nazývat **window analýza**, zůstává stále platná a je, zejména v geofyzice, nejčastěji používaná. V této podkapitole se podíváme na některé alternativy této metodiky kalibrace a následného vyhodnocení spekter v terénní spektrometrii.

Nejprve se podíváme na metodu **Full spectrum analysis** (dále jen **FSA**), která byla podrobně představena v práci [HENDRIKS ET AL. 2001]. Jak název napovídá, tento postup zpracovává celá spektra. Naměřené neznámé spektrum (Y) je v této metodě definováno jako součet tzv. standardních spekter (X_i) násobených hmotnostními koncentracemi pro jednotlivé radionuklidy (C_i) , plus pozaďové spektrum. Standardní spektra se získávají v procesu kalibrace pro daný detektor měřením na standardech (v principu je možné je získat i Monte Carlo simulacemi). Při analýze spektra se tedy hledají hmotnostní koncentrace C_i tak, aby výsledné vypočtené spektrum co nejblíže aproximovalo naměřené spektrum, využívá se při tom metoda nejmenších čtverců.

Oproti klasické window analýze je metoda FSA odolnější proti problémům se stabilizací zesílení - tedy posunům píků po ose x. V klasickém nastavení oken, jak jsme ho uvedli v předešlé kapitole, dále window analýza neodhalí přítomnost dalších radionuklidů ve spektru - typicky ¹³⁷Cs. Výsledky analýzy spektra pomocí FSA dále vykazují obecně nižší nejistotu, zejména pro radionuklidy s více energetickými linkami. Ve window analýze obvykle bereme 1-2 linky pro daný radionuklid, FSA využívá všechny linky, které byly k dispozici v kalibračním spektru.

Autoři článku [HENDRIKS ET AL. 2001] aplikovali FSA společně s krystaly BGO při leteckém průzkumu v oblasti Jihoafrické republiky. Za použití těchto dvou vylepšení se jim podařilo dosáhnout o necelý řád lepší citlivosti než u tradiční kombinace NaI(Tl) + window analýza. Autoři dále upozornili, že vylepšení citlivosti bude rapidně stoupat pro nízkoaktivní měření. Při velmi nízkých aktivitách dochází u tradiční window analýzy k zanášení nejistoty vlivem stripping faktorů a tím ke ztrátě citlivosti. Zvýšení citlivosti u zpracování spekter pomocí FSA umožňuje kratší časy měření spektra oproti window analýze - což v praxi vede buďto ke krašímu měření nebo v případě monitorování ploch k lepšímu prostorovému rozlišení.

Hlavní slabinou metody je fakt, že standardní spektra K, U a Th jsou do velké míry korelovaná. Oproti window analýze FSA přibírá oblast Comtonovských kontinuí, kde jsou spektra (zejména U a Th) velmi podobná. Korelace mezi standardními spektry vede ke zvýšení nejistoty výsledných koncentrací vypočtených z měřeného spektra.

Obdobní autoři jako v předchozí publikaci pak o rok později v článku [HENDRIKS ET AL. 2002] testovali využití standardních spekter počítaných pomocí Monte Carlo simulací namísto spekter získaných měřením na kalibračním padu. Simulovaná spektra autoři článku hodnotí jako podstatně lepší variantu než spektra měřená, zejména s ohledem na variabilitu kalibračních materiálů - hustota a složení materiálu - kterou simulace nabízejí. Zmíněna je i možnost simulace standardních spekter pro umělé radionuklidy (¹³⁷Cs či ⁶⁰Co), pro které by bylo vytvoření kalibračních padů z hlediska radiační ochrany velmi složité³. Hlavní nevýhodu tohoto postupu, jak autoři sami uvádějí, je problém systematické chyby při tvorbě modelu, tedy správnosti s jakou model detektoru aproximuje reálné zařízení.

Vylepšenou metodu FSA pak představili autoři v publikaci [XU ET AL. 2020]. V této práci z roku 2020 představili autoři variantu metody FSA s uvážením Poissonovské statistiky měřených spekter. Původní FSA představená v článku [HENDRIKS ET AL. 2001], využívá metodu nejmenších čtverců, která není plně optimalizovaná pro Poissonovskou statistiku dat. Autoři tak navrhli alternativní algoritmus, který je uveden v článku [XU ET AL. 2020] a který nazvali Spectral unmixing. Využití algoritmu pak ilustrovali na řadě měření s využitím různých polovodičových i scintilačních detektorů v sérii navazujících publikací: [PARADIS ET AL. 2020], [XU ET AL 2022],

[MAFRAIT ET AL. 2023]...

Autoři ze švédské univerzity v Umea představili v článku [BOSON ET AL. 2006] tzv. **semi-emprickou metodu kalibrace** HPGe detektorů využívaných v terénním monitorování. Jejich metoda se skládá ze dvou kroků. Prvním krokem je teoretický výpočet fluence fotonů od zdrojového objemu. K tomuto kroku přistupují na základě principu výpočtu fluence homogenní vrstvy (princip popsán již dříve v [KOCHER A AJOREEN 1985]), kdy je integrován příspěvek malého elementu dV. Původní princip z roku 1985 uvažoval pouze jednu homogenní vrstvu (jedna hustota

³Alternativ pro kalibrace spektrometrů pro detekci umělých radionuklidů (havarijní spektrometrie) je celá řada. Metody mohou být experimentální (obvykle kalibrace na na bližších pících přírodních radionuklidů a následná interpolace), výpočetní (metoda Monte Carlo) či hybridní (jakou představili autoři [BADAWI ET AL. 2022]).V této práci se však soustředíme čistě na metody využívané v monitorování přírodních radionuklidů.

materiálu s homogenně rozloženou aktivitou), autoři článku [BOSON ET AL. 2006] vytvořili novou variantu této metody, která umožňuje definici až tří vrstev s různou tloušťkou, hustotou zeminy a navzájem různou homogenně rozloženou aktivitou. Druhým krokem semiempirické metody je empirické určení detekční účinnosti samotného detektoru, které autoři prováděli laboratorně rotováním bodového zdroje kolem detektoru. Semi-empirickou metodu kalibrace autoři testovali terénním měřením, jehož výsledky porovnali s laboratorně stanovenými koncentracemi radionuklidů v odebraných vzorcích. Porovnání ukázalo necelé 5 % relativní rozdíly mezi in-situ stanovenou hmotnostní aktivitou a střední hodnotou aktivity ve vzorcích. Výhoda této metody spočívá zejména v možnosti kalibrace spektrometru pro terénní situace s nehomogenním rozložením - slabé vrstvy navážek, sedimenty či neaktivní vrstvy překrývající aktivní podloží.

Zmíněnou semi-empirickou metodu kalibrace HPGe detektorů porovnávali obdobní autoři o tři roky později s metodou kalibrace založenou čistě na Monte Carlo simulacích v článku [BOSON ET AL. 2009]. Porovnání obou metod kalibrace prováděli na spektrech naměřených na pěti lokalitách, kde byly zároveň odebrány vzorky. Porovnáním obou metod autoři získali shodné výsledky pro terénní měření a v rámci nejistoty stanovení i shodné s odebranými vzorky (autoři vyslovili drobnou pochybnost ohledně reprezentativnosti vzorků vzhledem ke známé vysoké nehomogenitě hmotnostních aktivit v těchto lokalitách - bylo odebráno celkem 17 vzorků na každé lokalitě včetně hloubkových profilů). Relativní nejistoty obou terénních metod stanovili autoři na 15-20%. Metoda kalibrací s využitím metody Monte Carlo samozřejmě nabízí mnohem větší variabilitu oproti semi-empirické metodě.

Předchozí článek se soustředil na kalibrace HPGe spektrometrů, nicméně výhody kalibrace pomocí metody Monte Carlo samozřejmě platí i pro scintilační detektory. Metodu kalibrace založenou čistě na simulacích testovali autoři v publikace [Cinelli ET AL. 2006]. Kde nejprve vytvořili modelové kalibrační situace, tj. poloroviny s homogenně rozloženými radionuklidy, a napočítali kalibrační matice zahrnující účinnosti pro 8 energetických linek (1 pro K, 1 pro Th a 6 pro U⁴). Dále provedli terénní měření na lokalitách, kde zároveň odebrali vzorky pro laboratorní stanovení. Porovnání ukázalo pouze hrubou shodu (relativní rozdíly 15-40 %), kde příčinou bude spíše nízká reprezentativnost vzorků než chybná metodika kalibrace pomocí metod Monte Carlo.

Kalibrace čistě na základě metody Monte Carlo nabízí sice vysokou variabilitu kalibračních geometrií, nicméně může do problému zanášet řadu nejistot - zejména otázku shody modelu (at už detektoru nebo zdroje) se skutečností. Obvyklou praxí tedy je tzv. verifikace modelu. Pro modely detektorů je obvykle relativně jednoduchá a bývá založena na laboratorních měřeních se známým zdrojem. Takovéto ověření pro NaI(Tl) publikovali například [SHI 2002] či [SALDAGO ET AL. 2012]. Verifikace modelu zdroje je obvykle složitější a vyžaduje buďto velmi důkladné vzorkování či

 $^{^{4}}$ Autoři zde využívají vysoko
energetické linky U řady z nichž některé mají radiační výtěžky pod
5 % a lze tak očekávat, že ploch těchto linek budou ve vyhodnocení stanoveny s vysokou neji
stotou a budou zároveň interferovat s dalšími linkami přírodních radionuk
lidů.

již ověřený model detektoru. Řada prací spíše než k přímé kalibraci metodou Monte Carlo využívá tuto metodu k výpočtům opravných koeficientů (na konečné rozměry či odlišnou hustotu kalibračních padů).

K přípravě před konstrukcí nových padů využil výpočty Monte Carlo [WALLACE 2013]. Autor pomocí simulací testoval různé geometrie kalibračních padů a jejich výsledný efekt na veličiny měřené nad takovýmto padem. Tento přístup umožnil maximálně zefektivnit budocí výrobu padů pro základnu Coopers Plains, Brisbane (kterou jsme zmínili ve výčtu základen v podkapitole 1.4.2) a zaručit tak reálnou možnost měření (zejména Kermy ve vzduchu) i v 1 m nad padem při minimální radiační zátěži okolí.

V závěru této části ještě zmíníme jednu zajímavou publikaci, týkající se výpočtů Monte Carlo při kalibracích terénních měření, ze které jsme čerpali v praktické části a tou je [WIELOPOLSKI ET AL. 2004]. Práce se zabývá vlastnostmi hornin a zemin a jejich dopadu na simulace Monte Carlo. V závěru této práce se sice autoři zabývají zejména simulacemi transportu neutronů, nicméně publikace poslouží i při výpočtech transportu fotonů. Obsahuje totiž celou řadu informací ohledně složení, hustot, zrnitosti a obsahu organických složek a vzduchu v různých typech hornin a zemin.

1.4.5 Motivace

Jak je zřejmé z předchozích odstavců, kalibrační základna je velmi důkladně a pečlivě propracovaným zařízením, od samotné tvorby standardů, přes jejich umístění a studie vlivů okolí až po opravné faktory na konečnost standardů. Pro co nejpřesnější popis a metodiku kalibrace na základně byla provedena celá řada dílčích měření a analytických výpočtů. Ve své době byla samotná základna ojedinělým zařízením a pro svůj konkrétní účel jím stále je.

Nyní ovšem upozorníme na to, že předchozí zmíněné studie (zejména vliv stěn a vzájemné ovlivnění standardů) jsou provedeny pro případ, kdy se kalibrované sondy umisťují na zem na středy standardů, tak jak vyžaduje základní metodika kalibrace [IAEA 2003] přístrojů podle které byla základna konstruována. V případě, že bychom požadovali kalibraci přístroje v jiné geometrii, nejsou přirozeně tyto opravy platné. Například pro rostoucí výšku sondy nad povrchem můžeme kromě potřeby opravy na konečnost standardu očekávat i rostoucí vliv okolních standardů a rostoucí vliv okolí (zejména radionuklidů v podlaze, případně podloží pod ní).

Postihnout všechny tyto opravy prostřednictvím analytických výpočtů je teoreticky možné a možnosti tohoto řešení jsme představili v předchozí rešeršní části. Nicméně jsme viděli, že je to úkol zdlouhavý a jeho přesnost je omezená nutnými geometrickými zjednodušeními, které by bylo třeba přijmout. V rešeršní části jsme také již ukázali, že s úrovní výpočetní techniky, kterou máme v dnešní době k dispozici, je mnohem jednodušším, rychlejším a univerzálnějším řešením provést výpočty pomocí metody Monte Carlo. Pro takové výpočty je nejprve nutné vytvořit co nejpřesnější model reality (tj. základny) a ověřit jeho správnost měřením (verifikace). S hotovým modelem se pak otevírá celá škála možností výpočtů různých veličin - od spekter záření gamma po dozimetrické veličiny jako např. Kerma ve vzduchu - a to vše v libovolných uživatelsky volitelných pozicích.

Na základě modelu je pak možné stanovit libovolné korekce pro měření v geometriích, které se odlišují od původní geometrie - sonda na středu standardu. Tento přístup pochopitelně nenahrazuje původně měřením a analytickými výpočty stanovené korekce, naopak původní měřená data jsou pro nás výchozími a celý model budeme ladit tak, aby simulovaná data a korekce pro pozice na standardech odpovídaly původním stanoveným datům a korekcím. Původní data, resp. korekce budeme v této práci také někdy nazývat nulovými (nebo výchozími) a naše práce tak tvoří nástavbu na původní analyticko - experimentální práci.

Kapitola 2 Metoda Monte Carlo

Studium literatury ukázalo, že metoda Mone Carlo je mocným nástrojem v řešení problematiky kalibrace terénních (samozřejmě i laboratorních) spektrometrů. Je to i metoda, kterou jsme zvolili pro naší práci. Jedná se o stochastickou metodu využívající známá pravidla (v našem případě transportu záření) a pseudonáhodná čísla, která řídí pohyb sledované veličiny modelovaným systémem. Metoda Monte Carlo má velmi široké pole využití, které sahá daleko za hranice fyziky. První využití nalezla v matematice - zejména pro výpočty určitých integrálů a parciálních diferenciálních rovnic. V současné době se hojně využívá ve fyzice, chemii, finančnictví a pojišťovnictví. Její využití je teoreticky možné v každém oboru, kde je hledané řešení výsledkem opakování dostatečného množství náhodných pokusů a tam, kde je známo pravděpodobnostní rozložení sledovaných veličin.

V následující části práce popíšeme nejprve základní princip metody s ukázkou jednoduché aplikace. Převážnou část této kapitoly budeme potom věnovat nástroji MCNP, který slouží právě pro simulaci transportu záření. Jedná se o velmi komplexní nástroj a v této práci se omezíme na komentář pouze těch možností, které budeme využívat v praktické části.

2.1 Základní princip metody

Máme tedy veličinu x, která je výsledkem náhodného děje a naším úkolem je určit její střední hodnotu:

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty x \cdot p(x) dx$$

kde p(x) je pravděpodobnostní distribuční fce (někdy také označována zkratkou PDF). p(x) ovšem pro daný případ ovšem předem neznáme a tak $\langle x \rangle$ nahradíme průměrem $\overline{x} \ge N$ příspěvků:

$$\overline{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$$

S $N\to\infty$ platí $\overline{x}\to\langle x\rangle,$ pokud je $\langle x\rangle$ konečné. Tato ekvivalence je zajištěna Zákonem velkých čísel.

Rozp
tyl v rámci příspěvků x_i je určen standardní odchylkou, pro kterou při velkém počtu histori
íN platí:

$$S^{2} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_{i} - \overline{x})^{2} \simeq \overline{x^{2}} - (\overline{x})^{2}$$
$$\overline{x^{2}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_{i}^{2}$$

Variance průměrné hodnoty \overline{x} , kterou dostáváme na výstupu výpočtu je tedy:

$$S_{\overline{x}}^2 = \frac{1}{N}S^2$$

Centrální limitní teorém říká, že s dostatečným počtem opakování budou střední hodnoty na výstupu simulací distribuovány podle normálního rozložení kolem skutečné střední hodnoty $\langle x \rangle$ s variancí $S_{\overline{x}}^2$. S pojmem variance se ještě v této kapitole setkáme v otázce "Redukce variance". Úkolem bude ušetření výpočetního času, podíváme se na problém z druhé strany, budeme pro fixní počet částic hledat odhad \overline{x} s minimální $S_{\overline{x}}$.

Při aplikaci metod redukce variance budeme měnit podstatu simulace a tedy i funkci p_x (která je v našem případě daná fyzikálními zákony transportu záření). Změnu této funkce budeme dělat tak, abychom minimalizovali nulové příspěvky a naše příspěvky byly více koncentrovány kolem střední hodnoty $\langle x \rangle$.

Jedním z raných příkladů (a možná i nejstarší) příklad využití metody Monte Carlo je matematická úloha zvaná "Buffonova jehla". V tomto experimentu je úkolem určit hodnou čísla π . K tomuto experimentu se využívají jehly délky L, které padají na plochu rozdělenou linkami o vzájemné vzdálenosti $T \leq L$, situaci ilustruje obrázek 2.1



Obrázek 2.1: Matematická úloha Buffonova jehla

Hustota pravděpodobnosti, že jehla padne do nějaké náhodné polohy je:

$$p(x) = \frac{2}{L} dx \cdot \frac{2}{\pi} d\Theta$$

Přičemž jehla protne linku, pokud $x \leq \frac{L}{2} sin \Theta.$

Budeme-li integrovat přes všechny možné úhly Θ a přes všechny vzdálenosti k nejbližší lince x dostáváme:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{L}{2}sin\Theta} \frac{4}{L \cdot \pi} dx d\Theta = \frac{2}{\pi}$$

Pokud tedy přimhodech jehla protnula linku $n\text{-}\mathrm{krát}$ dostávám rovnici: $\frac{n}{m}=\frac{2}{\pi}$

2.2 MCNP

Při simulacích budeme využívat kód MCNP (Monte Carlo N-Particle) vyvíjený v Los Alamos National Laboratory. První verze programu byla vydána v roce 1983 a od roku 2022 je dostupná nejaktuálnější verze MCP6.3 [KULESZA ET AL. 2022]. Kód má široké využití při výpočtech v dozimetrii, výpočtech stínění, vývoji detektorů a mnoha dalších odvětvích radiační fyziky.

Tvorba geometrie je umožněna prostřednictvím uživatelsky definovaných ploch a materiálů. Při samotných simulacích kód využívá implementované fyzikální tabulky (a v okrajových oblastech energií i modely) účinných průřezů všech interakcí, které modelované částice při transportu podstupují. Kód obsahuje vlastní generátory pseudonáhodných čísel, které používá při vzorkování funkcí hustot pravděpodobnosti, které popisují procesy interakcí. Každá z historií využívá unikátní sekvenci pseudonáhodných čísel a proto mohou být historie považovány za nezávislé [KULESZA ET AL. 2022].

Během dráhy jedné částice může být do výstupu zaznamenáno více jevů (veličin). Skórování obsahuje řadu tally (základních principů, které se skórují), přičemž každá má celou řad modifikačních funkcí, díky kterým lze výstup maximálně přiblížit požadované fyzikální veličině.Sám kód dále obsahuje řadu funkcí pro zefektivnění výpočtu u problémů, které mají ze své fyzikální podstaty malou pravděpodobnost a tím pádem špatnou statistiku.

V teoretické části nepovažujeme za nutné popisovat obecně všechny funkce MCNP, které jsme v praktické části použili. Mechanismy definice geometrie a zdroje je možné nastudovat v přehledném úvodu do práce v MCNP [SHULTIS A FAW 2011] nebo přímo v manuálu MCNP [MCNP6 2014]. Při tvorbě geometrie a definici zdroje není obvykle velký prostor pro chyby a případné chyby odhalí vykreslení modelu pomocí vizualizačního nástroje (například VisEd). V teoretické části tedy popíšeme pouze dvě části tvorby modelu, které vyžadují větší pozornost uživatele a kde je možné zanést do modelu chybu, kterou je následně těžké odhalit. Podíváme se na metody skórování (Tally) a metody redukce variance.

2.2.1 Tally

Budeme tedy chvíli věnovat pozornost skórování v MCNP. Protože výčet možností skórování v MCNP je velmi rozsáhlý, v této sekci se omezíme pouze na možnosti (tally), které budeme používat v praktické části práce. Všechny ostatní tally jsou samozřejmě popsány v literatuře (mimo jiné v manuálu MCNP [MCNP6 2014].

Puls height tally - F8

Filozofie tally F8 se lehce liší od ostatních MCNP tally. Bez použití redukce variance je princip tally relativně jednoduchý. Tally máme definovanou pro danou buňku. Skórování probíhá na konci každé historie částice. Pokud tedy během této historie došlo ke K vstupům do buňky a L výstupům, celkovou energii zanechanou v buňce určíme jednoduše jako rozdíl:

$$T = \sum_{i=1}^{K} E_i - \sum_{j=1}^{L} D_j$$

kde E_i jsou dílčí energie částic na vstupu a výstupu z buňky. Vstupem do buňky může být buďto přechod hranice buňky nebo její vznik v buňce. Analogicky výstupem může být přechod hranice ven z buňky nebo její záchytem uvnitř.

Výpočet Kermy - F5

Tato tally je lehce odlišná od předchozích tally F1-F4. Pracuje na podobném principu, který představíme v podkapitole Metody redukce variance. Tato tally vždy při generování částice a následně pro každou interakci částice započítá příspěvek k tally, kdy váhu upraví pravděpodobností, že částice bude emitována nebo rozptýlena směrem k detektoru. Ukažme si její práci na jednoduchém případu homogenního média a částice s energií E a vahou W. Zdroj těchto částic je bodový a vzdálen r od bodového detektoru. Víme, že příspěvek k fluenci $\delta \Phi$ v místě detektoru je:

$$\delta \Phi = \frac{W}{4\pi r^2} e^{-\mu(E) \cdot r}$$

kde $\mu(E)$ je účinný průřez pro interakci dané částice o energii E a dané médium. Víme, že úhlová distribuce částic z bodového zdroje je $\frac{1}{4\pi}$ na 1 steradián. Tedy pokud částice interaguje ve vzdálenosti r od detektoru, úhel potřebný k rozptylu do detektoru je Θ a $\mu(E, \Theta)$ je účinný průřez pro rozptyl do úhlu Θ , potom poměr $\frac{\mu(E, \Theta)}{\mu(E)}$ je pravděpodobnost rozptylu do úhlu Θ normovaná na jeden steradián. Potom je příspěvek do bodového detektoru roven:

$$\delta \Phi = \frac{W \cdot \mu(E, \Theta)}{\mu(E)r^2} e^{-\mu(E) \cdot r}$$

Tato tally je zejména užitečná v případech, kdy pravděpodobnost zásahu detektoru je velmi malá. Typickým příkladem může být například detektor velmi vzdálený od zdroje. Praktické zadání tally je velmi jednoduché:

kde X Y Z jsou souřadnice bodového detektoru a R je tzv. sféra vyloučení. Nutnost její definice vychází z existence úměrnosti $\frac{1}{r^2}$, kde tedy r je vzdálenost mezi místem interakce a bodovým detektorem. Vidíme, že pokud se bude r blížit k nule, tally bude konvergovat k nekonečnu. Definujeme tedy oblast o poloměru R od detektoru, kterou nazýváme "sféra vyloučení", dojde-li k interakci uvnitř této sféry, je skórován příspěvek k tally, který by nastal pokud by částice interagovala na povrchu této sféry. Poloměr sféry je možné definovat jako číslo (v cm; kladná hodnota) nebo počet středních volných drah (záporné číslo). Obecně se doporučuje aby R bylo v rozsahu 0.2 až 0.5 středních volných drah.

Síťové tally

Poslední z možností skórování v MCNP, které si zde představíme, bude skórování pomocí síťových struktur, tzv. meshtally. Jak samotný název napovídá, tato volba se používá k mapování různých veličin v síti dílčích objemů najednou. Zadaná síť skórování je vždy nezávislá na geometrii, což je důležitý fakt zejména pro interpretaci výsledků dozimetrických veličin. Konkrétně v praktické části této práce budeme odhadovat dávku ve vzduchu, ovšem v jednom místě bude naše síť obsahovat buňky vyplněné pevným materiálem (betonem). V této části sítě bude tedy zpracování výsledků (přepočet předpokládající výplň vzduchem) prováděna nesprávně a výsledné hodnoty je třeba z interpretace výsledků vynechat.

Námi používaná verze MCNP6 umožňuje dvě možnosti zadání meshtally a to TMESH (vytvořená pro starší verzi kódu MCNPX) a FMESH (vytvořená pro novější verzi MCNP5). Obě metody zadání se kromě různé syntaxe zadání liší i některými možnostmi specifikace parametrů [MCNP6 2014].a je proto více než vhodné prostudovat obě možnosti a vybrat vhodnější variantu pro daný účel. Samozřejmě některé možnosti si odpovídají a je tedy vybrané veličiny možné se shodnými výsledky skórovat pomocí TMESH či FMESH dle volby uživatele.

Volba TMESH, kterou jsme použili v praktické části, umožňuje zadávat čtvercovou, válcovou nebo sférickou síť a to celkem ve čtyřech typech skórovaného výsledku

- Typ 1: Track-Averadged Mesh Tally
- Typ 2: Source Mesh Tally

- Typ 3: Energy deposition Mesh Tally
- Typ 4: DXTRAN Mesh tally

Nyní jen stručně přiblížíme Typ 3: Energy Deposition Mesh Tally, kterou budeme využívat v Praktické části. Tato tally skóruje energetickou depozici v jednotlivých elementech sítě a to od všech částic, které model zahrnuje. Započítává se tedy depozice od brzdění nabitých části, rozptylů jader či lokálně deponovaná energie částic, které dále modelem nepokračují. Tento typ tally neumožňuje definovat pouze jeden typ částice pro skórování (pro tento účel je určena funkce PEDEP, která je jedním z možných parametrů Typu 1: Track-Averadged Mesh Tally).

Výstupní veličina má rozměr $MeV \cdot cm^3 \cdot particle$. Stejně jako u ostatních výstupů meshtally platí, že síť je nezávislá na geometrii a tedy některé elementy mohou obsahovat buňky vyplněné různým materiálem, proto normování na objem nikoliv hmotnost.

TMESH typu 3 umožňuje následující upřesnění specifikace:

- TOTAL : skóruje se energie deponovaná ze všech zdrojů
- DE/DX: umožní skórování ionizace od nabitých částic
- RECOL : skórování energie předané rozptýleným jádrům
- TLEST : skóruje se délka stopy (track lenght) násobená tabulkovým "heating number"
- EDLCT : skórují se pouze částice, které deponují energii lokálně a dále nepokračují modelem

2.2.2 Statistika skórování

V obecné části v metodě Monte Carlo jsme již definovali pojem variance. Ještě než přejdeme ke slíbené kapitole o redukci variance, popíšeme některé důležité statistické veličiny, které MCNP vrací na výsledku výpočtu.

První z těchto statistik je relativní chyba (Relative error, R) definovaná jednoduše:

$$R = \frac{S_{\overline{x}}}{\overline{x}}$$

Chceme, aby R bylo co nejmenší při minimálním počtu historií. Manuál MCNP obecně důrazně doporučuje jako kritériu akceptovatelnosti výsledků, aby R bylo menší než 0,1 a ještě menší pro tally F5. Vidíme, že zvyšování počtu historií není příliš efektivní při snižování R, protože:

$$R \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Druhou významnou statistikou, kterou MCNP vrací je hodnota FOM (Figure of merit), definovaná pomocí relativní chyby (R) času simulace T následujícím vztahem:

$$FOM = \frac{1}{R^2T}$$

Další veličinou, kterou nalezneme ve výstupu, je hodnota Variance variance (VOV), která nám ukazuje fluktuace relativní chyby R. Definováno je pomocí:

$$VOV = \frac{S^2(S_{\overline{x}}^2)}{S_{\overline{x}}^2} = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \overline{x})^4}{\left[\sum_{i=1}^N (x_i - \overline{x})^2\right]^2} - \frac{1}{N}$$

kde tedy $S^2(S_{\overline{x}}^2)$ je variance $S_{\overline{x}}^2$.

Mimo mnoho dalších výstupů MCNP vrací také tabulku, která popisuje empiricky určenou pravděpodobnostní distribuční funkci (PDF) z definice střední hodnoty veličiny, kterou určujeme. Kromě této tabulky MCNP popisuje empirickou PDF pomocí parametru Slope. Jedná se o parametr, který popisuje část PDF popisující historie s vysokými hodnotami skórované veličiny.

