

**Weiterführende
Bearbeitung spezieller
Themen im Rahmen
generischer Sicherheits-
analysen zur Kritikalität
von Kernbrennstoffen
in der Nachverschluss-
phase eines geologi-
schen Endlagers**

Abschlussbericht zum Vorhaben
3610R03245

Weiterführende Bearbeitung
spezieller Themen im
Rahmen generischer
Sicherheitsanalysen zur
Kritikalität von
Kernbrennstoffen in der
Nachverschlussphase eines
geologischen Endlagers

Abschlussbericht zum Vorhaben
3610R03245

Matthias Behler, Matthias Bock, Remy
Cannepín, Bernhard Gmal, Hans-
Jürgen Herbert, Robert Kilger,
Eberhard-Franz Moser, Jörg Peschke,
Florian Rowold, Mingliang Xie

Juli 2013

Auftrags-Nr.: 867535

Anmerkung:

Das diesem Bericht zu Grunde lie-
gende FE-Vorhaben 3610R03245
wurde im Auftrag des Bundesminis-
teriums für Umwelt, Naturschutz
und Reaktorsicherheit durchgeführt.
Die Verantwortung für den Inhalt
dieser Veröffentlichung liegt beim
Auftragnehmer.

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

Kurzfassung

Ziel des Vorhabens war, aufbauend auf den früheren Arbeiten WS 1005/8488-2 und SR 2528 eine Methodik bereitzustellen, die es ermöglicht, auf der Basis von Langzeitprognosen für ein technisches und geologisches Endlagersystem für ausgediente Kernbrennstoffe die erwartete Eintrittswahrscheinlichkeit für das unerwünschte Ereignis „Kritikalität“ mit den damit verbundenen Unsicherheiten begründbar und möglichst zuverlässig zu quantifizieren. Das Vorhaben untergliederte sich dazu in vier Themenschwerpunkte:

- Die Weiterentwicklung einer probabilistischen Methodik, um auf der Basis von konsistenten, hypothetischen Degradationsabläufen für ein Endlagersystem die erwartete Eintrittswahrscheinlichkeit einer Kritikalität zu quantifizieren und die damit verbundenen Unsicherheiten durch Sensitivitätsanalysen zu berücksichtigen.
- Die Weiterführung der in den Vorhaben begonnenen Entwicklung und Verifikation des Rechenverfahrens PUNKT-V6 zur Konsequenzenanalyse einer kritischen Exkursion unter geologischen Endlagerbedingungen.
- Die Identifikation und Diskussion abdeckender Annahmen und Kriterien zur praktischen Berücksichtigung des Brennelementabbrands bei Kritikalitätsanalysen zur Endlagerung, v. a. im Hinblick auf die zuverlässige Nachweisführung, dass Brennelemente den erforderlichen Mindestabbrand tatsächlich erreicht haben.
- Die Fortschreibung eines bestehenden Literaturberichts aus dem Jahr 2004, unter besonderem Augenmerk auf die jüngeren Entwicklungen in den USA, Großbritannien, Frankreich, Finnland, Schweden und weiterer Länder im Hinblick auf Kritikalitätssicherheitsanalysen bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe.

Abstract

Based on earlier work performed in the frame of the projects WS 1005/8488-2 and SR 2528, the aim of this follow-up project was to provide a methodology to allow for quantification of the expected probability of occurrence and involved uncertainties of the inadvertent event “criticality” for a technological and geological disposal system for disused spent nuclear fuel, based on long term prognoses, as justifiable and reliable as possible. The structure of the study was divided into four main topics:

- To advance the development of a probabilistic method to determine the expected probability of occurrence of a critical event under repository conditions based on consistent hypothetical degradation evolution paths, and to regard for the involved uncertainties by application of sensitivity analysis methods.
- To advance the development and verification of the calculation tool PUNKT-V6 for consequence analysis under geological repository conditions, started in the former projects.
- To identify and discuss bounding assumptions and criteria for the practical implementation of burn-up credit in the criticality safety assessment for a final repository, especially in terms of the reliable verification that fuel assemblies have reached at least the required level of burn-up.
- The update of an existing literary research report dating 2004, focusing on since then made developments in the US, Great Britain, France, Finland, Sweden, and other countries in terms of criticality safety analysis and assessment for final disposal systems for disused spent nuclear fuels.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Probabilistische Szenarienanalyse	4
2.1	Vorrechnungen zur Kritikalität anhand von Parameterstudien.....	4
2.2	Erweiterung und Detaillierung der bisher untersuchten Szenarien	11
2.2.1	Bildung von uranhaltigen Mineralphasen im Behälterinneren.....	11
2.2.2	Aufweitung des mittleren Brennstab–Abstands.....	15
2.2.3	Radioaktiver Stofftransport ins Behälter–Nahfeld.....	15
2.3	Kritikalitätsanalysen zu den erweiterten Szenarien	17
2.3.1	Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 1a: Bildung eines wässrigen Mineralphasengemischs im intakten POLLUX-Innenbehälter (Beladung mit abgebranntem Spaltstoff).....	18
2.3.2	Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 1b: Korrodierter POLLUX-Behälter (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff).....	18
2.3.2.1	Homogene und heterogene Spaltstoffverteilungen im korrodierten POLLUX-Innenbehälter.....	18
2.3.3	Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 1c: Korrodierter Spaltstoff im intakten Behälter (Beladung mit frischem Brennstoff)	26
2.3.4	Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 2a: POLLUX-Behälter mit korrodiertem Innenbehälter und Stabgitter-Aufweitung (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff).....	31
2.3.5	Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 2b: Brennstabkokille BSK-3 mit korrodierendem Behälter und Stabgitter-Aufweitung (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff).....	34
2.3.6	Zusammenfassung der Kritikalitätsanalysen	36
2.4	Probabilistische Analysen	37
2.4.1	Modifikation von Eingangsparametern	37
2.4.2	Ergebnisse.....	45
2.4.3	Zusammenfassung der probabilistischen Analysen	105
3	Konsequenzenanalyse	107

3.1	Erweiterung des Exkursionscodes PUNKT-V6.....	108
3.1.1	Zufuhr oder Abnahme von Moderator-Material	108
3.1.2	Simulation der Dichte-Reaktivität-Rückkopplungen.....	112
3.1.3	Zusätzliche Erweiterungen.....	120
3.1.4	Auswertung und Ankopplung der Vorrechnungen	121
3.1.5	Erweiterung der graphischen Darstellung der Ergebnisse.....	123
3.1.6	Verifikations- und Testrechnungen	125
3.2	Vergleichsrechnungen am Beispiel der Oklo-Naturreaktoren	129
3.2.1	Die Oklo-Naturreaktoren	129
3.2.2	Bisherige Arbeiten zur Modellierung und der Simulation der Kritikalität ausgewählter Reaktorzonen	132
3.2.3	Nachrechnungen mit dem Exkursionscode PUNKT-V6.....	135
3.3	Zusammenfassung der Arbeiten zur Konsequenzenanalyse	147
4	Berücksichtigung des Brennelementabbrands in Kritikalitätsanalysen zur Nachverschlussphase	150
4.1	Anforderungen zur Abbrandberücksichtigung bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe.....	150
4.1.1	Bedeutung des Brennelementabbrands für Kritikalitätsanalysen.....	150
4.1.2	Anforderungen nach DIN 25472 und DIN 25712.....	152
4.1.3	Möglichkeiten und Grenzen einer Anrechnung des Brennelementabbrands bei Kritikalitätsbetrachtungen zur Endlagerung	155
4.1.4	Nachweis und Überprüfung des erforderlichen Mindestabbrands	157
4.1.5	Empfehlungen für das weitere Vorgehen	158
4.2	Physikalische Randbedingungen zur numerischen Analyse	161
4.3	Zusammenfassung	170
5	Internationaler Stand von Wissenschaft und Technik bei Kritikalitätsanalysen zur Nachverschlussphase	172
5.1	Einführung	172
5.2	China	173

5.3	Finnland.....	174
5.4	Frankreich.....	176
5.5	Großbritannien.....	179
5.6	Schweden.....	184
5.7	USA.....	186
5.8	Zusammenfassung	191
6	Quellenverzeichnis	193

1 Einleitung

Das deutsche Entsorgungskonzept für ausgediente Kernbrennstoffe aus Kernkraftwerken sah zu Projektbeginn eine nicht rückholbare direkte Endlagerung in tiefen geologischen Formationen vor /BMU 09/. Mittlerweile besteht die Forderung nach Rückholbarkeit der eingelagerten Abfälle bis zum endgültigen Verschluss des Endlagers, sowie eine Bergbarkeit der eingelagerten Abfälle bis 500 Jahre nach dem Verschluss /BMU 10/. Zum Teil gilt dies auch für Brennstoffe aus Forschungsreaktoren, soweit nicht eine Rückführung in dessen Ursprungsland möglich ist. Die derzeit aktuellen Sicherheitsanforderungen für die Endlagerung radioaktiver Stoffe in Deutschland legen für die Nachverschlussphase¹ einen Betrachtungszeitraum von einer Million Jahre zugrunde, für den auch der Nachweis der Unterkritikalität zu erbringen ist /BAL 08, BMU 10/.

Dieser Nachweis stellt eine Herausforderung dar, die den Rahmen herkömmlicher Kritikalitätsanalysen sprengt, da die Randbedingungen für Kritikalitätsberechnungen für solche Zeiträume nicht mehr exakt festgelegt werden können. Insbesondere kann man nicht davon ausgehen, dass die ursprüngliche Anordnung der Brennelemente in den Endlagerbehältern für diesen Zeitraum erhalten bleibt.

In verschiedenen früheren Vorhaben wurden bereits Arbeiten zu dieser Problematik durchgeführt /GMA 01, GMA 04, GMA 09/. Dazu gehörten grundlegende deterministische Analysen zur Kritikalität für eine Endlagerung in Steinsalz, Analysen für andere Wirtsgesteine auf der Basis geologisch begründeter Eingangsdaten, probabilistische Analysen und Unsicherheitsanalysen anhand zunächst einfacher, später detaillierter postulierter Szenarien in der Nachverschlussphase, sowie eine erste Abschätzung möglicher Konsequenzen einer kritischen Exkursion unter Endlagerbedingungen durch Rechenverfahren. Auch die Endlagerung z. T. höher reaktiver Brennstoffe aus Forschungs- und Prototypreaktoren wurde betrachtet. Zudem wurde der internationale Stand von Wissenschaft und Technik verfolgt und dokumentiert /KIL 04/.

¹ Der frühere Begriff „Nachbetriebsphase“ wurde mit /BMU 10/ in „Nachverschlussphase“ umbenannt.

Das übergeordnete Ziel dieses Vorhabens war es, aufbauend auf diesen Arbeiten eine Methodik zu entwickeln, um auf der Basis von Langzeitprognosen für ein technisches und geologisches System mit den damit verbundenen Unsicherheiten die erwartete (bedingte) Eintrittswahrscheinlichkeit für das unerwünschte Ereignis „Kritikalität“ begründbar und möglichst zuverlässig zu quantifizieren. Dazu wurden die folgenden Einzelziele verfolgt:

Ein wesentliches Ziel war es, eine Methodik zu entwickeln, um auf der Basis von begründeten Langzeitprognosen für ein technisches und geologisches System mit den damit verbundenen Unsicherheiten die erwartete (bedingte) Eintrittswahrscheinlichkeit für das unerwünschte Ereignis „Kritikalität“ begründbar und möglichst zuverlässig zu quantifizieren. Dazu wurden die in SR 2528 entwickelten generischen Degradationsszenarien weiter ausgearbeitet und verfeinert. Zusammen mit geochemischen Berechnungen zum reaktiven Stofftransport sowie sondierender Parameterstudien zur Kritikalität wurden bestimmte Abschnitte der Degradationsabläufe weiter gerechtfertigt. Die Szenarien wurden zusätzlich um die Betrachtung der Reaktivität von frischem anstelle von bestrahltem Brennstoff ergänzt, da die Berücksichtigung des Abbrands seitens der Industrie in Deutschland derzeit nicht verfolgt wird. Die bestehende probabilistische Modellierung durch Markov-Prozesse wurde entsprechend ergänzt, und entsprechende Wahrscheinlichkeits- und Sensitivitätsrechnungen auf Basis der generischen Degradationsszenarien durchgeführt und ausgewertet. Die Entwicklung der Methodik anhand eines generischen Systems ist damit abgeschlossen, wird aber bei Verfügbarkeit konkreter, standortbezogener Informationen ggf. weiter zu ergänzen sein. Die entsprechenden Arbeiten und Ergebnisse sind in Kapitel 2 im Detail beschrieben.

Ein weiteres Ziel war es, die in den Vorhaben WS 1005/8488-2 begonnene und in SR 2528 fortgesetzte Entwicklung des Rechenverfahrens PUNKT-V6 zur Konsequenzenanalyse einer kritischen Exkursion unter Endlagerbedingungen weiterzuführen. Eine Reihe von methodischen Verbesserungen im Rechencode sowie bei den Möglichkeiten zur Modellierung kritischer Systeme wurde vorgenommen. Die Handhabbarkeit des Codes sowie die Möglichkeiten zur Auswertung und grafischen Darstellung der Rechenergebnisse mithilfe zusätzlicher Module wurden deutlich verbessert. Am Beispiel der Reaktorzone 2 der prähistorischen, natürlichen kritischen Anordnung in Oklo wurden erste vergleichende Testrechnungen zur Verifikation und Validierung durchgeführt. Die entsprechenden Arbeiten und Ergebnisse sind in Kapitel 3 im Detail beschrieben.

Drittes Ziel war, aufbauend auf den bisherigen Ergebnissen sowie aktueller Entwicklungen, die Identifikation und Diskussion abdeckender Annahmen und Kriterien zur praktischen Berücksichtigung des Brennelementabbrands bei Kritikalitätsanalysen zur Endlagerung. Dazu wurden erstens abdeckende Annahmen zur Inventarbestimmung hinsichtlich Abbrandkredit für einen Betrachtungszeitraum von 1 Mio. Jahre identifiziert, also deutlich über den etablierten Zeitraum der Zwischenlagerung hinaus. Zweitens wurden Aspekte diskutiert, ob und inwieweit der Abbrand ausgedienter Kernbrennelemente im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises für ein Endlager auch in der Praxis berücksichtigt werden kann. Wesentlich ist hier die Möglichkeit der Nachweisführung, dass der geforderte Mindestabbrand von den jeweiligen Brennelementen auch mit hinreichender Konfidenz mindestens erreicht worden ist. Im Blick stehen Reaktoreinsatzaufzeichnungen sowie messtechnische Nachweismethoden, vom einfachen Gammascan als Entscheidungsmessung „bestrahlt ja/nein“ bis hin zu aufwändigen quantitativen Verfahren. Die entsprechenden Arbeiten und Ergebnisse sind in Kapitel 4 im Detail beschrieben.

Viertes Ziel war die Fortschreibung des bestehenden Literaturberichts /KIL 04/ unter besonderem Augenmerk auf die zwischenzeitlichen Entwicklungen in den USA, Großbritannien, Frankreich, Finnland, Schweden und weiterer Länder, sowie die für das Vorhaben besonders relevanten Themenbereiche Probabilistische Analyse, Modellierung von kritischen Systemen, Abbrandberücksichtigung und Endlagerung von höher angereicherten Brennstoffen. Die entsprechenden Arbeiten und Ergebnisse sind in Kapitel 5 im Detail beschrieben.

Die einzelnen Teilkapitel sind thematisch im Wesentlichen unabhängig voneinander und stehen für sich. Deshalb verfügen sie über eine eigene, separate Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse.

2 Probabilistische Szenarienanalyse

2.1 Vorrechnungen zur Kritikalität anhand von Parameterstudien

Die in früheren Arbeiten durchgeführten Untersuchungen zur probabilistischen Analyse denkbarer Szenarienabläufe mit Potential für den Eintritt einer Kritikalität unterstellten auf generischer Basis zumeist den planmäßig erreichten Abbrand ausgedienter Kernbrennelemente. Dies bedeutete z. B. 40 GWd/tSM bei 3,6 Gew.-% Anreicherung an ^{235}U , oder 55 GWd/tSM bei 4,4 Gew.-% Anreicherung. Entsprechend wurde das zugehörige, den Kritikalitätsanalysen zu Grunde liegende Nuklidinventar ermittelt /GMA 04, GMA 09/. Gegenwärtig wird aber die Berücksichtigung des Abbrands bei der Endlagerung in tiefen geologischen Formationen seitens der deutschen Industrie praktisch nicht verfolgt, vgl. z. B. /CHE 11/. Zudem liegen nicht für alle bestrahlten Brennelemente, vor allem solche älteren Datums, die für eine belastbare Abbrandrechnung notwendigen Daten in ausreichender Qualität vor. Deshalb muss u. U. bei der Kritikalitätssicherheitsanalyse auch bei ausgedienten Kernbrennelementen aus Leichtwasserreaktoren von der Reaktivität frischen Brennstoffs ausgegangen werden, bzw. von einem nur geringen erreichten Mindestabbrand, wie es gegenwärtig bei der trockenen Zwischenlagerung von Brennelementen in Behältern in den Aufbewahrungsgenehmigungen der Standortzwischenlager gefordert ist, d. h. 12 GWd/tSM für DWR-Brennstoffe mit mehr als 4,05 Gew.-% Anreicherung ^{235}U (vgl. z. B. /BFS 03/). Zumindest diese Reaktivitätsminderung kann auch bei der Endlagerung berücksichtigt werden, vgl. auch Kapitel 4.1. Weiterhin liegen durch die außerplanmäßige Abschaltung und Stilllegung einzelner Reaktoren in der Tat Brennelemente vor, die nur einen sehr geringen Abbrand erreicht haben.

Um diesen Umständen in den probabilistischen Untersuchungen Rechnung zu tragen, werden die Analysen in der vorliegenden Arbeit, parallel zu Abbrandberücksichtigung, vergleichend ausgedehnt auf unbestrahlte bzw. gering bestrahlte Brennstoffe. In der Praxis bedeutet dies derzeit für Brennelemente aus Siedewasserreaktoren (SWR) Anfangsanreicherungen bis 4,2 Gew.-% ^{235}U , aus Druckwasserreaktoren (DWR) bis 4,0 Gew.-% ^{235}U sowie bis 4,4 Gew.-% ^{235}U und einem Abbrand von 12 GWd/tSM. Gegenüber planmäßig abgebrannten Brennstoffen bedeuten diese Annahmen eine deutlich erhöhte Reaktivität. Damit ist eine entsprechende Verringerung der kleinsten kritischen Massen verbunden. Dies bedeutet, dass unter diesen unterstellten Randbe-

dingungen eine wesentlich geringere Menge an Kernbrennstoff zur Bildung einer kritischen Konfiguration erforderlich ist. In der Wahl der Eingangsparameter zur probabilistischen Analyse der Szenarien kann dies eine signifikante Erhöhung der Eintrittswahrscheinlichkeiten von Teilschritten in dem zum jeweiligen Szenario zugehörigen Ereignisbaum bedeuten. Eine weitere Konsequenz ist, dass nun auch in dem Behältertyp BSK–3 eine kritische Anordnung rein aufgrund der vorhandenen Brennstoffmasse nicht mehr ausgeschlossen werden kann. Da die Wandung dieses Behältertyps deutlich dünner ist als diejenige des bisher alleinig betrachteten POLLUX–Behälters, ändern sich bei Betrachtung der BSK–3 ebenfalls weitere Eingangsparameter, z. B. die Zeitdauer des Durchkorrodierens bei Laugenzutritt an den Behälter. Die Erweiterung und Ergänzung der betrachteten Szenarien ist im Detail in Kapitel 2.2 beschrieben. Die Behältertypen selbst sind detailliert z. B. in /GMA 04/ und /GMA 09/ beschrieben. Etwaige, über das gegenwärtige Behälterkonzept hinausgehende Modifikationen zur Einhaltung der Unterkritikalität werden hier nicht berücksichtigt; dazu gehören z. B. etwaige Verfüllungen der Behälter.

Im Folgenden wird eine Reihe von sondierenden Voruntersuchungen zu kritischen Parametern für relevante frische bzw. unterschiedlich bestrahlte Kernbrennstoffe beschrieben. Sie werden bei der Modifikation bestimmter Szenarienparameter qualitativ berücksichtigt. Da aber viele jener Szenarienparameter eher als grobe Schätzwerte denn als stringente Quantifizierung aufgefasst werden müssen, fließen diese Voruntersuchungen nicht quantitativ in die weiteren Analysen ein. Sie dienen vielmehr dem Experten als Richtlinie bei der Abschätzung der Zahlenwerte für diejenigen probabilistischen Szenarienparameter, welche direkt oder indirekt mit der Reaktivität und der für Kritikalität erforderlichen Masse des jeweils betrachteten Brennstoffs zusammenhängen. Die Kritikalitätsrechnungen wurden mit der Steuersequenz CSAS1 aus dem amerikanischen Codepaket SCALE Version 6.1 /SCA 11/ durchgeführt. Berücksichtigt wurden analog zu /GMA 09/ die jeweils berechneten Anteile der kritikalitätsrelevanten Aktinoiden im bestrahlten Brennstoff sowie der enthaltene Sauerstoff. Die zugehörigen Nuklidmassen wurden mit dem GRS Abbrandcode OREST /HES 86/ ermittelt. **Abb. 2.1** zeigt die berechneten infiniten Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{inf} für wassermoderierte, unendlich ausgedehnte Brennstabgitter für unterschiedliche Anfangsanreicherungen und Abbrände in Abhängigkeit von der Abklingdauer für den gesamten Betrachtungszeitraum. Es handelt sich hier also um heterogene Systeme, mit festem Moderationsverhältnis das demjenigen intakter Brennelemente entspricht. Diese Werte dienen als qualitativer Anhaltspunkt für den zeitlichen Verlauf der Reaktivität der Brennstoffe, der alleine durch den radioaktiven Zerfall bedingt ist.

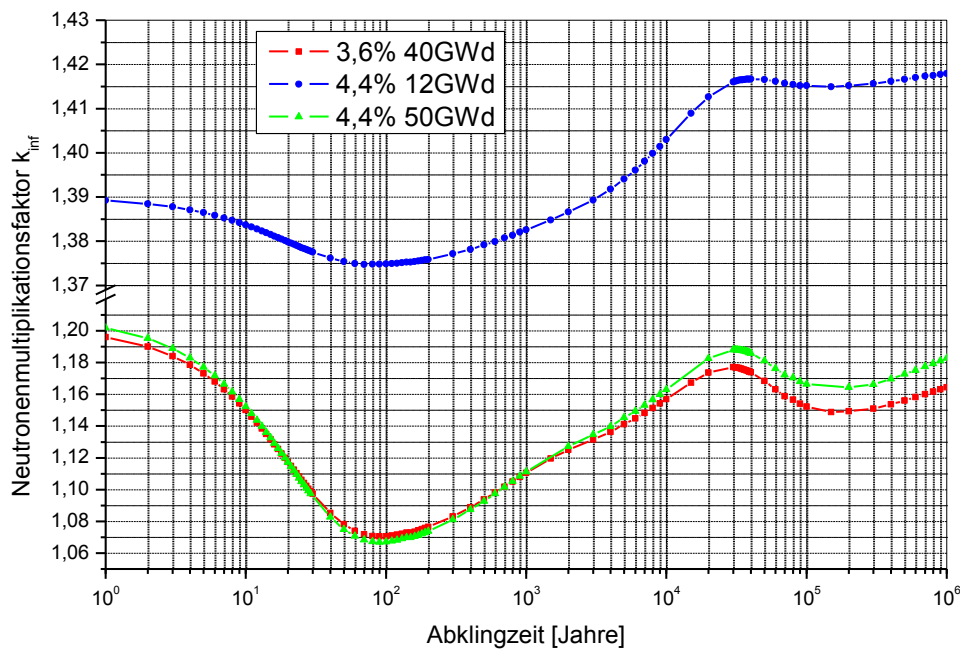


Abb. 2.1 Multiplikationsfaktoren k_{inf} für infinite Stabgitter von Brennstoffen mit unterschiedlichen Anreicherungen und Abbränden in Wasser.

Man erkennt in der Abbildung, dass die Reaktivität selbst für gering bestrahlten Brennstoff mit 12 GWd/tSM Abbrand während des Betrachtungszeitraums signifikant variiert. Dies liegt an den unterschiedlichen Halbwertszeiten der reaktivitätserhöhenden bzw. reaktivitätsmindernden Plutoniumisotope sowie ihrer Zerfallstochter. Für höher abgebrannte Brennstoffe ist die Schwankungsbreite der Reaktivität noch stärker ausgeprägt, da hier sowohl relativ als auch absolut eine gegenüber niedriger abgebrannten Brennstoff höhere Menge an Plutonium enthalten ist. Bemerkenswert ist, dass bei dem hier betrachteten generischen System jeweils im Zeitbereich um ca. 30 000 Jahre Abklingzeit ein lokales Maximum der Reaktivität auftritt, das zu Ende des Betrachtungszeitraums, je nach Abbrand, wieder nahezu erreicht bzw. überschritten wird.

In **Abb. 2.2** sind infinite Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{inf} und kleinste kritische Kugelmassen mit 30 cm starkem Wasserreflektor für homogene Mischungen aus bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 Gew.-% Anreicherung ^{235}U und 12 GWd/tSM Abbrand für verschiedene Mischungsverhältnisse über den gesamten Betrachtungszeitraum aufgetragen.

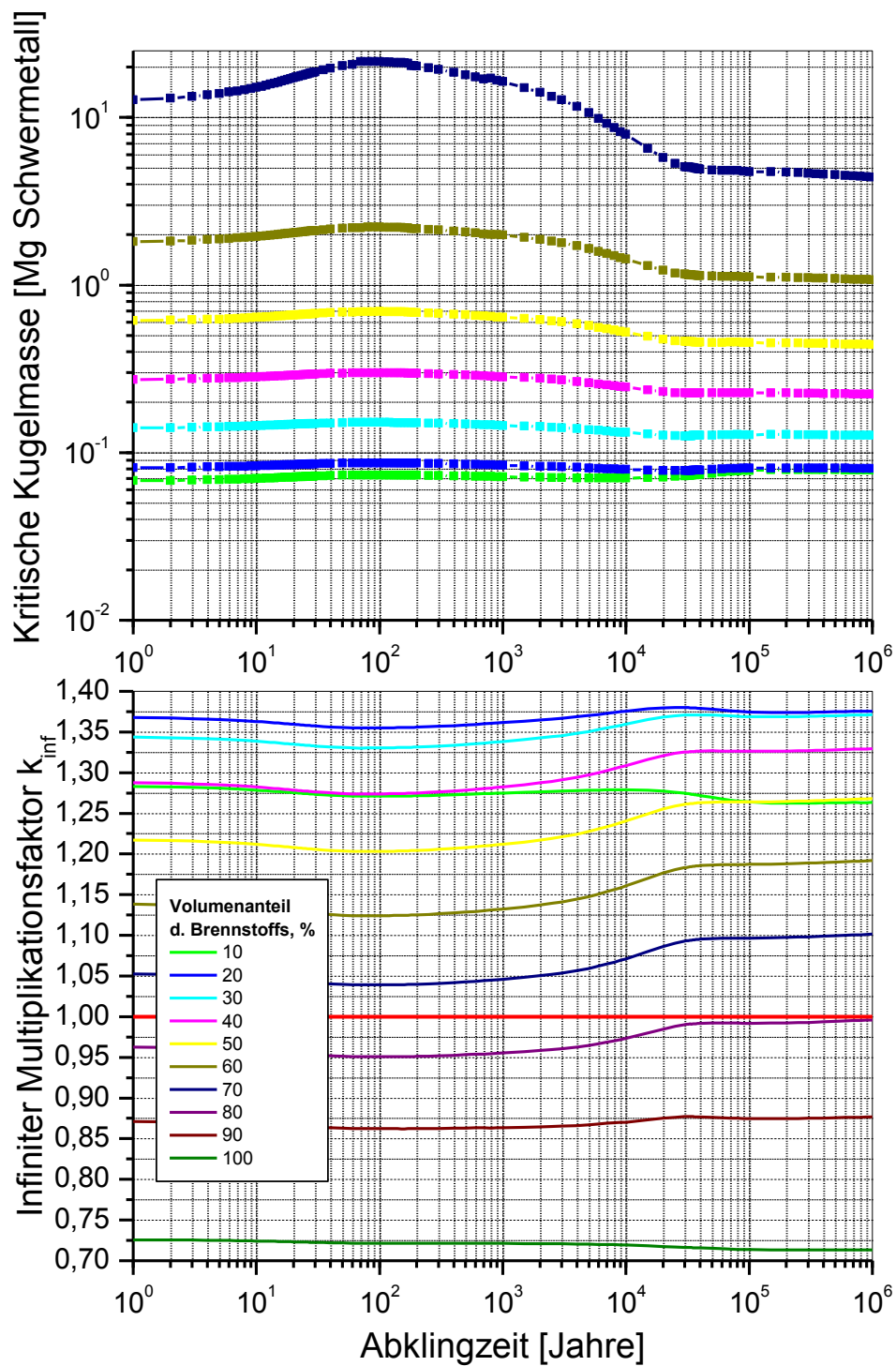


Abb. 2.2 Infiniter Multiplikationsfaktor und kritische Kugelmassen homogener Mischungen aus bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 % Anreicherung und 12 GWd/tSM Abbrand und Wasser.

Man erkennt in der Abbildung, dass für sehr hohe Anteile an Brennstoff in der Spaltmaterial-Moderator-Mischung, d. h. bei stark untermoderierten Systemen, der infinite Multiplikationsfaktor k_{inf} unterhalb 1,0 liegt und Kritikalität deshalb hier ausgeschlossen ist. Erst bei Volumenanteilen des Moderators über 20 % wird für die unterstellten homogenen Mischungen k_{inf} für bestimmte Zeiträume während des Betrachtungszeitraums größer als 1,0. Die zugehörigen kleinsten kritischen Kugelmassen hängen dabei stark von Mischungsverhältnis und Abklingzeit ab. Der maximale Wert von $k_{inf} = 1,38$ und damit die maximale Reaktivität für homogene Gemische wird in dieser Parameterstudie bei einem Moderatoranteil von 80 % und bei einer Abklingzeit von 25 000 Jahren erreicht. Die entsprechende kleinste kritische Kugelmasse liegt bei etwa 70 kg Schwermetall. Dies impliziert jedoch nicht automatisch, dass sich das entsprechende Moderationsverhältnis im Inneren eines Endlagerbehälters im geologischen Langzeitverhalten auch wirklich über einen größeren Bereich des Innenraums einstellen kann. Zudem ist dort ein Stahl/Wirtsgestein-Reflektor anstelle des in der Parameterstudie unterstellten Wasserreflektors zu erwarten. Dieser letztere Umstand besitzt allerdings nur nachgeordnete Bedeutung für die Unterkritikalität, da dadurch nur vergleichsweise geringe Variationen in den multiplikativen Eigenschaften des Systems bewirkt werden dürften.

In **Abb. 2.3** ist eine äquivalente Parameterstudie für einen Abbrand von 50 GWd/tSM dargestellt, also den für diese Anreicherung typischen Zielabbrand. Wie erwartet liegen hier die errechneten Werte für k_{inf} im Vergleich zu 12 GWd/tSM deutlich niedriger. Zudem zeigt sich durch den höheren Plutoniumanteil eine größere zeitabhängige Schwankungsbreite der Reaktivität während des Betrachtungszeitraums. Außerdem liegt k_{inf} für alle Mischungsverhältnisse mit weniger als 50 % Moderator unterhalb von 1,0, d. h. ohne entsprechende freie Volumina in einem Behältersystem ist Kritikalität ausgeschlossen. Der maximale Wert von $k_{inf} = 1,14$ und damit die maximale Reaktivität für homogene Gemische wird in dieser Parameterstudie bei einem Moderatoranteil von 70 % und bei einer Abklingzeit von 30 000 Jahren erreicht. Die entsprechende kleinste kritische Kugelmasse liegt bei etwa 600 kg Schwermetall. Dies bedeutet, dass die Anforderungen zum Eintritt einer Kritikalität für einen Brennstoff mit diesem Abbrand hinsichtlich verfügbarem freien Volumen (Moderationsverhältnis) und vorhandener Brennstoffmasse deutlich höher liegen als bei 12 GWd/tSM oder gar unbestrahltem Brennstoff. Das Entstehen einer kritischen Konfiguration unter Endlagerbedingungen ist dadurch als entsprechend für niedrig oder gering bestrahlte Brennstoffe entsprechend als wahrscheinlicher einzustufen. Diesem Umstand wird in der Erweiterung der Szenarien in Kapitel 2.2 qualitativ Rechnung getragen.

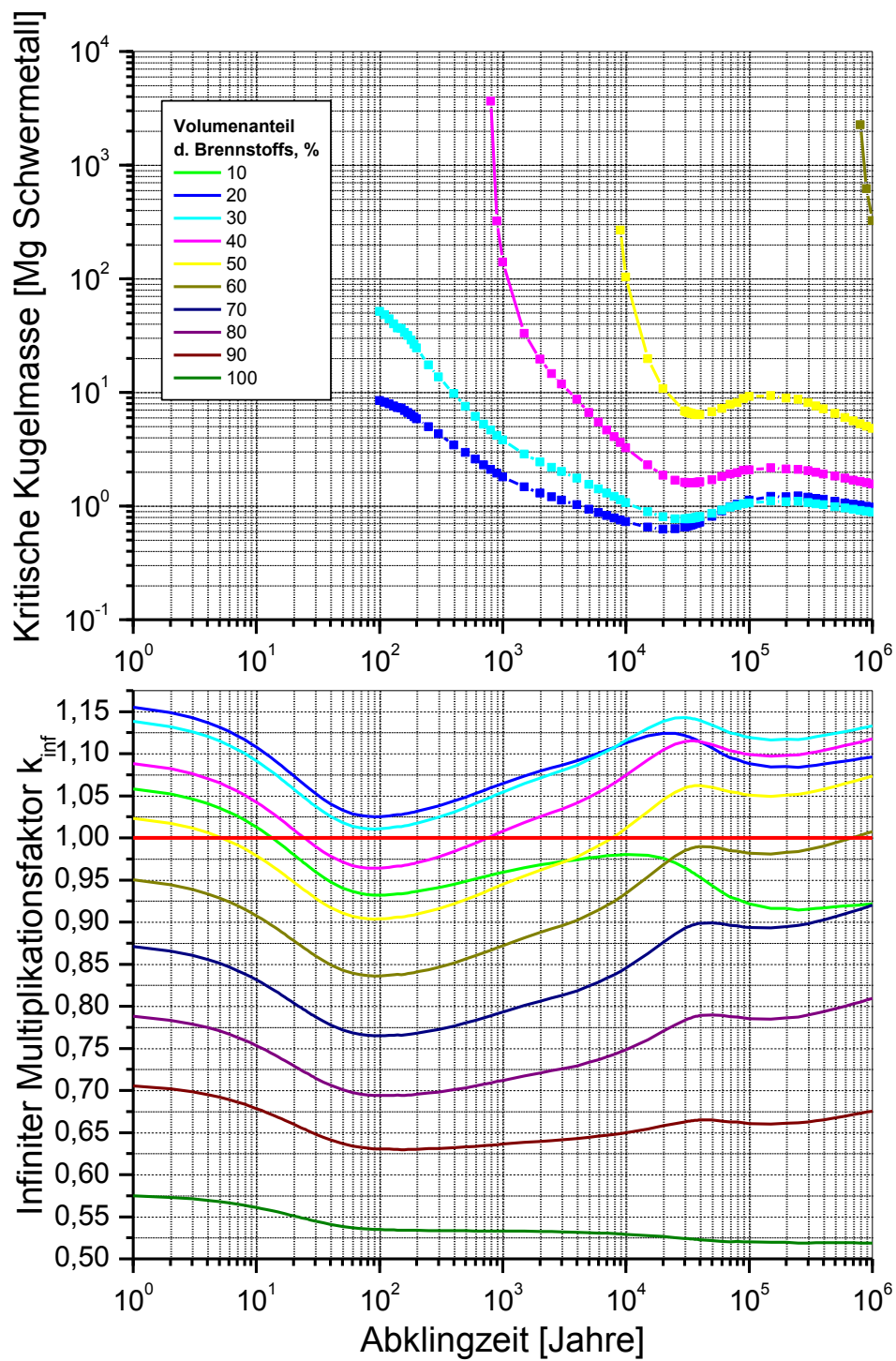


Abb. 2.3 Infiniter Multiplikationsfaktor und kritische Kugelmassen von homogenen Mischungen aus bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 % Anreicherung und 50 GWd/tSM Abbrand und Wasser.

In **Abb. 2.4** sind für homogene Brennstoff-Wasser-Gemische mit 30 cm Wasserreflektor die berechneten kleinsten kritischen Kugelmassen von bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 Gew.-% Anreicherung ^{235}U und einem Abbrand von 12 GWd/tSM bei einer Abklingzeit von 5 Jahren in Abhängigkeit von der Brennstoffkonzentration aufgetragen. Zum Vergleich wurden die Rechnungen wiederholt, anstelle von reinem Wasser als Moderator/Reflektor nun basierend auf einer Lösungszusammensetzung, wie sie exemplarisch in einem nichtsalinaren Wirtsgestein im Versatzmaterial FEBEX /GMA 04/ angenommen wird.

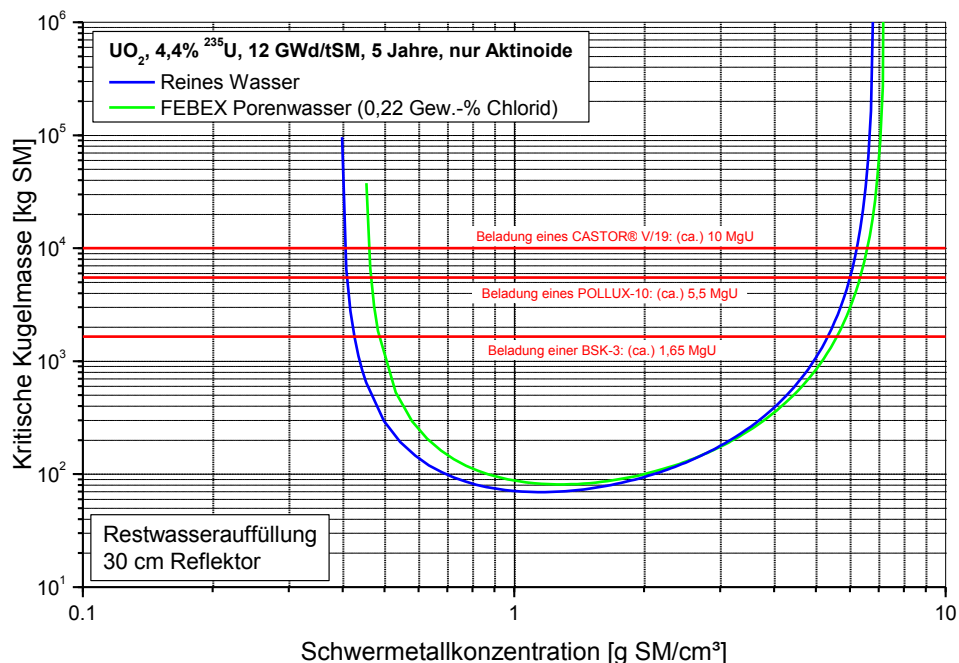


Abb. 2.4 Kritische Kugelmassen von bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 % Anreicherung und 12 GWd/tSM Abbrand mit reinem Wasser und FEBEX Porenwasser.

Man erkennt in der Abbildung, dass die Betrachtung von nichtsalinärer Lauge gegenüber reinem Wasser als Moderator auf die kleinste kritische Kugelmasse keinen in diesem Zusammenhang signifikanten Einfluss ausübt. Mit eingezeichnet sind zusätzlich die in den in Deutschland als Endlagerbehälter diskutierten Behältertypen enthaltenen Schwermetallmassen. Dieser Vergleich zeigt, dass in jedem dieser Behälter prinzipiell genügend Spaltmaterial enthalten ist, um bei Annahme gering bestrahlten Brennstoffs eine Kettenreaktion aufrecht zu erhalten. Der relevantere Parameter ist vielmehr das sich einstellende Moderationsverhältnis auf Basis freier Volumina.

2.2 Erweiterung und Detaillierung der bisher untersuchten Szenarien

2.2.1 Bildung von uranhaltigen Mineralphasen im Behälterinneren

In den probabilistischen Untersuchungen im Vorgängervorhaben /GMA 09/ wurde die Bildung von uranhaltigen Mineralphasen im Behälterinneren als Szenario 1 hinsichtlich Kritikalität untersucht. Bislang wurde die Art der hierbei durch chemische Prozesse entstehenden Mineralphase nicht näher spezifiziert. Vielmehr wurden eine Reihe natürlich vorkommender Uranminerale aufgelistet und hinsichtlich Kritikalität auf Basis ihres Moderationsverhältnisses, welches auf der jeweiligen chemischen Zusammensetzung basiert, untersucht /GMA 04/. Das Entstehen einer reaktiven Mineralphase wurde dann im Rahmen der probabilistischen Untersuchungen unterstellt /GMA 09/.

Für eine verbesserte Modellierung in den Szenarienabläufen wurde nun die mögliche Art und Zusammensetzung derartiger Mineralphasen, insbesondere das sich potentiell einstellende Moderationsverhältnis, durch entsprechende chemische Berechnungen näher untersucht. Dazu wurde ein Lösungszutritt an den bestrahlten Kernbrennstoff unterstellt und die entsprechende chemische Reaktion modelliert. Chemische Randbedingungen wie pH-Wert, Eh-Wert usw. wurden dabei z. T. anhand von Plausibilitätsüberlegungen gewählt. Für ein nichtsalinares Wirtsgestein wurde Opalinuston-Lösung als repräsentative Zusammensetzung von Porenwasser in tonartigen Wirtsgesteinen bzw. Bentonit-Versatzmaterial ausgewählt. Die geochemische Gleichgewichtsreaktion dieser Lösung mit Kernbrennstoff wurde mit dem Programm ChemApp berechnet. Die chemische Datenbasis für die Rechnung beruht auf dem Datensatz EQ3/6 data0.hmw. Für den abgebrannten Kernbrennstoff wurde für diese Berechnungen eine repräsentative Zusammensetzung eines typischen Abbrands angenommen.

Tab. 2.1 listet die verwendete Zusammensetzung der Opalinuston-Lösung in [mol/kg H₂O] nach /ALT 09/ auf.

Tab. 2.1 Chemische Zusammensetzung von Opalinuston-Lösung für die geochemischen Berechnungen.

Element/Ion	Konzentration [mol/kg H ₂ O]
Na ⁺	0.1284
K ⁺	0.0008
Mg ²⁺	0.0049
Ca ²⁺	0.0069
Sr ²⁺	0.0003
Cl ⁻	0.1301
HCO ₃ ⁻	0.0005
CO ₃ ²⁻	0.0000
SO ₄ ²⁻	0.0148

Die geochemische Reaktion von 1 kg abgebranntem Kernbrennstoff mit Opalinuston-Lösung eines Wassergehalts von 1 kg wurde berechnet. Die Gleichgewichtsreaktion verbraucht dabei 13,09 % des Wassers. Die errechneten Ergebnisse für die chemische Zusammensetzung der wässrigen Phase und der festen Mineralphase sind in **Tab. 2.2** und **Tab. 2.3** aufgelistet.

Tab. 2.2 Wässrige chemische Zusammensetzung der resultierenden Lösung nach der Reaktion von Opalinuston-Lösung mit abgebranntem Kernbrennstoff.

Element	Konzentration [mol/kg H ₂ O]
Na	1.446E-01
K	9.205E-04
Mg	5.638E-03
Ca	7.102E-06
Cl	1.497E-01
S	1.564E-02
C	1.307E-05
Tc	4.119E-09
Np	9.711E-10
U	3.163E-09
Pu	1.753E-11
Am	4.658E-09
Th	3.106E-09

Element	Konzentration [mol/kg H ₂ O]
Na	1.446E-01
K	9.205E-04
Mg	5.638E-03
Ca	7.102E-06
Cl	1.497E-01
S	1.564E-02
C	1.307E-05
Tc	4.119E-09
Np	9.711E-10
U	3.163E-09
Pu	1.753E-11
Am	4.658E-09
Th	3.106E-09
Cm	4.630E-05
I	1.593E-03
Se	1.504E-23
Pb	4.807E-09
Zn	2.925E-08
Cd	2.894E-04
Cs	1.799E-02
Zr	6.377E-10
Ba	2.906E-02
Sr	6.766E-03
Mo	4.009E-02
Nd	2.617E-11
Ag	2.476E-10
Ra	1.295E-10

Tab. 2.3 Mineralzusammensetzung nach der chemischen Gleichgewichtsreaktion von 1 kg bestrahltem Kernbrennstoff mit Opalinuston-Lösung mit Wassergehalt 1 kg.

Mineral	Chemische Formel	Menge [Mol]
Pb	Pb	6.194E-09
Am +III (OH) ₃ (c)	Am(OH) ₃	7.137E-03
CdCO ₃	CdCO ₃	2.402E-04
alpha-CdSe	CdSe	8.948E-04
CaMoO ₄ _Powellite	CaMoO ₄	6.894E-03
Na _{0.5} Nd _{0.5} MoO ₄ (s)	Na _{0.5} Nd _{0.5} MoO ₄	5.445E-03
Nd(OH) ₃	Nd(OH) ₃	3.523E-02
Np +IV (OH) ₄ (am)	Np(OH) ₄	3.798E-03
Pu +IV (OH) ₄ (am)	Pu(OH) ₄	4.014E-02
SrCO ₃ (s)	SrCO ₃	2.484E-04
TcO ₂ :1.6H ₂ O(s)	TcO ₂ :1.6H ₂ O	1.019E-02
Th(OH) ₄ (am)	Th(OH) ₄	3.367E-07
U +IV (OH) ₄ (am)	U(OH) ₄	3.545E+00
ZrO ₂ (monoclinic)	ZrO ₂	5.847E-02
AgI(cr)	AgI	9.652E-04
BaSO ₄	BaSO ₄	1.208E-03
SrSO ₄	SrSO ₄	1.828E-07

Man erkennt anhand von **Tab. 2.3**, dass der dominierende Bestandteil der Mineralphase aus amorphem Uranhydroxid U|+IV|(OH)₄(am) besteht. Dieses Mineral besitzt mit H/U = 4 ein relativ hohes intrinsisches Moderationsverhältnis, welches durch das Auffüllen amorpher Porosität mit Lösung noch weiter erhöht werden könnte. Aufgrund dessen besitzt das Mineral grundsätzlich Potential zur Unterhaltung einer selbsterhaltenden Kettenreaktion. Vorrechnungen auf Basis von unbestrahlt unterstelltem Uran der Anreicherung 4,2 Gew.-% ²³⁵U zeigten dabei, dass auf Basis der Mengen und Volumina innerhalb eines Endlagerbehälters eine Kritikalität bei Unterstellung dieser Mineralphase unter konservativen Annahmen zunächst als grundsätzlich möglich erscheint und der zugehörige Degradationsverlauf hin zu einer kritischen Konfiguration in sich als plausibel gerechtfertigt ist. Weitere Details sind in Kapitel 2.3 ausgeführt.

2.2.2 Aufweitung des mittleren Brennstab–Abstands

In diesem Modell (Szenarien 2a und 2b) wird angenommen, dass Behälter und Einbauten vollständig zu nicht stöchiometrischem porösem $\text{Fe}(\text{OH})_3$ korrodiert sind. Dabei sollen sowohl die Brennstäbe als auch die hexagonale Gitterstruktur erhalten bleiben. Die Brennstäbe verteilen sich gleichmäßig auf die durch Behälterkorrosion deutlich vergrößerte Querschnittsfläche, und der Leerraum wird vollständig mit $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ausgefüllt modelliert. Durch Einlagerung von Wasser in die Poren des $\text{Fe}(\text{OH})_3$ wird in dem untermoderierten System ein reaktiveres Moderationsverhältnis erreicht, was auch zu einer Verringerung der für eine Kritikalität notwendigen Uranmasse führt.

Im Fall des POLLUX-Behälters (Szenario 2a) bedeutet dies, dass der Außenbehälter mit einem Innenradius ca. 50,6 cm und einer Wandstärke von etwa 27 cm bei diesen Untersuchungen als intakt angenommen wird. Die Gitterschrittweite des bis an die Behälterinnenwand des Außenbehälters aufgeweitete Stabgitters mit 2360 Brennstäben vergrößert sich damit von vorher 1,333 cm auf 1,9838 cm.

Die Brennstabkockille BSK-3 (Szenario 2b) verfügt nur über einen Behälter mit einem Innenradius von 16,5 cm und einer Wandstärke von 5,0 cm. Nach vollständiger Korrosion dieses Behälters und erfolgter Stabgitter-Aufweitung nimmt die Gitterschrittweite der 708 eingelagerten Brennstäbe von 1,181 cm auf 1,539 cm zu.

Auch hier wurde zusätzlich zur Zusammensetzung bestrahlten Brennstoffs die Reaktivität von unbestrahltem Brennstoff unterstellt und untersucht.

2.2.3 Radioaktiver Stofftransport ins Behälter–Nahfeld

In mit Porenwasser gesättigtem Tongestein bzw. Bentonit-Versatzmaterial sind die Darcy Fließgeschwindigkeiten von Wasser mit etwa 10^{-14} bis 10^{-12} m/a /KIE 03/ verschwindend gering, weshalb die Migration von Radionukliden aus endgelagertem abgebranntem Kernbrennstoff in derartigen Medien durch Diffusion bestimmt ist /CAN 10/. Dabei kommt es während des Transports zu physikochemischen Wechselwirkungen zwischen diesen Nukliden mit dem Gesteins– bzw. Versatzmaterial.

Um die Ausbreitung der Radionuklide unter diesen Bedingungen während des gesamten Betrachtungszeitraums zu berechnen, wurden in der GRS Braunschweig die Rechenprogramme OpenGeoSys (THMC–Rechnungen) und ChemApp (chemische

Gleichgewichtsrechnungen) entsprechend gekoppelt, erweitert und angewandt /CAN 10/. Erste Ergebnisse zeigen, dass auch nach 1 Mio. Jahren Urannuklide weniger als 30 m in das Versatzmaterial bzw. das Tongestein wandern. Weiterhin wird berechnet, dass auch die höchsten Urankonzentrationen, welche man in unmittelbarer Nähe zum Behälter errechnet, bei verschiedenen Abbränden und selbst unter der Annahme unbestrahlten Brennstoffs mit 4,2 % Anreicherung bei weitem nicht ausreichen, um den Neutronenmultiplikationsfaktor des Gesamtsystems „Behälter plus Nahfeld“ signifikant gegenüber dem Behälter alleine zu beeinflussen. In die Modellbildung gingen zwar eine ganze Reihe von teilweise unrealistischen Vereinfachungen und Annahmen ein, doch sind diese ausnahmslos dergestalt, dass sie im Sinne der Kritikalitätssicherheit als konservativ angenommen werden können. Das bedeutet in letzter Konsequenz, dass der Multiplikationsfaktor des Gesamtsystems einzig durch den Behälter selbst bestimmt wird. Die Menge an im Nahfeld akkumuliertem Spaltmaterial reicht damit nicht aus, um eine selbsterhaltende Kettenreaktion aufrecht zu erhalten. Ausführliche Details sind in /CAN 10/ beschrieben. Dies bestätigt quantitativ entsprechende qualitative Aussagen früherer, unabhängiger Arbeiten /KIE 03/.

Aus diesem Grund wurde das entsprechende Szenario 3 „Selektive Aufkonzentrierung von Uran im Versatzmaterial des Behälternahfelds“ von den weiteren Betrachtungen zur probabilistischen Analyse ausgenommen, da eine Kritikalität unter den gegebenen Bedingungen zum gegenwärtigen Zeitpunkt als deterministisch ausgeschlossen erscheint. Auf die im Zusammenhang mit dem reaktiven Stofftransport involvierten Sensitivitäts- und Unsicherheitsbetrachtungen wurde ebenfalls verzichtet, da daraus aufgrund der Geringfügigkeit des Einflusses auf den Neutronenmultiplikationsfaktor keine weiteren Erkenntnisse zu erwarten sind.

Sobald höher angereicherte Brennstoffe z. B. aus Forschungs- und Prototypreaktoren in die probabilistische Analyse aufgenommen werden, muss dieser Punkt aufgrund der deutlich geringeren kleinsten kritischen Massen der entsprechenden Brennstoffe jedoch wieder in Betracht gezogen werden. Dies übersteigt den Rahmen der vorliegenden, generischen Analyse und ist im Sinne einer Methodenentwicklung gegenwärtig nicht erforderlich.

2.3 Kritikalitätsanalysen zu den erweiterten Szenarien

Dieses Vorhaben schließt die Entwicklung einer Methode zur Bewertung der Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität in einem Endlager für ausgediente Kernbrennstoffe auf der Basis einer probabilistischen Sicherheitsanalyse ein. Um diese Analyseverfahren zu erstellen, werden die in früheren Vorhaben erarbeiteten Szenarien, die zu einer Kritikalität führen, als Basis der weiteren Entwicklung zu Grunde gelegt /GMA 09/. Diese wurden hier erweitert und präzisiert. Als zusätzliche Ergänzung dieser Analysen, bei denen ursprünglich Brennstoffe mit unterschiedlichen Abbränden untersucht wurden, wurde in der vorliegenden Arbeit zusätzlich die Reaktivität von als unbestrahlt unterstelltem Brennstoff betrachtet. Dazu wurden verschiedene Konfigurationen, die zum Auftreten von Kritikalitätsexkursionen führen können, identifiziert, und die zugehörigen Randbedingungen durch entsprechende Kritikalitätsrechnungen präzisiert. Die Szenarien basieren auf den bestehenden Rechenmodellen zweier unterschiedlicher Typen von generischen Endlagerbehältern. In einem Behältertyp analog zur Brennstabkockille BSK-3 werden die vereinzelt Brennstäbe aus drei DWR-Brennelementen eingelagert, während in dem Typ POLLUX die Brennstäbe aus zehn DWR-Brennelementen eingebracht werden /GMA 04/. Auf das in jüngerer Zeit untersuchte Konzept der direkten Endlagerung von CASTOR® Transport- und Zwischenlagerbehältern (DIREGT-Konzept /CHE 11/) wird hier nicht eingegangen.

Im Rahmen dieser Untersuchungen wurden unbestrahlte Brennelemente mit Anreicherungen von 4,0 und 4,2 Gew.-% ^{235}U betrachtet. Jedes dieser Brennelemente besitzt 236 Brennstäbe mit einer aktiven Länge von 390 cm und inaktiven Zonen am oberen (19,4 cm) und am unteren Brennstabende (31,4 cm). Der Pelletdurchmesser beträgt 0,911 cm, der Hüllrohräußendurchmesser 1,075 cm und die Hüllrohrdicke 0,0725 cm. Für die UO_2 -Dichte wurde bei beiden Anreicherungen ein Wert von $10,4 \text{ g/cm}^3$ angenommen. Zerfallsbedingte Veränderungen des Brennstoffs wurden nicht berücksichtigt, da sich das Verhältnis von ^{235}U zu ^{238}U nicht signifikant verändert und die Unterstellung der heutigen Anreicherung für den gesamten Betrachtungszeitraum als konservativ anzusehen ist. Sämtliche hier aufgeführten Kritikalitätsrechnungen wurden mit dem Programmsystem SCALE 6.1 /SCA 09/ mit der Steuersequenz CSAS5 (KENO-Va) unter Verwendung der auf ENDF/B-VII Daten basierenden 238-Gruppen-Bibliothek v7-238 durchgeführt. Dabei wurden für jede Rechnung 550 Neutronengenerationen mit jeweils 10 000 Neutronen gestartet, wobei die ersten 50 Generationen zur Ergebnisermittlung nicht herangezogen wurden. Anstelle einer expliziten Darstellung von Brenn-

stäben (Szenarien 2a und 2b) wurde hier mit zellgewichteten Wirkungsquerschnitten gearbeitet.

Bedingt durch konstruktive Unterschiede zwischen den beiden verschiedenen Typen von Endlagerbehältern wurden unterschiedliche, entsprechend angepasste Szenarienableufe entwickelt und verfolgt.

2.3.1 Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 1a: Bildung eines wässrigen Mineralphasengemischs im intakten POLLUX-Innenbehälter (Beladung mit abgebranntem Spaltstoff)

Die Modelle und Rechnungen zu diesem Szenario sind, ebenso wie konstruktive Einzelheiten des POLLUX-Behälters, im Detail in /GMA 09/ dargelegt und erläutert. Die relevanten Ergebnisse werden in diesem Bericht an geeigneter Stelle zu Vergleichszwecken wiedergegeben.

2.3.2 Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 1b: Korrodierter POLLUX-Behälter (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff)

Im Szenario 1b werden zwei unterschiedliche Teilszenarien für den korrodierten POLLUX-Behälter untersucht. Im ersten Fall werden homogene und heterogene Spaltstoffverteilungen im korrodierten Innenbehälter und im zweiten Fall Systeme mit korrodiertem Spaltstoff und korrodierten Einbauten im intakten Innenbehälter betrachtet.

2.3.2.1 Homogene und heterogene Spaltstoffverteilungen im korrodierten POLLUX-Innenbehälter

In diesem Szenario wird von einer vollständigen Korrosion des Innenbehälters der Einbauten und Brennstäbe (Spaltstoff und Hüllrohrmaterial) ausgegangen. Der Spaltstoff korrodiert zu einem wässrigen Gemisch aus Mineralphasen, von denen ursprünglich, stellvertretend für eine Vielzahl denkbarer Mineralien, Metaschoepit ($\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, theoretische Dichte $4,998 \text{ g/cm}^3$, /KIE 03/) ausgewählt wurde /GMA 09/. Aus Gründen der Vergleichbarkeit zu früheren Arbeiten wird dies hier beibehalten. Das Eisen von Einbauten und Innenbehälter wandelt sich chemisch durch Korrosion zu $\text{Fe}(\text{OH})_3$ mit einer theoretischen Dichte von $3,12 \text{ g/cm}^3$ um.

Untersucht werden sowohl homogene Mischungen aus diesen beiden Korrosionsprodukten als auch Systeme, in denen Metaschoepit und $\text{Fe}(\text{OH})_3$ voneinander separiert sind. Im letzteren Fall stellt man sich vor, dass sich die schwerere Phase durch Gravitation in dem als liegend unterstellten Behälter unten absetzt und sich die leichtere darüber befindet. Dazu werden Metaschoepit und $\text{Fe}(\text{OH})_3$ innerhalb des zylinderförmigen Außenbehälters durch eine Fläche getrennt modelliert, die parallel zur Zylinderachse verläuft. In beiden Fällen wird der gesamte Innenraum des Außenbehälters von den jeweiligen Systemen vollständig ausgefüllt.

Bei einem Teil der Rechnungen wurden die restlichen Materialien, bestehend aus Einbauten, Innenbehälter und Hüllrohren (z. B. Zr, Ni, Mn, Cr, Al, B usw.) dem $\text{Fe}(\text{OH})_3$ im Modell beigefügt, wobei die gewichtsbezogenen Relationen zu dem die Masse dominierenden Eisen erhalten bleiben. Bedingt durch die geringere Dichte der Korrosionsprodukte im Vergleich zu den Ausgangsstoffen ist gleichzeitige Massenerhaltung für die Korrosionsprodukte des Spaltstoffs und der Materialien aus Einbauten und Innenbehälter im verfügbaren Volumen nicht möglich. Infolgedessen mussten bei der Durchführung der Kritikalitätsrechnungen diesbezüglich Näherungen eingeführt werden. In dem den Kritikalitätsrechnungen zugrunde liegenden Rechenmodell verbleibt der gesamte vollständig korrodierte Spaltstoff im Behälter (Massenerhaltung für Uran) und die Korrosionsprodukte der Materialien aus Einbauten und Innenbehälter füllen das verbleibende Restvolumen auf, was etwa 22,85 % ihrer ursprünglichen Masse erfordert. Der restliche Massenanteil (77,15 % der ursprünglichen Masse) wird in den Rechnungen nicht erfasst bzw. kann als unkorrodiert interpretiert werden. Bei dem homogenen System werden diese Randbedingungen durch geeignete Wahl der Volumenanteile im Spaltstoff-Materialien-Gemisch, bei dem heterogenen durch entsprechende Festlegung der Trennfläche im Behälterinneren umgesetzt.

Abb. 2.5 zeigt Querschnitte durch den POLLUX-Behälter senkrecht zur Behälterachse für ein homogenes System (linkes Bild) und ein heterogenes System (rechtes Bild). In beiden Fällen ist das Uran vollständig korrodiert. Während beim homogenen System $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ und $\text{Fe}(\text{OH})_3$ eine homogene Mischung eingehen, sind sie im heterogenen System räumlich getrennt.

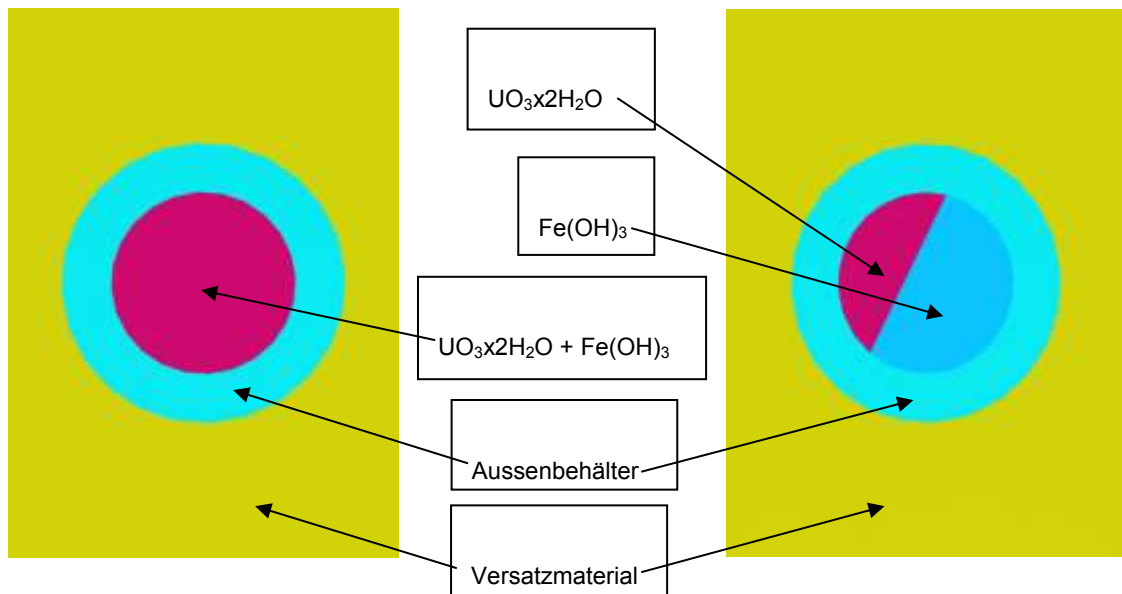


Abb. 2.5 Vergleich zweier Geometrien für einen POLLUX-Behälter mit vollständig korrodierten Brennstäben, Einbauten und Innenbehälter

Tab. 2.4 fasst die Rechenergebnisse zusammen. Die erste Spalte zeigt den Systemtyp (homogen oder heterogen), die zweite Spalte gibt an, ob dem Korrosionsprodukt $\text{Fe}(\text{OH})_3$ die Materialien aus Einbauten und Innenbehälter beigefügt sind oder nicht. In den folgenden (Doppel-)Spalten sind die effektiven Multiplikationsfaktoren k_{eff} und die zugehörigen Standardabweichungen für ^{235}U -Anreicherungen von 4,0 % und 4,2 % aufgelistet.

Tab. 2.4 Effektive Multiplikationsfaktoren und Standardabweichungen für homogene und heterogene Spaltstoffverteilungen in einem korrodierten POLLUX-Innenbehälter in Abhängigkeit von der ^{235}U -Anreicherung.

Spaltstoffverteilung	Material in $\text{Fe}(\text{OH})_3$	4,0 % ^{235}U		4,2 % ^{235}U	
		k_{eff}	Sigma	k_{eff}	Sigma
Homogen	nein	1,06054	0,00024	1,08018	0,00031
Homogen	ja	0,98580	0,00020	1,00524	0,00022
Heterogen	nein	1,16873	0,00037	1,17733	0,00037
Heterogen	ja	1,16720	0,00039	1,17500	0,00034

Tab. 2.4 zeigt, dass unter der Annahme von Massenerhaltung für Uran in dem zugrunde liegenden Modell Kritikalität sowohl für homogene als auch für heterogene Spaltstoffverteilungen möglich ist. Die einzige Ausnahme stellt dabei die homogene Spaltstoffverteilung (Anreicherung 4,0 % ^{235}U) mit Restmaterial im Korrosionsprodukt

Fe(OH)₃ dar, bei der der effektive Multiplikationsfaktor unter 1,0 bleibt. Im selben Modell tritt bei einer Anreicherung von 4,2 % Kritikalität auf.

Der Einfluss von Restmaterial im Fe(OH)₃ auf den effektiven Multiplikationsfaktor ist bei homogenen Spaltstoffverteilungen wesentlich größer als bei heterogenen. Während das Restmaterial im Fe(OH)₃ bei den homogenen Spaltstoffverteilungen zu einer Reduzierung des effektiven Multiplikationsfaktors um bis zu ca. 7500 pcm führt, liegen die Effekte bei den heterogenen Spaltstoffverteilungen kaum über den statistischen Unsicherheiten. Dieser Unterschied dürfte durch die Verdrängung von Moderator (OH⁻ Ionen) sowie eine geringe Absorptionswirkung der zusätzlichen Materialien begründet sein, die in einem Fall in der spaltstoffhaltigen Phase eingebracht sind und im anderen Fall davon separiert auftreten.

2.3.2.2 Korrodierter Spaltstoff und korrodierte Einbauten im intakten Innenbehälter

In diesem Teilszenario wird angenommen, dass nur der Brennstoff, die Hüllrohre und die Einbauten korrodiert sind, während das Material sowohl des Innen- als auch des Außenbehälters unkorrodiert vorliegen. Der Spaltstoff liegt bei diesen Untersuchungen entweder in vollständig korrodierter Form als reines Metaschoepit UO₃·2H₂O oder als Metaschoepit zusammen mit unkorrodiertem UO₂ vor. Die Materialien der Hüllrohre und der Einbauten formieren sich nicht zu Korrosionsprodukten sondern zu homogenen Materialmischungen, die selbst entweder mit dem Spaltstoffdioxid und/oder seinem Korrosionsprodukt Metaschoepit homogene Gemische bilden oder eigene getrennte Zonen im Behälterinneren belegen können.

Bei der Korrosion von UO₂ zu UO₃·2H₂O vergrößert sich das für die Aufnahme der gesamten Uranmasse notwendige Volumen wegen der unterschiedlichen Urandichten (Urandichte in UO₂ ca. 9,167 gU/cm³ und in UO₃·2H₂O ca. 3,693 gU/cm³) erheblich, sodass bei vollständiger Korrosion des UO₂ für die Materialien der Hüllrohre und Einbauten rechnerisch nur ca. 40,06 % des zur Massenerhaltung erforderlichen Volumens verfügbar ist. Als Näherung sind also entweder das Abweichen von der Massenerhaltung für die Materialien der Hüllrohre und Einbauten bei gleichzeitiger vollständiger Korrosion von UO₂ zu UO₃·2H₂O oder die Beibehaltung der Massenerhaltung bei einer nur teilweisen Korrosion des Urans und der gleichzeitigen Koexistenz von UO₂ und UO₃·2H₂O denkbar.

Damit die Massen der Materialien der Hüllrohre und Einbauten und des Urans erhalten bleiben und gleichzeitig das verfügbare Volumen vollständig ausgeschöpft wird, können nur ca. 61,265 % der vorhandenen Uranmasse zu $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ korrodieren. Die restliche Uranmasse liegt weiterhin als UO_2 vor. Insgesamt verteilt sich das verfügbare Volumen prozentual wie folgt auf die einzelnen Komponenten: UO_2 13,516 %, $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 53,063 %, und Materialien der Hüllrohre und Einbauten 33,421 %.

In den Kritikalitätsrechnungen wurden beide Varianten (Massenerhaltung für die Materialien der Hüllrohre und Einbauten; ja oder nein) mit einer homogenen Spaltstoffverteilung sowie mit mehreren heterogenen Spaltstoffverteilungen mit jeweils unterschiedlichen geometrischen Konfigurationen modelliert. In allen betrachteten Fällen wurde die Massenerhaltung für Uran beibehalten.