Popis všech výstupů ve výsledku výpočtu je mimo rozsah této práce. Zmíníme pouze, že MCNP má implementovanou funkci, která pomáhá uživateli zorientovat se v množství výstupních statistik a snadněji zhodnotit, zda-li náš výsledek správně konverguje k požadovanému výsledku. Tímto nástrojem je tzv. 10 statistických testů. Testy jsou následující:

- Střední hodnota skórované veličiny musí v druhé výpočtu problému s rostoucím N vykazovat pouze náhodné fluktuace, bez libovolného pozorovatelného trendu.
- Relativní chyba musí být menší než 0,1 (resp. 0,05 pro F5).
- Relativní chyba musí monotónně klesat s rostoucím Nv druhé polovině výpočtu.
- Relativní chyba musí klesat s $1/\sqrt{N}$ v druhé polovině výpočtu.
- VOV musí být menší než 0,1.
- VOV musí monotónně klesat v druhé polovině výpočtu.
- VOV musí klesat s 1/N v druhé polovině výpočtu.
- FOM musí zůstat konstantní v druhé polovině výpočtu.
- FOM nesmí vykazovat jakýkoliv trend (narůstající či klesající) v druhé polovině výpočtu.
- Slope parametr určený z nejvyšších skórovaných událostí musí být větší než 3.

Testy pomáhají uživateli zanalyzovat správnost konvergence výpočtu ke skutečné střední hodnotě. Nicméně vždy je na uživateli provést kontrolu výsledků, splnění všech testů ještě neznamená správný výpočet a na druhé straně fakt, že některá z tally neprošla některým statistickým testem ještě automaticky neznamená, že je střední hodnota odhadnuta špatně.

2.2.3 Metody redukce variance

Některé Monte Carlo výpočty budou poměrně rychle konvergovat ke správnému výsledku. Ovšem u mnoha výpočtů se uživatel potýká s otázkou kompromisu mezi akceptovatelnou relativní chybou výpočtu a výpočetním časem. U některých případů je tento problém už z principu velmi významný - příkladem mohou být výpočty stínění. I náš problém bude z hlediska efektivity výpočtů relativně náročný. Budeme modelovat celou kalibrační základnu, tzn. poměrně rozsáhlý zdroj záření, ovšem skórovat budeme obvykle v poměrně malém elementu, který zabírá malý prostorový úhel z hlediska zdroje. Jedná se o problém malého detektoru ve velké místnosti, kdy je jen velmi malá pravděpodobnost, že se částice směrem k detektoru rozptýlí.

V případech, kdy přímá simulace (analogový přístup) vyžaduje příliš mnoho historií pro dosažení rozumné statistiky skórované veličiny, jsou obvykle aplikovány metody redukce variance.

V samotném principu se nabízejí dva základní přístupy, kterými dosáhnout zkrácení výpočetního času. Prvním, poměrně zřejmým, je geometrické zjednodušení modelu. Uživatel může provést revizi svého modelu a posoudit, zda-li je jeho rozsah (geometrický, energetický apod..) nutný pro stanovení simulované veličiny s požadovanou chybou. Jako příklad jmenujme simulaci detektoru na zemi, kdy uživatel zadá zbytečně velkou tloušťku země. Simulace pak ztratí velkou část výpočetního času simulací částic, které vznikly a zanikly hluboko pod povrchem. Jiným příkladem může být simulace částic, které nemohou přispět do tally. Například zadání kompletního zadání spektra fotonů v rozsahu 50-300 keV, přestože jediným skórovaným výsledkem je počet impulzů v píku 2500 keV. Taková úprava modelu samozřejmě vyžaduje dobrou znalost fyziky transportu záření, tak aby nedošlo k přílišnému omezení modelu.

Druhým přístupem je přizpůsobení samotného simulačního procesu, tak aby námi preferované události byly pravděpodobnější. Tento přístup je označován jako neanalogový¹. Dále si představíme několik konkrétních možností, které MCNP nabízí. Často se setkáváme s dělením do tří kategorií:

- Kontrola populace: Využívá navyšování populace částic preferovaným směrem
 a samozřejmě redukci počtu částic nepreferovaným směrem.
- Modifikované vzorkování: Narušení přirozené (fyzikálním zákony) dané frekvence událostí.

¹V analogovém přístupu částice buď existuje nebo ne. U neanalogového přístupu používáme váhu částice - pravděpodobnost, že se částice nachází v daném stavu.

• Částečně deterministický výpočet: Umožňují částečně nahradit klasickou "náhodnou procházku" deterministickým transportem (pošle částici rovnou na cíl).

Zde zdůrazněme, že každá změna fyzikálního principu musí být samozřejmě kompenzována úpravou váhy částice tak, aby celková bilance vah v modelu zůstala zachována. Dochází-li například k preferování směru směrem k detektoru (například kontrolou populace a navyšováním importancí směrem k detektoru), musí být o náležitý faktor upravena skórovaná veličina.

V praktické části práce budeme používat pouze jedninou metodu redukce variance a to DXTRAN kterou si stručně představíme nyní.

Deterministický transport=DXTRAN

Výhody DXTRAN se uplatní zejména v případech kdy je velmi malá pravděpodobnost, že částice dopadne do zájmové oblasti, tj. sledovaná oblast by byla v analogovém výpočtu velmi špatně navzorkována. Principem metody je obklopení této oblasti DXTRAN sférou. MCNP upraví výpočet tak, že při kolizi simulované částice vytvoří tzv. DXTRAN pseudočástici, která je deterministicky transportována směrem na povrch DXTRAN sféry. Původní náhodná procházka pak pokračuje dál s původní vahou částice a je ukončena pokud částice vstoupí do DXTRAN sféry (tento fakt kompenzuje vytvoření DXTRAN virtuální pseudočástice).

Redukce variance pro Puls height tally

V původních verzích byly možnosti použití redukce variance pro Puls height tally již z principu fungování této tally silně omezené. Samozřejmě vždy se nabízí možnost zjednodušení simulace pomocí vypuštění geometricky či energeticky nezajímavých oblastí modelu. Nicméně z pohledu neanalogových metod byly až do verze MCNP5 prakticky všechny možnosti zakázané. V rámci rozšíření možností MCNP byly však neanalogové metody zavedeny i do novějších variant MCNP. Podrobný matematický rozbor možnosti aplikace metody redukce variance pro Puls height tally je uveden v práci [BOOTH 1992]. V tomto dokumentu nalezneme rozbor a příklad využití "integer splitting".

Od verze MCNP5 jsou pak v kódu implementovány i další metody redukce variance pro Puls height tally. Konkrétně jsou k dispozici: noninteger splitting (karta IMP), implicit capture a váhový cutoff (karta CUT), váhová okna (karta WWN), nucené kolize (FCL), exponencial transform (karta EXT) a DXTRAN sféra (DXT). Principy implementace všech metod jsou přehledně zpracovány v [BOOTH 1998]. Všechny implementované postupy byly samozřejmě tvůrci kódu důkladně testovány, zajímavý přehled výstupů aplikace metod redukce variance na vzorové případy prezentuje například [BULL 2008]. Ukázky použití DXTRAN sféry byly zpracovány v publikacích [BOOTH ET AL. 2009] a [BOOTH ET AL. 2012]. Tyto práce představují celou řadu konkrétních příkladů výpočtů, při nichž je vhodné využít DXTRAN. Součástí publikací je i rozbor výstupu z ukázkových výpočtů, kde autoři upozorňují na potenciální problémy spojené s využitím DXTRAN. Praktická část

Přehled prací

Hlavním úkolem praktické části bylo vytvoření modelu kalibrační základny, který s maximální přesností aproximuje realitu. V poslední kapitole praktické části ukážeme i příklady možných výpočtů s tímto modelem, nicméně hlavním výstupem je samotná existence modelu. Pro lepší přehlednost ukažme jednoduché schéma, podle kterého jsme v praktické části postupovali.



Experimentální data pro práci jsme sbírali v rámci 3 měřících fází v letech 2015, 2018 a 2020. Samotná tvorba modelu potom probíhala v 5 fázích vyznačených zelenými rámečky ve schématu. V první fázi jsme provedli Motivační experiment, v rámci kterého jsme dokázali, že kalibrační pady nejsou jediným zdrojem příspěvku do spektra a že příspěvek ostatních stavebních prvků (přesněji přírodních radionuklidů v nich) je nezanedbatelný. Převážně na základě dat z literatury, doplněných informacemi získanými v rámci prvního měření, jsme vytvořili první verzi modelu. Následně jsme přistoupili k verifikaci této verze modelu porovnáním, kdy jsme porovnávali spektra získaná v rámci třetí měřící fáze pomocí HPGe spektrometru se spektry simulovanými za pomocí první verze modelu. Dle očekávání jsme nedostali dobrou shodu a přistoupili jsme tedy k iteračnímu vylepšování modelu. V této fázi jsme po krocích upravovali rozložení a absolutní aktivity přírodních radionuklidů ve stavebních prvcích tak, aby simulovaná spektra co nejlépe odpovídala zmíněným experimentálním HPGe spektrům.

Výsledkem byl model, který velmi dobře aproximoval reálné pole záření měřené HPGe spektrometrem v oblasti nad pozemními standardy. Pro dodatečné ověření správnosti modelu a k posouzení jeho správnosti i mimo tuto oblast jsme využili sadu scintilačních spekter, které jsme nabrali též v rámci poslední fázi měření. Výsledkem byl tedy hotový ověřený model. Jednotlivé kroky tohoto postupu, zvýrazněné zelenou barvou ve schématu výše, budeme tedy podrobně komentovat v samostatných podkapitolách praktické části práce. A v poslední kapitole ukážeme příklady možných výpočtů s tímto modelem.

Motivační experiment

Na úvod praktické části bychom rádi představili jednoduchý motivační výpočetní experiment. Při popisu základny v teoretickém úvodu (sekce Kalibrační základna ve Stráži pod Ralskem) této práce jsme představili jakým způsoben došlo k odvození efektivních koncentrací K, U, Th na jednotlivých kalibračních padech (číselně jsou uvedeny v tabulce 1.7). Připomeňme, že tyto koncentrace byly stanoveny měřením pomocí ověřených spektrometrů a upřesněny pomocí opravných faktorů (pro detailní popis doporučujeme pročíst [MATOLÍN ET AL. 2010]). Z popisu, který jsme uvedli vyplývá, že naměřené koncentrace jsou pro každou pozici lineární kombinací příspěvků od různých stavebních prvků. Tedy součtem příspěvků nejen od samotného padu, ale i od dalších objektů s obsahem K, U, Th - jako jsou zdi, podlaha atd. Velikost příspěvku stavebních prvků do spektra je vždy funkcí polohy. Lze očekávat, že v nulové pozici (na zemi) bude příspěvek do spektra od daného padu maximální, s rostoucí výškou bude podíl příspěvku padu klesat a přibývat podíl ostatních stavebních prvků. Můžeme dále očekávat, že pro pady v rohu základny bude relativně vyšší podíl záření přicházejícího ze stěn (vlivem vyššího efektivního úhlu, který stěny zabírají).

Nyní se pokusíme tyto předpoklady potvrdit motivačním výpočetním experimentem. Budeme se tedy snažit dokázat, že koncentrace uvedené v tabulce 1.7 v kapitole Doporučené efektivní koncentrace K, U, Th pro kalibrace karotážních spektrometrů [DIAMO]. jsou skutečně **efektivní koncentrace** tvořené příspěvkem různých stavebních prvků, nikoliv čisté koncentrace radionuklidů v jednotlivých padech, jak by se mohl uživatel základny bez předchozího hlubšího studia podkladů o tvorbě základny snadno domnívat.

Důkaz provedeme sporem. Předpokládejme opak, tedy že koncentrace v tabulce 1.7 jsou skutečně čisté koncentrace v samotných padech. Pro účely tohoto experimentu jsme využili experimentální výsledky získané v druhé fázi měření na základně s NaI(Tl) 3" x 3"spektrometrem, kde jsme měřili 3 spektra nad každým padem ve výškách (0; 0,5 a 1) m. Dále jsme vytvořili model této situace. V souladu s předpokladem tohoto důkazu tedy šlo pouze o samotný betonový pad s radionuklidy rovnoměrně rozptýlenými v jeho objemu. Nad pad jsme umístili zjednodušený model NaI(Tl) spektrometru. Modelové výpočty byly provedeny za pomocí kódu MCNP [MCNP6 2014].

Je-li předpoklad uvedený v předchozím odstavci správný, měli bychom s rostoucí výškou nad zemí pozorovat pokles měřeného počtu impulzů, který bude stejný pro

měřená i simulovaná data. Budeme-li však pozorovat pokles počtu impulzů v pících pozvolnější pro měřená data (oproti simulaci) lze se domnívat, že pad není jediným zdrojem impulzů přicházejících do detektoru a že s rostoucí výškou sice ubývá příspěvku od padu (menší prostorový úhel), nicméně narůstá příspěvek od dalších prvků. Podíváme-li se například na signál od radionuklidů v podlaze, je zřejmé, že příspěvek do spektra je v nulové pozici prakticky plně odstíněn padem. Nicméně s rostoucí výškou se zvyšuje prostorový úhel, který podlaha zaujímá v "zorném poli"detektoru. Pojďme se nyní detailněji podívat na reálné provedení tohoto experimentu.

Pro měření byl použit gamma spektrometr s názvem Gamma Surveyor firmy GF Instruments [GAMMA SURVEYOR2] se scintilačním krystalem NaI(Tl) 3" x 3". Měření jsme provedli na každém ze standardů (resp. nad jejich středy) ve třech výškách - ve výšce 0 m ve výšce 0,5 m a ve výšce 1 m. Každé ze spekter bylo měřeno 15 min. Vyhodnocení nabízí dvě možnosti. První z nich bylo jednoduché odečtení počtu impulzů v jednotlivých oknech, tak jak je měl nastavený spektrometr, tj. pro draslík (⁴⁰K) 1,36-1,56 MeV, pro uran (²¹⁴Bi) 1,66-1,86 MeV a pro thorium (²⁰⁸Tl) 2,41-2,80 MeV. Druhým způsobem vyhodnocení byla spektrometrická píková analýza 512-kanálových spekter uložených v paměti přístroje. Dle teoretického předpokladu nevrací tyto dvě možnosti stanovení stejný výsledek. První způsob vrací plochu píku včetně kontinua, na kterém pík leží, zatímco spektrometrická píková analýza vrací čistou plochu píku. V našem případě byly ovšem v rámci nejistoty stanovení obě hodnoty shodné (tedy plocha kontinua pod píky byla malá ve srovnání s nejistotou stanovení ploch píků).

Dále jsme tedy vytvořili jednoduchý model, který aproximuje reálný případ. Máme válcový betonový pad o rozměrech a hustotě odpovídající padům na základně, tedy 1,9 m v průměru, 0,62 m výšky a objemové hmotnosti 1,8 g/cm³. V jeho objemu máme rovnoměrně rozptýlený zdroj fotonů. Pro jednoduchost zde budeme uvažovat pouze monoenergetický zdroj 1,462 MeV (⁴⁰K), resp. 1,764 MeV (²¹⁴Bi), resp. 2,614 MeV (²⁰⁸Tl). Pad je zapuštěný v betonové podlaze (bez zdroje) a nad padem je volných prostor vyplněný vzduchem. Detektor, který do modelu umístíme, je zjednodušenou modelovou reprezentací detektoru Gamma Surveyor firmy GF instrument. Tento model byl vytvořen na základě schémat dodaných od výrobce již dříve a použili jsme ho v i rámci diplomové práce [JOHNOVÁ 2014]. Vizualizaci geometrického uspořádání můžeme vidět v obrázku 2.2

Jelikož jsme tento případ pro model zjednodušili zadáním pouze monoenergetického zdroje (postupně 1,462 MeV, 1,764 MeV, 2,614 MeV), při skórování jsme nastavili pouze okna zabírající tyto tři píky. Nastavení odpovídalo oknům, které měl nastavený skutečný terénní spektrometr a do výpočtu bylo zadáno gaussovské rozmazání píků. Parametry rozmazání píku - tedy závislost FWHM na energii - byly stanoveny již v rámci Diplomové práce [JOHNOVÁ 2014]. Skórování jsme provedli zadáním tally F8 v buňce krystalu detektoru a energetických binů odpovídajících zmiňovaným oknům.



Obrázek 2.2: Motivační experiment - vizualice jednoduchého uspořádání spektrometru nad betonovým padem

Pro úplnost ještě dodáme, že pro každý pad jsme předpokládali přítomnost pouze "hlavního radionuklidu" a jeho jediné linky. Pokud bychom chtěli být zcela korektní, zahrnuli bychom do výpočtu i minimální koncentrace doplňujících radionuklidů - zde máme na mysli fakt, že PK obsahuje kromě draslíku i malé množství U a Th - jejichž spektra tvoří kontinuum pro pík⁴⁰. U uranového zdroje přispívají do kontinua pod píkem 1,764 MeV i vyšší energie samotného U, například linka 2,204 MeV (²¹⁴Bi). Tyto příspěvky jsou v tomto případě a v této fázi práce zcela zanedbatelné jejich započítání by neovlivnilo podstatu našeho důkazu.

Nyní ještě okomentujme způsob, jakým jsme provedli přepočet výsledků. Výstup MCNP (v zadaném případě tally F8) vrací pravděpodobnost, že foton generovaný ze zdroje s daným rozložením zanechá v detekčním objemu energii odpovídající energetickému rozsahu, který je zadaný binem. Při našem zadání tally můžeme říci, že se jedná o fotopíkovou detekční účinnost. Model sám samozřejmě nezahrnuje informaci o absolutní aktivitě zdroje (pouze relativní rozložení), tuto informaci musíme dodat při přepočtu výsledků na CPS (=counts per second). Při tomto přepočtu musíme zohlednit následující veličiny:

- Aktivitu zdroje A (Bq). Dle předpokladu tohoto důkazu uvažujeme koncentrace dané tabulkou 1.7, které převedeme na hmotnostní aktivitu a_m (Bq/kg) pomocí převodních koeficientů (1.1). Zajímá nás celková aktivita zdroje, tedy vynásobíme celkovou hmotností zdroje m (kg).
- Výtěžek fotonů Y (-). Jak jsme zmínili výše, zadali jsme pouze monoenergetický zdroj 1,764 MeV resp. 2,614 MeV se 100 % účinností (poznamenejme, že MCNP vždy přenormuje distribuci zdroje na 100 % a daný výsledek je pak nutno buďto upravit dodatečně, případně zadat opravný faktor přímo do vstupního souboru pomocí karty FM viz. manuál MCNP [MCNP6 2014]). Při přepočtu jsme použili výtěžky, které jsou převzaty z [GILMORE 2008]:

-10,44 % (pro 1,462 MeV)

- 15,28 % (pro 1,764 MeV)
- 35,85 % (pro 2,614 MeV)

Označíme-li tedy výstup z výpočtu F8, přepočet na CPS (= impulzy za sekundu) je jednoduše:

$$CPS = F8 \cdot A \cdot Y = F8 \cdot a_m \cdot m \cdot Y \tag{2.1}$$

Přejděme tedy nyní k výsledkům zobrazeným v obrázku 2.3. Jak bylo popsáno v předchozím odstavci, zpracování výstupů ze simulace bylo nastaveno tak, aby počet impulzů za sekundu v píku pro nulovou pozici byl stejný pro simulovaná a experimentální data. V tomto experimentu se nám jedná o ukázku tendence změny CPS s rostoucí výškou, nikoliv nutně o absolutní hodnoty CPS. V grafu jsou data pro jednotlivé energie spojena čarou - nejedná se o fit, nýbrž prostou spojnici dat (spline) pro lepší přehlednost.

V porovnání jsou tedy pro každou energii uvedeny CPS pro:

- simulace: jednoduchý betonový pad s rovnoměrně rozloženým monoenergetickým zdrojem (postupně: 1,462 MeV, 1,764 MeV resp. 2,614 MeV)
- experiment: data získaná nad skutečnými pady v různých výškách, pro každý pad byly vyhodnoceny pouze hlavní píky, tedy: PK (1,462 MeV), PU (1,764 MeV) a PTh (2,614 MeV)

Z uvedeného grafu je tedy zřejmé, že četnost impulzů pro všechny pozice klesá s rostoucí výškou nad padem. Ovšem u experimentálních dat je pokles pomalejší než u simulace. Rozdíly ve výšce 1 m značně převyšují nejistotu stanovení experimentálních dat. Tímto jsme vyvrátili původní hypotézu, že pad je jediným zdrojem záření. Je tedy zřejmé, že existují další zdroje záření, které přispívají do spektra a jejich podíl roste s rostoucí výškou nad padem. V každé výšce je tedy spektrum záření gama lineární kombinací příspěvků od měřeného padu a od dalších zdrojů.

Ve výsledcích motivačního experimentu můžeme dále pozorovat, že nejmenší rozdíl mezi experimentem a simulací je u PU, zatímco nejvyšší u PTh. Při pohledu na schéma umístění padů na základně (obrázek 1.6) vidíme, že zatímco PU je umístěn v relativně otevřeném prostoru, pouze s jednou stěnou v těsné blízkosti a nulovým padem poblíž. PTh je umístěn v rohu místnosti a dá se očekávat, že do spektra přispívají velkou měrou hned dvě stěny. Toto pozorování je dalším potvrzením předpokladu, že pady nejsou jediným přispěvatelem do spektra.



Obrázek 2.3: Motivační experiment - porovnání měřených CPS a CPS simulovaných při uvážení pouze betonového padu jako zdroje

Kapitola 3

Tvorba modelu

V následující kapitole popíšeme postupně proces, kterým vznikal výpočetní model kalibrační základny. Nejprve se budeme věnovat tvorbě první verze modelu, která vznikla čistě na základě technických nákresů základny, historických dokumentů z doby výstavby základny atd. Tyto informace jsme doplnili daty získanými přímo na základně v rámci prvního měření.

První verzi modelu jsme konfrontovali s výsledky sady verifikačních měření - tento proces popíšeme v sekci Verifikace první verze modelu. Dle očekávání jsme v rámci této verifikace nedosáhli uspokojivé shody měřených a simulovaných výsledků. Jako hlavní příčinu neshody jsme označili nepřesné zadání zdroje záření, přesněji rozložení radionuklidů ve stavebních prvcích na základně.

Přistoupili jsme tedy k procesu postupné úpravy zadání zdroje a to formou iteračního vylepšování. V tomto fázi práce jsme postupně měnili rozložení aktivit a výsledek vždy porovnávali s první sadou verifikačních spekter. Jednalo se o sadu spekter nabraných přenosným polovodičovým detektorem ve třetí fázi měření. Kompletní postup popisujeme v sekci Iterační postup zpřesňování modelu.

Takto získaná finální verze modelu již při výpočtech vracela spektra, které s dostatečnou přesností odpovídala spektrům měřeným v třetí fázi měření HPGe detektorem. Výsledný model však bylo třeba ověřit porovnáním s nezávisle nabranou sadou měření. Využili jsme tedy další sadu spekter tentokrát spekter ze scintilačních detektorů, tak abychom provedli závěrečnou verifikaci. Popis procesu je uveden v závěrečné sekci této kapitoly Finální verifikace.

Je zřejmé, že v této kapitole postupně tvoříme a ladíme zejména model základny, nicméně ve výpočtech figurují i modely detektorů používaných při verifikacích. Jejich modely byly vytvořeny a verifikovány samostatně během laboratorních experimentů. Tvorba a verifikace modelů detektorů nezapadá přímo do hlavních cílů této práce a proto uvádíme jejich rozbor v dodatcích práce, konkrétně v části: Dodatek A Verifikace modelů detektorů.

3.1 První verze modelu

V této části přiblížíme tvorbu první verze modelu. Popis rozdělíme na dvě části. První se bude věnovat struktuře základny ze stavebního hlediska, budou tedy řešeny zejména rozměry vnitřních struktur a použité stavební materiály - jejich prvkové složení a hustota. V druhé části se zaměříme čistě na zadání zdroje záření v modelu, tj. hmotnostním aktivitám K, U, Th v jednotlivých stavebních prvcích.

3.1.1 Geometrie

Při tvorbě geometrie modelu základny jsme vycházeli především z technické dokumentace dostupné na webových stránkách provozovatele základny [DIAMO]. Další informace jsme pak získali z technické zprávy, která mapuje proces stěhování kalibračních standardů z původní lokality Bratkovice do Stráže pod Ralskem [MATOLÍN ET AL. 2010]. Pro doplnění chybějících údajů jsme využili naše první měření na základně, při kterém jsme doměřili potřebné vnitřní rozměry stavebních prvků a odebrali vzorky materiálů.

Vnitřní uspořádání základny je poměrně jednoduché, tudíž i při zachování poměrně velkého množství detailů není geometrická struktura modelu příliš komplikovaná. Stěžejní částí modelu jsou stěny budovy. Stěny jsou zadány samostatně (tzn. do samostatných buněk, nikoliv celý obvodový plášť do jediné buňky) jako S (severní), V (východní) J (jižní) a Z (západní). Každá ze stěn je potom rozdělena na vnější omítku - zdivo - vnitřní omítku. Rozdělením máme opět na mysli fakt, že každý z těchto prvků je zadán samostatnou buňkou a tudíž umožňuje zadání individuálních materiálů (složení i hustot) a později i zdroje (aktivitu, případně i radionuklidové složení). Tloušťky stěn byly určeny s relativně vysokou přesností díky technickým informací o budově. Samotné zdi (zdivo) je tvořeno plynosilikátovými tvárnicemi a stěny jsou vyztuženy železnou konstrukcí, která vystupuje na povrch a je tak snadno lokalizovatelná. Tloušťka vnější omítky byla změřena v rohu budovy, tloušťka vnitřní omítky pak byla dopočítána ze známé tloušťky zdiva a vnější omítky. Prvkové složení všech zmíněných materiálů bylo zadáno podle doporučení kompendia materiálů [McCONN ET AL. 2011], jejich hustotu jsme určili z odebraných vzorků.

Kromě stěn pak model dále obsahuje betonovou podlahu, jejíž tloušťka byla předmětem diskuze, a která byla oproti původnímu předpokladu lehce upravena v reakci na výsledky prvních výpočtů, které jsme realizovali. Výsledná tloušťka podlahy byla určena na 30 cm. Pod podlahou je pak do hloubky 2 m zadána buňka obsahující zeminu s materiálovým složením a hustotou odpovídající navážce (písčitý materiál), která převažuje v areálu.

Z vnitřních struktur byla pak zadána už pouze zídka v jihovýchodním rohu základny, která částečně odstiňuje záření z vrstevnatých karotážních standardů. Zídka je tvořena betonovými bloky a pokryta omítkou. Dále byly do modelu zadány kovové dveře, které tvoří velkou část západní stěny. Ostatní stavební prvky uvnitř základny nemají prakticky žádný vliv na transport záření uvnitř a nebyly zahrnuty do modelu. Konkrétně máme na mysli stůl v jihozápadním rohu místnosti a dřevěné vitrínky na stěnách.

Dostáváme se k nejdůležitějším stavebním prvkům celé základny, kterými jsou pochopitelně samotné standardy. Povrchové standardy ¹ PU a PTh jsou modelovány jako betonové válce s rozměry dle technických dokumentů (tj. 1,9 m průměr a 0,62 m výška) a jsou plně zapuštěny do podlahy. Prvkové složení betonu bylo zadáno dle typického složení portlandského betonu - dle [McCONN ET AL. 2011], hustota betonu potom na základě technické dokumentace obsahující záznamy z měření vzorků odebraných v době výroby standardů [ROJKO ET AL. 1975]. Mezi válci a podlahou je slabá vrstva tvořená ocelí, která reprezentuje ocelové nádoby, ve kterých jsou standardy umístěny. Povrchový standard PK je, co do rozměrů a umístění v ocelové nádobě, stejný jako PU a PTh. Liší se však mírně ve složení a hustotě materiálu. Jak je možné se dočíst v dobových materiálech, PK vznikl mísením portlandského cementu s vodou a draselným hnojivem (bez přidávání písku). Složení bylo tedy upraveno na základě této informace a hustota materiálu byla zadána opět podle dat z odběru vzorků uvedených v [ROJKO ET AL. 1975]. Pozaďový standard P0 se už od PU, PTh a PK liší významněji. V tomto případě se jedná se o čtvercový otvor v podlaze o rozměrech $(2 \ge 2 \ge 0.8)$ m, vyplněný nízkoaktivním pískem ze Střelče u Turnova. Prvkové složení písku bylo do modelu zadáno dle certifikátu od dodavatele a hustota na základě našeho vlastního měření odebraného vzorku. V obrázku 3.1 je ukázán vertikální řez modelem základny se standardy (zleva) PU, P0 a PTh.