Bei der homogenen Spaltstoffverteilung wird das gesamte frei verfügbare Volumen, ein zylindrischer Hohlraum mit einem Radius von 34,5 cm und einer Höhe von 459,8 cm, mit einer homogenen Mischung aus den Materialien von Hüllrohren und Einbauten und dem Spaltstoff UO_2 und/oder dem Korrosionsprodukt des Spaltstoffs $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ aufgefüllt. In der Variante mit Massenerhaltung für die Materialien der Hüllrohre und Einbauten (HRM+EBM) werden sowohl der Spaltstoff als auch sein Korrosionsprodukt Metaschoepit in der homogenen Mischung modelliert. Im anderen Fall ist dazu nur das Korrosionsprodukt erforderlich. In **Abb. 2.6** verdeutlichen Schnitte senkrecht und parallel zur Behälterachse die geometrische Modellierung.

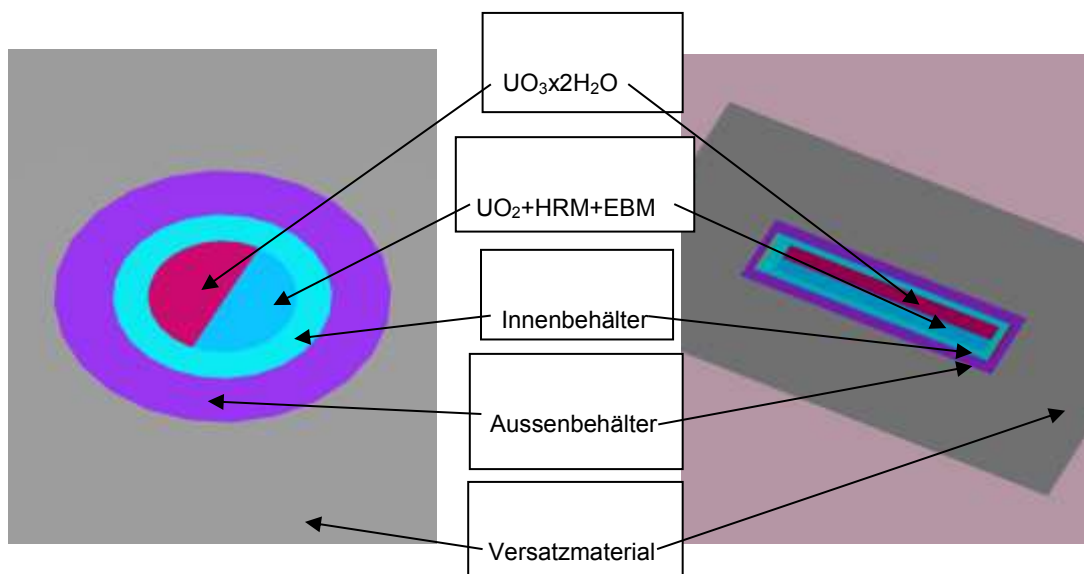


Abb. 2.6 Geometriemodell 'Trennfläche im Zylinder'. Schnittebenen senkrecht (linkes Bild) und parallel (rechtes Bild) zur Behälterachse

Im Fall der heterogenen Spaltstoffverteilungen wird der Behälterinnenraum mit mehreren Zonen mit Spaltstoff, korrodiertem Spaltstoff und Materialien aus Hüllrohren und Einbauten ausgefüllt. Wird die Massenerhaltung für die Materialien aus Hüllrohren und Einbauten eingehalten, so sind drei Zonen, jeweils eine für $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, UO_2 und die Materialien aus Hüllrohren und Einbauten, notwendig. Wird auf diese Randbedingung verzichtet, dann genügen zwei Zonen, weil UO_2 nicht erforderlich ist.

In den Kritikalitätsrechnungen zu den heterogenen Spaltstoffverteilungen wurden verschiedene geometrische Modelle verwendet:

- Geometrie der 'Seriell angeordneten Zylinder': Die Zonen werden durch Zylinder mit einheitlichem Radius (34,5 cm) aber unterschiedlicher, dem jeweiligen Zonenvolumen geschuldeter Länge, dargestellt. Die Zylinder werden hintereinander (seriell) zentriert auf der Behälterachse ausgerichtet.
- Geometrie der 'Zylinderschalen': Die Zonen werden durch Zylinderschalen mit einheitlicher Länge (459,8 cm) aber unterschiedlichen, vom jeweiligen Zonenvolumen abhängigen Zylinderinnen- und außenradien aufgebaut.

In **Abb. 2.7** werden die Geometriemodelle der 'Seriell angeordneten Zylinder' (linkes Bild) und der 'Zylinderschalen' gegenübergestellt. Die Farbzuzuweisung ist für beide Bil-

der identisch. Die Abkürzung 'HRM+EBM' steht für eine homogene Mischung aus Hüllrohrmaterial und Material der Einbauten.

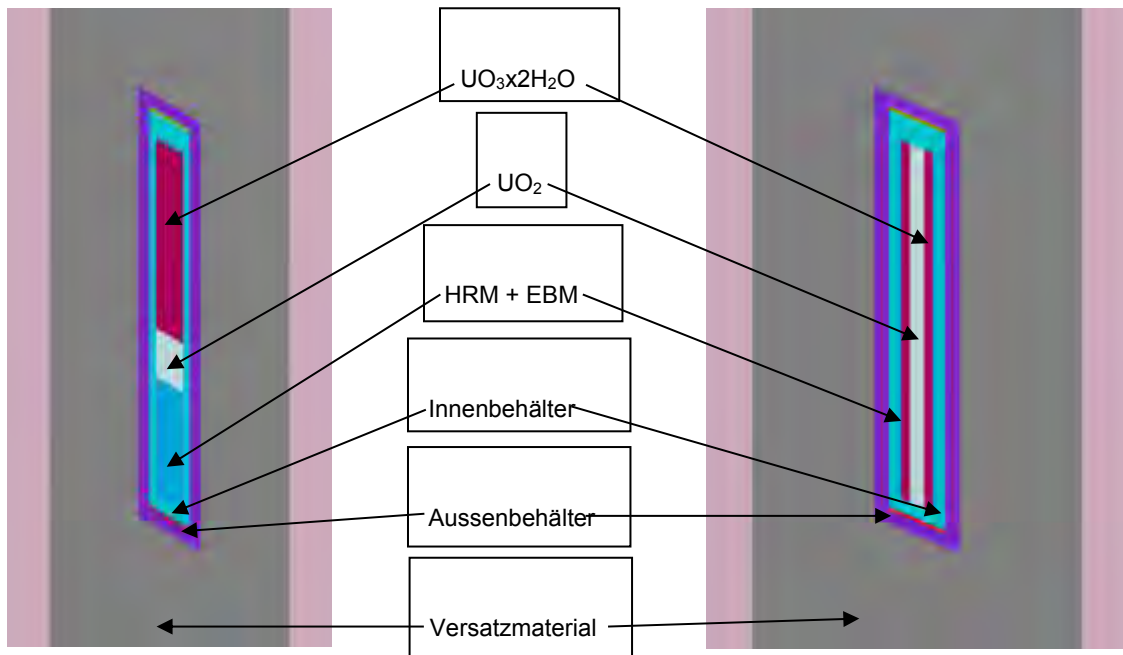


Abb. 2.7 Vergleich der Geometriemodelle 'Seriell angeordneten Zylinder' und 'Zylinderschalen' (rechtes Bild) mit Zonen für UO_2 und UO_3x2H_2O . Querschnitt parallel zur Behälterachse (heterogene Spaltstoffverteilung)

Tab. 2.5 listet die Resultate der Kritikalitätsrechnungen zu einem POLLUX-Behälter mit intaktem Innenbehälter aber vollständig korrodierten Brennstäben und Einbauten auf. Die Ergebnisse sind nach Spaltstoffverteilungen und nach den verwendeten Geometriemodellen geordnet. Außerdem werden die jeweiligen Beladungen mit Spaltstoff bzw. Spaltstoffkombinationen angegeben. Die Spalte 'MEH HRM+EBM' informiert, ob für den betreffenden Fall Massenerhaltung für die Materialien aus Hüllrohrmaterial und Einbauten (HRM+EBM) gegeben ist. Die Massenerhaltung für Uran ist in jedem Fall gewährleistet.

Tab. 2.5 Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen zum POLLUX-Behälter mit korrodierten Brennstäben und Einbauten bei Verwendung von unterschiedlichen Geometriemodellen und Brennstoffverteilungen.

Spaltstoffverteilung	Spaltstoff	MEH HRM+EBM	Geometrie	4,0 % ²³⁵ U		4,2 % ²³⁵ U	
				K _{eff}	Sigma	K _{eff}	Sigma
Homogen	UO ₂ +UO ₃ x2H ₂ O	ja	Zylinder	0,74402	0,00021	0,75852	0,00023
Homogen	UO ₃ x2H ₂ O	nein	Zylinder	1,01640	0,00032	1,02961	0,00027
Heterogen	UO ₃ x2H ₂ O	nein	Seriell angeordnete Zylinder	1,23075	0,00033	1,23869	0,00032
Heterogen	UO ₃ x2H ₂ O	nein	Zylinderschalen	1,21290	0,00035	1,22153	0,00033
Heterogen	UO ₂ / UO ₃ x2H ₂ O	ja	Seriell angeordnete Zylinder	1,22761	0,00032	1,23498	0,00040
Heterogen	UO ₂ / UO ₃ x2H ₂ O	ja	Zylinderschalen	1,09623	0,00031	1,10434	0,00030
Heterogen	UO ₃ x2H ₂ O / UO ₂ +(HRM+EBM)	ja	Trennfläche im Zylinder	1,15292	0,00038	1,16126	0,00032

Die in **Tab. 2.5** zusammengestellten Ergebnisse können auf der Grundlage der hier vorgestellten Rechenmodelle wie folgt interpretiert werden:

Bei homogenen Spaltstoffverteilungen mit Beimischungen von Materialien aus Hüllrohrmaterial und Einbauten (HRM+EBM) wurden keine Multiplikationsfaktoren über 1,0 berechnet, wenn Massenerhaltung nicht nur für den Spaltstoff sondern auch für (HRM+EBM) angenommen wird. Erst nach Aufgabe der Randbedingung 'Massenerhaltung für HRM+EBM' und Auffüllung des so frei werden Volumenanteils mit einem Korrosionsprodukt des Spaltstoffs (UO₃x2H₂O) wird für das System ein Multiplikationsfaktor größer als 1,0 berechnet.

Im Gegensatz dazu überschritten die effektiven Multiplikationsfaktoren aller hier betrachteter heterogener Spaltstoffverteilungen den Wert eins, ungeachtet davon, ob die Massenerhaltung für HRM+EBM beibehalten wurde oder nicht. Es zeigte sich allerdings, dass der Einfluss der Einhaltung der Randbedingung 'Massenerhaltung für HRM+EBM' auf den effektiven Multiplikationsfaktor stark vom jeweiligen Geometriemodell abhängt. Während der Verzicht auf die Massenerhaltung für HRM+EBM beim Mo-

dell der *'Seriell angeordneten Zylinder'* nur zu Zunahmen des effektiven Multiplikationsfaktors um ca. 0,30 % führt, sind es im Fall des Modells der *'Zylinderschalen'* etwa 9,6 %. Letzteres dürfte auf den geringeren räumlichen Abstand zwischen den Spaltstoffzonen und der Zone mit HRM+EBM beim Modell der *'Zylinderschalen'* und der daraus resultierenden besseren neutronenphysikalischen Ankopplung zwischen diesen Zonen zurückzuführen sein. Eine Vernachlässigung der Randbedingung *'Massenerhaltung für HRM+EBM'* mit der damit verbundenen Abnahme dieser Materialien (auch von Neutronenabsorbern wie beispielsweise Bor) hat in diesem Fall größere Auswirkungen auf den effektiven Multiplikationsfaktor als beim Modell der *'Seriell angeordneten Zylinder'*.

Im Szenario 1b wurden Multiplikationsfaktoren über 1,0 bei jedem der beiden betrachteten Subszenerarien (*'Homogene und heterogene Spaltstoffverteilungen im korrodierten POLLUX-Innenbehälter'* und *'Korrodiertes Spaltstoff und korrodierte Einbauten im intakten Innenbehälter'*) sowohl für homogene als auch für heterogene Spaltstoffverteilungen berechnet, wobei sich die heterogenen Spaltstoffanordnungen im Vergleich zu den homogenen Anordnungen als die deutlich reaktiveren erwiesen haben.

2.3.3 Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 1c: Korrodiertes Spaltstoff im intakten Behälter (Beladung mit frischem Brennstoff)

Die Brennstabkockille BSK-3 weist bei einem Innendurchmesser von 33 cm eine Innenhöhe von 488 cm auf. Die Behälterwand aus Eisen hat allseitig eine Dicke von 5 cm. Der Behälter wird als allseitig von einer 100 cm dicken Schicht aus Versatzmaterial umgeben modelliert. Das Szenario 1c basiert darauf, dass sich im Inneren der strukturell intakten BSK-3-Brennstabkockille nach Korrosion von Hüllrohren und Spaltstoff homogene Gemische aus Spaltstoff, Hüllrohrmaterial und Wasser bilden. Die BSK-3 wird in vertikalen Bohrlöchern, d. h. aufrecht stehend, eingelagert

Im hier betrachteten Rechenmodell wird das gesamte Behälterinnenvolumen mit verschiedenen Materialzonen unterschiedlicher Mischungsverhältnisse aufgefüllt. Die aktive Länge des Brennelements (390 cm) wird in zehn vertikal angeordneten zylindrischen Zellen mit einer einheitlichen Höhe von je 39 cm und einem Durchmesser von 33 cm aufgeteilt. Diese zehn Zellen enthalten homogene Spaltstoff-Hüllrohrmaterial-Wasser-Gemische mit von Zelle zu Zelle unterschiedlichen, aber innerhalb einer Zelle konstanten Spaltstoffdichten; dabei wird wegen möglicher schwerkraftbedingter Auf-

konzentrierungsprozesse ein vertikaler Dichtegradient für den Spaltstoff angenommen (Zunahme der Spaltstoffdichte mit abnehmender Höhe in der Brennstabkokille wegen vertikaler Endlagerung der BSK-3-Brennstabkokille). Weiterhin wurde in den einzelnen Zonen das Verhältnis der Dichten zwischen Hüllrohrmaterial und Spaltstoff unter Gewährleistung der Massenerhaltung konstant gehalten, sodass im homogenen Spaltstoff-Wasser-Hüllrohrmaterial-Gemisch mit wachsender Spaltstoffdichte auch die Hüllrohrmaterialdichte zunimmt. Entsprechend nimmt der nach dem Prinzip der Restwasserauffüllung bestimmte Wasseranteil ab, sodass in den untersten Spaltstoffzonen mit den größten Dichten von Spaltstoff und Hüllrohrmaterial kein Wasser mehr vorhanden ist. Die Reaktivität des Systems wird in diesem Modell maßgeblich von den höher liegenden Spaltstoffzonen mit niedrigerer Spaltstoffdichte aber höherem Wasseranteil bestimmt.

Das Rechenmodell enthält zusätzlich zu den zehn Spaltstoffzellen noch drei Zellen mit nichtaktivem Material. Zwei davon schließen sich oben und unten direkt an die Spaltstoffzellen an und beinhalten homogene Mischungen aus Hüllrohrmaterial und Wasser (HRM+H₂O). Diese Zellen weisen bei einem Durchmesser von 33 cm Höhen von 31,4 cm (untere Zelle) bzw. 19,4 cm (obere Zelle) auf. Damit entsprechen diese Höhen den Längen der nichtaktiven Brennstabenden. Die Hüllrohrmaterialdichten in den beiden Zellen wurden so gewählt, dass für das Hüllrohrmaterial Massenerhaltung gegeben ist. Die letzte Zelle (Höhe 47,2 cm, Durchmesser 33 cm) ist mit reinem Wasser gefüllt und bildet den oberen Abschluss im Behälterinnenraum der BSK-3-Brennstabkokille.

Abb. 2.8 zeigt eine schematische Darstellung des Dreizehn-Zonen-Modells mit zehn Spaltstoffzonen, zwei Zonen mit einem homogenen Gemisch aus Hüllrohrmaterial (HRM+H₂O) und einer Zone mit reinem Wasser.

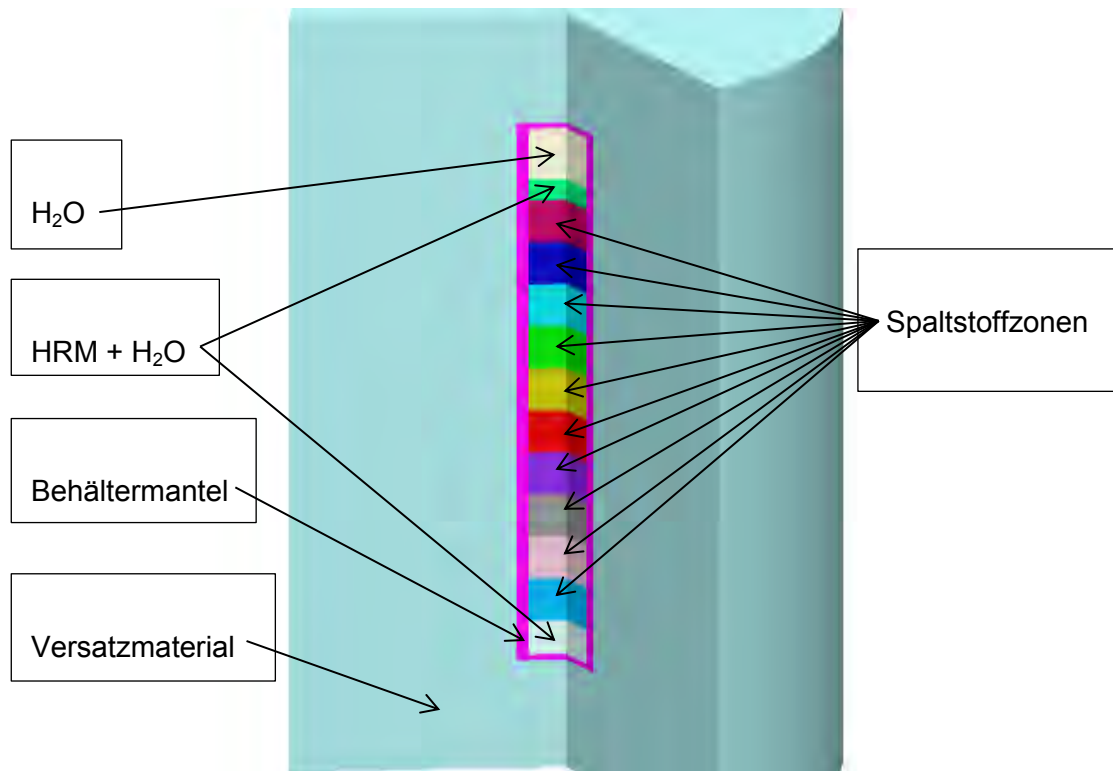


Abb. 2.8 Schematische Darstellung des Dreizehn-Zonen-Modells für die BSK-3-Brennstabkockille

Mit diesem Modell wurden die effektiven Multiplikationsfaktoren für sieben Fälle mit unterschiedlichen Ausgangswerten für die Spaltstoffdichte in der obersten Spaltstoffzone (minimale Spaltstoffdichte) ermittelt.

In **Tab. 2.6** sind für die betrachteten Fälle die minimalen und maximalen Spaltstoffdichten in der obersten und untersten Spaltstoffzone, die jeweiligen Schrittweiten in der Spaltstoffdichte pro Zone sowie die effektiven Multiplikationsfaktoren K_{eff} und Standardabweichungen bei U235-Anreicherungen von 4,0 % und 4,2 % aufgelistet.

Tab. 2.6 Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen zum Dreizehn-Zonen-Modell des BSK-3 Behältermodells

Minimale Urandichte gU/cm ³	0,75	1,00	1,25	1,50	1,75	2,00	3,00
Maximale Urandichte gU/cm ³	9,142	8,892	8,642	8,392	8,142	7,892	6,892
Dichteschrittweite gU/cm ³	0,932	0,877	0,821	0,766	0,710	0,655	0,432
Anreicherung 4,0 % ²³⁵ U							
k _{eff}	1,00596	1,00787	1,00942	1,00850	1,00437	0,99650	0,93961
Sigma	0,00043	0,00038	0,00046	0,00046	0,00038	0,00038	0,00038
Anreicherung 4,2 % ²³⁵ U							
k _{eff}	1,01610	1,01720	1,01898	1,01820	1,01357	1,00552	0,94768
Sigma	0,00042	0,00039	0,00044	0,00035	0,00041	0,00038	0,00038

Aus **Tab. 2.6** ist ersichtlich, dass Multiplikationsfaktoren größer 1,0 für das Dreizehn-Zonen-Modell der BSK-3 über einen weiten Bereich an Spaltstoffverteilungen im Behälterinneren berechnet werden. Dies zeigt das Werteintervall für die minimale Urandichte in der obersten Spaltstoffzone, in dem kritische Konfigurationen gefunden wurden. Nach den bereits erläuterten Modellvoraussetzungen kann die minimale Urandichte in der obersten Spaltstoffzone als grundlegender Modellparameter angesehen werden. Besagtes Werteintervall reicht von etwa 0,75 gU/cm³ bis näherungsweise 2 gU/cm³.

Die untere Intervallgrenze wird durch die Modellannahmen begrenzt, weil eine weitere Reduzierung der Urandichte in der obersten Spaltstoffzone zu einer maximalen Urandichte in der untersten Spaltstoffzone oberhalb der theoretisch maximal möglichen Urandichte im Spaltstoff führen würde. Die obere Intervallgrenze wird bestimmt durch das Moderationsverhalten: Eine Vergrößerung der minimalen Urandichte verringert signifikant den Wasseranteil und verschlechtert damit die Moderation in den für die Reaktivität des Systems relevanten oberen Spaltstoffzonen.

In der **Tab. 2.7** sind die Urandichten und die relativen Anteile an der Gesamtzahl der Spaltungen für jede einzelne der zehn Spaltstoffzonen aufgelistet. Zone 1 entspricht dabei der obersten Spaltstoffzone mit der niedrigsten Urandichte und Zone 10 der untersten mit der größten Dichte. Die über alle zehn Spaltstoffzonen gemittelte Urandichte beträgt dabei 4,9461 gU/cm³.

Tab. 2.7 Urandichten und relative Anteile an den Spaltungen pro Spaltstoffzone für das Dreizehn-Zonen-Modell mit einer minimalen Urandichte von $1,25 \text{ gU/cm}^3$ in der obersten Spaltstoffzone.

Spaltstoffzone	Urandichte gU/cm^3	Relativer Anteil an Spaltungen %
1	1,2500	29,013
2	2,0714	46,782
3	2,8927	20,467
4	3,7141	3,462
5	4,5354	0,267
6	5,3568	0,009
7	6,1781	0,000
8	6,9995	0,000
9	7,8208	0,000
10	8,6422	0,000
Summe		100,000

Tab. 2.7 verdeutlicht, dass die oberen Spaltstoffzonen mit relativ geringer Urandichte wie erwartet maßgebend für die Reaktivität sind. Während in den oberen drei Zonen mehr als 96 % aller Spaltungen stattfinden, werden in den unteren vier Zonen keine Spaltungen registriert. Das Maximum der Spaltratendichteverteilung liegt in der Spaltstoffzone 2.

Zu Vergleichszwecken wurden die effektiven Multiplikationsfaktoren für eine Befüllung des gesamten Innenraums der Brennstabkockille mit einer homogenen Mischung aus Spaltstoff, Wasser und, optional, Hüllrohrmaterial ermittelt. Dabei wurde für den Spaltstoff Massenerhaltung angesetzt, was zu einer über den Behälterinnenraum gemittelten Urandichte von $3,9528 \text{ g U/cm}^3$ führt. Die Ergebnisse der Rechnungen sind in der **Tab. 2.8** zusammengestellt.

Tab. 2.8 Effektive Multiplikationsfaktoren und zugehörige Standardabweichungen für die Brennstabkockille BSK-3 bei einer vollständigen Befüllung mit einer homogenen Spaltstoff-Wasser-Mischung mit und ohne Hüllrohrmaterial

Urandichte g U/cm ³	Mischung besteht aus	Anreicherung 4 % ²³⁵ U		Anreicherung 4,2 % ²³⁵ U	
		K _{eff}	Sigma	K _{eff}	Sigma
3,9528	UO ₂ +HRM+H ₂ O	0,89117	0,00037	0,89859	0,00039
3,9528	UO ₂ +H ₂ O	0,99797	0,00041	1,00533	0,00038

Aus **Tab. 2.8** ist ersichtlich, dass Kritikalität bei einer homogenen Verteilung des Spaltstoff-(Hüllrohrmaterial)-Wasser-Gemisches im Inneren der Brennstabkockille BSK-3 nur für ²³⁵U-Anreicherungen von 4,2 % und bei Vernachlässigung des Hüllrohrmaterials rechnerisch möglich ist.

2.3.4 Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 2a: POLLUX-Behälter mit korrodiertem Innenbehälter und Stabgitter-Aufweitung (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff)

In diesem Szenario wird angenommen, dass Innenbehälter und Einbauten vollständig zu nicht stöchiometrischem porösem Fe(OH)₃ korrodiert sind, wobei durch Einlagerung von Wasser in die Poren ein reaktiveres Moderationsverhältnis erreicht wird. Der Außenbehälter mit einem Innenradius ca. 50,6 cm und einer Wandstärke von etwa 27 cm wird bei diesen Untersuchungen, ebenso wie das durch Korrosionsprozesse und die dabei entstehenden Korrosionsprodukte aufgeweitete Brennstabgitter, als intakt angenommen.

Nach dieser Modellvorstellung sollen sowohl die Brennstäbe als auch die hexagonale Gitterstruktur erhalten bleiben und die 2360 Brennstäbe sich gleichmäßig auf die deutlich vergrößerte Querschnittsfläche (Innenradius des Außenbehälters 50,6 cm) verteilen. Die Gitterschrittweite steigt damit von vorher 1,333 cm auf 1,9838 cm. Der verbleibende Leerraum im Behälter wird vollständig mit Fe(OH)₃ ausgefüllt. Die Wassereinlagerung in den Poren des Fe(OH)₃ wurde durch eine homogene Mischung von Fe(OH)₃ und H₂O unter Beachtung des Prinzips der Restwasserauffüllung (Volumenanteile von Fe(OH)₃ und H₂O ergänzen sich zu 1,0) modelliert. Im Rahmen dieses Szenarios wurde als erste Näherung nur für den Brennstoff und das Hüllrohrmaterial Massenerhaltung unterstellt. Vom Material der Einbauten und des Innenbehälters wurde wegen der Volumenänderung beim Korrosionsprozess (theoretische Dichte Fe(OH)₃

3.120 g/cm^3) nur ein Teil der Eisenmasse im Korrosionsprodukt Fe(OH)_3 berücksichtigt. Maximal (Wasseranteil 0 % bei homogener Mischung von Fe(OH)_3 und H_2O) konnten ca. 27,78 % der Massen der Einbauten und des Innenbehälters erfasst werden, wobei dieser Prozentsatz mit steigendem Wasseranteil abnahm.

Bei der Durchführung der Kritikalitätsrechnungen wurde der Volumenanteil des Fe(OH)_3 schrittweise von 1 auf 0 verringert und der des Wassers entsprechend von 0 auf 1 erhöht. Für jeden dieser Schritte wurden die effektiven Multiplikationsfaktoren für ^{235}U -Anreicherungen von 4,0 % und 4,2 % ermittelt. Dabei wurden zwei Fälle unterschieden: Im ersten Fall wurde als Füllmaterial zwischen den Brennstäben ausschließlich Fe(OH)_3 ohne Beimengungen von anderen Bestandteilen der Einbauten und des Innenbehälters verwendet. Im zweiten Fall wurden diese Bestandteile gemäß ihrer Massenrelation zu Eisen im nicht korrodierten Zustand dem Fe(OH)_3 beigefügt.

In **Abb. 2.9** sind die Rechenergebnisse für ^{235}U -Anreicherungen von 4,0 % und 4,2 %, sowie für Fe(OH)_3 ohne Beimischung als auch mit Beimischung der Bestandteile aus Einbauten und Innenbehälter wie Cr, Ni, Mn, B usw. dargestellt. In der **Abb. 2.9** sind die Datensätze entsprechend gekennzeichnet. Beispielsweise werden mit '4 % ^{235}U , Fe(OH)_3 ' Rechnungen zu einer ^{235}U -Anreicherung von 4 % mit reinem Fe(OH)_3 als Füllmaterial bezeichnet. '4,2 % ^{235}U , Fe(OH)_3 +Mat' hingegen steht für eine ^{235}U -Anreicherung von 4,2 % mit einer homogenen Mischung aus Fe(OH)_3 und den Bestandteilen aus Einbauten und Innenbehälter als Füllmaterial.

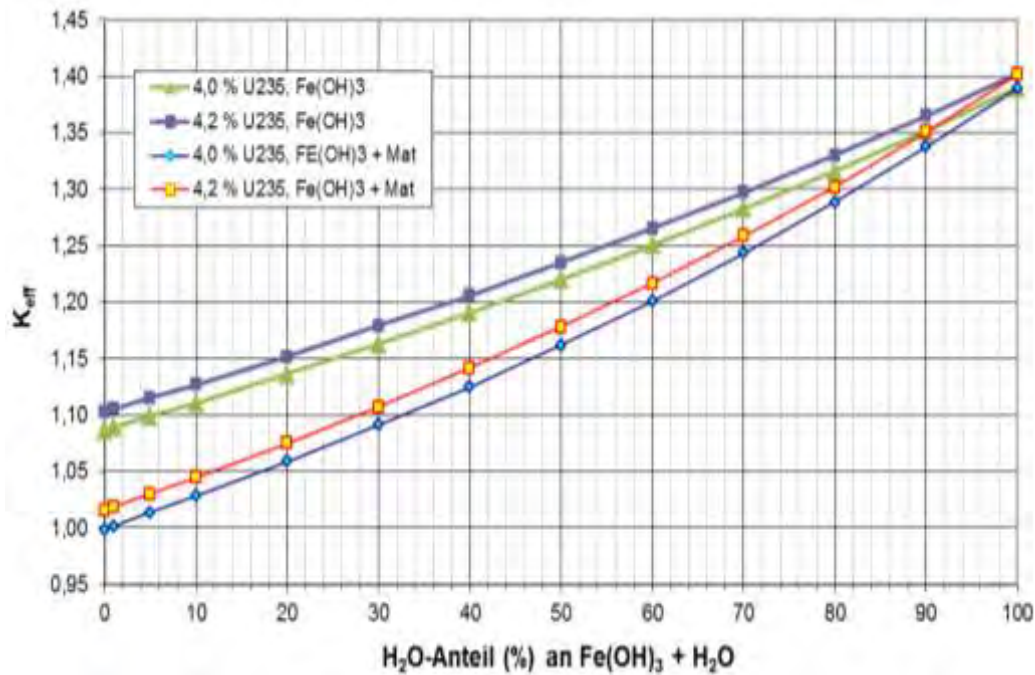


Abb. 2.9 Effektive Multiplikationsfaktoren für einen POLLUX-Behälter mit korrodiertem Innenbehälter und aufgeweitetem Brennstabgitter in Abhängigkeit vom Wasseranteil im Korrosionsprodukt $\text{Fe}(\text{OH})_3$.

Aus **Abb. 2.9** ist ersichtlich, dass bei diesem Modell, unabhängig von Anreicherung, Wasseranteil oder Beimischung von Material aus Einbauten und Innenbehälter, fast immer ein kritischer Zustand erreicht werden kann. Dies ist auf die Vergrößerung des Moderatorvolumens um einen Faktor von ca. 3,96 bei der Aufweitung des Brennstabgitters zurückzuführen. Lediglich bei einer ^{235}U -Anreicherung von 4,0 % für $\text{Fe}(\text{OH})_3$ mit Beimischungen von Materialien aber ohne Wasseranteil tritt ein effektiver Multiplikationsfaktor von $0,99883 \pm 0,00023$ auf. Bei einem Wasseranteil von einem Volumenprozent steigt der Multiplikationsfaktor auf $1,00183 \pm 0,00023$.

Bei Wasseranteilen bis etwa 60 % wird der effektive Multiplikationsfaktor mehr vom Vorhandensein der Beimischungen zum $\text{Fe}(\text{OH})_3$ als vom Anreicherungsgrad bestimmt. Mit zunehmenden Wasseranteilen und damit abnehmenden Beimischungen von Material aus Einbauten und Innenbehälter wird der Anreicherungsgrad dominant und bei einem Wasseranteil von 100 % gehen die Kurven mit gleicher Anreicherung ineinander über.

2.3.5 Kritikalitätsrechnungen zu Szenario 2b: Brennstabkokille BSK-3 mit korrodierendem Behälter und Stabgitter-Aufweitung (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff)

Nach der Modellvorstellung dieses Szenarios korrodiert der Behälter der BSK-3-Brennstabkokille zu nicht stöchiometrischem porösem $\text{Fe}(\text{OH})_3$, wobei sowohl die Brennstäbe als auch die hexagonale Gitterstruktur erhalten bleiben. Die 708 Brennstäbe verteilen sich während des an der Behälterinnenwand beginnenden Korrosionsprozesses sukzessive und gleichmäßig auf die im Verlauf des Korrosionsprozesses größer werdende verfügbare Querschnittsfläche des Behälters, sodass sich die Gitterschrittweite des Brennstabgitters von 1,181 cm zu Beginn des Korrosionsprozesses (Radius der verfügbaren Querschnittsfläche 16,5 cm) bis zu 1,539 cm nach vollständiger Korrosion des BSK-3-Behälters (Radius der verfügbaren Querschnittsfläche und Außenradius des Behälters 21,5 cm) vergrößert. Der verbleibende Leerraum zwischen den Brennstäben wird als vollständig mit $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ausgefüllt modelliert.

Bei der Durchführung der Kritikalitätsrechnungen wurde die Wandstärke des BSK-3-Behälters von innen her schrittweise reduziert und die Brennstäbe äquivalent zu Kapitel 2.3.4 in hexagonaler Anordnung gleichmäßig in der verfügbaren Querschnittsfläche verteilt. Für jeden dieser Schritte wurden die effektiven Multiplikationsfaktoren für ^{235}U -Anreicherungen von 4,0 % und 4,2 % ermittelt. Dabei wurden zwei Fälle unterschieden: Im ersten Fall wurde als Füllmaterial zwischen den Brennstäben $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ohne weitere Beimengung, im zweiten Fall wurde eine homogene Mischung aus $\text{Fe}(\text{OH})_3$ (80 Vol%) und H_2O (20 Vol%) angesetzt.

Im Rahmen dieses Szenarios konnte nur für den Brennstoff und das Hüllrohrmaterial Massenerhaltung gewährleistet werden. Vom Material der BSK-3-Brennstabkokille wurde wegen der Volumenänderung beim Korrosionsprozess (theoretische Dichte von $\text{Fe}(\text{OH})_3$ 3.12 g/cm^3) nur ein Teil im Korrosionsprodukt $\text{Fe}(\text{OH})_3$ berücksichtigt. Dieser Teil der erfassten korrodierten Behältermasse nahm mit zunehmender Korrosion des Behälters ab und sank bei vollständiger Korrosion des BSK-3-Behälters auf einen Wert von ca. 30,348 % für $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ohne H_2O , bzw. auf 24,278 % für $\text{Fe}(\text{OH})_3$ mit einem Anteil von 20 Vol% H_2O .

Unterstellt man am BSK-3-Behälter einen kontinuierlich fortschreitenden Korrosionsprozess mit einer konstanten Korrosionsrate, dann kann eine eindeutige Zuordnung zwischen dem Status der Korrosion und der dafür erforderlichen Zeit hergestellt wer-

den. In diesem Fall wurde von einer Korrosionsrate von $10 \mu\text{m/a}$ /GMA 09/ ausgegangen. Dabei beträgt die Zeitspanne für eine vollständige Korrosion des BSK-3-Behälters 5000 a vom Beginn des Wasserzutritts an gerechnet.

In **Abb. 2.10** ist für die BSK-3-Brennstabkokille die Abhängigkeit des effektiven Multiplikationsfaktors vom fortschreitenden Korrosionsprozess dargestellt. Ausgehend vom Zeitpunkt des Wasserzutritts zur BSK-3-Brennstabkokille wird die Umwandlung von Behältermaterial zum Korrosionsprodukt über die Korrosionsrate von $10 \mu\text{m/a}$ mit der seitdem abgelaufenen Zeit verknüpft. Betrachtet wurden U235-Anreicherungen von 4,0 % und 4,2 %. Für das Korrosionsprodukt $\text{Fe}(\text{OH})_3$ wurden Wasseranteile von 0 und 20 Vol% untersucht.

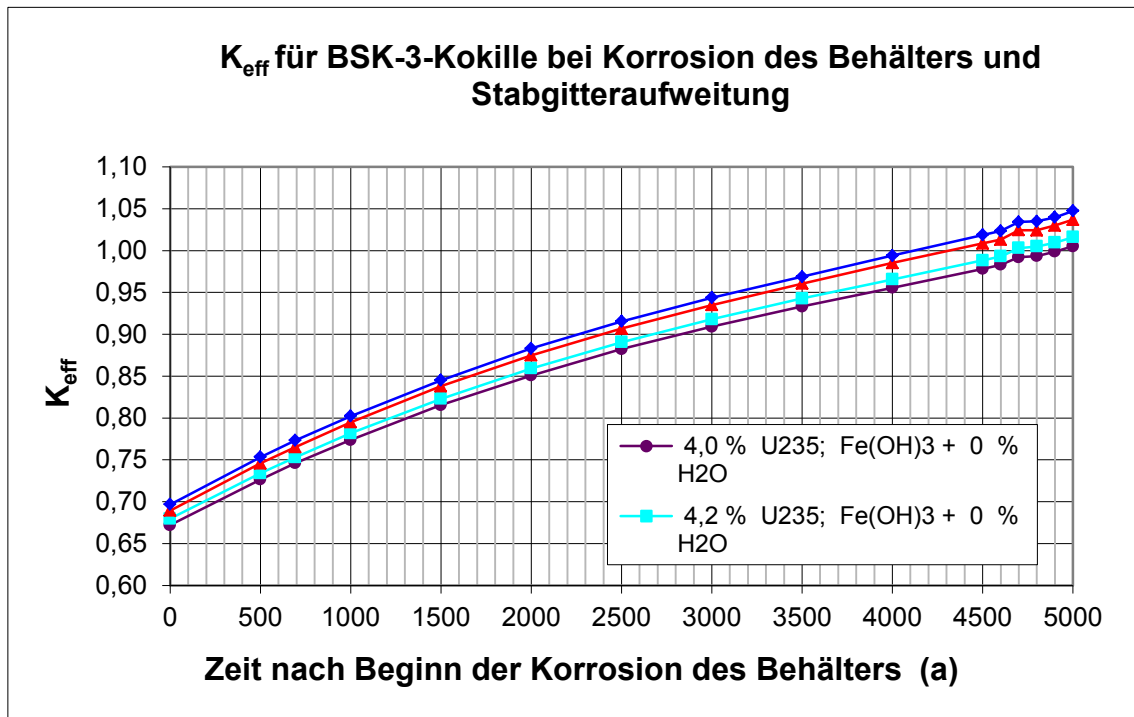


Abb. 2.10 Zeitliche Entwicklung der effektiven Multiplikationsfaktoren k_{eff} bei einer BSK-3-Brennstabkokille im Modell der Stabgitter-Aufweitung im Verlauf des Korrosionsprozesses

Aus **Abb. 2.10** geht hervor, dass die effektiven Multiplikationsfaktoren für alle untersuchten Systeme mit fortschreitendem Korrosionsgrad ansteigen und dass sie innerhalb der für die vollständige Korrosion des Behälters angenommenen Zeitspanne von 5000 Jahren den Wert 1,0 erreichen bzw. überschreiten. Bei den reaktiveren Systemen (Korrosionsprodukt $\text{Fe}(\text{OH})_3 + 20 \text{ Vol}\% \text{ H}_2\text{O}$) erfolgt dies zu einem früheren Zeitpunkt (nach etwa 4200 Jahren bei 4,2 % Anreicherung, bzw. nach ca. 4400 Jahren bei 4,0 %

Anreicherung) und bei den Systemen mit $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ohne Wasseranteil zu späteren Zeitpunkten (nach ca. 4700 Jahren bei 4,2 % Anreicherung, bzw. nach etwa 5000 Jahren bei 4,0 % Anreicherung).

2.3.6 Zusammenfassung der Kritikalitätsanalysen

Die Untersuchungen zur Kritikalitätssicherheit beziehen sich in beiden hier betrachteten Szenarien auf zwei unterschiedliche Typen von Endlagerbehältern, nämlich die Brennstabkokille BSK-3 und den POLLUX-Behälter. In der Brennstabkokille BSK-3 können die vereinzelt Brennstäbe von bis zu drei, im POLLUX-Behälter von bis zu zehn DWR-Brennelementen untergebracht werden. Als Spaltstoff wurde in den hier durchgeführten, den probabilistischen Szenarienanalysen als Voruntersuchung vorangestellten Betrachtungen unbestrahltes UO_2 mit einer Anreicherung von 4,0 bzw. 4,2 % ^{235}U angenommen.

Abweichend von früheren Analysen /GMA 09/ wird hier eine Migration von Spaltstoff in Bereiche außerhalb des Behälters (ehemaliges Szenario 3) nicht weiter verfolgt, da aktuellere geochemische Berechnungen /CAN 10/ zeigen, dass während des Betrachtungszeitraums eine hinsichtlich Kritikalität signifikante Aufkonzentrierung von Brennstoff im Behälternahfeld nicht zu erwarten ist.

In den neu definierten und ergänzten Szenarien 1b und 2a wurden sowohl Fälle mit und ohne Korrosion des Innenbehälters des POLLUX-Behälters betrachtet. Der Außenbehälter bleibt in jedem dieser Szenarien intakt. Sowohl für die Brennstabkokille BSK-3 als auch für den POLLUX-Behälter wurden Szenarien mit Korrosion von Brennstäben und Spaltstoff (erweiterte Szenarien 1b und 1c) als auch mit Korrosion an einem Behälter bei gleichzeitiger Aufweitung des Brennstabgitters (erweiterte Szenarien 2a und 2b) untersucht.

Die Kritikalitätsrechnungen zu den Szenarien mit Korrosion von Spaltstoff und Behältermaterialien zeigen, dass Kritikalität sowohl bei der Brennstabkokille BSK-3 als auch beim POLLUX-Behälter möglich ist. Bei beiden Behältertypen begünstigen heterogene Spaltstoffanordnungen das Auftreten von Kritikalität mehr als homogene. Bei der Brennstabkokille BSK-3 ist die Reaktivität des Systems durch eine homogene Spaltstoffverteilung signifikant reduziert, und kann bei Berücksichtigung von Hüllrohrmaterialien rechnerisch ausgeschlossen werden. Auch im Fall des POLLUX-Behälters führt die

Miteinbeziehung von Restmaterialien aus der Korrosion der Einbauten und Hüllrohre (z. B. Cr, Ni, usw.) zu einer deutlichen Verringerung der Reaktivität, wobei homogene Spaltstoffverteilungen davon wesentlich ausgeprägter betroffen sind als heterogene.

Die in den Szenarien 2a und 2b untersuchte Aufweitung des Stabgitters mit intakten Brennstäben nach Behälterkorrosion führt sowohl bei der Brennstabkokille BSK-3 als auch beim POLLUX-Behälter mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit zur Kritikalität. Beimischungen von Restmaterialien aus der Korrosion der Einbauten und des Innenbehälters (nur bei POLLUX-Behälter) haben darauf nur sehr geringen Einfluss.

2.4 Probabilistische Analysen

Eine der Aufgabenstellung im vorliegenden Vorhaben bestand, darin, die Anwendung probabilistischer Methoden auf die Frage nach der möglichen Entstehung einer Kritikalität in der Nachverschlussphase eines Endlagers weiter zu entwickeln. Zu diesem Zweck wurde das bereits in /GMA 09/ beschriebene mathematische Modell der Markov-Prozesse verwendet und durch Modifikation der Eingangsparameter und Veränderungen an der Auswahl der Szenarien ausgebaut. So wurden in diesem Vorhaben die Analysen einerseits auf zusätzliche Szenarien wie die Behandlung der Brennstabkokille BSK-3 sowie Behälterbeladungen mit frischem Brennstoff ausgeweitet und andererseits wurde ein Szenario, die *selektive Aufkonzentrierung von Uran im Versatzmaterial des Behälternahfeldes*, aus der Betrachtung entnommen.

2.4.1 Modifikation von Eingangsparametern

Die oben beschriebenen Veränderungen bei den Eingangsparametern und Szenarien machen Anpassungen bei den Referenzwerten und Unsicherheiten der Parameter erforderlich. In den Tabellen Tab. 2.9 bis sind Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter der modifizierten Szenarien sowie, zu Vergleichszwecken, die der alten Szenarios aus /GMA 09/ aufgelistet.

Tab. 2.9 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des ursprünglichen Szenario 1 nach /GMA 09/

POLLUX, Abbrand (GRS-A-3486)						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
1	Korrosionsrate	10 µm/a	Histogramm	75% (0,1; 10) µm/a	25% (10; 100) µm/a	Wandstärke 50 cm
2	Kein Selbstverschluss	0,1	Histogramm	75% (0; 0,1)	25% (0,1; 1,0)	
3	Erhöhte Mg-Konz.	0,3	Gleichverteilung	U(0,2; 0,4)		
4	Schutzüberzug hält	0,15	Gleichverteilung	U(0,1; 0,2)		
5	Separation Ak/Sp	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		
6	Immobilisierung Ak	0,75	Gleichverteilung	U(0,6; 0,9)		
7	Zeitdauer Immo-Ak	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
8	Tertiäre. Phasen	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		
9	Zeitdauer Tert. Phasen	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
10	Auff. mit Tert. Ph.	0,7	Gleichverteilung	U(0,6; 0,8)		
11	Geeignete Geom.	0,1	Gleichverteilung	U(0,05; 0,15)		
12	Zeitdauer krit. H/U	35000	Gleichverteilung	U(10 000; 60 000)		

Tab. 2.10 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 1a

POLLUX, Abbrand						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
1	Korrosionsrate	10 µm/a	Histogramm	75% (0,1; 10) µm/a	25% (10; 100) µm/a	Wandstärke 50 cm
1b	Keine Kompaktierung	0,6	Gleichverteilung	U(0,4; 0,8)		Gebirgsdruck
2	Kein Selbstverschluss	0,1	Histogramm	75% (0; 0,1)	25% (0,1; 1,0)	
3	Erhöhte Mg-Konz.	0,3	Gleichverteilung	U(0,2; 0,4)		standortabhängig
4	Schutzüberzug hält	0,15	Gleichverteilung	U(0,1; 0,2)		Bevorzugte BS-Korr.
5	Separation Ak/Sp	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		
6	Immobilisierung Ak	0,75	Gleichverteilung	U(0,6; 0,9)		
7	Zeitdauer Immo-Ak	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
8	Tertiäre Phasen	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		
9	Zeitdauer Tert. Phasen	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
9b	Absorberverlust	0,7	Gleichverteilung	U(0,6; 0,8)		(BSK-3: kein Bor)
10	Auff. mit Tert. Ph.	0,7	Gleichverteilung	U(0,6; 0,8)		
11	Geeignete Geom.	0,1	Gleichverteilung	U(0,05; 0,15)		mit 9b korreliert
12	Zeitdauer krit. H/U	35000	Gleichverteilung	U(10 000; 60 000)		mit 1b antikorreliert

Tab. 2.11 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 1b

POLLUX, unbestrahlt 4,2%						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
1	Korrosionsrate	10 µm/a	Histogramm	75% (0,1; 10) µm/a	25% (10; 100) µm/a	Wandstärke 50 cm
1b	Keine Kompaktierung	0,6	Gleichverteilung	U(0,4; 0,8)		Gebirgsdruck
2	Kein Selbstverschluss	0,1	Histogramm	75% (0; 0,1)	25% (0,1; 1,0)	
3	Erhöhte Mg-Konz.	0,3	Gleichverteilung	U(0,2; 0,4)		standortabhängig
4	Schutzüberzug hält	0,15	Gleichverteilung	U(0,1; 0,2)		Bevorzugte BS-Korr.
5	Separation Ak/Sp	1				unbestrahlter BS
6	Immobilisierung Ak	0,75	Gleichverteilung	U(0,6; 0,9)		
7	Zeitdauer Immo-Ak	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
8	Tertiäre. Phasen	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		
9	Zeitdauer Tert. Phasen	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
9b	Absorberverlust	0,7	Gleichverteilung	U(0,6; 0,8)		(BSK-3: kein Bor)
10	Auff. mit Tert. Ph.	0,7	Gleichverteilung	U(0,6; 0,8)		
11	Geeignete Geom.	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		mit 9b korreliert
12	Zeitdauer krit. H/U	30 000	Gleichverteilung	U(10 000; 50 000)		mit 1b antikorreliert

Tab. 2.12 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 1c

BSK-3, unbestrahlt 4,2%						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
1	Korrosionsrate	10 µm/a	Histogramm	75% (0,1; 10) µm/a	25% (10; 100) µm/a	Wandstärke 5 cm
1b	Keine Kompaktierung	0,3	Gleichverteilung	U(0,2; 0,4)		Gebirgsdruck
2	Kein Selbstverschluss	0,1	Histogramm	75% (0; 0,1)	25% (0,1; 1,0)	
3	Erhöhte Mg-Konz.	0,3	Gleichverteilung	U(0,2; 0,4)		standortabhängig
4	Schutzüberzug hält	0,15	Gleichverteilung	U(0,1; 0,2)		Bevorzugte BS-Korr.
5	Separation Ak/Sp	1				unbestrahlter BS
6	Immobilisierung Ak	0,75	Gleichverteilung	U(0,6; 0,9)		
7	Zeitdauer Immo-Ak	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
8	Tert. Phasen	0,8	Gleichverteilung	U(0,7; 0,9)		
9	Zeitdauer Tert. Phasen	5500 a	Gleichverteilung	U(1000; 10 000) a		
10	Auff. mit Tert. Ph.	0,7	Gleichverteilung	U(0,6; 0,8)		
11	Geeignete Geom.	0,5	Gleichverteilung	U(0,4; 0,6)		
12	Zeitdauer krit. H/U	25 000	Gleichverteilung	U(10 000; 40 000)		mit 1b antikorreliert

Tab. 2.13 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des ursprünglichen Szenario 2 nach /GMA 09/

POLLUX, Abbrand (GRS-A-3486)						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
13	Auffüllung mit Fe-KP	0,25	Gleichverteilung	U(0,1; 0,4)		
14	Aufweitung der BS	0,05	Gleichverteilung	U(0,0; 0,1)		
15	Zeitdauer H/U	50 500	Gleichverteilung	U(1000, 100 000)		

Tab. 2.14 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 2a

POLLUX, unbestrahlt						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
13	Auffüllung mit Fe-KP	0,25	Gleichverteilung	U(0,1; 0,4)		
14	Aufweitung der BS	0,075	Gleichverteilung	U(0,0; 0,15)		mit 1b korreliert
15	Zeitdauer H/U	30 500	Gleichverteilung	U(1000, 100 000)		

Tab. 2.15 Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 2b

BSK-3, unbestrahlt						
P#	Parameter Name	Referenzwert	Unsicherheit Typ	Unsicherheit Wert 1	Unsicherheit Wert 2	Kommentar
13	Auffüllung mit Fe-KP	0,25	Gleichverteilung	U(0,1; 0,4)		
14	Aufweitung der BS	0,1	Gleichverteilung	U(0,0; 0,2)		mit 1b korreliert
15	Zeitdauer H/U	16 000	Gleichverteilung	U(1000, 35 000)		

Ein Vergleich von **Tab. 2.8** bis **Tab. 2.15** zeigt, dass ein Großteil der Referenzwerte und Unsicherheiten unverändert von den ursprünglichen Szenarien 1 und 2 in die modifizierten Szenarien 1a, 1b und 1c sowie 2a und 2b übernommen wurde. Im Folgenden wird eine kurze Zusammenfassung der Veränderungen (gelb markiert) bei den Referenzwerten und Unsicherheiten gegeben.

Neu aufgenommen bei den modifizierten Szenarien wurden die folgenden Parameter:

‘Keine Kompaktierung’ (Parameter 1b). Mit diesem Parameter wird der Einfluss des auf den Behältern lastenden Gebirgsdrucks berücksichtigt. Eine Kompaktierung des Behälters macht wegen der damit signifikant reduzierten Moderation eine Kritikalität nahezu unmöglich. Im Fall des POLLUX-Behälters wird für diesen Parameter ein Wert von 0,6 mit einer gleichverteilten Unsicherheit von 0,4 bis 0,8 angenommen. Bei der Brennstabkocille BSK-3 beträgt der Parameterwert wegen der wesentlich dünneren Wandstärke des Behälters und der daraus resultierenden geringeren Resistenz gegenüber dem Gebirgsdruck nur 0,3 (Unsicherheit von 0,2 bis 0,4).

‘Absorberverlust’ (Parameter 9b). Neutronenabsorber (z. B. borierter Stahl) in den Einbauten des POLLUX-Behälters garantieren während des bestimmungsgemäßen Betriebs die Kritikalitätssicherheit des eingelagerten Spaltmaterials. Nach erfolgter Korrosion der Einbauten begünstigt der Abtransport dieser Neutronenabsorber das Auftreten von Kritikalität. Im Fall des POLLUX-Behälters wird für diesen Parameter ein Wert von 0,7 mit einer gleichverteilten Unsicherheit von 0,6 bis 0,8 angenommen. Da bei der Brennstabkocille BSK-3 keine Neutronenabsorber verwendet werden, kommt dieser Parameter hier nicht zum Einsatz.

Die folgenden Parameter wurden in den modifizierten Szenarien gegenüber den ursprünglichen verändert:

‘Separation von Aktinoiden und Spaltstoff’ (Parameter 5). Die Trennung von Spaltstoff und Aktinoiden begünstigt bei abgebranntem Brennstoff das Auftreten von Kritikalität. Im Fall des POLLUX-Behälters mit einer Beladung aus abgebranntem Brennstoff wurde diesem Parameter im ursprünglichen (Szenario 1) und im modifizierten Szenario (Szenario 1a) ein Wert von 0,8 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,7 bis 0,9) zugewiesen. In den Szenarien 1b und 1c werden sowohl für den POLLUX-Behälter als auch für die Brennstabkocille BSK-3 Beladungen mit frischem Brennstoff unterstellt. Des-

halb wurde in diesen beiden Fällen für Parameter 5 ein Wert von 1 (ohne Unsicherheiten) angesetzt.

'Ausbildung einer geeigneten Geometrie' (Parameter 11). Das Entstehen einer für das Auftreten von Kritikalität geeigneten Geometrie ist maßgeblich von der Zusammensetzung und der Masse des relevanten Spaltstoffs abhängig. Der Wert dieses Parameters beträgt bei einer Beladung des POLLUX-Behälters mit abgebranntem Brennstoff sowohl für das ursprüngliche Szenario 1 als auch für das modifizierte Szenario 1a 0,1 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,05 bis 0,15). In den Szenarien 1b und 1c sind sowohl der POLLUX-Behälter als auch die Brennstabkockille BSK-3 mit frischem Brennstoff beladen. Deshalb wurde in Szenario 1b (POLLUX-Behälter) für den Parameter 11 ein Wert von 0,8 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,7 bis 0,9) und in Szenario 1c wegen der geringeren in der Brennstabkockille BSK-3 eingelagerten Spaltstoffmasse ein Wert von 0,5 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,4 bis 0,6) angesetzt.

'Zeitdauer bis zur Etablierung eines kritischen H/U-Verhältnisses' (Parameter 12). Bei einer Beladung des POLLUX-Behälters mit abgebranntem Brennstoff (Szenarien 1 und 1a) wird für diesen Parameter ein Wert von 35 000 Jahren (mit gleichverteilter Unsicherheit von 10 000 bis 60 000 Jahren) angenommen. Eine Beladung mit frischem Brennstoff sowie eine Verkleinerung des betroffenen Volumens - wie bei der Brennstabkockille BSK-3 im Vergleich zum POLLUX-Behälter - sollten diese Zeitspanne verkürzen. Deshalb wurden für die modifizierten Szenarien 1b (POLLUX-Behälter) und 1c (Brennstabkockille BSK-3) für Parameter 12 Werte von 30 000 Jahren (mit gleichverteilter Unsicherheit von 10 000 bis 50 000 Jahren) bzw. von 25 000 Jahren (mit gleichverteilter Unsicherheit von 10 000 bis 40 000 Jahren) angesetzt.

Im ursprünglichen Szenario 2 und in den modifizierten Szenarien 2a und 2b wird von einer vollständigen Korrosion des Innenbehälters (POLLUX-Behälter) bzw. des Behälters (Brennstabkockille BSK-3) mit nachfolgender Aufweitung des Brennstabgitters ausgegangen. Parameter 14 (*Aufweitung der Brennstäbe*) gibt dabei die Wahrscheinlichkeit für die Aufweitung des Brennstabgitters an. Im ursprünglichen Szenario 2 wurde dafür ein Wert von 0,05 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,0 bis 0,1) angesetzt. In den modifizierten Szenarien 2a (POLLUX-Behälter) und 2b (Brennstabkockille BSK-3) werden dafür Werte von 0,075 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,0 bis 0,15) bzw. 0,1 (mit gleichverteilter Unsicherheit von 0,0 bis 0,2) angenommen. Der höhere Wert im Fall der Brennstabkockille BSK-3 berücksichtigt die gegenüber dem POLLUX-Behälter niedrigere Anzahl an Brennstäben, die an einer Aufweitung des Gitters betei-

ligt sind. Die Zeitdauer bis zur Etablierung eines kritischen H/U-Verhältnisses ist für die Szenarien 2 und 2a mit 30500 Jahren (mit gleichverteilter Unsicherheit von 1 000 bis 100 000 Jahren) identisch. Im Fall der Brennstabkockille BSK-3 wird diese Zeitdauer wegen der geringeren Dicke der Behälterwandung und der damit verbunden kürzeren Korrosionszeit auf 16 000 Jahre (mit gleichverteilter Unsicherheit von 1 000 bis 35 000 Jahren) verkürzt.

2.4.2 Ergebnisse

Für jedes der modifizierten fünf Szenarien, drei für den POLLUX-Behälter (Szenarien 1a, 1b und 2a) und zwei für die Brennstabkockille BSK-3 (Szenarien 1c und 2b), wurden probabilistische Analysen vorgenommen und neben der Variation der Eintrittswahrscheinlichkeiten unter Einsatz der Unsicherheitsanalyse auch die Einflüsse der Unsicherheiten der einzelnen Modellparameter auf die Ergebnisse durch die Sensitivitätsanalyse bestimmt. Die Sensitivitätsanalyse liefert Informationen, welche Modellparameter einen relevanten und weniger relevanten Einfluss auf die Ergebnisunsicherheiten haben. Dazu wird der zeitabhängige Verlauf des Korrelationskoeffizienten herangezogen: Die Korrelationskoeffizienten relevanter Parameter verlassen im zeitlichen Ablauf mindestens einmal deutlich den Wertebereich $[-0,2, 0,2]$. Es wird hier ausdrücklich darauf hingewiesen, dass dieses Kriterium nur als erstes grobes Unterscheidungsmerkmal zu betrachten ist. Für eine genauere Aus- und Bewertung der Sensitivitätsanalyse müssen die Ergebnisse verschiedener Sensitivitätsmaße miteinander verglichen und in Verbindung mit dem analysierten Prozess interpretiert werden. Die Sensitivitätsanalysen wurden sowohl für kumulierte Verteilungen - im Folgenden auch mit Konsequenz 1 bezeichnet - als auch für Verteilungen, die sich auf 5 000-Jahresintervalle beziehen (Konsequenz 2) durchgeführt. Die Resultate für die einzelnen Szenarien sind in den folgenden Unterkapiteln dargestellt. Wo es möglich war, wurden zu Vergleichszwecken die Ergebnisse der ursprünglichen Szenarien 1 und 2 aus /GMA 09/ in die Abbildungen und Tabellen eingearbeitet.

Die Interpretation des Sensitivitätsverhaltens der relevanten Parameter in den verschiedenen Szenarien ist auf Grund der Kopplung der Parameter nicht immer eindeutig. Wo es möglich und sinnvoll erschien, wurde eine Interpretation durchgeführt. Da sich gleiche relevante Parameter in unterschiedlichen Szenarien sehr ähnlich verhalten, konzentriert sich diese Interpretation vorwiegend auf die Ergebnisse zu Szenario 1a.

Es wird an dieser Stelle ausdrücklich darauf hingewiesen, dass es sich bei den nachfolgenden Wahrscheinlichkeitsangaben ausschließlich um bedingte Wahrscheinlichkeiten handelt. Die Wahrscheinlichkeiten beziehen sich auf die Annahme, dass Ereignisse eingetreten sind (z. B. Erdbeben), die zu wasserführenden Klüften im Endlager geführt haben. Um die jeweiligen unbedingten Wahrscheinlichkeiten einer Kritikalität für die verschiedenen Fälle zu ermitteln, müssen die im Text aufgeführten Wahrscheinlichkeiten noch mit der Wahrscheinlichkeit des Ereignisses multipliziert werden, das zu den wasserführenden Klüften geführt hat.

2.4.2.1 Szenario 1a

Das modifizierte Szenario 1a behandelt die Bildung einer Mineralphase mit Kernbrennstoff im Inneren des POLLUX-Behälters. Die Beladung des POLLUX-Behälters besteht aus bestrahltem Brennstoff mit einem Abbrand von 40 GWd/tSM.

2.4.2.1.1 Eintrittswahrscheinlichkeit von Szenario 1a

In **Abb. 2.11** sind die Variationen der kumulierten Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Kritikalität im Fall von Szenario 1a dargestellt. Für diese Unsicherheitsanalyse wurden 100 Rechenläufe durchgeführt.

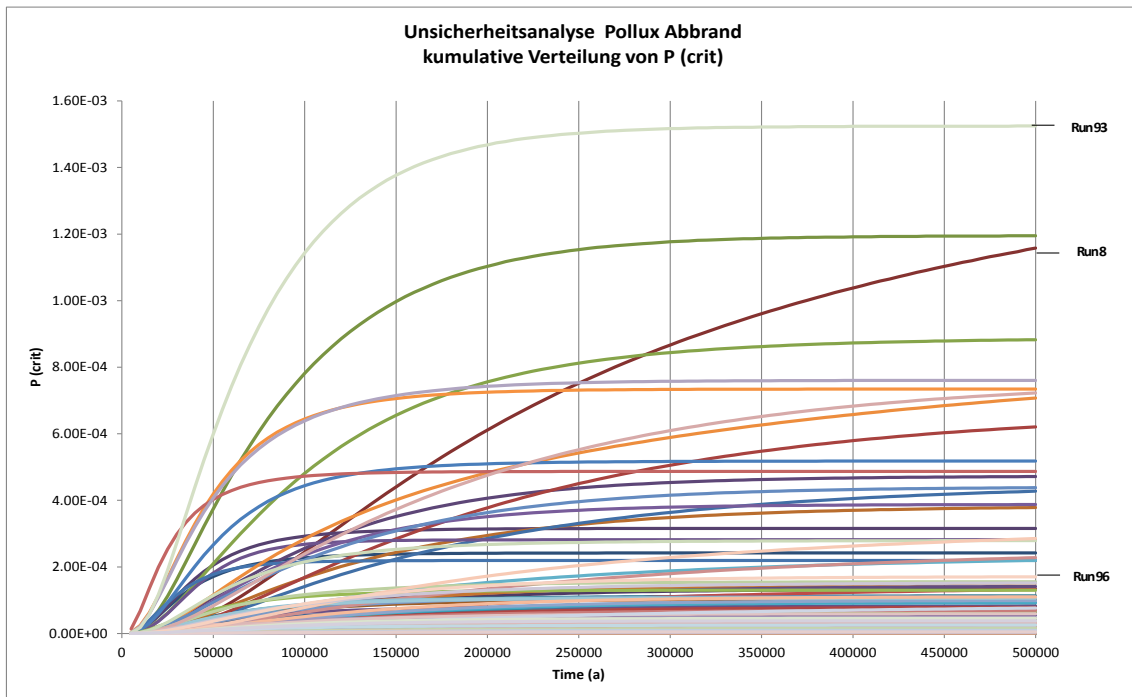


Abb. 2.11 Unsicherheiten der kumulierten Verteilungen von P(crit) im Szenario 1a (POLLUX-Behälter mit abgebranntem Brennstoff)

Aus **Abb. 2.11** ist ersichtlich, dass für Szenario 1a bei einem Großteil (ca. -79 %) der kumulierten Verteilungen die Wahrscheinlichkeit für das Entstehen einer Kritikalität im Endlager innerhalb von 500 000 Jahren $< 2 \cdot 10^{-4}$ ist.

In 10 von den 100 in der Unsicherheitsanalyse berücksichtigten kumulierten Verteilungen ist die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität im Zeitraum von 500 000 Jahren größer als $5 \cdot 10^{-4}$. Der Maximalwert tritt mit ca. $1.4 \cdot 10^{-3}$ bei dem Rechenlauf „Run 93“ auf.

In vier Fällen überschreitet die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität den Wert von $5 \cdot 10^{-4}$ innerhalb des Zeitraums von 100 000 Jahren und in einem Fall bereits innerhalb von 50 000 Jahren.

Im Rahmen der Unsicherheitsanalyse zeigen insbesondere die zeitlichen Verläufe der Kurven „Run 93“ und „Run 8“ besondere Auffälligkeiten.

„Run 93“ weist die größten Wahrscheinlichkeiten einer Kritikalität für das Zeitintervall zwischen 45 000 und 200 000 Jahren auf. Für Zeiträume $> 200\,000$ Jahre ist die Zunahme der Wahrscheinlichkeit P(crit) für diesen Lauf nur noch marginal.

Der Verlauf von „Run 8“ zeigt im Zeitintervall zwischen 100 000 und 150 000 Jahre keine besonderen Auffälligkeiten. Für Zeiträume jenseits von 150 000 Jahren werden erhebliche Wahrscheinlichkeitszuwächse registriert, wie sie beim größten Teil der restlichen Rechenläufe nicht auftreten. Das von „Run 8“ gezeigte Verhalten unterscheidet sich damit deutlich von dem überwiegenden Teil der restlichen Kurven.

Bei den erheblichen Unterschieden zwischen den Verläufen von „Run 93“ und „Run 8“ zur Kurve eines mittleren Verlaufs, wie z. B. „Run 96“, könnte man erwarten, dass man bei einem Vergleich der Parameterwerte bereits wesentliche Ursachen dafür erkennen kann. Dass dies hier aber durch einen einfachen Vergleich der Parameterwerte in den meisten Fällen nicht sofort ersichtlich ist, zeigt **Tab. 2.16**.

Tab. 2.16 Parameterwerte zu ausgewählten Kurvenverläufen der kumulierten Wahrscheinlichkeitsverteilung P(crit) für Szenario 1a

Parameter	Run 8	Run 93	Run 96
Korr.Rate	1.45E+00	1.37E+01	6.89E+00
Keine Kompaktierung	5.49E-01	4.47E-01	5.40E-01
Kein Selbstverschluss	7.73E-01	9.64E-01	9.93E-02
Geeignetes chem. Milieu	3.35E-01	3.39E-01	2.86E-01
Schutzüberzug hält	1.38E-01	1.25E-01	1.79E-01
Separation Ak/Sp	8.61E-01	8.99E-01	8.61E-01
Immobilisierung Ak	8.42E-01	7.97E-01	7.96E-01
Zeitdauer Immob. Ak	8.09E+03	4.39E+03	7.26E+03
Tertiäre Phasen	8.21E-01	8.98E-01	8.39E-01
Zeitdauer tert. Phasen	7.46E+03	5.03E+03	2.97E+03
Absorberverlust	7.15E-01	6.52E-01	6.17E-01
Auffüllung mit tert. Phasen	7.72E-01	6.28E-01	6.93E-01
Geeignete Geometrie	1.47E-01	1.29E-01	1.23E-01
Zeitdauer krit. H/U	5.83E+04	2.55E+04	3.64E+04

Anhand von **Tab. 2.16** soll untersucht werden, ob man Unterschiede in den Parameterwerten feststellen kann, die zu dem auffälligen Verhalten von „Run 8“ und „Run 93“ geführt haben. Dazu werden die Parameterwerte von „Run 93“ und „Run 8“ mit denen eines mittleren Verlaufs, z. B. „Run 96“, verglichen.