Obrázek 3.1: Pohled na základnu v rovině xz v místě povrchový standardů, vidíme zleva PU, P0 a PTh. PK je mimo tuto rovinu.

Karotážní standardy KU, KTh a KK jsou opět betonové (v případě KK upěchované draselné hnojivo) válce, tentokrát o rozměrech: 1,4 m průměr a 1,2 m výška. Středem válců vede otvor pro vložení přístrojové techniky. Otvor má průměr 9 cm a jeho vnitřkem je vedena hliníková pažnice a tloušťce stěny 0,5 cm, vnitřní průměr otvoru je tedy 8 cm. Válcové standardy jsou zapuštěny do země - do čtvercových otvorů - v mezeře je vzduch. Nulový standard K0 má opět čtvercový půdorys s rozměry (1,5 x 1,5) m a sahá do hloubky 1,8 m. Vyplněn je opět nízkoaktivním střelečským pískem. Karotážní standardy můžeme vidět ve vizualizaci v obrázku 3.2.

Poslední dva kalibrační prvky jsou vrstevnaté karotážní standardy KV1 a KV2 umístěné v jihovýchodním rohu základny na zemi - tj. jako jediné ze standardů

 $^{^1{\}rm Zde}$ je trochu zavádějící označení. "Povrchové"
označuje geometrii kalibrace, pro níž slouží, nikoliv jejich umístění.



Obrázek 3.2: Pohled na model v rovině xz v místě karotážních standardů, po řadě vidíme K0, KK, Ku a KTh.

vystupují na povrch - a jsou odstíněné zídkou. Standardy jsou tvořeny válcovými prstenci průměru 0,9 m a výšce 10 cm, středem opět prochází hliníková pažnice jako u karotážních KK, KU, KO a KTh. Prstenců je k dispozici celkem 18 a lze je libovolně (za pomocí jeřábu v hale) skládat na sebe - v základní verzi modelu jsou naskládány ve dvou stejných sloupcích (9+9). Materiálem i hustotou opět odpovídají portlandskému betonu. Jednotlivé prstence obsahují různé aktivity U a Th (v různých poměrech), některé jsou nízkoaktivní. Horizontální řezy základnou vidíme v obrázcích 3.3 (detail na KV) a 3.4 (celá základna).



Obrázek 3.3: Detail na roh se stínící zídkou a karotážními vrstevnatými standardy KV, které jsou umístěny na povrchu.



Obrázek 3.4: Celkový pohled na základnu v rovině xy.





Obrázek 3.5: 3 D vizualizace modelu kalibrační základny.

3.1.2 Definice zdroje záření

Otázka geometrie byla poměrně jednoduchá a během jejího řešení nevyvstalo příliš mnoho nejistot. Jiný případ však byla otázka zadání zdroje záření tedy otázka aktivity přírodních radionuklidů v jednotlivých stavebních prvcích. Jak ukáže tato část, tuto otázku nejsme schopni vyřešit čistě na základě technických dokumentů a odebraných vzorků. Již závěrem této kapitoly ukážeme, že bude nutno aktivity doladit porovnáváním modelových a experimentálních výsledků. Pro tento proces však potřebujeme vstupní odhad rozložení radionuklidů a aktivit, který budeme následně zpřesňovat v další kapitole.

Začneme s fyzikální částí problému, tedy jakým způsobem jsme stanovili hmotnostní aktivity jednotlivých stavebních prvků - resp. jejich vstupní odhady. Poté budeme pokračovat výpočetní částí, kdy vysvětlíme způsob jakým jsou tyto aktivity zadány do modelu a jaké je potřeba zavést přepočetní koeficienty.

Stanovení hmotnostních aktivit

Zdrojem informací pro odhady hmotnostních aktivit stavebních prvků na základně byly zejména dobové dokumenty informující o tvorbě standardů

[ROJKO ET AL. 1975] a o stěhování standardů do současné budovy ve Stráži pod Ralskem [MATOLÍN ET AL. 2010]. Z prvního citovaného dokumentu jsme čerpali především informace o hmotnostních aktivitách samotných betonových padů, kdy při postupném slévání byly z každé vrstvy odebírány vzorky, a následně měřeny pomocí laboratorní gama spektrometrie. Z druhého dokumentu jsme pak převzali zejména informaci o hmotnostní aktivitě přírodních radionuklidů v podlaze, kdy byla celá podlaha proměřena přenosným spektrometrem ještě před umístěním padů. Tento dokument obsahuje spektrometrické informace o celé síti měřících bodů, které sloužili k posouzení homogenity obsahu přírodních radionuklidů v celé ploše podlahy a pro vytipování nejlepších pozic pro umístění jednotlivých padů. Přestože jednotlivé body vykazovaly menší rozdíly v obsahu přírodních radionuklidů, do modelu zadáváme zdroj radionuklidů v podlaze homogenně rozložený. Měřením zjištěná nehomogenita je malá a její zanedbání nezatíží naše simulace významnou chybou.

Druhý zdrojem informací o hmotnostní aktivitě přírodních radionuklidů byly námi odebrané vzorky. Jednalo se vzorky zdiva (plynosilikátové tvárnice) s kusy omítky (vnější i vnitřní). Vzorek byl odebrán z vedlejšího objektu, který byl právě demolován. Přestože se jednalo o sousední objekt, provozovatel areálu podal informaci, že obě haly byly totožné. Jednalo se o haly (sklady), které byly vystavěny ve stejnou dobu, a za použití stejných materiálů a postupů. Dále jsme odebrali vzorek zeminy - a to v bezprostřední blízkosti skladu. Posledním odebraným materiálem byl nízkoaktivní písek ze Střelče u Turnova, který slouží jako náplň pozaďových standardů P0 a K0.

Všechny zmíněné vzorky jsme nejprve upravili drcením a vysušením a následně hermeticky uzavřeli do vzorkovnic - Marinelliho nádoby (600 ml) - určených pro měření metodou laboratorní spektrometrie. Po ustálení radioaktivní rovnováhy (doba hermetizace byla 30 dní) jsme měřili spektra metodou polovodičové laboratorní spektrometrie - 35% HPGe detektor. Pro maximální přesnost byla doba nabírání spekter stanovena na 6 h a u nízkoaktivního písku na 20 h. Následné zpracování spekter, ostatně stejně jako postup zpracování vzorků, odpovídalo běžnému postupu při gamaspektrometrickém vyhodnocení obsahu radionuklidů. Tj. byly identifikovány píky přírodních radionuklidů, spočteny jejich plochy a na základě účinnostní kalibrace pro danou geometrii byly stanoveny aktivity přírodních radionuklidů a aplikovány potřebné korekce. Pro stanovení aktivit přírodních radionuklidů byly zvoleny následující linky:

- Radionuklid ⁴⁰K emituje jedinou linku gamma 1461 keV.
- Aktivita ²³⁸U byla stanovena jako vážený průměr z linek 352 keV a 295 keV (²¹⁴Pb), 609 keV a 1764 keV (²¹⁴Bi) a 1001 keV (^{234m}Pa).
- Aktivita ²³²Th byla stanovena jako vážený průměr z linek 911 keV (²²⁸Ac), 238 keV (²¹²Pb), 583 keV a 2614 keV (²⁰⁸Tl).
- Aktivita ²³⁵U byla stanovena z píku 163 keV a následně ověřena pomocí píku 186 keV (kde dochází k interferenci s ²²⁶Ra). Ověření nám dle očekávání potvrdilo zachování přírodního izotopického poměru mezi ²³⁸U a ²³⁵U.

Uvádíme tabulku 3.1 hmotnostních aktivit přírodních radionuklidů v jednotlivých stavebních prvcích, tak jak byly zadány do první verze modelu. V tabulce prezentujeme pouze aktivity ⁴⁰K, ²³⁸U a ²³²Th. Předpokládáme (u měřených vzorků jsme potvrdili) existenci trvalé radioaktivní rovnováhy v obou přírodních řadách a zároveň přírodní izotopický poměr ²³⁸U a ²³⁵U, tj. U_{nat} obsahuje 99,27 % ²³⁸U a 0,72 % ²³⁵U.

Hmotnostní aktivity zde zjištěné budou dále vstupovat do výpočetního procesu a budou porovnávány s terénními daty. Proto jsme v této části práce věnovali zvýšenou pozornost přesnosti, s jakou byly výsledné aktivity stanoveny. U každého z výsledků jsme pak stanovili kombinovanou nejistotu, kterou prezentujeme v tabulce společně s výsledky. U dat, která jsme čerpali čistě z literatury (standardy, podlaha), jsou uvedeny nejistoty prezentované v této literatuře. U námi měřených laboratorních výsledků je pak uvedena kombinovaná nejistota daná stanovením obsahu radionuklidů v laboratoři (nejistoty stanovení ploch píků, výtěžků, korekcí, hmotnosti vzorků) a nejistotou vzniklou vzorkováním.

K této části ještě připojíme jednu informaci ohledně experimentálního stanovení aktivit. Týká se objemové aktivity radonu, resp. jeho produktů přeměny, ve vzduchu uvnitř základny. Model umožňuje zadání zdroje i do buňky vzduchu, který vyplňuje základnu. V rámci prvního z terénních měření na základně bylo provedeno stanovení aktivity dceřinných prvků radonu ve vzduchu uvnitř základny. Toto měření provedl Ing. Radek Černý, SÚJCHBO, v.v.i. Stanovení bylo provedeno prosáváním vzduchu přes vysokoabsorpční filtr po dobu 10 minut a následným proměřením těchto filtrů radiometrem MAAF. Odběr vzorků vzduchu byl proveden na celkem 5 místech -2x nad PU padem (20 cm nad zemí a ve výšce 1m), nad P0, nad PTh a zhruba

stavební	⁴⁰ K	²³⁸ U	²³² Th
prvek	$\mathrm{Bq/kg}$	$\mathrm{Bq/kg}$	$\mathrm{Bq/kg}$
PK	4792 ± 40	26 ± 1	4.9 ± 1.0
PU	69 ± 4	357 ± 20	5.9 ± 1.2
$\mathbf{P0}$	2 ± 0.5	3.4 ± 0.3	3.1 ± 0.3
PTh	84 ± 4	60 ± 3	378 ± 20
KV1	156 ± 10	3557 ± 150	2177 ± 100
KV2	156 ± 10	3557 ± 150	2177 ± 100
KK	14460 ± 500	2.5 ± 0.3	2.0 ± 0.2
KU	94 ± 7	14820 ± 500	106 ± 6
KTh	94 ± 7	754 ± 30	6618 ± 200
zemina	860 ± 40	125 ± 7	57 ± 4
podlaha	723 ± 50	66 ± 4	45 ± 3
zdivo	660 ± 30	71 ± 5	56 ± 4
vnější omítka	460 ± 30	25 ± 2	10.4 ± 0.8
vnitřní omítka	410 ± 30	22 ± 2	12 ± 0.9
zídka	620 ± 40	54 ± 4	41 ± 3

Tabulka 3.1: Hmotnostní aktivity přírodních radionuklidů ve stavebních prvcích základny - první odhad.

uprostřed místnosti vždy zhruba 20 cm nad zemí. Všechny výsledky byly v rámci nejistoty měření stejné a byly na hranici detekční schopnosti měřící metody. Příspěvkem od radonu, resp. od jeho dceřinných produktů se tedy na základě těchto výsledků nebudeme již dále zabývat, jelikož zjištěná ekvivalentní objemová aktivita radonu (v řádu jednotek Bq/m^3) gamaspektrometrická měření na padech měřitelně neovlivní.

Nyní známe hmotnostní aktivity všech použitých materiálů. Rozložení přírodních radionuklidů v rámci každého ze stavebních prvků budeme dále považovat za homogenní. Možnou nejistotu (ikdyž jen velmi malou), kterou tímto předpokladem do své práce zanášíme, budeme u každého ze stavebních prvků dále evidovat a započítávat do kombinované nejistoty výsledků budoucích výpočtů². V návaznosti na předchozí tvrzení budeme dále předpokládat stejnou hmotnostní aktivitu zdiva, resp. omítek ve všech zdech (severní, jižní, západní i východní). V předchozí části jsme sice popsali, že zdi jsou modelovány zvlášť na severní, jižní, západní i východní, nicméně nikoliv z důvodu, že bychom očekávali různou aktivitu materiálů. Toto zadání bylo zvoleno ze dvou důvodů. Prvním je zjednodušení definice modelu, druhým potom fakt, že při výpočtech budeme moci snadno oddělit příspěvky od jednotlivých zdí a například je vzájemně porovnávat. Je samozřejmě možné zadat různou aktivitu

²Tato nejistota bude u podlahy dána výsledky dřívějších měření; u zdiva a omítek přípustnou nehomogenitou materiálů, která je běžná ve stavebnictví a u padů nehomogenitou vzorků odebraných při slévání standardů, která byla reportována v příslušné literatuře

zdiva do různých zdí, nicméně při studiu technické dokumentace ani při další práci se neprokázalo, že by takové zadání bylo opodstatněné.

Způsob definice zdroje v MCNP

Známe tedy hmotnostní aktivitu jednotlivých prvků, nyní se podívejme na způsob, jakým byly tyto aktivity zadány do modelu. Spektra fotonů budeme zadávat pomocí diskrétních energetických linek. Model obsahuje všechny linky ⁴⁰K, ²³⁸U řady a ²³²Th řady v rozsahu 50 keV - 3000 keV s radiačním výtěžkem vyšším než 1 %. Energie a výtěžky jsme čerpali z databáze [LUND ONLINE].

Při konkrétním zadání využíváme možnost MCNP zadat parametry zdroje (v tomto případě energie (ERG)) nikoliv přímou hodnotou, ale jako distribuci. Zde tedy prvky distribuce (SI) budou naše diskrétní energetické linky a zastoupení prvků (SP) bude odpovídat výtěžkům. Víme, že MCNP při zpracování vstupního souboru vždy přenormuje každou zadanou distribuci tak, aby celkové zastoupení dalo dohromady 1 (tedy 100%). My budeme jako zastoupení linek zadávat přímé radiační výtěžky a přenormování, které MCNP provede, tedy naruší skutečnou fyzikální podstatu. Tento fakt snadno napravíme zavedením opravného koeficientu daného výtěžkem (či součtem všech výtěžků v dané řadě). Přepočetní koeficienty ještě okomentujeme ve speciálním odstavci.

Již tedy známe, jaká spektra budeme zadávat, přejděme tedy na zdánlivě nejkomplikovanější část, tj. jakým způsobem zadáme rozdílné hmotnostní aktivity do jednotlivých buněk. V této otázce se nabízely dvě možnosti řešení:

- Zadávání zdroje postupně do každé zdrojové buňky zvlášť. Tento postup umožňuje zadat kompletní spektrum, tj. počítat příspěvek od K, U a Th v jednom výpočtu. Zastoupení linek v distribuci pak bude bude odrážet výtěžek linky a hmotnostní aktivitu. (resp. poměr hmotnostních aktivit K, U a Th).
- Jako druhý způsob zadání zdroje se nabízí využít jednu z možností implementovaných v MCNP, kterou je zadání tzv. závislého zdroje (=Dependent Source). Tato volba umožňuje zadat některý z parametrů zdroje jako funkci jiného parametru. V našem případě se nabízí zadat souřadnice zdroje X, Y a Z jako závislé distribuce, které jsou funkcí buňky (CEL). Následně lze parametr (CEL) zadat jako distribuci, kdy (SI) distribuce budou čísla buněk ve kterých zdroj chceme a jejich zastoupení (SI) budou odpovídat (relativním) hmotnostním aktivitám.

Vidíme, že první z možností zadání s sebou nese prakticky jedinou výhodu. Je to fakt, že jsme takto schopni spočítat celé spektrum (tj. příspěvek K, U a Th) v jednom výpočtu. Nicméně by bylo třeba počítat každý ze zdrojových stavebních prvků (máme jich celkem 25) zvlášť a pro celkový obrázek o poli záření v jediném bodě by bylo potřeba tyto příspěvky váženě posčítat. Další komplikaci by přinesl fakt nutnosti doladění rozložení zdroje v modelu porovnáním s experimentálními hodnotami. Již nyní můžeme očekávat, že toto ladění bude obnášet více kroků. Při prvním způsobu zadání zdroje bychom museli pro každý verifikační bod přepočítávat celá spektra, abychom upravili relativní hmotnostní aktivitu a to pro každou zdrojovou buňku zvlášť. A následně provádět 25 oddělených výpočtů - tj. pro každý zdrojový stavební prvek zvlášť.

Zdroj tedy zadáme druhým uvedeným způsobem. Tento způsob zadání s sebou ze svého principu nese jednu nevýhodu a to, že bude nutné počítat každý ze zdrojový prvků K, U a Th zvlášť. Pro každý kompletní výsledek bude pak nutno vždy provést tři výpočty a příspěvky posčítat.

Bude se tedy v podstatě jednat o distribuci 25 kvádrových zdrojů, kdy váhy této distribuce budou relativní podíly jednotlivých stavebních prvků v celkové aktivitě. Konkrétně tedy postup zadání pro jeden ze zdrojových radionuklidů (například ⁴⁰K) vypadá takto:

- 1. Z aktuálních hmotnostních aktivit (tabulka 3.1) spočítáme pomocí známé hmotnosti celých stavebních prvků celkové aktivity A_n radionuklidu ⁴⁰K pro všechny stavební prvky n.
- 2. Spočítáme relativní zastoupení stavebních prvků n v celkové aktivitě $a_{r,n} = \frac{A_n}{\sum_n A_n}.$
- 3. Do definice zdroje zadáme rozdělení vah jednotlivých buněk formou distribuce (CEL=D1), D1 pak bude mít parametry (SI1) čísla buněk a (SP1) budou příslušná $a_{r,n}$.

Toto jsou relativně jednoduché tři kroky, které budeme muset zopakovat pokaždé, když změníme hmotnostní aktivity stavebních prvků. A to pro každý z prvků K, U a Th zvlášť. Zbývající část definice zdroje už bude zůstávat stejná. Definovali jsme tedy váhu jednotlivých zdrojových buněk - vyšší váha odpovídá preferovanějším buňkám při mechanismu generování částic a tedy aktivnějším stavebním prvkům. Nyní zbývá zadat jednotlivé kvádrové zdroje pokrývající buňky.

Budeme tedy definovat závislé distribuce, tj. zadáme parametry X, Y a Z jako funkci parametru buňka: X=FCEL=D2, resp. Y=FCEL=D3, resp. Z=FCEL=D4. V distribucích D2, reps. D3, resp. D4 pouze zavedeme čísla dílčích distribucí v X, resp. Y, resp. v Z a to zadáním DS2 (resp. DS3, resp. DS4) s dosud nepoužitými čísly N. Za každou z DS pak následují již klasicky příslušná SIN a SPN, kde v SIN bude uveden geometrický rozsah z příslušném směru (X, Y, Z) a v SPN 0 1 (tedy rovnoměrné rozložení).

Na závěr se ještě podívejme na některé vizualizace generování částic ze zdroje v obrázcích 3.6 - 3.8.



Obrázek 3.6: Vizualizace kompletně zadaného zdroje - draslíkový (vlevo) a uranový (vpravo). Pohled shora.



Obrázek 3.7: Vizualizace kompletně zadaného zdroje- uranový zdroj (nahoře) thoriový zdroj (dole). Řez rovinou karotážních padů.



Obrázek 3.8: Vizualizace kompletně zadaného zdroje - thoriový zdroj. SV roh - zdivo a omítky.
Opravné koeficienty

Závěrem části, která se týkala popisu zdroje, ještě shrneme momenty, kdy naše definice narušila fyzikální realitu modelovaného problému. Toto narušení je přímým důsledkem mechanismu výpočtu a pro jeho napravení zavedeme při každém z přepočtů opravné koeficienty. Tyto se budou mírně lišit u každého požadovaného výpočtu zvlášť a budeme je vždy komentovat u každé podkapitoly. Ty obecně platné zmíníme zde.

V první opravě zavedeme **vztah mezi energetickou distribucí a aktivitou**. Přestože energie zadáváme formou distribuce se zadanými radiační výtěžky, MCNP vždy tyto pravděpodobnosti vždy přenormuje, aby součet všech dílčích SP byl 1. Podíváme-li se na konkrétní příklad zadání linky ⁴⁰K formou:

MCNP vytvoří foton na začátku každé nové dráhy částice a my tím ztratíme informaci o výtěžku. Dostaneme tak stejný výsledek, jako kdybychom zadali definici:

> si1 1.462 sp1 1

Stejně tak u spektra ⁶⁰Co zadaného pomocí:

bude MCNP sice správně generovat fotony v poměru 1:1, ovšem pro výsledný počet simulovaných části NPS budeme mít i NPS vygenerovaných fotonů. Chceme-li pak NPS vztáhnout k aktivitě, je třeba výsledek přenásobit radiačním výtěžkem - tedy v prvním uvedeném příkladu ⁴⁰K výtěžkem Y=0,11 a v druhém případě součtem výtěžků ve spektru Y₁₁₇₃ + Y₁₃₃₂ \doteq 2. Tedy na každou přeměnu zdrojového radionuklidu připadá 0,11 resp. 2 fotony z daného spektra. Při výpočtech tedy budeme výsledek vždy přenásobovat výtěžkem pro K zdroj, resp. součtem výtěžků všech zadaných linek pro U a Th zdrojové radionuklidy.

Druhým důležitým modifikujícím faktorem, který bude třeba zavést u většiny výpočtů, bude zohlednění **skutečné aktivity**. Viděli jsme, že při zadání rozložení zdroje napočítáváme zastoupení jednotlivých stavebních prvků v celkové aktivitě daného radionuklidu v celé základně. MCNP nicméně tuto naši distribuci opět přenormuje na 1 a vrátí nám výsledek normovaný na jednu generovanou částici. Zbývá tedy přenásobit výsledek počtem přeměn, tedy celkovou aktivitou. Tuto už máme pro každý výpočet stanovenou - označili jsme ji výše jako $\sum_n A_n$ tedy sumu z dílčích aktivit stavebních prvků přes všechny tyto stavební prvky n.

Další opravy budou už otázkou konkrétních výpočtů, které budeme od modelu vyžadovat. U některých výpočtů bude nutné převést výsledek z jednotek, které vrací MCNP na jednotky nám bližší. Nejčastěji se budeme potkávat s výstupem výpočtů **deponované energie**, kterou MCNP reportuje **v jednotkách MeV** (obvykle normované na objem buňky a 1 generovanou částici). Při těchto převodech budeme pracovat se vztahem 1MeV = 1.602×10^{-13} J.

3.2 Verifikace první verze modelu

Po dokončení základní verze modelu jsme přistoupili k verifikaci. Základním principem verifikace bylo naměření reálných spekter a následné namodelování stejné situace s využitím již hotového modelu základny. Z porovnáním naměřených a simulovaných spekter jsme získali první informaci o přesnosti našeho modelu a zároveň vstupní data pro následné zpřesňování modelu v rámci iteračního procesu. Ten popíšeme v sekci Iterační postup zpřesňování modelu této práce. Nyní se budeme věnovat prvotní verifikaci. Nejprve přiblížíme experimentální část práce a následně popíšeme, jak jsme experimentální uspořádání převedli do modelu.

3.2.1 Experimentální část verifikace

Pro verifikaci modelu jsme nabrali sadu spekter pomocí přenosného HPGe detektoru o relativní detekční účinnosti 40 %. Detektor byl připojen k vyhodnocovací a napájecí jednotce a spektra byla nabírána pomocí programu Genie 2000. Tento spektrometr je uzpůsoben pro terénní měření připojením k menší přenosné Dewarově nádobě, která umožňuje umístění detektoru do vertikální polohy s krystalem směřujícím dolů. Další podrobnosti o detektoru, tvorbě jeho modelu pro MCNP a verifikaci modelu samotného detektoru jsou probrány v dodatcích této práce, konkrétně v kapitole Dodatek A

Verifikace modelů detektorů.

Pro verifikaci jsme zvolili celkem 14 verifikačních pozic detektoru. Pozice, jejich označení v této práci a jejich popis jsou shrnuty v tabulce 3.2.

popis pozice	zkratka	výšky nad zemí (m)
nad středem standardu PK	ΡK	0; 1
na středem standardu PU	PU	0; 0, 4 a 1
nad středem standardu P0	$\mathbf{P0}$	0; 0, 4 a 1
nad středem standardu PTh	PTh	0; 0, 4 a 1
3m na jih od středu PU	$3 \mathrm{mPU}$	1
na spojnici středů PK a PU	PK-PU	1
v severozápadním rohu základny	kout	0

Tabulka 3.2: Verifikační pozice - zkratky a popis

Rozmístění verifikačních pozic je zakresleno v 3D vizualizaci základny v obrázku 3.9.



Obrázek 3.9: Rozmístění verifikačních pozic na základně.

Minimální doba nabírání každého spektra byla stanovena na 15 min. Pro některé vybrané pozice (pozaďové pady) byla doba nabírání spekter delší, tak jak to momentální uspořádání dalších měření na základně umožňovalo.

Před samotným vyhodnocením experimentálních spekter bylo nutné stanovit, jakým způsobem budeme porovnávat míru shody experimentálních a simulovaných výsledků. Nabízely se dvě možnosti - na jedné straně porovnání kompletních spekter, na straně druhé porovnání ploch vybraných píků. Přestože celá spektra podávají kompletnější informaci, pro ověření správnosti modelu v této fázi práce, se nejeví jako příliš vhodná. Prosté vizuální porovnání simulovaných a měřených spekter je sice rychlé, ovšem o to komplikovanější je kvantifikace míry odlišnosti obou spekter. V této části jsme tedy zvolili cestu porovnávání ploch vybraných píků. Ukázku porovnání simulovaných a experimentálních spekter ukážeme v následující podkapitole Finální verifikace s již hotovým modelem.

Vyhodnocení měřených spekter odpovídalo klasické proceduře v gama spektrometrii, tj. energetická kalibrace - identifikace píků - fitování píků předpisem modifikované Gaussovy funkce - výpočet čisté plochy píku (bez kontinua). Píky byly vybrány tak, aby reprezentovaly maximální energetický rozsah, při zachování dostatečné statistiky³. Vybrali jsme celkem 16 píků, pro něž jsme provedli vyhodnocení ploch měřených spekter, jejich seznam včetně původu a výtěžků podle [GILMORE 2008] je uveden tabulce 3.3.

 $^{^{3}}$ Je nutné připomenout, že pozemní kalibrační pady jsou relativně málo aktivní a zejména ve výšce 1 m je signál již jen málo převyšující pozadí.

řada	energie [keV]	výtěžek [%]	radionuklid
⁴⁰ K	1460,8	10,7	⁴⁰ K
	186,2	_*	$^{186}\mathrm{Ra}{+}^{235}\mathrm{U}$
	295,2	18,5	214 Pb
	$351,\!9$	$35,\! 6$	$^{214}\mathrm{Pb}$
238T I	609,3	45,5	$^{214}\mathrm{Bi}$
0	1120,3	14,9	$^{214}\mathrm{Bi}$
	1238,1	5,8	$^{214}\mathrm{Bi}$
	1764, 5	15,3	$^{214}\mathrm{Bi}$
	2204,2	4,9	$^{214}\mathrm{Bi}$
	$238,\! 6$	$43,\!6$	²¹² Pb
	338,3	11,3	$^{228}\mathrm{Ac}$
	583,2	$30,\!6$	$^{208}\mathrm{Tl}$
$^{232}\mathrm{Th}$	727,3	6,7	$^{212}\mathrm{Bi}$
	911,2	$25,\!8$	$^{228}\mathrm{Ac}$
	969,0	$15,\!8$	$^{228}\mathrm{Ac}$
	2614,5	35,9**	208 Tl

Tabulka 3.3: Vybrané píky pro verifikaci první verze modelu.

* Interference dvou linek, vyhodnocení proběhlo v souladu s metodikou komentovanou v teoretické části v podkapitole Důležitá specifika spektrometrie přírodních radionuklidů.

**Výtěžek je opravený na větvení v ²³²Th řadě. Jev byl podrobněji komentován též v podkapitole Důležitá specifika spektrometrie přírodních radionuklidů.

Poměrně rozsáhlou tabulku 3.5 s výsledky vyhodnocení ploch píků uvádíme v závěru této části práce. Jedná se o četnosti impulzů v pících za vteřinu (CPS). Absolutní hodnota této veličiny vždy záleží na typu detektoru, nicméně výsledky mohou být i tak zajímavé pro představu o relativně nízké aktivitě padů. Připomínáme, že se jedná o výsledky získané pomocí 40% HPGe.

3.2.2 Výpočetní část verifikace

V této fázi práce jsme převedli všechna experimentální uspořádání do jejich modelové reprezentace. Použili jsme tedy model základny, tak jak jsme ho vytvořili a popsali v předešlé sekci této kapitoly. Do tohoto modelu jsme vložili dříve připravený model HPGe detektoru. Jedná se o věrný model HPGe detektoru použitého při experimentálním měření. Detaily ohledně tvorby modelu detektoru a verifikaci jeho správnosti jsme zařadili do dodatků této práce. Při tvorbě modelu detektoru jsme jeho geometrii zadali s použitím tzv. universů, jedné v mnoha možností zjednodušení zadávání geometrie v MCNP. Celý detektor je umístěn ve zvláštním universu a buňky, plochy a materiály jsou číslovány tak, aby nekolidovaly s definicí geometrie modelu základny (které jsme číslovali od 1). Pro HPGE konkrétně jsme použili číslování 200-299. Takto zadaná geometrie detektoru umožňuje jeho snadné vložení do libovolného jiného modelu (nejen naší základny) a jeho jednoduchou rotaci a posouvání prostým zadáním transformace.

V obrázku 3.10 můžeme vidět ukázku experimentálního uspořádání s jeho modelovým ekvivalentem. Jedná se detektor HPGe umístěný v 1 m nad P0 standardem.



Obrázek 3.10: Ukázka experimentálního uspořádání P01 a jeho modelového ekvivalentu.

Model detektoru jsme tedy postupně umísťovali na jednotlivé verifikační pozice a vždy provedli požadovaný výpočet. Skórovali jsme pomocí tally F8 v buňce tvořící aktivní objem detektoru. Tally jsme upřesnili zadáním energetických binů tak, aby jednotlivé biny obsahovaly sledované píky z tabulky 3.3. Připomeňme zde, že model je koncipován tak, že pro každý z přírodních radionuklidů K, U a Th je třeba provést samostatný výpočet.

Z teoretického úvodu této práce (podkapitola Tally) již víme, že zadáním tally F8 s energetickými biny dostáváme pravděpodobnost, že foton náhodně generovaný ze zadané prostorové a energetické distribuce, zanechá v aktivním objemu detektoru energii v rozsahu daném energetickým binem. Tato veličina je tedy přímo úměrná počtu impulzů v píku (resp. četnosti impulzů v píku), je však nutné provést příslušný přepočet. Princip přepočtu zůstává stejný tak, jak jsme ho použili v kapitole Motivační experiment. Skórovanou pravděpodobnost tedy opět potřebujeme přenásobit celkovým počtem fotonů generovaných celým zdrojem za jednotku času (za 1 vteřinu pro získání CPS). Budeme tedy vždy používat celkovou aktivitu zdroje (pro každý výpočet zvlášť K, U a Th) a celkový výtěžek fotonů dle zadaného zdroje. Tímto postupem dostáváme CPS v jednotlivých pících. Při vyhodnocení experimentálních dat jsme stanovovali čistou plochu píku, u simulovaných dat je tedy nutno získat stejnou, resp. co nejbližší veličinu. Do procesu zpracování simulovaných výsledků je tedy ještě nutné zahrnout odečet kontinua, tj. pozadí způsobeného rozptýlenými fotony od píků vyšších energií. Potup při stanovení plochy píku u simulovaných výsledků popíšeme na příkladu píku ⁴⁰K:

1. Pro jednu konkrétní pozici detektoru chceme znát počet impulzů v draslíkovém píku 1,461 MeV. Bereme tedy výstup z výpočtu v energetickém binu 1,459-1,463 MeV, tuto hodnotu označme F8_K. Hodnotu tally F8_K vynásobíme celkovou aktivitou draslíku v celé modelu A_K a výtěžkem pro tento pík (Y_K) a dostáváme CPS^{**}_K.

2. Nyní odečteme kontinuum způsobené samotným draslíkovým zdrojem. Za tímto účelem jsme zadali dva biny kolem každého píku - jeden před a jeden za píkem. Údaj z každého tohoto binu upravíme stejně jako hlavní bin (násobíme aktivitou a výtěžkem) a spočteme průměr. Tento údaj odečteme od hodnoty CPS_K^{**} v hlavním píku, získáme CPS_K^{*4} .

Pozn. U experimentálních dat je kontinuum pod píkem 1,461 MeV samozřejmě tvořeno rozptýlenými fotony zdroje U a Th. Nicméně my provádíme každý z výpočtů K, U a Th zvlášť, tudíž při výpočtu K (resp. U, resp. Th) nejsou zbývající zdroje přítomny a tudíž netvoří žádné kontinuum.

Tímto procesem jsme tedy získali čisté četnosti impulzů všech píků z tabulky 3.3.

3.2.3 Porovnání

Nyní tedy můžeme porovnat zjištěné plochy píků z experimentu s plochami píků získaných simulacemi.

Všechny výsledky tohoto porovnání prezentujeme v tabulce 3.4. Jedná se o čisté poměry CPS model/experiment. Tedy hodnota rovna 1 odpovídá čisté shodě, hodnoty <1 ukazují že model v této situaci podhodnocuje reálnou situaci, hodnoty >1 naznačují nadhodnocení modelu oproti skutečnosti. V tabulce jsou barevně vyznačené extrémní hodnoty: poměr ≥ 4 (červeně), poměr v rozsahu (2,4) nebo ≤ 0.5 (oranžově). Data v rozsahu $\langle 0.5; 2 \rangle$ černě.

Vybraná data ještě ukážeme pro lepší představu graficky. Vykreslujeme CPS pro píky 1461 keV (40 K) v obrázku 3.11. Dále data pro píky 295 keV, 609 keV a 1764 keV (238 U) v obrázku 3.12. A nakonec poměry pro píky 238 keV, 911 keV a 2614 keV (232 Th) v obrázku 3.13.

 $^{^{4}\}mathrm{V}$ tom
to vzorovém příkladu je pochopitelně pozadí tvořené samotným zdrojem nulové, jelikož 1,461 MeV je jediný pík ve spektru. Nicméně pro U a Th
 zdroj je řada nízko
energetických píků, které leží na signifikantním pozadí od více energetických píků stejného zdroje.

	energie	PK	PU	P0	PTh	PU	P0	PTH
	$[\mathrm{keV}]$	0m	$0\mathrm{m}$	$0\mathrm{m}$	$0\mathrm{m}$	0.4m	0.4m	0.4m
^{40}K	1460,82	1,19	$1,\!83$	1,84	1,53	$1,\!97$	$1,\!69$	1,86
	186, 21	$5,\!95$	4,12	$16,\!13$	3,11	$3,\!59$	$7,\!11$	$5,\!67$
	$295,\!22$	3,12	2,48	3,14	2,49	$2,\!23$	4,13	$2,\!80$
	$351,\!93$	$1,\!93$	1,52	$1,\!91$	1,75	$1,\!63$	$2,\!66$	2,02
238 t t	$609,\!31$	1,88	1,27	$1,\!98$	1,23	$1,\!34$	$1,\!98$	$1,\!60$
U	1120,29	1,25	2,78	1,78	1,77	$1,\!29$	$2,\!16$	1,98
	1764, 49	$1,\!63$	$1,\!40$	$1,\!82$	$1,\!45$	$1,\!56$	2,28	$1,\!61$
	2204, 21	1,64	$1,\!86$	6,53	$1,\!43$	$1,\!53$	$2,\!88$	2,11
	$238,\!63$	0,79	1,31	1,28	0,99	$2,\!63$	$0,\!38$	1,15
	$338,\!32$	1,90	$0,\!94$	$1,\!05$	$0,\!93$	$1,\!27$	2,80	$1,\!00$
	$583,\!19$	$2,\!31$	1,59	$1,\!41$	$0,\!68$	1,70	$0,\!94$	0,88
232 Th	911,2	1,02	$1,\!30$	$1,\!33$	1,21	$1,\!26$	$1,\!25$	1, 19
1 11	$968,\!97$	0,98	0,65	$0,\!97$	0,50	$1,\!00$	$0,\!93$	$0,\!67$
	2614,51	1,71	1,70	$1,\!89$	$1,\!11$	$2,\!26$	$1,\!54$	1,23
	energie	PK	PU	P0	PTh	3mPU	PK-PU	KOUT
	energie [keV]	PK 1m	PU 1m	P0 1m	PTh 1m	3mPU	PK-PU	KOUT
40K	energie [keV] 1460,82	PK 1m 1,37	PU 1m 1,77	P0 1m 1,48	PTh 1m 1,61	3mPU 1,64	PK-PU 1,49	KOUT 1,64
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,82 186,21	PK 1m 1,37 19,08	PU 1m 1,77 4,82	P0 1m 1,48 8,33	PTh 1m 1,61 3,55	3mPU 1,64 7,87	PK-PU 1,49 5,20	KOUT 1,64 7,27
40 K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22	PK 1m 1,37 19,08 3,66	PU 1m 1,77 4,82 2,68	P0 1m 1,48 8,33 3,88	PTh 1m 1,61 3,55 3,93	3mPU 1,64 7,87 4,06	PK-PU 1,49 5,20 2,99	KOUT 1,64 7,27 3,20
40 K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22 351,93	PK 1m 1,37 19,08 3,66 2,52	PU 1m 1,77 4,82 2,68 1,84	P0 1m 1,48 8,33 3,88 2,60	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32	3mPU 1,64 7,87 4,06 2,80	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22 351,93 609,31	PK 1m 1,37 19,08 3,66 2,52 2,00	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,77 \\ 4,82 \\ 2,68 \\ 1,84 \\ 1,53 \end{array}$	P0 1m 1,48 8,33 3,88 2,60 2,19	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79	3mPU 1,64 7,87 4,06 2,80 2,50	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,822 186,21 295,22 351,93 609,31 1120,29	PK 1m 1,37 19,08 3,66 2,52 2,00 2,27	PU 1m 1,77 4,82 2,68 1,84 1,53 1,86	P0 1m 1,48 8,33 3,88 2,60 2,19 2,21	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83	3mPU 1,64 7,87 4,06 2,80 2,50 1,75	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22 351,93 609,31 1120,29 1764,49	PK 1m 1,37 19,08 3,66 2,52 2,00 2,27 2,37	PU 1m 1,77 4,82 2,68 1,84 1,53 1,86 1,92	$\begin{array}{c} P0 \\ 1m \\ \hline 1,48 \\ 8,33 \\ 3,88 \\ 2,60 \\ 2,19 \\ 2,21 \\ 2,05 \end{array}$	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59	3mPU 1,64 7,87 4,06 2,80 2,50 1,75 2,06	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22 351,93 609,31 1120,29 1764,49 2204,21	PK 1m 1,37 19,08 3,66 2,52 2,00 2,27 2,37 2,92	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,77 \\ 4,82 \\ 2,68 \\ 1,84 \\ 1,53 \\ 1,86 \\ 1,92 \\ 1,72 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ \hline 1,48\\ 8,33\\ 3,88\\ 2,60\\ 2,19\\ 2,21\\ 2,05\\ 3,22\\ \end{array}$	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59 3,03	$\begin{array}{c} 3 \text{mPU} \\ \hline 1,64 \\ 7,87 \\ 4,06 \\ 2,80 \\ 2,50 \\ 1,75 \\ 2,06 \\ 3,42 \end{array}$	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17 2,89	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84 2,71
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22 351,93 609,31 1120,29 1764,49 2204,21 238,63	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,37 \\ 19,08 \\ 3,66 \\ 2,52 \\ 2,00 \\ 2,27 \\ 2,37 \\ 2,92 \\ \hline 1,16 \end{array}$	PU 1m 1,77 4,82 2,68 1,84 1,53 1,86 1,92 1,72 1,19	P0 1m 1,48 8,33 3,88 2,60 2,19 2,21 2,05 3,22 1,49	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59 3,03 1,13	$\begin{array}{c} 3mPU\\ \hline 1,64\\ 7,87\\ 4,06\\ 2,80\\ 2,50\\ 1,75\\ 2,06\\ 3,42\\ 1,45 \end{array}$	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17 2,89 1,51	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84 2,71 1,27
⁴⁰ K	energie [keV] 1460,82 186,21 295,22 351,93 609,31 1120,29 1764,49 2204,21 238,63 338,32	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,37 \\ 19,08 \\ 3,66 \\ 2,52 \\ 2,00 \\ 2,27 \\ 2,37 \\ 2,92 \\ 1,16 \\ 1,78 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,77 \\ 4,82 \\ 2,68 \\ 1,84 \\ 1,53 \\ 1,86 \\ 1,92 \\ 1,72 \\ 1,19 \\ 1,50 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ \hline 1,48\\ 8,33\\ 3,88\\ 2,60\\ 2,19\\ 2,21\\ 2,05\\ 3,22\\ \hline 1,49\\ 1,80\\ \end{array}$	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59 3,03 1,13 1,41	$\begin{array}{c} 3 \mathrm{mPU} \\ \hline 1,64 \\ 7,87 \\ 4,06 \\ 2,80 \\ 2,50 \\ 1,75 \\ 2,06 \\ 3,42 \\ 1,45 \\ 1,35 \end{array}$	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17 2,89 1,51 0,80	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84 2,71 1,27 1,43
⁴⁰ K	$\begin{array}{c} \text{energie} \\ [\text{keV}] \\ \hline 1460,82 \\ 186,21 \\ 295,22 \\ 351,93 \\ 609,31 \\ 1120,29 \\ 1764,49 \\ 2204,21 \\ \hline 238,63 \\ 338,32 \\ 583,19 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,37 \\ 19,08 \\ 3,66 \\ 2,52 \\ 2,00 \\ 2,27 \\ 2,37 \\ 2,92 \\ \hline 1,16 \\ 1,78 \\ 1,32 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,77 \\ 4,82 \\ 2,68 \\ 1,84 \\ 1,53 \\ 1,86 \\ 1,92 \\ 1,72 \\ 1,72 \\ 1,72 \\ 1,50 \\ 1,52 \end{array}$	P0 1m 1,48 8,33 3,88 2,60 2,19 2,21 2,05 3,22 1,49 1,80 1,17	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59 3,03 1,13 1,41 1,40	$\begin{array}{c} 3 \mathrm{mPU} \\ \hline 1,64 \\ 7,87 \\ 4,06 \\ 2,80 \\ 2,50 \\ 1,75 \\ 2,06 \\ 3,42 \\ 1,45 \\ 1,35 \\ 1,17 \end{array}$	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17 2,89 1,51 0,80 1,19	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84 2,71 1,27 1,43 1,33
⁴⁰ K ²³⁸ U	$\begin{array}{c} \text{energie} \\ [\text{keV}] \\ \hline 1460,82 \\ 186,21 \\ 295,22 \\ 351,93 \\ 609,31 \\ 1120,29 \\ 1764,49 \\ 2204,21 \\ \hline 238,63 \\ 338,32 \\ 583,19 \\ 911,2 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,37 \\ 19,08 \\ 3,66 \\ 2,52 \\ 2,00 \\ 2,27 \\ 2,37 \\ 2,92 \\ 1,16 \\ 1,78 \\ 1,32 \\ 1,15 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU}\\ {\rm 1m}\\ {\rm 1,77}\\ {\rm 4,82}\\ {\rm 2,68}\\ {\rm 1,84}\\ {\rm 1,53}\\ {\rm 1,86}\\ {\rm 1,92}\\ {\rm 1,72}\\ {\rm 1,72}\\ {\rm 1,19}\\ {\rm 1,50}\\ {\rm 1,52}\\ {\rm 1,24}\\ \end{array}$	P0 1m 1,48 8,33 3,88 2,60 2,19 2,21 2,05 3,22 1,49 1,80 1,17 1,38	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59 3,03 1,13 1,41 1,40 1,20	$\begin{array}{c} 3 \mathrm{mPU} \\ \hline 1,64 \\ 7,87 \\ 4,06 \\ 2,80 \\ 2,50 \\ 1,75 \\ 2,06 \\ 3,42 \\ \hline 1,45 \\ 1,35 \\ 1,17 \\ 1,43 \end{array}$	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17 2,89 1,51 0,80 1,19 1,29	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84 2,71 1,27 1,43 1,33 1,25
⁴⁰ K ²³⁸ U ²³² Th	$\begin{array}{c} \text{energie} \\ [\text{keV}] \\ \hline 1460,82 \\ 186,21 \\ 295,22 \\ 351,93 \\ 609,31 \\ 1120,29 \\ 1764,49 \\ 2204,21 \\ \hline 238,63 \\ 338,32 \\ 583,19 \\ 911,2 \\ 968,97 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,37 \\ 19,08 \\ 3,66 \\ 2,52 \\ 2,00 \\ 2,27 \\ 2,37 \\ 2,92 \\ 1,16 \\ 1,78 \\ 1,32 \\ 1,15 \\ 0,87 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU}\\ {\rm 1m}\\ 1,77\\ {\rm 4,82}\\ {\rm 2,68}\\ {\rm 1,84}\\ {\rm 1,53}\\ {\rm 1,86}\\ {\rm 1,92}\\ {\rm 1,72}\\ {\rm 1,19}\\ {\rm 1,50}\\ {\rm 1,52}\\ {\rm 1,24}\\ {\rm 0,97}\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ \hline 1,48\\ 8,33\\ 3,88\\ 2,60\\ 2,19\\ 2,21\\ 2,05\\ 3,22\\ \hline 1,49\\ 1,80\\ 1,17\\ 1,38\\ 1,14\\ \end{array}$	PTh 1m 1,61 3,55 3,93 2,32 1,79 1,83 1,59 3,03 1,13 1,41 1,40 1,20 1,13	$\begin{array}{c} 3 \mathrm{mPU} \\ \hline 1,64 \\ 7,87 \\ 4,06 \\ 2,80 \\ 2,50 \\ 1,75 \\ 2,06 \\ 3,42 \\ 1,45 \\ 1,35 \\ 1,17 \\ 1,43 \\ 0,50 \end{array}$	PK-PU 1,49 5,20 2,99 2,19 2,03 1,98 2,17 2,89 1,51 0,80 1,19 1,29 1,24	KOUT 1,64 7,27 3,20 2,13 1,80 1,91 1,84 2,71 1,27 1,43 1,33 1,25 0,89

Tabulka 3.4: Poměry simulovaných/experimentálních ploch jednotlivých píků získaných v rámci verifikace první verze modelu.



Obrázek 3.11: Porovnání simulovaných a naměřených CPS v píku 1462 ke
V $(\rm ^{40}K)$



Obrázek 3.12: Porovnání simulovaných a naměřených CPS pro píky dceřiných radionuklidů $^{238}\mathrm{U}$



Obrázek 3.13: Porovnání simulovaných a naměřených CPS pro píky $^{232}\mathrm{Th}$

V této části práce prozatím neuvažujeme nejistoty, s jakými byly CPS stanoveny. U experimentálních výsledků byla celková kombinovaná nejistota pro všechny píky menší 5%. Jedná se o relativně nízkou nejistotu zejména díky poměrně dlouhé době měření spekter. U simulovaných výsledků je však situace jiná. Při tvorbě modelu jsme zavedli řadu předpokladů a odhadů. Již na konci minulé sekce práce jsme uvedli, že prozatím pracujeme s vstupním odhadem modelu, který bude dále nutno poměrně výrazně upravovat. Nejistota tvořená těmito odhady a předpoklady by byla velmi vysoká - v řádech stovek procent. V rámci takto vysoké nejistoty by pak výsledky simulací a měření vzájemně souhlasily.

Nyní budeme věnovat prostor komentáři k výsledkům. Momentálně pracujeme s první verzí modelu a v kapitole o tvorbě modelu jsme u několika stavebních prvků zmínili, že nemáme jinou možnost, než provést odhad aktivity přírodních radionuklidů obsažených ve zdivu a dalších stavebních materiálech a následně provést upřesnění na základě výsledků prvních simulací. Velké rozdíly mezi výsledky simulací a experimentů byly očekávané.

Obecně vidíme, v tabulce poměrů i u grafů, že model v drtivé většině dat nadhodnocuje skutečnost. Tedy aktivity přírodních radionuklidů ve stavebních prvcích v modelu jsou obecně nižší než ve skutečnosti a bude potřeba je postupně snižovat. Pokud by se jednalo pouze o celkovou aktivitu, tj. poměry hmotnostních aktivit mezi jednotlivými stavebními prvky by byly zadány správně a aktivity by byly pouze systematicky nadhodnoceny, nebylo by potřeba do modelu již zasahovat. Stačilo by upravit celkovou aktivitu, kterou se výsledek násobí.

Na fakt, že se nejedná pouze o celkové systematické nadhodnocení hmotnostních aktivit, můžeme usuzovat z významného rozdílu v poměrech model/experiment pro jednotlivé energetické linky v rámci jednoho zdroje. Obecně můžeme tvrdit, že poměr model/experiment je horší pro nižší energie. Přesněji pro drtivou většinu verifikačních pozic se zdá, že model v rámci jednoho z výpočtů U či Th zdroje nadhodnocuje realitu víc u nižších energií než u vyšších energií. Můžeme předpokládat, že rozdílný poměr u různých energií v rámci jednoho zdroje lze přisoudit nepřesně zadané prostorové distribuci zdroje v modelu. Tedy nejenže jsou absolutní hodnoty koncentrací přírodních radionuklidů ve stavebních prvcích nepřesné - nepřesně definované jsou i jejich poměry mezi jednotlivými stavebními prvky. Bude tedy nutné upravovat definici zdroje. V této úvaze vycházíme z faktu, že lineární součinitel zeslabení je závislý na energii. Víme, že nižší energie se budou zeslabovat snáze a dostaneme-li tedy na dané pozici víc nízkoenergetických fotonů než kolik by odpovídalo dané aktivitě podle vysokoenergetických fotonů, je zřejmé, že tyto nízkoenergetické fotony prošly menším množstvím zeslabujícího média. U jednoduchého zdroje bychom prohlásili, že signál, který detekujeme, pochází z menší vzdálenosti než jsme předpokládali. U takto komplexního zdroje, kdy je signál tvořen příspěvky od mnoha stavebních prvků, bude situace o něco složitější a vypořádáme se s ní za pomocí specifik jednotlivých verifikačních pozic.

Úpravě prostorového rozložení zdroje bude ještě třeba věnovat pozornost v další části práce. Nicméně během vyhodnocení jsme identifikovali další potenciální zdroj toho rozdílu. Jedná se o možné nepřesné stanovení čisté plochy píků ze simulace. Postup popsaný o několik odstavců výše, spočívající v odčítání CPS v oknech, je poměrně hrubým odhadem kontinua a je navíc zbytečně nepřehledný a neobratný. Pro další část zvolíme lehce odlišný přístup, ve kterém výstupem ze simulace budou kompletní spektra, která následně zpracujeme klasickým gamaspektrometrickým vyhodnocením.

Na závěr první verifikační části můžeme označit následující zdroje nesouhlasu mezi modelem a experimentem:

- Nepřesně stanovená celková aktivita přírodních radionuklidů. Konkrétně nadhodnocená celková aktivita. Budeme iteračně snižovat aktivity jednotlivých stavebních prvků.
- Nesprávně zadané rozložení aktivity, tj. nesprávné dílčí aktivity jednotlivých stavebních prvků. Budeme iteračně měnit na základě poměrů u jednotlivých verifikačních pozic a poměrů u jednotlivých energií v rámci jedné verifikační pozice.
- Nepřesnosti při vyhodnocení simulovaných spekter nepřesné odčítání kontinua. Napravíme simulací celých spekter a následnou klasickou píkovou analýzou.
- Chybějící příspěvek od řady ²³⁵U. Velmi vysoký rozdíl model/experiment pro pík 186 keV ukázal chybějící příspěvek řady ²³⁵U. Do zdroje ²³⁸U přidáme linky ²³⁵U, kdy provedeme přepočet výtěžků za předpokladu přírodního izotopického poměru.
- Nepřesnosti v geometrii. Tento bod uvádíme jako teoreticky možný zdroj nepřesností, jedná se zejména o nadhodnocené či podhodnocené tloušťky omítek na úkor zdiva a tloušťku podlahy. Nicméně tyto nepřesnosti považujeme za minimálně ovlivňující celkový výsledek. V rámci naší práce jsme nenašli žádný geometrický parametr modelu, který bychom mohli upřesnit.
- Nehomogenity v geometrii, konkrétně nehomogenity v hustotě materiálů a zejména v rozložení aktivity. V rámci celý stavebních prvků nutně považujeme aktivitu i hustotu za homogenní. Nehomogenity není v této práci možné postihnout a jejich vliv budeme muset považovat za minimální.

S prvními čtyřmi body budeme tedy pracovat v následující části. V první fázi zavedeme nový, přehlednější způsob vyhodnocení dat. V následující části budeme postupně upravovat rozložení aktivit a tím pádem i celkovou aktivitu zdroje.

· · ·	DIZ	דת	D0	וחת		D 0	
energie		PU	P0 0	PTh	PU	PU o 4	PTH
keV	Um	0m	Um	Um	0.4m	0.4m	0.4m
186,21	0,19	1,57	0,08	0,46	1,33	0,14	0,31
$238,\!63$	0,66	1,47	$0,\!55$	10,90	0,73	0,77	8,25
295,22	0,39	3,41	0,23	$0,\!76$	2,72	$0,\!30$	0,70
$338,\!32$	0,11	$0,\!17$	0,13	$2,\!33$	0, 19	0,17	1,76
$351,\!93$	$0,\!80$	6,18	0,48	$1,\!39$	$4,\!82$	$0,\!58$	$1,\!35$
583, 19	0,36	$0,\!37$	0,27	5,43	$0,\!42$	0,41	4,10
609, 31	0,76	6,59	0,40	$1,\!64$	$4,\!93$	$0,\!62$	$1,\!46$
$727,\!33$	0,08	$0,\!07$	$0,\!06$	$1,\!20$	0, 10	$0,\!09$	$0,\!89$
911,2	0,27	0,22	0,21	4,00	$0,\!36$	$0,\!31$	$2,\!94$
$968,\!97$	$0,\!15$	0,14	0,12	2,40	0, 19	$_{0,17}$	1,75
$1120,\!29$	0,22	1,77	$0,\!13$	0,44	$1,\!33$	$0,\!17$	$0,\!37$
1238, 11	0,09	0,70	$0,\!05$	0,20	0,51	$0,\!06$	$0,\!15$
$1460,\!82$	$16,\!56$	$0,\!97$	$0,\!82$	$1,\!18$	$1,\!32$	1,26	$1,\!54$
$1764,\!49$	0,20	1,57	$0,\!11$	0,41	$1,\!15$	$0,\!15$	0,38
$2204,\!21$	0,06	0,46	$0,\!01$	0,12	0,33	$0,\!05$	0, 10
$2614,\!51$	0,27	0,25	$0,\!22$	3,70	0,33	$0,\!30$	2,70
energie	PK	PU	P0	PTh	3mPU	PK-PU	KOUT
keV	1m	$1\mathrm{m}$	$1\mathrm{m}$	$1\mathrm{m}$			
186, 21	0,08	$0,\!64$	$0,\!15$	$0,\!49$	0,28	0,32	0,26
$238,\!63$	1,12	$1,\!06$	$1,\!09$	$4,\!04$	1,55	$1,\!26$	$0,\!95$
295,22	0,51	1,41	0,44	$0,\!53$	$0,\!66$	$0,\!68$	$0,\!45$
338, 32	0,25	0,28	$0,\!20$	$0,\!90$	$0,\!35$	0,42	0,24
$351,\!93$	0,88	$2,\!65$	$0,\!82$	$1,\!16$	1,24	$1,\!20$	0,78
583, 19	$0,\!63$	0,58	$0,\!58$	$2,\!09$	$0,\!81$	$0,\!74$	$0,\!51$
609,31	$0,\!94$	$2,\!66$	$0,\!84$	$1,\!22$	1,27	$1,\!18$	0,78
$727,\!33$	0,13	0,13	0,12	$0,\!46$	0,16	0,13	$0,\!15$
911,2	0,48	$0,\!47$	0,44	$1,\!50$	$0,\!60$	0,57	0,39
968, 97	0,26	0,27	0,25	$0,\!83$	0,36	0,28	0,28
1120,29	0,24	$0,\!65$	0,25	$0,\!33$	0,41	$0,\!31$	0,23
$1238,\!11$	0,10	0,26	$0,\!10$	$0,\!13$	0,13	$0,\!14$	$0,\!12$
$1460,\!82$	6,47	$1,\!94$	$1,\!85$	$2,\!07$	$2,\!61$	2,75	2,19
1764, 49	0,22	$0,\!60$	0,23	0,36	0,35	0,30	0,22
$2204,\!21$	0,06	0,20	0,05	0,06	0,09	0,08	0,06
261451	0.43	0,44	0,41	1,41	0,52	0,54	0.41

Tabulka 3.5: Četnosti (CPS) ve vybraných pících z verifikačních měření - experimentální data. Připomínáme, že se jedná o výsledky získané pomocí 40% HPGe.