Bei Betrachtung der Parameterwerte lassen sich allenfalls bzgl. der Parameter ‚Korrosionsrate‘, ‚Kein Selbstverschluss‘, ‚Zeitdauer für die Bildung tertiärer Phasen‘ und vielleicht ‚Zeitdauer zur Etablierung eines kritischen H/U-Verhältnisses‘ etwas deutlichere Unterschiede zwischen den Läufen feststellen. Die Korrosionsrate von „Run 8“ ist niedriger und die von „Run 93“ höher als die von „Run 96“. Die Wahrscheinlichkeit, dass kein Selbstverschluss stattfindet, ist für „Run 93“ und „Run 8“ erheblich höher als die

von „Run 96“. Die zur Bildung von tertiären Phasen erforderliche Zeitspanne ist für „Run 96“ signifikant kleiner als die für „Run 93“ und „Run 8“. Die Zeitdauer, nach der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt, ist für „Run 8“ etwas höher als die der beiden anderen Läufe. Ob mit diesen unterschiedlichen Parameterwerten die großen Unterschiede zwischen den Rechenläufen „Run 93“, „Run 8“ und „Run 93“ erklärt werden kann, ist ungewiss.

Obwohl man es hier mit einer überschaubaren Anzahl von Parametern zu tun hat, lässt sich das Prozessverhalten aufgrund eines solchen Vergleichs von Parameterwerten kaum erfassen. Dies erklärt den Sinn und Zweck einer Sensitivitätsanalyse, mit der die Einflüsse von Parameterunsicherheiten auf die Ergebnisunsicherheiten quantifiziert werden können.

In **Abb. 2.12** werden die zeitlichen Verläufe einiger Kenngrößen (Median, Mittelwert, 95%-Quantile sowie der oberen zweiseitigen (90%,90%)- und einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen), die aus den Werten der kumulierten Verteilungen zu den jeweiligen Zeitpunkten ermittelt werden, dargestellt.

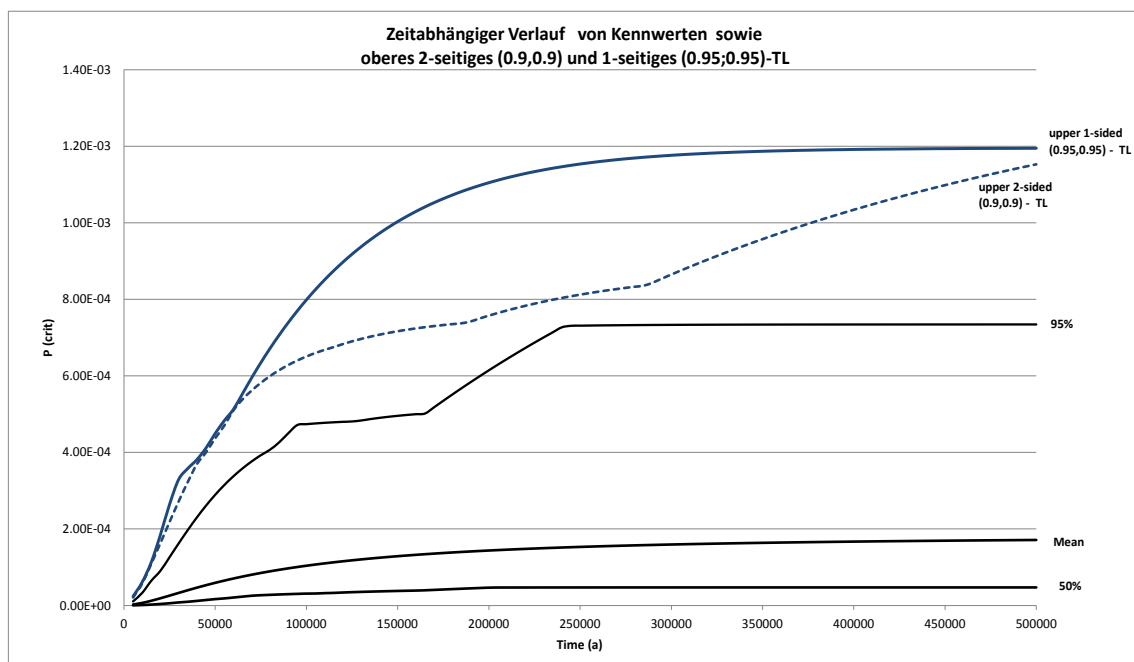


Abb. 2.12 Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten für Szenario 1a (Konsequenz 1)

Abb. 2.12 zeigt, dass der zeitliche Verlauf der Medianwerte im Zeitraum von 500 000 Jahren den Wert von ca. $5.E-5$ nicht überschreitet. Der Verlauf der Mittelwerte ist aufgrund des Vorhandenseins mehrerer extremer Verteilungen gegenüber dem Median-

verlauf erhöht, wobei der Wert $5 \cdot 10^{-5}$ nach ca. 40 000 Jahren überschritten wird. Der Mittelwert für die Wahrscheinlichkeit, dass eine Kritikalität im Endlager für den POLLUX-Behälter mit bestrahltem Brennstoff innerhalb von 500 000 Jahren auftritt, liegt bei ca. $1.7 \cdot 10^{-4}$.

Die sehr große Abweichung des zeitlichen Verlaufs der 95%-Quantile gegenüber dem Mittelwert- bzw. Medianverlauf weist auf einige wenige Ausreißer in den Verteilungen hin. Die Wahrscheinlichkeitswerte dieser wenigen „Ausreißer-Verteilungen“ sind, wie in **Abb. 2.12** ersichtlich, gegenüber denen der Mehrheit der Verteilungen extrem erhöht. Die 95%-Quantile der Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalität im Endlager für POLLUX-Behälter mit Abbrand weisen im Zeitraum bis 50 000 Jahren Werte von $< 3 \cdot 10^{-4}$ und im Zeitraum bis ca. 150 000 Jahren von $< 5 \cdot 10^{-4}$ auf. Zwischen 240 000 und 500 000 Jahren sind die Werte der 95%-Quantile der Wahrscheinlichkeiten nahezu konstant und liegen bei ca. $7.3 \cdot 10^{-4}$.

Zusätzlich zu den besprochenen Kennwertkurven wurden noch die zeitlichen Verläufe der oberen zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze und der oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze dargestellt. Die zweiseitigen Toleranzgrenzen zum Zeitpunkt $t = 500\,000$ Jahre betragen $1.08 \cdot 10^{-6}$ und $1.15 \cdot 10^{-3}$ und geben an, dass nach 500 000 Jahren mit 90%-iger Sicherheit 90% der Wahrscheinlichkeitswerte $P(\text{crit})$ zwischen $1.08 \cdot 10^{-6}$ und $1.15 \cdot 10^{-3}$ liegen. Die obere einseitige Toleranzgrenze mit $1.19 \cdot 10^{-3}$ zum Zeitpunkt $t=500\,000$ Jahre besagt, dass mit 95%-iger Sicherheit für 95% der Wahrscheinlichkeitswerte $P(\text{crit}) < 1.19 \cdot 10^{-3}$ gilt. Im Umkehrschluss bedeutet dies, dass diese Aussage mit einer Wahrscheinlichkeit von 5 % nicht zutreffend ist.

In **Abb. 2.13** werden zu Vergleichszwecken zusätzlich zu den in **Abb. 2.12** gezeigten Kennwertverläufen noch die zeitabhängigen Verläufe der auf den Referenzwerten der Eingangsparameter für das modifizierte Szenario 1a (neu) und für das bisherige Szenario 1 (alt) /GMA 09/ basierenden kumulierten Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Kritikalität dargestellt.

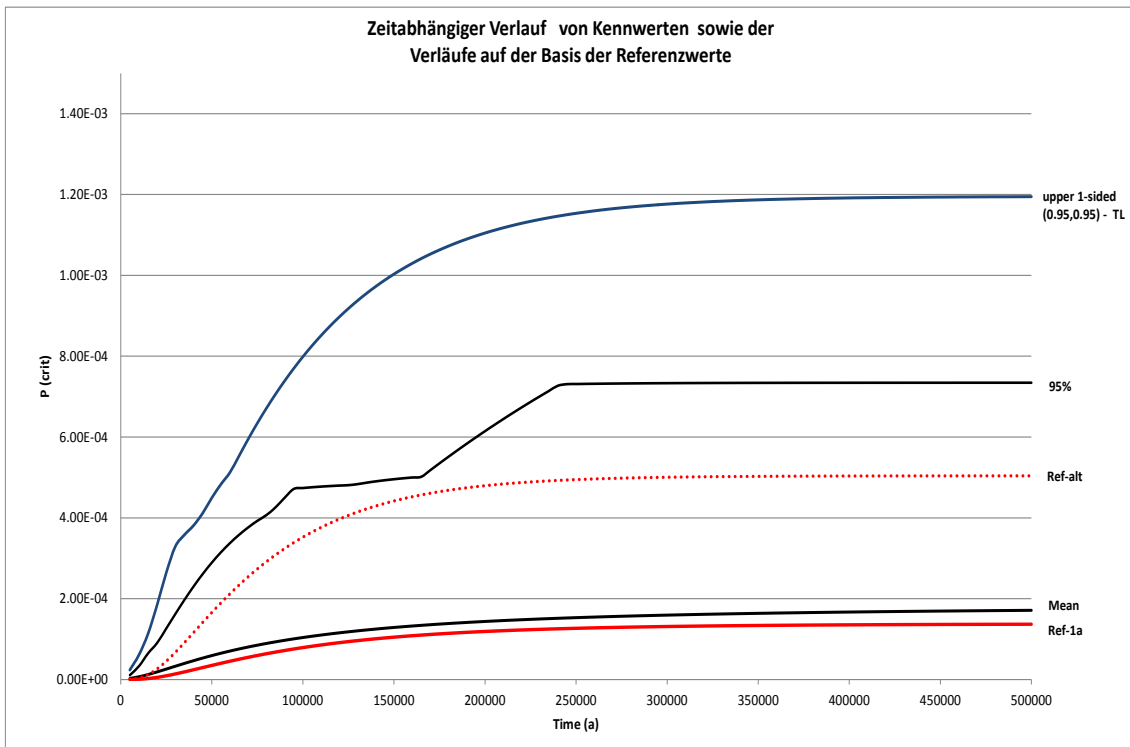


Abb. 2.13 Vergleich der Kennwertverläufe für Konsequenz 1 mit den zeitabhängigen Verläufen der Wahrscheinlichkeiten für die Referenzwerte der Eingabegrößen von Szenario 1a (neu) und Szenario 1 (alt)

Abb. 2.13 zeigt, dass die Wahrscheinlichkeiten für das modifizierte Szenario 1a, die auf der Basis der Referenzwerte der Eingabeparameter berechnet wurden, ungefähr den Verläufen der über die Unsicherheitsanalyse bestimmten Mittelwerte der Wahrscheinlichkeiten entsprechen. Außerdem ist zu erkennen, dass die Wahrscheinlichkeiten des Szenarios 1a im zeitlichen Verlauf deutlich unter denen des ursprünglichen Szenarios 1 liegen. Allerdings liegen die 95%-Quantile und insbesondere die Werte obere (95%,95%)-Toleranzgrenze im zeitlichen Verlauf signifikant über den Wahrscheinlichkeitswerten des alten Referenzlaufs.

Im Einzelnen nehmen die Referenzwerte und Kenngrößen nach 500 000 Jahren die folgenden Werte an:

- Referenzwerte Szenario 1a (neu): $1,37E-4$,
- Referenzwerte Szenario 1 (alt): $5,04E-4$,
- Median: $4,7E-5$,
- Mittelwert: $1,71E-4$,
- 95%-Quantil: $7,34E-4$,
- obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze: $1,15E-3$ und

- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $1,19E-3$.

In **Abb. 2.14** werden die aus den einzelnen Rechenläufen resultierenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ bezüglich von Zeitintervallen mit einer Dauer von 5000 Jahren (Konsequenz 2) für den POLLUX-Behälter mit Abbrand dargestellt. Auf diese Weise wird die Variation von $P(\text{crit})$ ersichtlich, die sich für verschiedene Zeitabschnitte ergibt.

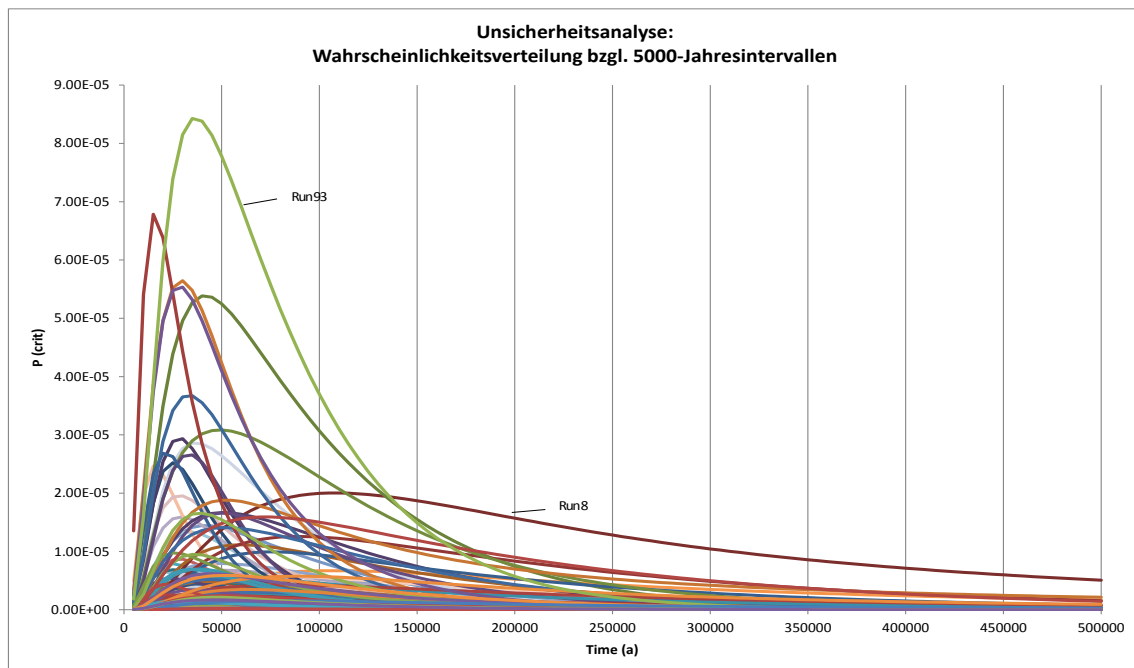


Abb. 2.14 Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ bezogen auf Zeitintervalle mit 5000 Jahren Dauer für Szenario 1a (POLLUX-Behälter mit abgebranntem Brennstoff)

Die Kurven in **Abb. 2.14** geben an, wie groß in bestimmten Zeitintervallen (Intervallgröße 5000 Jahre) die Wahrscheinlichkeiten einer Kritikalität für den POLLUX-Behälter mit Abbrand in einem Endlager sind. Aus den Kurven lässt sich jeweils ablesen, in welchen Zeitintervallen die größten Wahrscheinlichkeiten auftreten. Es ist ersichtlich, dass gerade die Variation bezüglich der maximalen Wahrscheinlichkeiten in bestimmten Zeitintervallen erheblich sein kann. Beispielsweise wird im „Run 93“ die maximale Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität mit $P(\text{crit}) = 8.4E-5$ zwischen 35 000 und 40 000 Jahren erreicht, während bei „Run 8“ mit einer wesentlich flacheren Wahrscheinlichkeitsverteilung die maximale Wahrscheinlichkeit von ca. $2.E-5$ zwischen 100 000 und 120 000 Jahren auftritt.

Abb. 2.15 gibt für 5000-Jahresintervalle sowohl den zeitlichen Verlauf verschiedener Kennwerte bezüglich der jeweiligen Wahrscheinlichkeiten als auch die Wahrscheinlichkeiten, die sich auf der Basis der Referenzwerte der Eingabegrößen des Szenarios 1a (neu) und des Szenarios 1 (alt) ergeben haben, wieder. Es wurden dabei die Kennwerte Median, Mittelwert, 95%-Quantil und die obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze ausgewählt.

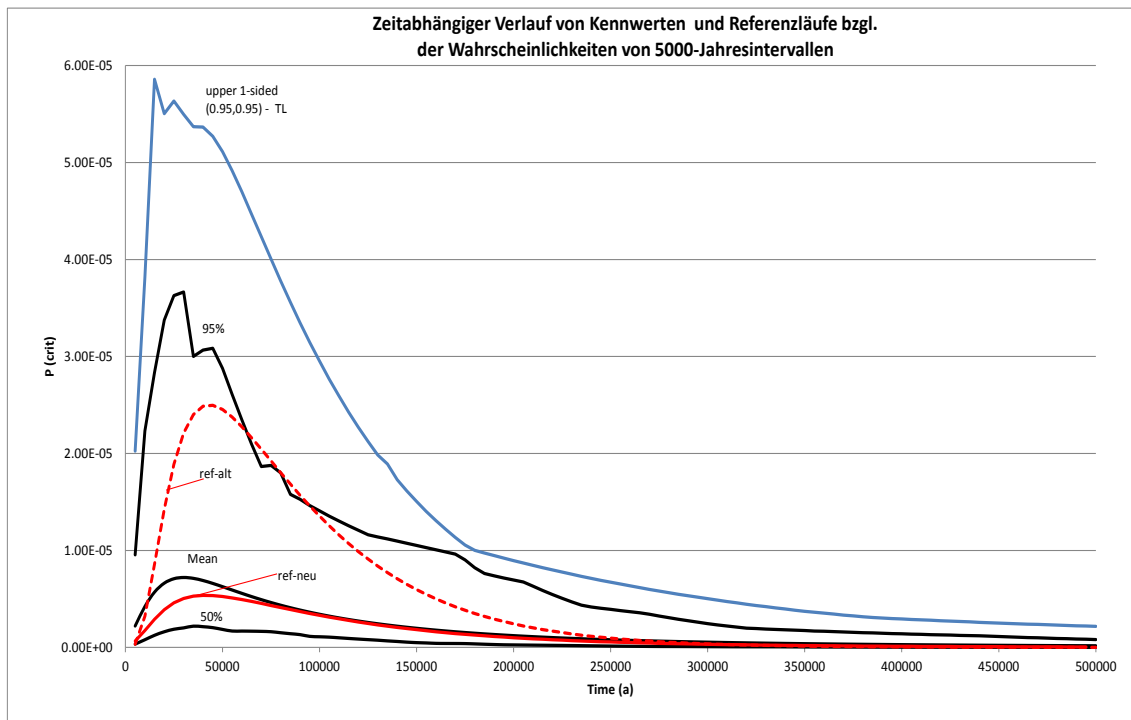


Abb. 2.15 Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten und Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen für Szenario 1a (neu) und Szenario 1 (alt)

Aus **Abb. 2.15** ist ersichtlich, dass die Maxima für das Auftreten von Kritikalität bei allen dargestellten Kennwerten näherungsweise innerhalb eines Intervalls von 10 000 Jahren bis 45000 Jahren liegen. Die Wahrscheinlichkeiten einer Kritikalität auf der Basis der Referenzwerte sind im neuen Szenario innerhalb der ersten 200 000 Jahre in den jeweiligen Zeitabschnitten zum Teil deutlich geringer als im alten Szenario. In **Tab. 2.17** sind für Szenario 1a die numerischen Werte von Median, Mittelwert, 95%-Quantilen und einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen und Referenzläufen (alt und neu) der Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Kritikalität in den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre aufgelistet.

Tab. 2.17 Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 1a

Zeitintervall (in Jahren)	Wahrscheinlichkeit		50%	Mean	95%	Upper 1-sided (95%,95%)-TL
	Referenz	Referenz-alt				
0 - 5000	2.39E-08	3.16E-07	3.41E-07	2.20E-06	9.55E-06	2.02E-05
5000 - 10000	6.50E-07	3.22E-06	7.90E-07	4.21E-06	2.23E-05	3.82E-05
10000 - 15000	1.74E-06	8.58E-06	1.25E-06	5.70E-06	2.83E-05	5.86E-05
15000 - 20000	2.91E-06	1.42E-05	1.61E-06	6.62E-06	3.38E-05	5.50E-05
20000 - 25000	3.89E-06	1.89E-05	1.88E-06	7.08E-06	3.63E-05	5.63E-05
25000 - 30000	4.59E-06	2.21E-05	2.01E-06	7.21E-06	3.67E-05	5.50E-05
30000 - 35000	5.04E-06	2.40E-05	2.19E-06	7.12E-06	3.00E-05	5.37E-05
35000 - 40000	5.28E-06	2.49E-05	2.14E-06	6.90E-06	3.07E-05	5.37E-05
40000 - 45000	5.37E-06	2.50E-05	2.04E-06	6.60E-06	3.08E-05	5.27E-05
45000 - 50000	5.35E-06	2.45E-05	1.86E-06	6.27E-06	2.88E-05	5.11E-05
50000 - 55000	5.26E-06	2.37E-05	1.69E-06	5.92E-06	2.61E-05	4.92E-05
55000 - 60000	5.11E-06	2.28E-05	1.68E-06	5.57E-06	2.35E-05	4.70E-05
60000 - 65000	4.94E-06	2.16E-05	1.67E-06	5.24E-06	2.10E-05	4.47E-05
65000 - 70000	4.74E-06	2.04E-05	1.66E-06	4.93E-06	1.87E-05	4.24E-05
70000 - 75000	4.53E-06	1.92E-05	1.62E-06	4.63E-06	1.88E-05	4.00E-05
75000 - 80000	4.32E-06	1.80E-05	1.51E-06	4.35E-06	1.80E-05	3.78E-05
80000 - 85000	4.11E-06	1.68E-05	1.41E-06	4.09E-06	1.58E-05	3.56E-05
85000 - 90000	3.90E-06	1.57E-05	1.32E-06	3.85E-06	1.53E-05	3.35E-05
90000 - 95000	3.70E-06	1.46E-05	1.14E-06	3.63E-06	1.46E-05	3.14E-05
95000 - 100000	3.50E-06	1.35E-05	1.10E-06	3.42E-06	1.41E-05	2.95E-05

Die numerischen Werte in **Tab. 2.17** können folgendermaßen interpretiert werden:

Für den Referenzfall des Szenario 1a ist die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität im Zeitintervall zwischen 40 000 und 45 000 Jahren mit 5.37E-6 maximal. Die maximale Wahrscheinlichkeit für den Referenzfall 1 (alt) liegt ebenfalls im Intervall zwischen 40 000 und 45 000 Jahren, ist aber mit 2.5E-5 erheblich größer. Die Werte der Kenngrößen (Median, Mittelwert, 95%-Quantil und obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze) für ein bestimmtes Zeitintervall wurden aus den Wahrscheinlichkeitswerten der 100 berechneten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (vgl. **Abb. 2.14**) für das entsprechende Zeitintervall ermittelt. Die Maxima der Kennwerte liegen teilweise in unterschiedlichen Zeitintervallen und zwar beim Median mit 2,19E-6 im Zeitintervall zwischen 30 000 und 35 000 Jahren, beim Mittelwert mit 7,21E-6 und beim 95%-Quantil mit 3,67E-5 im Bereich von 25 000 bis 30 000 Jahren und bei der einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze mit 5.86E-5 im Intervall zwischen 10 000 und 15 000 Jahren.

2.4.2.1.2 Sensitivitätsanalysen zu Szenario 1a

Abb. 2.16 und **Abb. 2.17** zeigen die Ergebnisse aus der Sensitivitätsanalyse für Konsequenz 1 (kumulierte Wahrscheinlichkeiten).

In **Abb. 2.16** ist der zeitabhängige Verlauf des R^2 -Anpassungswertes für die Konsequenz 1 dargestellt. Obwohl der R^2 -Wert bzgl. der ersten 20 000-25 000 Jahre mit 0.5-0.6 relativ niedrig ist, verbessert sich der Wert im weiteren Zeitverlauf auf Werte > 0.7 . Aus diesem Grund wird hier für die zeitabhängige Sensitivitätsanalyse der gewöhnliche Korrelationskoeffizient verwendet.

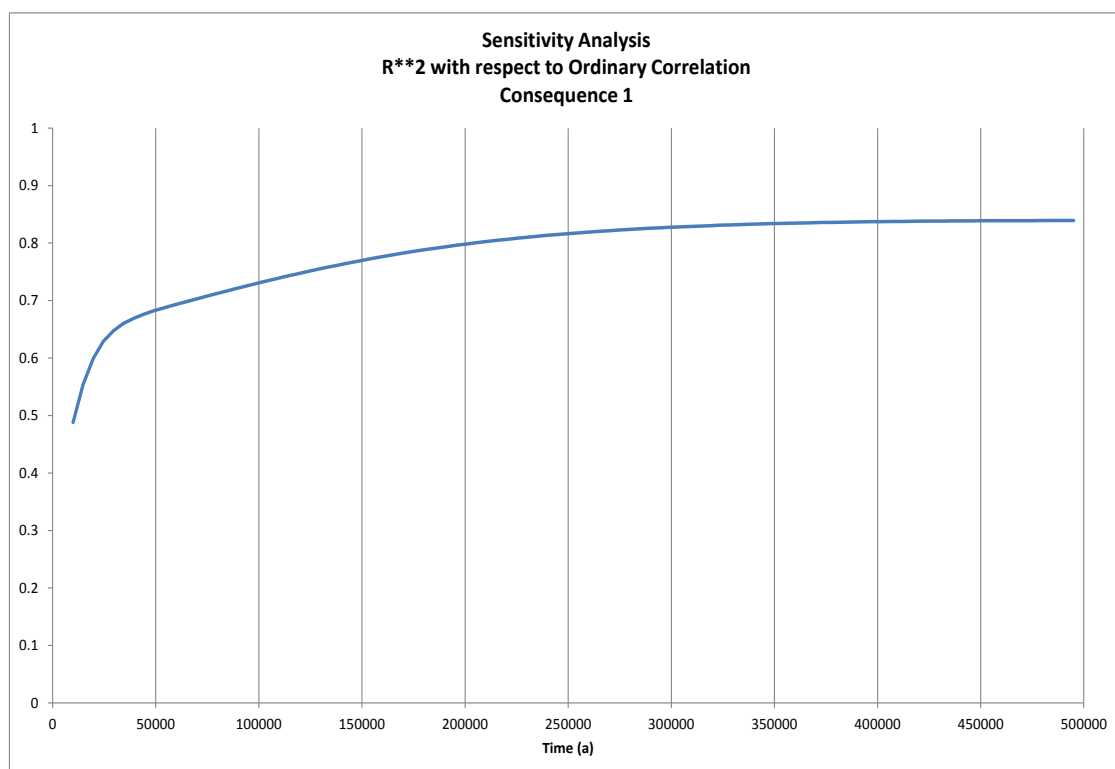


Abb. 2.16 Zeitabhängiger Verlauf des R^2 -Anpassungswertes für Konsequenz 1 (kumulierte Wahrscheinlichkeiten) im Szenario 1a

In den Abbildungen zur Sensitivitätsanalyse der Szenarien 1a, 1b und 1c kommt die folgende Zuordnung zwischen Parameterkennzeichnung und Parameter zur Anwendung:

- Parameter 1: Korrosionsrate
- Parameter 2: Keine Kompaktierung
- Parameter 3: Kein Selbstverschluss

- Parameter 4: Geeignetes chemisches Medium
- Parameter 5: Schutzüberzug hält
- Parameter 6: Separation von Aktinoiden und Spaltstoff
- Parameter 7: Immobilisierung der Aktinoiden
- Parameter 8: Zeitdauer für Immobilisierung der Aktinoiden
- Parameter 9: Bildung von tertiären Phasen
- Parameter 10: Zeitdauer für Bildung von tertiären Phasen
- Parameter 11: Absorbierverlust
- Parameter 12: Auffüllung mit tertiären Phasen
- Parameter 13: Geeignete Geometrie
- Parameter 14: Zeitdauer bis zur Ausbildung eines kritischen H/U-Verhältnisses.

In **Abb. 2.16** sind die zeitlichen Verläufe der Sensitivitäten der 14 Parameter für Konsequenz 1 (kumulierte Wahrscheinlichkeiten) des Szenarios 1a angegeben. Die Abszissenachse gibt dabei den Zeitverlauf und die Ordinatenachse den Wert des Korrelationskoeffizienten an. Im Rahmen dieser Untersuchungen wurde als Sensitivitätsmaß der zeitabhängige Verlauf des Korrelationskoeffizienten herangezogen. Als grobes Bewertungskriterium wird der Einfluss derjenigen Parameter auf die Ergebnisunsicherheit als relevant bewertet, deren Korrelation im zeitlichen Ablauf mindestens einmal deutlich den Wertebereich $[-0,2, 0,2]$ überschreitet. Besondere Aufmerksamkeit ist bei Konsequenz 2 gegenüber Parametern geboten, deren Korrelationskoeffizienten gegen Ende der Zeitskala große Werte aufweisen: Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kritikalität in einem 5000-Jahresintervall nimmt bei Konsequenz 2 gegen Ende der Zeitskala deutlich ab und somit ist auch der Einfluss eines Parameters mit großen Korrelationskoeffizienten am Ende der Zeitskala weniger relevant.

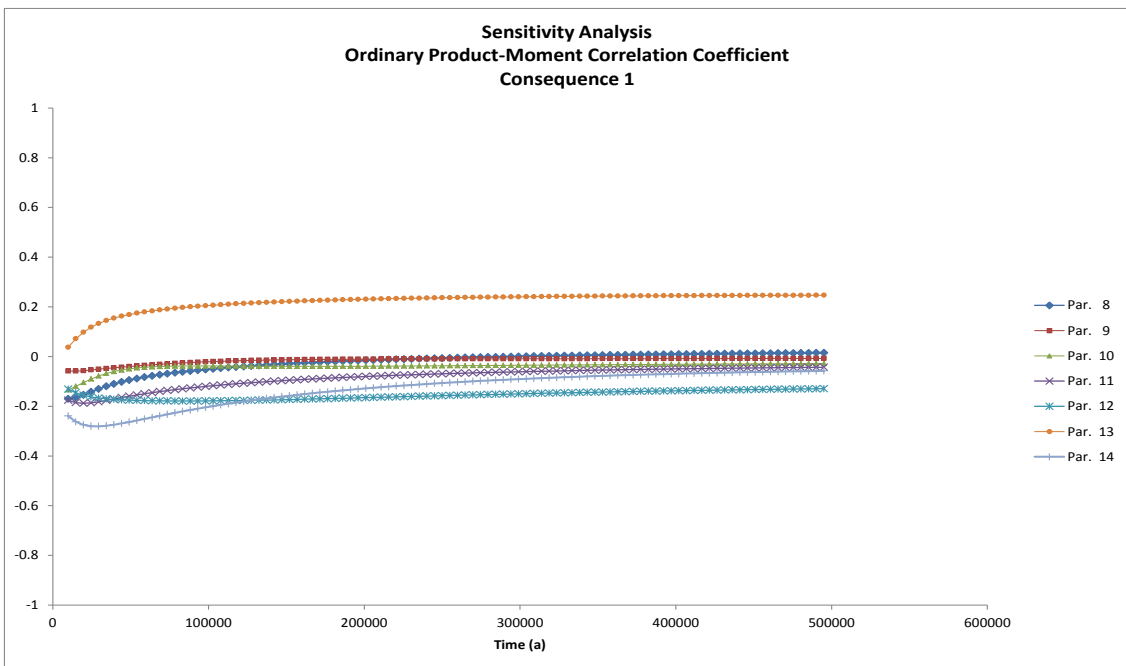
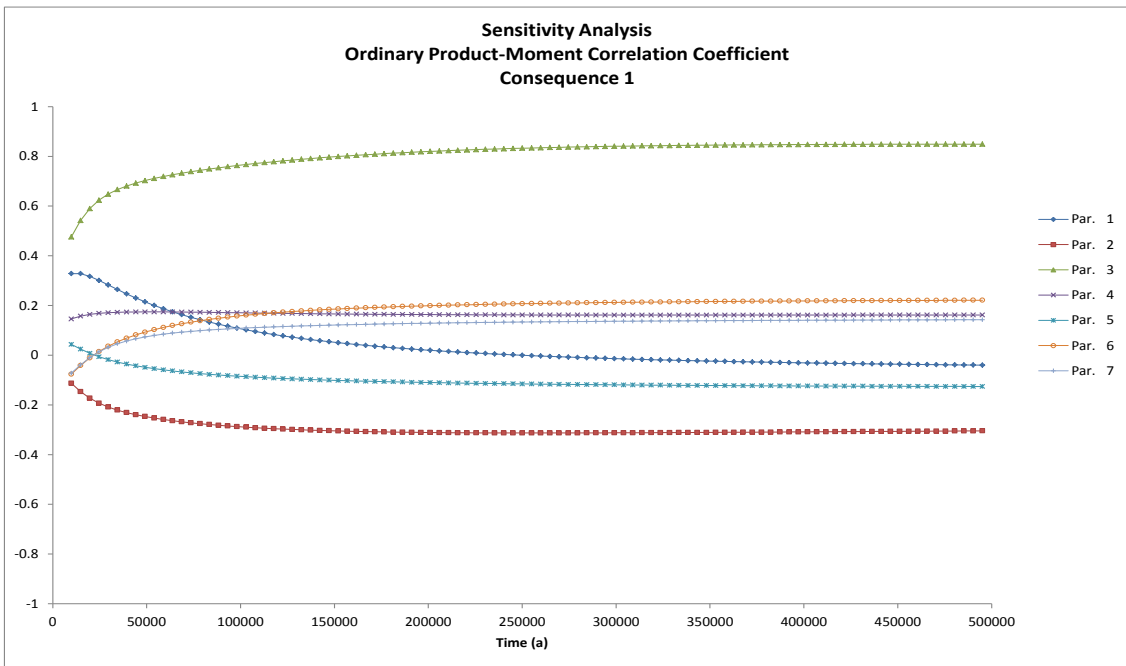


Abb. 2.17 Zeitabhängige Sensitivitäten der 14 Parameter von Szenario 1a (Konsequenz 1)

Nach **Abb. 2.17** können für das Sensitivitätsverhalten der einzelnen Parameter in Szenario 1a mit Konsequenz 1 die folgenden Aussagen getroffen werden:

Parameter 1 (*Korrosionsrate*) beginnt mit einem Wert von ca. 0,35 und fällt dann innerhalb von etwa 350 000 Jahren auf nahezu 0 ab. Dieses Verhalten kann mit den Wertebereich von 0 bis 100 $\mu\text{m/a}$ abdeckenden Kenntnisstandunsicherheiten bei den

Korrosionsraten und mit der endlichen Wandstärke des POLLUX-Behälters (50 cm) erklärt werden: Anfangs begünstigen hohe Korrosionsraten das Entstehen einer Kritikalitätsexkursion, wenn aber der Behältermantel einmal korrodiert ist, dann verliert der Parameter an Bedeutung.

Umgekehrt verhält es sich mit **Parameter 2** (*Keine Kompaktierung*) der anfangs kaum Bedeutung hat aber im zeitlichen Verlauf zum zweitwichtigsten Parameter mit einer negativen Korrelation zur Kritikalitätswahrscheinlichkeit (Wert bis etwa -0,35) wird.

Parameter 3 (*Kein Selbstverschluss*) ist zu jedem Zeitpunkt der Parameter mit dem mit Abstand größten Einfluss auf die Unsicherheit bezüglich der Wahrscheinlichkeiten einer Kritikalitätsexkursion für die POLLUX-Behälter mit abgebranntem Brennstoff. Der Parameterwert liegt anfangs bei ca. 0,5 und steigert sich dann bis auf etwa 0,8. Die Dominanz dieses Parameters auf die Ergebnisunsicherheiten lässt sich mit seinen den gesamten Wertebereich von 0 bis 1 abdeckenden Kenntnisstandunsicherheiten erklären. Die Unsicherheiten des Parameters wurden so spezifiziert, dass mit einem Vertrauensgrad zu 75% die Wahrscheinlichkeit, dass kein Selbstverschluss stattfindet, gleichverteilt zwischen 0 und 0.1 liegt und mit einem 25%-Vertrauensgrad gleichverteilt zwischen 0.1 und 1.

Parameter 6 (*Separation der Aktinoiden vom Spaltstoff*) steigt von 0 kontinuierlich bis auf einen Wert von ca. 0,2 (nach ca. 200 000 Jahren) an und behält diesen Wert näherungsweise bis zum Skalenende bei. Eine Abtrennung von den zumeist Neutronen absorbierenden Aktinoiden aus der Spaltstoffmatrix vergrößert die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kritikalität. Deshalb weist Parameter 6 über den ganzen Zeitbereich eine positive Korrelation auf.

Parameter 13 (*Geeignete Geometrie*) beginnt mit einem Wert nahe 0 der sich innerhalb von etwa 100 000 Jahren auf ca. 0,2 steigert und bis zum Skalenende näherungsweise konstant bleibt. Die Ausbildung einer geeigneten Geometrie erhöht die Eintrittswahrscheinlichkeit für eine Kritikalitätsexkursion signifikant. Die positive Korrelation und der nahezu konstante Verlauf von Parameter 13 unterstreichen dies.

Parameter 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*). Beginnt mit einem negativen Wert (ca. -0,2) der nach etwa 25 000 Jahren bis auf etwa -0,3 abfällt und im zeitlichen Verlauf bis auf näherungsweise -0,05 ansteigt.

Alle weiteren Parameter haben im Vergleich eine eher untergeordnete Bedeutung. Ihre Werte bewegen sich im Intervall von -0,2 bis +0,2.

Abb. 2.18 zeigt die Ergebnisse aus der Sensitivitätsanalyse für Konsequenz 2 (Wahrscheinlichkeiten bezogen auf Zeitintervalle mit einer Dauer von 5000 Jahren). Hier ist der zeitabhängige Verlauf des R^2 -Anpassungswertes bzgl. Konsequenz 2 auf der Basis der metrischen Werte dargestellt.

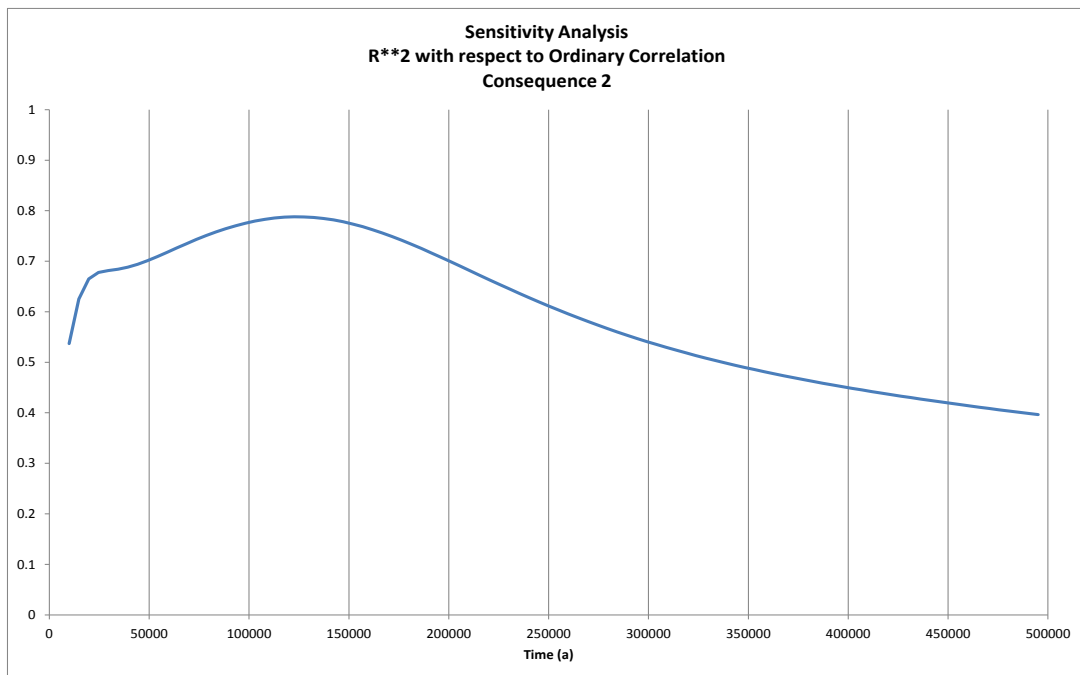


Abb. 2.18 Zeitabhängiger Verlauf des R^2 -Wertes für Szenario 1a (Konsequenz 2) auf der Basis der metrischen Werte

Nach **Abb. 2.18** erscheint das R^2 -Anpassungsmaß für die metrischen Werte lediglich zwischen dem Zeitintervall von ca. 20 000 Jahren bis hin zu 250 000 Jahren hinreichend anwendbar. Deshalb wird für Konsequenz 2 die Spearmansche Rangkorrelation als Sensitivitätsmaß verwendet, deren R^2 -Anpassungsmaß (vgl. **Abb. 2.19**) über den gesamten zeitlichen Verlauf gut anwendbar ist.

Rangbasierte Sensitivitätsmaße wie die Spearmansche Rangkorrelation beruhen im Wesentlichen auf dem folgenden Konzept:

- Sowohl den Werten der unsicheren Parameter als auch den Werten der Model- lergebnisse werden die entsprechenden Ränge zugeordnet.
- Die Ränge bedeuten einen Informationsverlust in dem Sinne, dass die Größe der Differenzen zwischen 2 Werten nicht mehr angegeben werden kann. D.h.

extreme Werte, denen ein entsprechend kleiner bzw. großer Rang zugeordnet wird, haben nicht mehr den großen Einfluss auf die Korrelation, den die ursprünglichen Werte haben würden.

- Die Rangkorrelationen geben damit prinzipiell den Wert der Beziehung für den größten Teil der Ergebnisse wieder. Durch die Rangzuordnung wird der Einfluss von Extremwerten abgeschwächt, d.h. man erkennt nicht mehr, dass es sich um Extremwerte handelt.
- Die Sensitivitätsmaße basierend auf Rangkorrelationen geben somit den Einfluss wieder, den die Unsicherheiten der jeweiligen Parameter auf den Großteil der Ergebnisunsicherheiten haben. Verzerrungen, die wenige Extremwerte haben können, bleiben allerdings unberücksichtigt.

Abb. 2.19 zeigt den zeitabhängigen Verlauf des R^2 -Anpassungswertes für Konsequenz 2 auf der Basis der Spearmanschen Rangkorrelation.

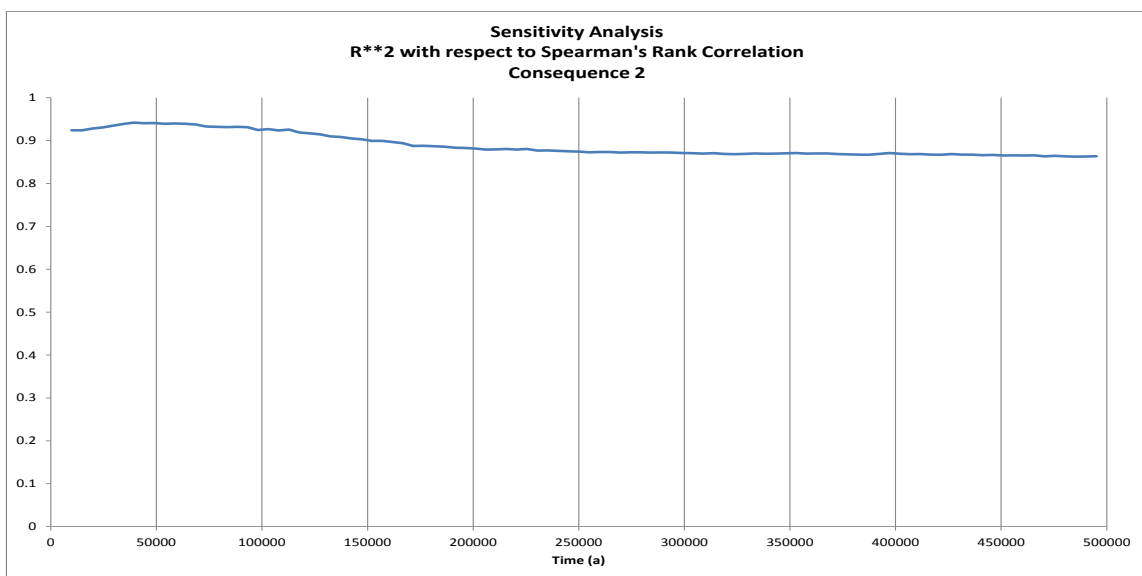


Abb. 2.19 Zeitabhängiger Verlauf des R^2 -Wertes für Konsequenz 2 für Szenario 1a auf der Basis der Spearmanschen Rangkorrelation

In **Abb. 2.20** sind die zeitlichen Verläufe der Sensitivitäten der 14 Parameter für Szenario 1a und Konsequenz 2 (Wahrscheinlichkeiten bei einer Einteilung in Zeitintervalle von 5000 Jahren) basierend auf der Spearmanschen Rangkorrelation dargestellt.

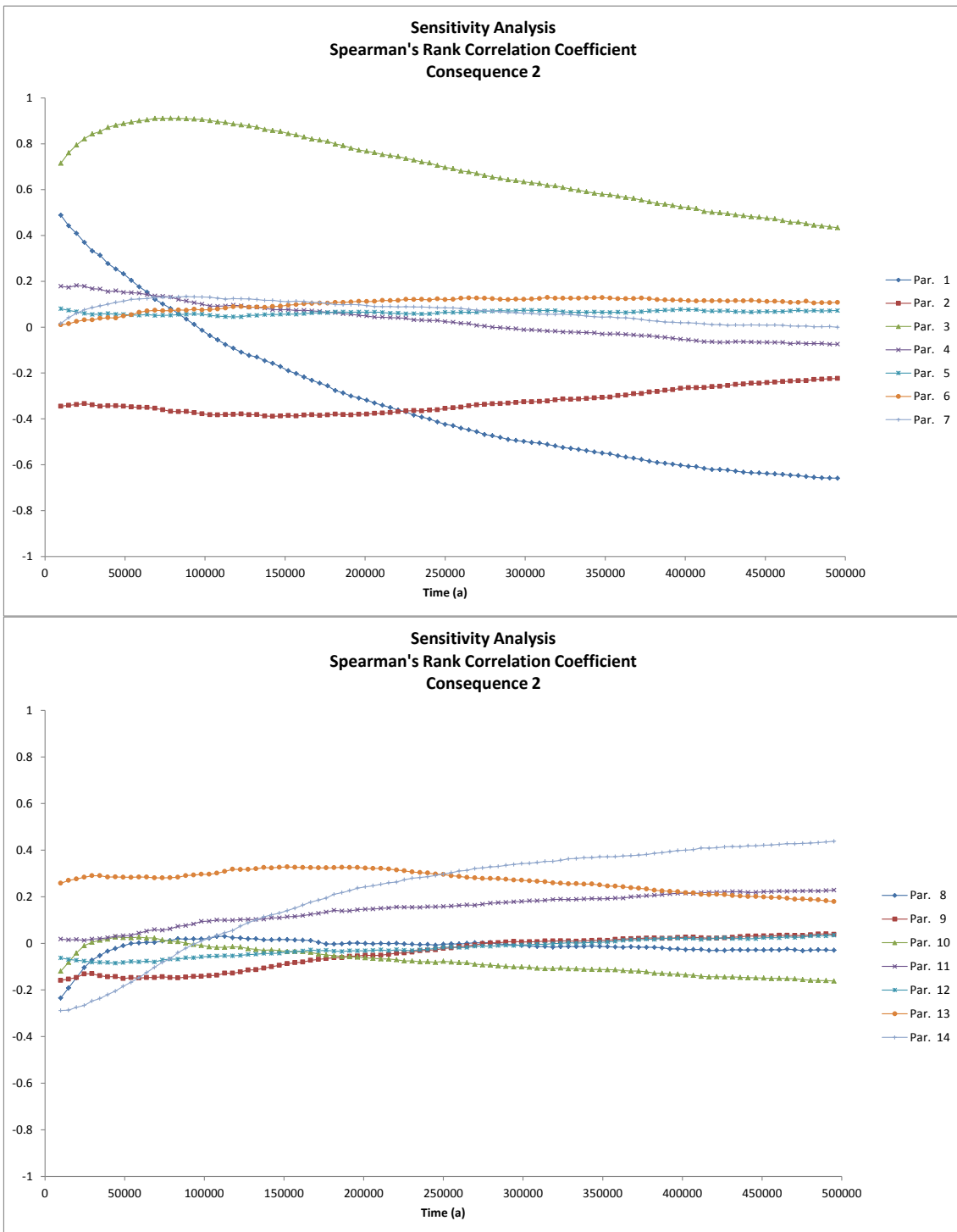


Abb. 2.20 Zeitabhängige Sensitivität der 14 Parameter bzgl. der Konsequenz 2 für Szenario 1a

Aus **Abb. 2.20** lassen sich für das Sensitivitätsverhalten der einzelnen Parameter für Konsequenz 2 die folgenden Schlüsse ziehen:

Parameter 1 (*Korrosionsrate*) beginnt mit ca. 0,5 und nimmt dann kontinuierlich ab. Nach etwa 100 000 Jahren ändert der Parameter das Vorzeichen und fällt nach 500 000 Jahren bis auf einen Wert von näherungsweise -0,6 ab. Bei hohen Korrosionsraten ist die Wahrscheinlichkeit für eine Kritikalität in den ersten Zeitintervallen größer als bei niedrigen Korrosionsraten. Wenn die Wahrscheinlichkeiten für ein frühes Auftreten von Kritikalität in den ersten Zeitintervallen groß sind, dann sind sie für die späteren Zeitintervalle entsprechend kleiner. Insofern ist die Umkehrung der Korrelation von positiv (bei den frühen Zeitintervallen) zu negativ (bei den späteren Zeitintervallen) plausibel. Allerdings verdeutlicht der Verlauf von Parameter 1, wie gefährlich die Informationen der rangbasierten Maße sein können. Bewertet man ausschließlich **Abb. 2.20**, so entsteht der Eindruck als würde Parameter 1 mit zunehmender Zeit zu dem Parameter mit dem meisten Einfluss auf die Ergebnisunsicherheiten werden. **Abb. 2.11** bzw. **Abb. 2.14** zeigen jedoch, dass die Unsicherheiten der Ergebnisse im Zeitraum von 250 000 bis 500 000 Jahren im Vergleich zu den Unsicherheiten die zu Beginn vorliegen, vernachlässigbar sind. Berücksichtigt man dies, dann wird der scheinbar große Einfluss des Parameters 1 auf die Ergebnisunsicherheiten erheblich reduziert.

Parameter 2 (*Keine Kompaktierung*) beginnt mit einem Wert von ca. -0,35, der bis etwa 250 000 Jahre näherungsweise konstant bleibt und zum Skalenende hin sich kontinuierlich der Nulllinie annähert. D.h., die anfängliche Bedeutung, die der Parameter 2 innerhalb der ersten 250 000 Jahre hat, schwächt sich im weiteren Zeitverlauf ab. Die negative Korrelation lässt sich dadurch erklären, dass je höher die Wahrscheinlichkeit einer Kompaktierung ist, die Kritikalitätswahrscheinlichkeit kleiner wird. Dies entspricht der ursprünglichen Einschätzung der Experten.

Parameter 3 (*Kein Selbstverschluss*) erweist sich – wie bei Konsequenz 1 – als der Parameter mit dem mit Abstand größten Einfluss auf die Unsicherheit der Wahrscheinlichkeiten in den 5000-Jahres-Intervallen. Parameter 3 besitzt über den ganzen Zeitbereich von 500 000 Jahren eine positive Korrelation und erreicht seine größten Werte zwischen 50 000 und 100 000 Jahren. Er steigt von anfänglichen 0,7 nach etwa 75 000 Jahren zu Maximalwerten von ca. 0,9 im Zeitraum zwischen 50 000 und 100 000 Jahren an und fällt im weiteren Zeitverlauf kontinuierlich bis auf etwa 0,4 ab.

Parameter 13 (*Geeignete Geometrie*) beginnt mit einem Wert von ca. 0,3, der ab ungefähr 250 000 Jahren langsam bis zum Skalenende auf ungefähr 0,2 abfällt. Die Aus-

bildung einer geeigneten Geometrie erhöht die Wahrscheinlichkeit für eine Kritikalitäts-
exkursion und erklärt die positiven Werte von Parameter 13.

Parameter 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) beginnt mit einem Wert vom etwa -0,3, der kontinuierlich bis zum Skalenende auf ca. 0,4 anwächst.

2.4.2.1.3 Zusammenfassung zu Szenario 1a

Die Unsicherheitsanalyse für Szenario 1a zeigte sowohl im Fall einer kumulierten Betrachtung der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kritikalität (Konsequenz 1) als auch bei deren Aufteilung in 5000-Jahresintervalle (Konsequenz 2) bei den zu Grunde liegenden Rechenläufen eine beachtliche Variationsbreite (vgl. **Abb. 2.11** und **Abb. 2.14**).

Dies spiegelt sich in den zugehörigen statistischen Kenngrößen für die Wahrscheinlichkeit eines Eintretens von Kritikalität wieder. Während die zeitabhängigen Verläufe von Mittelwert, Median und Referenzwert Szenario 1a (neu) für Konsequenz 1 nur relativ geringe Abweichungen aufweisen, liegen die des 95%-Quantils und des oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzintervalls deutlich darüber. Dies gilt – mit etwas größeren Abweichungen zwischen Median, Referenzwert Szenario 1a (neu) und Mittelwert – auch für Konsequenz 2. Der Verlauf von Referenzwert Szenario 1 (alt) aus /GMA 09/ liegt sowohl bei Konsequenz 1 als auch bei Konsequenz 2 deutlich über dem von Referenzwert Szenario 1a (neu).

Die für Konsequenz 1 und Szenario 1a nach 500 000 Jahren ermittelten kumulierten Maximalwerte für Kenngrößen und Referenzläufe erstrecken sich über einen weiten Bereich:

- Median: 4,7E-5,
- Referenzwert Szenario 1a (neu): 1,37E-4,
- Mittelwert: 1,71E-4,
- Referenzwert Szenario 1 (alt): 5,04E-4,
- 95%-Quantil: 7,34E-4 und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 1,19E-3.

Die maximalen Wahrscheinlichkeiten und die Zeitintervalle, in denen diese bei Konsequenz 2 erreicht werden unterscheiden sich teilweise erheblich (**Tab. 2.17**):

- Median: $2,14E-6$ im Zeitintervall (35 000, 40 000) Jahre,
- Referenzwert Szenario 1a (neu): $5,37E-6$ im Zeitintervall (40 000, 45 000) Jahre,
- Mittelwert: $7,21E-6$ im Zeitintervall (25 000, 30 000) Jahre ,
- Referenzwert Szenario 1 (alt): $2,50E-5$ im Zeitintervall (40 000, 45 000) Jahre,
- 95%-Quantil: $3,67E-5$ im Zeitintervall (25 000, 30 000) Jahre und
- Obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $5,86E-5$ im Zeitintervall (10 000, 15 000) Jahre.

Bei der Sensitivitätsanalyse wurden die Parameter 1 (*Korrosionsrate*), 2 (*Keine Kompaktierung*), 3 (*Kein Selbstverschluss*), 13 (*Geeignete Geometrie*) und 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) als relevante Parameter sowohl für Konsequenz 1 als auch für Konsequenz 2 identifiziert, wobei Parameter 3 dominiert (vgl. **Abb. 2.20**). Zusätzlich wurde bei Konsequenz 1 noch Parameter 6 (*Separation der Aktinoiden vom Spaltstoff*) als relevanter Parameter erkannt. Die Sensitivitätsanalyse von Konsequenz 1 basierte auf einem metrischen R^2 -Anpassungsmaß. Für Konsequenz 2 wurde ein rangbasiertes Sensitivitätsmaß (hier: Spearmansche Rangkorrelation) verwendet (vgl. **Abb. 2.16** und **Abb. 2.18**).

2.4.2.2 Szenario 1b

Im modifizierten Szenario 1b wird die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kritikalität im Inneren des POLLUX-Behälters nach Bildung neuer Mineralphasen mit Kernbrennstoff untersucht. Als Beladung des POLLUX-Behälters wird dabei nicht bestrahlter Brennstoff angenommen.

2.4.2.2.1 Eintrittswahrscheinlichkeit von Szenario 1b

In **Abb. 2.21** sind für Szenario 1b und Konsequenz 1 die zeitlichen Verläufe von Median, Mittelwert, 95%-Quantile, die der oberen zweiseitigen (90%,90%)- und einseitigen(95%,95%)-Toleranzgrenzen sowie die der Referenzläufe von Szenario 1b (neu) und Szenario 1 (alt) dargestellt.

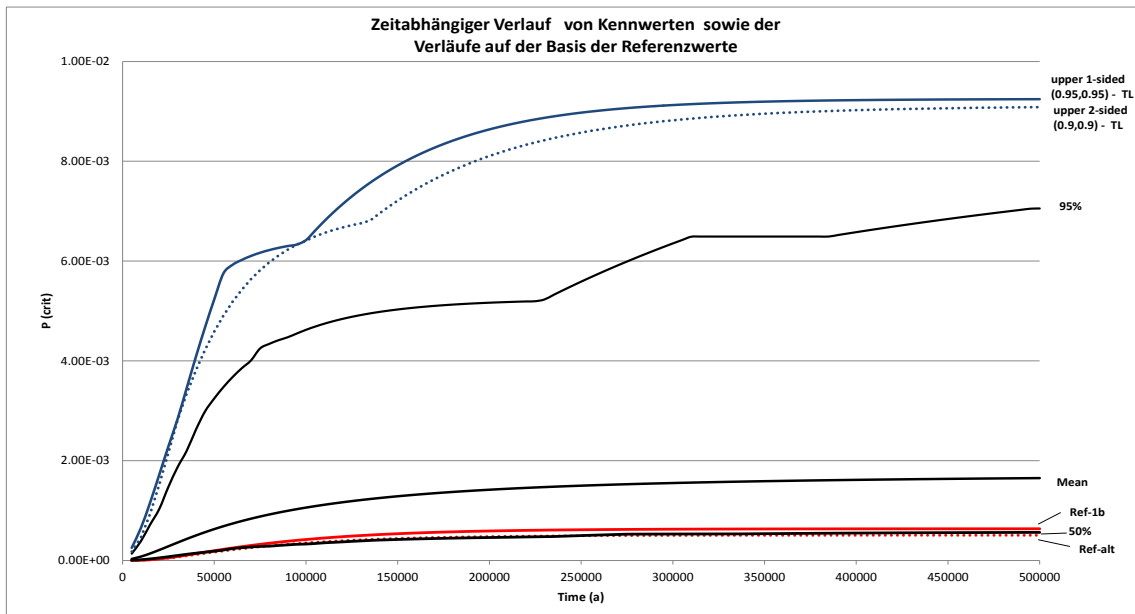


Abb. 2.21 Vergleich der Kennwertverläufe für Szenario 1b und Konsequenz 1 mit den zeitabhängigen Verläufen der Wahrscheinlichkeiten für die Referenzwerte der Eingabegrößen von Szenario 1b (neu) und Szenario 1 (alt)

Nach **Abb. 2.21** liegen die zeitlichen Verläufe des Medians sowie die Referenzläufe des Szenarios 1b (neu) und des Szenarios 1 (alt) im Zeitraum von 500 000 Jahren dicht beieinander und liegen im gesamten Zeitbereich von 500 000 Jahren deutlich unterhalb einer Wahrscheinlichkeit von $1.E-3$. Mit einem Maximalwert von ca. $1.7E-3$ hebt sich der Mittelwert etwas davon ab. Deutlich höhere Werte weisen die 95%-Quantile der Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalität auf. Sie liegen im Zeitraum bis 50 000 Jahren bei $< 4.E-3$, im Zeitraum bis ca. 250 000 Jahren bei $< 6.E-3$ und im Zeitraum bis 500 000 Jahre bei $< 7.5E-3$. Zusätzlich zu den besprochenen Kennwertkurven wurden auch die zeitlichen Verläufe der oberen zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze und der oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze dargestellt. Ihre beiden Werte erreichen nach etwa 400 000 Jahren ein Plateau mit einem Maximum von $< 9.5E-3$.

Im Einzelnen nehmen die Referenzwerte und Kenngrößen nach 500 000 Jahren die folgenden Werte an:

- Referenzwerte Szenario 1b (neu): $6,35E-4$,
- Referenzwerte Szenario 1 (alt): $5E-4$,
- Median: $5,9E-4$,

- Mittelwert: $1,65E-3$,
- 95%-Quantil: $7,05E-3$,
- oberen zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze: $9,1E-3$ und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $9,24E-3$.

In **Abb. 2.22** sind die Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ für 5000-Jahresintervalle (Konsequenz 2) für den POLLUX-Behälter mit einer Beladung mit unbestrahltem Spaltstoff (Szenario 1b) dargestellt.

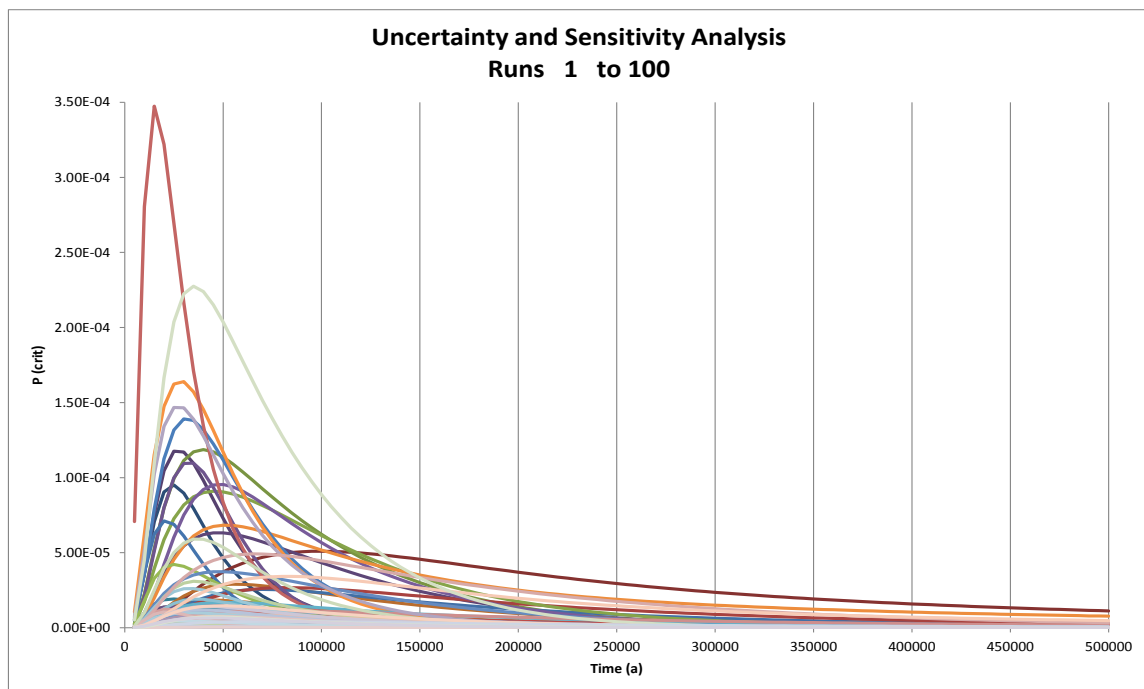


Abb. 2.22 Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ für 5000-Jahresintervalle für Szenario 1b

Abb. 2.22 verdeutlicht, dass im Szenario 1b bei den Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ für die einzelnen Runs teilweise erhebliche Unsicherheiten sowohl in Bezug auf den Zeitpunkt als auch auf die Höhe des jeweiligen Maximums auftreten.

Abb. 2.23 zeigt den zeitlichen Verlauf verschiedener Kennwerte bzgl. der Wahrscheinlichkeiten für die jeweiligen 5000-Jahresintervalle und die Wahrscheinlichkeiten der 5000-Jahresintervalle, die sich auf der Basis der Referenzwerte der Eingabegrößen des Szenarios 1b ergeben haben. Bei den Kennwerten handelt es sich im Einzelnen um Median, Mittelwert, 95%-Quantil und die obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze.

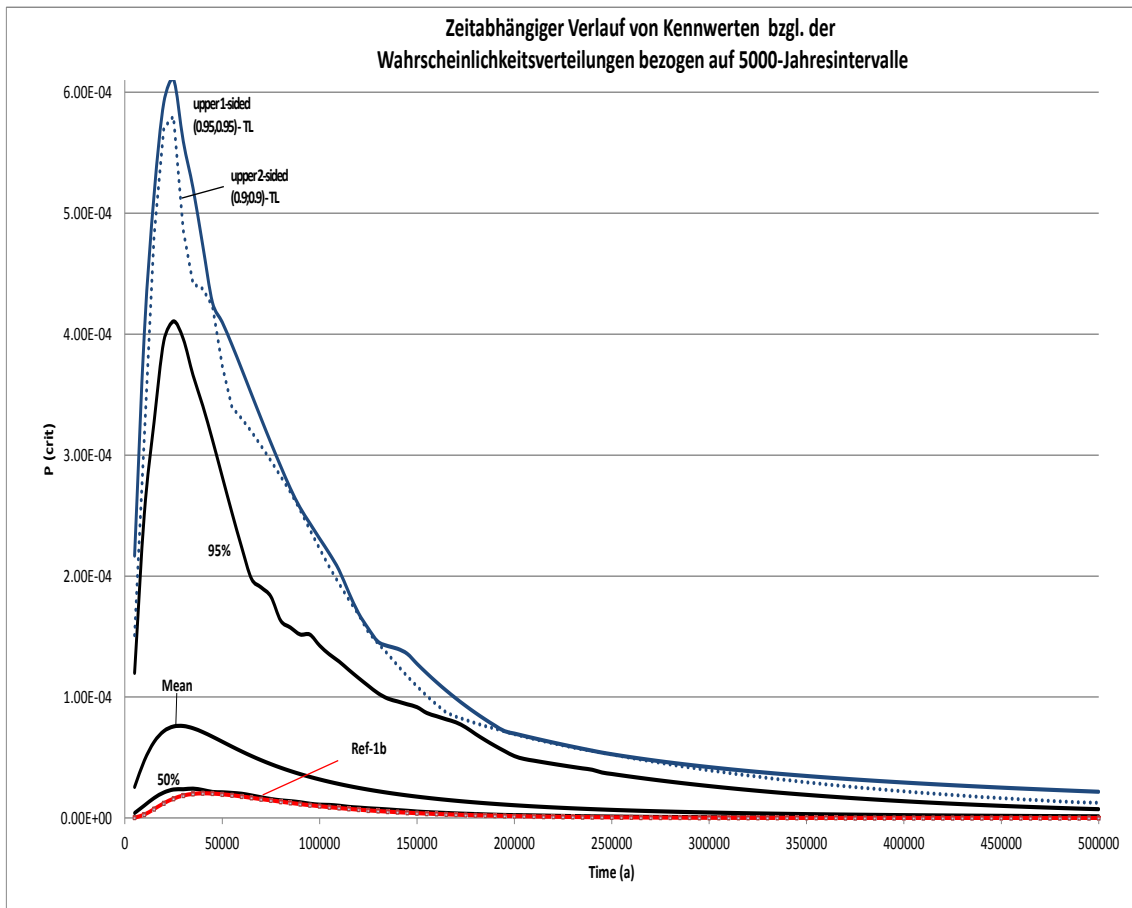


Abb. 2.23 Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten der 100 Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus der Unsicherheitsanalyse für Szenario 1b (Konsequenz 2)

Nach **Abb. 2.23** unterscheiden sich die zeitlichen Verläufe der einzelnen Kennwerte. Geringe Abweichungen werden dabei zwischen Median und Referenzlauf festgestellt. Alle Maxima dieser Kurven liegen im Zeitfenster zwischen näherungsweise 20 000 und 35 000 Jahren.

In **Tab. 2.18** sind für Szenario 1b die numerischen Werte von Median, Mittelwert, 95%-Quantil, oberer zweiseitiger (90%,90%)- und einseitiger (95%,95%)-Toleranzgrenze sowie der Referenzläufe (1 alt und 1b neu) der Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Kritikalität in den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre aufgelistet.