3.3 Iterační postup zpřesňování modelu

Nyní přímo navážeme na předchozí část. Použijeme stejná experimentální data, tedy měření s 40 % HPGe detektorem na 14 verifikačních pozicích realizované v rámci třetí měřící fáze, a budeme postupně upravovat model tak, abychom dostali maximální shodu experimentálních a simulovaných CPS.

Ještě než přistoupíme k samotným úpravám hmotnostních aktivit stavebních prvků, vypořádáme se s problémem poněkud neobratného stanovení kontinua, který jsme zmínili závěrem předchozí části práce.

Zaveď me tedy jednodušší způsob, kdy výstupem simulace bude kompletní spektrum. Zadáváme tedy opět tally F8, ovšem tentokrát s energetickými biny v rozsahu 0 - 3000 keV. (Přesněji zadáváme jako první záporný bin, jako druhý epsilonový bin a následně 2048 binů až do energie 3000 keV.) Zadáme i Gaussovské rozmazání píků pomocí funkce "tally treatment card"(FT GEB), kterou MCNP nabízí. Parametry tohoto Gaussovského rozmazání jsme již dříve stanovili během laboratorní verifikace, která je detailně popsána v dodatcích této práce. Toto je jediná úprava týkající se změny stanovení kontinua v samotném modelu. Následně jsme si připravili funkci v programu Matlab (přesněji tři funkce - jednu pro každý radionuklid K, U, Th). Funkce načte zadané spektrum a přenásobí všechny biny výtěžkem (celkovým výtěžkem), který zůstává pro každý radionuklid stejný. V dalším kroku přenásobí spektrum celkovou aktivitou daného radionuklidu a časem (který je stejný jako čas příslušného měřeného spektra) - tyto dvě hodnoty jsou vždy parametry funkce a zadává je uživatel. Takto dostáváme impulzové spektrum. Funkce dále na stanovených pozicích nafituje píky uživatelsky zadanou modifikovanou Gaussovou křivkou:

$$f(x) = A \cdot exp(-\frac{(x - x_c)^2}{2\sigma^2}) + B \cdot x + C$$
(3.1)

a uloží parametry těchto fitů pro každý zadaný pík (zadány jsou opět píky z tabulky 3.3). Následně funkce spočte plochu píku, pomocí:

$$P = A \cdot \sigma \cdot \sqrt{2\pi} \tag{3.2}$$

a vrátí matici s vektory střed píku (\mathbf{x}_c) ; plocha píku (\mathbf{P}) .

Úpravy hmotnostní aktivity jsme tedy prováděli postupně v krocích (budeme je označovat jako iterace) a to pro každý zdrojový radionuklid (K, U či Th) zvlášť. Zde upozorníme, že verifikační body z tabulky 3.2 nebyly vybrány zcela náhodně, nýbrž byly zvoleny tak, aby upřednostňovaly různé stavební prvky. Podívejme se ještě jednou na schéma umístění verifikačních bodů v obrázku 3.9.

Pole záření na všech bodech je samozřejmě kombinací příspěvků od všech stavebních prvků, jak jsme dokázali v motivačním příkladu v úvodu této kapitoly. Ovšem pro některé pozice jsou příspěvky některých prvků dominantní. Konkrétně:

 Všechny pozice v nulové výšce nad pady odrážejí dominantně obsah přírodních radionuklidů v samotných padech.

- S rostoucí výškou pak postupně klesá podíl záření přicházejících z padů a narůstá podíl pole tvořeného okolím.
- Pozice KOUT preferuje záření ze stěn.
- Pozice 3mPU odráží z velké části záření radionuklidů v podlaze.
- Pozice PK-PU odráží pokles signálu od padu s rostoucí vzdáleností od něho.

Změny v hmotnostní aktivitě stavebních prvků jsme tak dělali nejprve na základě posouzení míry neshody simulovaných a experimentálních výsledků u jednotlivých padů. Konkrétně jsme nejprve ladili pozice PK, PU, PTh v nulové výšce. Následně jsme zpřesňovali pozici KOUT úpravou aktivity ve stěnách. Poté jsme se vrátili k pozicím PK, PU, PTh ve vyšších výškách a lehce upravovali stěny. Nakonec jsme se věnovali pozicím 3mPU a ladili jsme hmotnostní aktivity radionuklidů v podlaze.

Jako doplňkovou informaci při zpřesňování modelu jsme využívali fakt, že v rámci jednoho zdroje a jedné pozice byly poměry model/experiment pro různé energie mírně odlišné⁵. Jako pomocný ukazatel v procesu zpřesňování modelu jsme si zavedli hodnotu rozptylu v rámci výsledků pro jednotlivé energetické linky. Jaké hodnoty bychom brali v úplně prvním verifikačním výpočtu do rozptylů je ukázáno na výřezu z tabulky 3.4 v obrázku 3.14 šedými rámečky. Jak jsme zmínili v závěru části kapitoly 3.2, tyto rozdíly mohou ukazovat na špatnou prostorovou distribuci zdroje, kdy fotony fotony v modelu podstupují jinou dráhu částice než v reálném případě. Chceme tedy aby byl rozptyl mezi výsledky pro jednotlivé energie minimální.

	energie	PK	PU	P0	PTh
	[keV]	$1 \mathrm{m}$	$1\mathrm{m}$	$1\mathrm{m}$	$1\mathrm{m}$
${}^{40}K$	1460,82	1,37	1,77	1,48	$1,\!61$
	186, 21	19,08	4,82	8,33	3,55
	295, 22	3,66	2,68	$3,\!88$	$3,\!93$
	351,93	2,52	1,84	$2,\!60$	2,32
23811	609,31	2,00	1,53	$2,\!19$	1,79
U	1120, 29	2,27	1,86	2,21	$1,\!83$
	1764, 49	2,37	1,92	2,05	$1,\!59$
	2204, 21	2,92	1,72	3,22	<u>3,03</u>
	$238,\!63$	1,16	1,19	1,49	1,13
	338, 32	1,78	1,50	$1,\!80$	1,41
	583, 19	1,32	1,52	1,17	$1,\!40$
232 T h	911,2	1,15	1,24	$1,\!38$	1,20
11	968, 97	0,87	0,97	1,14	$1,\!13$
	2614, 51	1,89	1,36	1,63	1,50

Obrázek 3.14: Ukázka různých poměrů v rámci jedné pozice a jednoho zdroje pro různé energie. Výřez z původní tabulky v sekci Verifikace první verze modelu.

 $^{^5\}mathrm{Po}$ opravě interferencí a doplnění $^{235}\mathrm{U}$ již pouze mírně, ovšem stále prokazatelně odlišné.

V rámci jednotlivých iterací jsme tedy sledovali jednu hlavní linku každého ze zdrojových radionuklidů (K, U a Th) - ukázku výsledků uvidíme dále a zároveň hodnoty rozptylů. Podmínka vylepšování tak byla nejen zlepšení poměru model/experiment (tudíž poměr blížící se k 1) pro vybranou linku, nýbrž i klesající rozptyl poměrů v rámci výsledků pro jednotlivé energie.

Podívejme se, jak se v jednotlivých iteracích vyvíjel relativní rozdíl mezi experimentálními a simulovanými CPS pro všechny pozice a jednotlivé radionuklidy. Postupně tedy ukážeme grafy pro 40 K v obrázku 3.15, pro 238 U v obrázku 3.16 a pro 232 Th v obrázku 3.17. Ve všech tří grafech jsou vykreslena data pouze pro hlavní píky, které byly tradičně 1461 keV (K), 1764 keV (U) a 2614 keV (Th).

Z grafů vidíme, že jsme provedli celkem 8 iterací pro draslíkový zdroj, 5 iterací pro uranový a 6 iterací pro thoriový zdroj pro dosažení verze modelu kterou považujeme za finální. Bylo by samozřejmě možné iterovat dále a ladit drobné rozdíly, nicméně další iterace již nepovažujeme za rozumné. Drobné rozdíly mezi experimentálními a simulovanými výsledky budou vždy vznikat a budou příčinou parametrů, které nejsme schopni postihnout - jako nehomogenity v rozložení radionuklidů, složení a hustotě materiálů apod.

Podívejme se na výsledky získané poslední, z našeho pohledu finální, verzí (resp. všemi třemi verzemi rozložení K, U a Th) modelu v tabulce 3.6. Jedná se o verzi původní tabulky 3.4, tentokrát pro finální rozložení zdroje. Stejně jako u původní tabulky uvádíme poměry simulovaných/experimentálních CPS. Hodnota 1 označuje absolutní shodu, hodnoty <1 ukazují na podhodnocující model, hodnoty >1 naznačují nadhodnocení modelu oproti skutečnosti.



Obrázek 3.15: Vývoj CPS v píku 1461 ke
V v průběhu iteračního zpřesňování draslíkového zdroje



Obrázek 3.16: Vývoj CPS v píku 1764 ke
V v průběhu iteračního zpřesňování uranového zdroje



Obrázek 3.17: Vývoj CPS v píku 2614 ke
V v průběhu iteračního zpřesňování thoriového zdroje

energie	PK	PU	$\mathbf{P0}$	PTh	PU	P0	PTH
keV	0m	$0\mathrm{m}$	$0\mathrm{m}$	$0\mathrm{m}$	$0.4\mathrm{m}$	$0.4\mathrm{m}$	$0.4\mathrm{m}$
1461	0,99	0,99	$1,\!02$	0,91	1,12	$1,\!01$	1,10
186	1,00	$0,\!97$	$1,\!16$	$0,\!99$	$1,\!00$	$1,\!09$	$0,\!98$
295	0,97	$1,\!01$	$1,\!17$	$0,\!98$	$1,\!00$	$1,\!08$	$1,\!02$
352	0,96	$1,\!01$	$1,\!21$	$1,\!05$	$1,\!03$	$1,\!03$	$0,\!94$
609	0,97	$1,\!01$	$1,\!14$	$0,\!99$	$1,\!06$	$1,\!07$	$0,\!96$
1120	0,94	$1,\!01$	$1,\!14$	$1,\!04$	$1,\!06$	$1,\!08$	$0,\!95$
1764	0,96	$0,\!99$	$1,\!17$	$1,\!01$	$1,\!04$	$1,\!06$	$0,\!98$
2204	0,92	$0,\!98$	$1,\!19$	$0,\!98$	$1,\!02$	$1,\!03$	$0,\!94$
239	1,09	$1,\!04$	$1,\!02$	$1,\!00$	$1,\!17$	$1,\!14$	$1,\!00$
338	1,05	$1,\!09$	$1,\!08$	$1,\!01$	$1,\!11$	$1,\!11$	$1,\!02$
583	1,11	$1,\!03$	$1,\!05$	$0,\!99$	$1,\!12$	$1,\!11$	$1,\!01$
911	1,09	$1,\!03$	$1,\!05$	$0,\!98$	$1,\!12$	$1,\!18$	$0,\!97$
969	1,10	1,10	$1,\!03$	$0,\!97$	$1,\!13$	$1,\!15$	$1,\!02$
2615	1,08	$1,\!07$	$1,\!05$	$1,\!00$	$1,\!14$	$1,\!14$	$1,\!01$
energie	PK	PU	$\mathbf{P0}$	PTh	3mPU	PK-PU	
energie keV	PK 1m	PU 1m	P0 1m	PTh 1m	3mPU	PK-PU	
energie keV 1461	PK 1m 1,02	PU 1m 1,01	P0 1m 0,97	PTh 1m 0,99	3mPU 0,94	PK-PU 1,02	
energie <u>keV</u> 1461 186	PK 1m 1,02 1,12	PU 1m 1,01 1,02	P0 1m 0,97 1,05	PTh 1m 0,99 1,02	3mPU 0,94 0,95	PK-PU 1,02 1,05	
energie keV 1461 186 295	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1{,}01 \\ 1{,}02 \\ 0{,}98 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm P0} \\ 1{\rm m} \\ 0{,}97 \\ 1{,}05 \\ 1{,}07 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0{,}99 \\ 1{,}02 \\ 1{,}05 \end{array}$	3mPU 0,94 0,95 1,01	PK-PU 1,02 1,05 1,00	
energie keV 1461 186 295 352	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ {\rm 1m} \\ {\rm 1,02} \\ {\rm 1,12} \\ {\rm 1,11} \\ {\rm 1,09} \end{array}$	PU 1m 1,01 1,02 0,98 1,04	$\begin{array}{c} {\rm P0} \\ {\rm 1m} \\ {\rm 0,97} \\ {\rm 1,05} \\ {\rm 1,07} \\ {\rm 1,05} \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \end{array}$	3mPU 0,94 0,95 1,01 0,94	PK-PU 1,02 1,05 1,00 1,05	
energie keV 1461 186 295 352 609	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0 \\ 1m \\ 0,97 \\ 1,05 \\ 1,07 \\ 1,05 \\ 1,04 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \end{array}$	$3 mPU \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 1,01 \\ 0,94 \\ 0,95$	PK-PU 1,02 1,05 1,00 1,05 1,06	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ 0,97\\ 1,05\\ 1,07\\ 1,05\\ 1,04\\ 1,07\end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3 \text{mPU} \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 1,01 \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 0,99 \end{array}$	PK-PU 1,02 1,05 1,00 1,05 1,06 1,06	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0 \\ 1m \\ 0,97 \\ 1,05 \\ 1,07 \\ 1,05 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,08 \end{array}$	PTh 1m 0,99 1,02 1,05 1,01 1,02 1,01 1,04	$\begin{array}{c} 3 \mathrm{mPU} \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 1,01 \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 0,99 \\ 0,97 \end{array}$	PK-PU 1,02 1,05 1,00 1,05 1,06 1,06 1,02	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764 2204	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \\ 1,08 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \\ 1,01 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ 0,97\\ 1,05\\ 1,07\\ 1,05\\ 1,04\\ 1,07\\ 1,08\\ 1,06\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \\ 1,04 \\ 1,07 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3mPU\\ 0,94\\ 0,95\\ 1,01\\ 0,94\\ 0,95\\ 0,99\\ 0,97\\ 0,99 \end{array}$	$\begin{array}{c} PK-PU \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,00 \\ 1,05 \\ 1,06 \\ 1,06 \\ 1,02 \\ 1,06 \end{array}$	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764 2204 239	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \\ 1,08 \\ 1,12 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \\ 1,01 \\ 1,09 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0 \\ 1m \\ 0,97 \\ 1,05 \\ 1,07 \\ 1,05 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,08 \\ 1,06 \\ 1,11 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,02 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3 \mathrm{mPU} \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 1,01 \\ 0,94 \\ 0,95 \\ 0,99 \\ 0,97 \\ 0,99 \\ 1,04 \end{array}$	$\begin{array}{c} PK-PU\\ 1,02\\ 1,05\\ 1,00\\ 1,05\\ 1,06\\ 1,06\\ 1,02\\ 1,06\\ 1,08 \end{array}$	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764 2204 239 338	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \\ 1,08 \\ 1,12 \\ 1,11 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \\ 1,01 \\ 1,09 \\ 1,10 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ 0,97\\ 1,05\\ 1,07\\ 1,05\\ 1,04\\ 1,07\\ 1,08\\ 1,06\\ 1,11\\ 1,12\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,02 \\ 1,04 \\ 1,04 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3mPU\\ 0,94\\ 0,95\\ 1,01\\ 0,94\\ 0,95\\ 0,99\\ 0,97\\ 0,99\\ 1,04\\ 0,99 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK-PU} \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,00 \\ 1,05 \\ 1,06 \\ 1,06 \\ 1,02 \\ 1,06 \\ 1,08 \\ 1,09 \end{array}$	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764 2204 239 338 583	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \\ 1,08 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,08 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \\ 1,01 \\ 1,09 \\ 1,10 \\ 1,06 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ 0,97\\ 1,05\\ 1,07\\ 1,05\\ 1,04\\ 1,07\\ 1,08\\ 1,06\\ 1,11\\ 1,12\\ 1,11\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,02 \\ 1,04 \\ 1,03 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3mPU\\ 0,94\\ 0,95\\ 1,01\\ 0,94\\ 0,95\\ 0,99\\ 0,97\\ 0,99\\ 1,04\\ 0,99\\ 1,02 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK-PU} \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,00 \\ 1,05 \\ 1,06 \\ 1,06 \\ 1,02 \\ 1,06 \\ 1,08 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,09 \end{array}$	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764 2204 239 338 583 911	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \\ 1,08 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,08 \\ 1,13 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \\ 1,01 \\ 1,09 \\ 1,10 \\ 1,06 \\ 1,07 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ 0,97\\ 1,05\\ 1,07\\ 1,05\\ 1,04\\ 1,07\\ 1,08\\ 1,06\\ 1,11\\ 1,12\\ 1,11\\ 1,12\end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,02 \\ 1,04 \\ 1,03 \\ 1,00 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3mPU\\ 0,94\\ 0,95\\ 1,01\\ 0,94\\ 0,95\\ 0,99\\ 0,97\\ 0,99\\ 1,04\\ 0,99\\ 1,02\\ 0,99\end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK-PU} \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,00 \\ 1,05 \\ 1,06 \\ 1,06 \\ 1,06 \\ 1,02 \\ 1,06 \\ 1,08 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,08 \end{array}$	
energie keV 1461 186 295 352 609 1120 1764 2204 239 338 583 911 969	$\begin{array}{c} {\rm PK} \\ 1{\rm m} \\ \hline 1,02 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,13 \\ 1,10 \\ 1,08 \\ 1,12 \\ 1,11 \\ 1,08 \\ 1,13 \\ 1,13 \\ 1,13 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PU} \\ 1{\rm m} \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 0,98 \\ 1,04 \\ 0,97 \\ 1,01 \\ 1,00 \\ 1,01 \\ 1,09 \\ 1,10 \\ 1,06 \\ 1,07 \\ 1,04 \end{array}$	$\begin{array}{c} P0\\ 1m\\ 0,97\\ 1,05\\ 1,07\\ 1,05\\ 1,04\\ 1,07\\ 1,08\\ 1,06\\ 1,11\\ 1,12\\ 1,11\\ 1,12\\ 1,13\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PTh} \\ 1{\rm m} \\ 0,99 \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,01 \\ 1,02 \\ 1,01 \\ 1,04 \\ 1,07 \\ 1,02 \\ 1,04 \\ 1,03 \\ 1,00 \\ 1,05 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3mPU\\ 0,94\\ 0,95\\ 1,01\\ 0,94\\ 0,95\\ 0,99\\ 0,97\\ 0,99\\ 1,04\\ 0,99\\ 1,02\\ 0,99\\ 1,01 \end{array}$	$\begin{array}{c} {\rm PK-PU} \\ 1,02 \\ 1,05 \\ 1,00 \\ 1,05 \\ 1,06 \\ 1,06 \\ 1,02 \\ 1,06 \\ 1,08 \\ 1,09 \\ 1,09 \\ 1,08 \\ 1,04 \end{array}$	

Tabulka 3.6: Poměry simulovaných/experimentálních ploch jednotlivých píků - profinální rozložení zdroje

Podívejme se na aktualizovaný přehled koncentrací přírodních radionuklidů v materiálech stavebních prvků v tabulce 3.7. Tato data tedy nahrazují původní koncentrace z tabulky 3.1.

stavební prvek	$^{40}\mathrm{K}$	^{238}U	²³² Th
PK	4350 ± 40	24 ± 1	$3,7 \pm 1,0$
PU	58 ± 4	310 ± 20	$4,0\pm1,0$
$\mathbf{P0}$	$2,2\pm0,5$	$2{,}1\pm0{,}3$	$2{,}0\pm0{,}3$
PTh	90 ± 4	42 ± 3	220 ± 20
KV1	156 ± 10	3557 ± 150	2177 ± 100
KV2	156 ± 10	3557 ± 150	2177 ± 100
KK	14460 ± 500	$2,5\pm0,3$	$2{,}0\pm0{,}2$
KU	94 ± 7	14820 ± 500	106 ± 6
KTh	94 ± 7	754 ± 30	6618 ± 200
zemina	570 ± 40	70 ± 7	38 ± 4
podlaha	430 ± 50	40 ± 4	20 ± 3
zdivo	375 ± 30	45 ± 5	30 ± 4
vnější omítka	270 ± 30	13 ± 2	$7{,}8\pm0{,}8$
vnitřní omítka	310 ± 30	15 ± 2	$8,0\pm0,9$
zidka	480 ± 40	45 ± 4	41 ± 3

Tabulka 3.7: Hmotnostní aktivity přírodních radionuklidů ve stavebních prvcích základny - finální verze modelu.

Nyní považujeme model za dostatečně přesně aproximující reálnou situaci. Než přejdeme k finální verifikaci, podívejme se na porovnání modelových a experimentálních spekter. Doposud jsme se zabývali pouze porovnáním ploch vybraných píků, které jsme vybrali jako objektivnější kritérium pro posuzování přesnosti modelu. Nicméně měřili (a v iterační části i simulovali) jsme celá spektra.

Pro zajímavost uvedeme i ukázku porovnání celých spekter. Nebudeme se blíže zabývat stanovením míry jejich shody a ponecháme je pouze k vizuálnímu posouzení. Ukázku uvádíme pro dvě pozice 1 m nad PU a těsně nad PTh. Celé spektrum pro pozici 1 m nad PU jsou uvedeno v obrázku 3.18, ve obrázcích 3.19 a 3.20 jsou uvedeny detaily tohoto spektra.

Obdobný komentář platí pro spektra těsně nad PTh, kdy celé spektrum vidíme v obrázku 3.21, za kterým následují detaily tohoto spektra - obrázek 3.22 a obrázek 3.23.



Obrázek 3.18: Porovnání simulovaných a experimentálních spekter pro finální verzi modelu.



Obrázek 3.19: Detail porovnání simulovaného a měřeného spektra, geometrie 1 m nad PU.



Obrázek 3.20: Detail porovnání simulovaného a měřeného spektra, geometrie 1 m nad PU.



Obrázek 3.21: Porovnání simulovaných a experimentálních spekter pro finální verzi modelu - geometrie těsně nad PTh.



Obrázek 3.22: Detail na oblast zahrnující významné píky dceřinných produktů $^{232}{\rm Th}:$ 727 keV, 794 keV, 860 keV, 911 keV a dvojpík 965 keV + 969 keV.



Obrázek 3.23: Detail na některé drobné rezervy modelu - dole. Konkrétně vidíme chybějící píky 1621 a 1631 keV od dceřinných produktů ²³²Th, které jsme kvůli nízkým výtěžků (cca 1,5%) do modelu nezadali.

3.4 Finální verifikace

V předchozí kapitole jsme popsali postupné zpřesňování modelu - jeho geometrie a zejména aktivity jednotlivých stavebních prvků tak, aby model maximálně odpovídal reálné situaci. Při zpřesňování modelu jsme využili sadu experimentálních spekter měřených pomocí HPGe detektoru. Jak jsme ukázali, dosáhli jsme dobré shody mezi experimentálními a modelovanými spektry. Nyní tedy ukážeme nezávislé porovnání tohoto výsledného modelu s další sadou spekter. Využijeme odlišné detektory - konkrétně sadu scintilačních detektorů s různými typy krystalů (CeBr -2" x 2", LaBr - 2" x 2"a NaI(Tl) - 3" x 3"). Správnost ověříme na několika vybraných pozicích, kdy některé budou shodné s pozicemi využitými při zpřesňování modelu a některé budou nové. Vybereme také některé pozice geometricky mimo oblast, kde jsme prováděli zpřesňování. Bude se tedy jednat o extrapolaci výsledků a tato data nám pomohou odhadnout, jaká je správnost modelu mimo region, kterému jsme se věnovali v předchozích kapitolách.

Součástí experimentální části této práce bylo proměření vybraných pozici, které blíže popíšeme při rozboru jednotlivých výsledků pomocí sady scintilačních detektorů (CeBr - 2" x 2", LaBr - 2" x 2"a NaI(Tl) - 3" x 3"). Doba nabírání spekter byla pro většinu pozic 15 min (vyjímečně 30 min, tam kde byl signál slabší).

Modelová část experimentu obnášela zadání předem hotových a verifikovaných modelů jednotlivých detektorů do modelu základny. Popis detektorů včetně jejich verifikace je uveden v příloze této práce (kapitola Dodatek A Verifikace modelů detektorů). Obdobně jako v předchozí části jsme skórovali celá spektra pomocí tally F8 s energetickými biny, které odpovídaly experimentálnímu nastavení jednotlivých sond - to bylo lehce odlišné u každého detektoru, obvykle 30 keV - 3 MeV po 1024 kanálech. Zadali jsme též příslušné energetické rozlišovací schopnosti pomocí FT (Tally Treatment) GEB (Gaussian energy broadening). Ve výpočtech byly opět využity metod redukce variance, stejně jao v předchozích případech jsme použili DXTRAN sféru.

Pozn.: Modely detektorů byly vytvořeny do jednotlivých universů s číslováním buněk, ploch a materiálů v předem daných číselných intervalech. Je tak možné používat všechny modely detektorů současně v jednom modelu a pomocí transformací přidělených každému detektoru je libovolně posouvat, případně rotovat.

Další detaily ohledně ověřovacích geometrií a simulací uvedeme při rozboru jednotlivých pozic.

3.4.1 Ověření přesnosti modelu směrem do výšky

Nejprve se zaměříme na ověření správnosti simulace pole záření nad standardem PK. Od provozovatelů základny jsme dostali informaci, že standard PK je z hlediska jeho aktivity nejvíce diskutabilní. Na rozdíl od PU a PTh není tvořen betonem a jeho dlouhodobá časová stabilita (zejména s ohledem na vlhkost prostředí a předcházející transport ze základny v Bratkovicích) je tak problematická. Nabrali jsme celkem 4 spektra v různých výškách - konkrétně (0, 1, 1,5 a 2) m nad PK. Použili jsme scintilační detektor s krystalem CeBr - 2" x 2". Ukázku experimentálního uspořádání - detektor ve výšce 1,5 m vidíme na obrázku 3.24.



Obrázek 3.24: Fotografie z měření a modelový ekvivalent: geometrie 1,5 m nad PK, detektor CeBr.

Porovnání provedeme opět na úrovni spekter - opět spíše k vizuálnímu posouzení a dále na úrovni porovnání ploch píků. U scintilačních detektorů obecně už nebudeme schopni identifikovat tolik píků jako u polovodičového detektoru. U této geometrie konkrétně budeme porovnávat pouze plochy píku 1461 keV pro všechny čtyři výšky.

Nejprve uvedeme porovnání ploch píků v tabulce 3.8 a stejná data v jednoduchém sloupcovém grafu, kde lépe uvidíme význam intervalů nejistot.

Tabulka 3.8: Porovnání CPS v píku 1461 keV pro detektor s krystalem CeBr nad PK padem.

	PK	ΡK	PK	PK
	0 m	$1 \mathrm{m}$	$1,5~\mathrm{m}$	$2 \mathrm{m}$
experiment: CPS	7,137	2,768	$1,\!043$	0,869
model: CPS	8,017	2,826	$1,\!033$	$0,\!834$
$\mathrm{model}/\mathrm{experiment}$	1,123	$1,\!021$	$0,\!990$	0,960

Než přejdeme ke spektrům, zařadíme krátkou rozvahu ohledně nejistot prezentovaných výsledků. Nejistota experimentálních CPS je poměrně jednoduchá, je dána nejistotou počtu impulzů v píku (nejistotu stanovení času nyní můžeme zanedbat). Počet impulzů v píku je zatížen zejména nejistotou, která vychází z metody stanovení jeho plochy - v našem případě je hlavním činitelem kvalita prokladu píku modifikovanou Gaussovou funkcí. Ta samozřejmě závisí na počtu impulzů v pících. V grafu 3.25 vidíme, že při zvětšení výšky detektoru nad povrchem z 1 m na 1,5 m, klesla četnost v píku významně, zatímco nejistota prakticky ne. Důvodem je fakt, že spektra ve výšce 1,5 m a 2 m byla nabírána 1800 s, zatímco spektra ve výšce 0 m a 1 m pouze 900 s.