Tab. 2.18 Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 1b

Zeitintervall (in Jahren)	Wahrscheinlichkeit			50%	Mean	95%	Upper 1-sided (95%,95%)-TL
	Referenz	Referenz-alt					
0 - 5000	2.77E-07	3.16E-07		4.11E-06	2.56E-05	1.20E-04	2.17E-04
5000 - 10000	2.81E-06	3.22E-06		1.03E-05	4.74E-05	2.51E-04	4.01E-04
10000 - 15000	7.41E-06	8.58E-06		1.65E-05	6.28E-05	3.27E-04	5.15E-04
15000 - 20000	1.22E-05	1.42E-05		2.11E-05	7.18E-05	3.94E-04	5.91E-04
20000 - 25000	1.60E-05	1.89E-05		2.36E-05	7.57E-05	4.11E-04	6.10E-04
25000 - 30000	1.86E-05	2.21E-05		2.38E-05	7.61E-05	3.96E-04	5.59E-04
30000 - 35000	1.99E-05	2.40E-05		2.43E-05	7.42E-05	3.66E-04	5.21E-04
35000 - 40000	2.04E-05	2.49E-05		2.31E-05	7.10E-05	3.41E-04	4.73E-04
40000 - 45000	2.02E-05	2.50E-05		2.15E-05	6.72E-05	3.12E-04	4.26E-04
45000 - 50000	1.96E-05	2.45E-05		2.12E-05	6.31E-05	2.82E-04	4.10E-04
50000 - 55000	1.88E-05	2.37E-05		2.07E-05	5.90E-05	2.52E-04	3.91E-04
55000 - 60000	1.78E-05	2.28E-05		2.00E-05	5.50E-05	2.24E-04	3.71E-04
60000 - 65000	1.67E-05	2.16E-05		1.87E-05	5.13E-05	1.98E-04	3.50E-04
65000 - 70000	1.56E-05	2.04E-05		1.71E-05	4.78E-05	1.91E-04	3.30E-04
70000 - 75000	1.46E-05	1.92E-05		1.57E-05	4.45E-05	1.83E-04	3.10E-04
75000 - 80000	1.35E-05	1.80E-05		1.46E-05	4.16E-05	1.63E-04	2.91E-04
80000 - 85000	1.25E-05	1.68E-05		1.39E-05	3.88E-05	1.57E-04	2.72E-04
85000 - 90000	1.15E-05	1.57E-05		1.30E-05	3.63E-05	1.52E-04	2.56E-04
90000 - 95000	1.06E-05	1.46E-05		1.18E-05	3.40E-05	1.52E-04	2.44E-04
95000 - 100000	9.77E-06	1.35E-05		1.10E-05	3.19E-05	1.43E-04	2.31E-04

Nach **Tab. 2.18** erreichen die Werte für den Referenzfall des Szenarios 1b im Zeitintervall von 35 000 bis 40 000 Jahren mit 2,04E-5 ihr Maximum. Die maximale Wahrscheinlichkeit für den Referenzfall 1 (alt) liegt im Intervall zwischen 40 000 und 45 000 Jahren, und ist mit 2.5E-5 um etwa 23 % größer als beim neuen Referenzfall 1b. Auch die Maxima der Kennwerte liegen teilweise in unterschiedlichen Zeitintervallen und zwar der Median mit 2,43E-5 im Zeitintervall zwischen 30 000 und 35 000 Jahren, der Mittelwert mit 7,61E-5 im Bereich von 25 000 bis 30 000 Jahren sowie das 95%-Quantil mit 4,11E-4 und die einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze mit 6,10E-4 im Intervall zwischen 20 000 und 25 000 Jahren.

2.4.2.2.2 Sensitivitätsanalyse zu Szenario 1b

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen zu Szenario 1b unterscheiden sich nur unwesentlich von denen zu Szenario 1a. Deshalb wird hier auf eine explizite Darstellung der entsprechenden Abbildungen und Texte verzichtet und auf die Sensitivitätsanalysen zu Szenario 1a (Kapitel 2.4.2.1.2) verwiesen. Geringfügige Unterschiede gibt es bei der Festlegung der relevanten Parameter. So werden bei Konsequenz 1 in Szenario 1b die Parameter 6 (*Separation der Aktinoiden vom Spaltstoff*) und 13 (*Geeignete Geometrie*) – im Gegensatz zu Szenario 1a – nicht mehr den relevanten Parametern zugerechnet.

In der Zusammenfassung zu Szenario 1b (Kapitel 2.4.2.2.3) findet sich ein kurzer Überblick über die wichtigsten Resultate der Sensitivitätsanalyse zu Szenario 1b.

2.4.2.2.3 Zusammenfassung Szenario 1b

Die statistischen Kenngrößen für die Wahrscheinlichkeit eines Eintretens von Kritikalität im Szenario 1b weisen teilweise stark voneinander abweichende zeitliche Verläufe auf. Während im Fall von Konsequenz 1 zwischen Referenzwert 1 (alt) /GMA 09/, Median und Referenzwert Szenario 1b kaum Abweichungen erkennbar sind, verlaufen 95%-Quantil, obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze und obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze deutlich darüber. Der Mittelwert liegt dazwischen (vgl. **Abb. 2.21**). Dies gilt prinzipiell auch für Konsequenz 2. Allerdings blieb in diesem Fall Referenzwert Szenario 1 (alt) aus /GMA 09/ unberücksichtigt (vgl. **Abb. 2.23**).

Die für Konsequenz 1 und Szenario 1a nach 500 000 Jahren ermittelten Maximalwerte für Kenngrößen und Referenzläufe erstrecken sich über einen weiten Bereich:

- Median: 5,9E-4,
- Referenzwert Szenario 1b: 6,35E-4,
- Mittelwert: 1,65E-3,
- Referenzwert Szenario 1 (alt): 5,04E-4,
- 95%-Quantil: 7,05E-3 und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 9,24E-3.

Die maximalen Wahrscheinlichkeiten und die Zeitintervalle, in denen diese bei Konsequenz 2 erreicht werden unterscheiden sich teilweise erheblich (vgl. **Tab. 2.18**):

- Median: 2,43E-5 im Zeitintervall (30 000, 35 000) Jahre,
- Referenzwert Szenario 1b: 2,04E-5 im Zeitintervall (35 000, 40 000) Jahre,
- Mittelwert: 7,61E-5 im Zeitintervall (25 000, 30 000) Jahre ,
- Referenzwert Szenario 1 (alt): 2,50E-5 im Zeitintervall (40 000, 45 000) Jahre,
- 95%-Quantil: 4,11E-4 im Zeitintervall (20 000, 25 000) Jahre und
- Obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 6,10E-4 im Zeitintervall (20 000, 25 000) Jahre.

Bei der Sensitivitätsanalyse wurden die Parameter 1 (*Korrosionsrate*), 2 (*Keine Kompaktierung*), 3 (*Kein Selbstverschluss*), 13 (*Geeignete Geometrie*) und 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) als relevante Parameter sowohl für Konsequenz 1 (Ausnahme hier: ohne Parameter 13) als auch für Konsequenz 2 identifiziert, wobei Parameter 3 in beiden Fällen dominiert. Die Sensitivitätsanalyse von Konsequenz 1 basierte auf einem metrischen R^2 -Anpassungsmaß, für die von Konsequenz 2 hingegen musste ein rangbasiertes Sensitivitätsmaß (hier: Spearmansche Rangkorrelation) verwendet werden.

2.4.2.3 Szenario 1c

Im modifizierten Szenario 1c wird die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kritikalität in der Brennstabkokille BSK-3 nach vollständiger Korrosion der Brennstäbe und Bildung einer homogenen Mischung aus Kernbrennstoff und Hüllrohrmaterialien untersucht. Die Brennstabkokille BSK-3 ist dabei mit nicht bestrahltem Brennstoff beladen.

2.4.2.3.1 Eintrittswahrscheinlichkeit von Szenario 1c

Abb. 2.24 zeigt für Szenario 1c und Konsequenz 1 die zeitlichen Verläufe von Median, Mittelwert, 95%-Quantil, die der oberen zweiseitigen (90%,90%)- und einseitigen(95%,95%)-Toleranzgrenzen sowie die der Referenzläufe von Szenario 1c (neu) und Szenario 1 (alt).

Vergleich der kumulierten Kennwertverläufe mit den zeitabhängigen Verläufen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen zu Szenario 1c (Brennstabkokille BSK-3 mit unbestrahltem Spaltstoff).

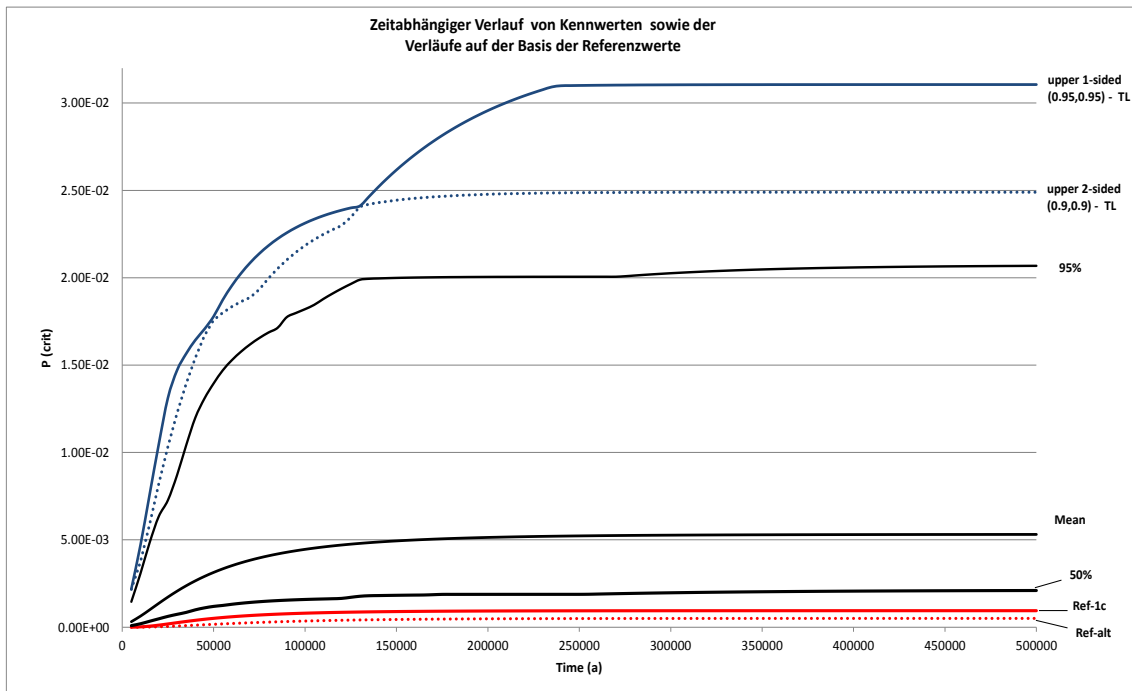


Abb. 2.24 Vergleich der kumulierten Kennwertverläufe mit den zeitabhängigen Verläufen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen zu Szenario 1c (Brennstabkockille BSK-3 mit unbestrahltem Spaltstoff)

Der in **Abb. 2.24** dargestellte zeitlichen Verlauf der oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze zeigt, dass mit 95%-iger Sicherheit das 95%-Quantil der Kritikalitätswahrscheinlichkeit nach 500 000 Jahren $< 3.1E-2$ ist. Diese Wahrscheinlichkeit stellt sich bereits nach 240 000 Jahren ein und bleibt bis 500 000 Jahre konstant. Die zweiseitigen Toleranzgrenzen zum Zeitpunkt $t = 500\ 000$ Jahre betragen $6.0E-5$ und $2.5E-2$ und geben an, dass nach 500 000 Jahren mit 90%-iger Sicherheit 90% der Wahrscheinlichkeitswerte $P(\text{crit})$ zwischen $6.0E-5$ und $2.5E-2$ liegen. Der Unterschied zwischen dem Median (ca. $2.1E-3$) und dem 95%-Quantil (ca. $2.1E-2$) nach 500 000 Jahren weist auf große Unsicherheiten bzgl. der Kritikalitätswahrscheinlichkeiten hin. Aus **Abb. 2.24** ist ersichtlich, dass sich große Unsicherheiten bereits nach 200 000 bis 250 000 Jahren einstellen. Nach 500 000 Jahren erreichen die Kenngrößen und Referenzläufe die folgenden Werte:

- Referenzwerte Szenario 1c (neu): $9,45E-4$,
- Referenzwerte Szenario 1 (alt): $5,04E-4$,
- Median: $2,1E-3$,
- Mittelwert: $5,31E-3$,
- 95%-Quantil: $2,07E-2$,
- oberen zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze: $2,5E-2$ und

- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $3,11E-2$.

In **Abb. 2.25** werden die zeitlichen Verläufe von Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Kritikalität in 5000-Jahresintervallen für den Referenzlauf von Szenario 1c und für die Kennwerte Median, Mittelwert, 95%-Quantil, obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze und obere einseitige (95%,95%)-Toleranzintervall dargestellt.

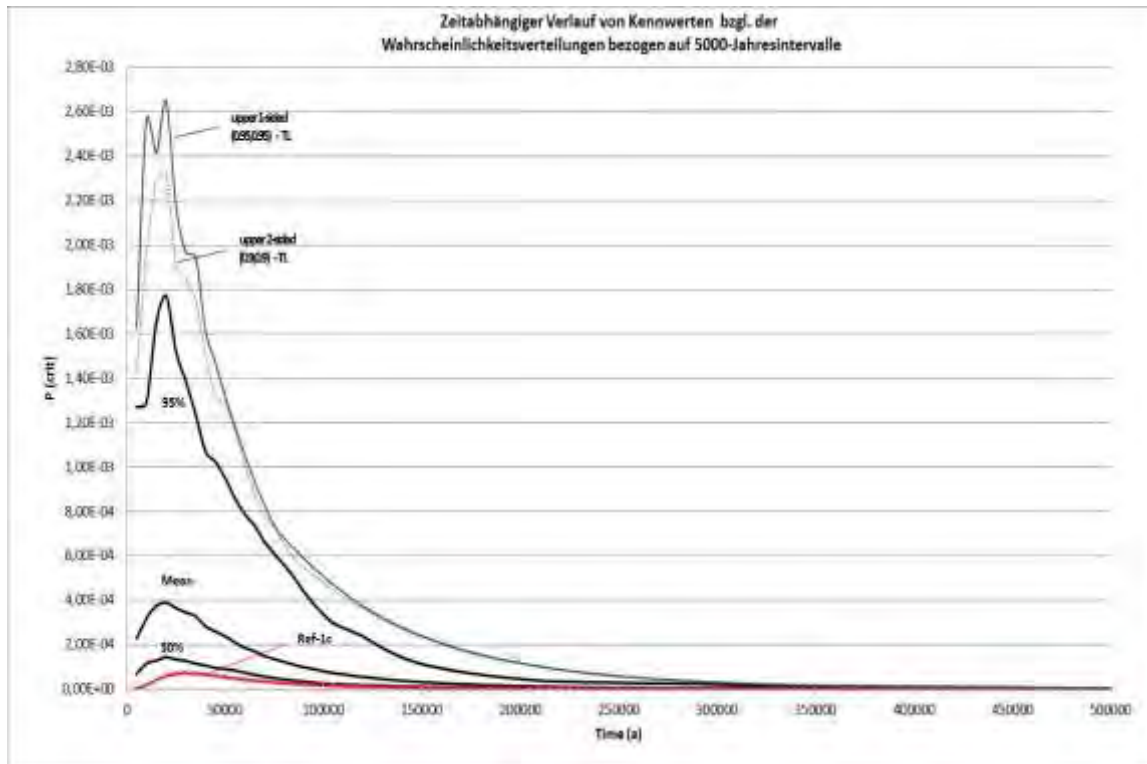


Abb. 2.25 Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten der 100 Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus der Unsicherheitsanalyse für Szenario 1c (Brennstabkille BSK-3 mit unbestrahltem Brennstoff) und Konsequenz 2

Aus **Abb. 2.25** ist ersichtlich, dass sich die maximalen Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalität innerhalb der ersten 50 000 Jahre einstellen und dass die Kritikalitätswahrscheinlichkeiten mit zunehmender Zeit drastisch abnehmen. Dies wird insbesondere aus den Verläufen des 95%-Quantils und der Toleranzgrenzen deutlich. Der Verlauf des Referenzlaufs 1 (alt) /GMA 09/ ist nicht dargestellt.

In **Tab. 2.19** sind für Szenario 1c die numerischen Werte von Median, Mittelwert, 95%-Quantil und einseitiger (95%,95%)-Toleranzgrenze sowie der Referenzläufe (1 alt und 1c neu) der Wahrscheinlichkeiten in den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre aufgelistet.

Tab. 2.19 Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 1c

Zeitintervall (in Jahren)	Wahrscheinlichkeit			50%	Mean	95%	Upper 1-sided (95%,95%)-TL
	Referenz	Referenz-alt					
0 - 5000	2.01E-06	3.16E-07		6.97E-05	2.28E-04	1.27E-03	1.63E-03
5000 - 10000	1.71E-05	3.22E-06		1.16E-04	3.19E-04	1.29E-03	2.56E-03
10000 - 15000	4.02E-05	8.58E-06		1.28E-04	3.75E-04	1.65E-03	2.41E-03
15000 - 20000	5.88E-05	1.42E-05		1.43E-04	3.90E-04	1.77E-03	2.65E-03
20000 - 25000	6.90E-05	1.89E-05		1.34E-04	3.65E-04	1.52E-03	2.18E-03
25000 - 30000	7.18E-05	2.21E-05		1.27E-04	3.45E-04	1.39E-03	1.97E-03
30000 - 35000	6.99E-05	2.40E-05		1.15E-04	3.29E-04	1.24E-03	1.95E-03
35000 - 40000	6.53E-05	2.49E-05		1.07E-04	2.83E-04	1.07E-03	1.62E-03
40000 - 45000	5.95E-05	2.50E-05		9.56E-05	2.60E-04	1.02E-03	1.47E-03
45000 - 50000	5.35E-05	2.45E-05		9.10E-05	2.38E-04	9.50E-04	1.32E-03
50000 - 55000	4.78E-05	2.37E-05		8.39E-05	2.10E-04	8.59E-04	1.18E-03
55000 - 60000	4.24E-05	2.28E-05		7.39E-05	1.86E-04	7.88E-04	1.05E-03
60000 - 65000	3.76E-05	2.16E-05		6.45E-05	1.71E-04	7.36E-04	9.35E-04
65000 - 70000	3.33E-05	2.04E-05		5.68E-05	1.49E-04	6.63E-04	8.29E-04
70000 - 75000	2.95E-05	1.92E-05		4.98E-05	1.35E-04	6.10E-04	7.35E-04
75000 - 80000	2.61E-05	1.80E-05		4.39E-05	1.22E-04	5.58E-04	6.79E-04
80000 - 85000	2.32E-05	1.68E-05		3.82E-05	1.10E-04	5.03E-04	6.33E-04
85000 - 90000	2.06E-05	1.57E-05		3.44E-05	9.83E-05	4.39E-04	5.88E-04
90000 - 95000	1.83E-05	1.46E-05		2.94E-05	9.06E-05	3.84E-04	5.46E-04
95000 - 100000	1.63E-05	1.35E-05		2.52E-05	8.03E-05	3.36E-04	5.07E-04

Im Zeitintervall zwischen 25 000 und 30 000 Jahren erreicht nach **Tab. 2.19** der Referenzfall des Szenarios 1c mit 7,18E-5 seinen Maximalwert. Für den Referenzfall des Szenarios 1 (alt) liegt die maximale Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Kritikalität im Intervall zwischen 40 000 und 45 000 Jahren, und ist mit 2.50E-5 deutlich kleiner als beim Referenzfall des Szenarios 1c (neu). Alle Maxima der Kritikalitätswahrscheinlichkeiten liegen in diesem Szenario ausnahmslos in den Zeitintervallen zwischen 15 000 und 30 000 Jahren und weisen dabei die folgenden Werte auf: Median: 1,43E-4, Mittelwert: 3,90E-4, 95%-Quantil: 1,77E-3 und einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 2,65E-3.

2.4.2.3.2 Sensitivitätsanalyse zu Szenario 1c

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen zu Szenario 1c weichen – wie bei Szenario 1b – nicht signifikant von denen zu Szenario 1a ab. Deshalb wird auch hier auf eine explizite Darstellung der entsprechenden Abbildungen und Texte verzichtet und auf die Sensitivitätsanalysen zu Szenario 1a (Kapitel 2.4.2.1.2) verwiesen. Kleinere Unterschiede gibt es bei der Festlegung der relevanten Parameter. So werden bei Konsequenz 1 in Szenario 1c die Parameter 6 (*Separation der Aktinoiden vom Spaltstoff*) und 13 (*Geeignete Geometrie*) – im Gegensatz zu Szenario 1a - nicht mehr als relevante

Parameter identifiziert. In der Zusammenfassung zu Szenario 1c (Kapitel 2.4.2.3.3) findet sich ein kurzer Überblick über die wichtigsten Resultate der Sensitivitätsanalyse zu Szenario 1c.

2.4.2.3.3 Zusammenfassung Szenario 1c

Die zeitlichen Verläufe der statistischen Kenngrößen für die Wahrscheinlichkeit eines Eintretens von Kritikalität im Szenario 1c weichen teilweise stark voneinander ab. Die niedrigsten Werte werden im Fall von Konsequenz 1 für die Referenzläufe der Szenarien 1 (alt) /GMA 09/ und 1c (neu) registriert. Mit steigenden Werten folgen die Verläufe von Median, Mittelwert, 95%-Quantil, oberer zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze und oberer einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze (vgl. **Abb. 2.24**). Dies gilt prinzipiell auch für Konsequenz 2. Allerdings blieb in diesem Fall der Referenzwert Szenario 1 (alt) aus /GMA 09/ unberücksichtigt (vgl. **Abb. 2.25**).

Die für Konsequenz 1 und Szenario 1c nach 500 000 Jahren ermittelten Maximalwerte für Kenngrößen und Referenzläufe erstrecken sich über einen weiten Bereich:

- Median: 2,2E-3,
- Referenzwert Szenario 1c: 9,46E-4,
- Mittelwert: 5,31E-3,
- Referenzwert Szenario 1 (alt): 5,04E-4,
- 95%-Quantil: 2,07E-3 und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 3,11E-2.

Die maximalen Wahrscheinlichkeiten und die Zeitintervalle, in denen diese bei Konsequenz 2 erreicht werden unterscheiden sich für Kennwerte und Referenzläufe teilweise erheblich (vgl. **Tab. 2.19**):

- Median: 1,43E-4 im Zeitintervall (15 000, 20 000) Jahre,
- Referenzwert Szenario 1c: 7,18E-5 im Zeitintervall (25 000, 30 000) Jahre,
- Mittelwert: 3,90E-4 im Zeitintervall (15 000, 20 000) Jahre ,
- Referenzwert Szenario 1 (alt): 2,50E-5 im Zeitintervall (40 000, 45 000) Jahre,
- 95%-Quantil: 1,77E-3 im Zeitintervall (15 000, 20 000) Jahre und
- Obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 2,65E-3 im Zeitintervall (15 000, 20 000) Jahre.

Bei der Sensitivitätsanalyse wurden die Parameter 1 (*Korrosionsrate*), 2 (*Keine Kompaktierung*), 3 (*Kein Selbstverschluss*) und 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) als relevante Parameter sowohl für Konsequenz 1 als auch für Konsequenz 2 identifiziert, wobei Parameter 3 in beiden Fällen dominiert. Die Sensitivitätsanalyse von Konsequenz 1 basierte auf einem metrischen R^2 -Anpassungsmaß, für die von Konsequenz 2 hingegen musste ein rangbasiertes Sensitivitätsmaß (hier: Spearmansche Rangkorrelation) verwendet werden.

2.4.2.4 Szenario 2a

In diesem Szenario wird angenommen, dass Innenbehälter und Einbauten des POL-LUX-Behälters vollständig zu nicht stöchiometrischem porösem $\text{Fe}(\text{OH})_3$ korrodiert sind, wobei durch Einlagerung von Wasser in die Poren ein reaktives Moderationsverhältnis erreicht wird. Der Außenbehälter und das durch Korrosionsprozesse und die dabei entstehenden Korrosionsprodukte aufgeweitete Brennstabgitter werden bei diesen Untersuchungen als intakt angenommen. Die 2360 Brennstäbe (Beladung unbestrahlter Brennstoff) verteilen sich gleichmäßig auf die deutlich vergrößerte Querschnittsfläche und der verbleibende Leerraum im Behälter wird vollständig mit $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ausgefüllt. Die Gitterschrittweite steigt damit von vorher 1,333 cm auf 1,9838 cm.

2.4.2.4.1 Eintrittswahrscheinlichkeit von Szenario 2a

Abb. 2.26 zeigt die Variation der kumulativen Verteilungen zu den Kritikalitätswahrscheinlichkeiten, die sich aus den Unsicherheiten der Eingabeparameter bezüglich des Szenarios 2a ergeben haben. Die Unsicherheitsanalyse wurde mit einem Stichprobenumfang von 100 Rechenläufen durchgeführt.

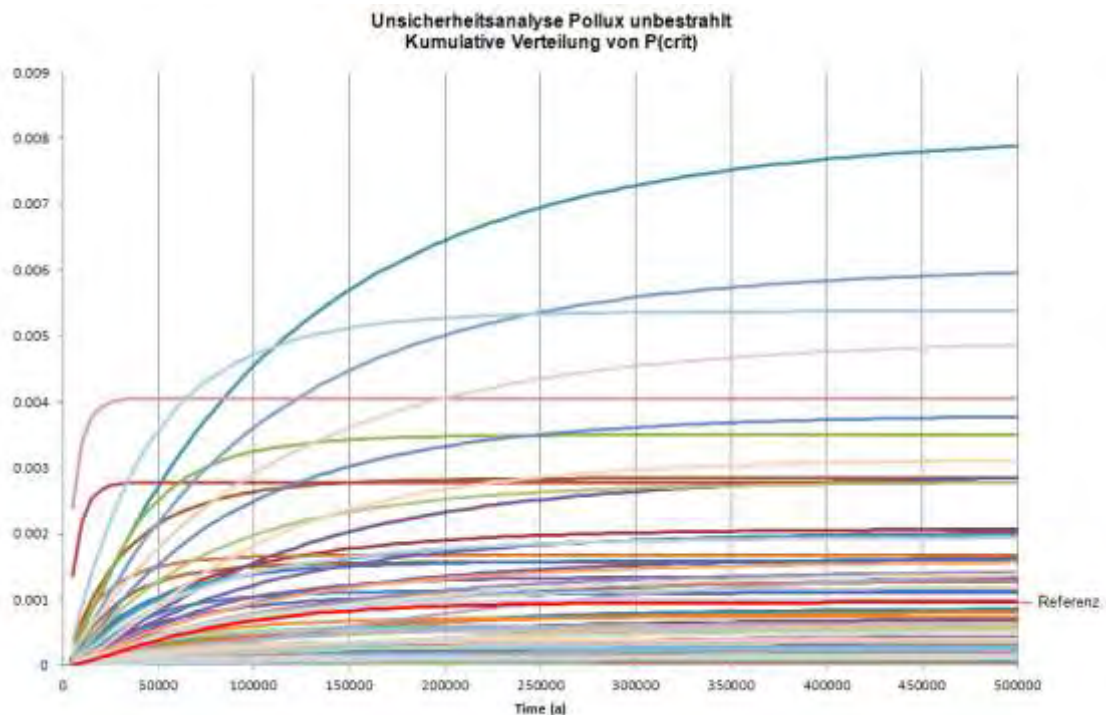


Abb. 2.26 Unsicherheit der kumulierten Verteilungen von P(crit) im Szenario 2a (POLLUX-Behälter mit Stabgitter-Aufweitung, Beladung mit unbestrahltem Brennstoff)

Aus **Abb. 2.26** ist ersichtlich, dass im Fall des POLLUX-Behälters mit Stabgitter-Aufweitung und einer Beladung mit unbestrahltem Brennstoff bei einer überwiegenden Zahl (ca. 88%) der kumulierten Verteilungen die Wahrscheinlichkeit für das Entstehen einer Kritikalität im Endlager innerhalb von 500 000 Jahren $< 2 \cdot 10^{-3}$ ist. Die hellrote Kurve in Abb. 2.26 ist die Kurve auf der Basis der Referenzwerte.

In **Abb. 2.27** sind die kumulierten zeitlichen Verläufe von Median, Mittelwert, 95%-Quantil und die der Referenzläufe des Szenarios 2a und des alten Szenarios 2 /GMA 09/ sowie der oberen zweiseitigen (90%,90%)- und der oberen einseitigen(95%,95%)-Toleranzgrenze dargestellt.

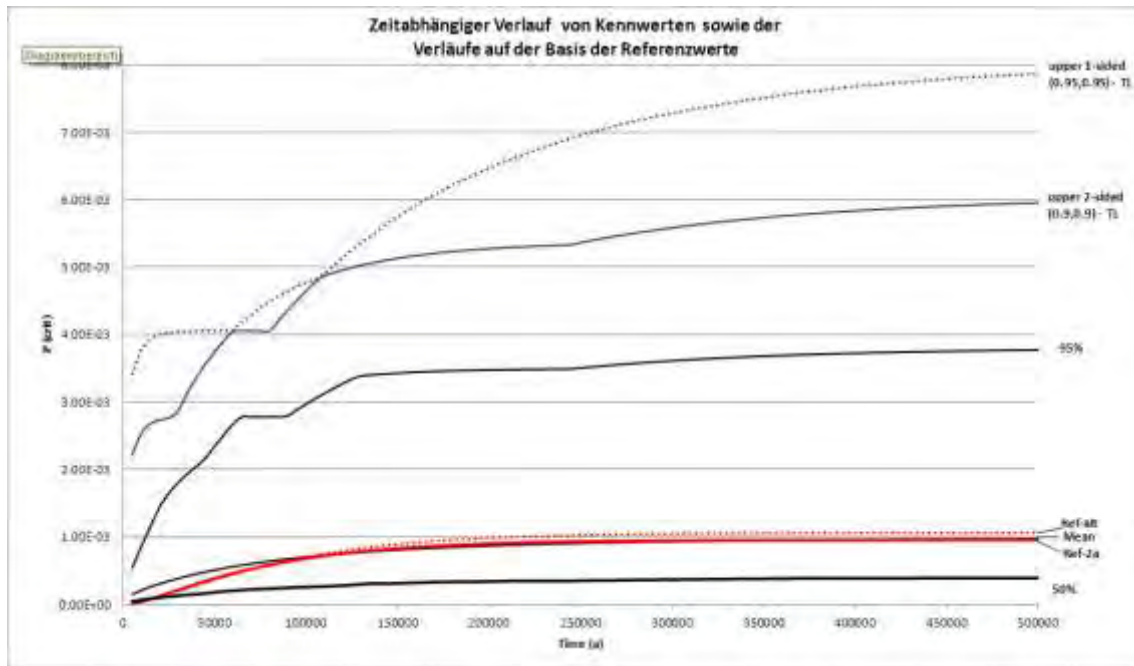


Abb. 2.27 Zeitabhängiger Verlauf verschiedener Kennwerte aus den Unsicherheiten der kumulierten Verteilungen (Konsequenz 1) für Szenario 2a

Nach **Abb. 2.27** liegt die (95%,95%) - Toleranzgrenze für die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität nach 500 000 Jahren bei ca. $7.8E-3$. D.h., nach dem angewendeten Modell nimmt das 95%-Quantil der Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität mit einer Sicherheit von 95% einen Wert von ca. $7.8E-3$ an. Das 95%-Quantil der Modellrechnungen ist nach 500 000 Jahren um einen Faktor von ca. 2 geringer und liegt bei ungefähr $3.8E-3$. Dies weist auf die Unsicherheiten hin, die bei der Schätzung des 95%-Quantils nach einem Zeitraum von 500 000 Jahren bestehen. Während die jeweiligen Maximalwerte für die beiden Referenzläufe (Szenario 2a und altes Szenario 2 /GMA 09/), den Median und den Mittelwert nach etwa 350 000 Jahren erreicht werden und danach konstant bleiben und auch die Werte des 95%-Quantils nach 400 000 Jahren keine wesentlichen Zuwächse mehr erhalten, haben die Kurven der oberen zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze und der oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze auch nach 500 000 Jahren ihre Sättigung noch nicht erreicht. D.h. die Unsicherheiten bzgl. der Schätzung des 95%-Quantils nehmen mit Zeiträumen $> 500\ 000$ Jahren weiter zu.

Nach 500 000 Jahren nehmen Kenngrößen und Referenzläufe die folgenden Werte an:

- Referenzwerte Szenario 2a (neu): $9,6E-4$,
- Referenzwerte Szenario 2 (alt): $1,1E-3$,
- Median: $3,8E-4$,

- Mittelwert: $9,9E-4$,
- 95%-Quantil: $3,8E-3$,
- obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze: $6,0E-3$ und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $7,9E-3$.

In **Abb. 2.28** werden die Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ bzgl. von Zeitintervallen mit einer Dauer von 5000 Jahren (Konsequenz 2) für Szenario 2a an Hand von 100 Rechenläufen dargestellt. Die Kurven in **Abb. 2.28** zeigen, wie groß in einem bestimmten Zeitintervall (Dauer 5000 Jahre) die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität für POLLUX-Behälter mit nicht abgebranntem Brennstoff und Stabgitter-Aufweitung ist.

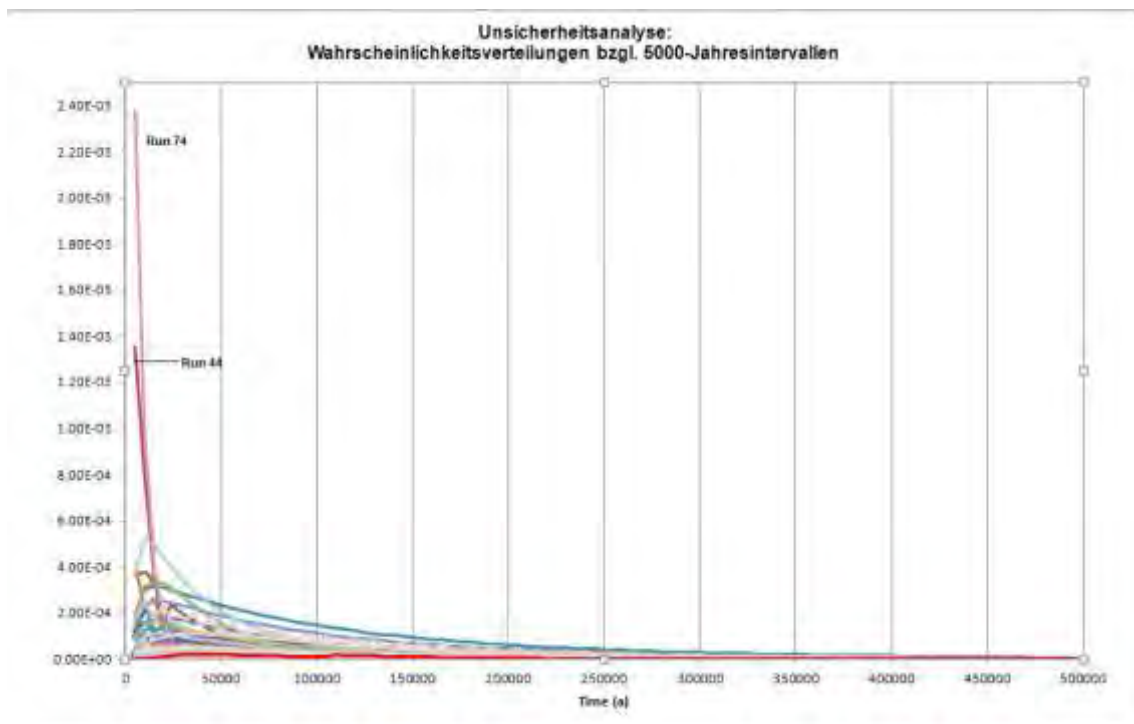


Abb. 2.28 Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ bezogen auf 5000-Jahresintervalle für Szenario 2a

Aus den berechneten Wahrscheinlichkeitsverteilungen in **Abb. 2.28** lassen sich die Informationen ableiten, in welchen Zeitintervallen die jeweiligen Verteilungen ihre maximalen Wahrscheinlichkeiten annehmen und wie groß die maximalen Wahrscheinlichkeiten sind.

In **Abb. 2.28** fällt auf, dass die Läufe 74 und 44 anfangs aus bislang unbekannter Ursache sehr hohe Werte aufweisen. Bei einigen anderen Läufen zeigt sich ein schwan-

kender Verlauf, der vermutlich auf die Genauigkeit der Zeiteinteilung für die Markov-Rechnungen zurückzuführen ist. Die hellrote Kurve in **Abb. 2.28** ist die Kurve auf der Basis der Referenzwerte.

Abb. 2.29 zeigt die zeitlichen Verläufe von Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Kritikalität in 5000-Jahresintervallen (Konsequenz 2) für den Referenzlauf von Szenario 2a und für die Kennwerte Median, Mittelwert, 95%-Quantil, obere zweiseitiger (90%,90%)-Toleranzgrenze und obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze.

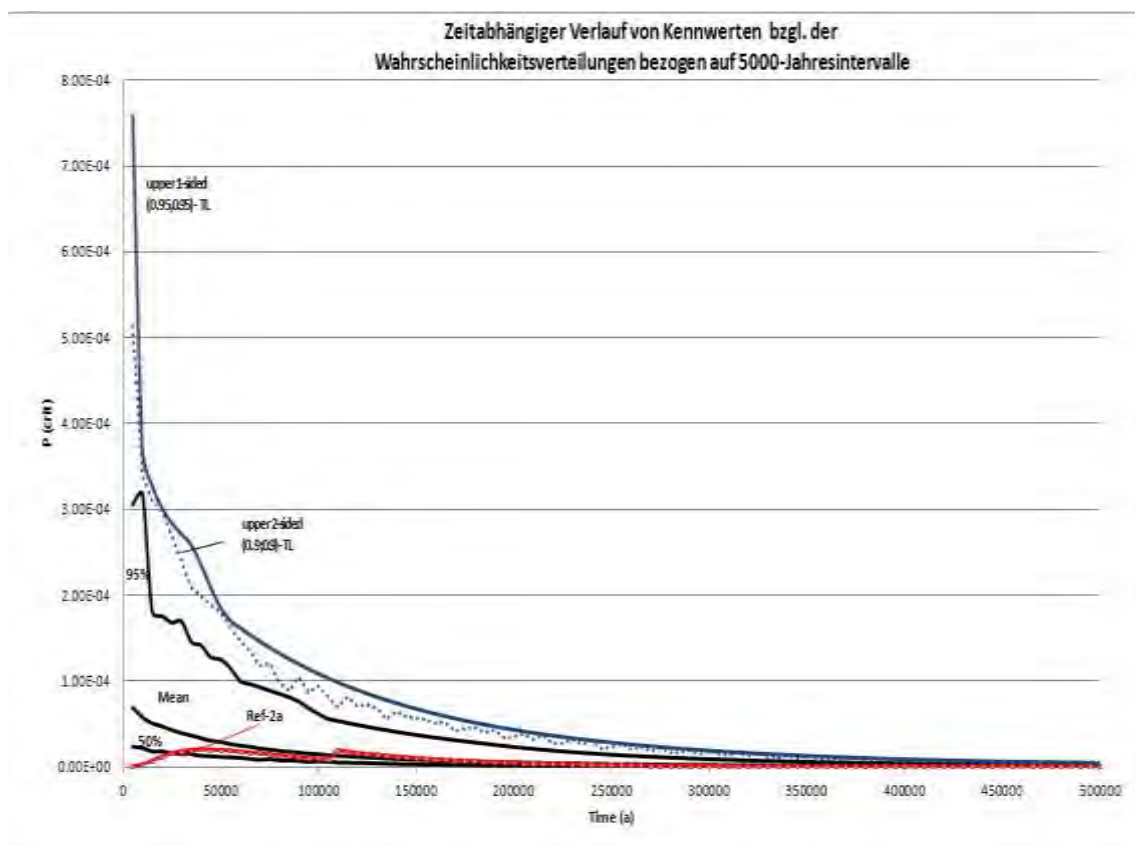


Abb. 2.29 Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten und Verlauf von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen (Szenario 2a)

Die zeitlichen Verläufe der Kennwerte in **Abb. 2.29** deuten an, dass die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität innerhalb der ersten 10 000 Jahre am größten ist. In welchem Ausmaß die Kurven der Kennwerte durch die beiden Läufe „Run 44“ und „Run 74“ (siehe **Abb. 2.28**) beeinflusst werden, bleibt zu untersuchen.

In **Tab. 2.20** sind für Szenario 2a die numerischen Werte von Median, Mittelwert, 95%-Quantilen und einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen sowie Referenzläufen (alt und

neu) zu den Wahrscheinlichkeiten in den jeweiligen 5000-Jahresintervallen (Konsequenz 2) im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre zusammengestellt.

Tab. 2.20 Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 2a

Zeitintervall (in Jahren)	Wahrscheinlichkeit				Upper 1-sided	
	Referenz	Referenz-alt	50%	Mean	95%	(95%,95%)-TL
0 - 5000	1.16E-05	9.82E-06	2.33E-05	6.90E-05	3.06E-04	7.58E-04
5000 - 10000	2.82E-05	2.45E-05	2.19E-05	5.76E-05	3.18E-04	3.69E-04
10000 - 15000	3.77E-05	3.35E-05	1.78E-05	5.05E-05	1.81E-04	3.28E-04
15000 - 20000	4.28E-05	3.89E-05	1.78E-05	4.73E-05	1.76E-04	3.02E-04
20000 - 25000	4.51E-05	4.20E-05	1.58E-05	4.27E-05	1.68E-04	2.84E-04
25000 - 30000	4.56E-05	4.35E-05	1.52E-05	3.92E-05	1.69E-04	2.71E-04
30000 - 35000	4.51E-05	4.40E-05	1.47E-05	3.64E-05	1.46E-04	2.58E-04
35000 - 40000	4.39E-05	4.38E-05	1.28E-05	3.33E-05	1.41E-04	2.35E-04
40000 - 45000	4.23E-05	4.31E-05	1.22E-05	3.03E-05	1.28E-04	2.09E-04
45000 - 50000	4.04E-05	4.21E-05	1.15E-05	2.89E-05	1.25E-04	1.85E-04
50000 - 55000	3.85E-05	4.08E-05	1.10E-05	2.64E-05	1.15E-04	1.70E-04
55000 - 60000	3.64E-05	3.93E-05	1.04E-05	2.45E-05	1.00E-04	1.62E-04
60000 - 65000	3.44E-05	3.78E-05	9.31E-06	2.34E-05	9.64E-05	1.54E-04
65000 - 70000	3.24E-05	3.61E-05	8.16E-06	2.13E-05	9.27E-05	1.46E-04
70000 - 75000	3.04E-05	3.45E-05	8.91E-06	2.00E-05	8.89E-05	1.39E-04
75000 - 80000	2.85E-05	3.28E-05	7.45E-06	1.86E-05	8.50E-05	1.32E-04
80000 - 85000	2.67E-05	3.11E-05	7.35E-06	1.75E-05	8.12E-05	1.26E-04
85000 - 90000	2.50E-05	2.95E-05	6.75E-06	1.65E-05	7.60E-05	1.20E-04
90000 - 95000	2.33E-05	2.79E-05	5.76E-06	1.54E-05	6.84E-05	1.14E-04
95000 - 100000	2.17E-05	2.63E-05	6.18E-06	1.46E-05	6.17E-05	1.09E-04

Nach **Tab. 2.20** werden für die Kennwerte die maximalen Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalität im Zeitintervall zwischen 0 und 5000 erreicht (Ausnahme: 95%-Quantile, dort nach 5000-10 000 Jahren). Die jeweiligen Maximalwerte betragen dabei 2.33E-5 für den Median, 6.90E-5 für den Mittelwert, 3.18E-4 für die 95%-Quantile, 5.1E-4 für die obere zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze (Ableseung aus **Abb. 2.28**) und 7.58E-4 für die obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze. Für den Referenzfall des Szenarios 2a weist die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität ihr Maximum mit 4.56E-5 im Zeitintervall zwischen 25 000 und 30 000 Jahren auf. Der entsprechende Maximalwert für den alten Referenzfall 2 /GMA 09/ ist im Intervall zwischen 30 000 und 35 000 lokalisiert Jahren und liegt mit 4.40E-5 sehr nahe am Maximalwert für das neue Szenario 2a.

In **Abb. 2.29** fällt auf, dass sämtliche Kennwerte ihre Maximalwerte zu wesentlich früheren Zeitpunkten als in den Szenarien 1a, 1b und 1c (vgl. **Abb. 2.14**, **Tab. 2.17**, **Abb. 2.23**, **Tab. 2.18** und **Abb. 2.25**) erreichen. Bei den Referenzläufen ist dieses Phänomen nicht in dieser Ausprägung erkennbar.

2.4.2.4.2 Sensitivitätsanalyse zu Szenario 2a

Die Abbildungen **Abb. 2.30**, **Abb. 2.31** und **Abb. 2.32** geben die Ergebnisse aus der Sensitivitätsanalyse für Konsequenz 1 (kumulierte Wahrscheinlichkeiten) wieder. In **Abb. 2.30** ist der zeitabhängige Verlauf des R^2 -Anpassungswertes für Konsequenz 1 dargestellt.

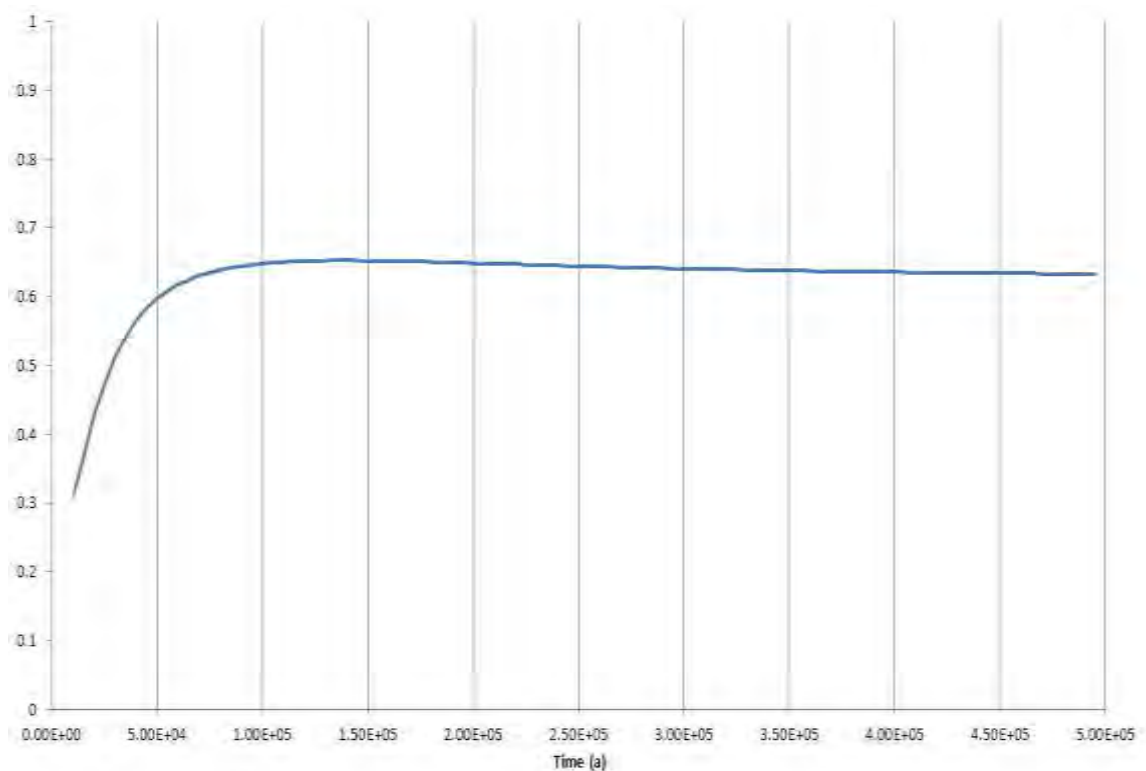


Abb. 2.30 Zeitabhängiger Verlauf des R^2 -Wertes für Konsequenz 1 im Szenario 2a

Nach **Abb. 2.30** erfüllt das auf metrischen Daten basierende Sensitivitätsmaß mit seinem zeitlichen Verlauf (Steigerung von anfangs ca. 0,3 bis auf maximal etwa 0,65) nicht die zur Durchführung einer Sensitivitätsanalyse erforderlichen Maßgaben. Deshalb wird für Konsequenz 1 die Spearmansche Rangkorrelation als Sensitivitätsmaß (vgl. **Abb. 2.31**) herangezogen.

Wie aus **Abb. 2.31** ersichtlich, liegen die Werte der Spearmanschen Rangkorrelation näherungsweise zwischen 0,85 und 0,9. Damit ist die Spearmansche Rangkorrelation für eine Sensitivitätsanalyse gut geeignet.

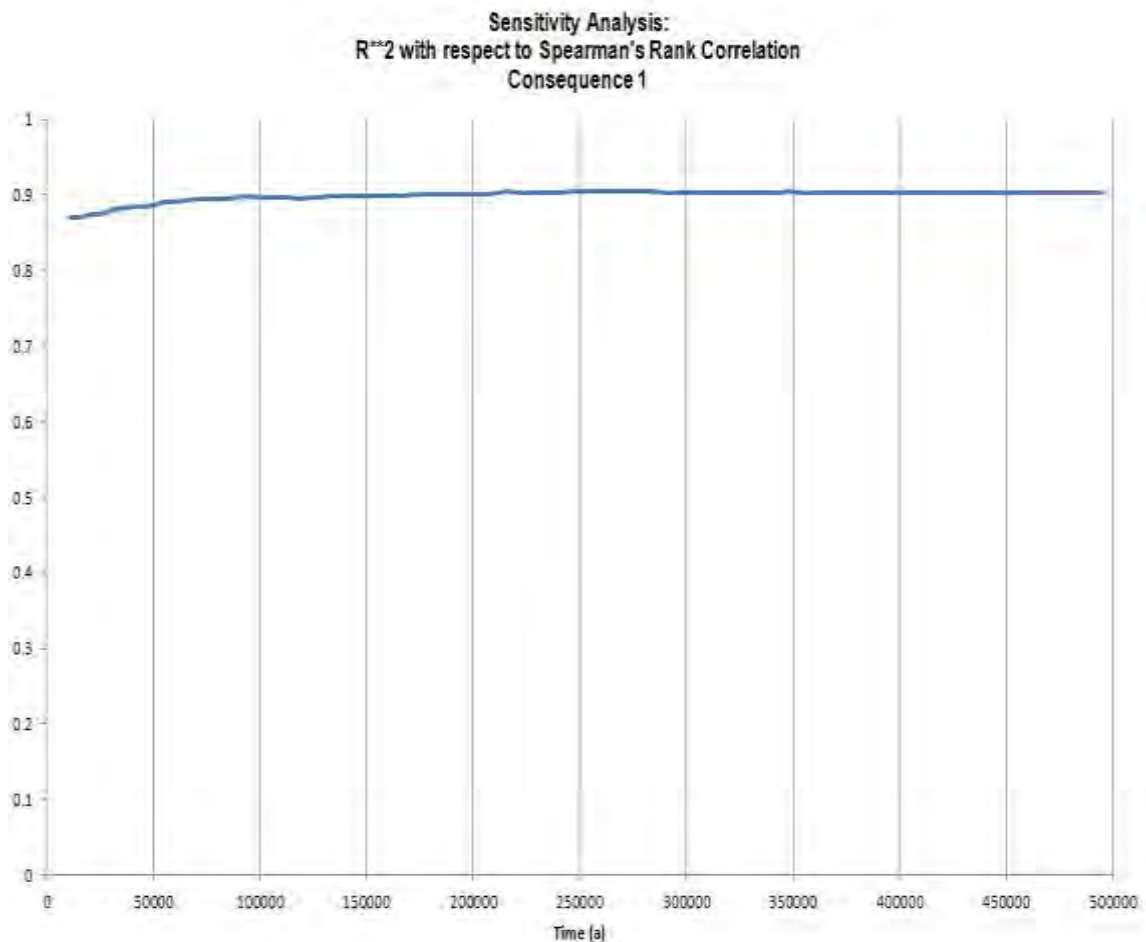


Abb. 2.31 Zeitabhängiger Verlauf der auf der Basis der Spearmanschen Rangkorrelation ermittelten R²-Werte für Konsequenz 1 im Szenario 2a

In den Abbildungen zur Sensitivitätsanalyse der Szenarien 2a und 2b kommt die folgende Zuordnung zwischen Parameterkennzeichnung und Parameter zur Anwendung:

Parameter 1: Korrosionsrate

Parameter 2: Keine Kompaktierung

Parameter 3: Kein Selbstverschluss

Parameter 4: Geeignetes chemisches Medium

Parameter 5: Schutzüberzug hält

Parameter 14: Zeitdauer bis zur Ausbildung eines kritischen H/U-Verhältnisses

Parameter 15: Auffüllung mit Korrosionsprodukten

Parameter 16: Aufweitung der Brennstäbe.

Abb. 2.32 zeigt die zeitlichen Verläufe der rangbasierten Sensitivitäten der Parameter für Szenario 2a und Konsequenz 1.

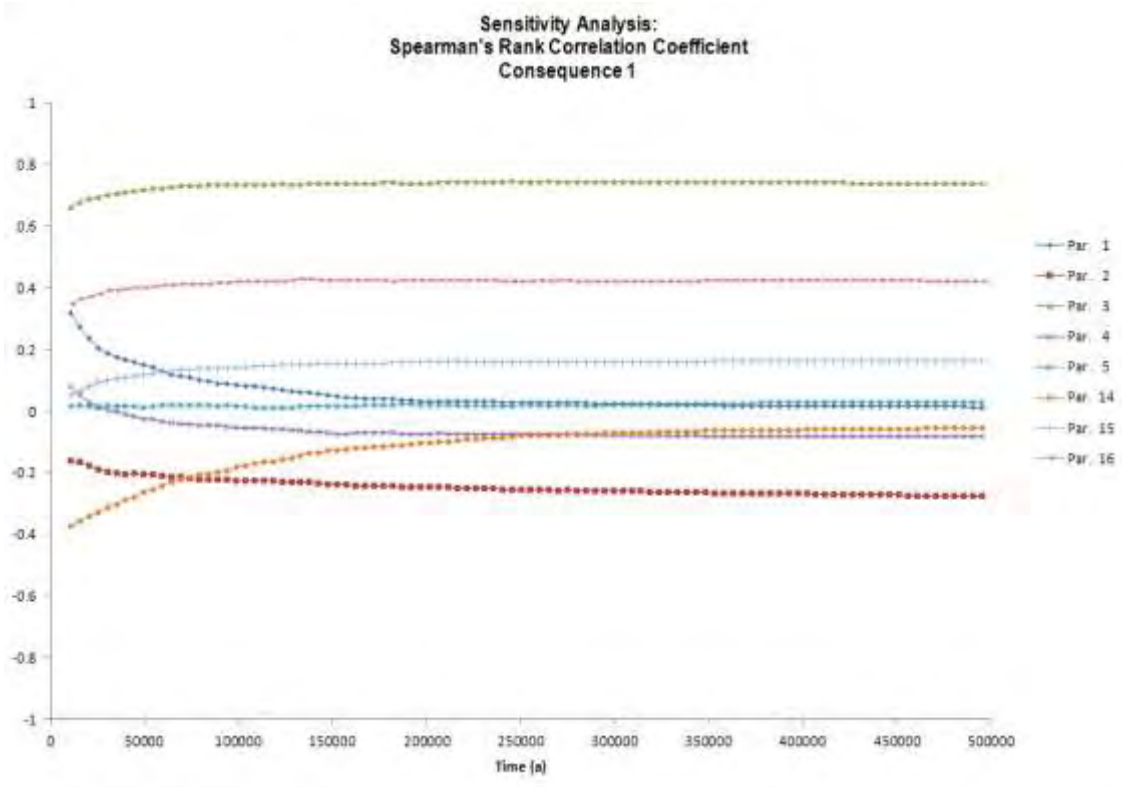


Abb. 2.32 Zeitabhängige Sensitivität (rangbasiert) der 8 Parameter für Konsequenz 1 bei Szenario 2a

Nach **Abb. 2.32** lassen sich die Parameter 1, 2, 3, 14 und 16 als maßgebliche Parameter in Szenario 1b und Konsequenz 1 definieren (Definition; $-0,2 > \text{Parameterwert} > 0,2$). Das Sensitivitätsverhalten dieser fünf maßgeblichen Parameter in Szenario 2a und Konsequenz 1 kann wie folgt beschrieben werden:

Parameter 1 (*Korrosionsrate*) beginnt mit einem Wert von ca. 0,3, fällt dann innerhalb von etwa 200 000 Jahren auf 0 ab und bleibt dabei.

Parameter 2 (*keine Kompaktierung*) startet bei ca. -0,18, fällt nach ungefähr 250 000 Jahren auf ca. -0,28 ab und behält näherungsweise diesen Wert bei.

Parameter 3 (*kein Selbstverschluss*) – der zu jedem Zeitpunkt dominante Parameter – beginnt mit ca. 0,65, wächst nach ungefähr 150 000 Jahren bis auf etwa 0,75 an und behält diesen Wert bei.

Parameter 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) startet mit einem negativen Wert (ca. -0,4) der nach ca. 400 000 Jahren bis auf näherungsweise -0,05 ansteigt.

Parameter 16 (*Aufweitung der Brennstäbe*) beginnt mit einem Wert von ca. 0,35, der nach etwa 100 000 Jahren bis auf näherungsweise 0,4 zunimmt.

Die verbleibenden Parameter sind im Vergleich dazu von untergeordneter Bedeutung.

Die Abbildungen **Abb. 2.33**, **Abb. 2.34** und **Abb. 2.35** zeigen die Ergebnisse aus der Sensitivitätsanalyse für Konsequenz 2 (Wahrscheinlichkeiten bezogen auf Zeitintervalle mit 5000 Jahren Dauer) für Szenario 2a.

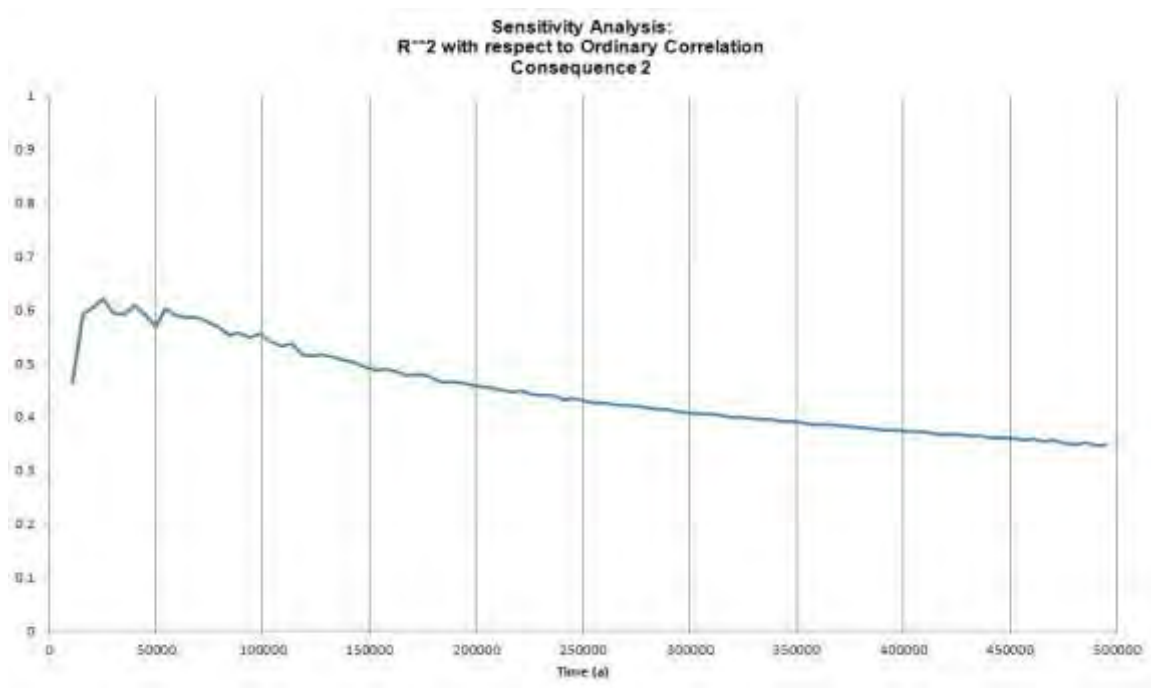


Abb. 2.33 Zeitabhängiger Verlauf des R²-Wertes für Konsequenz 2 im Szenario 2a (auf der Basis der metrischen Werte)

Nach **Abb. 2.33** startet das R² –Anpassungsmaß für die metrischen Werte bei etwa 0,35, nimmt dann bis auf ca. 0,6 zu, sinkt dann kontinuierlich bis zu einem Wert von 0,35 (nach 500 000 Jahren) ab und erscheint in der zeitlichen Abfolge nicht hinreichend stabil für eine Sensitivitätsanalyse. Aus diesem Grund wird für Konsequenz 2 die Spearmansche Rangkorrelation als Sensitivitätsmaß verwendet, deren R²–Anpassungsmaß – wie **Abb. 2.34** zeigt – über den gesamten zeitlichen Verlauf den Anforderungen genügt.

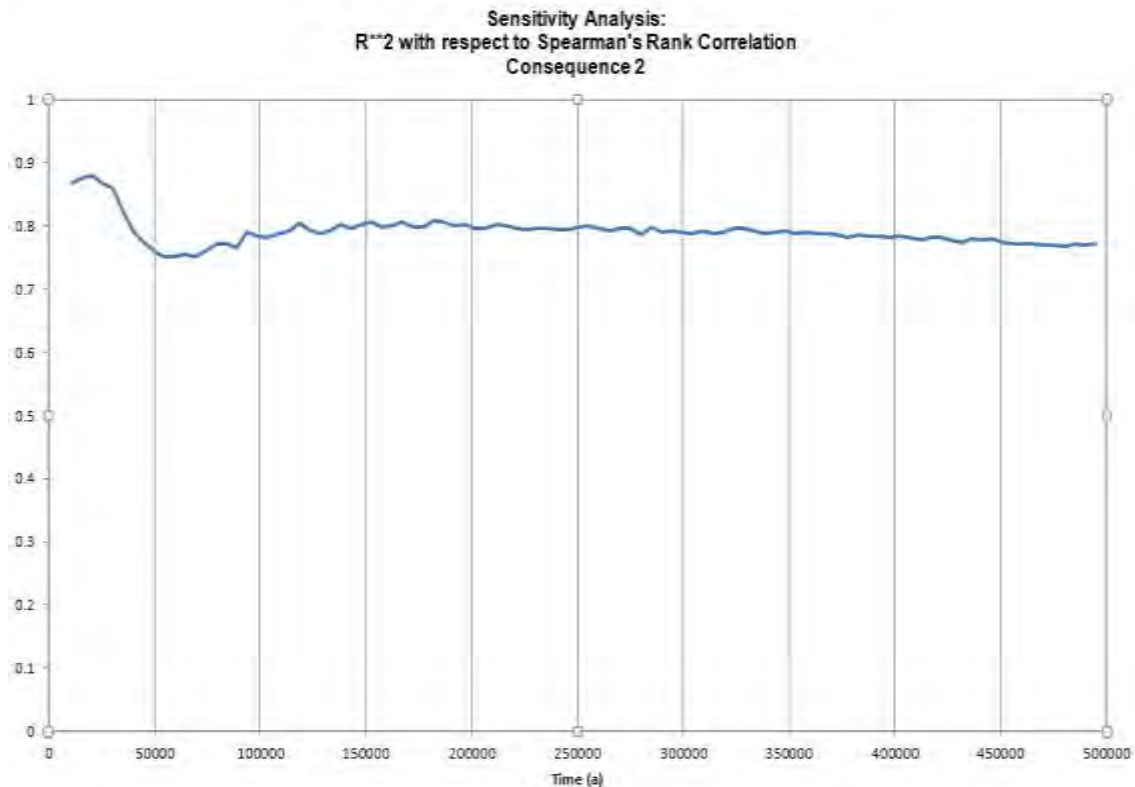


Abb. 2.34 Zeitabhängiger Verlauf des rangbasierten R^2 -Anpassungsmaßes für Konsequenz 2 im Szenario 2a

Wie aus **Abb. 2.34** ersichtlich ist, weist das Spearmansche R^2 -Anpassungsmaß über den gesamten Zeitbereich relativ hohe Werte bei einem durchweg stabilen Verlauf auf und ist für eine Sensitivitätsanalyse geeignet.

Abb. 2.35 gibt für Szenario 2a und Konsequenz 2 (Wahrscheinlichkeiten für eine Einteilung in Zeitintervalle von 5000 Jahren) den Verlauf der Sensitivitäten der 8 Parameter über einen Zeitbereich von 500 000 Jahren wieder. Die Ergebnisse basieren dabei auf der Spearmanschen Rangkorrelation.

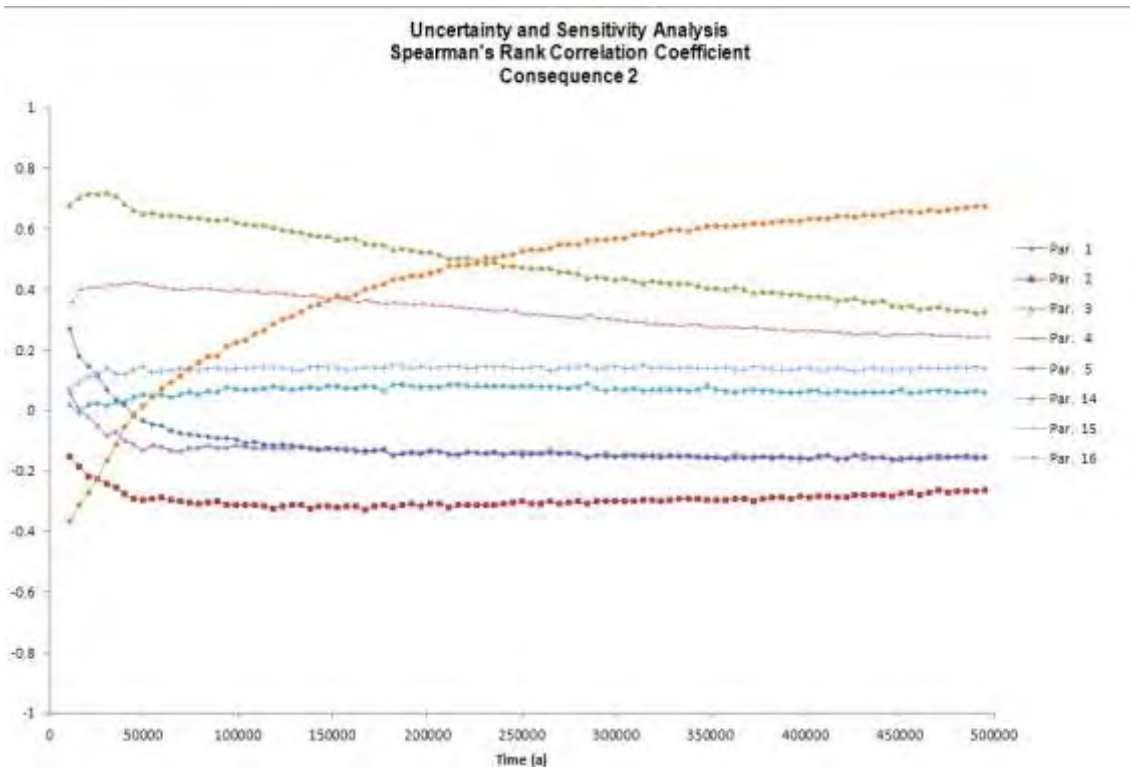


Abb. 2.35 Zeitabhängige Sensitivitäten (rangbasiert) der 8 Parameter für Konsequenz 2 des Szenarios 2a

Aus **Abb. 2.35** können die wichtigsten Parameter für die Sensitivitätsanalyse von Konsequenz 2 in Szenario 2a wie folgt identifiziert werden:

Parameter 1 (*Korrosionsrate*): Startet mit einem Wert von ca. 0,3 und nimmt stetig ab, bis es nach etwa 40 000 Jahren zu einem Vorzeichenwechsel kommt und der Wert nach 500 000 Jahren auf ca. -0,2 abfällt.

Parameter 2 (*keine Kompaktierung*): Beginnt mit einem negativen Korrelationswert von ca. -0,15, sinkt nach ca. 50 000 Jahren bis auf ca. -0,3 ab und bleibt in diesem Wertebereich.

Parameter 3 (*kein Selbstverschluss*): Beginnt mit einem Wert von ca. 0,7, steigt an und erreicht nach ca. 50 000 Jahren ungefähr einen Wert von 0,95, hält kurzzeitig diesen Wert und fällt dann langsam bis zu einem Wert von ca. 0,25 nach 500 000 Jahren ab. Parameter 3 ist auch hier der dominante Parameter.

Parameter 14 (*Zeitdauer bis zu Ausbildung eines kritischen H/U-Verhältnisses*): Startet mit einem negativen Korrelationswert von ca. -0,4, überschreitet nach ca. 25 000 Jahren die Nulllinie und erreicht nach 500 000 Jahren einen Wert von ca. 0,8.

Der Verlauf von Parameter 14 verdeutlicht, wie vorsichtig die Informationen der rangbasierten Maße zu deuten sind. Bewertet man ausschließlich **Abb. 2.35**, so entsteht der Eindruck als würde Parameter 14 mit zunehmender Zeit zu dem Parameter mit dem meisten Einfluss auf die Ergebnisunsicherheiten werden. **Abb. 2.32** zeigt jedoch, dass die Unsicherheiten der Ergebnisse im Zeitraum von 250 000 bis 500 000 Jahren im Vergleich zu den Unsicherheiten die zu Beginn vorliegen, vernachlässigbar sind. Berücksichtigt man dies, dann muss der scheinbar große Einfluss des Parameters 14 auf die Ergebnisunsicherheiten im Zeitraum zwischen 250 000 und 300 000 Jahren in Relation zu den verhältnismäßig kleinen Unsicherheiten in diesem Zeitabschnitt bewertet werden.

Parameter 16 (*Aufweitung der Brennstäbe*) beginnt mit einem Wert von ca. 0,35, der nach etwa 50 000 Jahren bis auf näherungsweise 0,4 zunimmt und ab dann kontinuierlich bis zu einem Wert von ca. 0,25 nach 500 000 Jahren abnimmt.

Die verbleibenden Parameter sind im Vergleich dazu von untergeordneter Bedeutung.

2.4.2.4.3 Zusammenfassung Szenario 2a

Die zeitlichen Verläufe der statistischen Kenngrößen für die Wahrscheinlichkeit eines Eintretens von Kritikalität im Szenario 2a weisen teilweise deutliche Unsicherheiten im Hinblick auf die Stabilität einer Langzeitabschätzung auf. So liegt nach **Abb. 2.27** beispielsweise die (95%,95%)-Toleranzgrenze für die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität nach 500 000 Jahren bei ca. $7.8E-3$. Das 95%-Quantil der Modellrechnungen ist nach 500 000 Jahren um einen Faktor von ca. 2 geringer und sein Wert beträgt rund $3.8E-3$. Dieser Faktor weist auf die Unsicherheiten hin, die bei der Schätzung des 95%-Quantils nach einem Zeitraum von 500 000 Jahren bestehen.

Während die jeweiligen Maximalwerte für die beiden Referenzläufe (Szenario 2a und altes Szenario 2 /GMA 09/), den Median und den Mittelwert nach etwa 350 000 Jahren erreicht werden und danach konstant bleiben und auch die Werte des 95%-Quantils nach 400 000 Jahren keine wesentlichen Zuwächse mehr erhalten, haben die Kurven

der oberen zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenze und der oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze auch nach 500 000 Jahren ihre Sättigung noch nicht erreicht. D.h. die Unsicherheiten bzgl. der Schätzung des 95%-Quantils nehmen mit Zeiträumen > 500 000 Jahren weiter zu.

Die für Konsequenz 1 und Szenario 2a nach 500 000 Jahren ermittelten Maximalwerte für Kenngrößen und Referenzläufe sind im Folgenden nochmals zusammengestellt:

- Median: $3,8E-4$,
- Referenzwert Szenario 2a: $9,6E-4$,
- Mittelwert: $9,9E-4$,
- Referenzwert Szenario 2 (alt): $1,1E-3$,
- 95%-Quantil: $3,8E-3$ und
- obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze: $6,0E-3$ und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $7,9E-3$.

Die maximalen Wahrscheinlichkeiten und die Zeitintervalle, in denen diese bei Konsequenz 2 auftreten:

- Median: $2,33E-5$ im Zeitintervall (0, 5000) Jahre,
- Referenzwert Szenario 2a: $4,56E-5$ im Zeitintervall (25 000, 30 000) Jahre,
- Mittelwert: $6,90E-5$ im Zeitintervall (0, 5000) Jahre ,
- Referenzwert Szenario 2 (alt): $4,40E-5$ im Zeitintervall (30 000, 35 000) Jahre,
- 95%-Quantil: $3,18E-4$ im Zeitintervall (5000, 10 000) Jahre und
- Obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $7,58E-4$ im Zeitintervall (0, 5000) Jahre.

Bei der Sensitivitätsanalyse wurden die Parameter 1 (*Korrosionsrate*), 2 (*Keine Kompaktierung*), 3 (*Kein Selbstverschluss*), 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) und 16 (*Aufweitung der Brennstäbe*) als relevante Parameter sowohl für Konsequenz 1 als auch für Konsequenz 2 identifiziert, wobei Parameter 3 in beiden Fällen dominiert (vgl. **Abb. 2.32** und **Abb. 2.35**). Beide Sensitivitätsanalysen von Konsequenz 1 und Konsequenz 2 basieren nicht mehr auf metrischen sondern auf rangbasierten Sensitivitätsmaßen (hier: Spearmansche Rangkorrelationen) (vgl. **Abb. 2.30**, **Abb. 2.31**, **Abb. 2.33** und **Abb. 2.34**).

2.4.2.5 Szenario 2b

In diesem Szenario wird angenommen, dass der Behälter und die Einbauten der Brennstabkockille BSK-3 vollständig zu nicht stöchiometrischem porösem $\text{Fe}(\text{OH})_3$ korrodiert sind, wobei durch Einlagerung von Wasser in die Poren ein reaktives Moderationsverhältnis erreicht wird. Das durch Korrosionsprozesse und die dabei entstehenden Korrosionsprodukte aufgeweitete Brennstabgitter bleibt bei diesen Untersuchungen intakt. Die 708 Brennstäbe (Beladung mit unbestrahltem Brennstoff) verteilen sich gleichmäßig auf die deutlich vergrößerte Querschnittsfläche und der verbleibende Leerraum wird vollständig mit $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ausgefüllt. Die Gitterschrittweite steigt damit von vorher 1,181 cm auf 1,539 cm.

2.4.2.5.1 Eintrittswahrscheinlichkeit von Szenario 2b

Abb. 2.36 zeigt die Variation der kumulativen Verteilungen zu den Kritikalitätswahrscheinlichkeiten, die sich aus den Unsicherheiten der Eingabeparameter für das Szenario 2b ergeben haben. Die Unsicherheitsanalyse wurde mit einem Stichprobenumfang von 100 Rechenläufen durchgeführt.

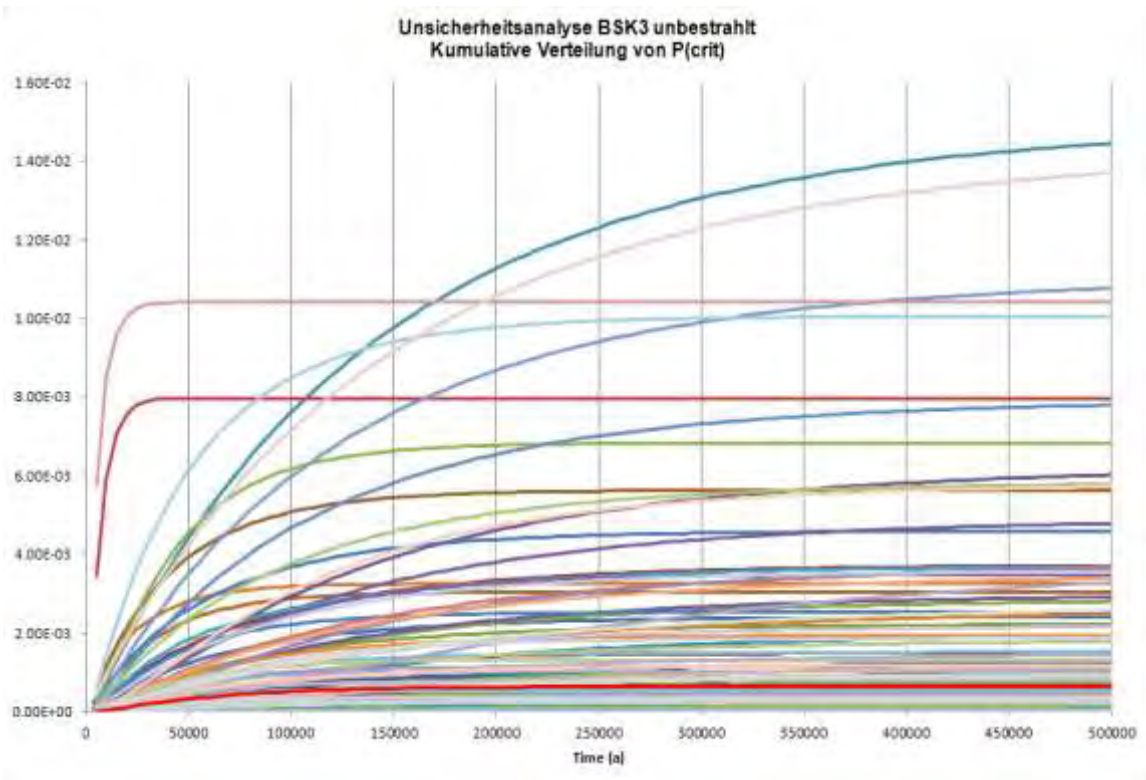


Abb. 2.36 Unsicherheit der kumulierten Verteilungen (Konsequenz 1) von P(crit) im Szenario 2b (Brennstabkocille BSK-3 mit unbestrahltem Spaltstoff und Stabgitter-Aufweitung)

Aus **Abb. 2.36** ist ersichtlich, dass im Fall der Brennstabkocille BSK-3 mit Stabgitter-Aufweitung und einer Beladung mit unbestrahltem Brennstoff bei der überwiegenden Anzahl (ca. 88%) der kumulierten Verteilungen die Wahrscheinlichkeit für das Entstehen einer Kritikalität im Endlager innerhalb von 500 000 Jahren $< 5.E-3$ ist. Die hellrote Linie ist die Kurve auf der Basis der Referenzwerte.

In **Abb. 2.37** sind die zeitlichen Verläufe von Median, Mittelwert, 95%-Quantil und die der Referenzläufe des Szenarios 2b (alt und neu) sowie der oberen zweiseitigen (90%,90%)- und einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen dargestellt.

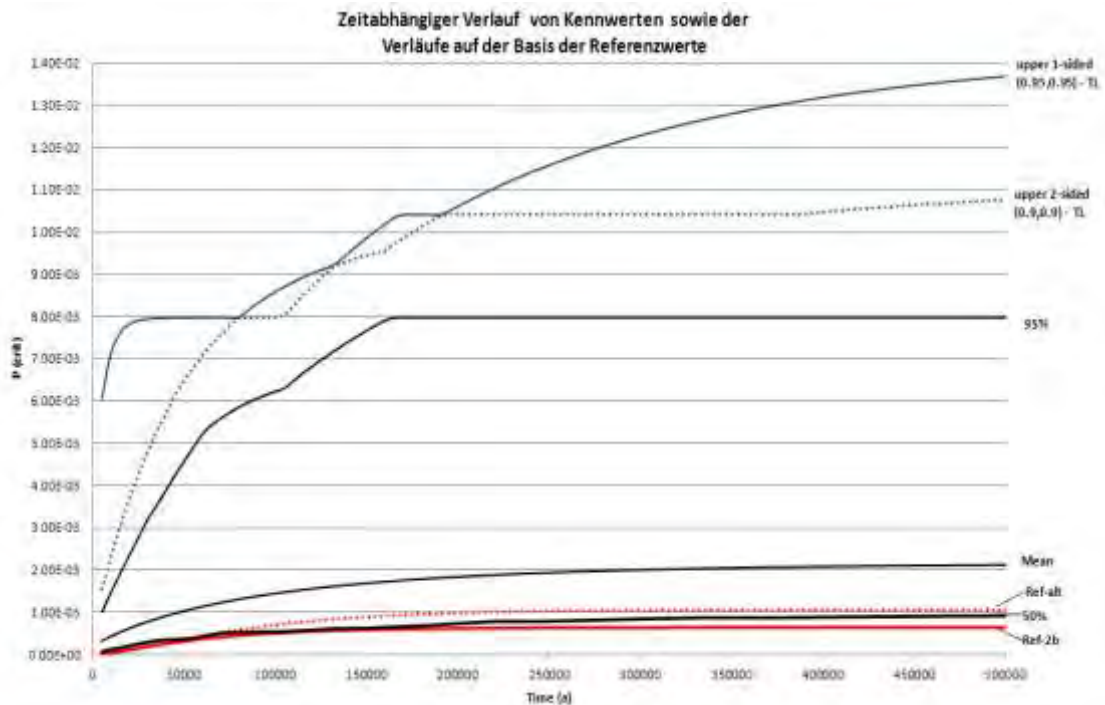


Abb. 2.37 Vergleich der Kennwertverläufe zu den zeitabhängigen Verläufen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen für Konsequenz 1 von Szenario 2b

Nach **Abb. 2.37** liegt die (95%,95%)-Toleranzgrenze für die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität nach 500 000 Jahren bei ca. $1.4E-2$. Somit hat in diesem Modell das 95%-Quantil für das Auftreten von Kritikalität nach 500 000 Jahren mit einer Wahrscheinlichkeit von 95% einen Wert von $1,4E-2$. Der Wert des 95%-Quantils beläuft sich nach 500 000 Jahren auf etwa $8.0E-3$ und ist somit um näherungsweise einen Faktor 1,7 kleiner. Dieser Faktor stellt ein Maß für die Unsicherheiten bei der Bestimmung des 95%-Quantils über ein Zeitintervall von 500 000 Jahren dar. Die Verläufe mit den niedrigsten Werten – sie erreichen ihren Sättigungsbereich nach spätestens 350 000 Jahren – sind dem Referenzlauf für Szenario 2b, dem Median und dem Referenzlauf des alten Szenarios zuzuordnen. Der nur geringfügig größere Mittelwert ist auch nach 500 000 Jahren noch nicht in der Sättigung. Mit deutlich höheren Werten folgen 95%-Quantil, obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze und obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze. Aber während das 95%-Quantil bereits nach knapp 200 000 Jahren seinen Sättigungsbereich erreicht hat, steigen die Werte der (90%,90%)-Toleranzgrenze und der oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze auch nach 500 000 Jahren noch an.

Die Kenngrößen und Referenzläufe erreichen nach 500 000 Jahren die folgenden Werte:

- Referenzwerte Szenario 2b (neu): $6,2E-4$,
- Referenzwerte Szenario 2 (alt): $1,1E-3$,
- Median: $9,1E-4$,
- Mittelwert: $2,2E-3$,
- 95%-Quantil: $8,0E-3$,
- obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze: $1,07E-2$ und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: $1,36E-2$.

In **Abb. 2.38** werden die Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ bezogen auf Zeitintervalle mit einer Dauer von 5000 Jahren für die mit unbestrahltem Spaltstoff beladene Brennstabkokille BSK-3 dargestellt. Die Kurven in **Abb. 2.38** zeigen, wie groß in bestimmten Zeitintervallen (5000 Jahre) die Wahrscheinlichkeiten einer Kritikalität für BSK-3-Brennstabkokillen mit Stabgitter-Aufweitung und einer Beladung aus nicht abgebranntem Brennstoff (Szenario 2b) sind. Aus den Kurven lässt sich jeweils ablesen, in welchen Zeitintervallen die größten Wahrscheinlichkeiten auftreten.

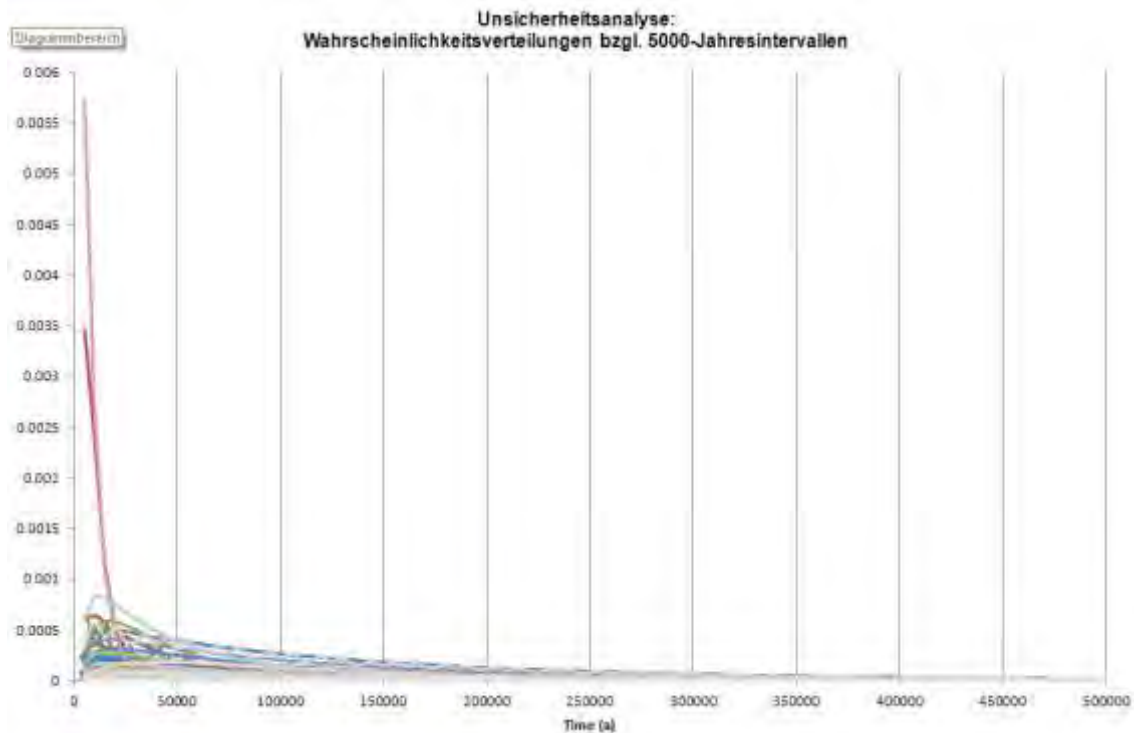


Abb. 2.38 Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von $P(\text{crit})$ für Szenario 2b und Konsequenz 2

In **Abb. 2.38** weisen ein Rechenlauf und der Referenzlauf (hellrote Kurve) zu Beginn aus bislang unbekannter Ursache sehr hohe Werte auf.

Abb. 2.39 zeigt für Szenario 2b den zeitlichen Verlauf verschiedener Kennwerte bezogen auf die Wahrscheinlichkeiten in den jeweiligen 5000-Jahresintervallen (Konsequenz 2). Die Kennwerte sind Median, Mittelwert, 95%-Quantil und die obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze. Außerdem ist in **Abb. 2.39** der zeitliche Verlauf für die Wahrscheinlichkeiten, die sich auf der Basis der Referenzwerte der Eingabegrößen von Szenario 2b (neu) ergeben haben, in den jeweiligen 5000-Jahresintervallen dargestellt.

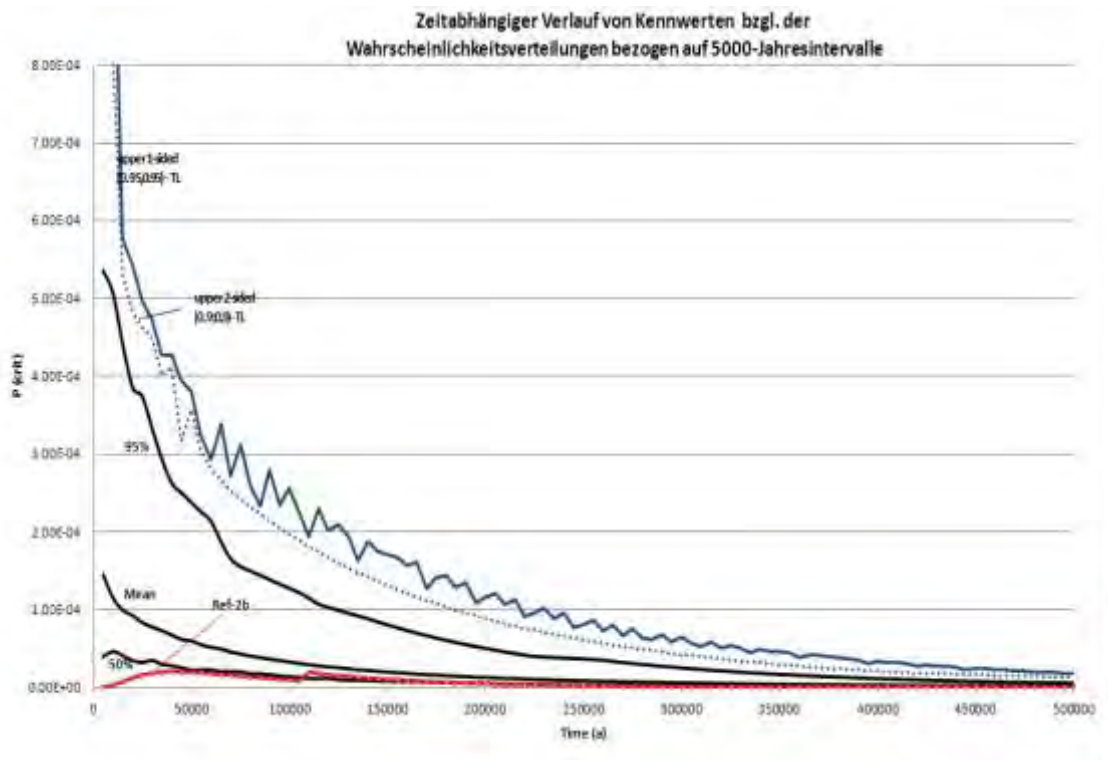


Abb. 2.39 Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten der 100 Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus der Unsicherheitsanalyse für Szenario 2b und Konsequenz 2

Aus **Abb. 2.39** ist ersichtlich, dass sich die zeitlichen Verläufe der einzelnen Kennwerte teilweise erheblich unterscheiden. Durchweg die höchsten Werte erreichen die oberen einseitigen (95%,95%)- und zweiseitigen (90%,90%)-Toleranzgrenzen, gefolgt vom 95%-Quantil, dem Mittelwert, dem Median und dem Referenzlauf für Szenario 2b. Der Verlauf des Referenzlaufs 2 (alt) /GMA 09/ ist nicht dargestellt.

In **Tab. 2.21** sind für Szenario 2b die numerische Werte von Median, Mittelwert, 95%-Quantilen und einseitiger (95%,95%)-Toleranzgrenze sowie den Referenzläufen (2 alt und 2b neu) zu den Wahrscheinlichkeiten für Konsequenz 2 im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre aufgelistet.

Tab. 2.21 Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 2b

Zeitintervall (in Jahren)	Wahrscheinlichkeit			Mean	95%	Upper 1-sided (95%,95%)-TL
	Referenz	Referenz-alt	50%			
0 - 5000	2.33E-05	9.82E-06	3.93E-05	1.45E-04	5.36E-04	2.29E-03
5000 - 10000	5.46E-05	2.45E-05	4.61E-05	1.15E-04	5.07E-04	1.04E-03
10000 - 15000	7.00E-05	3.35E-05	4.07E-05	9.92E-05	4.41E-04	5.76E-04
15000 - 20000	7.62E-05	3.89E-05	3.43E-05	9.24E-05	3.86E-04	5.43E-04
20000 - 25000	7.71E-05	4.20E-05	3.20E-05	8.32E-05	3.74E-04	4.98E-04
25000 - 30000	7.51E-05	4.35E-05	3.45E-05	7.75E-05	3.33E-04	4.72E-04
30000 - 35000	7.16E-05	4.40E-05	2.96E-05	7.28E-05	2.93E-04	4.28E-04
35000 - 40000	6.73E-05	4.38E-05	2.77E-05	6.71E-05	2.63E-04	4.27E-04
40000 - 45000	6.28E-05	4.31E-05	2.51E-05	6.15E-05	2.50E-04	3.95E-04
45000 - 50000	5.83E-05	4.21E-05	2.21E-05	5.97E-05	2.37E-04	3.80E-04
50000 - 55000	5.40E-05	4.08E-05	2.23E-05	5.47E-05	2.26E-04	3.24E-04
55000 - 60000	4.98E-05	3.93E-05	2.25E-05	5.13E-05	2.14E-04	2.93E-04
60000 - 65000	4.59E-05	3.78E-05	2.01E-05	4.96E-05	1.88E-04	3.38E-04
65000 - 70000	4.22E-05	3.61E-05	1.99E-05	4.53E-05	1.65E-04	2.71E-04
70000 - 75000	3.88E-05	3.45E-05	1.99E-05	4.30E-05	1.55E-04	3.13E-04
75000 - 80000	3.56E-05	3.28E-05	1.78E-05	4.03E-05	1.50E-04	2.61E-04
80000 - 85000	3.27E-05	3.11E-05	1.72E-05	3.81E-05	1.44E-04	2.33E-04
85000 - 90000	2.99E-05	2.95E-05	1.64E-05	3.64E-05	1.38E-04	2.79E-04
90000 - 95000	2.74E-05	2.79E-05	1.46E-05	3.42E-05	1.33E-04	2.34E-04
95000 - 100000	2.51E-05	2.63E-05	1.38E-05	3.28E-05	1.27E-04	2.55E-04

Aus **Tab. 2.21** lassen sich die folgenden Schlüsse für die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität ziehen:

Für die Kennwerte werden die maximalen Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalität im Zeitintervall zwischen 0 und 5000 erreicht (Ausnahme: Median, 5000-10 000 Jahre). Die jeweiligen Maximalwerte betragen dabei 4.61E-5 für den Median, 1.45E-4 für den Mittelwert, 5.36E-4 für die 95%-Quantile und 2.29E-3 für die obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze. Für den Referenzfall des Szenarios 2b weist die Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität ihr Maximum mit 7.71E-5 im Zeitintervall zwischen 20 000 und 25 000 Jahren auf. Der entsprechende Maximalwert für den Referenzfall 2 (alt) liegt im Intervall zwischen 30 000 und 35 000 Jahren und ist mit 4.40E-5 wesentlich kleiner als der für Szenario 2b (neu).

In **Abb. 2.39** fällt wie in **Abb. 2.29** bei Szenario 2a auf, dass sämtliche Kennwerte für Konsequenz 2 ihre Maximalwerte zu wesentlich früheren Zeiten als in den Szenarien 1a, 1b und 1c (vgl. **Abb. 2.22**, **Tab. 2.17**, **Abb. 2.23**, **Tab. 2.18**, und **Abb. 2.25**) errei-

chen. Bei den Referenzläufen ist dieses Phänomen nicht in dieser Ausprägung erkennbar.

2.4.2.5.2 Sensitivitätsanalyse zu Szenario 2b

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen zu Szenario 2b stimmen weitgehend mit denen zu Szenario 2a überein. Bei beiden Szenarien wurden sowohl für die Sensitivitätsanalyse zu Konsequenz 1 als auch zu der für Konsequenz 2 das Spearman'sche R^2 -Anpassungsmaß als Basis herangezogen. Bei beiden Szenarien wurden die gleichen relevanten Parameter identifiziert, die auch in ihren zeitlichen Verläufen durchweg nur sehr geringe Abweichungen voneinander aufwiesen. Deshalb wird hier auf eine explizite Darstellung der entsprechenden Abbildungen und Texte zu Szenario 2b verzichtet und stattdessen auf die Sensitivitätsanalysen zu Szenario 2a (Kapitel 2.4.2.4.2) verwiesen. In der Zusammenfassung zu Szenario 2b (Kapitel 2.4.2.5.3) findet sich ein kurzer Überblick über die wichtigsten Resultate der Sensitivitätsanalyse zu Szenario 2b.

2.4.2.5.3 Zusammenfassung Szenario 2b

Die zeitlichen Verläufe der statistischen Kenngrößen für die Wahrscheinlichkeit eines Eintretens von Kritikalität im Szenario 2b unterscheiden sich teilweise signifikant voneinander. Geordnet nach steigenden Werten der Verläufe folgen auf den Referenzlauf für Szenario 2b, der Median, der Referenzlauf des alten Szenarios 2 und der Mittelwert. Mit deutlichem Abstand bilden 95%-Quantil, obere zweiseitiger (90%,90%)-Toleranzgrenze und obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze den Abschluss nach oben (vgl. **Abb. 2.37**). Dies gilt prinzipiell auch für Konsequenz 2. Allerdings blieb in diesem Fall der Referenzwert zu Szenario 2 (alt) aus /GMA 09/ unberücksichtigt (vgl. **Abb. 2.39**).

Die für Konsequenz 1 und Szenario 2b nach 500 000 Jahren ermittelten Maximalwerte für Kenngrößen und Referenzläufe sind im Folgenden nochmals zusammengefasst:

- Referenzwerte Szenario 2b (neu): 6,2E-4,
- Referenzwerte Szenario 2 (alt): 1,1E-3,
- Median: 9,1E-4,
- Mittelwert: 2,2E-3,

- 95%-Quantil: 8,0E-3,
- obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze: 1,07E-2 und
- obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 1,36E-2.

Die maximalen Wahrscheinlichkeiten und die Zeitintervalle, in denen diese bei Konsequenz 2 auftreten sind im Folgenden nochmals zusammengestellt:

- Median: 4,61E-5 im Zeitintervall (5000, 10 000) Jahre,
- Referenzwert Szenario 2a: 7.71E-5 im Zeitintervall (20 000, 25 000) Jahre,
- Mittelwert: 1,45E-4 im Zeitintervall (0, 5000) Jahre ,
- Referenzwert Szenario 2 (alt): 4,40E-5 im Zeitintervall (30 000, 35 000) Jahre,
- 95%-Quantil: 5,36E-4 im Zeitintervall (0, 5000) Jahre und
- Obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze: 2,29E-3 im Zeitintervall (0, 5000) Jahre.

Bei der Sensitivitätsanalyse wurden die Parameter 1 (*Korrosionsrate*), 2 (*Keine Kompaktierung*), 3 (*Kein Selbstverschluss*), 14 (*Zeitdauer zu der sich ein kritisches Moderationsverhältnis einstellt*) und 16 (*Aufweitung der Brennstäbe*) als relevante Parameter sowohl für Konsequenz 1 als auch für Konsequenz 2 identifiziert, wobei Parameter 3 in beiden Fällen dominiert. Beide Sensitivitätsanalysen von Konsequenz 1 und Konsequenz 2 basieren nicht mehr auf metrischen sondern auf rangbasierten Sensitivitätsmaßen (hier: Spearmansche Rangkorrelationen).

2.4.2.6 Vergleich der Szenarien 1a bis 2b

In diesem Unterkapitel soll ein Vergleich der probabilistischen Analysen der betrachteten fünf Szenarien durchgeführt werden. Dazu werden für alle Szenarien die Ergebnisse dieser Analysen betrachtet. Dies beinhaltet eine Gegenüberstellung der Eintrittswahrscheinlichkeiten für eine Kritikalitätsexkursion einschließlich der zugehörigen Kenngrößen und der Resultate der Sensitivitätsanalysen.

In **Tab. 2.22** sind die kumulierten Eintrittswahrscheinlichkeiten für alle fünf betrachteten Szenarien zum Zeitpunkt $T = 500\,000$ Jahre zusammengefasst. Aufgelistet sind dabei sowohl die alten /GMA 09/ und neuen Referenzwerte als auch die sich aus der Auswertung von 100 Rechenläufe ergebenden Kennwerte.

Tab. 2.22 Referenz- und Kennwerte aller Szenarien für Konsequenz 1 nach 500 000 Jahren

Referenzwert / Kennwert	Kumulierte Wahrscheinlichkeiten (Konsequenz 1) nach 500 000 Jahren				
	Szenario 1a	Szenario 1b	Szenario 1c	Szenario 2a	Szenario 2b
Referenzwerte neu	1,37E-04	6,35E-04	9,45E-04	9,60E-04	6,20E-04
Referenzwerte alt	5,04E-04	5,04E-04	5,04E-04	1,10E-03	1,10E-03
Median	4,70E-05	5,90E-04	2,10E-03	3,80E-04	9,10E-04
Mittelwert	1,71E-04	1,65E-03	5,31E-03	9,90E-04	2,20E-03
95%-Quantil	7,34E-04	7,05E-03	2,07E-02	3,80E-03	8,00E-03
obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze	1,15E-03	9,10E-03	2,50E-02	6,00E-03	1,07E-02
obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze	1,19E-03	9,24E-03	3,11E-02	7,90E-03	1,36E-02

Aus **Tab. 2.22** ist die große Bandbreite der kumulierten Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalitätsexkursion innerhalb von 500 000 Jahren bei allen Szenarien ersichtlich. Sowohl die Werte aus den neuen und alten Referenzläufen als auch die unterschiedlichen Kennwerte weichen teilweise erheblich voneinander ab. Die große Fluktuation bei den Kennwerten drückt im Wesentlichen die Unsicherheit in den Modellergebnissen aus, die sich durch Fortpflanzung der Unsicherheiten in den Modellparametern ergeben.

Betrachtet man nur die kumulierten Wahrscheinlichkeiten aus den neuen Referenzläufen, dann erhält man für die einzelnen Szenarien für das Eintreten einer Kritikalitätsexkursion die folgende Reihenfolge: Am wahrscheinlichsten ist demzufolge eine Kritikalitätsexkursion für Szenario 2a. Mit abnehmenden Wahrscheinlichkeiten folgen Szenario 1c, Szenario 1b, Szenario 2b und Szenario 1a. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit für

eine Kritikalitätsexkursion bei Szenario 2a um einen Faktor 7,0 höher als bei Szenario 1a.

Auch für die Kennwerte (vom Median bis zur oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenze) lässt sich im Hinblick auf die Eintrittswahrscheinlichkeit für eine Kritikalitätsexkursion nach 500 000 Jahren eine eindeutige Reihenfolge definieren. Ordnet man für irgendeinen bestimmten Kennwert die Szenarien nach den in **Tab. 2.21** angegebenen Wahrscheinlichkeiten nach absteigender Größe, dann erhält man die Reihenfolge: Szenario 1c, Szenario 2b, Szenario 1b, Szenario 2a und Szenario 1a. Diese Reihenfolge ergibt sich für jeden der Kennwerte aus **Tab. 2.22**. Das Verhältnis der kumulierten Wahrscheinlichkeiten zwischen dem Szenario mit der größten Eintrittswahrscheinlichkeit (Szenario 1c) und dem mit der geringsten (Szenario 1a) ist von Kennwert zu Kennwert unterschiedlich und bewegt sich im Intervall von 21,7 für die obere zweiseitige (90%,90%)-Toleranzgrenze bis hin zu 44,7 für den Median.

Die teilweise erheblichen Diskrepanzen zwischen den Ergebnissen der aktualisierten Referenzläufe und der Kennwerte lassen sich wie folgt erklären: Bei den Referenzläufen wird nur ein einziger Rechenlauf mit dem Referenzdatensatz für die Parameterwerte betrachtet. Im Gegensatz dazu werden bei den Kennwerten die Resultate von 100 Läufen mit Parameterdaten aus den jeweiligen Unsicherheitsintervallen herangezogen. Insofern entsprechen die Kennwertresultate den Modellvorstellungen der einzelnen Szenarien besser als die Ergebnisse der Referenzläufe.

Zur Illustration dieses Sachverhalts werden in **Abb. 2.40** die zeitlichen Verläufe der kumulierten Wahrscheinlichkeiten für eine Kritikalitätsexkursion für die Mittelwerte und Referenzläufe der Szenarien 1a bis 1c sowie für den Referenzlauf des alten Szenarios 1 dargestellt. Mit den Szenarien 1a und 1c werden die Szenarien mit der niedrigsten bzw. größten Kritikalitätswahrscheinlichkeit der fünf betrachteten Szenarien berücksichtigt.

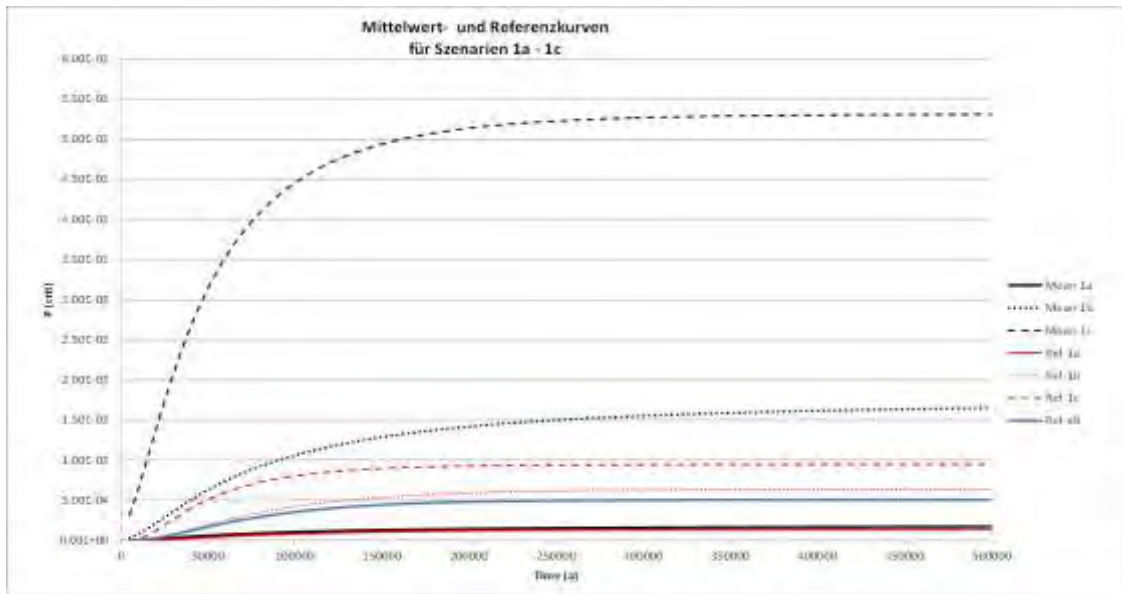


Abb. 2.40 Mittelwert- und Referenzkurven für Konsequenz 1 für die Szenarien 1a – 1c

Abb. 2.40 verdeutlicht nochmals die Diskrepanzen zwischen den Resultaten von Referenzläufen und Kennwerten (hier: Mittelwerte). Während bei Szenario 1a – dem Szenario mit der geringsten Wahrscheinlichkeit für eine Kritikalitätsexkursion – die Kurven für Referenzlauf und Mittelwert nur minimale Abweichungen aufweisen, wächst dieser Abstand über Szenario 1b bis Szenario 1c deutlich zu Gunsten des Mittelwerts an. Der Referenzlauf für das alte Szenario 1 liegt zwischen den neuen Referenzläufen für die Szenarien 1a und 1b.

Neben den kumulierten Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Kritikalitätsexkursion sind auch die differentiellen zeitabhängigen Wahrscheinlichkeiten von Interesse, weil sie angeben, in welchen Zeitabschnitten mit diesbezüglich erhöhten Wahrscheinlichkeiten zu rechnen ist. Aus diesem Grund werden in der Konsequenz 2 die auf Zeitintervalle (Dauer hier: 5000 Jahre) bezogenen Wahrscheinlichkeiten für Kritikalitätsexkursionen betrachtet.

Die Abbildungen **Abb. 2.41** und **Abb. 2.42** zeigen für die Szenarien 1a, 1b und 1c die Wahrscheinlichkeiten für eine Kritikalitätsexkursion in 5000-Jahresintervallen für die neuen Referenzläufe, die Mittelwerte und den alten Referenzlauf für Szenario 1 (**Abb. 2.41**) sowie für die 95%-Quantile und oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen (**Abb. 2.42**).

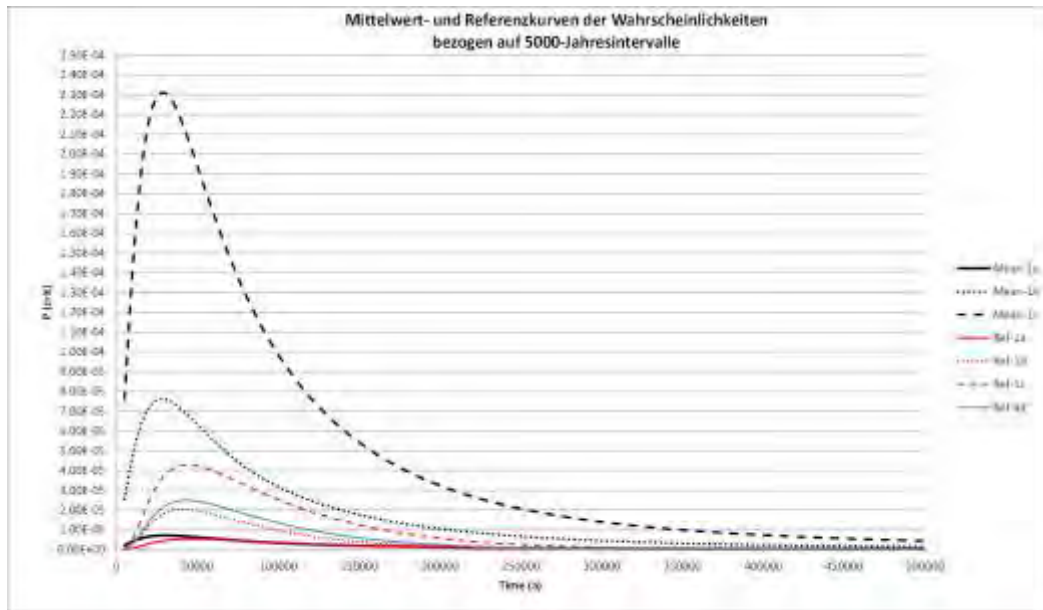


Abb. 2.41 Vergleich der Mittelwert- und Referenzkurven für Konsequenz 2 für die Szenarien 1a – 1c

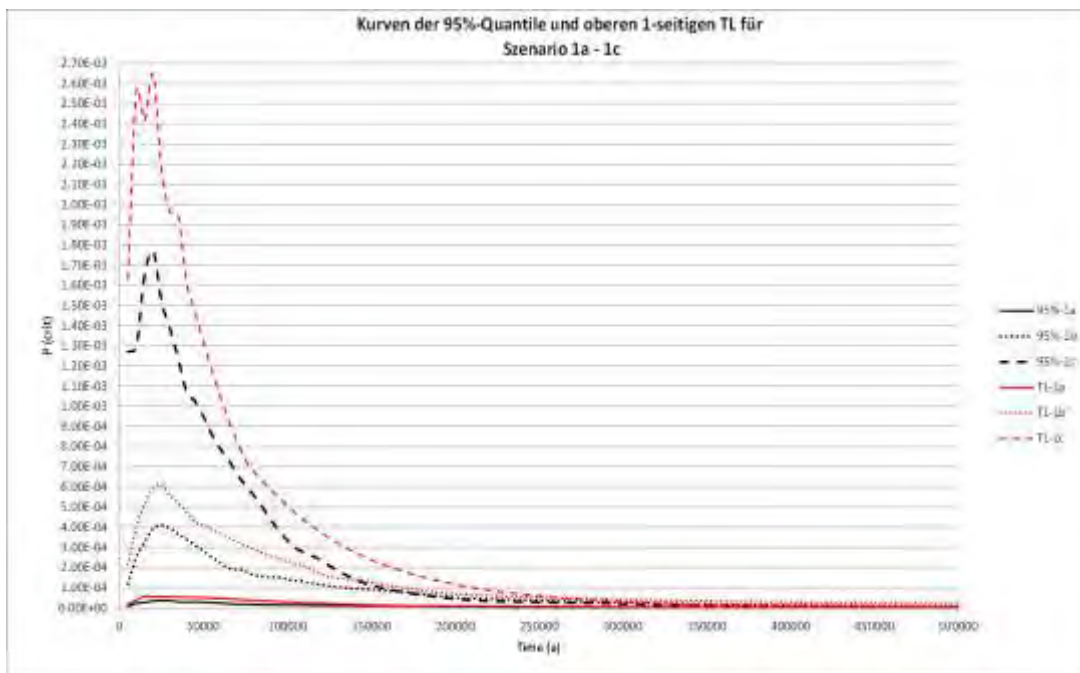


Abb. 2.42 Vergleich der zeitlichen Verläufe von 95%-Quantilen und oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen in 5000-Jahresintervallen (Konsequenz 2) für die Szenarien 1a – 1c

Nach **Abb. 2.41** weisen die Verläufe der Mittelwerte im Vergleich zu denen der Referenzläufe wesentlich höhere Wahrscheinlichkeitsmaxima bei kleineren Zeiten auf. Dies gilt für alle drei Szenarien.

Abb. 2.42 verdeutlicht die großen Unterschiede bei den Wahrscheinlichkeitsmaxima der Kennwerte 95%-Quantil und oberer einseitiger (95%,95%)-Toleranzgrenze. Dies gilt für alle drei Szenarien.

In der **Tab. 2.23** sind für alle betrachteten fünf Szenarien die Maximalwerte der Wahrscheinlichkeiten in 5000-Jahresintervallen (Konsequenz 2) für die neuen und alten Referenzwerte sowie für die aus 100 Rechenläufen ermittelten Kennwerte einschließlich der Zeitintervalle, in denen die Maxima anfallen, zusammengestellt.

Tab. 2.23 Maxima der Referenz- und Kennwerte einschließlich der zugehörigen Zeitintervalle für alle Szenarien und für Konsequenz 2

Referenzwert / Kennwert	Maxima Wahrscheinlichkeiten (Konsequenz 2) / Zeitintervall (Jahre)				
	Szenario 1a	Szenario 1b	Szenario 1c	Szenario 2a	Szenario 2b
Referenzwerte neu	5,37E-06	2,04E-05	7,18E-05	4,56E-05	7,71E-05
	40 000-45 000	35 000-40 000	25 000-30 000	25 000-30 000	20 000-25 000
Referenzwerte alt	2,50E-05	2,50E-05	2,50E-05	4,40E-05	4,40E-05
	40 000-45 000	40 000-45 000	40 000-45 000	30 000-35 000	30 000-35 000
Median	2,19E-06	2,43E-05	1,43E-04	2,33E-05	4,61E-05
	30 000-35 000	30 000-35 000	15 000-20 000	0-5000	5000-10 000
Mittelwert	7,21E-06	7,61E-05	3,90E-04	6,90E-05	1,45E-04
	25 000-30 000	25 000-30 000	15 000-20 000	0-5000	0-5000
95%-Quantil	3,67E-05	4,11E-04	1,77E-03	3,18E-04	5,36E-04
	25 000-30 000	20 000-25 000	15 000-20 000	5000-10 000	0-5000
obere einseitige (95%,95%)-Toleranzgrenze	5,86E-05	6,10E-04	2,65E-03	7,58E-04	2,29E-03
	10 000-15 000	20 000-25 000	15 000-20 000	0-5000	0-5000

Die Maxima der Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind nach **Tab. 2.23** bis auf wenige Ausnahmen bei den Kennwerten größer als bei den Referenzläufen. Auch tauchen diese Maxima bei den Kennwerten wesentlich früher als bei den Referenzläufen auf. Dieser Sachverhalt trifft ganz besonders auf die Szenarien 2a und 2b zu.

Ein wichtiger Aspekt bei der Sensitivitätsanalyse ist die Bestimmung der für das Auftreten einer Kritikalitätsexkursion wichtigen Parameter. In dieser Auswertung wurden relevante Parameter an Hand der zeitabhängigen Sensitivitäten der Unsicherheitsanalyse (vgl. **Abb. 2.20**, usw.) ermittelt. Auswahlkriterium für den jeweiligen Parameter P ist dabei ein Sensitivitätswert $S(P)$, der über einen längeren Zeitraum die Bedingung $-0,2 > S(P) > 0,2$ erfüllt. Eine Szenarien-übergreifende Untersuchung dieser relevanten Parameter ergab, dass gleiche Parameter in unterschiedlichen Szenarien im Hinblick auf die Sensitivitätsanalyse sehr ähnliches Verhalten zeigen. Eine Auflistung der in den fünf untersuchten Szenarien als relevant identifizierten Parameter findet sich in **Tab. 2.24**. Die Abkürzungen 'K1' und 'K2' beziehen sich dabei auf Konsequenz 1 und Konsequenz 2.

Tab. 2.24 Übersicht über die relevanten Parameter der Sensitivitätsanalysen für Konsequenz 1 (K1) und Konsequenz 2 (K2) bei allen Szenarien

Parameter	Szenario 1a		Szenario 1b		Szenario 1c		Szenario 2a		Szenario 2b	
	K1	K2	K1	K2	K1	K2	K1	K2	K1	K2
Korrosionsrate	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Keine Kompaktierung	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Kein Selbstverschluss	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Separation Aktinoiden vom Spaltstoff	x									
Geeignete Geometrie	x	x		x						
Zeitdauer für kritisches H/U-Verhältnis	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Aufweitung der Brennstäbe							x	x	x	x

Nach **Tab. 2.24** gibt es für jedes Szenario – sowohl für Konsequenz 1 als auch für Konsequenz 2 – im Hinblick auf eine mögliche Kritikalitätsexkursion zwischen vier und sechs relevante Parameter. Allen Szenarien gemeinsam sind die relevanten Parameter *‘Korrosionsrate‘*, *‘Keine Kompaktierung‘*, *‘Kein Selbstverschluss‘* und *‘Zeitdauer für ein kritisches H/U-Verhältnis‘*, wobei in allen Fällen *‘Kein Selbstverschluss‘* bei weitem dominiert. Diese vier Parameter beschreiben die grundlegenden Voraussetzungen für eine Kritikalitätsexkursion:

Es darf *‘Kein Selbstverschluss‘* im Versatzmaterial stattfinden damit Flüssigkeit ungehinderten Zutritt zum Behälter hat, Die Parameter *‘Korrosionsrate‘* und *‘Zeitdauer bis zur Etablierung eines kritischen H/U-Verhältnisses‘* bestimmen, in welchem Zeitrahmen Flüssigkeit in das Behälterinnere zum Spaltstoff gelangt und wann sich ein kritisches H/U-Verhältnis ausbildet. Außerdem soll auch *‘Keine Kompaktierung‘* des Behälters durch Gebirgsdruck stattfinden, weil dadurch die Wahrscheinlichkeit für die Etablierung eines kritischen H/U-Verhältnisses drastisch reduziert wird.

Bei einigen Szenarien gewinnen, bedingt durch die jeweiligen individuellen Modellannahmen, noch zusätzlich andere Parameter an Bedeutung:

Bei Szenario 1a (POLLUX-Behälter mit abgebranntem Brennstoff) sind dies die beiden Parameter *‘Separation Aktinoiden vom Spaltstoff‘* und *‘Geeignete Geometrie‘*. Da in allen übrigen Szenarien eine Beladung mit frischem Brennstoff unterstellt wird, ist dort eine Separation von Aktinoiden und Spaltstoff irrelevant. Frischer Brennstoff ist zudem in der Regel reaktiver als abgebrannter Brennstoff mit gleicher Anfangsanreicherung. Deshalb kommt auch der Ausbildung einer geeigneten Geometrie und damit dem entsprechenden Parameter bei einer möglichen Kritikalitätsexkursion in einem System mit abgebranntem Brennstoff eine größere Bedeutung zu als in einem mit frischem Brennstoff. Warum sich aber der Parameter *‘Separation Aktinoiden vom Spaltstoff‘* für Konsequenz 2 von Szenario 1a kein relevanter Parameter und *‘Geeignete Geometrie‘* für Szenario 1b und Konsequenz 2 als relevanter Parameter erweist, ist bislang ungeklärt.

In den Szenarien 2a und 2b wird von einer Korrosion des POLLUX-Innenbehälters (Szenario 2a) bzw. des Behälters der Brennstabkokille BSK-3 mit nachfolgender Aufweitung des Brennstabgitters ausgegangen. Deshalb ist der Parameter *‘Aufweitung der Brennstäbe‘* nur für diese beiden Szenarien relevant.

2.4.3 Zusammenfassung der probabilistischen Analysen

Mit diesen Arbeiten zur PSA wurde auf den Resultaten des vergangenen und in /GMA 09/ dokumentierten Vorhabens aufgebaut und die dort beschriebenen Methoden und Szenarien modifiziert und weiterentwickelt. Insbesondere wurden alle in diesem Projekt durchgeführten Berechnungen der erstellten Markov-Modelle zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeit einer Kritikalität im Endlager mit dem GRS-Programm RAMESU /BRO 88/, /PEJ 91/ durchgeführt.

Mit dieser Methodik wurden die Eintrittswahrscheinlichkeiten für Kritikalität für fünf unterschiedliche Szenarienabläufe ermittelt:

- Bildung einer neuen Mineralphase mit abgebranntem Kernbrennstoff im Inneren eines POLLUX-Behälters,
- Bildung einer neuen Mineralphase mit frischem Kernbrennstoff im Inneren eines POLLUX-Behälters,
- Bildung einer neuen Mineralphase mit frischem Kernbrennstoff im Inneren einer Brennstabkockille BSK-3,
- Aufweitung der Abstände der Brennstabanordnung in einem mit frischem Brennstoff beladenen POLLUX-Behälter und
- Aufweitung der Abstände der Brennstabanordnung in einer mit frischem Brennstoff beladenen Brennstabkockille BSK-3.

Grundlage der Berechnungen war ein gegenüber dem früheren Vorhaben /GMA 09/ aktualisierter und problemoptimierter Parameterdatensatz.

Die Untersuchungen führten zu folgenden Ergebnissen:

- Die Eintrittswahrscheinlichkeiten für eine Kritikalität unterscheiden sich von Szenario zu Szenario erheblich.
- Die aus den Rechenläufen ermittelten statistischen Kennwerte zeigen sowohl untereinander als auch im Vergleich zu den Referenzläufen große Diskrepanzen. Die Diskrepanzen in den Kennwertverläufen weisen auf die erheblichen Unsicherheiten der Modellergebnisse hin.
- Als Folge davon besetzen die Eintrittswahrscheinlichkeiten für eine Kritikalitätsexkursion bei einem bestimmten Szenario einen großen Wertebereich, wodurch die erheblichen Unsicherheiten ausgedrückt werden. Dies trifft sowohl für ku-

mulierte Verteilungen (Konsequenz 1) als auch für Verteilungen in bestimmten Zeitintervallen (hier: 5000-Jahresintervalle) zu. Während für Konsequenz 1 die Unsicherheiten mit zunehmender Zeit anwachsen, sind für Konsequenz 2 die größten Unsicherheiten während der ersten 50 000 Jahre zu beobachten.

- Nur eine kleine Anzahl von Parametern (4-6) ist nach der Sensitivitätsanalyse relevant für die Unsicherheiten bei der Eintrittswahrscheinlichkeit für eine Kritikalitätsexkursion.
- Gleiche (relevante) Parameter zeigen im Hinblick auf die Sensitivitätsanalyse in unterschiedlichen Szenarien sehr ähnliches Verhalten.
- Die bereits weiter oben angesprochenen Diskrepanzen bei Kennwertverläufen und Referenzläufen sind zum Teil auf die hier durchgeführte standardisierte Interpretation der probabilistischen Ergebnisse zurückzuführen. Durch eingehendere, systematische Untersuchungen der Ergebnisse sollte das Ausmaß der Diskrepanzen reduziert werden können. Als erster Schritt in diese Richtung bietet sich zunächst einmal eine genauere Analyse des Verhaltens besonders auffälliger Rechenläufe (z.B. Run 8 und Run 93 in Szenario 1a und ähnlich auffälliger Runs in den Szenarien 2a und 2b) an. Weitere diesbezügliche Maßnahmen müssen noch ausgearbeitet werden.

3 **Konsequenzenanalyse**

In den früheren Vorhaben WS 1005/8488-2 und SR 2528 wurde damit begonnen, mögliche Auswirkungen der Bildung einer kritischen Anordnung unter Endlagerbedingungen zu betrachten. Um mögliche Verläufe und Konsequenzen einer kritischen Exkursion unter Endlagerbedingungen abschätzen zu können, wurde die Entwicklung eines entsprechenden Exkursionscodes, PUNKT-V6, initiiert /HES 04/, /HES 09/. Dazu wurde auf ein früheres Rechenprogramm zur Analyse kritischer Exkursionen zurückgegriffen, welches dahingehend überarbeitet wurde, dass auch die unter Endlagerbedingungen zu erwartenden langen Exkursionszeiten bei sehr geringer Leistungsfreisetzung numerisch geeignet erfasst werden können.

Der daraus entstandene Exkursionscode PUNKT-V6, der zu Beginn dieses Vorhabens in Version 2008 vorlag, löst die nulldimensionalen dynamischen Reaktorgleichungen in einer Energiegruppe durch eine iterative Abfolge von Rechenschritten, mit denen die jeweiligen zeitlichen Änderungen modelliert werden. Intern arbeitet Punkt-V6 mit makroskopischen Eingruppen-Wirkungsquerschnitten und effektiven Rückkopplungskoeffizienten. Erstere beschreiben dabei die Materialzusammensetzung und die geometrische Konfiguration, während letztere den Einfluss der temperaturbedingten Reaktivitätsrückkopplungen (Dopplereffekt) auf die makroskopischen Wirkungsquerschnitte widerspiegeln. Der zeitliche Verlauf des unterstellten Szenarios wird durch entsprechende zeitliche Änderungen der makroskopischen Wirkungsquerschnitte und des Abbrands durch Änderungen der makroskopischen Wirkungsquerschnitte pro Spaltung modelliert. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte, ihre Änderungen und die entsprechenden effektiven Rückkopplungskoeffizienten sind vom Anwender zuvor in geeigneten Vorrechnungen zu bestimmen /HES 09/. Mit diesen errechnet der Code den zeitlichen Verlauf der relevanten Größen. Dies sind hauptsächlich die makroskopischen Wirkungsquerschnitte, der Neutronenmultiplikationsfaktor, die Leistung und die Temperaturen.

Reaktivitätsrückkopplungen wurden bislang nur in der Form des Dopplereffekts im Spaltmaterial und des Abbrands berücksichtigt. Im ersten Fall geschieht dies durch einen effektiven Koeffizienten, der die Änderung des Neutronenmultiplikationsfaktors je Grad Temperaturänderung im Spaltmaterial beschreibt. In PUNKT-V6 wird mit dieser Änderung des Multiplikationsfaktors auf einen effektiven Absorptionswirkungsquer-

schnitt für das Spaltmaterial zurückgerechnet. Der Abbrand wird durch eine effektive Minderung des Spalt- bzw. einer effektiven Zugabe zum Absorptionswirkungsquerschnitt des Spaltmaterials je errechneter Spaltung berücksichtigt. Die Absorption der Spaltprodukte ^{135}Xe und ^{149}Sm wird dabei separat betrachtet. Die Temperaturentwicklung wird bisher über ein einfaches kugelsymmetrisches Dreizonen-Geometriemodell (Spaltstoffzone, Moderator-/Reflektorzone, unendlich ausgedehnte Umgebung – Wirtsgestein) simuliert.

Ausgehend von diesem Stand wurden im Rahmen des vorliegenden Vorhaben verschiedene Erweiterungen am Exkursionscode PUNKT-V6 vorgenommen.

3.1 Erweiterung des Exkursionscodes PUNKT-V6

Die methodischen Erweiterungen an dem Rechenmodell betreffen zunächst die effektivere Durchführung der notwendigen, zahlreichen Vorrechnungen. Außerdem wurden weitere Mechanismen zur Reaktivitätsrückkopplung implementiert, und schließlich die Möglichkeiten zur graphischen Darstellung der Resultate erweitert. Neben Testrechnungen zur Verifizierung der implementierten Erweiterungen wurden auch erste Vergleichsrechnungen zu den sog. „Naturreaktoren“ in Oklo durchgeführt.

3.1.1 Zufuhr oder Abnahme von Moderator-Material

Die Reaktivität eines Spaltstoffsystems wird neben dem Spaltmaterial auch durch die Moderation der Neutronen und dem sich daraus ergebenden Neutronenspektrum bestimmt. Dies wird in PUNKT-V6 durch das Eingehen des Neutronenspektrums in die Kondensierung der Wirkungsquerschnitte berücksichtigt. Ändert sich die Moderation aufgrund von Zu- oder Abnahme von Moderator-Material, so beeinflusst dies somit die Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der übrigen Materialien. Die jeweiligen Auswirkungen sind i. d. R. materialabhängig. Zudem können sich zusätzlich andere Materialmengen ändern und so ebenfalls die makroskopischen Eingruppen-Wirkungsquerschnitte beeinflussen, z.B. in einem Szenario mit Auswaschen von Wirtsgestein oder Korrosionsprodukten und Auffüllen der Freiräume mit Moderator. Da wie oben erwähnt der zeitliche Ablauf eines unterstellten Exkursionsszenarios in PUNKT-V6 durch eine zeitabhängige Zu- oder Abnahme makroskopischer Wirkungsquerschnitte beschrieben wird, können so komplexe zeitliche Abhängigkeiten der makroskopischen Wirkungsquerschnitte entstehen. Zudem treten während einer Exkursion verschiedene

temperaturabhängige Reaktivitätsrückkopplungen auf, die sich ebenfalls in unterschiedlichem Maß auf die makroskopischen Wirkungsquerschnitte auswirken (Kapitel 3.1.2). Um diese Abhängigkeiten im Rahmen von PUNKT-V6 modellieren zu können, ist eine Unterteilung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte für verschiedene Materialien bzw. Materialgruppen notwendig.

In der bisherigen Implementierung von PUNKT-V6 (Version 2008) wurde nur zwischen dem Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt der homogenisierten Spaltmaterialzonen unterschieden. Weitere Materialzonen, wie eine Reflektorzone und eine als unendlich ausgedehnt angenommene äußere Umgebung wurden mittels einer effektiven Leckage berücksichtigt /HES 09/. Zusätzlich war die Angabe einer „Vergiftung“ der Spaltstoffzone mit einem Neutronenabsorber möglich. Dieser Modellierungsansatz orientiert sich stark am Aufbau eines Reaktors oder eines typischen Exkursionsexperiments und stammt ursprünglich aus der früheren Implementierung des Exkursionscodes. Um, wie oben diskutiert, verschiedene Szenarien und Brennstoffanordnungen ausreichend annähern zu können, die in einem Endlager nach entsprechender Degradation der Behälter und/oder des enthaltenen Kernbrennstoffs vorstellbar sind, wurde eine weitergehende Unterteilung der Wirkungsquerschnitte in verschiedene Materialgruppen vorgenommen. Als Ausgangspunkt zur Unterteilung der Wirkungsquerschnitte in Punkt-V6 wurden exemplarische Annahmen zu einem degradierten Endlagerbehälter mit ebenfalls degradiertem, abgebranntem Kernbrennstoff als typisches Beispiel für den zukünftigen Einsatz von PUNKT-V6 herangezogen: Für die innere Zone eines hypothetischen Endlagerbehälters, die das Spaltmaterial enthält, sind zunächst die Spalt- und Einfangwirkungsquerschnitte dieses Kernbrennstoffs zu unterscheiden, um dessen Reaktivität zu beschreiben. Typischerweise wird der Zufluss von Lösung unterstellt, um eine hinreichende Moderation zu erhalten, damit sich ein kritischer Zustand bilden kann. Somit ist auch der Absorptionswirkungsquerschnitt eines Moderators separat zu berücksichtigen, da dessen Wert durch Zu- oder Abfluss des Moderators variiert. Endlagerbehälter enthalten ferner Neutronenabsorber, zumindest in Form der langlebigen Spaltprodukte im abgebrannten Kernbrennstoff, und gegebenenfalls durch zusätzlich eingebrachte Absorbermaterialien, z. B. Borstahl. Zumeist wird der Abtransport dieser Neutronenabsorber unterstellt, sodass deren Absorptionswirkungsquerschnitt variieren kann und im Code entsprechend separat zeitabhängig zu betrachten ist. Im Fall einer Exkursion kommen zusätzlich neugebildete Spaltprodukte hinzu, die ebenfalls zur Absorption beitragen, wodurch auch ihr Absorptionswirkungsquerschnitt separat zu berücksichtigen ist. Letztlich bestehen noch Absorptionseffekte durch Strukturmaterialien des Behälters oder durch Bestandteile des Wirtsgesteins, welche in den degradierten

Behälter gelangt sind, sowie Neutronenverlust durch Leakage-Effekte. Diese Neutronenverluste sind entsprechend in Form eines weiteren Absorptionswirkungsquerschnitts zu beschreiben, da PUNKT-V6 keine direkten Informationen über die Geometrie enthält. Damit ergibt sich aus diesen generellen Modellannahmen die Notwendigkeit, folgende makroskopische Wirkungsquerschnitte in dem Exkursionsmodell separat zu betrachten und zu implementieren:

- Spaltwirkungsquerschnitte des Spaltmaterials,
- Einfangwirkungsquerschnitte des Spaltmaterials,
- (gesamter) Absorptionswirkungsquerschnitt der neugebildeten Spaltprodukte,
- Absorptionswirkungsquerschnitt des Moderators,
- (gesamter) Absorptionswirkungsquerschnitt von Neutronenabsorbern, die je nach modelliertem Szenario variieren können (z. B. anfänglich vorhandene Spaltprodukte, Neutronengifte im Behälter, etc.),
- (gesamter) Absorptionswirkungsquerschnitt sonstiger Materialien und zur Berücksichtigung von Leakage-Effekten.

Diese Wirkungsquerschnitte können je nach unterstelltem Szenario z. B. durch Zu- oder Abfluss von Material, variieren. Dementsprechend wurden folgende Überarbeitungen und Erweiterungen am Exkursionscode PUNKT-V6 vorgenommen:

- Die codeinterne Handhabung und Verarbeitung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte wurde so überarbeitet, dass nunmehr die sechs oben beschriebenen Wirkungsquerschnitte unterschieden bzw. separat gespeichert und verarbeitet werden.
- Das Einlesen der Eingabedatei wurde so erweitert, dass für diese makroskopischen Wirkungsquerschnitte ein separater Eingabewert zur Verfügung steht. Ausnahme ist hier lediglich der Absorptionswirkungsquerschnitt der neugebildeten Spaltprodukte, welche zu Beginn der Exkursionsrechnung als Null angenommen wird:
 - $$$xsfis$: Eingabewert des Spaltwirkungsquerschnitts des Spaltmaterials,
 - $$$xscap$: Eingabewert des Einfangwirkungsquerschnitts des Spaltmaterials,
 - $$$xsmo$: Eingabewert des Absorptionswirkungsquerschnitts des Moderators,

- Δx_{spoils} : Eingabewert des Absorptionswirkungsquerschnitts variabler Neutronenabsorber,
- Δx_{sleak} : Eingabewert des effektiven Absorptionswirkungsquerschnitts sonstiger Materialien und der Leckage (1. Wert) und Neutronenmultiplikationsfaktor der Anordnung zum Anfangszeitpunkt (2. Wert).

Eine Besonderheit bietet der Eingabeparameter Δx_{sleak} , der den ursprünglich vorhandenen Parameter Δdb^{**2} ersetzt. Hier sind zwei Zahlenwerte zu übergeben, mit denen der Anwender zwei Varianten zur Auswahl hat, den benötigten Absorptionswirkungsquerschnitt festzulegen. Der erste Wert gibt direkt den effektiven Absorptionswirkungsquerschnitt an, der dann zuvor vom Anwender zu bestimmen ist. Der zweite Wert gibt den Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} der betrachteten Spaltstoffanordnung zum Anfangszeitpunkt der Exkursionsrechnung vor, aus welchem dann durch PUNKT-V6 intern ein effektiver Absorptionswirkungsquerschnitt für die sonstigen Materialien und der Leckage berechnet wird. Welcher der beiden Werte in der Exkursionsrechnung genutzt wird, ist vom Anwender im Parameter $\Delta flags$ zu definieren /HES 09/. Wird vom Anwender die Berechnung des Absorptionswirkungsquerschnitts anhand des vorgegebenen Neutronenmultiplikationsfaktors ausgewählt, so wird der erste Wert zum Parameter Δx_{sleak} nicht weiter verwendet. Analog gilt dies entsprechend bei der gegenteiligen Wahl.

- Um das für die Exkursion unterstellte Szenario in Form der oben definierten Wirkungsquerschnitte beschreiben zu können, wurde entsprechend der Eingabeparameter $\Delta param$ überarbeitet. Mit diesem kann der Anwender die zeitlichen Änderungen der Wirkungsquerschnitte vorgeben, um so den Ablauf des Szenarios zu beschreiben. Die Angabe des Parameters $\Delta param$ erfolgt in der Form:

```

 $\Delta param$  <time1> < $\Delta x_{sfis1}$ > < $\Delta x_{scap1}$ > < $\Delta x_{smod1}$ > < $\Delta x_{spoils1}$ >
< $\Delta ext.source1$ >
<time2> < $\Delta x_{sfis2}$ > < $\Delta x_{scap2}$ > < $\Delta x_{smod2}$ > < $\Delta x_{spoils2}$ >
< $\Delta ext.source2$ >
...