Modelovaná data jsou zatížena mnohem větší nejistotou. Samotný výpočet má díky použití vysokokapacitního clusteru v rámci možností relativně malou nejistotu - v rozsahu 1-5 % na bin u geometrií těsně nad povrchem, 4-9 % na bin u geometrií v 1 m a už vyšší 6-17 % na bin u geometrie 2 m nad povrchem. Další dílčí nejistotu tvoří opět nejistota spojená s metodou vyhodnocení plochy píku, tj. prokladu Gaussovou funkcí. Hlavní podíl na celkové nejistotě ovšem má odchylka modelu od reality. Závěry o velikosti této odchylky vyslovíme na konci této kapitoly, prozatím jí konzervativně považujeme za 20 %.



Obrázek 3.25: Grafické znázornění poměrů ploch píků 1461 keV pro různé výšky detektoru s krystalem CeBr nad PK padem.

Dosáhli jsme dobré shody experimentálních a měřených CPS. Nad očekávání dobrá je zejména shoda experimentu a modelu ve vyšších výškách, tj. 1,5 m a 2 m.

Nyní se ještě podívejme na celá spektra, resp. porovnání modelových a simulovaných spekter postupně pro všechny čtyři pozice detektoru zvlášť v obrázcích 3.26 a 3.27. A na detaily spektra v oblasti píku 1461 keV pro všechny výšky v obrázku 3.28.



Obrázek 3.26: Porovnání modelovaných a experimentálních spekter pro detektor CeBr ve výšce 0 m (nahoře) a 1 m (dole) nad PK.





Obrázek 3.27: Porovnání modelovaných a experimentálních spekter pro detektor CeBr ve výšce 1.5 m (nahoře) a 2 m (dole) nad PK.



Obrázek 3.28: Detail předchozích spekter na oblast píku 1461 keV pro CeBr ve výšce 0 a 1 m (nahoře) a ve výšce 1.5 a 2 m (dole) nad PK.

3.4.2 Ověření přesnosti modelu směrem do místnosti

V předešlé části jsme porovnali měřená a modelovaná spektra v různých výškách a to i mimo výšku, kde jsme prováděli zpřesňování modelu. Nyní posoudíme přesnost modelu v horizontálním směru od oblasti pozemních standardů směrem do místnosti. Využijeme k tomu spektrum, které jsme nabrali opět detektorem CeBr 2" x 2"a to ve vzdálenosti 3 m od standardu PU směrem do místnosti v nulové výšce nad povrchem.

Princip vyhodnocení měřeného spektra, stejně jako způsob výpočtu a vyhodnocení modelovaných spekter, zůstal stejný jako v předchozím případě. Vybrali jsme tři píky, pro které budeme opět prezentovat poměry model/experiment v tabulce 3.9 a následně ukážeme opět porovnání celých spekter v obrázku 3.29.

Tabulka 3.9: Porovnání CPS pro detektor CeBr v nulové výšce 3 m od PU.

	experiment	model	model/experiment
$609 \mathrm{keV}$	0,518	$0,\!549$	1,06
$1461 { m ~keV}$	0,277	$0,\!298$	$0,\!93$
$1764~{\rm keV}$	$0,\!033$	$0,\!036$	1,10



Obrázek 3.29: Porovnání simulovaného a měřeného spektra 3 m směrem od PU v nulové výšce.

3.4.3 Ověření přesnosti modelu nad pozemními standardy

Při posledním nezávislém ověření správnosti modelu jsme se zaměřili na standard PU. Tentokrát jsme proměřovali výšku těsně nad standardem s využitím dvou různých detektorů. Použili jsme scintilační sondy s krystaly LaBr - 2" x 2"a NaI(Tl)-3" x 3".

Princip vyhodnocení měřených spekter, stejně jako způsob výpočtu a vyhodnocení modelovaných spekter zůstal stejný jako v předchozích případech. Na rozdíl od předchozích geometrií však budeme tentokrát schopni rozlišit víc píků.

Podívejme se na tabulku 3.10 výsledných CPS ve vybraných pících pro oba detektory.

Tabulka 3.10: Porovnání CPS v pících 352 keV, 609 keV, 1120 keV 1764 keV pro detektory NaI(Tl) a LaBr těsně nad PU padem.

energie		NaI(Tl)			LaBr	
keV	experiment	model	poměr	experiment	model	poměr
352	40,99	43,57	1,06	4,13	4,46	$1,\!08$
609	$21,\!92$	$23,\!09$	$1,\!05$	2,87	$3,\!36$	$1,\!17$
1120	6,01	5,77	$0,\!96$	-		-
1764	4,84	5,27	$1,\!09$	-		-

I zde platí obdobný komentář týkající se nejistoty stanovených hodnot jako u předchozího případu. Chyba stanovení experimentálních dat je opět dána především kvalitou prokladu píků. Bohužel při měření detektorem LaBr došlo k blíže nespecifikovatelné chybě a píky vyšších energií jsou zcela deformované. Problém uvidíme zejména u spekter, které budeme prezentovat dále.

Nejistota simulovaných dat má opět stejné dílčí nejistoty jako v předchozím případě. Můžeme očekávat, že odchylka modelu od skutečnosti je v této geometrické pozici minimální - konzervativně budeme brát 10 %.

I nad standardem PU jsme dosáli velmi dobré shody měřených a experimentálních dat. Relativní rozdíly mezi simulovanými a měřenými spektry byly pro všechny píky u NaI(Tl) detektoru menší než 10 %.

Dále budeme prezentovat spektra pro NaI(Tl) v obrázku 3.30 i LaBr 3.31 opět pouze pro vizuální porovnání. U spektra LaBr pozorujeme již zmíněný problém, který znemožňuje správnou kalibraci a obecně korektní vyhodnocení spektra.





Obrázek 3.30: Celé spektrum pro Nai(Tl) (nahoře) a detail spektra pro nízko
energetické píky U (dole).





Obrázek 3.31: Celé spektrum pro LaBr (nahoře) a detail spektra pro nízkoenergetické píky U (dole).

3.4.4 Porovnání různých detektorů na pozici PU0

V předchozí části jsme měřili a simulovali spektra různých detektorů těsně nad standardem PU. Srovnání modelu a experimentu jsme prezentovali pouze pro spektra NaI(Tl) a bohužel deformované spektrum LaBr. Ve stejné pozici jsme však měřili i pomocí zbývajících detektorů, tj. pomocí scintilační sondy s krystalem CeBr a pomocí detektoru 40 % HPGe, který jsme dříve použili k nabrání dat pro zpřesňování našeho modelu.

Srovnání těchto spekter sice nesouvisí přímo se simulacemi Monte Carlo, ovšem je zajímavé z pohledu vlastností různých typů detektorů. V této ukázce výsledků již neprezentujeme spektrum LaBr.

Podíváme se tedy nejprve na srovnání všech tří kompletních spekter v obrázku 3.32 a pro lepší možnost porovnání uvádíme dva detaily toho spektra pro energie 150-750 keV a 1000-2000 keV v obrázku 3.33. Prezentujeme tedy pouze



Obrázek 3.32: Porovnání spekter měřených v pozici PU0 čtyřmi různými detektory.




Obrázek 3.33: Detail měřených spekter v pozici PU0 pro energie 150-750 keV (nahoře) a 1-2 MeV (dole).

3.4.5 Hodnocení přesnosti modelu

V závěru této kapitoly ještě stručně okomentujeme přesnost s jakou námi vytvořený model popisuje reálnou kalibrační základnu ve Stráži pod Ralskem.

Tato přesnost bude silně záviset na geometrické pozici na základně. Pochopitelně nejpřesnější bude modelová aproximace v oblasti, kde jsme prováděli zpřesňování modelu - tj. nad povrchovými standardy do výšky 1 m. Zde můžeme odchylku modelu od reality určit pomocí poměrů model/experiment, které jsme prezentovali v tabulce 3.6 a graficky je přiblížili v grafech 3.15 - 3.17 v podkapitole Iterační postup zpřesňování modelu. Přesnost modelu bude pochopitelně různá (přestože pouze mírně odlišná) pro jednotlivé zdroje K, U a Th, jelikož každý z těchto zdrojů je definován zvlášť a vyžaduje tím pádem samostatný výpočet.

Podíváme-li se do tabulky 3.6 vidíme, že zmíněné poměry model/experiment jsou pro různé energie v rámci jednoho zdroje mírně odlišné. Nabízí se tedy otázka, který z poměrů definuje nejlépe odchylku modelu od reality. Konzervativně bychom mohli brát vždy ten poměr, který je nejvíc odlišný od 1 v rámci jednoho zdroje (K, U nebo Th). Rozdílné přesnosti modelu u rozdílných energií jednoho zdroje jsou zejména důsledkem zadání pouze omezeného počtu energetických linek přírodních radionuklidů. Připomeňme, že jsme do modelu zahrnuli pouze linky s radiačním výtěžkem vyšším než 1 %.

Na základě gamaspektrometrické praxe víme, že u mnohých linek přírodních radionuklidů dochází k interferencím s linkami dalších radionuklidů, či někdy i s linkami stejného radionuklidu, kdy rozdíl blízkých energií je pod rozlišovací schopností detektoru. Rozlišení detektoru je v našem modelu simulováno, ovšem nejsou v něm zadány všechny linky přírodních radionuklidů. Tudíž u některých energií může být rozdíl mezi modelem a realitou ovlivněn nedokonalým zadáním energetické distribuce zdroje v modelu více než u jiných energií. Zadání energetických linek s nižšími výtěžky (pod 1 %), je samozřejmě možné a teoreticky povede k dalšímu zpřesnění modelu. Tuto možnost ponecháváme jako další prostor k dodatečnému zpřesnění modelu, pokud si to budoucí požadavky z praxe vyžádají. Současné metodiky kalibrace však interferující linky ke kalibraci nevyužívají, proto nepovažujeme za nutné provádět dodatečné zpřesnění modelu v těchto energetických oblastech.

V oblasti pozemních standardů je tak přesnost modelu dána přímo tabulkou 3.6. Vidíme zde, zejména vysokou přesnost v nulové výšce, kdy prakticky všechna data ukazují maximální rozdíl do 10 %. Výjimku tvoří standard P0, kde jsou koncentrace minimální a projeví se zde ve velké míře statistický charakter záření. V rostoucí výškou ukazují výsledky stále dobrou shodu experimentu a modelu, kdy minimálně pro K a U zdroj můžeme stále konzervativně počítat s přesností do 10 %. Největší odchylku vykazují linky Th zdroje, kdy v některých místech s obecně nižší koncentrací Th převyšují rozdíly mírně 10 % hranici.

Přesnost modelu mimo oblast pozemních standardů, kde jsme prováděli zpřesňování modelu jsme ilustrovali na dvou příkladech - měření nad PK do výšky 2 m a měření na zemi směrem do středu místnosti. U všech geometrií mimo oblast pozemních standardů byla odchylka modelu od reality menší než 10 %.

U obou geometrií jsme viděli, že spektra se blíží pozaďovým hodnotám. Směrem do výšky bylo zřejmé, že při zvýšení výšky detektoru nad povrchem z 1,5 m na 2 m došlo k minimální změně plochy píku 1461 keV a to i při relativně dlouhé době nabírání spektra (1800 s). I s ohledem na tento fakt jsme žádná měření ve vyšších výškách neprováděli.

Stejně tak spektrum nabírané na podlaze 3 m od PU odráželo víceméně pouze přírodní radionuklidy v obsažené podlaze, kdy jejich aktivita je minimální. Oblast ve větší vzdálenosti než jsou 3 m od pozemních standardů jsme již neproměřovali. Zde už se blížíme poli záření z karotážních standardů, které jsou oproti pozemním velmi aktivní. Tuto oblast nepovažujeme za vhodnou pro kalibrace a ověřování detektorů, tak jak jsme ji pojali v této práci. V blízkosti karotážních standardů je totiž poměrně vysoký gradient toku částic, tudíž jen malá změna polohy detektoru může způsobit velkou změnu v měřeném spektru (nebo dávkovém příkonu). Využití této části základny by vyžadovalo extrémně přesné stanovení pozice a výšky detektoru a docházelo by k zbytečnému zanášení chyby do měření.

Posledním zmíněným faktem se pomalu dostáváme k otázce celkového pole záření gama uvnitř základny. Na tuto problematiku se podíváme v následující kapitole, kde představíme možnosti výpočtů, které lze s hotovým modelem provádět.

Kapitola 4

Možnosti výpočtů s modelem

Model je tedy hotový a ověřený. Nyní ukážeme příklady výpočtů, které lze s modelem realizovat. Již v úvodu této práce jsme zmínili, že se jedná pouze o ukázku výsledků, které je možné s modelem získat. Za stěžejní část této práce považujeme tvorbu a ověření správnosti modelu samotného. Výpočty, které budeme prezentovat, jsou pro nás zajímavé z ohledem na momentální potřeby měření na základně. Nicméně předpokládáme, že model bude v budoucnu využíván i na další výpočty, které si vyžádá praxe.

4.1 Dávkové veličiny

Jedna z veličin, která se nabízí k výpočtům, je dávkový příkon ve vzduchu. Jedním z důvodů je fakt, že mnohé z terénní spektrometrů tuto veličinu stanovuje a nabízí se tedy ji kontrolně proměřit v rámci kalibrace spektrometru. Dalším důvodem je fakt, že tato veličina je obecně jedním z nejčastějších parametrů, jakým se popisuje pole záření gama v různých situacích.

V tomto oddíle se budeme věnovat nejdříve dávkovému příkonu gama ve vzduchu, který jsme počítali v celém vnitřním objemu základny a jehož mapy poskytují zajímavý celkový přehled o poli záření gama uvnitř základny. Dále se budeme zabývat výsledky simulací Kermy ve vzduchu ve vybraných verifikačních bodech, které je možno srovnat s výsledky měření a provést tak dodatečnou verifikaci modelu (rozložení i absolutní aktivity radionuklidů). Poznatky prezentované v této podkapitole byly publikovány v článku [JOHNOVÁ A KLUSOŇ 2022].

4.1.1 Parametry výpočtů

První ze simulovaných veličin, kterým jsme se věnovali, byl dávkový příkon ve vzduchu. Mechanismu, jakým různé přístroje tuto veličinu stanovují je se může mírně lišit. Pro nás je tato veličina momentálně zajímavá spíše z pohledu obecného přehledu o poli záření gama na základně a nebudeme se jí snažit navázat na žádná skutečná měření. Pro aproximaci **dávkového příkonu ve vzduchu** jsme použili skórování energie deponované v buňkách síťové struktury - Meshtally. Konkrétně jsme použili meshtally typu 3 (rmesh3 total). Základní princip této volby v MCNP jsme popsali v teoretické části práce. Síť byla zadána v celém vnitřním objemu základny, který je vyplněn převážně vzduchem. Výjimku tvoří jihovýchodní roh základny, kde jsou za stínící zídkou umístěny vrstevnaté standardy, přičemž tato struktura sahá do výšky 155 cm nad povrchem. Ve vizualizacích tuto oblast nevykreslujeme. Síť je umístěna i přes tuto oblast ovšem skórované hodnoty v tomto sektoru nemají správný fyzikální smysl. Jako kompromis mezi zachováním prostorové informace a časovou únosností výpočtu jsme zvolili síť s elementem 30x30x30 cm. Vysoká časová náročnost těchto výpočtů je dána zejména faktem, že možnosti metod redukce variance pro meshtally jsou značně omezené. Výpočet navíc prodlužuje i povaha samotné veličiny.

Mapy dávkových příkonů sice poskytují zajímavé přehledy, nicméně považujeme za nezbytné ukázat i výpočet veličiny lépe srovnatelné s reálně měřenými daty. Pro verifikaci výpočtu dávkových veličin jsme proto zvolili veličinu **Kerma ve vzdu-chu**. Na straně experimentální budeme mít hodnotu stanovenou ze scintilačních spekter (tři různé NaI(Tl) spektrometry) metodou dekonvoluce prezentovanou v [KLUSOŇ 2010]. Na straně výpočetní budeme skórovat tok energie bodovým de-tektorem (*F5) s použitím konverzní energeticky závislé funkce (ta je dána hmotnostními součiniteli přenosu energie ve vzduchu). Při výpočtu navíc přenásobujeme (*fm5*) tally konstantou, převádějící výsledek výpočtu na jednotky pGy/h. Celé zadání tally (příklad pro jednu z verifikačních pozic o souřadnicích (-920 150 100) - tj. nad středem PK ve výšce 1 m) je tedy následující:

```
fc5 Kerma ve vzduchu (PK:1m) [pGy/s]
*f5:p -920 150 100 0
fm5 1.6022e2
de5 0.004 0.005 0.006 0.008 0.01 0.015 0.02 0.03
            0.04 0.05 0.06 0.08 0.1 0.15 0.2 0.3
            0.4 0.5 0.6 0.8 1.0 1.5 2.0 3.0
            4.0 5.0 6.0 8.0 10.0 15.0 20.0
df5 74.2 38.2 22.0 9.16 4.61 1.27 0.511 0.148
            0.0669 0.0406 0.0305 0.0243 0.0234 0.0250 0.0268 0.0288
            0.0295 0.0297 0.0296 0.0289 0.0280 0.0257 0.0236 0.0207
            0.0189 0.0178 0.0168 0.0157 0.0151 0.0143 0.0142
```

Vzhledem k principu, jakým tally F5 pracuje, je tento výpočet relativně málo časově náročný, ovšem platí zde víceméně podobná upozornění jako při používání DXTRAN sféry u předešlých výpočtů a je nutné hlídat konvergenci tally.

4.1.2 Výsledky

Přejděme k ukázkám výsledků výpočtů dávkových veličin a některým závěrům, které z nich plynou.

Dávkový příkon ve vzduchu

V první části tedy ukažme výstupy výpočtů s Meshtally, které jsme nejprve převedli z formátu, které vrací TMESH typu 3 RMESH3: total (tj. $MeV \cdot cm^3 \cdot particle$) na nám bližší nGy/h. K přepočtu jsme použili fakt, že $1MeV=1,602\times10^{-13}$ J, dále pak hustotu vzduchu $\rho = 1,205\times10^3$ g/cm³ a celkovou aktivitu zdroje (celkový počet fotonů vyprodukovaný všemi zdroji v modelu za 1 s).

Jak bylo ukázáno v předchozí kapitole, model definuje každý z přírodních radionuklidů (K, U, Th) zvlášť a pro každý radionuklid je třeba provést zvláštní výpočet. Výstupy výpočtů jsou tedy tři 3D matice hodnot. Můžeme samozřejmě prohlížet každý z radionuklidů zvlášť, nicméně pro následující ukázky jsme všechny tři matice sečetli.

Podíváme se nyní na některé vybrané řezy výslednou maticí dávkových příkonů ve vzduchu. Připomeňme zde schéma rozložení padů na základně obrázkem 4.1. V obrázku jsou vyznačeny 4 řezy (2 rovinami YZ a 2 rovinami XZ), v nichž budeme prohlížet výsledky dále.



Obrázek 4.1: Schéma rozložení padů na základně s vyznačením řezů pohledů.

Nejprve se podívejme na řez maticí výsledků v rovině XY (tedy rovině řezu, ve kterém je vyvedeno schéma 4.1) v několika výškách v obrázku 4.2, konkrétně ve výškách (0-30) cm, (90-120) cm, (210-240) cm a (300-330) cm.

Rezy v dalších výškách touto rovinou jsou pak k nahlédnutí v příloze B této práce.



Obrázek 4.2: Vybrané řezy rovinou XY

Na první pohled je zřejmé, že karotážní standardy jsou mnohem silnějšími zářiči než standardy pozemní. Ve výšce (60-90) cm je již dávkový příkon od pozemních standardů jen málo odlišný od pozadí a ve výšce (150-180) cm již pole záření nad pozemními standardy prakticky odpovídá pozadí na základně. Zatímco u karotážních standardů ještě ve výšce 300 cm vidíme dávkové příkony odpovídající zhruba 5-ti násobku pozaďových hodnot.

Bílá pole v prvních dvou řezech, tj. ve výškách (0-30) cm, (90-120) cm, odpovídají oblasti karotážních vrstevnatých standardů a betonové stínící zídky, která je obklopuje. Jak jsme zmínili, způsob definice tally a přepočtu jejích výsledků dává správný fyzikální smysl jen pro buňky vyplněné vzduchem. Proto hodnoty z této oblasti až do výšky 155 cm, kde zídka končí, nevykreslujeme.

V praxi se často setkáváme se stanovením dávkového příkonu ve vzduchu ve výšce 1 m (pro navázání na dozimetrickou veličinu PPDE - tj. příkon prostorového dávkového ekvivalentu - v 1 m nad zemí). Z našich simulací však vidíme, že chce-li si uživatel ověřit tuto veličinu na svém přístroji, pozemní standardy nejsou příliš vhodné, jelikož v 1 m je již jejich dávkový příkon malý ve srovnání s pozadím a více se zde projeví fluktuace způsobené statistickým charakterem záření, vlastností přístroje a fluktuace pozadí. Pro ověření takového přístroje je mnohem lepší volit pozici nad karotážními standardy KU a KK, případně mezi nimi (v 1 m již je směrově pole dostatečně homogenní). Dávkové příkony zde přesahují 10-ti násobek pozadí na základně, díky čemuž se méně projeví dříve zmíněné fluktuace, ovšem dávkový příkon ještě není natolik vysoký, aby se dostal mimo rozsah běžných přístrojů. Zároveň však zde má pole velmi vysoký gradient a jen malá změna v poloze detektoru bude mít za následek významnou změnu ve výsledné hodnotě dávkového příkonu.

Podívejme na řezy dalšími rovinami. Nejprve ukážeme řez rovinou YZ pro X = -310 cm v obrázku 4.3 a dále pro X = 320 cm v obrázku 4.4.



Obrázek 4.3: Řezy rovinou YZ, kde vidíme pole záření KK (vlevo) PU (vpravo).



Obrázek 4.4: Druhý ukázaný řez rovinou YZ, na kterém můžeme vidět pole záření vlevo KTh a vpravo K0.

V posledním řezu ještě nahlédneme na situaci v rovině XZ, kdy je řez veden rovinou procházející středy všech karotážních standardů. Vidíme zde slabé pole standardu KK a dále dvě významná pole dávkových příkonů od KU a od KTh. Těsně nad zemí můžeme rozlišit pole záření KU a KTh, zatímco ve vyšší výšce už jsou obě pole spojena. V obrázku 4.5 v pravé spodní části, tj. souřadnicích x=(800-1000) cm a z=(0-150) cm vidíme zřetelný obrys stínící zídky, za kterou jsou ukryté vrstevnaté standardy, která částečně kolimuje záření od karotážních padů - máme na mysli obdélníkový tvar nižších dávkových příkonů v pravém dolním rohu obrázku. Navíc vidíme i slabé pole dávkových příkonů od vrstevnatých padů, kdy zídka plně neodstíní fotony z těchto padů.



Obrázek 4.5: Řez rovinou XZ, procházející karotážními standardy.

Komentujme nyní nejistoty prezentovaných výpočtů. Celková nejistota je kombinací celé řady vstupních nejistot, z nichž velkou část tvoří nejistota spojená s přesností s jakou model aproximuje skutečnou situaci. Této nejistotě jsme věnovali prostor v podkapitole Hodnocení přesnosti modelu, zde jen shrneme základní poznatky. Již jsme ukázali, že v geometrické oblasti, kde jsme prováděli iterančí zpřesňování modelu je nejistota spojená s použitím modelu oproti reálné situaci do 8 %. I mimo oblast, ve které jsme model vylepšovali (ověřeno do výšky 2 m a vzdálenosti 3 m směrem do místnosti), byla nejistota stále menší než 10 %. A jak jsme již několikrát komentovali, hodnoty impulzů v pících (a zde i dávkových příkonů) jsou v této oblasti na úrovni pozadí. Potenciální měření v těchto oblastech je tak málo efektivní.

Druhou část celkové nejistoty dat dávkových příkonů pak tvoří nejistota samotného výpočtu. Jak jsme popsali dříve, používali jsme skórování pomocí meshtally, což je metoda, která sama o sobě neumožňuje použití většiny metod redukce variance. Navíc se jedná o odhad energie deponované ve vzduchu zářením gama - což je fyzikální proces o poměrně malé pravděpodobnosti. Je tedy zřejmé, že tento výpočet je velmi náročný na výpočetní čas. Pro zlepšení statistiky jsme nastavili relativně velký objem elementu sítě (30x30x30) cm jako kompromis mezi přijatelným výpočetním časem a prostorovým rozlišením výsledků. Pro výpočet jsme použili vysokokapacitní výpočetní cluster a doba výpočtu každého ze souborů (opět se počítá K, U a T zdroj zvlášť) byla nastavena na 12 h. I přes tyto kroky dosahovala nejistota výpočtu až 10 % u některých elementů sítě v oblasti do 2 m nad zemí a až 30 % v oblasti okolo 5 m nad zemí. Zde navíc mluvíme o nejistotách pro jeden z výpočtů (K, U či Th), celková nejistota se pak ještě navýší při součtu všech tří matic dávkových příkonů.

Kerma ve vzduchu Přejděme nyní k výsledkům simulace Kermy ve vzduchu. Výsledky uvedeme v tabulce 4.1 srovnání simulovaných a experimentálních hodnot (přesněji řečeno hodnot získaných dekonvolucí naměřených scintilačních spekter). Ukázkou hodnot kermy ve vzduchu stanovené modelem a experimentem navíc prezentujeme další způsob ověření přesnosti modelu.

pozice	výška	kermový příkon	[nGy/h]
	[m]	experiment	simulace
ΡK	0.5	146 ± 7	138 ± 18
PU	0.5	127 ± 6	124 ± 16
P0	0.5	55 ± 3	49 ± 7
PTh	0.5	180 ± 9	169 ± 22
\mathbf{PK}	1	117 ± 6	111 ± 14
PU	1	104 ± 5	100 ± 13
P0	1	68 ± 4	60 ± 7
\mathbf{PTh}	1	132 ± 7	121 ± 16

Tabulka 4.1: Kerma ve vzduchu - srovnání simulovaných a experimentální hodnot

Stejná data ještě ukážeme formou grafu 4.6 a přidáme informaci o podílech jednotlivých zdrojů (K, U, Th) na celkové Kermě v daném místě.





Obrázek 4.6: Kerma ve vzduchu- provnání experiment vs. model. Data pro pozice ve výšce 1 m (nahoře) a ve výšce 0.5 m (dole).

4.2 Spektra

Jedním ze způsobů, jak lze model využít, je samozřejmě napočítání kompletních spekter, teoreticky na libovolné pozici na základně. Stačí do modelu základny vložit model detektorů a provést jednotlivé výpočty K, U a Th a výsledné spektrum sečíst.

Použití modelu tímto způsobem je relativně jednoduché a rychlé. Kroky doporučeného postupu jsou následující:

- Model detektoru, který se bude vkládat do modelu základny by měl být číslován 100-999. Máme na mysli čísla buněk, ploch a materiálů.
- Celý model detektoru by měl být vložen do zvláštního universu s libovolným číslem. Na buňku ohraničující tento univers je pak aplikována transformace.
- Po vložení modelu detektoru do modelu základny je třeba vyjmout příslušnou buňku ohraničující univers detektoru z buňky vzduchu uvnitř základny (buňka 25) - používá se symbol #.
- Dále je třeba vložit požadovanou tally (včetně energetických binů a energetické rozlišovací schopnosti pro požadovaný detektor) a případné metody redukce variance.
- S detektorem lze libovolně posouvat pomocí transformace v rozsahu vnitřního prostoru základny. Tj. X ∈ (-1120, 1120), Y ∈ (-600, 600), Z ∈ (0, 600).
- Vypočtené spektrum stačí vynásobit časem měření (případně ponechat bez násobení, tj. normované na 1 s.). Ostatní opravné koeficienty (celková aktivita a výtěžek) jsou již součástí modelu.
- Každé počítané celkové spektrum bude mít tři dílčí výpočty K, U, Th tato tři spektra je třeba sečíst.

Tuto možnost použití modelu jsme poměrně rozsáhle ilustrovali v podkapitole Finální verifikace. Nyní tedy pouze ilustrujeme tento způsob aplikace modelu na dvou ukázkách simulovaných spekter. První z ukázek je v obrázku 4.7 jde o porovnání tří spekter pro 3" x 3"NaI(Tl) detektor v řezu rovinou YZ, pro X = 320 cm. Kdy jedno ze spekter je nad P0, druhé uprostřed místnosti, třetí nad KTh, vše ve výšce 1 m. Druhá ukázka je potom v obrázku 4.8 a jedná se o spektra polovodičového HPGe detektoru posouvaného v rovině XZ v úrovni středů karotážních standardů (tj. Y = -355 cm) ve výšce 50 cm. První pozice je nad K0, druhá nad KK a třetí nad KU.



Obrázek 4.7: Ukázka simulace spektra NaI(Tl) pro 3 různé polohy podél osy Y, pro X=320 cm a Z=100 cm.

111



Obrázek 4.8: Ukázka simulace spektra HPGe pro 3 různé polohy podél osy X, pro Y=-355 cm a Z=50 cm.

112

4.3 Porovnání příspěvků různých stavebních prvků k celkové fluenci částic

Viděli jsme tedy celkový pohled na pole záření uvnitř základny z pohledu dávkového příkonu i spektra v různých pozicích uvnitř základny. Ukázali jsme i podíl jednotlivých prvků na kermě ve vzduchu na vybraných pozicích. Nyní navážeme na poslední myšlenku a budeme posuzovat podíl jednotlivých stavebních prvků na poli záření gama v různých místech. Vrátíme se tak k úvodní, motivační kapitole praktické části, kde jsme sporem dokázali, že standardy nejsou jediným zdrojem záření gama. V závěru praktické části se podíváme, jak velký je podíl standardů a všech dalších stavebních prvků na poli záření ve vybraných místech základny.

V této části použijeme jednu z voleb na kartě tally treatment (FT). Volba má označení ICD a umožňuje uživateli sledovat zdrojové buňky částic, ze kterých bylo vytvořeno skóre v tally, kterou tato volba upravuje. Zadání je velmi jednoduché, zadá se pouze FTn ICD (kde n je číslo tally, kterou má tato funkce sledovat) a dále je nutno zadat kartu FUn, kde definujeme uživatelské biny - v případě FT ICD jsou to čísla zdrojových buněk. Volba ICD funguje pouze pro "detector tally", tedy tally typu F5. Příklad zadání je tedy následující:

f5:p 920 400 104 0 ft ICD fu5 20 22 23 24 17 25 111 11 112 121 12 122 131 13 132 141 14 142

Zde tedy definujeme Tally typu F5 pro fotony v bodě X=920 Y=400 Z=104 - detektor se středem krystalu 1 m nad středem PTh, se sférou vyloučení 0 cm. Dále zapínáme funkci ICD a definujeme zdrojové buňky 20, 22, 23, 24 (pozemní standardy), 17 (podlaha), 25 (země pod podlahou), 11, 12, 13 a 14 (zdi - S, J, V a Z) a omítky: vnější (111, 121...) a vnitřní (112, 122 ...).

Bohužel volba ICD funguje pouze pro tally typu F5, nikoliv pro F8, kterou jsme používali u spekter. Nicméně abychom se příliš nevzdalovali od spektrometrického přístupu, zadáme opět okna pomocí energetických binů a bude nás zajímat fluence pouze částic vybraných energií. Konkrétně zvolíme opět 1461 keV (pro K zdroj), 1764 keV (pro U) a 2614 keV (pro Th). Zadání zdrojů zůstává stejné, tj. stále se generují celá spektra jako v předchozích případech. Pro ukázku výsledků budeme skórovat pouze v těchto třech oknech.

Skórovat můžeme samozřejmě v libovolných pozicích uvnitř základny, pro ukázku výsledků však vybereme pouze několik pro nás zajímavých pozic. Nejprve se podíváme na zastoupení různých stavebních prvků ve fluenci fotonů hlavní energií nad středy standardů, tj. 1461 keV nad PK, 1764 keV nad PU a 2614 keV nad PTh v tabulce 4.2 a následně na vybrané pozice formou koláčových grafů v obrázcích 4.9 pro PU a 4.10 pro PTh.

Tabulka 4.2: Procentuální zastoupení stavebních prvků na fluenci částic vybraných energií nad standardy PK, PU a PTh ve výškách 0 m a 1 m

	1461 keV - PK		1764 keV - PU			
	0m	1m	0m	1m	0m	1m
S stěna	1,16	$3,\!95$	2,64	$19,\!57$	2,09	7,84
J stěna	0,73	$2,\!31$	0,73	$4,\!11$	$0,\!45$	$1,\!41$
V stěna	0,12	0,36	0,24	$1,\!30$	$2,\!06$	$7,\!85$
Z stěna	1,84	$7,\!48$	0,52	$3,\!05$	$0,\!09$	0,26
podlaha	0,76	15,71	0,93	29,22	$0,\!68$	13,77
PTh	0,00	$0,\!00$	0,00	$0,\!02$	94,59	68, 49
PU	0,00	0,01	$94,\!93$	42,43	$0,\!00$	$0,\!00$
ΡK	95, 39	70,11	0,00	$0,\!08$	0,00	$0,\!00$
P0	0,00	$0,\!00$	0,00	$0,\!01$	0,00	$0,\!01$
země	$0,\!00$	$0,\!07$	0,01	$0,\!19$	$0,\!03$	$0,\!37$



0,0380

0,0026 0,0007

podlaha





Obrázek 4.9: Procentuální zastoupení jednotlivých stavebních prvků na fluenci částic vybraných energií nad standardem PU.



Obrázek 4.10: Procentuální zastoupení jednotlivých stavebních prvků na fluenci částic vybraných energií nad standardem PTh.

Co se týče nejistot prezentovaných výsledků, platí stejný komentář jako u předchozích částí této kapitoly. Opět je výsledná nejistota kombinací nejistoty dané samotným výpočtem a nejistoty způsobené odchylkou modelu od skutečnosti. Již víme, že odchylka modelu od reality je v této geometrické oblasti (nad pozemními standardy do výšky 1 m) nižší než 10%. Nejistota plynoucí z výpočtu je v tomto případě závislá na buňce. Některé z buněk mají bohužel velmi malou pravděpodobnost příspěvku do tally a jejich podíly tak byly zatíženy významnou chybou i při relativně dlouhé době výpočtu. Obecně se jednalo o prvky s podílem na fluenci částic menším než 0.01%. V naší práci nepovažujeme za potřebné stanovení takto nízkých podílů, které nemají z detekčního hlediska žádný význam, a tím pádem se nebudeme zabývat ani jejich vysokou relativní nejistotou. Všechny tally významných stavebních prvků měly relativní nejistotu výpočtu menší než 2%.

V tabulce 4.2 jsme viděli náznak vývoje podílu jednotlivých stavebních prvků na fluenci částic nad standardy. Pro hladší přechod jsme dopočítali data pro výšky 20, 40 a 60 cm a společně s daty pro 0 a 100 cm z předchozí tabulky je vykreslíme v grafech 4.11 a 4.12. Tentokrát prezentujeme data nikoliv formou procentuálních podílů, ale v formou fluence části (části/s) hlavních energií - tedy 1461 keV nad PK, 1764 keV nad PU a 2614 keV nad PTh.



Porovnání příspěvků různých zdrojů



Obrázek 4.11: Ukázka vývoje příspěvku jednotlivých zdrojů s rostoucí výškou nad standardy PK a PU.

Fluence 2614 keV fotonů nad PTh Porovnání příspěvků různých zdrojů



Obrázek 4.12: Ukázka vývoje příspěvku jednotlivých zdrojů s rostoucí výškou nad PTh standardem. Stejný graf je pro lepší představu o rozdílech ukázán v logaritmickém (nahoře) a lineárním měřítku (dole) osy y.

Než uzavřeme tuto kapitolu, podívejme se na některá zajímavá pozorování plynoucí z prezentovaných výsledků.

- Pozice nad PTh mají prakticky stejný podíl zastoupení záření ze S a V stěny
 pad se nachází v rohu základny.
- V pozici "na zemi"je u všech tří aktivních standardů vždy signál v detektoru tvořen z 95 % samotným padem (máme na mysli signál od hlavních radio-nuklidů v každém padu).
- Na rozdíl od nulové výšky je ve výšce 1 m zastoupení padu na celkovém signálu (od hlavního radionuklidu) nejnižší pro U (pouze 42 % zatímco pro K a Th je to cca 70 %).
- Podíl zastoupení záření přicházejícího ze země stoupá s energií (klesající lineární součinitel zeslabení s rostoucí energií) a je u všech padů vyšší pro výšku 1 m. V nulové výšce je záření efektivně odstíněno samotným padem. Ve výšce 1 m však již zorném pole detektoru zabírá i velký kus oblasti pokryté pouze základovou deskou, která je mnohem slabší než samotný pad (pouze 0 cm na rozdíl od 80 cm padů).
- Podíly V a Z stěny narůstají/klesají s přibližováním se resp. vzdalováním se od nich.
- Na pozicích nad PTh je projevuje odstínění vlivu J stěny krycí zídkou, za kterou jsou umístěny vrstevnaté karotážní standardy.

Touto poslední podkapitolou jsme se tedy vrátili k otázce, které jsme se věnovali v motivačním experimentu v úvodu celé praktické části. Ukázali jsme zde, že s hotovým a ověřeným modelem můžeme pro libovolnou pozici na základně kvantifikovat velikost příspěvku padů a ostatních stavebních prvků do spektra. Tímto ukončíme i ukázku možností využití modelu. Hlavní cíl práce, tj. vytvoření a verifikace samotného modelu, byl splněn a jeho další aplikace do praxe budeme přizpůsobovat konkrétním požadavkům provozovatelů základny.

Závěr

Hlavním cílem této disertační práce bylo vytvořit nástroj, který by umožňoval rozšíření možností využití kalibrační základny pro terénní spektrometry ve Stráži pod Ralskem. Kalibrační základna je jedním z mála podobných zařízení na světě. Díky preciznosti, se kerou byly kalibrační standardy pro tuto základnu vytvořeny, slouží jako spolehlivý nástroj pro kalibraci pozemních spektrometrů pro vybrané geometrie měření. Nicméně s rozvíjejícími se metodami detekce - zejména novými typy detektorů a novými metodami měření a zpracování dat - se výrobci a uživatelé detekčních systému, nejen v ČR, často setkávají s nedostačujícími nástroji pro jejich kalibrace.

V rámci této práce jsme tak hledali řešení, které umožní využít plný potenciál kalibrační základny a zajistí možnost rozšíření jejího využití pro uspokojení současných i budoucích požadavků spektrometrické praxe. V práci jsme zvolili přístup založený na vytvoření maximálně přesného modelu celé základny, který pomocí simulací metodou Monte Carlo umožní řešit uživatelem zadaný požadavek. Hlavním cílem práce tedy bylo vytvoření a ověření tohoto modelu. Jeho aplikace do praxe bude realizována v budoucnu na základě konkrétních požadavků provozovatelů základny.

V teoretické části jsme shrnuli nejdůležitější poznatky z oblasti gamaspektrometrie s důrazem na některá specifika stanovení koncentrace přírodních radionuklidů. Dále jsme se věnovali problematice kalibrací terénních spektrometrů, podrobně jsme popsali základní metodiku kalibrace a následně jsme věnovali prostor moderním přístupů ke kalibracím. Popsali jsme též podrobně českou kalibrační základnu ve Stráži pod Ralskem a stručně představili i další podobná zařízení ve světě. V poslední kapitole teoretické části jsme věnovali prostor metodě Monte Carlo.

Praktickou část jsme uvedli motivačním experimentem, v rámci kterého jsme ukázali, že pole záření gama na základně je sumou příspěvků kalibračních standardů a dalších stavebních prvků.

Na tento experiment jsme navázali hlavní částí celé práce a to popisem tvorby a zpřesňování modelu základny. V první fázi jsme vytvořili základní verzi modelu, kterou jsme verifikovali porovnáním s experimentálními spektry měřenými pomocí polovodičového spektrometru. V této fázi jsme nedostali uspokojivou shodu modelu a experimentu a přistoupili jsme k postupnému zpřesňování modelu. Finální verzi modelu jsme následně verifikovali porovnáním se spektry měřenými scintilačními detektory a dostali velmi dobrou shodu měřených a simulovaných dat. Tímto jsme naplnili hlavní cíl této práce.

V poslední kapitole praktické části jsme představili některé možnosti výpočtů s modelem. Nejprve jsme prezentovali ukázky popisu pole záření uvnitř základny pomocí dávkového příkonu ve vzduchu a kermy ve vzduchu. Dále jsme stručně ukázali možnost výpočtu spektra libovolného detektoru v libovolném místě základny. V závěrečné ukázce jsme věnovali prostor stanovení vlivu různých stavebních prvků na spektra nabíraná v různých bodech základny. Jednalo se pouze o příklady možností využití našeho modelu, jak jsme již zmínili, další aplikace našeho modelu budeme diskutovat přímo s provozovateli základny.

Stěžejním výstupem této práce je existence přesného a ověřeného modelu základny, který, jak věříme, bude nadále využíván v rámci běžné činnosti základny a samozřejmě může být do budoucna i upravován či zpřesňován na základě aktuálních požadavků.

Literatura

- [ADAMS 1961] Adams, J.A.S. Radiometric determination of thorium, uranium, and potassium in the Field. Geol. Soc. America Spec. (Abstracts of paper submitted for the meeting in Cincinnati, November 2-4,1961): p 125. 1961.
- [ADAMS AND FRYER 1964] Adams, J.A.S., G.E. Fryer. Portable gamma-ray spectrometer and field determination of thorium, uranium, and potassium. The Natural Radiation Environment (Ed by J.A.S Adams and W.M.Lowder), University of Chicago Press, Chicago, pp 577-596. 1964.
- [ADSLEY ET AL. 1998] Adsley, I., J.S. Backhouse, A.L. Nichols, J. Toole. U-238 decay chain: resolution of observed anomalies in the measured secular equilibrium between Th-234 and daughter Pa-234m. Applied Radiation and Isotopes, Volume 49, Issues 9–11, Pages 1337-1344. 1998. ISSN 0969-8043, https://doi.org/10.1016/S0969-8043(97)10070-7.
- [BADAWI ET AL. 2022] Badawi, M., A. Hamzawy, A. Thabet. Hybrid analytical method for calibrating a standard NaI(Tl) gamma-ray scintillation detector using a lateral hexagonal radioactive source. AIP Advances 12, 065021. 2022. https://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0099399 [cit. 10.10.2022]
- [BECK ET AL. 1971] Beck, H.L., W.M. Lowder, J.E. McLaughlin. In situ external environmental gamma ray measurements utilizing Ge(Li) and NaI(Tl) spectrometry and pressurized ionization chambers. International Symposium on Rapid Methods for Measuring Radioactivity in the Environment, Nurnberg, Federal Republic of Germany, 5 - 7 July 1971, IAEA-SM-148/2: 499-513. 1971.
- [BILLINGS A HOVGAARD 1999] Billings, S.D., J. Hovgaard. Modeling detector response in airborne gamma ray spectrometry. Geophysics, v. 64, 1378-1392. 1999.
- [BOOTH 1992] Booth, T.E. Monte Carlo Variance Reduction Approaches for Non-Boltzmann Tallies. Los Alamos National Laboratory report LA-12433. December 1992.
- [BOOTH 1998] Booth, T.E. Pulse-height Tally Variance Reduction In MCNP Los Alamos National Laboratory report LA-UR-12448. 1998.
- [BOOTH ET AL. 2009] Booth, T.E., K. Kelley, S.S. McCready. Monte Carlo Variance Reduction Using Nested Dxtran Spheres. Nuclear Technology 168. p: 765-767. 2009. 10.13182/NT09-A9303.

- [BOOTH ET AL. 2012] Booth, T. MCNP Variance Reduction Examples LA-UR-12-25907.pdf. 10.13140/RG.2.1.4018.8646. 2012.
- [BOSON ET AL. 2006] Boson, J., K. Lidström, T. Nylén, G. Agren, L. Johansson. In situ gamma-ray spectrometry for environmental monitoring: a semi empirical calibration method. Radiat Prot Dosimetry. 121(3). p: 310-6. 2006. doi: 10.1093/rpd/ncl041.
- [BOSON ET AL. 2009] Boson J, A.H. Plamboeck, H. Ramebäck, G. Agren, L. Johansson. Evaluation of Monte Carlo-based calibrations of HPGe detectors for in situ gamma-ray spectrometry. Journal of Environ Radioact. 100(11), p: 935-40. 2009. doi: 10.1016/j.jenvrad.2009.06.006.
- [BULL 2008] Bull, J.S. Validation Testing of Pulse Height Variance Reduction in MCNP. Los Alamos National Laboratory report LA-UR-08-05076. August 2008.
- [Cinelli ET AL. 2006] Cinelli, G., L. Tositti, D. Mostacci, J. Baré. Calibration with MCNP of NaI detector for the determination of natural radioactivity levels in the field. Journal of Environ Radioact., Vol. 155–156, p: 31-37..2016. ISSN 0265-931X, https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2016.02.009.
- [ČSN IEC 1452] ČSN IEC 1452 (356639). Přístroje jaderné techniky- Měření emisí gama záření radionuklidů - Kalibrace a užití germaniových detektorů. Vydáno Praha 1998. [cit. 3.8.2022]
- [DIAMO] DIAMO, státní podnik, odštěpný závod Těžba a úprava uranu, Máchova 201, 471 27 Stráž pod Ralskem; více informací a kontakt na: http://gammastandard.com/
- [DICKSON A LøVBORG 1984] Dickson, B., L. Løvborg. An Australian facility for the calibration of portable gamma-ray spectrometers. Exploration Geophysics. 15. p: 260-262. 1984. 10.1071/EG984260.
- [DOE 2017] U.S. Department of Energy, Pre- and Post-Rehabilitation Source Reduction Modeling and Radiometric Surveys. Report z projektu Grand Junction Regional Airport Calibration Pads Rehabilitation Project.Vytvořeno 2017 dostupné na: https://www.energy.gov/lm/listings/calibration-facilitiesdocuments. [cit. 5.9.2022]
- [DURRANCE 1986] Durrance, E.M. Radioactivity in geology: principles and applications. Chichester: Ellis Horwood Limited. 1986.
- [GAMMA SURVEYOR2] GF Instruments, s.r.o., Purkynova 144, Brno. návod a specifikace dostupné: http://www.gfinstruments.cz/ [cit. 5.5.2020]
- [GEORADIS] Georadis s.r.o., Novomoravanská 321/41, Brno. návod a specifikace dostupné: http://www.georadis.com/cs/produkty/gt-40.html [cit. 14.5.2020]
- [GILMORE 2008] Gilmore, G.R. Practical Gamma-Ray Spectrometry, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Ltd. 2008. DOI:10.1002/978047086198

- [GRAAF 2011] Graaf, E.R. van der, J. Limburg, R.L. Koomans, M. Tijs. Monte Carlo based calibration of scintillation detectors for laboratory and in situ gamma ray measurements. J. Environ. Radioact. 102(3), p: 270-282. 2011.
- [GRASTY 1987] Grasty, R.L. The design, construction and application of airborne gamma ray spectrometer calibration pads – Thailand. Geological Survey of Canada Paper 87-10. 1987.
- [GRASTY ET AL. 1991] Grasty, R.L., P.B. Holman, Y. Blanchard. Transportable calibration pads for ground and airborne gamma ray spectrometers. Geol. Survey. Can. Paper 90-23. 1991.
- [HAND 1964] Hand, J.E. Instrumentation for aerial surveys of terrestrial gammaradiation. The Natural Radiation Environment, (Ed by J.A.S.Adams and W.M.Lowder), University of Chicago Press, Chicago, pp 687-704. 1964.
- [HENDRIKS ET AL. 2001] Hendriks P.H., J. Limburg, R.J. de Meijer. Fullspectrum analysis of natural gamma-ray spectra. J Environ Radioact. 53(3). p: 365-80. 2001. doi: 10.1016/s0265-931x(00)00142-9. PMID: 11379063.
- [HENDRIKS ET AL. 2002] Hendriks, P.H., G.M. Maučec, R.J. de Meijer. MCNP modelling of scintillation-detector gamma-ray spectra from natural radionuclides. App. Radiation and Isotopes, Vol. 57, Iss. 3, p: 449-457. 2002. ISSN 0969-8043, https://doi.org/10.1016/S0969-8043(02)00118-5.
- [HOFSTADTER 1948] Hofstadter, R. Alkali halide scintillation counters. Phys Rev 74, p: 100-101. 1948.
- [IAEA 1974] International Atomic Energy Agency. Recommended Instrumentation for Uranium and Thorium Exploration. Technical Reports Series No. 158, IAEA, Vienna. 1974.
- [IAEA 1976] International Atomic Energy Agency. Radiometric Reporting Methods and Calibration in Uranium Exploration. Technical Reports Series No. 174, IAEA, Vienna. 1976.
- [IAEA 1989] International Atomic Energy Agency. International Atomic Energy Agency, Construction And Use Of Calibration Facilities For Radiometric Field Equipment, Technical Reports Series No. 309, Vienna. 1989.
- [IAEA 2003] International Atomic Energy Agency. Guidelines for Radioelement Mapping Using Gamma Ray Spectrometry Data, IAEA, Vienna. 2003.
- [IAEA 2010] International Atomic Energy Agency. Radioelement mapping, Vienna, STI/PUB/1463. 2010. ISBN 978-92-0-106110-2.
- [JOHANSSON 1950] Johansson, S.A.E. Measurements of the energy of beta- and gamma-rays with a scintillation counter. Nature 165: 396. 1950.
- [JOHNOVA ET AL. 2014] Johnová, K., L. Thinova, S. Giammanco. Revealing the hidden faults in the SE flank of Mt. Etna using radon in-soil gas measurement. Radiation protection dosimetry 160(1-3):70-3. 2014. 160.10.1093/rpd/ncu092.

- [JOHNOVÁ 2014] Johnová, K. Stanovení obsahu přírodních radionuklidů metodou gama spektrometrie in situ a jejich korelace s koncentrací radonu v půdním plynu, diplomová práce, FJFI ČVUT v Praze. 2014.
- [JOHNOVÁ 2016] Johnová, K. Self-absorption corrections based on Monte carlo simulations, Acta Polytechnica CTU Proceedings, Vol 4/2016, p.27-33. 2016. https://doi.org/10.14311/AP.2016.4.0027
- [JOHNOVÁ A KLUSON 2022] Johnová, K., J. Kluson. Dose Rate Mapping Inside the Straz pod Ralskem Calibration Facility – Monte Carlo Approach. Radiation protection and Dosimetry, Vol 198, No.9-11 2022, Special Issue. 2022. https://doi.org/10.1093/rpd/ncac135
- [KHATER A EBAID 2017] Khater, A.E.M., Y.Y. Ebaid. The evaluation of the 1001.03 keV gamma emission absolute intensity using fundamental parameter method. Journal of Environmental Radioactivity, Vol. 180, Pages 120-126. 2017. ISSN 0265-931X, https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2017.10.006.
- [KIRKEGAARD A LøVBORG 1974] Kirkengaard, P., L. Løvborg. Computer modelling of terrestrial gamma-radiation fields. Riso Report No. 303. 1974.
- [KOCHER A AJOREEN 1985] Kocher, D.C., A.L. Sjoreen. Dose-rate conversion factors for external exposure to photon emitters in soil. Health Phys. 1985 Feb;48(2), p: 193-205. 1985. doi: 10.1097/00004032-198502000-00006. PMID: 3972585.
- [KDAIZ FJFI a SÚRO 2018] Kolektiv KDAIZ FJFI ČVUT a SÚRO v.v.i. *Ozáření z přírodního zdroje záření*. Výukový text KDAIZ FJFI, Listopad 2018.
- [KLUSON 2010] Klusoň, J. In-situ gamma spectrometry in environmental monitoring, Applied Radiation and Isotopes, 68(4-5), p: 529-535. 2010.
- [KULESZA ET AL. 2022] Kulesza, J.A., T.R. Adams, J.C. Armstrong, et al. MCNP Code Version 6.3.0 Theory & User Manual. Los Alamos National Laboratory Tech. Rep. LA-UR-22-30006, Rev. 1. Los Alamos, NM, USA. September 2022.
- [LNHB online] Laboratoire National Henri Becquerel. Atomic and Nuclear data tables, C.E.A. Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France, URL: http://www.lnhb.fr/nuclear-data/module-lara/. [cit. 16.2.2022]
- [LOVBORG ET AL. 1972] Løvborg, L., P. Kirkegaard, J. Rose-Hansen. Quantitative interpretation of the gamma ray spectra from geologic formation. Naturam Radiation Environment II., Adams J.A.S., Lowder W.M. and Gesell T.F, U.S. Dept. of Commerce, Springfield, Va., 155-180. 1972
- [LøVBORG ET AL. 1981] Løvborg, L., E.M. Christiansen, L. Botter-Jensen, P. Kirkegaard. Pad facility for calibration of gamma-ray measurements of rocks. Denmark. Forskningscenter Risoe. Risoe-R. No. 454. 1981.

- [LøVBORG 1984] Løvborg, L. The calibration of portable and airborne gamma ray spectrometers - theory, problems and facilities. Report Riso-M-2456, Roskilde. 1984.
- [LUND ONLINE] Chu, S.Y.F., L.P. WWW Ekström, R.B. Firestone. Table ofRadioactive Isotopes, database version*1999-02-28*. URL http://nucleardata.nuclear.lu.se/nucleardata/toi/ [cit. 8.1.2022]
- [MAFRAIT ET AL. 2023] Malfrait, P., J. Bobin, A. de Vismes Ott. Spectral unmixing of multi-temporal data in gamma-ray spectrometry. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Vol. 1045. 2023. ISSN 0168-9002, https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.167547.
- [MANOVÀ A MATOLÍN 1995] Manová, M., M. Matolín. Radiometric map of the Czech Republic 1:500000. Czech Geol. Survey, Prague. 1995.
- [MARES 1979] Mareš, S. a kol. *Úvod do užité geofyziky*. SNTL, Praha. 1979.
- [MATOLÍN 1970] Matolín, M. Radioaktivita hornin Českého masívu. ÚUG Geofond pro ACADEMIA Praha. Praha 1970.
- [MATOLÍN 1970] Matolín, M. Radioaktivita hornin Západních Karpat. Universita Karlova. Praha. 1976
- [MATOLÍN A CHLUPÁCOVÁ 1997] Matolín, M., M. Chlupáčová. *Radioaktivní vlastnosti hornin*, kapitola v KOBR M. a kol.: Petrofyzika. Praha: Karolinum. 1997.
- [MATOLÍN ET AL. 2010] Matolín, M., P. Křesťan, V. Stoje, P. Veselý. Přestěhování kalibrační základny pro terénní spektrometry gama z Bratkovic do Stráže pod Ralskem. Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, tech. report. 2010.
- [McCONN ET AL. 2011] McConn, R.J., C.J. Gesh, R.T. Pagh, R.A. Rucker, R. Williams III. Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling. PNNL-15870 rev.1, Richland, WA: Pacific Northwest National Laboratory. 2011.
- [MCNP6 2014] MCNP6 Users Manual Code Version 6.1.1beta, LA-CP-14-00745. June 2014.
- [MINTY 1997] Minty, B.R.S. Fundamentals of airborne gamma ray spectrometry. AGSO Journal of Australian Geology and Geophysics, v. 17, n. 2, 39-50, 1997.
- [MULTALA 1981] Multala, J. The construction of gamma-ray spectrometer calibration pads, Geoexploration, Vol.19, Iss. 1, 33-46, ISSN 0016-7142. 1981. https://doi.org/10.1016/0016-7142(81)90011-9.