```

Dabei geben die Werte $\Delta time$ markante Zeitpunkte im Exkursionsverlauf des betrachteten Szenarios an, und die übrigen Werte beschreiben die dazugehörigen zeitlichen Änderungen der entsprechenden Wirkungsquerschnitte bzw. einer externen Neutronenquelle ($\Delta ext.source$), welche z. B. durch vorhandene spontan spaltende Nuklide wie Curium gebildet wird /HES 09/. Die Änderungen

der Wirkungsquerschnitte bzw. der externen Neutronenquelle können entweder als einmalige Zugabe zum jeweiligen Zeitpunkt $\langle time \rangle$ oder als Änderungsrate, die ab dem Zeitpunkt $\langle time \rangle$ bis zum nächsten Zeitpunkt gültig bleibt, angegeben werden. Die Festlegung welche der beiden Varianten jeweils genutzt wird, ist wieder im Parameter $\$flags$ zu definieren /HES 09/.

Die Möglichkeit, zeitliche Änderungen im Absorptionswirkungsquerschnitt der sonstigen Materialien und Leckage $\$xs/leak$ vorzugeben, war bislang nicht implementiert. D. h. Änderungen im umgebenden Material oder in der Geometrie waren erforderlichenfalls mithilfe der anderen variablen Wirkungsquerschnitte zu beschreiben. Weitere Angaben zum Parameter $\$flags$ sind zusätzlich in /HES 09/ gegeben. Der Aufbau des Absorptionswirkungsquerschnitts der neu gebildeten Spaltprodukte wird intern anhand der Zahl der Spaltungen während der Exkursion und der vom Anwender vorzugebenden mittleren Zunahme des Absorptionswirkungsquerschnitts pro Spaltung $\$xscapgain$ bestimmt. Eine extern vorgegebene Veränderung dieses Wirkungsquerschnitts ist bislang nicht vorgesehen.

- In der bisherigen Implementierung von PUNKT-V6 wurden insbesondere die von außen vorgegebene Zufuhr und Abnahme an makroskopischen Wirkungsquerschnitten je Zeitschritt zunächst in einer zusätzlichen „Puffer“-Variablen aufaddiert /HES 09/. Erreichten die Werte dieser Variablen eine gewisse Höhe, so wurden sie erst zu den Variablen, die die eigentlichen Werte der makroskopischen Wirkungsquerschnitte enthalten, hinzuaddiert. Auf diese Weise sollte erreicht werden, dass auch sehr geringe Änderungen der Wirkungsquerschnitte je Rechenschritt registriert werden und nicht aufgrund von Abrunden nach der direkten Addition verloren gehen. Diese Vorgehensweise wurde auch für die neuen Wirkungsquerschnitte in PUNKT-V6 Version 2013 übernommen.

Die durchgeführten Überarbeitungen und Erweiterungen des Codes wurden in entsprechenden Testrechnungen verifiziert und auf Konsistenz mit den bisherigen Funktionalitäten der Version 2008 überprüft (siehe auch Kapitel 3.1.6).

3.1.2 Simulation der Dichte-Reaktivität-Rückkopplungen

Neben dem Zu- oder Abfluss von Spaltmaterial oder Moderator wird der Verlauf einer Exkursion durch verschiedene Rückkopplungseffekte mitbestimmt, die die Reaktivität des betrachteten Spaltmaterial-Moderator-Systems beeinflussen. Von diesen wurden

in der bisherigen Version 2008 von PUNKT-V6 lediglich der Dopplereffekt des Spaltmaterials aufgrund dessen Temperaturerhöhung und der Abbrand während der Exkursion berücksichtigt (s. o.). Beide Effekte werden im Modell durch effektive Koeffizienten beschrieben. Im Fall des Dopplereffekts sind dessen Auswirkungen auf die Reaktivität des Systems von der Temperatur des Spaltmaterials abhängig.

Ein weiterer zu berücksichtigender, temperaturabhängiger Rückkopplungsmechanismus ist die temperaturbedingte Dichteänderung der an der Exkursion beteiligten oder in deren Umfeld vorliegenden Materialien. Da bei Exkursionen unter Endlagerbedingungen in der Regel das Vorhandensein von Wasser als dominierender Neutronenmoderator vorausgesetzt wird, beeinflusst hier vor allem dessen Dichteänderung die Reaktivität der betrachteten Systeme. Als weiterer Effekt kann auch die temperaturbedingte Ausdehnung der Spaltstoff- oder der Reflektorzone die Reaktivität des Systems beeinflussen.

Um die Temperaturabhängigkeit der Reaktivität eines Systems in verbesserter Näherung modellieren zu können, sind die folgenden Zusammenhänge zu berücksichtigen: Grundsätzlich werden die Temperaturen aller im Bereich einer Exkursion vorliegenden Materialien aufgrund der Energiefreisetzung der Exkursion erhöht. Der Temperaturanstieg kann für unterschiedliche Materialien verschieden groß ausfallen. Dies betrifft vor allem heterogene Spaltmaterial-Moderator-Systeme. D. h. bei der Implementierung dieser Rückkopplungseffekte ist auf eine Unterscheidung der Temperaturen der verschiedenen Materialien zu achten. Gleiches gilt für die Dichteänderungen, auch diese werden in der Regel materialabhängig sein. Insbesondere eine Dichteänderung des Moderators, d. h. des im System vorhandenen Wassers, kann wesentliche Auswirkungen auf die Reaktivität haben. So führt eine durch Temperaturanstieg hervorgerufene Reduzierung der Wasserdichte unter geologischen Bedingungen i.d.R. zu einer Verminderung der Moderation, woraus ein härteres Neutronenspektrum resultiert. Letzteres hat für typische unter Endlagerbedingungen zu betrachtende Spaltstoffanordnungen und Szenarien eine Reduzierung der Reaktivität und damit, zusammen mit dem Dopplereffekt im Spaltmaterial, eine Reduktion der erzeugten Leistung zur Folge. Führt der Temperaturanstieg zur Erzeugung von Dampfblasen und in Folge dessen dazu, einen wesentlichen Anteil des Wassers aus der Spaltmaterialzone zu verdrängen, so terminiert dies i.d.R. sogar die Exkursion. In PUNKT-V6 sind intern allerdings keine Materialinformationen wie z. B. die Wasserdichte verfügbar, und das Neutronenspektrum geht nicht direkt sondern nur indirekt durch die Kondensierung der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte in eine Energiegruppe in die Berechnungen ein. Daher

besteht nur die Möglichkeit, eine Änderung des Neutronenspektrums in entsprechende Änderungen der jeweiligen Eingruppen-Wirkungsquerschnitte zu übersetzen und auf diese Weise zu berücksichtigen. Dabei ist zu beachten, dass dies alle Wirkungsquerschnitte betrifft, welche sich aber i. A. in unterschiedlicher Weise ändern. In das bisherige Konzept von PUNKT-V6 übertragen bedeutet dies, dass die verschiedenen makroskopischen Eingruppen-Wirkungsquerschnitte temperaturabhängig modellierbar sein müssen, um eine entsprechende, auf temperaturbedingte Dichteänderungen zurückgehende Reaktivitätsrückkopplung simulieren zu können.

Eine analoge Schlussfolgerung ergibt sich bei der Betrachtung von Szenarien mit temperaturbedingter Ausdehnung der Spaltstoff- oder Reflektorzone. Da PUNKT-V6 keine Geometrieinformationen enthält, besteht auch in diesen Fällen nur die Möglichkeit, die durch die Ausdehnung bedingten Reaktivitätsänderungen innerhalb der Exkursionsrechnungen in einer Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte von der Temperatur zu beschreiben.

Die Bestimmung der Temperaturen erfolgt in PUNKT-V6 derzeit über ein Dreizonen-Wärmeleitmodell (Spaltmaterialzone, Reflektorzone, unendlich ausgedehnte Umgebung – Wirtsgestein), welches für die beiden ersten Zonen eine mittlere Temperatur bestimmt. Die Temperatur der Umgebung wird dagegen fest vorgegeben. So werden bislang nur zwei variable Temperaturen unterschieden. Hier obliegt es dem Anwender zu entscheiden, welche der beiden Temperaturen für die Beschreibung der Rückkopplung heranzuziehen ist. Liegt z. B. ein Spaltmaterial-Reflektor-System (ohne Moderator in der Spaltmaterialzone) vor, so werden sich die Temperaturen von Spaltmaterial und Reflektor deutlich unterscheiden. In diesem Fall kann die Temperatur der mittleren (zweiten) Zone des Wärmeleitmodells als Näherung für die Reflektortemperatur und als Bezug für die Reaktivitätsrückkopplungen genutzt werden. Im Fall eines homogenen Spaltmaterial-Moderator-System kann dagegen die gleiche Temperatur für Spaltmaterial und Moderator angenommen werden. D. h. die Temperatur der zentralen Zone wird die Reaktivitätsrückkopplungen bestimmen. In der Implementierung der Rückkopplungen ist somit eine Wahlmöglichkeit der Bezugstemperaturen einzufügen.

Zur eigentlichen Simulation der Reaktivitätsrückkopplungen wurden zwei Modellvarianten in den Exkursionscode PUNKT-V6 implementiert. Zunächst wurde ein einfaches Modell erstellt, welches sich an der Vorgehensweise zur Berücksichtigung des Dopplereffekts orientiert. In diesem ersten Modell wird die Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte über den Umweg einer Temperaturabhängigkeit des Neutronenmul-

tiplikationsfaktors beschrieben, d. h. die Wirkungsquerschnitte werden im Code jeweils zu Ausgangstemperatur T_0 verwaltet, der daraus errechnete Neutronenmultiplikationsfaktor wird anschließend bezüglich seiner modellierten Temperaturabhängigkeit korrigiert, und aus diesem temperaturkorrigierten Multiplikationsfaktor ein neuer effektiver Wirkungsquerschnitt für den Moderator abgeleitet:

Hierzu wurde ein linearer Koeffizient $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m}$ definiert, der die Änderung des Neutronenmultiplikationsfaktors k_{eff} des Systems bezüglich der Temperaturänderung der damit verbundenen Folgen wie z. B. die Dichteänderungen beschreibt. Mit dem Neutronenmultiplikationsfaktor des aktuellen Zeitschritts unter Annahme der Anfangstemperatur T_0 des Systems kann der aktuelle Neutronenmultiplikationsfaktor $k_{eff}(T_A)$ zur Temperatur T_A mit

$$k_{eff}(T_A) = k_{eff}(T_0) + \frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m} [T_A - T_0]. \quad (3.1)$$

bestimmt werden.

Um auch ein nicht-lineares Verhalten näherungsweise zu beschreiben, wurde der Koeffizient $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m}$ so implementiert, dass er abschnittsweise definiert werden kann. D.h. es können mehrere Werte $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m} \Big|_{T_0 \rightarrow T_1}$, $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m} \Big|_{T_1 \rightarrow T_2}$, ... angegeben werden, die das jeweils lineare Verhalten des Neutronenmultiplikationsfaktors zwischen den Temperaturen T_0 und T_1 , T_1 und T_2 usw. beschreiben. Die Gleichung (3.1) erweitert sich in diesem Fall zu

$$k_{eff}(T_A) = k_{eff}(T_0) + \frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m} \Big|_{T_0 \rightarrow T_1} \cdot [T_1 - T_0] + \frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m} \Big|_{T_1 \rightarrow T_2} \cdot [T_2 - T_1] + \frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m} \Big|_{T_2 \rightarrow T_3} \cdot [T_A - T_2], \quad (3.2)$$

mit $T_0 < T_1 < T_2 < T_A < T_3$. Gleichung (3.1) beschreibt somit den einfachsten Fall $T_0 < T_A < T_1$.

Um den Neutronenmultiplikationsfaktor zur Ausgangstemperatur T_0 zu berechnen, werden alle Wirkungsquerschnitte jeweils zur Ausgangstemperatur T_0 , also ohne Tem-

peraturkorrektur, gespeichert, so kann mit diesen zum jeweiligen Zeitschritt der Neutronenmultiplikationsfaktor $k_{eff}(T_0)$ berechnet werden /HES 09/:

$$k_{eff}(T_0) = \frac{\Sigma_{fis}(T_0)}{\Sigma_{fis}(T_0) + \Sigma_{cap}(T_0) + \Sigma_{SP}(T_0) + \Sigma_{mod}(T_0) + \Sigma_{pois}(T_0) + \Sigma_{leck}(T_0)} \quad (3.3)$$

Dabei ist

die Anzahl der Neutronen pro Spaltung,

Σ_{fis} der makroskopische Spaltwirkungsquerschnitte des Spaltmaterials,

Σ_{cap} der makroskopische Einfangwirkungsquerschnitte des Spaltmaterials,

Σ_{SP} der makroskopische Absorptionswirkungsquerschnitt der neugebildeten Spaltprodukte,

Σ_{mod} der makroskopische Absorptionswirkungsquerschnitt des Moderators,

Σ_{pois} der makroskopische Absorptionswirkungsquerschnitt der variablen Neutronenabsorber,

Σ_{leck} der makroskopische Absorptionswirkungsquerschnitt sonstiger Materialien bzw. der effektive Absorptionswirkungsquerschnitt zur Beschreibung der Leckage.

Für die weiteren Rechenschritte wird aus dem korrigierten Neutronenmultiplikationsfaktor $k_{eff}(T_A)$ durch Umformung von Gleichung (3.3) ein effektiver makroskopischer Absorptionswirkungsquerschnitt $\Sigma_{mod}(T_A)$ des Moderators zur aktuellen Temperatur T_A bestimmt, der so die komplette Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte enthält.

Die Zahl der Temperaturintervalle, in denen $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m}$ definiert werden kann, wurde bei der Implementierung zunächst auf drei beschränkt. Allerdings lässt sich diese Zahl im Bedarfsfall auf einfache Weise erhöhen.

Die Festlegung, auf welche Temperatur im Wärmeleitmodell die Rückkopplung bezogen wird, kann mit dem Eingabeparameter $\$flags$ /HES 09/ erfolgen, welcher entsprechend erweitert wurde. Wird hier die Temperatur der zentralen Zone als Bezug gewählt, so wird die hier definierte Rückkopplung getrennt vom Dopplereffekt berücksichtigt, der sich auf dieselbe Temperatur bezieht.

In der Eingabedatei sind die Koeffizienten $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m}$ unter dem für diesen Zweck hinzugefügtem Parameter $\$tkmod$ in der Form

```
 $\$tkmod$  <dk/dT_1> <Temperatur_1>
      <dk/dT_2> <Temperatur_2>
      <dk/dT_3> <Temperatur_3>
```

anzugeben. Dabei beschreiben die Werte $\langle dk/dT_i \rangle$ die Koeffizienten $\frac{\Delta k_{eff}}{\Delta T_m}$ und die Werte $\langle Temperatur_i \rangle$ die jeweiligen maximalen Temperaturen. Zu beachten ist dabei, dass eine Korrektur des Neutronenmultiplikationsfaktors über die größte hier angegebene Temperatur hinaus nicht vorgenommen wird. Dies kann von Anwender dazu genutzt werden, um die Situation einer maximal zu erreichenden Rückkopplung (z. B. ein vollständig verdampfter Moderator) zu simulieren. Ansonsten sollte die größte angegebene Temperatur so gewählt werden, dass sie während der Exkursionsrechnung nicht überschritten wird. Entsprechende sondierende Testrechnungen vorab können hier empfehlenswert sein.

Die Bestimmung der für dieses Modell benötigten Koeffizienten erfolgt wie im Fall des Dopplereffekts durch entsprechende Vorrechnungen. Dazu sind durch den Anwender die Neutronenmultiplikationsfaktoren des Ausgangszustands sowie eines oder mehrerer Zustände des Systems bei unterstellten hohen Temperaturen mit den entsprechenden Dichteänderungen zu bestimmen, und die Koeffizienten durch den Quotienten der Differenzen der Neutronenmultiplikationsfaktoren und der Temperaturen zu errechnen.

Der Vorteil dieses Modells liegt in der einfachen Bestimmung der benötigten Koeffizienten. Zusätzlich wird nur ein Parameter der Exkursionsrechnung beeinflusst, so dass eventuelle Auswirkungen auf die numerische Stabilität des Codes möglichst gering gehalten werden. Allerdings ist zu beachten, dass dieses Modell nicht für die Simulation jedes Szenarios geeignet ist. Die hier verwendete Berechnung des effektiven makroskopischen Absorptionswirkungsquerschnitts $\Sigma_{mod}(T_A)$ aus dem temperaturkorrigier-

ten Neutronenmultiplikationsfaktor führt dazu, dass bei Verringerung des Multiplikationsfaktors der errechnete effektive Wirkungsquerschnitt $\Sigma_{mod}(T_A)$ ansteigt. Wird im unterstellten Szenario eine temperaturbedingte Verringerung der Moderatorichte unterstellt, so ist in der Regel eine Verringerung und nicht ein Anstieg der Werte der Wirkungsquerschnitte zu erwarten; d. h. in diesen Fällen kann die Verwendung dieses Modells zu unphysikalischen Resultaten führen. Eine Anwendung ist dagegen bei Szenarien möglich, bei denen z. B. die Spaltmaterialanordnung einer temperaturbedingten Ausdehnung unterliegt.

In einem zweiten implementierten Modell wurde dagegen versucht, ein im Vergleich realistischeres Verhalten der Wirkungsquerschnitte wiederzugeben. Dies wurde vor allem durch die in Kapitel 3.1.1 beschriebene strikte Unterscheidung der Wirkungsquerschnitte ermöglicht. In diesem zweiten Rückkopplungsmodell wird jedem im PUNKT-V6 definierten Wirkungsquerschnitt ein separater linearer Koeffizient zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit zugeordnet:

Für jeden in Punkt-V6 definierten Wirkungsquerschnitt wurde ein separater linearer Temperaturkoeffizient $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}$ definiert. Mit den jeweils zur Ausgangstemperatur T_0 gültigen Wirkungsquerschnitten $\Sigma_i(T_0)$ werden die temperaturabhängigen Wirkungsquerschnitte $\Sigma_i(T_A)$ zur aktuellen Temperatur T_A analog zur Gleichung (3.1) für den einfachsten Fall gemäß

$$\Sigma_i(T_A) = \Sigma_i(T_0) + \frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m} [T_A - T_0] \quad (3.4)$$

ermittelt. Dies betrifft alle in PUNKT-V6 definierten Wirkungsquerschnitte:

- Σ_{fis} makroskopischer Spaltwirkungsquerschnitte des Spaltmaterials,
- Σ_{cap} makroskopischer Einfangwirkungsquerschnitte des Spaltmaterials,
- Σ_{SP} makroskopischer Absorptionswirkungsquerschnitt der neugebildeten Spaltprodukte,
- Σ_{mod} makroskopischer Absorptionswirkungsquerschnitt des Moderators,
- Σ_{pois} makroskopischer Absorptionswirkungsquerschnitt der variablen

Neutronenabsorber,

Σ_{leck} makroskopischer Absorptionswirkungsquerschnitt sonstiger Materialien bzw. der effektive Absorptionswirkungsquerschnitt zur Beschreibung der Leckage.

Auch hier wurden zur näherungsweisen Beschreibung eines möglichen nicht-linearen Verhaltens die Koeffizienten $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}$ so implementiert, dass sie abschnittsweise definiert werden können. Entsprechend ist auch hier die Angabe mehrerer Werte $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}\Big|_{T_0 \rightarrow T_1}$, $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}\Big|_{T_1 \rightarrow T_2}$, ... möglich, die jeweils ein lineares Verhalten der Wirkungsquerschnitte zwischen den Temperaturen T_0 und T_1 , T_1 und T_2 usw. beschreiben. Im allgemeinen Fall gilt so auch hier entsprechend Gleichung (3.2)

$$\begin{aligned} \Sigma_i(T_A) = \Sigma_i(T_0) + \frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}\Big|_{T_0 \rightarrow T_1} \cdot [T_1 - T_0] + \frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}\Big|_{T_1 \rightarrow T_2} \cdot [T_2 - T_1] \\ + \frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}\Big|_{T_2 \rightarrow T_3} \cdot [T_A - T_2], \end{aligned} \quad (3.5)$$

mit $T_0 < T_1 < T_2 < T_A < T_3$.

Für die weiteren Rechenschritte werden dann die temperaturkorrigierten Wirkungsquerschnitte genutzt.

Die Zahl der Temperaturintervalle, in denen $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}$ definiert werden kann, wurde wie oben in der Implementierung auf drei beschränkt. Auch hier lässt sich diese Zahl zukünftig bei Bedarf einfach vergrößern.

Wie im obigen ersten Modell wird auch hier die Bezugstemperatur der Rückkopplung mit dem Eingabeparameter `$$flags /HES 09/` festgelegt.

Die Koeffizienten $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}$ werden in der Eingabedatei ebenfalls mit dem Parameter `$$tkmod` angegeben. Dies geschieht hier in der Form

$\$stkmod$ <dSfis/dT_1> <dScap/dT_1> <dSsp/dT_1> <dSmod/dT_1>
 <dSpois/dT_1> <dSleck/dT_1> <Temperatur_1>
 <dSfis/dT_2> <dScap/dT_2> <dSsp/dT_2> <dSmod/dT_2>
 <dSpois/dT_2> <dSleck/dT_2> <Temperatur_2>
 <dSfis/dT_3> <dScap/dT_3> <dSsp/dT_3> <dSmod/dT_3>
 <dSpois/dT_3> <dSleck/dT_3> <Temperatur_3>

Dabei beschreiben die Werte <dS/dT_i> die entsprechenden Koeffizienten $\frac{\Delta\Sigma_i}{\Delta T_m}$ und die Werte <Temperatur_i> die jeweiligen maximalen Temperaturen. Auch hier ist wieder zu beachten, dass die Korrekturen der Wirkungsquerschnitte nicht über die größte angegebene Temperatur hinaus vorgenommen werden.

Die Auswahl des jeweils genutzten Rückkopplungsmodells erfolgt mit dem Parameter $\$flags$ /HES 09/. Da nur eines der beiden Modelle ausgewählt werden kann, ergibt sich kein Konflikt bei der Angabe des Parameters $\$stkmod$.

Dieses zweite Modell hat den Vorteil, dass es für die Änderungen der Wirkungsquerschnitte generell eine bessere Approximation wiedergibt als dies im ersten Modell der Fall ist. Allerdings besteht ein größerer Aufwand in der Bestimmung der notwendigen Koeffizienten. Insbesondere müssen die in den Vorrechnungen herangezogenen Programme die Möglichkeit zur entsprechenden nuklidweisen Kondensierung der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte aufweisen. Zudem werden alle Wirkungsquerschnitte durch Rückkopplungen variiert, wodurch die numerische Stabilität des Codes mit höherem Maß beeinflusst werden kann, als dies mit dem ersten Modell zu erwarten ist.

3.1.3 Zusätzliche Erweiterungen

Aufgrund der in den Kapiteln 3.1.1 und 3.1.2 beschriebenen Erweiterungen des Exkursionscodes ergaben sich weitere notwendige Anpassungen. Zusätzlich wurden Verbesserungen zur numerischen Stabilität des Codes vorgenommen. Im Einzelnen waren dies die folgenden Schritte:

- Die Wahl der Zeit, die vom aktuellen Rechenschritt zum nächsten Rechenschritt überbrückt wird, wird in PUNKT-V6 dynamisch anhand der Änderungen verschiedener Variablen vom vorangegangenen Rechenschritt zum aktuellen Rechenschritt ermittelt. Zu diesen Variablen zählen u. a. auch die makroskopi-

schen Wirkungsquerschnitte. Entsprechend den Erweiterungen, die an der Handhabung der Wirkungsquerschnitte vorgenommen wurden, wurde die Bestimmung der Zeitintervalle zwischen den Rechenschritten entsprechend angepasst, d. h. die neu definierten Wirkungsquerschnitte wurden in den Algorithmus integriert.

- In der bisherigen Version 2008 wurden zu Beginn der eigentlichen Exkursionschritte einige Rechenschritte benötigt, um verschiedene Werte, z. B. den anfänglichen Neutronenfluss, der sich aus der externen Quelle und der unterkritischen Multiplikation ergibt, sowie die sich daraus ergebende Leistung und Temperatur in einen Gleichgewichtszustand zu überführen. Dies wurde dahingehend überarbeitet, dass nun bereits vor dem ersten Rechenschritt eine verbesserte Initialisierung der Variablen vorgenommen wird. So wird z. B. ein Gleichgewichtszustand für den Neutronenfluss anhand der reaktordynamischen Neutronenbilanzgleichung aus den verfügbaren Anfangsdaten ermittelt (/HES 09/, Gl. 1), woraus auch bereits eine anfängliche Leistung abgeschätzt werden kann. Dadurch wird der Gleichgewichtszustand für die übrigen Werte nun bereits nach drei bis vier Rechenschritten erreicht.
- Konstanten in den verwendeten Gleichungen bzw. numerischen Operationen in PUNKT-V6 wurden in Version 2013 explizit in der Genauigkeit „double precision“ angegeben, um sicherzustellen, dass die betreffenden numerischen Operationen tatsächlich in „double precision“ ausgeführt werden.
- Die verwendeten Gleichungen bzw. numerischen Operationen wurden auf mögliche unnötige Operationen überprüft, welche gegebenenfalls durch Umstellung der Gleichungen entfernt wurden.

3.1.4 Auswertung und Ankopplung der Vorrechnungen

Durch die in diesem Vorhaben vorgenommenen Erweiterungen des Exkursionscodes sind auch neue Anforderungen an die vom Anwender durchzuführenden Vorrechnungen zu stellen. Insbesondere ist bei der Kondensierung der Wirkungsquerschnitte nun eine nuklidweise Kondensierung in Eingruppen-Wirkungsquerschnitte notwendig, um anschließend eine entsprechende Zusammenführung der Wirkungsquerschnitte, wie sie in PUNKT-V6 Version 2013 unterteilt werden, zu gewährleisten.

In früheren Vorhaben wurde dabei zuletzt auf das zweidimensionale deterministische Transportprogramm DORTABLE zurückgegriffen /HES 09/. Dies liefert aber eine Kon-

densierung der Wirkungsquerschnitte in Raumzonen, welche in der jetzigen Erweiterung von PUNKT-V6 Version 2013 so nicht mehr verwendet werden kann. Prinzipiell vergleichbare Funktionalitäten wie das Programm DORTABLE liefern alternativ auch die ein- bzw. zweidimensionalen deterministischen Transportprogramme XSDRN und NEWT aus dem SCALE-Softwarepaket. /SCA 11/. Mit diesen ist im Gegensatz zu DORTABLE aber auch die nuklidweise Kondensierung der Wirkungsquerschnitte in einfacher Weise möglich, weshalb in den später beschriebenen Test- und Vergleichsrechnungen diese Programme für die benötigten Vorrechnungen genutzt werden.

Zur Vereinfachung und Automatisierung der Auswertung dieser Vorrechnungen wurde das Modul „extractXSFromNEWT.py“ erstellt, mit dem die Resultate der Transportrechnungen eingelesen und die kondensierten Wirkungsquerschnitte in den folgend beschriebenen Schritten geeignet zusammengefasst werden können:

- Gesteuert wird dieses Modul mittels einer Konfigurationsdatei. In dieser sind die Zuordnungen der in den Vorrechnungen definierten Materialien zu den im PUNKT-V6 benötigten Wirkungsquerschnitten festzulegen. Dazu wurden die Konfigurationskommandos *start material* und *start mixing* definiert:

- Mit *start material* wird einem Wirkungsquerschnitt in PUNKT-V6 die zugehörigen Materialnummern der Vorrechnungen zugeordnet. Anzugeben ist dies in der Form

```
start material <XS>
<MaterialNo_1> <MaterialNo_2> ...
end material <XS>.
```

Dabei ist <XS> die Bezeichnung des jeweiligen Wirkungsquerschnitts in PUNKT-V6. Möglich sind hier *fuel*, *moderator* und *poison*. Die Werte <MaterialNo_1> geben die Nummer der Materialien in den Vorrechnungen an. Die kondensierten Wirkungsquerschnitte der Vorrechnungen werden für die Materialien <MaterialNo_1> addiert und bei der Ausgabe der Ergebnisse der Bezeichnung <XS> zu gewiesen.

- Mit *start mixing* können für die Addition der Wirkungsquerschnitte der Materialien <MaterialNo_1> Skalierungsfaktoren für einzelne Nuklide definiert werden. Damit ist es möglich die verschiedenen Nuklide eines Materials ganz oder teilweise unterschiedlichen Wirkungsquerschnitten im PUNKT-V6 zuzuordnen. Anzugeben sind diese Skalierungsfaktoren in der Form

```
start mixing <MaterialNo_1>
<Nuklid-Id_1> <fracfuel_1> <fracmod_1> <fracpois_1>
```

<Nuklid-Id_2> <fracfuel_2> <fracmod_2> <fracpois_2>

...

end mixing <MaterialNo_i>.

Auch hier ist wieder <MaterialNo_i> die Materialnummer in der Vorrechnung, <Nuklid-Id_i> bezeichnet die das jeweilige Nuklid als 6-stellige Kennziffer bestehend aus dessen Atom- und Massenzahl und <fracfuel_i>, <fracmod_i> sowie <fracpois_i> geben die jeweiligen Anteile des Nuklids, die dem Spaltmaterial, dem Moderator oder den Neutronenabsorbern in PUNKT-V6 hinzugerechnet werden sollen, an.

Mit diesem Modul besteht nun die Möglichkeit, die Vorrechnungen bezüglich der kondensierten Wirkungsquerschnitte in einfacher Form auszuwerten und eine direkte für PUNKT-V6 verwendbare Einteilung zu erzeugen.

Zusätzlich wurden Module zum Auslesen weiterer Werte aus den Ergebnisdateien der Vorrechnung, wie z. B. dem Neutronenmultiplikationsfaktor, sowie zur Modifizierung der Eingabedateien für Vorrechnungen mit XSDRN und NEWT zur Verfügung gestellt. Letztere können dazu verwendet werden, um aus einer bestehen Eingabedatei, die z. B. den Anfangszustand der zu betrachtenden Spaltmaterialanordnung beschreibt, automatisiert die Eingabedateien für Vorrechnungen mit veränderten Materialdichten zu erstellen, um mit diesen die Reaktivitätsänderungen aufgrund temperaturbedingten Dichteveränderungen zu bestimmen.

Durch Kopplung dieser Module ist es nun auch möglich, die notwendigen Vorrechnungen in weitgehend automatisierter Form durchzuführen und auszuwerten sowie die Resultate direkt in die Eingabedateien von PUNKT-V6 zu übertragen. Aufgrund der Vielzahl der möglichen Spaltmaterialanordnungen und Szenarien, die unter Endlagerbedingungen denkbar sind, wurde bislang auf eine starre Kopplung der Module verzichtet. Derzeit ist es bei Bedarf noch die Aufgabe des Anwenders die Module in der notwendigen Form in einem eigenen Skript aneinanderzufügen.

3.1.5 Erweiterung der graphischen Darstellung der Ergebnisse

Die Ausgabe der Resultate der eigentlichen Exkursionsrechnung erfolgt in Form von umfangreichen Textdateien, in denen die errechneten Werte für Neutronenmultiplikationsfaktor, makroskopische Wirkungsquerschnitte, Temperaturen, Leistungen, etc. in

Abhängigkeit der Rechenschritte bzw. des simulierten Zeitverlaufs aufgelistet werden. Diese Werte wurden bislang mithilfe des Unix-Programms „jsplot“ zusätzlich graphisch dargestellt; diese wird jedoch auf den aktuellen, in der GRS vorhandenen Computern nicht mehr gepflegt. Die graphische Darstellung wurde deshalb um die Möglichkeit, die Ausgabedaten mit dem frei verfügbaren Datenanalysepaket ROOT /BRU 96/ zu verarbeiten und zu visualisieren, erweitert.

Das Softwarepaket ROOT /BRU 96/ wurde in den 1990er Jahren am European Council for Nuclear Research, CERN entwickelt und wird dort seit dem kontinuierlich erweitert. Zielsetzung dieser Entwicklung war bzw. ist die Erstellung eines modularen Softwarepakets zur effizienten statistischen Analyse großer Mengen komplexer experimenteller Daten. ROOT ist vor allem in der experimentellen Hochenergiephysik weit verbreitet und wird dort von verschiedensten Forschungsgruppen und Anwendern eingesetzt und aktiv weiterentwickelt. Es ist objektorientiert in C++ implementiert. Die Programmroutinen sind frei verfügbar und können sowohl direkt in eigene Programmcodes eingebunden, also auch mittels verschiedener Skriptsprachen bzw. über einen C++-Interpreter in Form sogenannter Makros angesprochen werden. Zudem ist die interaktive Nutzung über eine graphische Benutzeroberfläche möglich. Das Softwarepaket ROOT besteht mittlerweile aus einer große Bandbreite an Modulen. Ein wesentlicher Teil von diesen enthält umfangreiche Methoden zur statistischen Analyse von Daten, aber auch verschiedene Möglichkeiten zu deren graphischer Darstellung sowie spezielle Datenformate zum effizienten Einlesen und Schreiben der zu analysierenden Daten.

Von den Funktionalitäten, die ROOT bereitstellt, sind für den Exkursionscode PUNKT-V6 zunächst die Möglichkeiten zur graphischen Aufbereitung von Daten bedeutsam. Zu diesem Zweck wurden zusätzliche Programmmodule für PUNKT-V6 erstellt und in den Rechenablauf eingebunden:

- Das Modul „createROOTTreeFromOutputFiles.py“ dient dazu, die Ausgabedateien von PUNKT-V6 in ein ROOT-spezifisches Datenformat, einen sogenannten ROOT-Tree, zu übertragen und zu speichern. Dabei werden die Ergebnisgrößen in den PUNKT-V6-Ausgabedateien auf mehrfaches Auftreten überprüft und in jedem Fall nur einmal im ROOT-Tree abgelegt.
- Ein weiteres Modul, „createStandardPlotsFromROOTFile.py“, visualisiert die so gespeicherten Ergebnisse. Dazu werden die einzelnen Ergebnisgrößen jeweils als Funktion der Rechenschritte und der simulierten Exkursionszeit als Graphen aufgetragen. Die Darstellung erfolgt sowohl linear als auch einfach und doppelt

logarithmisch, um dem Anwender verschiedene Ansichten der zeitlichen Verläufe der dargestellten Ergebnisgrößen zur Verfügung zu stellen. Dabei dienen insbesondere die doppelt logarithmisch dargestellten Graphen dazu, den Beginn der Exkursion gut sichtbar darzustellen, welcher bei linearen Darstellungen oft nicht zu erkennen ist. Dagegen vermitteln die linearen Abbildungen oft einen besseren Eindruck bezüglich der Relationen der einzelnen Exkursionsphasen zueinander. Die Graphen werden sowohl als Grafikdatei (z. B. Portable Network Graphics, „png“) als auch in einem ROOT-spezifischem Format gespeichert. Letzteres ermöglicht es z. B. mithilfe der graphischen Benutzeroberfläche von ROOT nachträglich interaktiv Veränderungen an der Darstellung vorzunehmen. So können Beschriftungen, Skalierungen, Legende, usw. angepasst werden.

- Ein drittes Modul, „createComparisonPlots.py“, ist eine Variante des oben beschriebenen zweiten Moduls „createStandardPlotsFromROOTFile.py“. Es ermöglicht den Vergleich zweier Rechenläufe miteinander. Die Visualisierung der Resultate erfolgt dazu analog wie oben beschrieben. Zu den Resultaten des aktuellen Rechenlaufs werden aber zusätzlich die Resultate eines früheren Rechenlaufs eingelesen und die Darstellungen der einzelnen Ergebnisgrößen enthalten deren zeitliche Verläufe für beide Rechenläufe. Auf diese Weise ist ein direkter Vergleich der Resultate möglich.

Neben den Möglichkeiten zur graphischen Darstellung der Resultate bietet die Verwendung von ROOT auch für zukünftige Weiterentwicklungen und Untersuchungen weitere Vorteile. Mit der Erstellung der sogenannten ROOT-Trees stehen die Resultate in einem effizienten Format für weitere Analysen zur Verfügung, dabei kann der Zugriff auf diese Datensätze, wie oben beschrieben, mittels vom Anwender erstellte Makros oder interaktiv mittels der graphischen Benutzeroberfläche erfolgen. So lassen sich die Datensätze auch rechnerisch auswerten, z. B. durch Bildung von Differenzen oder Verhältnisse der Ergebnisgrößen verschiedener Rechenläufe, Verknüpfung verschiedener Ergebnisgrößen miteinander, durch Parameteranpassungen (Fits) beliebiger Funktionen an die Verläufe der jeweiligen Ergebnisgrößen, usw.

3.1.6 Verifikations- und Testrechnungen

Die durchgeführten Weiterentwicklungen wurden durch Testrechnungen überprüft. Von diesen werden im Weiteren einige relevante Aspekte diskutiert.

Der Vergleich der Rechenergebnisse mit der bisherigen Version 2008 und der in diesem Vorhaben aktualisierten Version 2013 von PUNKT-V6 stimmen qualitativ bei entsprechender Anpassung bzw. „Nullsetzen“ der neu eingefügten Parameter überein. Die zu beobachtenden Unterschiede in den Resultaten beider Versionen lassen sich durch die durchgeführten Weiterentwicklungen erklären. Ein direkter Vergleich der einzelnen Rechenschritte ist nicht möglich, da die Zeitabstände dynamisch gewählt werden und sich die Wahlkriterien u. a. durch die vorgenommene zusätzliche Unterteilung der Wirkungsquerschnitte verändert haben.

Generell zeigen die durchgeführten generischen Tests die zu erwartenden Verhaltensweisen. **Abb. 3.1** zeigt die Leistungsentwicklung generischer Testrechnungen, bei denen für jeweils 10^6 s unterschiedliche Spaltmaterialzufuhr mit gleich langer Unterbrechung simuliert wurde. Dabei unterscheiden sich die Testrechnungen in den verwendeten Temperaturkoeffizienten zur Beschreibung des Dopplereffekts, für die Werte von $\Delta k/\Delta T = -1,0 \cdot 10^{-5} \text{ 1/K}$ (schwarze Kurve) und $\Delta k/\Delta T = -6,0 \cdot 10^{-5} \text{ 1/K}$ (rote Kurve) angenommen wurden. In den Zeiträumen ohne Spaltmaterialzufuhr nimmt der Spaltwirkungsquerschnitt und damit auch Leistung und Temperatur des Systems aufgrund des Abbrands ab. Durch die sinkende Temperatur verringert sich aber auch die Auswirkung der Reaktivitätsrückkopplungen, so dass dadurch der Absorptionswirkungsquerschnitt zurückgeht. Insgesamt wird so der Leistungsrückgang abgemildert. Im Fall geringer Reaktivitätsrückkopplungskoeffizienten ergeben sich hier sogar kurzzeitig wieder Leistungsanstiege. Inwieweit diese allerdings physikalisch begründet sind oder nur Artefakte des Reaktivitätsrückkopplungsmodells, lässt sich an dieser Stelle nicht definitiv entscheiden.

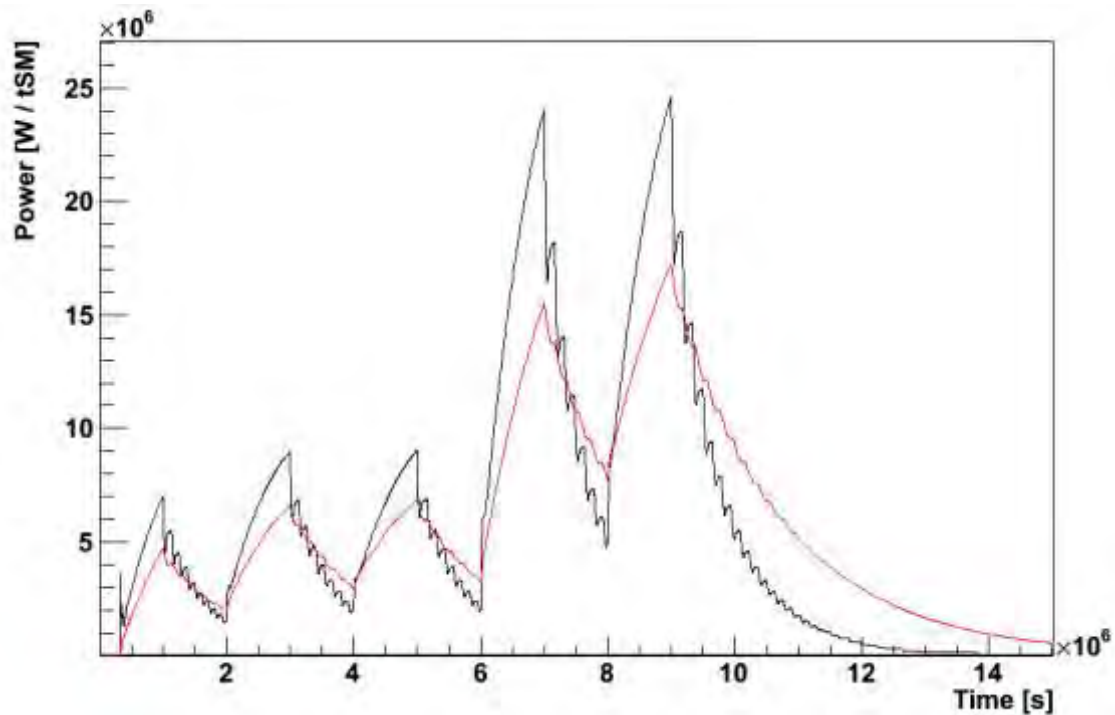


Abb. 3.1 Vergleich der Leistungsverläufe von Testrechnungen mit verschiedenen Dopplerkoeffizienten

Bei bestimmten Parameterkombinationen zur Berücksichtigung der Reaktivitätsrückkopplungen pro Wirkungsquerschnitt aufgrund von Dichteänderungen (Modell 2, Kapitel 3.1.2) treten allerdings deutliche, eindeutig unphysikalische Oszillationen in den Resultaten auf. Wie im Kapitel 3.1.2 bereits vermutet, stellt dieses Rückkopplungsmodell durch das gleichzeitige Beeinflussen mehrerer Größen höhere Anforderungen an die numerische Stabilität des Codes. Im Rahmen dieses Vorhabens konnte das Auftreten solcher Oszillationen nicht vollständig beseitigt werden.

Abb. 3.2 zeigt Beispiele für Leistungsverläufe verschiedener Testrechnungen mit unterschiedlichen Werten für die Rückkopplungskoeffizienten. Im letzten Fall treten die erwähnten Oszillationen auf. Eine Systematik beim Auftreten dieser Oszillationen oder deren Ursache konnte bislang nicht eindeutig bestimmt werden.

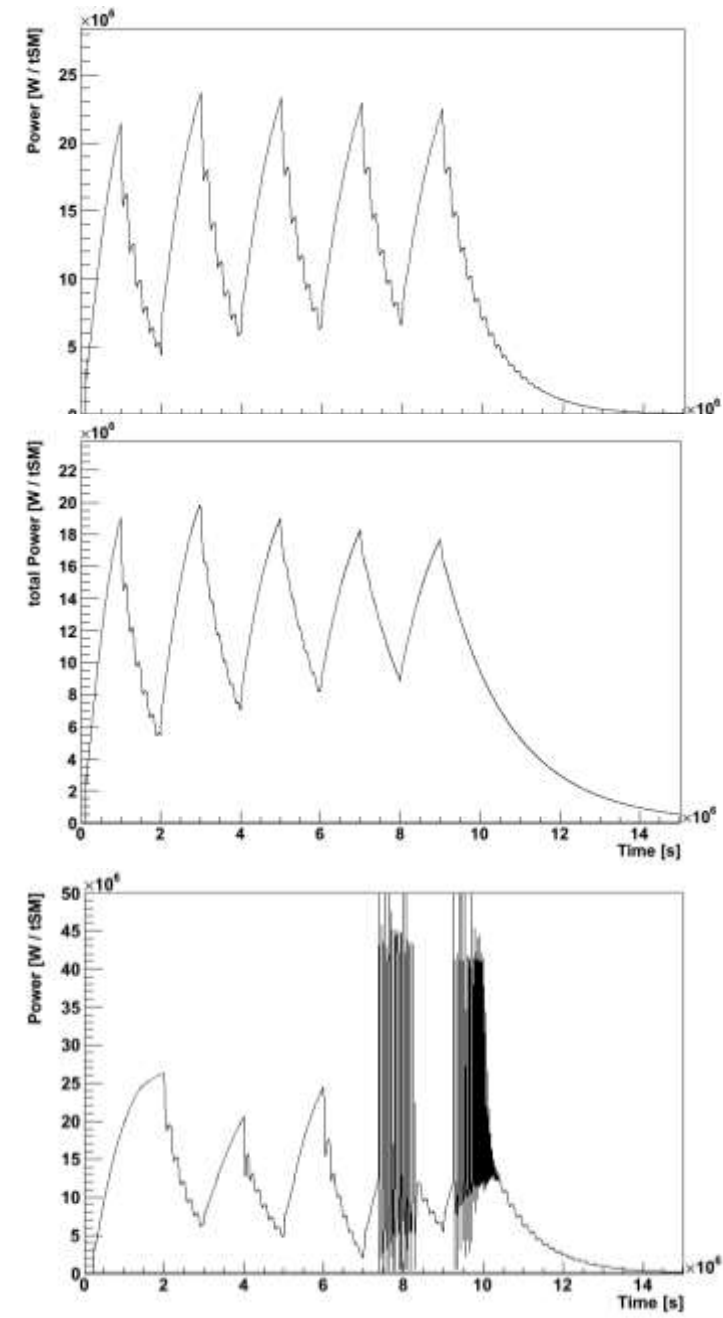


Abb. 3.2 Beispiele einer Leistungsverteilung einer Testrechnung mit einem Dopp-
 lerkoeffizient von $\Delta k/\Delta T = 2 \cdot 10^{-5} \text{ 1/K}$ und verschiedenen Dichterück-
 kopplungskoeffizienten

3.2 Vergleichsrechnungen am Beispiel der Oklo-Naturreaktoren

Als weiterer Test der aktualisierten Version 2013 von PUNKT-V6 und insbesondere der durchgeführten Weiterentwicklungen wurden Rechnungen zu den Naturreaktoren in Oklo durchgeführt. Als Vergleichsgrundlage wurden aktuelle britische Veröffentlichungen zu diesem Thema genutzt.

3.2.1 Die Oklo-Naturreaktoren

Vor zwei Milliarden Jahren fanden im Franceville Becken im afrikanischen Gabun (**Abb. 3.3**) in mehreren Bereichen der dortigen unterirdischen Uranerzlagerstätten nukleare Kettenreaktionen statt, die sich über einen Zeitraum von bis zu einer Million Jahren erstreckten. Entdeckt wurde dieses Phänomen im Jahr 1972. In der französischen Isotopentrennanlage Pierrelatte wurde bei einer routinemäßigen Isotopenanalyse einer Uranerzprobe aus der Mine in Oklo ein ^{235}U Gehalt von 0,7171 % festgestellt. Dieser Wert wich signifikant von der natürlichen Zusammensetzung des Urans mit einem ^{235}U Anteil von 0,7202 % ab. Darauf wurden weitere Abweichungen identifiziert und untersucht, ob Messfehler oder unbeabsichtigte Vermischungen mit abgereichertem Uran aufgetreten sind. Als dies ausgeschlossen werden konnte, erschienen natürliche Kernspaltungen als die einzig logische Erklärung. Analysen zur Isotopenzusammensetzung weiterer Elemente wie Neodym, Zink und Dysprosium zeigten zudem Abweichungen zur natürlichen Zusammensetzung, die nur durch ein vorhandenes Neutronenfeld hervorgerufen werden konnten und bestätigten somit die Existenz früherer kritischer Konfigurationen. Bei weiteren Untersuchungen wurden in Oklo insgesamt 17 Bereiche identifiziert, in denen offensichtlich selbst erhaltende Kettenreaktionen stattgefunden hatten.

Der Urangehalt im Erz der Oklo-Mine beträgt im Mittel 0,2 – 1,0 %. Probebohrungen ergaben, dass aber lokal Urankonzentrationen von 20 bis 70 % vorlagen. Diese uranreichen Erztaschen entstanden aus einer Verkettung geologischer und geochemischer Ereignisse. Infolge von tektonischen Bewegungen trat Rissbildung in den Sandsteinschichten auf und ermöglichte die Zirkulation von Grundwasser. Unter oxidativen Umgebungsbedingungen ging das Uran in wasserlösliche Oxidverbindungen über und wurde migrationsfähig. Die uranhaltige Lösung akkumulierte sich in größeren Spalten, in denen durch das Vorhandensein organischen Materials reduktive Umgebungsbedingungen herrschten. Infolgedessen fiel das Uran aus der Lösung aus, und es blieb

hochkonzentriertes Erz zurück. Solche Bereiche erstreckten sich typischerweise über eine Länge von 10 bis 40 m, hatten eine Breite von 10 m und eine Schichtdicke von 0,1 bis 0,5 m.

Damit es in diesen Taschen zu selbsterhaltenden Kettenreaktion kommen konnte, mussten neben dem hohen Urangehalt des Erzes weitere Bedingungen erfüllt sein. Mithilfe der verschiedenen Halbwertszeiten von ^{235}U und ^{238}U lässt sich die Zusammensetzung des Urans vor zwei Milliarden Jahren berechnen. Mit einem ^{235}U Anteil von ca. 3,6 % entspricht die damalige Anreicherung in etwa der aktueller Urandioxidbrennstoffe kommerzieller Leistungsreaktoren /SME 05/. Weiterhin mussten ausreichend leichte Nuklide zur Moderation der Neutronen vorhanden sein; mit dem Zutritt von Wasser wurde diese Bedingung erfüllt. Ferner bewirkten die Risse und Porosität des Sandsteines gekoppelt mit der Verbindung zum Grundwasser eine ständige Zirkulation des Moderators. Einen weiteren Umstand stellte die geringe Konzentration von natürlichen Neutronengiften wie Bor und Gadolinium dar. Letztlich musste das Stoffgemisch unter den jeweiligen Randbedingungen ein kritisches Volumen aufweisen. Ein kritisches Volumen liegt vor, wenn die Verlustrate an Neutronen durch Absorption und durch Leckage über die Randbereiche nicht größer ist als die Produktionsrate durch Kernspaltungen. Die Verlustrate infolge der Leckage hängt dabei wesentlich von der Geometrie d. h. dem Verhältnis von Oberfläche zu Volumen ab.

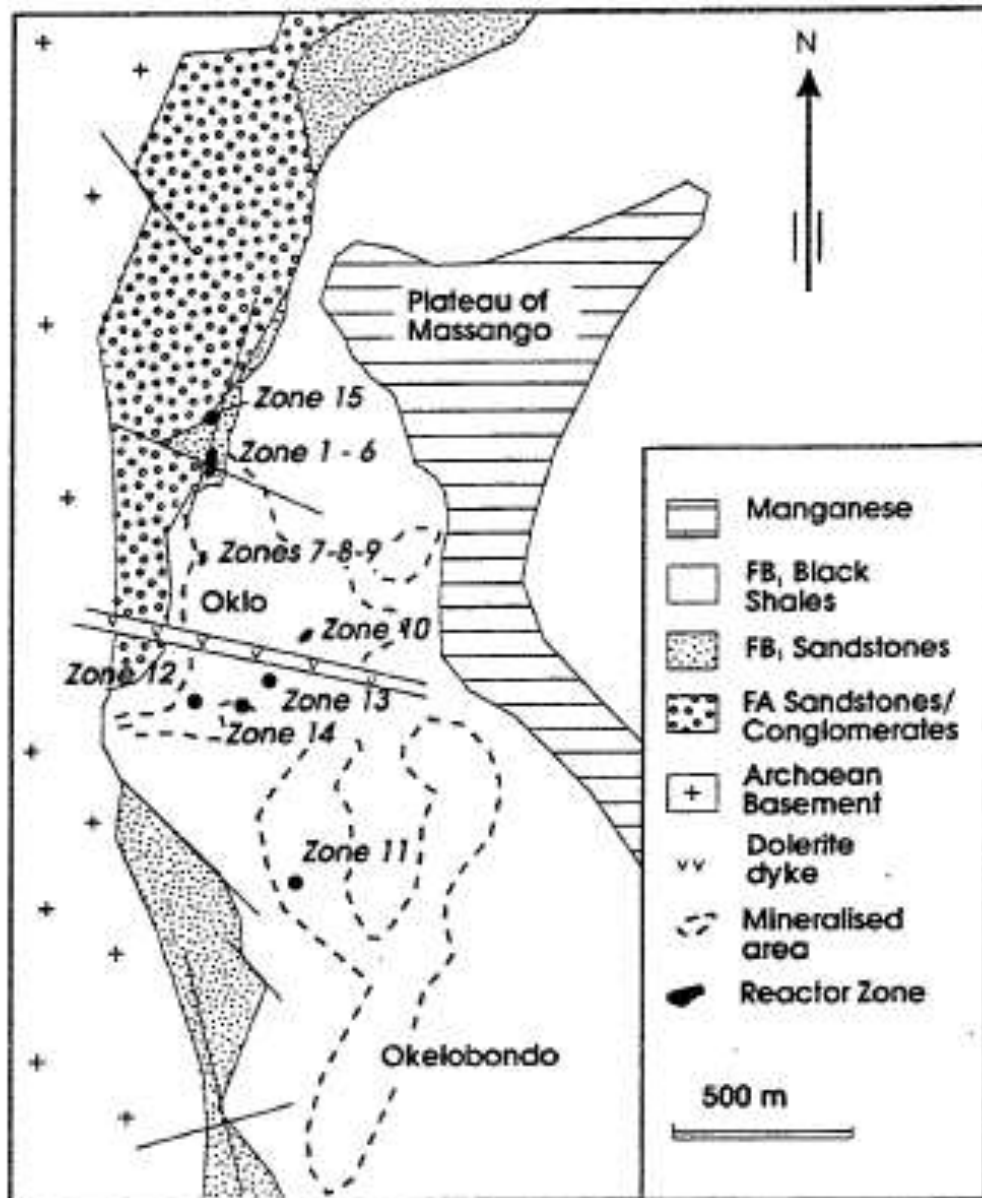


Abb. 3.3 Überblick über die Oklo-Reaktorzonen im Franceville Becken, Gabun

3.2.2 Bisherige Arbeiten zur Modellierung und der Simulation der Kritikalität ausgewählter Reaktorzonen

3.2.2.1 Französische Arbeiten

Im Jahr 1991 veröffentlichte der Franzose R. Naudet die Arbeit „Oklo: Des Reacteurs Nucleaires Fossiles“ /NAU 91/, basierend auf Daten des französischen CEA (Commissariat à l’Energie Atomique), welches nach der Entdeckung des Oklo-Phänomens umfangreiche geologische und geochemische Untersuchungen in der Mine sowie später weitere Analysen zum Oklo-Phänomen durchführte. Die Arbeit von Naudet ist nicht frei verfügbar, doch findet man die wesentlichen Punkte der Vorgehensweise und die gewonnenen Erkenntnisse in dem technischen Bericht „Criticality in a high level waste repository“ von V. M. Oversby /OVE 96/.

Naudet beschäftigte sich vorrangig mit der sogenannten „Reaktorzone 2“. Das lag zum einen an der vergleichsweise frühen Entdeckung des Bereichs. Zum anderen war die Form der Zone im Laufe der Zeit nicht allzu stark tektonisch verworfen worden und ist zudem chemisch stabil geblieben. Der gut erhaltene Endzustand der kritischen Formation erlaubte deshalb im Vergleich zu den anderen Reaktorzonen genauere Rückschlüsse auf die damaligen Bedingungen. Komplex gestaltete sich die Erstellung eines adäquaten Modells zur Kritikalität und zum Reaktionsverlauf, da nur Informationen aus dem vorgefundenen Zustand der Gesteinszusammensetzung vorliegen. In der Zeit nach der kritischen Exkursion dieser Zone wurde vor allem poröses Gestein durch das Gewicht der oberen Gesteinsschichten verdichtet, so dass die vorgefundenen Schichtdicken und Volumenanteile nicht den damaligen Größenordnungen entsprechen. Dementsprechend müssen bei der Modellerstellung zahlreiche Annahmen bezüglich der Porosität des Sandsteins und folglich dem vorhandenen Wasserinventar getroffen werden, was sich wiederum auf die Moderation und die Kritikalität des Systems auswirkt. Des Weiteren sind die Erzsichten durch eine ausgeprägte Heterogenität gekennzeichnet. So variiert der Urangehalt zwischen den verschiedenen Zonen, sowie entlang einer einzelnen Zone selbst. Auf Basis geologischer Untersuchungen rekonstruierte Naudet eine Entsandung der Sandsteinschichten infolge hydrothormaler Zirkulation. Dies führte einerseits zur Erhöhung der Urankonzentration und andererseits zur erhöhten Moderation im Falle des Auffüllens der entstandenen Freiräume mit Wasser. Beide Effekte erhöhten die Reaktivität des Systems.

Das von Naudet beschriebene Modell besaß laut /OVE 96/ die Geometrie einer flachen Scheibe, bei der die Neutronenleckage nur in einer Dimension von Bedeutung ist. Die Umgebungsbedingungen wurden mit der Temperatur $T = 160\text{ °C}$ und dem Druck $p = 500\text{ bar}$ angenommen. Infolge der Exkursion könnte sich die Spaltzone bei den getroffenen Modellannahmen auf $400\text{ bis }500\text{ °C}$ erhitzt haben. Die präsentierten Analysen belaufen sich größtenteils auf die Bestimmung der kritischen Höhe der Scheibe mittels eines Monte Carlo-Codes. Durch entsprechende Annahmen zur Porosität und zum Wassergehalt gelang der Nachweis des Potentials für einen kritischen Zustand. Die Parametervariationen umfassten den Urangehalt im Erz, die vorhandene Menge an Wasser und die Konzentration an Neutronengiften. Es finden sich in /OVE 96/ keine Auszüge zur Methodik der durchgeführten Exkursionsrechnungen.

3.2.2.2 Britische Arbeiten

Für Untersuchungen zur Kritikalität im Endlager hat die britische Firma Serco im Rahmen des UCuRC-Programmes (Understanding Criticality under Repository Conditions) der NDA (Nuclear Decommissioning Authority) in Großbritannien mit dem sogenannten „Quasi-Steady-State“-Modell (QSS-Modell) ein Rechenverfahren entwickelt, mit dem das Langzeitverhalten einer postulierten, quasi-stationären Kritikalität im Endlager besser verstanden werden soll. Mithilfe von Vergleichen zu Überlegungen zum Oklo-Phänomen wurde versucht, das Programm soweit zu validieren, wie es anhand vorhandener Daten möglich war. Die Dokumentation erfolgte in einem öffentlich zugänglichen technischen Bericht /SER 11/.

Mit dem quasi-stationären Ansatz werden Transienten eines Systems durch eine Abfolge aus Gleichgewichtszuständen beschrieben. Der Ansatz bietet sich für sehr langsam ablaufende Prozesse wie das Oklo-Phänomen an. Das britische Modell basiert auf einer komplexen Reaktivitätsfunktion, in der die Abhängigkeiten der Reaktivität von Temperatur, Abbrand und Nuklidzusammensetzung implementiert sind. Über die Variation der genannten Parameter wurde eine Matrix aus stationären Funktionswerten generiert, auf welche das Rechenprogramm zurückgreift. Zwischen den einzelnen Werten findet eine lineare Interpolation statt.

Laut den britischen Recherchen /SER 11/ hatte die „Reaktorzone 2“ eine Länge von 14 m und eine Schichtdicke von unter 1 m . Der integrale Fluss belief sich auf $1,45\text{E}+21\text{ n/cm}^2$ und war damit der höchste aller Spaltzonen. Der Bereich zeichnete

sich bei Untersuchungen durch eine völlige Entsandung aus. Zurückgeblieben ist bis heute nur noch Tongestein. Das Inventar an Uran betrug ca. 200 tSM, und mit ca. 1,4 tSM wurden 0,7 % des Urans verbraucht.

Als geometrische Darstellung wurde ein Zylinder mit vertikaler Achse gewählt, welcher die linsenförmigen Spaltzonen in guter Näherung abbildet. Nach der Bestimmung kritischer Abmessungen mit dem Monte Carlo-Code MONK und basierend auf der Materialzusammensetzung nach Naudet wurde für die weiteren Simulationen ein Zylinder mit 47,5 cm Höhe und einem Radius von 360 cm als Referenzmodell verwendet. Als Vereinfachungen wurden die Spaltzone als homogenisiert und die Temperaturverteilung als konstant angenommen. Zum Hervorrufen eines transienten Verhaltens ist die Auslenkung des stationären Systems durch eine Änderung der Reaktivität nötig. Der Zulauf von Spaltmaterial wäre möglich gewesen, wurde in der vorliegenden Untersuchung aber nicht verfolgt. Ein Anstieg der Reaktivität durch Erhöhung der Porosität war programmtechnisch nicht möglich. Man entschied sich für die Option, einem nahezu kritischen System einen „Kick-Start“ zu geben, indem man 1 % der Anfangskonzentration an ^{10}B entfernte.

Die Ergebnisse der Simulationen decken sich in guter Näherung mit den rekonstruierten Werten für die Spaltzone 2 und mit den Ergebnissen von Naudet. Die mittlere Gesamtleistung beläuft sich auf ca. 1,5 kW (**Abb. 3.4**) bei einem Abbrand von 0,9 % des Urans bzw. 20 % des ^{235}U (**Abb. 3.6**).

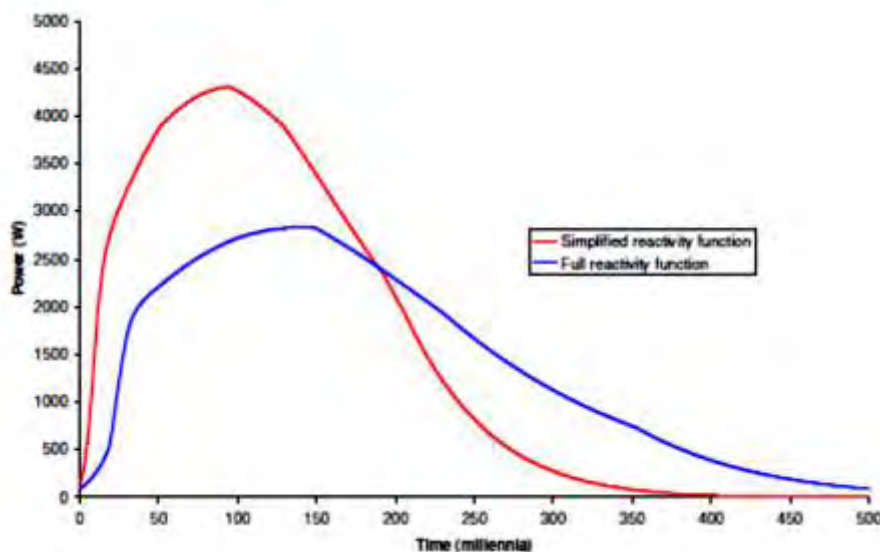


Abb. 3.4 Zeitlicher Verlauf der Leistung in der Oklo Reaktorzone 2 nach dem QSS-Modell

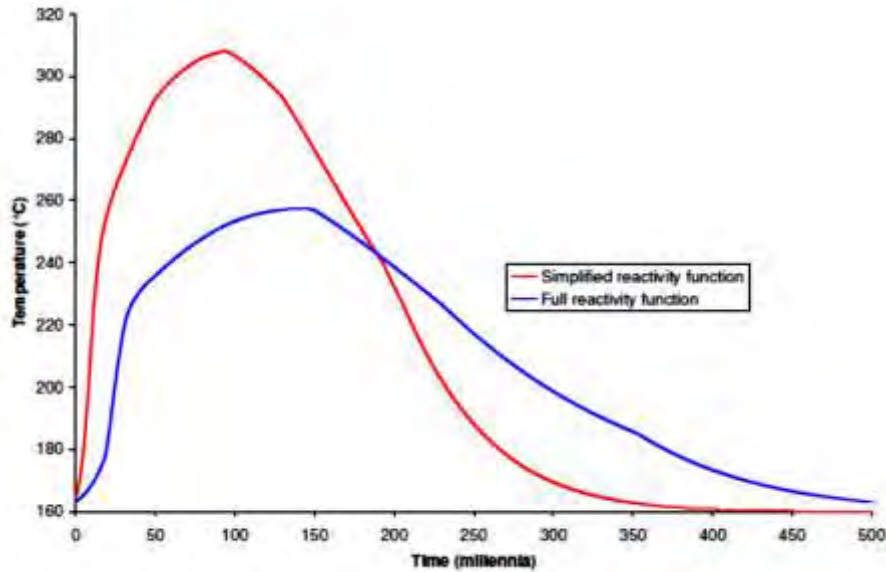


Abb. 3.5 Zeitlicher Verlauf der Temperatur in der Oklo Reaktorzone 2 nach dem QSS-Modell

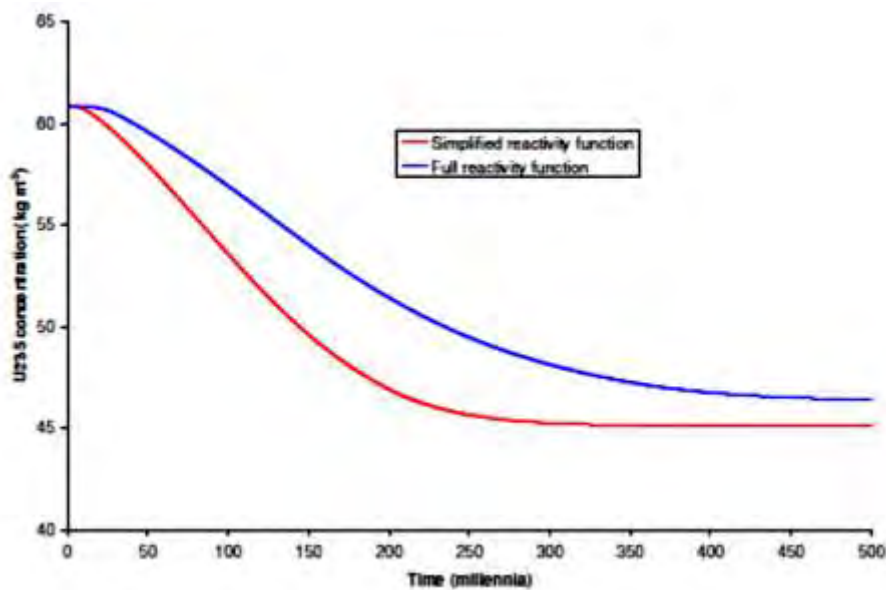


Abb. 3.6 Zeitlicher Verlauf der ²³⁵U Konzentration in der Oklo Reaktorzone 2 nach dem QSS-Modell

3.2.3 Nachrechnungen mit dem Exkursionscode PUNKT-V6

Als Grundlage für die eigenen Nachrechnungen mit PUNKT-V6 Version 2013 wurden die in Kapitel 3.2.2 beschriebenen Arbeiten genutzt. Dort wurde im Simulationsverlauf die sich selbst erhaltende Kettenreaktion durch die positiven Reaktivitätseffekte der Änderung der Gesteinszusammensetzung initiiert. Dazu sind hier zunächst entspre-

chende Vorrechnungen notwendig. So bedarf es zweier Systemzustände, ein geringfügig unterkritisches System mit einem Multiplikationsfaktor $k_{\text{eff}} < 1$ und ein kritisches System mit $k_{\text{eff}} = 1,0$, um den Übergang vom unterkritischen in das kritische System im PUNKT-V6 über die zeitlich variable Zugabe von makroskopischen Wirkungsquerschnitten zu ermitteln. Deshalb müssen mithilfe eines geeigneten Programmes die effektiven Multiplikationsfaktoren und die kondensierten Eingruppen-Wirkungsquerschnitte für verschiedene Materialzusammensetzungen sowie die Zuflussraten berechnet werden.

3.2.3.1 Ermittlung einer kritischen Anordnung

Zur Ermittlung einer kritischen Anordnung wurden die ein- bzw. zweidimensionalen Neutronentransportprogramme XSDRN und NEWT aus dem Codepaket SCALE 6.1 genutzt. Gemäß den Erkenntnissen zur Geometrie der Erztaschen wurde als Modell (**Abb. 3.7**) für die Spaltzone eine unendliche lange Platte mit einer Stärke von 1 m verwendet. Das Material innerhalb der Schicht ist homogen verteilt und besteht aus den Bestandteilen Uranoxid, Sandstein und (freiem) Wasser. Die Platte ist ihrerseits von zwei 2,5 m dicken Schichten aus Sandstein umgeben. Als Ausgangszusammensetzung wurden die in der Literatur /SER 11, NAU 91/ angegebenen Werte der **Tab. 3.1** verwendet.

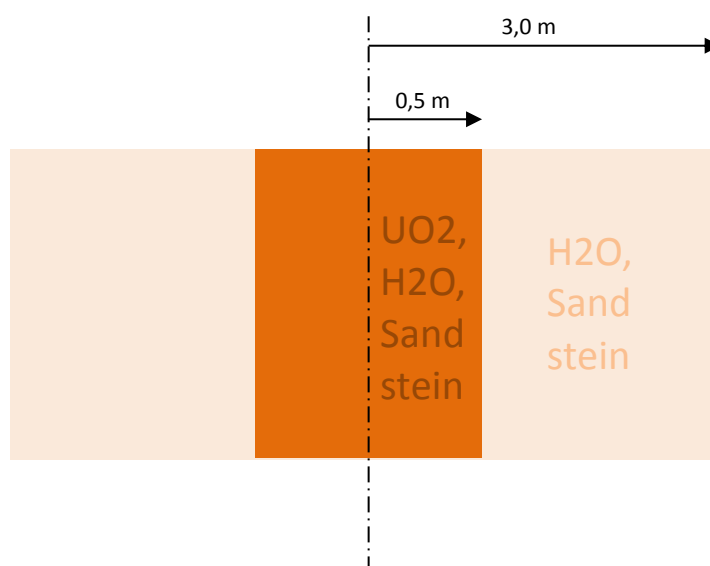


Abb. 3.7 Geometrisches Modell der Oklo Spalt- und Randzone

Tab. 3.1 Materialzusammensetzung der Oklo Spaltzone 2

Material	Nuklide	Konzentration in g/cm ³	Konzentration in %
Gestein	Wasserstoff (gebund. H ₂ O)	1,310E-02	0,374
	Sauerstoff (gebund H ₂ O)	1,040E-01	2,970
	Si	2,103E-01	6,005
	Al	1,592E-01	4,546
	Fe	1,386E-01	3,958
	Mg	5,779E-02	1,650
	K	2,210E-02	0,631
	Mn	1,031E-02	0,294
	O	4,664E-01	13,318
			Σ= 33,746
Neutronengifte	Gd-155	2,964E-06	8,464E-05
	Gd-157	3,175E-06	9,066E-05
	Sm-149	2,859E-06	8,164E-05
	B-10	5,323E-05	1,520E-03
		Σ= 1,777E-03	
Spaltmaterial	U-235	6,088E-02	1,738
	U-238	1,710E+00	48,829
	O	2,382E-01	6,802
		57,369	
freies Wasser (Porenwasser)	H	3,481E-02	0,994
	O	2,763E-01	7,890
		Σ= 8,884	
		Σ= 3,502E+00	

Die Randzone wurde vereinfacht ohne Urangehalt und mit dem gleichen Verhältnis von Gestein und freiem Wasser modelliert. Die Temperatur wurde nach /NAU 91/ bzw. /OVE 96/ zu 160 °C angesetzt. Der erste Versuch mit der in **Tab. 3.2** aufgeführten Zusammensetzung ergab einen deutlich unterkritischen k_{eff} -Wert von 0,9244. Infolge dessen wurden die Zusammensetzungen der Spalt- und Randzonen leicht variiert; die entsprechenden Ergebnisse sind in Tab. 3.2 dokumentiert. Die Konfigurationen 2-14 und 2-15 wurden für die weiteren Berechnungen als geeignet identifiziert.

Bei konstantem Urangehalt wird zwischen beiden Zuständen ein Teil des Gesteins durch Wasser ersetzt. Durch die gestiegene Moderation erhöht sich der Multiplikationsfaktor von 0,98626 (unterkritisch) auf 1,014 (überkritisch). Der Vorgang modelliert das eingangs beschriebene Kritikalitätsphänomen der Oklo-Spaltzonen. In den XSDRN- bzw. NEWT-Rechnungen wurden für jedes Nuklid die mikroskopischen Eingruppen-Wirkungsquerschnitte für Spaltung und Einfang ermittelt, mit welchen durch Multiplikation mit den jeweiligen Kernzahldichten die makroskopischen Spalt- und Einfangsquerschnitte der verwendeten Nuklide berechnet wurden.

Tab. 3.2 Mit XSDRN berechnete Werte für k_{eff} für die Exkursionsmodellierung der Oklo Spaltzone 2 in Abhängigkeit der Materialzusammensetzung

Versuch#	Gifte	k xsdrn	Reaktorzone			Randzone	
			UO2	Gestein	H2O	Gestein	H2O
1	0.000017	0,924439	0,57	0,33	0,088	0,79	0,21
2	nein	0,944794	0,57	0,33	0,088	0,79	0,21
2-2	nein	0,94275	0,57	0,33	0,088	0,79	0,21
2-3	nein	0,941991	0,57	0,33	0,088	0,66	0,34
2-4	nein	0,931293	0,6	0,31	0,088	0,71	0,29
2-5	nein	0,942676	0,6	0,3	0,1	0,71	0,29
2-6	nein	1,000162	0,57	0,28	0,15	0,71	0,29
2-7	nein	0,963797	0,55	0,35	0,1	0,71	0,29
2-8	nein	0,973901	0,57	0,31	0,12	0,71	0,29
2-9	nein	0,973652	0,57	0,31	0,12	0,66	0,34
2-10	nein	0,974965	0,57	0,31	0,12	0,88	0,12
2-11	nein	1,009423	0,55	0,3	0,15	0,88	0,12
2-12	nein	1,008864	0,55	0,3	0,15	0,79	0,21
2-13	nein	0,983365	0,57	0,3	0,13	0,79	0,21
2-14	nein	1,01406	0,5	0,37	0,13	0,79	0,21
2-15	nein	0,986259	0,5	0,4	0,1	0,79	0,21
2-16	nein	0,998207	0,56	0,3	0,14	0,88	0,12
2-17	0.000017	0,985483	0,5	0,37	0,13	0,79	0,21

3.2.3.2 PUNKT-V6 Modell für die Spaltzone

Die Spaltzone für die Exkursionsrechnungen hat ein Volumen von 12 m³ und besteht aus Uran und Gestein. In den weiteren Rechnungen wurden die Uranisotope als Spaltmaterial (statt UO₂) und die restlichen Bestandteile als Moderator zusammengefasst.

Materialangaben

Bei einer mittleren Dichte von $\rho = 3,5 \text{ g/cm}^3$ beträgt das Gesamtgewicht des homogenen Systems 42 t. Im PUNKT-Modell betragen die Massen des Urans und des Moderators jeweils 21 t (gem. **Tab. 3.2**, Versuch 2-14 und 2-15). Das Uran nimmt durch seine höhere Dichte von 10,2 g/cm³ ein Volumen von 2,058 m³ ein. Die Dichte der restlichen Materialien (Moderator) ergibt sich zu 2,11 g/cm³. Die Anfangstemperatur beträgt einheitlich 160 °C (430,15 K).

Den Startpunkt des Modells stellt der ausgewählte unterkritische Zustand (Versuch 2-15, **Tab. 3.2**) des Systems dar, dessen makroskopische Spalt- und Einfangsquerschnitte des Spaltmaterials und Absorptionsquerschnitt des Moderators als Anfangswerte der Exkursionsrechnung genutzt werden. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte sind in **Tab. 3.3** unter der Bezeichnung „OKLO-Start“ aufgeführt. Die gleiche Methodik wurde für den kritischen Zustand des Systems (Versuch 2-14, **Tab. 3.2**) angewandt. Die Wirkungsquerschnitte finden sich in der **Tab. 3.4** unter der Bezeichnung „OKLO-160“.

Tab. 3.3 Kernzahldichten und Wirkungsquerschnitte des Modells „OKLO-Start“

		N [1/b*cm]	Mikroskopischer WQ [b]			Makroskopischer WQ [1/cm]		
			Total	Absorption	Fission	Total	Absorption	Fission
Gestein	H	1,2740E-02	1,2898E+01	8,6068E-03		1,6431E-01	1,0965E-04	
	O	4,3694E-02	3,5242E+00	1,8345E-03		1,5399E-01	8,0156E-05	
	Si28	3,4433E-03	2,8021E+00	7,3277E-03		9,6484E-03	2,5232E-05	
	Si29	1,7492E-04	2,6222E+00	7,0476E-03		4,5868E-04	1,2328E-06	
	Si30	1,1545E-04	2,6538E+00	2,8941E-02		3,0638E-04	3,3411E-06	
	Al27	2,9427E-03	3,0506E+00	8,4477E-03		8,9770E-03	2,4859E-05	
	Fe54	7,2306E-05	7,4298E+00	8,9694E-02		5,3722E-04	6,4854E-06	
	Fe56	1,1350E-03	6,2097E+00	7,7063E-02		7,0483E-03	8,7469E-05	
	Fe57	2,6213E-05	7,1654E+00	8,3383E-02		1,8783E-04	2,1857E-06	
	Fe58	3,4885E-06	4,9074E+00	7,0132E-02		1,7120E-05	2,4465E-07	
	Mg24	9,3868E-04	4,8508E+00	3,5279E-03		4,5533E-03	3,3115E-06	
	Mg25	1,1884E-04	3,5833E+00	1,0094E-02		4,2582E-04	1,1995E-06	
	Mg26	1,3084E-04	3,2564E+00	1,2381E-03		4,2606E-04	1,6199E-07	
	K39	2,6292E-04	2,1190E+00	1,0063E-01		5,5711E-04	2,6457E-05	
	K40	3,2985E-08	3,5856E+00	9,4838E-01		1,1827E-07	3,1282E-08	
	K41	1,8974E-05	2,8208E+00	8,0609E-02		5,3522E-05	1,5295E-06	
	Mn55	9,5491E-05	2,7475E+01	5,6654E-01		2,6236E-03	5,4099E-05	
						Σ=	4,2764E-04	
	Spaltmaterial	U-235	4,0314E-04	3,0359E+01	2,0966E+01	1,6107E+01	1,2239E-02	8,4524E-03
U-238		1,0975E-02	1,1328E+01	7,9439E-01	8,1226E-02	1,2432E-01	8,7183E-03	8,9144E-04
					Σ=	1,7171E-02	7,3850E-03	
						Capture U	9,7857E-03	

Tab. 3.4 Kernzahldichten und Wirkungsquerschnitte des Modells „OKLO-160“

		N [1/b*cm]	Mikroskopischer WQ [b]			Makroskopischer WQ [1/cm]		
			Total	Absorption	Fission	Total	Absorption	Fission
Gestein	H	1,4149E-02	1,2948E+01	9,5104E-03		1,8321E-01	1,3456E-04	
	O	4,3306E-02	3,5168E+00	1,9121E-03		1,5230E-01	8,2805E-05	
	Si28	3,1851E-03	2,7977E+00	7,8792E-03		8,9107E-03	2,5096E-05	
	Si29	1,6180E-04	2,6235E+00	7,4237E-03		4,2449E-04	1,2012E-06	
	Si30	1,0679E-04	2,6514E+00	2,8805E-02		2,8314E-04	3,0760E-06	
	Al27	2,7220E-03	3,0315E+00	9,1140E-03		8,2519E-03	2,4808E-05	
	Fe54	6,6883E-05	7,3125E+00	9,6245E-02		4,8908E-04	6,4371E-06	
	Fe56	1,0499E-03	6,2574E+00	8,4006E-02		6,5697E-03	8,8199E-05	
	Fe57	2,4247E-05	7,0498E+00	8,9481E-02		1,7094E-04	2,1696E-06	
	Fe58	3,2268E-06	4,8601E+00	7,2977E-02		1,5683E-05	2,3548E-07	
	Mg24	8,6828E-04	4,8145E+00	3,7196E-03		4,1803E-03	3,2296E-06	
	Mg25	1,0992E-04	3,5609E+00	1,0751E-02		3,9142E-04	1,1818E-06	
	Mg26	1,2103E-04	3,2519E+00	1,3433E-03		3,9356E-04	1,6257E-07	
	K39	2,4320E-04	2,1363E+00	1,0745E-01		5,1955E-04	2,6132E-05	
	K40	3,0511E-08	3,6827E+00	1,0427E+00		1,1236E-07	3,1814E-08	
	K41	1,7551E-05	2,8237E+00	8,3772E-02		4,9558E-05	1,4703E-06	
	Mn55	8,8329E-05	2,7283E+01	6,0263E-01		2,4099E-03	5,3230E-05	
						Σ=	4,5403E-04	
	Spaltmaterial	U-235	4,0314E-04	3,2061E+01	2,2664E+01	1,7518E+01	1,2925E-02	9,1368E-03
U-238		1,0975E-02	1,1319E+01	8,1802E-01	8,3545E-02	1,2423E-01	8,9776E-03	9,1688E-04
					Σ=	1,8114E-02	7,9792E-03	
						Capture U	1,0135E-02	

Der Übergang vom unterkritischen zum kritischen Zustand wurde mit der Programmfunktion der additiven Zugabe von Wirkungsquerschnitten modelliert. Die Zugabe erfolgte kontinuierlich über eine vordefinierte Zeitspanne. Die entsprechenden Zulauftrafen ergaben sich aus den Differenzen der Wirkungsquerschnitte der Zustände OKLO-160 und OKLO-Start mit anschließender Division durch die gewählte Zeitspanne.

Zusammenfassung der Eingabewerte:

- Masse Spaltmaterial (m_{basis}) = 2,1E+07 g
- Volumen Spaltmaterial ($V_{volfuel}$) = 2,058E+06 cm³
- Masse Moderator ($m_{basisclm}$) = 2,1E+07 g
- Dichte Moderator (ρ_{hoclm}) = 2,11 g/cm³
- Temperatur Spaltmaterial (T_{tempf}) = 430,15 K
- Temperatur Moderator (T_{tempv}) = 430,15 K
- makroskopischer Spaltquerschnitt (Σ_{xfis}) = 0,007385 1/cm
- makroskopischer Einfangquerschnitt Spaltmaterial (Σ_{xscap}) = 0,0097857 1/cm
- makroskopischer Absorptionsquerschnitt Moderator (Σ_{xsmod}) = 4,2764E-04 1/cm

Eingaben zum Wärmeleitmodell

Die zeitliche Änderung der Spaltmaterial- und Moderatortemperatur infolge einer Leistungsexkursion werden maßgeblich von den Wärmekapazitäten und den Wärmeleitfähigkeiten der Materialien bestimmt. Die spezifische Wärmekapazität von UO₂ beträgt nach /DIR 11/ 0,24 J/g*K. Zur Ermittlung der Wärmekapazität des Sandstein-Wassergemisches (Moderator) wurden die einzelnen Wärmekapazitäten über die Massenanteile ins Verhältnis gesetzt. Der resultierende Wert beträgt 1,443 J/g*K. Der Wärmeübergangskoeffizient muss vom Nutzer nach /HES 09/ mittels Gl. (3.6) berechnet und manuell eingegeben werden.

$$\alpha = \frac{\lambda_a}{r_B} \quad (3.6)$$

Die Größe r_B bezeichnet dabei den zum Volumen des Spaltmaterials gehörenden Kugelradius, λ_a ist die Wärmeleitfähigkeit des Moderators. Diese ist für Sandstein in mehreren Literaturquellen mit ca. 2 W/m*K angegeben.

Es ergeben sich somit die Werte:

- $r_B = 0,789 \text{ m}$,
- $\alpha (\$alpha) = 2,5346 \text{ W/m}^2\text{K}$.

Temperaturkoeffizienten

In PUNKT-V6 sind die Reaktivitätsrückkopplungen aufgrund der Moderator Temperatur (Dichteänderung) als auch der Spaltmaterialtemperatur (Doppler-Effekt) zu modellieren. Die separate Ermittlung der Reaktivitätskoeffizienten beider Parameter ist aber mit den zur Verfügung stehenden Programmen (XSDRN, NEWT) für homogene Systeme nicht möglich, da sich dem Moderator und dem Spaltmaterial in einer Materialzone keine verschiedenen Temperaturen zuweisen lassen. Aufgrund der homogenen Verteilung von Spaltmaterial und Moderator kann für beide Materialien die Temperatur der Spaltzone im Wärmeleitmodell angenommen werden. Somit beziehen sich beide Rückkopplungen auf dieselbe Temperatur, und der Dopplereffekt kann bei der Bestimmung der Rückkopplungen aufgrund der Dichteänderungen mitberücksichtigt werden.

Zum Vergleich wurde in einem zweiten Ansatz eine heterogene Verteilung von Spaltmaterial und Moderator angenommen. D. h. die Rückwirkungen aufgrund von Dichteänderungen wurden nicht auf die Temperatur der Spaltzone, sondern auf die Temperatur der Reflektorzone des Wärmeleitmodells bezogen. Dazu wurde ein Koeffizient für den Dopplereffekt von $\Delta k/\Delta T = -1,8 \cdot 10^{-5} \text{ 1/K}$ übernommen, der typischerweise in früheren Rechnungen verwendet wurde /HES 09/ und die sonstigen Parameter beibehalten.

Zur Ermittlung der Temperaturkoeffizienten von Spaltmaterial und Moderator wurden die makroskopischen Wirkungsquerschnitte der kritischen Konfiguration bei einer Temperatur von $460 \text{ }^\circ\text{C}$ ($733,15 \text{ K}$) berechnet. Die Konfiguration wurde mit „OKLO-460“ bezeichnet und die Wirkungsquerschnitte finden sich in der **Tab. 3.5**. Die Differenzen zu der Konfiguration bei einer Temperatur von $160 \text{ }^\circ\text{C}$ (s. „OKLO-160“) ergaben die in **Tab. 3.6** aufgeführten Koeffizienten in der Form differentieller Wirkungsquerschnitte.

Tab. 3.5 Kernzahldichten und Wirkungsquerschnitte des Modells „OKLO-460“

		N [1/b*cm]	Mikroskopischer WQ [b]			Makroskopischer WQ [1/cm]		
			Total	Absorption	Fission	Total	Absorption	Fission
Gestein	H	9,1155E-03	1,2695E+01	6,1280E-03		1,1572E-01	5,5860E-05	
	O	4,0789E-01	3,5438E+00	1,6875E-03		1,4455E+00	6,8831E-04	
	Si28	3,1851E-03	2,8298E+00	5,9278E-03		9,0132E-03	1,8880E-05	
	Si29	1,6180E-04	2,6180E+00	6,1208E-03		4,2359E-04	9,9037E-07	
	Si30	1,0679E-04	2,6653E+00	3,0122E-02		2,8461E-04	3,2166E-06	
	Al27	2,7220E-03	3,1321E+00	6,7058E-03		8,5256E-03	1,8253E-05	
	Fe54	6,6883E-05	7,7914E+00	7,2272E-02		5,2111E-04	4,8337E-06	
	Fe56	1,0499E-03	6,0312E+00	5,8243E-02		6,3322E-03	6,1150E-05	
	Fe57	2,4247E-05	7,5147E+00	6,6755E-02		1,8221E-04	1,6186E-06	
	Fe58	3,2268E-06	5,0637E+00	6,1782E-02		1,6340E-05	1,9936E-07	
	Mg24	8,6828E-04	4,9779E+00	3,0839E-03		4,3222E-03	2,6777E-06	
	Mg25	1,0992E-04	3,6563E+00	8,4384E-03		4,0191E-04	9,2756E-07	
	Mg26	1,2103E-04	3,2749E+00	9,5401E-04		3,9634E-04	1,1546E-07	
	K39	2,4320E-04	2,0753E+00	8,2819E-02		5,0471E-04	2,0141E-05	
	K40	3,0511E-08	3,3196E+00	6,8950E-01		1,0128E-07	2,1037E-08	
	K41	1,7551E-05	2,8124E+00	7,0999E-02		4,9360E-05	1,2461E-06	
	Mn55	8,8329E-05	2,7860E+01	4,6499E-01		2,4608E-03	4,1072E-05	
						$\Sigma=$	9,1951E-04	
Spaltmaterial	U-235	4,0314E-04	2,5520E+01	1,6162E+01	1,2175E+01	1,0288E-02	6,5155E-03	4,9083E-03
	U-238	1,0975E-02	1,1388E+01	7,2946E-01	7,5976E-02	1,2499E-01	8,0057E-03	8,3382E-04
						$\Sigma=$	1,4521E-02	5,7422E-03
							Capture U	8,7790E-03

Tab. 3.6 Übersicht der ermittelten Temperaturkoeffizienten für Spaltmaterial und Moderator

	OKLO 160	OKLO 460	dXS/dT
XS fiss	7,9792E-03	5,7422E-03	
	Delta XS fiss	-2,2370E-03	-7,4568E-06
XS cap mod	4,5403E-04	9,1951E-04	
	Delta XS cap mod	4,6548E-04	1,55161E-06
XS cap fuel	1,0135E-02	8,7790E-03	
	Delta XS cap fuel	-1,3562E-03	-4,52056E-06

Abbrand-abhängige Eingaben

Der Verlust an Spaltquerschnitt und der Aufbau an Einfangquerschnitt infolge einer Spaltung kann in PUNKT-V6 über die Konstanten $\$X_{\text{sfissloss}}$ und $\$X_{\text{scapagain}}$ definiert werden. Hier werden die Werte früherer Testrechnungen übernommen /HES 09/.

3.2.3.3 Testrechnungen mit variierten Zulaufzeiten

Die Differenzen der makroskopischen Wirkungsquerschnitte der „OKLO-Start“ und „OKLO-160“ Modelle sind konstant. Die gewählte Zulaufzeit bestimmt somit, wie schnell sich die Materialzusammensetzung in der Zone ändert. Die Zulaufzeiten wurden von $3E+08$ s (9,5 Jahre) ausgehend in Zehnerpotenzen bis $3E+12$ s (95000 Jahre) erhöht und die verschiedenen Parameter der Exkursionsverläufe aufgezeichnet. Von besonderem Interesse sind dabei die erzeugte Leistung und die auftretenden Temperaturen.

Die Abbildungen **Abb. 3.8** bis **Abb. 3.10** zeigen die mit den unterschiedlichen Zulaufzeiten errechneten Leistungsverläufe. Man erkennt, dass das Modell während des Zeitraums der Querschnittszugabe Kritikalität erreicht und eine Leistungsexkursion stattfindet. Die errechneten Temperaturverläufe zeigen dabei qualitativ dieselbe Form wie sie für die Leistung ermittelt wurde. Das jeweilige Maximum der erreichten Leistung steigt dabei mit der Höhe der Zulaufzeit. Mit dem Zulaufstopp wird das System aufgrund der Selbstvergiftung durch die Spaltprodukte schnell unterkritisch. Reaktivitätsgewinn kann dann nur noch durch die zurückgehenden Temperaturen und den damit geringer werdenden negativen Rückkopplungseffekten erzielt werden.

Im Fall gleicher Temperatur für Spaltmaterial und Moderator zur Simulation der Reaktivitätsrückwirkungen (rote Kurven) ergeben sich für die höheren Zulaufzeiten während der Exkursion Temperaturerhöhungen in der Spaltzone von lediglich 30 K und Leistungen von etwa 700 W. Mit abnehmender Zulaufzeit sinkt die maximale Leistung auf etwa 300 W, allerdings bleibt der maximale Temperaturanstieg bei etwa 30 K, wird aber erst gegen Ende des Materialzulaufs erreicht. Dabei ist zu beachten, dass hier der Abbruch des Exkursionsverlaufs (rote Kurven) durch Erreichen der maximalen Anzahl an Rechenschritten im Code von $2E+9$ bedingt ist und nicht das Ende der Exkursion bedeutet. Dies konnte durch die Wahl größerer Schrittweiten im Fall der geringsten Zulaufzeit kompensiert werden, für größere Zulaufzeiten führte dies hier allerdings zu stärkeren Oszillationen in den Resultaten. Durch Extrapolation der errechneten Exkursionsverläufe sind insgesamt Exkursionsdauern von einigen $1E+12$ s, also von der Größenordnung von 100 000 Jahren, zu erwarten. Dies bestätigt auch der Exkursionsverlauf, der für die geringste Zulaufzeit errechnet wurde. In allen betrachteten Fällen ergaben sich Exkursionsdauern, die deutlich über die Zeit des Moderator-Zulaufs hinaus andauerten.

Im Vergleich zu diesen Ergebnissen ergeben die Rechnungen mit unterschiedlich gewählten Temperaturen zur Modellierung der Reaktivitätsrückkopplungen deutlich höhere Temperaturanstiege in der Spaltmaterialzone und ebenso deutlich höhere Leistungen (schwarze Kurven in **Abb. 3.8** bis **Abb. 3.10**). Hier treten für die hohen Zulaufzeiten Temperaturerhöhungen in der Spaltmaterialzone von etwa 800 K auf und betragen die für die geringste Zulaufzeit noch etwa 30 K. Für die Leistungen werden in diesen Fällen Werte zwischen etwa 15 kW und 300 W berechnet. Die Dauer der Exkursion ist dagegen deutlich kürzer als dies unter der Annahme identischer Temperaturen der Fall ist. Insbesondere für die geringen Zulaufzeiten sind die Exkursionsdauern im Wesentlichen durch die jeweilige Dauer des Moderator-Zulaufs gegeben, und die Exkursion kommt nach Beendigung des Moderator-Zulaufs rasch zum Erliegen. Die Ursache für die deutlich höheren Temperaturanstiege und Leistungen liegt in der hier geringeren Reaktivitätsrückkopplung. Lediglich der Dopplereffekt wirkt hier sofort bei Erwärmung der Spaltmaterialzone. Die Rückkopplung aufgrund der Dichteänderungen des Moderators wirkt erst, wenn sich die Temperatur in der mittleren Zone des Wärmeleitmodells merklich ändert. In welcher Form sich diese Zone aufheizt, hängt aber wiederum von dessen Größe, Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit ab.

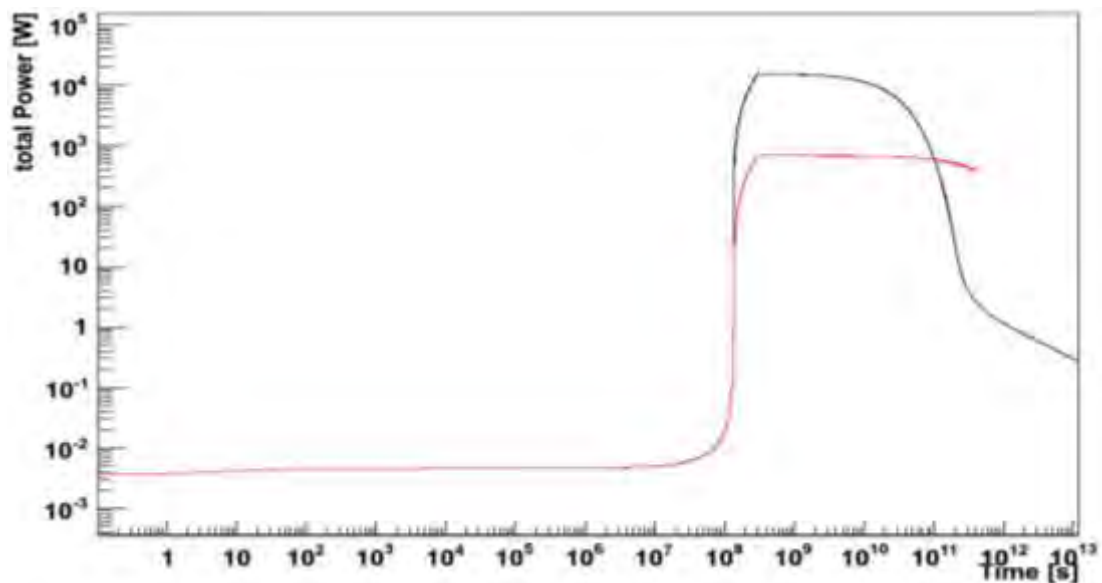


Abb. 3.8 Verlauf der mit PUNKT-V6 errechneten Leistung für das Oklo-Modell bei einer Zulaufzeitdauer von $3E+8$ s

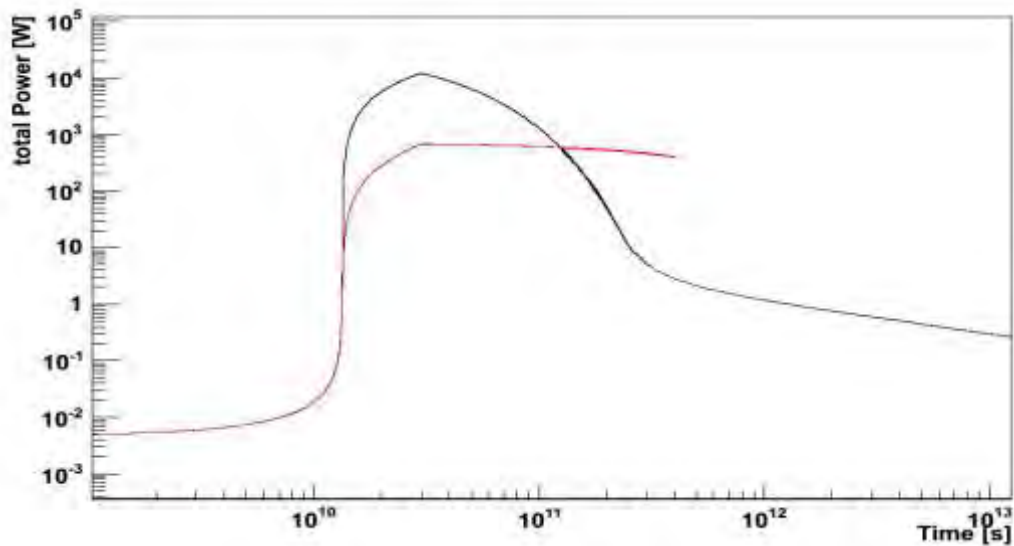


Abb. 3.9 Verlauf der mit PUNKT-V6 errechneten Leistung für das Oklo-Modell bei einer Zulaufzeitdauer von $3E+10$ s

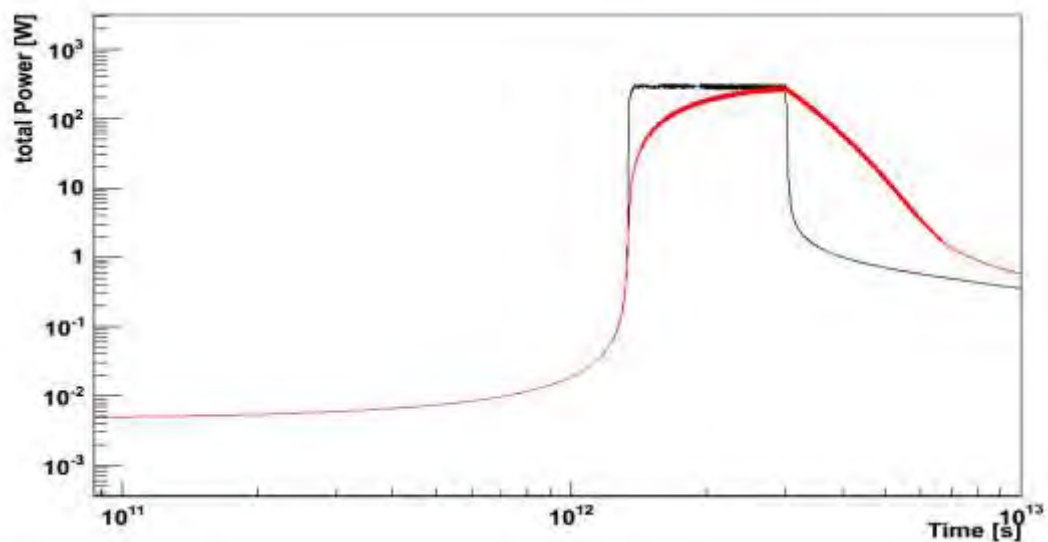


Abb. 3.10 Verlauf der mit PUNKT-V6 errechneten Leistung für das Oklo-Modell bei einer Zulaufzeitdauer von $3E+12$ s

Mit Temperaturerhöhungen zwischen etwa 30 K und 800 K sowie Leistungen zwischen 300 W und 15 kW zeigen die Rechnungen eine vergleichsweise große Bandbreite an Resultaten. Dies ist hier zum einen durch die von außen festzulegende Zulaufzeitdauer bedingt. Zum anderen führen auch Annahmen in der Simulation der Rückkopplungen zu Schwankungen der Resultate. Zudem wird in PUNKT-V6 bislang ein sehr stark verein-

fachtes Wärmeleitmodell genutzt. Der Vergleich mit den britischen Arbeiten, in denen Leistungen von einigen kW, Temperaturerhöhungen von etwa 250 K und Exkursionszeiten von etwa 500 000 Jahren erreicht wurden /SER 11/, zeigt aber, dass die mit PUNKT-V6 erzielten Ergebnisse innerhalb vergleichbarer Größenordnungen liegen.

Detailliertere Vergleiche mit den britischen Arbeiten erweisen sich als schwierig. Generell ist ein generisches Modell, wie es hier verwendet wurde, mit vielen Unsicherheiten behaftet. Weder die genauen zeitlichen Abschnitte, noch die geologischen Vorgänge selbst sind ausreichend exakt bekannt. Dieser Umstand kann gerade bei dem im PUNKT-V6 implementierten Verfahren der zeitlichen Wirkungsquerschnittzugabe zu Fehleinschätzungen der Reaktivitätszufuhr führen. Auch ein direkter Code zu Code Vergleich mit dem britischen QSS-Modell ist schwierig, da viele Eingabeparameter in /SER 11/ zwar prinzipiell in ihrer Bedeutung beschrieben sind, die verwendeten Zahlenwerte aber nicht publiziert wurden. Dies trifft vor allem auf das verwendete Wärmeleitmodell zu, welches bedeutenden Einfluss auf den Exkursionsverlauf hat.

3.3 Zusammenfassung der Arbeiten zur Konsequenzenanalyse

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde die bestehende Version 2008 des Exkursionscodes PUNKT-V6 weiterentwickelt und verbessert. Für die neue Version 2013 wurden sowohl codeinterne Funktionalitäten hinzugefügt bzw. überarbeitet, als auch weitere externe Zusatzmodule erstellt. Die codeinternen Erweiterungen betreffen vor allem die Handhabung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte. Diese wurden revidiert und differenzierter gestaltet. Anders als in vorigen Programmversionen werden nun die makroskopischen Wirkungsquerschnitte verschiedener Materialgruppen unterschieden, wodurch eine verbesserte Modellierung der betrachteten Spaltmaterialanordnungen und unterstellten Szenarien möglich wird. Insbesondere konnten dadurch erweiterte Reaktivitätsrückkopplungsmodelle implementiert werden, die zur Modellierung von Rückkopplungen von temperaturbedingten Dichteänderungen auf die Reaktivität des zu simulierenden Systems dienen. Aufgrund der differenzierten Unterscheidung der Wirkungsquerschnitte konnten entsprechende separate Temperaturkoeffizienten implementiert werden, die es erlauben, die Änderungen der makroskopischen Wirkungsquerschnitte durch temperaturbedingte Dichtevariationen der Materialien separat und damit in verbesserter Näherung zu beschreiben.

Zudem wurden zusätzliche externe Module erstellt, die eine weitgehend automatisierte Vorbereitung und Auswertung der für PUNKT-V6 notwendigen Vorrechnungen gewährleisten. Besonders die Auswertung der in geeigneten Vorrechnungen zu bestimmten makroskopischen Wirkungsquerschnitte und deren Zusammenstellung in die für PUNKT-V6 notwendige Form sind nun weitgehend automatisiert durchführbar und damit gegenüber der früheren manuellen Handhabung deutlich vereinfacht und weniger fehleranfällig. Auch für die Auswertung und graphische Darstellung der Resultate von PUNKT-V6 wurde ein weiteres Modul entwickelt. Dieses greift auf das Softwarepaket ROOT zur statistischen Datenanalyse zurück und ermöglicht neben der Darstellung der Resultate auch eine einfache Implementierung eventueller zukünftig erforderlicher Auswertungen der mit Hilfe von PUNKT-V6 ermittelten Exkursionsverläufe.

Zur Verifizierung der neu implementierten Funktionen wurden umfangreiche Test- und Vergleichsrechnungen durchgeführt. Mit den durchgeführten Rechnungen konnte demonstriert werden, dass mit dem Exkursionscode PUNKT-V6 Version 2013 Langzeittransienten über Zeiträume in der Größenordnung von 100 000 Jahren berechnet werden können. Die Zeitspannen, die dazu in den Rechnungen betrachtet wurden, betragen bis zu 600 000 Jahre.

Besonderes Augenmerk galt den Vergleichsrechnungen zu den Naturreaktoren in Oklo, deren Resultate für erste Vergleiche mit entsprechenden britischen Rechnungen genutzt werden konnten. Durch das Studium der verfügbaren Literatur wurden Daten und Randbedingungen zur Modellierung dieses Phänomens recherchiert und in ein entsprechendes Modell umgesetzt. Die ersten Testreihen zeigten, dass die mit PUNKT-V6 errechneten Exkursionsverläufe stark von den simulierten Wirkungsquerschnittszuflüssen und von der Simulation der Reaktivitätsrückkopplungen abhängen. Die Schwankungsbreite der Ergebnisse liegt für die errechneten Temperaturerhöhungen zwischen etwa 30 K und 800 K und für die errechneten Leistungen zwischen 300 W und 15 kW. Zwar weist so PUNKT-V6 noch relativ große Variationen in den errechneten Ergebnissen auf, aber der Vergleich mit britischen Arbeiten, in denen Leistungen von einigen kW, Temperaturerhöhungen von etwa 250 K und Exkursionszeiten von etwa 500 000 Jahren erreicht wurden, zeigt, dass die mit PUNKT-V6 erzielten Ergebnisse innerhalb vergleichbarer Wertebereiche streuen.

Die durchgeführten Tests und Vergleichsrechnungen zeigten in einzelnen Fällen aber auch noch bestehende Limitierungen im Exkursionscode PUNKT-V6 auf. So besteht Bedarf einer weiteren numerischen Stabilisierung des Codes und an einer Optimierung

der Wahl der Rechenschritte, um auch für sehr lange Exkursionsdauern ($> 100\,000$ Jahre) eine vollständige Simulation erstellen zu können. Zudem wird bislang nur ein sehr einfaches Wärmeleitmodell genutzt. Ein detaillierteres Modell, ggf. mit einer erhöhten Anzahl an Material- und Raumzonen, könnte dazu beitragen, die beobachtete große Schwankungsbreite der Resultate einzugrenzen. Ferner wird der radioaktive Zerfall bisher unzureichend berücksichtigt. Er fließt bislang indirekt über notwendige, vorab durchzuführende Abbrandrechnungen ein, mit denen aber in der Regel nur deutlich höhere Leistungen und kürzere Zeiträume als die zu erwartenden Exkursionsdauern sinnvoll betrachtet werden können.

4 Berücksichtigung des Brennelementabbrands in Kritikalitätsanalysen zur Nachverschlussphase

4.1 Anforderungen zur Abbrandberücksichtigung bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe

4.1.1 Bedeutung des Brennelementabbrands für Kritikalitätsanalysen

Die Berücksichtigung des Brennelementabbrands in Kritikalitätsberechnungen für bestrahlte Brennelemente wurde erstmals in den 1980er Jahren in Einzelfällen praktiziert und wird seit Beginn der 1990er Jahre auch durch internationale Arbeitsgruppen und Gremien, z. B. bei der OECD/NEA, verfolgt und gefördert. Dabei wird in den Kritikalitätsrechnungen für bestrahlte Brennelemente nicht mehr konservativ vereinfachend von frischem Kernbrennstoff ausgegangen, sondern bis zu einem gewissen, sicherheitstechnisch vertretbaren Maß von den reaktivitätsmindernden Effekten, die sich im Brennstoff durch den Reaktoreinsatz einstellen, Kredit genommen. Häufig wird deshalb auch der Begriff „Abbrandkredit“ („burn-up credit“) verwendet. Ein Nutzen für den Anwender ergibt sich daraus, dass die Unterkritikalität einer Brennelementanordnung z. B. in einem Transport- und Lagerbehälter für eine kompaktere Anordnung der Brennelemente nachgewiesen werden kann als dies für frischen Brennstoff mögliche wäre. Die resultierende Volumenreduzierung kann auch für die Endlagerung von Nutzen sein. Andererseits muss dann sichergestellt werden, dass in einen für bestrahlten Brennstoff ausgelegten Behälter kein frischer Brennstoff gelangt, um die Kritikalitätssicherheit nicht zu gefährden.

Die Reaktivitätsabnahme des bestrahlten Kernbrennstoffs wird im Wesentlichen verursacht durch

- die Abnahme des Anteils an spaltbaren Nukliden (i. d. R. ^{235}U oder ^{239}Pu und ^{241}Pu),
- das Entstehen von Spaltprodukten, von denen einige als Neutronenabsorber wirken, und
- das Entstehen von höheren Aktiniden, die zum Teil ebenfalls als Neutronenabsorber wirken, insbesondere ^{240}Pu .

Dem stehen in geringerem Maße auch gegenläufige Effekte gegenüber, die eine Zunahme der Reaktivität bewirken können. Hier sind insbesondere zu nennen

- der Aufbau höherer spaltbarer Aktiniden wie ^{239}Pu und ^{241}Pu durch Neutroneneinfang aus ^{238}U , und
- ggf. die Abnahme von sog. abbrennbaren Neutronenabsorbern, die häufig bei frischen Brennelementen mit vergleichsweise hoher Anfangsanreicherung (i. d. R. $> 4,5\%$ Spaltstoffanteil) zur Begrenzung der Anfangsreaktivität eingesetzt werden.

Die aufgezählten Veränderungen im Brennstoff können nach Berechnungen einer Arbeitsgruppe der OECD/NEA bei LWR-Brennelementen mit einem mittleren Abbrand von 40 GWd/tSM eine Abnahme im Multiplikationsfaktor um $\Delta k \approx 0,4$ bewirken, wobei der höchstzulässige Wert des Multiplikationsfaktors zur Einhaltung der Unterkritikalität in der Regel $k_{\text{eff}} = 0,95$ beträgt.

Eine weitere Einflussgröße ist die axiale Verteilung des Abbrands (Axialprofil) und damit der relevanten Nuklide über die Länge des Brennelements. Diese wird durch die Leistungsverteilung im Reaktor bestimmt und führt dazu, dass der Abbrand im Kopf- und Fußbereich eines Brennelements deutlich geringer ist als im mittleren Bereich. Bei höheren Abbränden ab etwa 15 GWd/tSM darf dieser Effekt nicht vernachlässigt werden, da dann die Annahme einer gleichmäßigen Abbrandverteilung zur Unterschätzung des Multiplikationsfaktors führen könnte (vergl. /WAG 03/, /GMA 09/, /DIN 13/). Da die in den Kritikalitätsrechnungen verwendeten Nuklidinventare von bestrahltem Brennstoff i. d. R. ebenfalls rechnerisch ermittelt werden, müssen bei der Anwendung von Abbrandkredit auch hohe Anforderungen an die Genauigkeit und Validierung der eingesetzten Rechenprogramme gestellt werden. In zahlreichen experimentellen Untersuchungen, z. T. im Rahmen internationaler Kooperationsprogramme, wurde in den zurückliegenden 25 Jahren eine entsprechende Datenbasis geschaffen, die Großteils frei zugänglich ist. Eine Übersicht dazu gibt z. B. der Bericht GRS-A-3604 /KIG 11/. Weitere Untersuchungen dauern noch an. Bei der Abbrandberücksichtigung kann somit je nach Umfang und Detailierungsgrad eine Reihe von Radionukliden, die beim Einsatz des Brennstoffs im Reaktor entstehen, und deren Dichteverteilungen in den Brennelementen (Axialprofil) in die Kritikalitätsrechnung eingehen. Diese Daten hängen stark von der Vorgeschichte und den Einsatzbedingungen des jeweiligen Brennelements ab und können entsprechend mehr oder weniger stark variieren. Eine Berechnung der entsprechenden Nukliddichteverteilungen im Brennstoff erfordert ebenfalls

die Berücksichtigung der Einsatzgeschichte des jeweiligen Brennelements. Für Kritikalitätsbetrachtungen zur Endlagerung kommt wegen des langen Betrachtungszeitraums (bis zu 10^6 Jahre) auch eine nicht zu vernachlässigende Veränderung der Inventare durch den radioaktiven Zerfall hinzu. Es ist daher naheliegend, bei einem Kritikalitätssicherheitsnachweis mit Abbrandberücksichtigung möglichst abdeckende und vereinfachende Annahmen zu wählen, um den Aufwand bei der Durchführung der Rechnung und bei der späteren Kontrolle zur Einlagerung zu begrenzen. Daneben ist zu berücksichtigen, in wieweit die erforderlichen Daten zu den einzelnen Brennelementgeschichten zum Zeitpunkt der Endlagerung noch verfügbar sind.

4.1.2 Anforderungen nach DIN 25472 und DIN 25712

Die Norm DIN 25472 „Kritikalitätssicherheit bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe“ /DIN 12/ enthält Anforderungen, bei deren Einhaltung das Entstehen einer potentiell kritischen Spaltstoffverteilung in der Nachbetriebsphase eines Endlagers mit hinreichender Sicherheit ausgeschlossen wird. Dazu sind potentiell mögliche Ereignisabläufe (sog. Szenarien) der Nachbetriebsphase hinsichtlich ihrer Relevanz für Kritikalität zu analysieren, d. h. auf der Basis der daraus abgeleiteten Parameter sind Werte für den Neutronenmultiplikationsfaktor möglicher Verteilungen von spaltbaren Stoffen zu berechnen. Ggf. sind für potentiell kritische Verteilungen bedingte Eintrittswahrscheinlichkeiten zu ermitteln und eventuelle Konsequenzen einer Kritikalität für das Endlager und dessen Umgebung abzuschätzen. Sofern das potentielle Entstehen einer kritischen Anordnung für die Nachbetriebsphase nicht ausgeschlossen werden kann (d. h. wenn nicht für alle berechneten Werte von $k_{\text{eff}} < 1$ erfüllt wird) wird eine Eintrittswahrscheinlichkeit $< 10^{-4}$ als Nachweiskriterium gefordert.

In den durchzuführenden Kritikalitätsberechnungen ist die jeweils reaktivste Brennstoffzusammensetzung zugrunde zu legen. Dabei darf gegebenenfalls auch ein reaktivitätsmindernder Effekt des Brennelementabbrands angerechnet werden.

Weitere Einzelheiten zur Berücksichtigung eines Brennelementabbrands bei Kritikalitätsanalysen sind auch in der Norm DIN 25712 „Kritikalitätssicherheit unter Anrechnung des Brennstoffabbrands bei Transport und Lagerung bestrahlter Leichtwasserreaktor-Brennelemente in Behältern“ (Entwurf vom März 2013) ausführlich beschrieben /DIN 13/. Zwar bezieht sich die Norm auf einen Nachweis der Unterkritikalität für Behälter, die zum Transport und zur Lagerung bestrahlter Brennelemente eingesetzt werden,

jedoch sind die darin getroffenen Festlegungen und Anforderungen, insbesondere hinsichtlich der erforderlichen Nachweisführung bei Abbrandberücksichtigung auch auf die Endlagerung bestrahlter Brennelemente in Behältern übertragbar.

Grundlegende Anforderungen bei der Kritikalitätssicherheit unter Anrechnung des Brennstoffabbrands nach DIN 25712 sind im Folgenden zusammengefasst:

- Für den Multiplikationsfaktor ist unter Einbeziehung aller Unsicherheiten ein Wert von $k \leq 0,95$ einzuhalten.
- Der erforderliche Mindestabbrand kann durch Ermittlung einer sog. Beladekurve festgelegt werden, die den mittleren Brennstoffabbrand in Abhängigkeit von der Anfangsanreicherung darstellt. Die Beladekurve kann dann als Entscheidungskriterium für die Auswahl der Brennelemente herangezogen werden.
- Alternativ kann für jedes einzelne Brennelement der individuell erforderliche Mindestabbrand auf der Basis der Leistungsgeschichte des jeweiligen Brennelements ermittelt werden.
- Für die Bestimmung der Nuklidinventare als Eingangsgrößen in die Kritikalitätsberechnungen sind anlagenbezogene oder nachweislich abdeckende Reaktorbetriebsbedingungen zugrunde zu legen.
- Sämtliche im bestrahlten Kernbrennstoff vorhandenen Nuklide, die einen positiven Reaktivitätsbeitrag aufweisen, sind zu berücksichtigen.
- Negative Reaktivitätsbeiträge von Nukliden im bestrahlten Kernbrennstoff dürfen berücksichtigt werden, sofern diese Beiträge verifizierbar sind und das Vorhandensein der Nuklide für den Nachweiszeitraum sichergestellt ist.
- Zeitliche Veränderungen des Nuklidsatzes auf Grund unterschiedlicher Halbwertszeiten sind zu berücksichtigen.
- Der Einfluss einer inhomogenen räumlichen Abbrandverteilung im Brennelement (Axialprofil) ist zu ermitteln und gegebenenfalls zu berücksichtigen.
- Alle in die Bestimmung der Mindestabbrände eingehenden Unsicherheiten und Toleranzen sind in geeigneter Weise zu berücksichtigen.
- Beim Beladen der Behälter entsprechend den durchgeführten Kritikalitätsanalysen ist unter Beachtung des Doppelfehlerprinzips sicherzustellen, dass keine Fehlbeladung mit einem Brennelement erfolgt, das nicht die zugrunde gelegten Auslegungsmerkmale und den erforderlichen Mindestabbrand aufweist.
- Zur Überprüfung der Abbrandwerte anhand der Reaktoraufzeichnungen und der Leistungsgeschichte der einzelnen Brennelemente ist bei Vergleich des jeweiligen

Brennelement-Abbrands mit der Beladekurve ein statistisches Signifikanzniveau von mind. 5 % anzusetzen.

- Bei Festlegung eines höchstzulässigen individuellen Brennelement-Abbrands ist eine einseitige untere 99%/99% Toleranzgrenze anzugeben.
- Besondere Anforderungen gelten auch für den Beladevorgang von Behältern. Dazu ist ein Beladeplan zu erstellen, in dem jedem Brennelement eine bestimmte Position im Behälter zugeordnet ist. Vor dem Einsetzen eines Brennelements in den Behälter ist zum einen die Identität des Brennelements anhand der Kennzeichnung (Fertigungsnummer o. ä.) auf dem jeweiligen Brennelement zu prüfen, zum anderen ist eine Kontrollmessung zum Abbrand des Brennelements durchzuführen.
- Je nach Genauigkeit und Zuverlässigkeit der vorher durchgeführten rechnerischen Analysen kann entweder eine einfache Entscheidungsmessung durchgeführt werden, in der geprüft wird, ob das Brennelement bestrahlt ist oder nicht, oder es ist eine Konsistenzprüfung mit quantitativer Bestimmung des Abbrands aus den Messwerten unter Verwendung weiterer Brennelement-Daten durchzuführen.
- Die Beschränkung auf eine Entscheidungsmessung ist dann zulässig, wenn der Vergleich des berechneten Brennelement-Abbrands mit einer Beladekurve bei einem Signifikanzniveau für die obere Erkennungsgrenze von höchstens 1 % erfolgt. Dies gilt auch für die alternative Vorgehensweise (ohne Beladekurve) bei der für jedes Brennelement der individuelle in der Kritikalitätsanalyse anzusetzende Abbrand als untere 99%/99% Toleranzgrenze anzugeben ist.
- Wenn der Vergleich des für das einzuladende Brennelement ermittelten Abbrands (einschließlich der Unsicherheiten) mit dem entsprechenden Wert der Beladekurve auf einem Signifikanzniveau von 5 % erfolgt, ist zusätzlich eine quantitative Konsistenzprüfung des Brennelement-Abbrands durch Messung durchzuführen. Dabei muss der aus der Messung bestimmte Abbrand wiederum mit hinreichender Genauigkeit unter Berücksichtigung aller Unsicherheiten (aus Rechnung und Messung) mit dem rechnerisch ermittelten Wert innerhalb einer oberen und unteren Erkennungsgrenze für ein Signifikanzniveau von 5 % übereinstimmen.

Ausführliche Erläuterungen zur Anwendung der DIN 25712 finden sich in den Anhängen zu dieser Norm /DIN 13/.

Ergänzend sei angemerkt, dass eine Berücksichtigung des Brennelementabbrands in Kritikalitätsanalysen zur Nachbetriebsphase eines Endlagers nicht zwingend auch die Abbrandberücksichtigung bei der Behälterbeladung erfordert. Ebenso ist letztere kein

hinreichendes Nachweiskriterium für die Nachbetriebsphase des Endlagers, wenn die Intaktheit der Brennelementstruktur und der Behälter nicht mehr als gegeben vorausgesetzt werden können. Es wäre jedoch denkbar, dass für Endlagerbehälter, die unter Anrechnung eines Brennelementabbrands beladen wurden, auch für die Nachbetriebsphase entsprechende Nachweise erbracht werden.

4.1.3 Möglichkeiten und Grenzen einer Anrechnung des Brennelementabbrands bei Kritikalitätsbetrachtungen zur Endlagerung

Bei Kritikalitätsanalysen für Transport- und Lagerbehälter mit oder ohne Anrechnung des Brennelementabbrands wird weitgehend von einer intakten Struktur des Behälters und der Brennelemente ausgegangen. Zwar werden im Rahmen von Störfallbetrachtungen auch in gewissem Umfang Deformationen und Abweichungen von der regulären Anordnung angenommen, dies ist jedoch nicht vergleichbar mit den Annahmen und Szenarien, die bei Kritikalitätsanalysen für die Nachbetriebsphase eines Endlagers zu unterstellen sind. Hier müssen dem jeweiligen Standort entsprechend mögliche Folgen aus dem Einwirken geochemischer und geophysikalischer Umgebungsbedingungen auf die Endlagerbehälter über Zeiträume bis 10^6 Jahre betrachtet werden. Dabei kann je nach untersuchtem Szenario auch ein Auflösen der Brennelement- und Behälterstrukturen angenommen werden. Wird nach DIN 25472 vorgegangen, so sind, wenn eine Kritikalität nicht *a priori* ausgeschlossen werden kann ($k_{\text{eff}} \geq 1$), bedingte Eintrittswahrscheinlichkeiten einer Kritikalität für die entsprechenden Ereignisabläufe zu ermitteln (s. oben). Wird dabei auch von der Anrechnung des Brennelementabbrands Gebrauch gemacht, so ergeben sich daraus zusätzliche Freiheitsgrade bei der Variation der möglichen Ereignisabläufe, die zu Kritikalität führen können. Einige Beispiele sind im Abschlussbericht des Vorgängervorhabens in Kapitel 2.6 beschrieben /GMA 09/.

In früheren generischen Studien zur Kritikalität in der Nachbetriebsphase eines Endlagers für ausgediente Kernbrennstoffe wurden bereits Berechnungen unter Zugrundelegung mittlerer Brennelement-Abbrände bis ca. 40 GWd/tSM durchgeführt /GMA 01, GMA 04/. Ziel dieser Betrachtungen war es zunächst, die damit verbundene potentielle Abnahme des Multiplikationsfaktors sowie den Einfluss der langzeitlichen Veränderungen des Nuklidinventares auf Grund unterschiedlicher Halbwertszeiten der Abbrand-Nuklide zu ermitteln. Wie einleitend erwähnt kann die Abnahme des k-Wertes in der Größenordnung von bis zu $\Delta k \approx 0,4$ gegenüber der Annahme von frischem Brennstoff liegen. Mit der Verbesserung des Kenntnisstands und der Rechenverfahren zum Ab-

brand rückte auch die Betrachtung spezieller Effekte wie des Axialprofils stärker in den Fokus der Untersuchungen. Im Rahmen des Vorgängervorhabens 3606R02528 wurde dieser Aspekt auch unter Endlagerbedingungen generisch untersucht /GMA 09/. Im Rahmen dieser Studie wurden beispielhaft auch einige Szenarien unter Berücksichtigung axial inhomogener Abbrand-Verteilungen untersucht. Zur Veranschaulichung sind in **Tab. 4.1** die Werte der berechneten Multiplikationsfaktoren aus /GMA 09/ für ein Degradationsszenario eines Endlagerbehälters bei unterschiedlicher Berücksichtigung des Brennelementabbrands wiedergegeben. Dabei zeigt sich u. a., dass bei einer axial inhomogenen Abbrandverteilung der k_{eff} -Wert höher sein kann als bei Annahme eines mittleren Wertes gleicher Höhe.

Tab. 4.1 Berechnete Multiplikationsfaktoren für einen generischen Endlagerbehälter Typ POLLUX bei Annahme eines vollständig korrodierten Innenbehälters für unterschiedlich abgebrannte Brennstoffe in Abhängigkeit vom Wasseranteil

Volumenanteil H ₂ O in Fe(OH) ₃ + H ₂ O	Abbrand 20 GWd/tSM k_{eff}	Abbrand 40 GWd/tSM k_{eff}	Axiales Abbrandprofil mittlerer Abbrand 40 GWd/tSM k_{eff}
0,50	0,863	0,784	0,851
0,60	1,001	0,816	0,883
0,70	1,036	0,852	0,917
0,75	1,088	0,869	0,934
0,80	1,107	0,887	0,951
0,85	1,127	0,909	0,972
0,90	1,147	0,931	0,991
0,95	1,168	0,950	1,013
1,00	1,190	0,973	1,035

Zwar können aus diesen Einzelergebnissen keine generellen Aussagen zur Kritikalitätssicherheit im Endlager unter Anrechnung höherer Abbrände mit Axialprofil abgeleitet werden, jedoch vermitteln die beispielhaften Betrachtungen in /GMA 09/ einen Eindruck von der zunehmenden Komplexität der Szenarien mit Kritikalitätspotenzial, die im Rahmen eines Sicherheitsnachweises zu betrachten sind. Um hierbei den erforderlichen Rechenaufwand für den Sicherheitsnachweis zu begrenzen, kann es sinnvoll sein, vereinfachende und konservativ abdeckende Annahmen zu treffen. So könnte zum Beispiel der Brennelementabbrand nur bis zu einer Höhe angerechnet werden, bei der axiale Effekte nicht berücksichtigt werden müssen, je nach unterstellten Randbedingungen also z. B. etwa 15 bis 25 GWd/tSM /WAG 03/, /GMA 09/.

4.1.4 Nachweis und Überprüfung des erforderlichen Mindestabbrands

Ein weiterer Aspekt, der beim Erstellen des Sicherheitsnachweises und bei der Überprüfung der zur Endlagerung kommenden Behälter mit Brennelementen eine wichtige Rolle spielt, ist die Verfügbarkeit der erforderlichen Daten und Informationen für jedes Brennelement. Wie man aus den Anforderungen der DIN-Normen erkennen kann, erfordert die Anrechnung des Brennelement-Abbrands in der Kritikalitätssicherheitsanalyse einen relativ hohen rechnerischen und unter Umständen auch messtechnischen Aufwand. Eine Voraussetzung dafür ist eine genaue und umfassende Dokumentation zu den Brennelementen, die neben den wesentlichen technischen Daten auch die individuelle Einsatzgeschichte jedes Brennelementes umfassen muss.

Im Folgenden sind noch einmal die für einen Kritikalitätssicherheitsnachweis zur Nachbetriebsphase mit Anrechnung des Brennelement-Abbrands erforderlichen Schritte zusammengefasst:

- Bestimmung der (zeitabhängigen) Nuklidinventare der Brennelemente,
- Analyse von Ereignisabläufen mit Behälterdegradation,
- Ggf. Untersuchung des Einflusses von axialen Abbrandprofilen und Ermittlung eines anzurechnenden mittleren Mindestabbrands,
- Sicherstellung des erforderlichen Mindestabbrands für jedes Brennelement bei Einsetzen in den Endlagerbehälter,
- Bereitstellen der entsprechenden Brennelement-Daten bei Anlieferung des Behälters zum Endlager.

Der Nachweis der Unterkritikalität bei Anrechnung eines bestimmten Mindestabbrands ist rechnerisch auf der Basis der Brennelementdaten und der Reaktoraufzeichnungen unter Einbeziehung aller Unsicherheiten aus den verwendeten Eingangsgrößen und Rechenverfahren zu führen. Dabei können, wie in der DIN 25712 beschrieben, geeignete statistische Verfahren angewendet werden, um die Unsicherheit und Zuverlässigkeit der Ergebnisse (z. B. als Toleranzgrenzen oder Vertrauensintervalle) zu bestimmen. Bei Einladung der Brennelemente in einen Endlagerbehälter ist dann anhand der Brennelement-Kennzeichnung und durch zusätzliche Messung sicherzustellen, dass jedes Brennelement den erforderlichen Mindestabbrand aufweist. Dabei kann gemäß DIN 25712 je nach Genauigkeit der rechnerischen Abbrand-Bestimmung eine einfache Entscheidungsmessung darüber, ob ein Brennelement frisch oder bestrahlt ist, genü-

gen, oder es ist eine quantitative Bestimmung des Abbrands als Konsistenzprüfung durchzuführen.

Bei Anlieferung zum Endlager muss dann zu jedem Behälter die Dokumentation über die enthaltenen Brennelemente verfügbar sein. Das bedeutet generell, wenn in den Kritikalitätsanalysen für ein Endlager prinzipiell ein bestimmter Brennelement-Abbrand angerechnet werden soll, muss vor Einlagerung in der dargelegten Art und Weise sichergestellt werden, dass auch alle einzulagernden Brennelemente den erforderlichen Mindestabbrand aufweisen. Dieser Aspekt sollte auch bei zukünftigen generischen Kritikalitätsanalysen zur Endlagerung von Kernbrennstoffen berücksichtigt werden.

4.1.5 Empfehlungen für das weitere Vorgehen

Wegen des politisch begründeten Neubeginns einer Suche nach einem geeigneten Endlagerstandort in Deutschland werden auf absehbare Zeit nur generische Sicherheitsanalysen für potentiell in Betracht kommende Gesteinsformationen wie Salz, Ton oder Granit durchgeführt werden können. Da bei Anrechnung des Brennelement-Abbrands unter bestimmten Umständen auf zusätzliche konstruktive Maßnahmen zur Gewährleistung der Unterkritikalität, wie z. B. Neutronenabsorber im Endlagerbehälter oder größere Abstände zwischen den Brennelementen verzichtet werden kann, sollte diese Option auch weiterhin offen gehalten und verfolgt werden.

Grundsätzlich erscheinen die Anrechnung von Abbrand für Kritikalitätsanalysen und die damit verbundenen Nachweise und Kontrollen auch auf den Betrieb eines HAW-Endlagers anwendbar. Aus praktischen Gründen ist es jedoch naheliegend, sich dabei an den Abbrand-Werten zu orientieren, die bei der Zulassung der Transport- und Lagerbehälter bereits genehmigt sind oder beantragt wurden. Dies hätte den Vorteil, dass für die mit Abbrand zugelassenen Behälter die erforderlichen messtechnischen Kontrollen an den Brennelementen schon beim Einsetzen der Brennelemente in die Behälter durchgeführt werden müssen, unabhängig von den Anforderungen des Endlagers. Sofern die Behälter direkt endgelagert werden, wäre es ausreichend, vor der Endlagerung die zugehörige Behälterdokumentation nochmals zu überprüfen. Nach derzeitigem Stand ist bei Behältern des Typs CASTOR V/19 mit DWR-Brennelementen mit einer Anfangsanreicherung $\geq 4,05\%$ ^{235}U die Anrechnung eines Mindestabbrands von 12 GWd/tSM genehmigt, entsprechend den Aufbewahrungsgenehmigungen der Standortzwischenlager, z. B. /BFS 03/. Der entsprechende Nachweis des erreichten

Abbrands ist auf die Endlagerung direkt übertragbar. Vergleichbares gilt qualitativ in ähnlicher Weise für SWR-Brennelemente im Behälter Typ CASTOR V/52, sofern Abbrandkredit zugelassen wird. Die Anrechnung von Abbränden, die höher als etwa 15 GWd/tSM sind, ist dagegen durch die Notwendigkeit der Berücksichtigung der axialen Abbrandprofile mit deutlich erhöhtem, evtl. unverhältnismäßigem Aufwand verbunden.

In Anbetracht der durch die neue Situation bei der Endlagerplanung „gewonnenen“ Zeit sollte auch geprüft werden, in wieweit die zur Anrechnung des Brennelementabbrands in einem Endlager erforderlichen Daten für den Bestand an Brennelementen in Deutschland verfügbar gemacht werden können. Daraus könnte ein Mindestabbrand für die Kritikalitätsanalysen so festgelegt werden, dass er von der Mehrzahl der bestrahlten Brennelemente sicher erreicht wird. Für den Anteil an Brennelementen, die diese Bedingung nicht erfüllen, müsste dann eine eigene Kritikalitätsanalyse ohne Anrechnung von Abbrand und ggf. unter Einbeziehung zusätzlicher Sicherheitsmaßnahmen (wie z. B. Neutronenabsorber) durchgeführt werden. Die messtechnische Kontrolle und Identifizierung jedes Brennelementes müsste gemäß DIN 25712 bei Beladen der Endlagerbehälter erfolgen. Für die Realisierung eines solchen Konzeptes ist jedoch das Interesse und eine Bereitschaft zur Mitwirkung auf Seiten der KKW-Betreiber eine grundlegende Voraussetzung. Hierfür kann z. B. anhand von Vorstudien der damit verbundene Nutzen aufgezeigt werden kann. Insofern sollte eine iterative Vorgehensweise verfolgt werden.

In jedem Fall sollte jedoch parallel als „Back-up“ Variante auch der Nachweis der Unterkritikalität ohne Anrechnung von Abbrand weiter verfolgt werden. Bedingt durch eine vorzeitige Außerbetriebsetzung von acht Anlagen nach den Ereignissen von Fukushima im Jahre 2011, ist davon auszugehen, dass auch Brennelemente entsorgt werden müssen, die keinen nennenswerten Abbrand aufweisen. Im Hinblick darauf wäre es auch denkbar, dass für verschiedene, hinreichend voneinander getrennte Einlagerungsbereiche eines Endlagers unterschiedliche Konzepte für Sicherheitsnachweise, mit bzw. ohne Anrechnung von Abbrand, zur Anwendung kommen. Über solche Details kann jedoch erst bei Vorliegen einer konkreten Planung eines Endlagers entschieden werden.

Zusammenfassend wird empfohlen, bei Kritikalitätsanalysen zur Nachbetriebsphase eines Endlagers für ausgediente Kernbrennstoffe die Anrechnung des Brennelementabbrands auch weiterhin zu verfolgen. Dabei sollte sich die Höhe des anzurechnenden

Abbrands zunächst an der derzeitigen Praxis bei Transport- und Lagerbehältern orientieren. Bei den erforderlichen messtechnischen Kontrollen könnte dann auf eine schon bewährte Praxis aus dem Beladen von Transport- und Lagerbehältern Bezug genommen werden. Bei Anrechnung höherer Abbrände sollte vorher die Verfügbarkeit der erforderlichen Informationen und Brennelementdaten erkundet werden.

Im Hinblick auf eine Endlagerung von sehr gering abgebranntem Brennstoff sollten parallel dazu auch generische Analysen unter der Annahme von nicht bestrahltem Brennstoff durchgeführt werden. Dabei ist insbesondere für MOX-Brennstoff auch die zeitliche Veränderung des Nuklidinventares zu berücksichtigen.

Wenn wie beim früheren POLLUX-Behälterkonzept ein Zerlegen der Brennelemente zur Endlagerung vorgesehen ist, müsste anhand der Verfahrensschritte geprüft werden, in wieweit hier gleichwertige Kontrollen des individuellen Brennelement-Abbrands möglich sind. Ist dies nicht der Fall, so wäre das ebenfalls ein Ausschlusskriterium für die Anrechnung von Abbrand.

Die generischen Analysen sollten auch dazu genutzt werden, die Rechenverfahren, insbesondere im Hinblick auf die Einbeziehung der Unsicherheiten und die Auswertung mit Hilfe statistischen Methoden, weiter zu verbessern und zu qualifizieren.

4.2 Physikalische Randbedingungen zur numerischen Analyse

Die Reaktivität von bestrahlten Kernbrennelementen hängt maßgeblich von dem jeweiligen Nuklidinventar nach dem Einsatz im Reaktor ab. Die Zusammensetzung dieses Inventars ist heterogen sowohl in axialer als auch in horizontaler Ausdehnung des Brennelements, und zudem individuell für jedes einzelne Brennelement. Die lokale Zusammensetzung des Brennstoffs ist für jeden Ort abhängig von der Höhe und der spektralen Verteilung des Neutronenflusses während der Einsatzzeit im Reaktor. Zudem ändert sich das Inventar auch nach der Entladung signifikant durch den radioaktiven Zerfall.