- [PARADIS ET AL. 2020] Paradis, H., C. Bobin, J. Bobin, J. Bouchard, et al. Spectral unmixing applied to fast identification of gamma-emitting radionuclides using NaI(Tl) detectors. Appl Radiat Isot. 2020 Apr; 158:109068. doi: 10.1016/j.apradiso.2020.109068. Epub 2020 Feb 1. PMID: 32174369.
- [ROJKO ET AL. 1975] Rojko, R., J. Zeman, M. Josovič, M. Staněk. Výstavba cejchovací základny pro terénní spektrometry gama. Závěrečná zpráva úkolu. Liberec, GPUP. 1975. Dostupné online: http://gammastandard.com/b4.htm
- [ROSHOLT 1959] Rosholt, J. N. Natural radioactive disequilibrium of the uranium series. U.S. Geological Survey Bullettin 1084-A. 1959.
- [SALDAGO ET AL. 2012] Salgado, C.M., L.E.B. Brandão, R. Schirru, C.M.N.A. Pereira, C.C. Conti. Validation of a NaI(Tl) detector's model developed with MCNP-X code. Progress in Nuclear Energy, Vol. 59, p: 9-25. 2012. ISSN 0149-1970, https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2012.03.006.
- [SHARMA ET AL. 2018] Sharma, P.K., N.K. Johri, G.B Raut. et al. Construction and Characterization of Transportable Calibration Pads for Calibration of Portable and Airborne Gamma Ray Spectrometers in India. J Geol Soc India 92, p: 281-285. 2018. https://doi.org/10.1007/s12594-018-1005-8
- [SHULTIS A FAW 2011] Shultis, J.K., R.E. Faw, An MCNP Primer. Kansas State University, Manhattan. 2011.
- [STROMSWOLD 1978] Stromswold, D. Monitoring of the Airport Calibration Pads at Walker Field, Grand Junction, Colorado for Long-Term Radiation Variation. U.S.Department of Energy Document, GJBX-99(78). 1978.
- [TIJS ET AL. 2016] Tijs, M., R. Koomans, H. Limburg. Towards a global network of gamma-ray detector calibration facilities. Exploration Geophysics, 47:4, p: 302-307. 2016 DOI: 10.1071/EG16016
- [UNSCEAR 1988] United nations scietific Committee On The Effect Of Atomic Radiation. *Exposures from natural Sources of Radiation*. Report 88. 1988.
- [WALLACE 2013] Wallace, J.D. Monte Carlo modelling of large scale NORM sources using MCNP. Journal of Environmental Radioactivity, Vol. 126, 2013, p: 55-60. 2013. ISSN 0265-931X, https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2013.06.009.
- [WALLACE 2016] Wallace, J. Establishing a NORM based radiation calibration facility. Journal of Env. Radioactivity, Vol. 155–156. p: 84-88. 2016. ISSN 0265-931X, https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2016.02.004.
- [WARD 1978] Ward, D.L. Construction of Calibration pads facility, Walker Fields, Grand Junction, Colorado. Tech. report U.S.Department of Energy Document, GJBX-37(78). 1978. Dostupné online https://www.osti.gov/servlets/purl/6826101. [cit. 8.10.2022]

- [WIELOPOLSKI ET AL. 2004] Wielopolski, L., Z. Song, I. Orion, A.L. Hanson, G. Hendrey. Basic considerations for Monte Carlo calculations in soil. Applied Radiation and Isotopes, Volume 62, Issue 1, 2005, p: 97-107. ISSN 0969-8043, https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2004.06.003.
- [SHI 2002] Shi, H.-X., B.-X. Chen, T.-Z. Li, D. Yun. Precise Monte Carlo simulation of gamma-ray response functions for an NaI(Tl) detector. Applied Radiation and Isotopes, Volume 57, Issue 4, p: 517-524. 2002. ISSN 0969-8043, https://doi.org/10.1016/S0969-8043(02)00140-9.
- [XU ET AL. 2020] Xu, J., J. Bobin, A. de Vismes Ott, C. Bobin. Sparse spectral unmixing for activity estimation in gamma-RAY spectrometry applied to environmental measurements. Appl Radiat Isot. Feb;156:108903. 2020. doi: 10.1016/j.apradiso.2019.108903.
- [XU ET AL 2022] Xu, J., J. Bobin, A. de Vismes Ott, C. Bobin, P. Malfrait. Analysis of gamma-ray spectra with spectral unmixing - Part I: Determination of the characteristic limits (decision threshold and statistical uncertainty) for measurements of environmental aerosol filters. Appl Radiat Isot. 2022 Apr;182:110109. doi: 10.1016/j.apradiso.2022.110109.
- [YÜCEI ET AL. 1998] Yücel, H., M. Cetiner, H. Demirel. Use of the 1001 keV peak of 234mPa daughter of 238U in measurement of uranium concentration by HPGe gamma-ray spectrometry. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment 413. p: 74-82. 1998.

Dodatek A Verifikace modelů detektorů

V několika kapitolách této práce jsme prováděli verifikaci modelu srovnáním simulovaných a měřených výsledků a ze shody či neshody těchto dvou přístupů jsme vyslovovali závěry o správnosti či nesprávnosti modelu základny. Při těchto výpočtech jsme používali modelové reprezentace skutečných detektorů (scintilačních i polovodičových). Nabízí se tedy otázka, jak přesné jsou modely detektorů, které jsme používali, resp. jak věrně popisují reálné spektrometry.

Tato otázka je sice důležitým prvkem celé této práce, proto jsme se rozhodli věnovat jí speciální kapitolu v rámci dodatků k práci.

Modely všech detektorů, které vstupovaly do této práce jsme vypracovali zvlášť a jejich geometrii jsme vždy zadávali tak, aby šli volně přenášet do dalších modelů. Použili jsme možnost definice tzn. Universů (Možnosti FILL a U implementované v MCNP). Filozofie tohoto zadání je následující. Prakticky v libovolném místě modelu vytvoříme buňku (FILL), která bude obsahovat vlastní vnitřní geometrii (=Universe) a na všechny struktury v této buňce se budou vztahovat pravidla této geometrie. Jednoduchým příkladem těchto pravidel je například použití transformací, kdy jednoduchým zadáním transformace lze posouvat či rotovat celý (libovolně komplikovaný) obsah buňky. Buňky, plochy a materiály byly rovněž číslovány tak, aby bylo umožněno snadné přenášení celého detektoru do jiného modelu.

Geometrii každého z modelů jsme tvořili na základně maximálního počtu dostupných informací, včetně námi vytvořených RTG snímků detektorů. U některých detektorů jsme prováděli drobné zpřesňování modelu na základě experimentálních dat. Bylo tomu tak zejména u modelu přenosného HPGe detektoru, kdy jsme hledali optimální tloušťku mrtvé vrstvy.

Dodejme ještě, že modely detektorů byly vytvořeny s vysokými nároky na detaily. Pro potřeby této práce by bylo jistě možné využít hrubší zjednodušení celého modelu, zejména vzhledem s přihlédnutím k charakteru zdroje, který jsme v práci používali. Zdroj (základna a její okolí) je rozměrově mnohem rozsáhlejší než samotný detektor, navíc obsahuje velké množství nejistot a nehomogenit, které nelze postihnout. Nicméně při tvorbě modelů detektorů jsme přistoupili k variantě detailnějšího popisu geometrii, než bylo pro tyto účely nutné. vyšší důraz na detaily nijak negativně neovlivnil výpočty s modelem základny a naopak umožnil využití modelů detektorů i pro laboratorní podmínky.

Přistupme nyní ke stručnému popisu a ukázce výsledků verifikace jednotlivých modelů.

HPGe

Nejdůležitějším detektorem při verifikacích modelu základny v této práci byl přenosný HPGe detektor, kterému budeme i zde věnovat největší pozornost.

Ukázku geometrie detektoru vidíme v následujícím obrázku.



Obrázek 13: Ukázka HPGe detektoru - modelové provedení

Verifikaci toho modelu jsme prováděli v laboratorních podmínkách pomocí bodových zdrojů typu EG3 (137 Cs, 241 Am, 60 Co, 57 Co, 152 Eu).

Součástí verifikace modelu detektoru byla i optimalizace tloušťky mrtvé vrstvy krystalu. Mrtvá vrstvy vzniká při výrobě detektoru a jedná se o neaktivní část krystalu na jeho povrchu. Tloušťka mrtvé vrstvy je důležitým parametrem detektoru a zásadně ovlivňuje zejména měření nízkých energií gamma. Přestože výrobce obvykle udává tloušťku mrtvé vrstvy, né vždy je ovšem tato informace dostatečně přesná a pokud se nabízí možnost vlastního stanovení, doporučuje se jí využít. V následujícím grafu máme ukázku účinnostních křivek (fotopíková detekční účinnost) - simulovaných pro různé tloušťky mrtvé vrstvy (hladké čáry) a fotopíkových detekčních účinností určených vyhodnocením spekter zdrojů EG3 umístěných do vzdálenosti 5 cm a 1 0cm od povrchu detektoru v jeho ose.

Při odhadu tlouštěk mrtvých vrstev jsme vycházeli z předchozích zkušeností, kdy prvním odhadem byla tloušťka 0,1 cm udávaná výrobcem. Dále jsme postupně simulovali tloušťky 0,01 cm; 0,15 cm a 0,12 cm. Nejlepší shodu, jak je možné vidět v obrázku 14, jsme dostali pro tloušťku 0,12cm.



Obrázek 14: Stanovení tloušťky mrtvé vrstvy přenosného HPGe detektoru. Horní graf odpovídá uspořádání s EG zdrojem ve vzdálenosti 5 cm od čela detektoru, spodní graf EG ve vzdálenosti 10 cm od detektoru (tj. nižší četnost, ale homogennější prozáření detektoru).

Po specifikaci mrtvé vrstvy jsme pokračovali dalšími verifikačními geometriemi pro zajištění maximální správnosti našeho modelu. Nejprve jsme prováděli měření s umístěním kalibračního zdroje v ose detektoru (tyto geometrie jsme pracovně označili označili jsme si jí pracovně A). Pozice A měla parametry 5, 10, 15, 20 a 25 cm - jedná o vzdálenosti zdroje EG od čela detektoru. Dále jsme provedli experiment s umístěním zdrojů EG ve dvou decetrovaných polohách B5 a C5. Zjednodušený nákres všech pozic je v obrázku 15.



Obrázek 15: Schéma verifikačních měření s EG. Verifikace přenosného HPGe.

Data z verifikačních geometrií A5 a A10 jsme již viděli u předchozího odstavce, který se zabýval výběrem mrtvé vrstvy. Nyní budeme prezentovat stejná data a dále data z ostatních geometrií a provedeme podrobnější analýzu výsledků. Pro následující analýzu jsme vždy fitovali přirozený logaritmus detekční účinnosti proti přirozenému logaritmu energie a fitovali jsme polynomem, tak jak je běžně doporučováno v polovodičové spektrometrii [GILMORE 2008]. V našem případě jsme fitovali polynomem 4. stupně. Analýza míry shody měřených a simulovaných účinnostní křivek byla provedena za pomocí metody nejmenších čtverců, tak jak je implementována v programu Matlab. U každé z geometrií tak vidíme dva grafy - v prvním je grafické porovnání obou účinnostních křivek (modelové a experimentální) a v druhém pak graf residuí (v absolutní hodnotě, tedy). Brali jsme tedy experimentální data a fitovali jsme je účinnostní křivkou, ovšem nikoliv s volnými parametry (jak by tomu bylo u běžného fitování) ale s fixními parametry danými právě modelovým výpočtem. Paratery modelových účinnostních křivek uvedeme na konci odstavce pro úplnost.

V každém z grafů jsou pak uvedeny výsledky metody nejmenších čtverců. Než přejdeme k samotným grafům, vysvětleme význam jednotlivých parametrů:

- SSE = Sum of Squares Due to Error, někdy také součet čtverců residuí, statistika určující celkovou odchylku experimentálních hodnot od naší účinnostní křivky.
- R-square, někdy také koeficient determinace, ukazuje, jaký podíl variability fitovaných experimentálních dat, odpovídá modelové účinnostní křivce. Tedy R-suare 0,9688 říká, že 96,88% dat je správně popsáno naší účinnostní křivkou.
- Adjusted R-square vznikl jako důsledek faktu, že koeficient R-square roste s
 počtem fitovaných bodů (tedy může se stát, že přidáváním dalších bodů se
 hodnota R-square blíží více k 1, přestože kvalita fitu se reálně nezlepšuje.
 Tento parametr je opraven na inflaci způsobenou počtem dat. Jeho hodnota
 může oproti R-square nabírat i záporných hodnota a to ve chvíli, kdy jsou
 obsažena data neodpovídající předpisu, kterými data fitujeme.
- RMSE = Root Mean Squared Error, jedná se o odhad standardní odchylky náhodné komponenty. Stanovuje se z SSE ovšem s uvážením počtu fitovaných bodů. Stejně jako u SSE platí, že s hodnotou blížící se k 0 dostáváme lepší fit.

Analýzy účinnostních křivek pro HPGe vidíme postupě v obrázku 16 pro geometrie A5, A10 a A15; dále v obrázku 17 pro A20, A25 a B5 a poslední v obrázku 18 pro geometrii C5.

Verifikace pomocí bodového zdroje ukázala vysokou přesnost s jakou model aproximuje skutečný detektor. Změříme se hlavně na parametry Adjusted R-square, který je v tomto případě nejvhodnějším pro posouzení míry shody experimentálních a vypočtených dat. Vidíme, že se naše výsledky mají Adjusted R-square mezi 0,993 a 0,9707, což vypovídá o vysoké míře shody obou dat. Vidíme, že nejhorší míru shody mají geometrie A25 (nejvzdálenější) a C5 (decentrovaná), což můžeme přisoudit v prvním případě nízké statistice u experimentálních dat a u druhého případu drobným nehomogenitám reálného detektoru, které nelze v modelu postihnout a projeví se u bočního ozáření. U obou geometrií (tedy A25 a C5) navíc vidíme, že prakticky všechna residua nabývají záporných hodnot, což zřejmě svědčí o drobné systematické chybě v modelu oproti realitě. V rámci naší práce považujeme model za více než přesný a další úpravy modelu opravující tuto systematickou chybu považujeme za neopodstatněné.







Obrázek 16: Porovnání simulovaných a měřených detekčních účinností pro model přenosného HPGe, geometrie A5, A10, A15.






Obrázek 17: Porovnání simulovaných a měřených detekčních účinností pro model přenosného HPGe, geometrie A20, A25, B5.



Obrázek 18: Porovnání simulovaných a měřených detekčních účinností pro model přenosného HPGe, geometrie C5

V rámci tohoto experimentu jsme mimo jiné stanovili energetickou rozlišovací schopnost detektoru. Uvádíme ji v grafu 19. V našich modelech prezentovaných v této práci, jsme tuto rozlišovací schopnost zadávali pomocí funkce GEB.



Obrázek 19: Energetická rozlišovací schopnost HPGe detektoru stanovená experimentálně.

Posledním dodatkem v této kapitole jsou parametry fitu modelových (a díky ukázce správnosti modelu) i experimentálních účinnostních křivek. Jelikož byl experiment prováděn s bodovým zdrojem, nemají tyto parametry pravděpodobně velký fyzikální význam, nicméně vzhledem k faktu, že jsme prezentovali křivky v předešlých grafech, považujeme za vhodné uvést i jejich parametry v tabulce 3.

Fitovali jsme funkcí: $f(x) = p_1 \cdot x^4 + p_2 \cdot x^3 + p_3 \cdot x^2 + p_4 \cdot x + p_5$

geometrie	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5
A5	-0.07835	2.039	-19.72	83.14	-132.1
A10	-0.07627	1.982	-19.16	80.81	-129
A15	-0.07347	1.911	-18.51	78.24	-126.6
A20	-0.07505	1.947	-18.81	79.38	-128.7
A25	-0.07235	1.883	-18.25	77.26	-126.2
B5	-0.0812	2.112	-20.43	86.37	-138
C5	-0.0813	2.122	-20.62	87.62	-141

Tabulka 3: Parametry účinnostních křivek prezentovaných v grafech 16 - 18.

Scintilační detektory

Ukažme ještě výsledky verifikací dalších použitých modelů detektorů (scintilačních). Jelikož tyto modely byly použity jako doplňkové, navíc většina parametrů verifikace - zejména experimentální uspořádání- je shodné s předchozím experimentem, nebudeme této části již věnovat tolik prostoru.

V obrázcích 20 a 21 vidíme ukázky porovnání modelů a RTG snímků, s jejichž využitím byly modely definovány.



Obrázek 20: Ukázka modelu CeBr detektoru a jeho RTG snímek.



Obrázek 21: Ukázka modelu NaI detektoru a jeho RTG snímek.

Experimentální část byla provedena s kalibračními zdroji ¹³⁷Cs, ²⁴¹Am, ⁶⁰Co. Z geometrií jsme měřili varianty A5, A10, A25 a C5 - značení odpovídá rozložení u HPGe detektoru ilustrované v obrázku 15.

Stanovení účinnostních křivek jako v případě HPGe by i v tomto případě bylo teoreticky možné. Ovšem počet bodů, pro které bychom mohli fotopíkovovu detekční účinnost stanovit, by byl silně omezený vlivem nízké energetické rozlišovací schopnosti scintilačních detektorů. Fit účinnostních křivek by pak byl zatížen vysokou nejistotou danou nízkým počtem bodů pro proklad. Pro ukázku výsledků verifikace scintilačních detektorů preferujeme porovnání ploch píků, které prezentujeme v tabulkách 4 (3" x 3"NaI(Tl)), 5 (2" x 2"CeBr) a 6 (2" x 2"LaBr). Uvedeny jsou poměry model/experiment pro plochy píků.

Tabulka 4: Poměry ploch píků (model/experiment) - detektor NaI(Tl) 3" x 3".

geometrie	59 keV	$661 { m keV}$	$1173 { m ~keV}$	$1332 \ \mathrm{keV}$
A5	1.15	1.08	1.03	1.02
A10	1.2	1.06	0.97	0.99
A25	0.94	1.08	1.12	1.08
C5	1.17	1.04	0.97	0.98

geometrie	59 keV	661 keV	$1173 \mathrm{~keV}$	1332 keV
A5	1.18	1.02	1.04	0.93
A10	0.97	1.09	0.94	0.95
A25	0.90	1.06	1.10	1.06
C5	1.26	1.11	1.07	1.07

Tabulka 5: Poměry ploch píků (model/experiment) - detektor CeBr 2" x 2".

Tabulka 6: Poměry ploch píků (model/experiment) - detektor LaBr 2" x 2".

geometrie	$59 \mathrm{keV}$	661 keV	$1173 { m ~keV}$	1332 keV
A5	0.86	0.97	1.01	0.93
A10	0.93	0.99	0.91	0.89
A25	0.88	1.07	0.96	0.89
C5	1.02	0.89	0.93	0.87

Výsledky ukázaly vysokou přesnost modelů detektorů

Pozn. Nejméně přesný se ukázal model detektoru LaBr. V naší práci jsme model tohoto detektoru nevyužili (vlivem chyby měřených dat) a proto jsme se vylepšováním modelu toht detektoru dále nezabývali. Nicméně možná příčina vyšší neshody modelu a experimentu pro detektor LaBr může spočívat ve problematice vlastní aktivity krystalu. Přírodní směs La obsahuje malé množství radioaktivního ¹³⁸La, při jehož přeměně je emitován foton (1436 keV (66%) nebo 189 keV (34%). Tyto linky mohou způsobovat interferenci s měřenými spektry a tento typ krystalu bývá často hodnocen jako nevhodný pro měření přírodních radionuklidů a nízkých aktivit.

Obdobně jako u polovodičového detektoru jsme i u scintilačních detektorů potřebovali znát energetickou rozlišovací schopnost. Tu jsme opět stanovili experimentálně a její závislosti na energii ukažme v obrázcích 22, 23 a 24.



Obrázek 23: Energetická rozlišovací schopnost CeBr 2" x 2".



Obrázek 24: Energetická rozlišovací schopnost La
Br2"x2".

Dodatek B Test redukce variance

V předchozí sekci jsme popsali tvorbu první verze modelu. Ještě než přejdeme k jeho verifikaci, uděláme menší odbočku týkající se efektivity výpočtů. Výpočty, kterými se zabýváme, jsou z jejich fyzikální podstaty časově velmi náročné a to i při možnosti využití vysokokapacitního výpočetního clusteru. Využijeme tedy metody redukce variance implementované v MCNP, jejichž principy jsme popsali v teoretické části této práce.

Z možností, které MCNP6 nabízí jsme pro aplikaci v našem modelu zvolili možnost DXTRAN sféry. Oprávněnost jejího použití v kombinaci s F8 tally (kterou využíváme ve většině výpočtů) byla ukázána v teorii a již dříve ověřena celou řadou benchmark testů realizovaných přímo tvůrci samotného kódu. Nicméně v naší práci jsme věnovali i menší pozornost vlastnímu testu použití této metody. Ilustrujeme tak na konkrétním modelu úsporu výpočetního času použitím této metody.

Pro otestování vlivu redukce variance (DXTRAN) na naše výpočty jsme zvolili jednu z reálných měřících situací, které jsme v rámci této práce realizovali. Jedná se o jednu z verifikačních geometrií, kterým se budeme věnovat v následující části této práce. Nyní pouze zmíníme, že jde o přenosný HPGe detektor umístěný v 1 m nad zemí na spojnici mezi povrchovými pady PU a PK. Další detaily geometrie nyní nejsou podstatné, nebudeme totiž porovnávat absolutní naměřené hodnoty s vypočtenými, nýbrž pouze výstupy výpočtů pro různá nastavení DXTRAN a pro přímý výpočet bez použití redukce variance.

Výpočty jsme prováděli pouze pro radionuklid ⁴⁰K rozložený ve všech stavebních prvcích, tak jak bylo nastíněno v předchozí části. Skórovanou veličinou byl počet impulzů v okně ⁴⁰K, tedy tally F8 s nastavením energetického okna 1,460-1,464 MeV, bez použití Gaussovského rozmazání. Můžeme předpokládat, že pro celá spektra by byly výsledky obdobné.

Výsledky testu prezentujeme v tabulce 7. V prvním sloupci jsou uvedeny parametry DXTRAN - konkrétně poloměry vnitřní a vnější sféry vyloučení, které jsme definovali v podkapitole Metody redukce variance teoretické části práce. Dále prezentujeme výsledek výpočtu, který, co do absolutní hodnoty, nemá přímý fyzikální smysl, nicméně je přímo úměrný CPS v daném energetickém okně. Třetí sloupec uvádí relativní rozdíl tally oproti výpočtu bez DXT. V tabulce také uvádíme potřebný výpočetní čas - zajímá nás spíše relativní porovnání těchto časů, jelikož jejich absolutní hodnota silně závisí na výpočetní kapacitě, pozici ve které se detektor nachází a zdrojovém prvku (K, U či Th). Podmínkou ukončení výpočtu byla relativní chyba v binu ⁴⁰K okna menší než 0,05. V posledním odstavci jsou uvedeny počty statistických testů, kterými daný výpočet prošel. Testy jsme popsali v podkapitole Statistika skórování. Připomeňme, že testy slouží k upozornění uživatele na možný problém, nikoliv k definitivnímu rozhodnutí o konvergenci či nekonvergenci tally.

nastavení	F8	relativní	výpočetní	statistické
DXTRAN		rozdíl	$\operatorname{\check{cas}}(h)$	testy
BEZ DXT	5,773E-8	0%	16	10/10
DXT 3 3	4,777E-8	-17,3%	1	6/10
DXT 77	6,341E-8	+9,8%	5	9/10
DXT 7 15	6,022E-8	$+4,\!3\%$	7	10/10
DXT 7 40	5,887E-8	+2,0%	8	10/10
DXT 7 70	5,976E-8	+3,5%	10	10/10
DXT 7 100	6,003E-8	+4,0%	13	10/10

Tabulka 7: Testování redukce variance - DXTRAN sféra.

Výsledek výpočtu bez DXT bereme v tomto testu jako zcela správný - proto je uveden relativní rozdíl 0 %. Definice vnitřní sféry 7 cm odpovídala nejčastěji doporučovanému způsobu zadání, kdy tato sféra obklopila celý detekční objem tedy krystal - ovšem obsahovala minimální poměr dalších částí modelu. Výpočet na druhém řádku DXT 3 3, kde byla sféra menší než detekční objem, vrátila dle předpokladu výsledek s velkou odchylkou od správné hodnoty navíc tento výsledek neprošel 4 z 10 statistických testů. Relativní odchylku od správné hodnoty vyšší než byla nejistota výpočtu vrátilo i zadání obou sfér s poloměrem 7 cm. Ve výpočtech v následujících kapitolách, které vyžadovaly (a také umožňovaly) využití metod redukce variance jsme na základě tohoto testu používali zadání DXT s poloměry 7 cm a 40 cm, jako nejlepší kompromis mezi ušetřeným výpočetním časem a relativním rozdílem oproti výsledku výpočtu bez použití DXT.

Dodatek C Další řezy maticí dávkových příkonů

Zde navážeme na kapitolu pojednávající o výpočtech dozimetrických veličin, konkrétně na výpočty dávkových příkonů ve vzduchu. Pro zajímavost doplníme některé další řezy maticí dávkových příkonů, které nebyly prezentovány v textu.



Obrázek 25: Vybrané řezy rovinou XY 0-2.1 m



Obrázek 26: Vybrané řezy rovinou XY 2.4-5.1 m

Seznam publikací

Články v impaktovaných časopisech

- Článek v "Radiation Protection and Dosimetry", 2022: Johnová, K.; Klusoň, J. DOSE RATE MAPPING INSIDE THE STRAZ POD RALSKEM CALIBRATION FACILITY—MONTE CARLO APPROACH, Radiation Protection Dosimetry. 2022, 198(9-11), 796-801. ISSN 0144-8420.
- Článek v "Life Sciences in Space Research", 2022: Sommer, M.; Johnová, K.; Ploc, O.; Benton, E.R.; Sihver, L, Monte Carlo simulation of semiconductor-based detector in mixed radiation field in the atmosphere, Life Sciences in Space Research. 2022, 2022(34), ISSN 2214-5524.
- Článek v "Physics in Medicine and Biology", 2018: Hanušová, T.; Johnová, K.; Navrátil, M.; Valenta, J.; Müller, L. Activation of QA devices and phantom materials under clinical scanning proton beams – a gamma spectrometry study, Physics in Medicine and Biology. 2018, 63(11), ISSN 0031-9155.
- Článek v "Radiation Protection and Dosimetry", 2017: Černý, R.; Johnová, K.; Otáhal, P.; Thinová, L.; Klusoň, J. Evaluation of human body irradiation caused by radionuclides deposited in the filtration unit of gas mask, Radiation Protection Dosimetry. 2017, 177(3), 289-294. ISSN 0144-8420.
- Článek v "Radiation Physics and Chemistry", 2017: Bártová, H.; Trojek, T.; Johnová, K., Theoretical study of depth profiling with gamma- and X-ray spectrometry based on measurements of intensity ratios, Radiation Physics and Chemistry. 2017, ISSN 0969-806X
- Článek v "Radiation Protection and Dosimetry", 2015: Černý, R.; Johnová, K.; Kozlovská, M.; Otahal, P.; Vošahlíková, I., Determining radioactive aerosol concentration using a surface contamination measurement device, Radiation Protection Dosimetry. 2015, 164(4), 533-536. ISSN 0144-8420
- Článek v "Radiation Protection and Dosimetry", 2014: Johnová, K.; Thinová, L.; Giammanco, SG REVEALING THE HIDDEN FAULTS IN THE SE FLANK OF MT. ETNA USING RADON IN-SOIL GAS MEA-SUREMENT, Radiation Protection Dosimetry. 2014, 160(1-3), 70-73. ISSN 0144-8420.

Recenzované články v neimpaktovaných časopisech

 Johnová, K., Self-absorption corrections based on Monte carlo simulations, Acta Polytechnica CTU Proceedings, Vol 4 (2016), p. 27-33. https://doi.org/10.14311/AP.2016.4.0027

Prezentace na konferencích

- Příspěvek na konferenci Dny radiační ochrany 2021: Mapování dávkových příkonů v uvnitř kalibrační základny pro terénní spektrometry, Stráž pod Ralskem
- Příspěvek na konferenci ENVIRA 2019: Johnová, K., Monte Carlo model of Czech calibration facility for gamma-ray spectrometers, Prague 2019
- Příspěvek na konferenci Dny radiační ochrany 2016: Johnová, K., Posouzení samoabsorpce záření ve vzorku při laboratorní gama spektrometrii
- Příspěvek na konferenci Dny radiační ochrany 2015: Johnová, K.; Thinová, L.; Černý, R., Vliv geometrie měření při kalibracích pozemních gama spektrometrů- aplikace metody Monte Carlo