Um den Multiplikationsfaktor einer Anordnung mit bestrahlten Kernbrennelementen (z. B. Endlagerbehälter) möglichst exakt zu berechnen, müsste im Prinzip für jedes beteiligte Brennelement das axiale Abbrandprofil bekannt sein, sowie eine entsprechende Verteilung der zu berücksichtigenden, reaktivitätsbestimmenden Nuklide berechnet werden. Dies ist mit immensem Aufwand verbunden und u. a. deshalb in der Praxis kaum zu realisieren. Eine alternative Möglichkeit der Modellierung besteht darin, das für den mittleren Abbrand errechnete Nuklidinventar als über die aktive Länge homogenisiert zu betrachten. Dieses Vorgehen führt gegenüber einer expliziten Modellierung typischerweise zu einem unterschiedlichen Wert des berechneten Multiplikationsfaktors. Insbesondere ist diese Homogenisierung für typische bestrahlte DWR-Brennelemente mit mittleren Abbränden über ca. 15 GWd/tSM nicht konservativ, d. h. durch die homogenisierte Modellierung wird der wahre Multiplikationsfaktor unterschätzt. Bei niedrigeren Abbränden gilt die Homogenisierung i. A. als konservativ. Sollen dennoch höhere Abbrände berücksichtigt werden, so wird typischerweise ein für alle realistischen Profile konservativ abdeckendes Profil für alle Brennelemente in dem speziellen Lagersystem definiert. Für die Wahl eines derartigen Profils wurden unterschiedliche Möglichkeiten vorgeschlagen, z. B. in /NEU 03/ oder /WAG 03/. Auf dieser Basis kann ein für jedes Lagersystem individueller Zusammenhang zwischen Anfangsanreicherung und dem zur Einlagerung erforderlichen Mindestabbrand, die sog. Beladekurve, erstellt werden. Weitere Einzelheiten sind z. B. in /DIN 07/ und /DIN 11/ beschrieben.

Wie erwähnt ist die Gültigkeit einer Beladekurve für jedes Lagersystem, also auch für einen Endlagerbehälter, individuell, d. h. die ursprüngliche Beladekurve verliert mit dem Einsetzen signifikanter Degradationsszenarien, wie sie in Kapitel 2 ausführlich beschrieben und diskutiert sind, ihre Gültigkeit. Dies ist ein wesentlicher Unterschied im

Vergleich zur Abbrandberücksichtigung in den typischen Zeiträumen der Zwischenlagerung. International werden erste Ansätze verfolgt, relevante Degradationsszenarien bei der Auslegung eines Endlagerbehälters mit Abbrandkredit bereits vorab bei der Erstellung der Beladekurve zu berücksichtigen /AGR 10/ (vgl. auch Kapitel 5.3). Die entsprechenden Arbeiten befinden sich noch in einem sehr frühen Stadium. Vor diesem Hintergrund ist auch die Auswahl der in die Analyse einzubeziehenden Nuklide, insbesondere der Spaltprodukte, zu sehen, da nachgewiesen werden muss, dass die Neutronen absorbierenden Isotope während des gesamten Genehmigungszeitraums, hier also des Betrachtungszeitraums, in der Anordnung präsent sind. Je nach unterstelltem Degradationsszenario kann dies nicht immer gewährleistet werden.

Konservative Wahl von Bestrahlungsparametern

Die Änderung des Nuklidinventars von Kernbrennstoff während der Bestrahlung hängt lokal und global von allen Parametern ab, welche Einfluss auf den zeitlichen und räumlichen Verlauf des Neutronenflusses und seines Spektrums ausüben. Die Höhe des erreichten Abbrands, d. h. die durch Spaltungen und Folgereaktionen erzeugte Energiemenge, gibt für sich alleine genommen nur ein ungefähres Maß für das exakte Nuklidinventar ausgedienter Brennelemente. Je nach Neutronenspektrum variiert v. a. die Menge und die isotopische Zusammensetzung des erbrüteten Plutoniums und der höheren Aktinoiden, aber auch die Zusammensetzung des Spaltproduktinventars, zu dem ebenfalls wichtige Neutronen absorbierende Nuklide zählen. Allgemein gilt, dass jeder Effekt, der während der Bestrahlung des Brennstoffs im Reaktor zu einem verringerten Anteil an thermalisierten Neutronen führt („spektrale Verhärtung“), auch eine Erhöhung von epithermischen Einfangprozessen an ^{238}U -Kernen bedingt, was in Konsequenz zu einem verstärkten Plutoniumaufbau führt. Zwar führt ein härteres Spektrum auch zu einem Anstieg von Spaltprozessen an Plutonium-Kernen, aber da dies mit einer Verringerung an Spaltungen von ^{235}U -Kernen einher geht, bedeutet dies bei gleichem Abbrand einen geringeren Netto-Rückgang an thermisch spaltbaren Isotopen. Mit anderen Worten, bei Kritikalitätsanalysen für abgebrannte LWR-Kernbrennstoffe weisen diejenigen Brennstoffe, welche in einem härteren Neutronenspektrum bestrahlt wurden, eine vergleichsweise höhere Reaktivität auf als diejenigen, welche in einem stärker thermalisierten („weicheren“) Spektrum bestrahlt wurden. Deshalb sind bei der rechnerischen Inventarbestimmung bestrahlter Kernbrennstoffe Abbrandbedingungen, welche innerhalb ihrer realistischen Wertebereiche zu dem jeweils härteren Spektrum führen, für die anschließende Kritikalitätsanalyse als konservativ einzustufen. Als wesentliche Einflüsse und Parameter sind hier zu betrachten /BEH 11/:

- Spezifische Leistung und Einsatzgeschichte (zeitliches Leistungsprofil); erhöhte Leistung führt zu mehr absorbierenden Spaltprodukten, und dies zur spektralen Verhärtung; für die Reaktivität nach Entladung ist dabei typischerweise die Bestrahlungsgeschichte im letzten Zyklus entscheidend /DEH 99/;
- Brennstofftemperatur; Dopplerverbreiterung von Einfangresonanzen des ^{238}U im epithermischen Energiebereich führt zu verstärkter Erbrütung von Plutonium
- Moderatortemperatur und -dichte; verringertes Moderationsverhältnis reduziert den Anteil thermalisierter Neutronen;
- Dampfblasengehalt (v. a. Siedewasserreaktor); beeinflusst ebenfalls das Moderationsverhältnis;
- Borvergiftung im Kühlmittel (Druckwasserreaktor); höherer Borgehalt verstärkt die Absorption thermischer Neutronen und reduziert so deren relativen Anteil;
- Feste Neutronenabsorber; z. B. Steuerstäbe, Stäbe mit abbrennbaren Neutronenabsorbern wie Gadolinium, u. a.;
- Integrierte abbrennbare Absorber; z. B. als Brennstäbe mit abbrennbaren Neutronenabsorbern wie Gadolinium, Pellets mit Absorberbeschichtung, u. a.;
- Benachbarte MOX-Brennelemente; deutlich erhöhte Plutoniumkonzentration führt zu einer erhöhten Anzahl an Schnellspaltungen sowie zu einer erhöhten mittleren Anzahl von schnellen Spaltneutronen pro Spaltung.

Für Betrachtungen zum Abbrandkredit im Themenfeld der Zwischenlagerung, d. h. intakte Brennelementstrukturen sowie Zeiträume bis etwa einhundert Jahre, sind diese Kriterien allgemein als konservativ anerkannt /BEH 11/. In dem Tagungsband IAEA TECDOC 1547 /IAE 07/ werden in einigen Beiträgen zu der Fachsitzung 2.3 „Criticality Safety Criteria“ verschiedene Parametersätze an abdeckenden Bestrahlungsbedingungen („bounding depletion conditions“) beschrieben und diskutiert. Je nach Studie und deren Randbedingungen variieren die verwendeten Zahlenwerte für die ausschlaggebenden Parameter, die im Sinne abdeckender Konservativität z. T. unrealistisch hoch bzw. niedrig angesetzt werden.

Um den weiteren Einfluss der fortschreitenden zeitlichen Änderung des Nuklidinventars durch radioaktiven Zerfall auf die Reaktivität des abgebrannten Kernbrennstoffs zu untersuchen, wurde für Abklingzeiten bis 1 Mio. Jahre der infinite Multiplikationsfaktor k_{inf} eines wassermodierten, unendlich ausgedehnten Stabgitter berechnet. Ausgangsbasis war ein DWR-Urandioxid-Brennstoff der Anreicherung 4,4 Gew.-% ^{235}U mit einem Abbrand von 50 GWd/tSM; dieser Abbrand wurde unter repräsentativen Be-

strahlungsbedingungen erreicht. Die Inventarberechnung wurde mit dem eindimensionalen Abbrandcode OREST /HES 86/ in der Version 2008 durchgeführt. In den anschließenden Kritikalitätsrechnungen mit dem eindimensionalen deterministischen Kritikalitätsrechenverfahren CSAS1 aus dem Codepaket SCALE 6.1 /SCA 11/ wurden die Nuklide ^{16}O , ^{229}Th , ^{230}Th , ^{232}Th , ^{232}U , ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{237}Np , ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{241}Am , ^{243}Am , ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{245}Cm , ^{246}Cm , ^{247}Cm und ^{248}Cm berücksichtigt. Eine zeitliche Änderung in der betrachteten Geometrie, also ein Degradationsszenario, wurde in dieser Parameterstudie nicht unterstellt. Dies bedeutet, dass das Moderationsverhältnis, welches die Reaktivität des betrachteten Systems ebenfalls mit definiert, für den gesamten Betrachtungszeitraum konstant gehalten wurde.

In **Abb. 4.1** ist der Verlauf der berechneten Konzentrationen der wichtigsten Aktinoide ab Bestrahlungsende für den Zeitraum der Nachverschlussphase dargestellt. Gut zu erkennen ist z. B. der Zerfall von ^{239}Pu zu ^{235}U . In **Abb. 4.2** ist der zugehörige, für die jeweilige Abklingzeit auf Basis aller oben erwähnten Aktinoiden berechnete, infinite Multiplikationsfaktor k_{inf} dargestellt. Es ist zu beachten, dass der Verlauf von k_{inf} in dieser Parameterstudie qualitativ zu interpretieren ist; d. h. die Absolutwerte des Multiplikationsfaktors – die in dieser Rechenstudie durchgängig über 1,0 liegen – stellen kein quantitatives Maß für Über- oder Unterkritikalität von endgelagertem Kernbrennstoff dar sondern demonstrieren lediglich die zeitabhängige Variabilität der Reaktivität des Brennstoffs.

Durch den radioaktiven Zerfall ändert sich das Nuklidinventar und darin vor allem die Konzentrationen der wichtigsten Plutonium-Isotope in abgebranntem Kernbrennstoff kontinuierlich, was sich im Multiplikationsfaktor niederschlägt. Ab Entladung aus dem Reaktor sinkt der Multiplikationsfaktor für diese Brennelemente für etwa einhundert Jahre, also dem typischen Zeitbereich der Zwischenlagerung, stetig ab, um danach bis ca. 30 000 Jahre wieder langsam anzusteigen. Nach einer Abnahme und einem Minimum bei etwa 250 000 Jahren folgt wieder ein Anstieg bis zum Ende des Betrachtungszeitraums und grundsätzlich auch darüber hinaus. Hier spielt u. a. das Entstehen des reaktiven Isotops ^{233}U aus den Zerfallsketten eine wichtige Rolle.

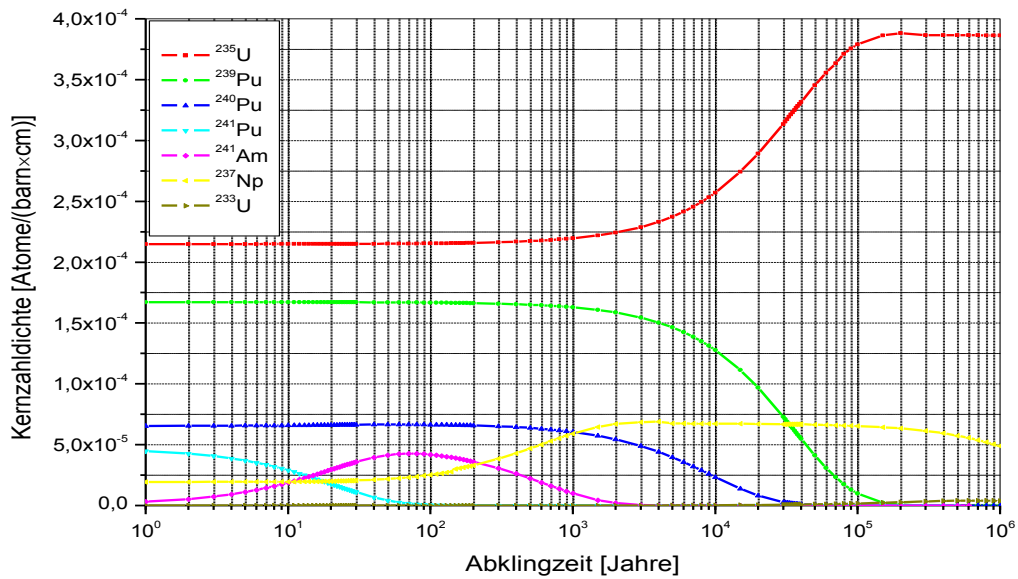


Abb. 4.1 Zeitliche Änderung der Aktinoidkonzentrationen in einem repräsentativen abgebrannten Kernbrennstoff während der Nachverschlussphase
4,4 % Anreicherung, 50 GWd/tSM Abbrand; repräsentative Bestrahlungsbedingungen

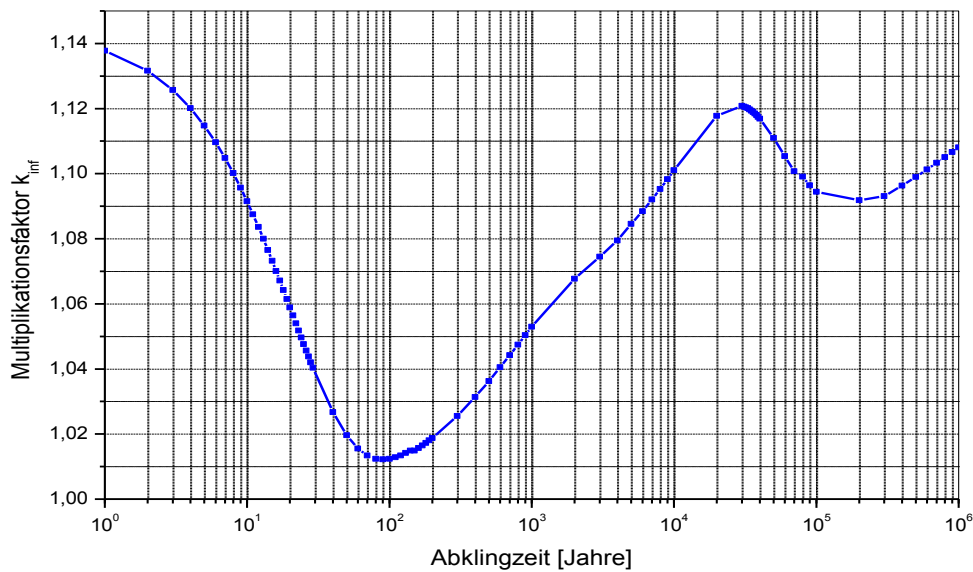


Abb. 4.2 Zeitlicher Verlauf des infiniten Multiplikationsfaktors k_{inf} über 1 Mio. Jahre für einen repräsentativen abgebrannten Kernbrennstoff

Der qualitative Verlauf des Multiplikationsfaktors für einen abgebrannten Kernbrennstoff ist durch die unterschiedlichen Halbwertszeiten der einzelnen reaktivitätserhöhenden Isotope wie ^{239}Pu bzw. -erniedrigenden Isotope wie ^{240}Pu zu erklären und seit län-

gerem bekannt, vgl. z. B. /GMA 09/. Allerdings wird daraus nicht ersichtlich, ob die unterstellten Bestrahlungsparameter während des Reaktoreinsatzes, die für eine Kritikalitätsanalyse im Zeitbereich der Zwischenlagerung als konservativ anerkannt sind, es auch für die wesentlich längere Zeitspanne der Nachverschlussphase sind. Insbesondere ist nicht *per se* klar, ob es für den gesamten Zeitbereich zweckmäßig ist, die spektralrelevanten Bestrahlungsparameter sämtlich zu maximieren bzw. minimieren, oder ob bestimmte Kombinationen für Zeiträume jenseits 100 Jahre zu einer höheren Reaktivität führen können.

Um die Annahme der Konservativität spektral verhärtender Bestrahlungsparameter auch für längere Zeiträume zu überprüfen, wurde mittels der stochastischen „Monte Carlo Sampling“ Technik eine große Anzahl an Einzelrechnungen zur Inventarberechnung durchgeführt. Ziel war, mögliche Parameterkombinationen und Abklingzeiträume zu identifizieren, die zu Werten von k_{inf} führen welche höher liegen als auf Basis der zunächst für alle Abklingzeiten als abdeckend konservativ unterstellten Parameterkombination.

Dazu wurden die Werte spektral relevanter Bestrahlungsparameter sowie der Abklingzeit innerhalb ihrer jeweiligen realistischen Bandbreite zufällig variiert („gewürfelt“), und diese Parametersätze in entsprechende Eingabedateien für den Abbrandcode OREST eingespeist. Die unterstellte Anfangsanreicherung betrug wie oben 4,4 Gew.-% ^{235}U . Die auf diese Weise ermittelten Inventare wurden anschließend in das bestehende Rechenmodell des infiniten Stabgitters für CSAS1 eingespeist und der zugehörige Multiplikationsfaktor berechnet.

Insgesamt wurden vier Eingangsparameter jeweils gleichzeitig variiert:

- Die Kühlmitteltemperatur,
- Die (konstante mittlere) Borkonzentration im Kühlmittel,
- Die (konstante mittlere) Leistung
zu Zwecken der Vergleichbarkeit wurde die Bestrahlungsdauer automatisch so angepasst, dass ein konstanter Abbrand von 50 GWd/tSM erreicht wurde, und
- Die Zerfallszeit nach Bestrahlungsende.

Dies sind die wesentlichen Parameter, welche in einem eindimensionalen Abbrandcode das Neutronenspektrum bei der Inventarberechnung für ein DWR-Brennelement bestimmen. Zudem sind sie repräsentativ im Hinblick auf spektrale Verhärtung, wes-

halb die Variation von vier Parametern ausreicht. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen wurden für alle Parameter als Gleichverteilung über ihren jeweiligen unterstellten Wertebereich angenommen. Alle anderen Parametereinstellungen wurden belassen.

Diese zufällige Variation der Eingangsparameter für die Inventarbestimmung, die Ansteuerung der Abbrandrechnungen, die automatisierte Konvertierung und Übertragung der berechneten Inventare in Eingabedateien für CSAS1, die Ansteuerung der Kritikalitätsrechnungen, sowie die Auswertung der ermittelten Werte für k_{inf} wurden mit Hilfe des in der GRS entwickelten und für die Anwendung in diesem Vorhaben geeignet erweiterten Werkzeugs SUnCISTT /KIR 11/ für stochastische Analysen durchgeführt.

Diese Parametervariation wurde zwei Mal durchgeführt: Erst wurde die Zerfallszeit in einem Bereich von 5 bis 1 000 000 Jahren gewürfelt, dann ein zweites Mal im Bereich von 1 bis 1000 Jahren. Ziel war, bei der grafischen Analyse der Ergebnisse auf einer logarithmischen Zeitskala eine ausreichende Punktdichte auch in den Zerfallszeiten bis zu 1000 Jahren zu erzielen. Pro Durchgang wurden 10 000 Rechenläufe (jew. OREST+CSAS1) durchgeführt.

Genauere Details zur Modellierung und skriptgesteuerten Umsetzung, welche den Rahmen der vorliegenden Dokumentation übersteigen, sind in dem technischen Bericht /BOC 12/ beschrieben.

In **Abb. 4.3** sind die mit Hilfe von SUnCISTT errechneten Multiplikationsfaktoren der Variationen für beide Zeitbereiche sowie die deterministisch bestimmten Einhüllenden auf Basis der Maxima und der Minima der Definitionsbereiche der spektral verhärtenden Parameter eingezeichnet.

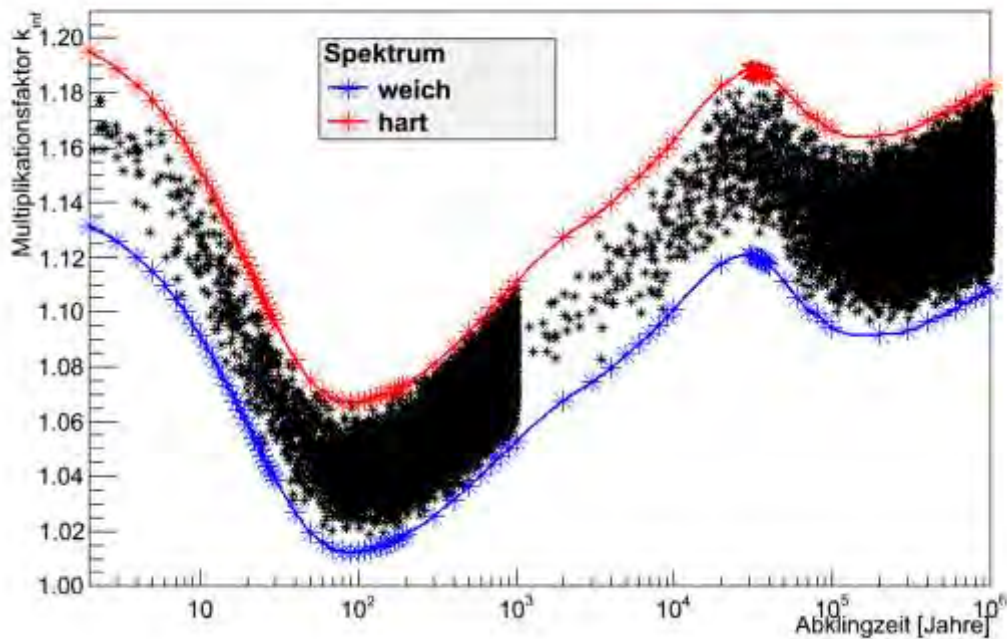


Abb. 4.3 Multiplikationsfaktoren k_{inf} für infinite Stabanordnungen mit 4,4 % Anfangsanreicherung und 50 GWd/tSM Abbrand mit statistisch variierten Abbrandbedingungen und Abklingzeiten

Rot eingezeichnet ist der zeitliche Verlauf des infiniten Multiplikationsfaktors für das Nuklidinventar, welches auf der Basis der o. g. Parameterwahl bestimmt wurde, die zu maximaler spektraler Verhärtung führt. Blau ist der entsprechende Verlauf für den Parametersatz, der zu einem maximal thermalisierten Neutronenspektrum führt. Schwarz sind diejenigen Multiplikationsfaktoren, welche sich aufgrund der jeweiligen Inventare ergeben, die mittels der stochastisch variierten Parametersätze und Abklingzeiten bestimmt wurden. Man erkennt, dass die rote und die blaue Kurve einhüllend für alle Abklingzeiten sind. Für jeden Zeitpunkt liegen die auf stochastisch definierten Bestrahlungsparametern ermittelten Multiplikationsfaktoren unterhalb der roten Kurve, für die alle betrachteten Bestrahlungsparameter auf ihren maximal spektral verhärtenden Wert ihres Definitionsbereichs gesetzt wurden.

Daraus folgt insbesondere, dass die für Zeiträume der Zwischenlagerung als konservativ hinsichtlich Kritikalität anerkannten abdeckenden Bestrahlungsbedingungen auch darüber hinaus für den Betrachtungszeitraum der Nachverschlussphase zunächst als konservativ gelten können, so lange das Moderationsverhältnis als konstant angenommen wird. Es ist zu beachten, dass zum radioaktiven Zerfall parallel ablaufende Degradationsprozesse Änderungen im Moderationsverhältnis bewirken können. Diese

haben einen zusätzlichen überlagernden Einfluss auf die Evolution des Multiplikationsfaktors, der im Detail von dem jeweils zu Grunde gelegten Degradationsverlauf abhängt. Dies ist in der eben beschriebenen Parameterstudie noch nicht berücksichtigt.

Die zeitliche Degradationsevolution ist, wie in Kapitel 2.4 beschrieben, mit großen Unsicherheiten verbunden. Zudem verläuft diese Evolution nicht in Schritten sondern kontinuierlich, was eine Modellierung in einem Kritikalitätsrechenverfahren auf Basis von durch Monte Carlo Sampling zufällig gewählten Zeitpunkten zunächst erschwert. Eine schrittweise Modellierung des Degradationsverlaufs in dem Kritikalitätscode mit geeigneter Wahl der Zeitschritte könnte hierfür eine erste sinnvolle Näherung darstellen. Im Sinne der beschriebenen Methodenentwicklung ist für diese generische Betrachtung die Untersuchung des hier betrachteten konstanten infiniten Stabgitters ausreichend. Bei Analyse weiterer, über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehender Szenarienabläufe kann eine zusätzliche Modellierung unterschiedlicher, von der Lagerungszeit abhängiger, geometrischer Konfigurationen in dem Kritikalitätscode erforderlich werden. Die notwendige genaue Definition dieser Abläufe und Anordnungen sowie deren Einordnung auf der Zeitskala können dabei spezifisch für das jeweilige Wirtsgestein an einem konkreten Standort sein. Die beschriebene Einbindung eines Abbrand- und eines in Serie dazu aufgerufenen Kritikalitätscodes in die modulare SUnCISTT-Umgebung erlaubt eine entsprechende problemspezifische Erweiterung auf einfache und unkomplizierte Art und Weise: Zuerst werden entsprechende sukzessiv eintretende Konfigurationen eines unterstellten Degradationsverlaufs identifiziert und dann mit einem geeigneten Kritikalitätsrechenverfahren modelliert. Anschließend wird die selektive Auswahl einer dieser zeitabhängigen Degradationskonfigurationen zu einem weiteren „unsicheren“ Parameter der SUnCISTT-Analyse, d. h. parallel zu allen anderen gewürfelten Parametern wird im Rahmen der Bandbreite der zeitlichen Einordnung zufällig eine geometrische Konfiguration ausgewählt, die für die jeweilige Kritikalitätsrechnung auf Basis des chronologisch zugehörigen Inventars² herangezogen wird.

Diese erweiterte Art der Modellierung wäre ggf. auch für das ursprüngliche Szenario 3 /GMA 09/, die selektive Akkumulation von Brennstoff im Behälternahfeld, bereits in der

² Bei der Unterstellung unbestrahlten Urandioxid-Brennstoffs entfällt diese Korrelierung von Degradationsschritt und Inventarbestimmung, vgl. Kapitel 2.1. Für als bestrahlt ebenso wie unbestrahlt unterstellten MOX-Brennstoff sind dagegen aufgrund des hohen Plutoniumanteils analog zu **Abb. 4.2** signifikante zeitliche Schwankungen in k_{eff} während des Betrachtungszeitraums zu erwarten.

vorliegenden generischen Analyse sinnvoll gewesen, um eine sukzessive Ausbreitung der spaltbaren Nuklide in das Nahfeld anzunähern. Dieses Szenario wurde aber aus der Untersuchung ausgenommen, da im Betrachtungszeitraum keine für Kritikalität ausreichende akkumulierte Brennstoffmenge im Nahfeld erwartet wird, vgl. Kapitel 2.2.3. Die Methodik dafür als solche steht aber grundsätzlich zur Verfügung.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass alle übrigen rechnerischen Herausforderungen, welche die Berücksichtigung des Abbrands ganz allgemein stellt /BEH 11/, natürlich auch für die Fragestellungen im Bereich der Endlagerung gelten. Dazu gehört insbesondere die belastbare Validierung der Rechenverfahren, d. h. des Inventarberechnungssystems (Abbrandcode) sowie des Kritikalitätsrechenverfahrens.

4.3 Zusammenfassung

Zur Berücksichtigung des Brennelement-Abbrands in Kritikalitätsanalysen zur Nachverschlussphase eines Endlagers für ausgediente Brennelemente wurde bislang national wie international eine ganze Reihe von überwiegend numerischen Analysen durchgeführt. In diesem Vorhaben wurden darüber hinaus Überlegungen angestellt und diskutiert, inwieweit die Umsetzung dieser Abbrandberücksichtigung in der Praxis realisierbar ist und welche Anforderungen erfüllt werden müssen. Ziel ist die Identifikation und Diskussion abdeckender Annahmen und Kriterien zur Berücksichtigung des Brennelementabbrands bei Kritikalitätsanalysen zur Endlagerung. Als Grundlage dienten u. a. die in den vorangegangenen Vorhaben erzielten Ergebnisse hinsichtlich der Berücksichtigung langlebiger Abbrand-Nuklide, insbesondere höherer Aktinoide, sowie axialer Abbrand-Profile. Das Augenmerk richtete sich dabei auch auf eine praktische Realisierbarkeit und Prüfbarkeit von Anforderungen zur Abbrandberücksichtigung. Dabei wird in den Kritikalitätsrechnungen für bestrahlte Brennelemente nicht mehr konservativ vereinfachend von frischem Kernbrennstoff ausgegangen, sondern bis zu einem gewissen, sicherheitstechnisch vertretbaren Maß von den reaktivitätsmindernden Effekten, die sich im Brennstoff durch den Reaktoreinsatz einstellen, Kredit genommen. Dieses Vorgehen erfordert nach den Grundprinzipien der Kritikalitätssicherheit eine entsprechende Qualifizierung der eingesetzten Rechenverfahren sowie Möglichkeiten zur Überprüfung des Brennelementabbrands in der Praxis.

Ein erster wesentlicher Punkt bei der Berücksichtigung des Abbrands betrifft die Anforderung des Nachweises, dass jedes einzelne Brennelement den dafür unterstellten

Abbrand auch mit hinreichender Konfidenz mindestens erreicht hat. Im Blick stehen Reaktoreinsatzaufzeichnungen sowie messtechnische Nachweismethoden, vom einfachen Gammascan als Entscheidungsmessung „bestrahlt ja/nein“ bis hin zu aufwändigen quantitativen Verfahren. Da hier im Hinblick auf die Endlagerung in Deutschland derzeit keine entsprechenden Nachweisanforderungen bestehen, wurde abgeschätzt, inwieweit man auf Basis der gegenwärtigen Praxis bei der Zwischenlagerung Rückschlüsse auf eine mögliche Abbrandberücksichtigung bei der Endlagerung ziehen kann. Dazu werden die wesentlichen Aspekte einer Abbrandberücksichtigung bei Kritikalitätsanalysen zur Nachverschlussphase eines geologischen Endlagers dargestellt und erläutert. Dabei müssen neben den langzeitlichen Veränderungen von Nuklidkonzentrationen auch mögliche Degradationsszenarien der Brennelemente in Betracht gezogen werden. Ferner sind die relevanten sicherheitstechnischen Anforderungen der Norm DIN 25472 „Kritikalitätssicherheit bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe“ und der Norm DIN 25712 „Kritikalitätssicherheit unter Anrechnung des Brennstoffabbrands bei Transport und Lagerung bestrahlter Leichtwasserreaktor-Brennelemente in Behältern“ zu berücksichtigen. Unter Einbeziehung aller relevanten Aspekte kommt die Untersuchung zu dem Ergebnis, dass eine Abbrandberücksichtigung bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe aus derzeitiger Sicht nur unter Anrechnung eines Mindestabbrands bis ca. 15 MWd pro kg Schwermetall bei praktisch vertretbarem Aufwand für Nachweisführung und Kontrollen sinnvoll erscheint. Eine denkbare Variante besteht in der Berücksichtigung des für einige Zwischenlagerbehälter für DWR-Brennelemente und Anfangsanreicherungen über 4,05 Gew.-% ^{235}U bereits genehmigten Mindestabbrands von 12 GWd/tSM /BFS 03/ bei den entsprechenden Brennelementen.

Der zweite wesentliche Aspekt für Analysen mit Abbrandberücksichtigung ist eine hinsichtlich Kritikalität abdeckende Bestimmung des relevanten Nuklidinventars. Hier gelten prinzipiell die gleichen neutronenphysikalischen Randbedingungen wie bei der Zwischenlagerung. Hierbei wichtige Größen und Parameter betreffen Einflüsse während der Bestrahlung im Reaktor, die zu einer Verhärtung des Neutronenspektrums führen können. Entsprechende abdeckende Annahmen hinsichtlich Kritikalität für Zeiträume einiger Jahrzehnte sind seit längerem bekannt und anerkannt. In diesem Vorhaben konnte durch den Einsatz stochastischer Verfahren gezeigt werden, dass die zu Grunde liegenden Annahmen für die Bestrahlung bis auf einige, letztlich nicht Ausschlaggebende Randerscheinungen, auch für Betrachtungszeiträume bis zu einer Million Jahren als konservativ im Sinne der Kritikalitätssicherheit angenommen werden können.

5 Internationaler Stand von Wissenschaft und Technik bei Kritikalitätsanalysen zur Nachverschlussphase

5.1 Einführung

In dem Vorhaben WS 1005/8488-2 wurden in einem Literaturbericht /KIL 04/ wesentliche internationale Arbeiten zur Kritikalitätssicherheit in der Nachverschlussphase eines Endlagers bis zum Jahr 2004 zusammengestellt. In dem vorliegenden Kapitel wird ausgehend von jenem Bericht ein Überblick über neuere internationale Arbeiten und den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik zu diesem Thema gegeben. Detaillierte Informationen sind der referenzierten Literatur und den darin enthaltenen weiterführenden Quellen zu entnehmen.

In den letzten Jahren wurden zahlreiche weiterführende Untersuchungen zur Langzeitsicherheit von Endlagern durchgeführt. Darüber hinaus wurden in der Zwischenzeit in verschiedenen Ländern bereits Genehmigungen zur Errichtung eines Endlagers für abgebrannte Kernbrennstoffe beantragt. In 2008 war dies in den USA durch das U.S. Department of Energy der Fall, 2011 bzw. 2012 erfolgten die Anträge durch Tochterunternehmen der Kernkraftwerksbetreiber in Finnland und in Schweden. Teil der Genehmigungsanträge ist immer auch ein Nachweis zur Kritikalitätssicherheit des geplanten Endlagers. Daher fassen die Antragsunterlagen die bis zum Zeitpunkt des Antrags vorliegenden und das jeweilige Endlagerkonzept betreffenden Arbeiten zu diesem Thema zusammen. Sie stellen auch gute Quellen für weiterführende Literatur dar. Die bisher durchgeführte Literaturlauswertung zeigte, dass für die erste Phase der angesprochenen Genehmigungsverfahren noch keine abschließenden bzw. vollständigen Untersuchungsergebnisse vorliegen. Ergänzungen der vorgelegten Arbeiten sind in späteren Phasen der Verfahren möglich und in der Regel auch für die eingebrachten Anträge vorgesehen. Daher sind im Folgenden die hier diskutierten Arbeiten, die in Genehmigungsverfahren eingebracht wurden, als Darstellung des aktuellen Stands der Untersuchungen und nicht als vollständige Kritikalitätssicherheitsanalyse zu verstehen.

Bei der Betrachtung der Kritikalitätssicherheit für die Nachverschlussphase eines Endlagers wird typischerweise der Zutritt von Lösung bzw. Wasser als Moderator bzw. korrodierendem Agens unterstellt. Andernfalls kann für typische, zur kommerziellen Stromerzeugung genutzte Kernbrennstoffe eine Kritikalität unter Endlagerbedingungen

insbesondere aufgrund der Moderationsbedingungen ausgeschlossen werden. Entsprechend wird in den nachfolgend diskutierten Arbeiten jeweils der Zutritt von Wasser unterstellt, auch wenn dies zur besseren Lesbarkeit hier nicht immer explizit erwähnt wird. Ebenso ist mit der Bezeichnung „intakter Behälter“ – wenn nicht anders beschrieben – grundsätzlich ein mit Wasser gefluteter Behälter bei ansonsten intakter Konfiguration gemeint.

5.2 China

China betreibt derzeit den Auf- bzw. Ausbau der kommerziellen Nutzung der Kernkraft massiv voran. Zu den bereits existierenden 7 Kraftwerken mit insgesamt 15 Blöcken sind weitere 8 Kraftwerke mit insgesamt 32 Blöcken in Bau bzw. in Planung. In den nächsten Jahren ist daher mit einem Anwachsen der anfallenden Menge an abgebrannten Kernbrennstoff auf etwa 800 tSM pro Jahr zu rechnen. Aktuell wird in China der Aufbau eines geschlossenen Brennstoffkreislaufes mit Wiederaufarbeitung des abgebrannten Brennstoffes aus Druckwasser- und Brutreaktoren angestrebt /HUO 11/. Für abgebrannte Brennstoffe aus CANDU- und Hochtemperaturreaktoren liegt hingegen noch kein endgültiges Konzept für deren weitere Verwertung vor. Als Alternative zur Wiederaufarbeitung dieser beiden Brennstoffarten wird auch eine direkte Endlagerung erwägt. So wurden bereits generische Studien zur Kritikalitätssicherheit bei unterstellter Endlagerung von abgebranntem Brennstoff unternommen. In der vorliegenden Recherche wurden nur wenige chinesische Arbeiten zu diesem Thema gefunden, die bislang auch nur die generellen Effekte einer Langzeitlagerung betrachteten.

Konkretere Arbeiten zur Kritikalitätssicherheit werden in /CAO 11/ diskutiert. Dort wird die zeitliche Entwicklung des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund des Zerfalls der Aktinoiden über lange Zeiträume (bis 10^9 Jahre) am Beispiel des chinesischen Transportbehälters CNFC-3G betrachtet. Der Behälter wird mit einer Beladung von 21 Brennelementen vom Typ AFA-3G mit einer Anreicherung von 4,45 % angenommen. Kritikalitätssicherheit ist beim intakten Behälter aufgrund seiner Auslegung für den gesamten betrachteten Zeitraum gewährleistet. Eine mögliche Korrosion des Gebindes wurde bislang nicht explizit untersucht. Sie wird nur qualitativ diskutiert. In diesem Zusammenhang wird argumentiert, dass eine Korrosion des Gebindes grundsätzlich zu einer verringerten Moderation und damit zu einer Verminderung des Neutronenmultiplikationsfaktors führt. Aufgrund dieser Argumentation wurden bislang keine weiteren Degradationsszenarien untersucht. Der Vergleich mit anderen internationalen Arbeiten

zeigt aber, dass eine solche Annahme nicht in jedem Fall getroffen werden kann. Weiter gehende Arbeiten aus China wurden bislang nicht gefunden.

5.3 Finnland

Im Dezember 2012 wurde von Posiva, einem Tochterunternehmen der finnischen Kernkraftwerksbetreiber, die Genehmigung zum Bau eines Endlagers für abgebrannte Kernbrennstoffe in Olkiluoto bei der zuständigen finnischen Genehmigungsbehörde eingereicht. Fertigstellung und Beginn der Einlagerung ist für etwa 2020 geplant. Das Konzept ist ähnlich dem schwedischen Endlagerkonzept KBS-3V (Kapitel 5.6).

Das geplante Endlager in Olkiluoto ist in einer Tiefe von etwa 400 – 450 m in Granitgestein vorgesehen /POS 12/. Die Kapazität ist so ausgelegt, dass eine Einlagerung von etwa 9000 tSM möglich ist. Diese Menge setzt sich aus den abgebrannten Brennstoffen der finnischen kommerziellen Kernkraftwerke, d. h. aus SWR-, DWR- und VVER- Brennelementen, zusammen, die in kupferummantelten Behältern mit 12 SWR- bzw. VVER-Brennelementen oder 4 DWR-Brennelementen verpackt werden sollen. Die Platzierung der Behälter im Endlager ist in vertikalen Bohrlöchern vorgesehen.

Die Langzeitsicherheitsanalyse des Endlagers ist u. a. in dem Bericht /POS 12a/ wiedergegeben, in dem auch die Arbeiten zur Kritikalitätssicherheit beschrieben sind. Dort wird im Wesentlichen Bezug auf die Arbeiten in /ANT 05/ genommen, in denen die verschiedenen Behältertypen hinsichtlich ihres maximalen Neutronenmultiplikationsfaktors bei Beladung mit frischen Brennelementen untersucht wurden. Die Untersuchungen in /ANT 05/ stellen eine herkömmliche Kritikalitätssicherheitsanalyse in rein deterministischer Form mit konservativer Modellierung für den intakten Behälter dar. Im Fall der VVER- und SWR-Behälter wurde gezeigt, dass diese für eine Beladung mit einer Anreicherung von 4,2 % bzw. 3,8 % das Kriterium bezüglich des Neutronenmultiplikationsfaktors von $k_{\text{eff}} < 0,95$ erfüllen. Dagegen ist bei einer Beladung mit DWR-Brennstoff (EPR) bei 4,0 % Anreicherung ein Mindestabbrand von etwa 20 GWd/tSM notwendig, um $k_{\text{eff}} < 0,95$ zu gewährleisten. Die Arbeiten in /ANT 05/ beinhalten keine Langzeitbetrachtungen oder Degradationsszenarien. Hierzu wurde auf schwedische Arbeiten in /AGR 10/ verwiesen, da das Behälterkonzept sehr ähnlich ist (vgl. Kapitel 5.6). An weiteren Untersuchungen zur Langzeitsicherheit wird derzeit gearbeitet und sollen in späteren Phasen des Genehmigungsverfahrens vorgelegt werden /POS 12b/.

Bezüglich einer möglichen Kritikalität im Nah- bzw. Fernfeld außerhalb der Behälter wird in /POS 12a/ wiederum auf schwedische Arbeiten /SKB 10a/ verwiesen, sowie auf ältere Arbeiten /BEH 78/, /OVE 96/, /OVE 97/ /VAN 95/ bzw. auf Arbeiten zum Yucca Mountain Projekt /NIC 08/, die ebenfalls in der schwedischen Sicherheitsanalyse /SKB 11/ herangezogen wurden. Aufgrund dieser Arbeiten kommt man zu dem Schluss, dass eine Kritikalität außerhalb des Behälters nur mit einer sehr geringen Wahrscheinlichkeit möglich ist. Ähnlich wurde beim Aspekt der möglichen Auswirkungen einer Exkursion im Endlager vorgegangen. Hierzu wurden britische und US-amerikanische Arbeiten /NDA 10a/, /DOE 08c/ referenziert, die darlegen, dass im Fall einer Exkursion nur geringe Auswirkungen für ein Endlager zu erwarten sind (vgl. Kapitel 5.5 und 5.7). Auch die hier angeführten Arbeiten sind durch weitere noch durchzuführende Untersuchungen zu ergänzen /POS 12b/.

Neben Brennstoff für kommerzielle Leistungsreaktoren wurde auch die Kritikalitätssicherheit bei der Endlagerung von Brennstoff aus dem finnischen Forschungsreaktor FiR1 vom Typ TRIGA Mark II untersucht /RAN 11/. Dieser Brennstoff besteht aus einer Uran-Zirkoniumhydrid-Matrix mit bis zu 12 Gew.-% Uran einer Anreicherung von 20 %. Zur Einlagerung dieser Brennstoffe wird ein DWR-Behältertyp herangezogen, dessen 12 Brennelement-Positionen durch spezielle Tragekörbe modifiziert werden. In jede dieser 12 Positionen können in jeweils 5 Lagen je 3x3 Brennstäbe eingeladen werden. Untersucht wurden der intakte Behälter mit Voll- und verschiedenen Teilbeladungen, sowie mit verschiedenen Materialien, die die Freiräume des Behälters ausfüllen, vor allem Wasser und Sand. Ferner wurde die Degradation der zusätzlich eingebrachten Tragekörbe betrachtet. Dabei wurde u. a. die Formierung von 4x4-Anordnungen von Brennstäben in allen Behälterposition unterstellt, d. h. Brennstäbe höher gelegener Lagen rutschen in tiefer liegende Lagen ab. Ein Neutronenmultiplikationsfaktor oberhalb des Grenzwerts von 0,95 wurde bei Vollbeladung lediglich für das Szenario der angenommenen 4x4-Anordnungen der Brennstäbe identifiziert. Alle anderen untersuchten Fälle ergaben Werte des Neutronenmultiplikationsfaktors weit unterhalb des Grenzwerts. Da bereits fünf der 12 Behälterpositionen zur Aufnahme der während der geplanten Laufzeit des Reaktors anfallenden Brennstäbe ausreichen, wurde auch der teilbeladene Behälter mit 4x4-Anordnungen von Brennstäben untersucht. Dabei führte die Wahl von fünf möglichst außen liegenden genutzten Behälterpositionen zu einer signifikanten Reduktion des Neutronenmultiplikationsfaktors, der damit deutlich unterhalb des Grenzwerts liegt.

5.4 Frankreich

In Frankreich koordiniert bzw. betreibt seit 1991 die „Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs“ (ANDRA) die Aktivitäten zur Endlagerforschung. 2005 wurden von ANDRA die bis zu diesem Zeitpunkt gesammelten Ergebnisse zur Endlagerung von hochradioaktiven, langlebigen Abfällen in zwei Berichte „Dossier 2005 Granite“ und „Dossier 2005 Argile“ /AND 05/ zusammengestellt. Diese betrachteten die Endlagerung in Granitgestein bzw. in Tongestein. Durch die Wiederaufarbeitung in Frankreich fallen unter die hochradioaktiven, langlebigen Abfälle hauptsächlich die verglasten HAW-Abfälle aus der Wiederaufarbeitung. Die Option, auch abgebrannten Kernbrennstoff endzulagern, wird aber nicht generell ausgeschlossen. Daher werden in den Berichten „Dossier 2005 Granite“ und „Dossier 2005 Argile“ verschiedene Szenarien mit unterschiedlichen Abfallmengen aus der Wiederaufarbeitung und in Form von abgebranntem Kernbrennstoff diskutiert. Die Konzepte für Granit- und Tongestein unterscheiden sich in der Klassifizierung der Abfälle und aus Sicht der Kritikalitätssicherheit nur unwesentlich, sodass für beide Varianten auf dieselben Untersuchungen zur Kritikalitätssicherheit zurückgegriffen wurde /AND 05/.

Die endzulagernden Abfälle werden im „Dossier 2005“ in Typ „B“, bestehend aus Hüllrohren, Endstücken, etc. aus der Wiederaufarbeitung, sowie in Typ „C“, bestehend aus verglasten, nicht verwertbaren Spaltprodukten und Aktinoiden aus den wiederaufarbeiteten abgebrannten Brennelementen, und in nicht wiederaufgearbeiteten Brennelementen unterschieden. Für die Typ „B“-Abfallgebinde ist eine Einlagerung in Kammern von bis zu 250 m Länge und 10°m – 12 m Durchmesser vorgesehen, wohingegen die Typ „C“-Abfallgebinde in Bohrlöchern eingelagert werden sollen. Das Konzept für abgebrannte Brennelemente sieht Behälter mit vier Urandioxid-Brennelementen oder einem Mischoxid-Brennelement vor, welche ebenfalls in Bohrlöchern eingelagert werden sollen.

Die Kritikalitätssicherheit der Abfallgebinde vom Typ „B“ ergibt sich aus der maximal zulässigen Menge an spaltbarem Material. Diese ist zu gering, um einen kritischen Zustand zu erreichen /AND 05a/. Ähnliches gilt für die Abfallgebinde von Typ „C“. Für diese zeigen konservative Modellrechnungen, dass der reaktivste Zustand erreicht wird, wenn durch Risse in der Glasmatrix Wasser eindringen kann; selbst dann bleibt Kritikalität ausgeschlossen. Eine Ausnahme bildet der als Konzeptstudie untersuchte Typ „C4“, welcher mit insgesamt bis zu 4 kg eine größere Menge an Plutonium als die anderen Gebindetypen enthalten kann. Um für diesen Gebindetyp Kritikalität zu errei-

chen, ist ein kompletter Verlust des im Glas enthaltenen Borgehalts von 18 Gew.-% B_2O_3 am Glasanteil des Gebindes zu unterstellen. Allerdings ist bereits 1 Gew.-% B_2O_3 am Glasanteil ausreichend, um Kritikalitätssicherheit zu gewährleisten.

Die Untersuchungen zur Kritikalitätssicherheit für die Endlagerung abgebrannter Kernbrennstoffe werden ausführlich in /AND 05b/ diskutiert und im „Dossier 2005 Argile“ /AND 05a/ zusammengefasst. Zunächst betrachten diese Untersuchungen in einer herkömmlichen deterministischen Analyse die Kritikalitätssicherheit der intakten Behälter, wie sie für den Transport und die Handhabung benötigt wird. Zusätzlich werden für den Langzeitsicherheitsnachweis verschiedene Degradationszustände analysiert. Diese unterscheiden dabei die Degradation eines einzelnen Brennelements oder des gesamten Behälters. Für ein einzelnes Brennelement wurden z. B. ein Verbiegen der Brennstäbe, Brechen der Hüllrohre und damit verbundenem Herauslösen einiger Brennstäbe aus dem Brennelement, oder Ansammeln von losem Brennstoff (Pellets) am Boden des Behälters untersucht. In der Regel führen diese Veränderungen in der Brennstoffgeometrie zu einer reduzierten Moderation und so zu einer reduzierten Reaktivität. Lediglich in Situationen, in denen es zu einer Aufweitung des Brennelements, also zu einem vergrößerten Brennstababstand kommt, wurde eine deutliche Erhöhung der Reaktivität gegenüber dem intakten Brennelement gefunden. Diese Untersuchungen zeigen, dass so zwar rechnerisch ein kritischer Zustand erreicht werden könnte, allerdings ist kein Prozess erkennbar, welcher in einer realistischen Weise zur Entstehung einer solchen geometrischen Anordnung führen könnte. Ähnliches gilt für die Betrachtung eines Endlagerbehälters mit vier Brennelementen. Auch hier führten die untersuchten Degradationsszenarien, im Wesentlichen die Korrosion des Behälters und Auffüllung der Leerräume mit Korrosionsprodukten oder das Kollabieren des Behälters, zur Verringerung der Moderation. Eine Erhöhung der Reaktivität konnte dagegen im Falle eines „Zusammenrückens“ der intakten Brennelemente ermittelt werden. D. h. die Behälterstrukturen zwischen den vier Brennelementen müssten z. B. durch Korrosion in ihren Dicken reduziert werden, ohne dass die Brennelemente beschädigt oder Korrosionsprodukte die Zwischenräume der Brennelemente ausfüllen. Auch zu diesem Szenario konnte kein entsprechender glaubhafter Entstehungsprozess gefunden werden. Daher wird in /AND 05a/ das Entstehen eines kritischen Zustands als sehr unwahrscheinliches Ereignis eingeschätzt.

Zusätzlich zur Untersuchung zum Kritikalitätsausschluss wurden auch mögliche Auswirkungen einer postulierten Kritikalität analysiert. Dazu wurde das oben angesprochene hypothetische „Zusammenrücken“ der intakten Brennelemente innerhalb eines Be-

hälters als mögliches Entstehungsereignis der Kritikalität herangezogen. Zwei Fälle wurden unterschieden: Das Zusammenrücken der Brennelemente mit 40 GWd/tSM Abbrand und 40 000 Jahren Abklingzeit von einem Abstand von ursprünglich 21 cm auf einen Abstand von 5 cm, und das komplette Zusammenrücken der Brennelemente. Im ersten Fall ergibt sich eine Reaktivitätszunahme von etwa 1000 pcm, im zweiten Fall von etwa 7300 pcm. Aus den dadurch entstehenden postulierten Exkursionen wurden Temperaturen für Brennstoff und direkte Behälterumgebung von etwa 65 °C und 60 °C im ersten Fall und von etwa 230 °C und 160 °C im zweiten Fall abgeschätzt. Auswirkungen auf die Eigenschaften des Verfüllmaterials oder des umgebenden Gesteins in direkter Behälterumgebung sind nach /AND 05a/ nur im zweiten Fall zu betrachten. Diese werden als lokal begrenzt eingeschätzt, weshalb eine Beeinträchtigung der generellen Integrität des Endlagers nicht erwartet wird.

Um die Möglichkeit einer Ansammlung von Spaltmaterial außerhalb der Abfallgebinde bzw. Brennelementbehälter und damit die Möglichkeit der Entstehung einer Kritikalität außerhalb der Behälter zu beurteilen, wurden in /AND 05a/ die dafür maximal verfügbaren Spaltmaterialmengen abgeschätzt. Für die Abfallgebinde vom Typ „B“ (Hüllrohre, Endstücke, etc. aus der Wiederaufarbeitung) liegen die maximal zulässigen Mengen an enthaltenem Spaltmaterial weit unter den benötigten minimalen kritischen Massen von ^{239}Pu (510 g) und Uran mit einer effektiven Anreicherung von maximal 2 % (260 kg). Eine Kritikalität könnte somit nur zustande kommen, wenn sich Spaltmaterial aus mehreren Abfallgebänden ansammelt. Da die Gebinde in größeren Einlagerungskammern dicht gestapelt eingebracht werden sollen, wäre eine entsprechende Ansammlung von Spaltmaterial zwar theoretisch denkbar, wird aber als sehr unwahrscheinlich eingeschätzt. Ähnliches gilt für die Abfallgebinde vom Typ „C“ (verglaste, nicht verwertbare Spaltprodukte und Aktinoiden aus der Wiederaufarbeitung). Da für diese aber eine Einlagerung geplant ist, bei der die einzelnen Abfallgebinde durch Verfüllmaterial voneinander getrennt sind, wird eine Ansammlung von Spaltmaterial aus mehreren Gebänden als ausgeschlossen eingestuft. Eine Ausnahme bildet hier wieder der Konzept-Typ „C4“ durch den möglichen maximalen Gehalt an Spaltmaterial von bis zu 2,3 kg ^{239}Pu -Äquivalent. Hier wäre ein Erreichen einer kritischen Anordnung außerhalb des Gebändes vorstellbar, wird aber auch aufgrund der vielen konservativen Annahmen als unwahrscheinlich eingeschätzt /AND 05a/. Eine analoge Argumentation wird für die Brennelementbehälter herangezogen. Auch sie enthalten eine hinreichende Menge an spaltbarem Material. Hier wird ebenfalls argumentiert, dass eine Ansammlung von 260 kg Uran mit einer maximalen effektiven Anreicherung von 2 % bzw. etwa 40 kg Uran – wenn eine höhere Anreicherung von maximal 4,6 % an ^{235}U unterstellt wird – in

entsprechender Geometrie mit wirksamem Reflektor und ohne Neutronenabsorber sehr unwahrscheinlich ist. Gleiches wird für eine Ansammlung von Plutonium im Falle von MOX-Brennelementen angenommen.

5.5 Großbritannien

In Großbritannien besteht bislang kein endgültiges Konzept zur Endlagerung radioaktiver Abfälle. Vorgesehen ist die Endlagerung in tiefen geologischen Schichten in Streckenlagerung für Abfallbehälter mit mittelaktivem Abfall (ILW) und in Bohrlochlagerung für Abfallbehälter mit hochradioaktivem Abfall (HLW). Die bisher erarbeiteten Anforderungen an ein zukünftiges Endlager wurden in einem „Disposal System Safety Case (DSSC)“ /NDA 10/ zusammengefasst, der aufgrund des noch nicht definierten endgültigen Konzepts als „generisch“ eingestuft wird. Grundlage dieses Berichts sind neben britischen Studien auch einige internationale Arbeiten.

Die generelle Vorgehensweise zur Bewertung der Langzeitsicherheit basiert beim britischen Ansatz auf einem sogenannten „Risk informed approach“ /NDA 10/. D. h. die Bewertung eines zu untersuchenden Ereignisses erfolgt jeweils anhand des von ihnen ausgehenden Risikos, also der Kombination aus Eintrittswahrscheinlichkeiten und Konsequenzen. Bezogen auf die Kritikalitätssicherheit bedeutet dies, dass nicht der grundsätzliche Ausschluss einer Kritikalität im Vordergrund steht, sondern eine Reduzierung des von einer möglichen Kritikalität ausgehenden Risikos auf ein akzeptables Maß gefordert wird. Dies hat zur Folge, dass in den britischen Arbeiten weitgehende Analysen zu Eintrittswahrscheinlichkeiten und Konsequenzen einer Kritikalität unter Endlagerbedingungen enthalten sind.

Aufgrund der Wiederaufarbeitung werden nach dem bisherigen britischen Abfallkonzept abgebrannter Brennstoff, hochangereichertes Uran und Plutonium nicht als Abfall eingestuft. Deshalb wird nicht notwendigerweise von deren Endlagerung ausgegangen; dennoch wird diese Möglichkeit in Betracht gezogen und untersucht. Entsprechend dieser Abfalldefinition konzentrierten sich britische Studien bislang vor allem auf die Endlagerung von mittelaktiven Abfällen, weshalb für diese Abfallart die Entwicklung eines Endlagerkonzeptes am weitesten fortgeschritten ist. Für die Beurteilung und die Ableitung genereller Kriterien für eine Endlagerung von abgebranntem Brennstoff, hochangereichertem Uran oder Plutonium wird dagegen vermehrt auf internationale Studien zurückgegriffen, ohne dabei konkrete Konzepte zu favorisieren.

Die Anforderungen an die Kritikalitätssicherheit und die Bewertung eines möglichen Eintretens einer unbeabsichtigten Kritikalität im Zuge der Endlagerung wird im Rahmen des DSSC in einem separaten Statusreport diskutiert /NDA 10a/. Sowohl im Fall von mittel- also auch im Fall von hochradioaktiven Abfällen werden nur sehr geringe Konzentrationen an spaltbarem Material erwartet. Als wesentliche Quelle für spaltbares Material werden Spuren von abgebranntem Brennstoff in Abfällen aus der Wiederaufbereitung genannt, z. B. in den abgetrennten Spaltproduktlösungen, den kompaktierten Hüllrohren und Endkappen, oder auf anderen Materialien (Papier, Plastik, etc.) in Form von Oberflächenkontamination. Für die zu erwartenden mittleren Konzentrationen an spaltbarem Material (Summe aus Pu und U) in mittel- oder hochradioaktiven Abfall werden daher Werte deutlich unterhalb von $0,1 \text{ kg/m}^3$ abgeschätzt, woraus sich z. B. für typische HLW-Behälter mittlere Massen von ^{239}Pu und ^{235}U pro Abfallgebinde von etwa 20 g bzw. 2 g ergeben. Diese Werte liegen um Größenordnungen unterhalb der Massen, die zum Erreichen einer kritischen Anordnung notwendig sind. In bereits konditionierten HLW-Abfallgebinden wurden keine in Bezug auf Kritikalitätssicherheit signifikante Abweichung von diesen mittleren Werten gefunden /NDA 10a/.

Für mittelaktive Abfälle sind Gebinde mit einem Volumen von bis zu 3 m^3 vorgesehen. Um zu verhindern, dass durch sehr heterogene Verteilung des Spaltmaterials einzelne Gebinde eine deutlich höhere Spaltmaterialkonzentrationen enthalten, wurden zur Sicherstellung der Unterkritikalität sowohl für die Lagerung als auch für den Transport bzw. zur Reduzierung der Wahrscheinlichkeit für das Eintreten einer ungewollten Kritikalität nach Verschluss des Endlagers zusätzlich Grenzwerte für enthaltenes Spaltmaterial definiert /NIR 07/. Diese Grenzwerte variieren je nach enthaltenem Spaltmaterial bzw. der genauen Kenntnis des enthaltenen Spaltmaterials. D. h., ist sichergestellt dass lediglich Uran mit natürlicher bzw. geringer Anreicherung in einem Gebinde enthalten ist, sind deutlich höhere Mengen zulässig als bei enthaltenem Plutonium oder hochangereichertem Uran. Ebenso beeinflusst enthaltenes Material mit guten Moderationseigenschaften die erlaubten Grenzen. Diese Grenzen sind so gewählt, dass mit ihnen die Sicherheitsanforderungen für Transport, Handhabung, und (End-)Lagerung erfüllt werden.

Aufgrund der geringen Mengen an spaltbarem Material im mittel- bzw. hochaktivem Abfall wird die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten einer Kritikalität nach Verschluss des Endlagers als äußerst gering eingeschätzt /NIR 98/. Unter ungünstigen geologischen und geochemischen Bedingungen (d. h. hoher Grundwasserdurchfluss, hohe Löslichkeit für Plutonium oder Uran) sowie zusätzlicher sehr heterogener Verteilung

des Spaltmaterials in den Abfallgebinden kann ein Entstehen einer kritischen Anordnung dennoch nicht ausgeschlossen werden. Zwar liegen dazu bislang keine entsprechenden quantitativen Aussagen vor, diese werden aber derzeit erarbeitet /NDA 10a/.

Konkrete Behälterkonzepte für abgebrannten Brennstoff, hochangereichertes Uran oder Plutonium werden derzeit entwickelt. Als Grundlage für ein Behälterkonzept für abgebrannte Kernbrennstoffe wird u. a. das Behälterdesign des schwedischen KBS-3-Konzepts betrachtet /DAR 11/ (vergl. Kapitel 5.6). Bei einer angenommenen Beladung mit vier frischen DWR-Brennelementen, ähnlich denen des britischen Reaktors Sizewell B, mit einer Anreicherung von 4,2 % ergeben sich aber mit dem KBS-3-Behälter Neutronenmultiplikationsfaktoren von bis zu 1,09, die damit deutlich über dem zulässigen Wert von 0,95 liegen. In /DAR 11/ werden daher verschiedene mögliche Optionen zur Modifikation des Behälterdesigns diskutiert. Darunter sind die Berücksichtigung des Abbrands, wie das im finnischen oder schwedischen Konzept geschieht, die Verfüllung des Behälters mit Sand und das Einbringen von Neutronenabsorbern. Allerdings erweist sich keine dieser Optionen als optimale Lösung, die direkt die britischen Anforderungen erfüllt.

In Bezug auf eine mögliche Endlagerung von Plutonium werden verschiedene Konzepte diskutiert, in denen besonderes Augenmerk auf die Immobilisierung des Plutoniums gelegt wird. In /HIC 11/ wird der Einschluss von bis zu 8 kg Plutonium in Stahl- oder Kupferkanistern betrachtet, in denen das Plutonium in Form von trockenem PuO_2 -Pulver innerhalb einer Polymer-Matrix eingeschlossen wird. Durch den im Polymer vorhandenen Kohlenstoff und Wasserstoff ergibt sich bereits durch das Polymer eine gute Moderation der Neutronen, so dass der Neutronenmultiplikationsfaktor maßgeblich von dem Mengenverhältnis von Plutonium zu Polymer bestimmt wird. Insbesondere in den Konfigurationen, in denen große Gebindevolumina (bis zu 500 Liter) betrachtet wurden, wurden Multiplikationsfaktoren nahe an oder oberhalb von 1,0 errechnet. Für kleinere Gebindevolumina konnten dagegen auch Werte unterhalb von 0,7 erreicht werden. Neben dem Volumen zeigte auch die Verteilung des Plutoniums innerhalb der Polymer-Matrix deutlichen Einfluss auf den Neutronenmultiplikationsfaktor. Durch die Gravitation ist ein Absinken eines Teils des Plutoniums vor dem vollständigen Aushärten des Polymers zu erwarten, so dass die Plutoniumdichte in Richtung des Bodens des Gebindes zunehmen wird, wobei dies zu einer Minderung des Multiplikationsfaktors führt.

Neben Analysen, die ein mögliches Eintreten einer Kritikalität untersuchen, wurden seit 2001 auch verschiedene Studien zu möglichen Folgen einer unterstellten Kritikalität durchgeführt. Betrachtet wurden dabei sowohl sogenannte „quasi-steady state transients“ (QSS) sowie „rapid transients“ (RT) /MAS 09/. Die erste Transientenklasse besitzt einen negativen Temperaturkoeffizienten, so dass mit zunehmender Leistung der Exkursion und dem dadurch bedingten Temperaturanstieg im Spaltstoff-Moderator-System eine Reaktivitätsminderung eintritt. Dadurch wird ein weiterer Leistungsanstieg verhindert und es kann sich ein Gleichgewicht zwischen Spaltmaterialzufuhr und Spaltmaterialverbrauch einstellen, wodurch die Exkursion in einen quasi-stationären Zustand überführt wird. Dieses Transientenmodell wurde auch für Simulationen zum Oklo-Phänomen genutzt, worauf bereits in Kapitel 3.2.2.2 eingegangen wurde.

Die zweite Transientenklasse zeigt einen positiven Temperaturkoeffizienten. Solche Transienten können bei Spaltstoffsystemen aus Plutonium und unter sehr speziellen Bedingungen auch bei UO₂-Systemen auftreten. Durch den positiven Temperaturkoeffizienten führt ein Temperaturanstieg des Spaltstoff-Moderator-Systems zu einer Reaktivitätserhöhung, wodurch eine Exkursion verstärkt wird. Aufgrund der typischen Bedingungen innerhalb eines Endlagers wird aber erwartet, dass im Fall der Bildung einer kritischen Anordnung in der Regel der erste Transiententyp auftritt, sich also ein quasi-stationärer Zustand ausbildet /CUM 06/.

Zur Analyse dieser beiden Transientenmodelle wurden entsprechende Codes entwickelt /MAS 09a/, die jeweils für eine der beiden Klassen optimiert wurden, aber nur sehr vereinfachte Spaltstoffgeometrien betrachten. Ebenfalls eingesetzt wurde der ursprünglich für kritische Exkursionen in Lösungen entwickelte Transientencode FETCH /PAI 99/, der entsprechend den Anforderungen, die sich aus den Bedingungen in einem geologischen Endlager ergeben, erweitert wurde. FETCH wird hauptsächlich für „rapid transients“ herangezogen, ermöglicht aber die Modellierung deutlich komplexerer Geometrien als dies mit den beiden zuvor erwähnten Modellen möglich ist. Eine wesentliche Schwierigkeit bei der (Weiter-)Entwicklung dieser Codes stellt ihre Validierung aufgrund der kaum bzw. nicht vorhandenen experimentellen Daten kritischer Exkursionen und deren Auswirkungen auf die Umgebung unter Bedingungen eines geologischen Endlagers dar /MAS 09a/.

Die mit diesen Modellen durchgeführten Untersuchungen zeigen in Abhängigkeit von den angenommenen Modellparametern eine weite Bandbreite an möglichen Leistungsverläufen der unterstellten Exkursionen /MAS 09/. Die daraus abgeleiteten Aus-

wirkungen auf das Endlager variieren von vernachlässigbaren, lokal beschränkten Temperaturerhöhungen vor allem in QSS-Modellen bis hin zu Schmelzen oder Verdampfen der kritischen Anordnung und ihrer lokalen Umgebung, was v. a. in RT-Modellen möglich erscheint. Dabei führten in der Regel „quasi-steady state transients“-Modelle zu deutlich geringeren Auswirkungen, d. h. erzeugten geringere Leistungen, als „rapid transients“-Modelle. Letztere weisen insbesondere mit Plutonium als Spaltmaterial die höchsten errechneten Leistungen auf, könnten daher als konservativ abdeckende Modelle in Betracht kommen. Die Richtigkeit dieser Annahme ist aber noch zu überprüfen.

In einer generischen Studie für ein angenommenes Endlager für mittelaktiven Abfall in einer kristallinen Gesteinsformation wurden die möglichen Auswirkungen einer Exkursion näher untersucht und das Leistungsniveau einer Exkursion abgeschätzt, das notwendig ist, um das Risiko einer Inventarfreesetzung in die Biosphäre innerhalb einer Millionen Jahre nach Verschluss des Endlagers signifikant zu erhöhen /CUM 08/. Es zeigte sich, dass eine Kritikalität dieses Risiko nur wesentlich durch die Ausbildung neuer Grundwasserwegsamkeiten, d. h. hauptsächlich durch die Bildung von Spalten und Rissen in der Umgebung der kritischen Anordnung aufgrund thermischer Effekte erhöhen kann. Dagegen sind Effekte aufgrund der Bildung von Spaltprodukten und der damit einhergehenden Erhöhung des radioaktiven Inventars des Endlagers im Vergleich zu dem bereits vorhandenen Inventar vernachlässigbar. Allerdings erfordert eine wesentliche Erhöhung der Grundwasserwegsamkeit, dass die durch das unterstellte Verfüllmaterial (hier „Nirex reference vault backfill“) gebildete geochemische Barriere so stark beeinflusst wird, dass diese nahezu unwirksam wird. Das dazu nötige Leistungsniveau ist mit den abgeschätzten Spaltmaterialmengen und -verteilungen in dem mittelaktiven Abfall nicht zu erreichen. Insgesamt kommt diese Studie zu dem Schluss, dass eine oder auch mehrere unterstellte kritische Exkursionen nur lokal begrenzte Auswirkungen haben und das Endlager als solches weitgehend unbeeinträchtigt bleibt. Insbesondere ergibt sich keine wesentliche Erhöhung des Risikos einer Inventarfreesetzung. Zusammen mit der sehr geringen Eintrittswahrscheinlichkeit einer Exkursion wird Kritikalität daher insgesamt als vernachlässigbares Risiko eingeschätzt /NDA 10a/.

Zu untersuchen bleibt die Frage, ob und in welchem Maße die obigen Resultate auf konkrete Endlagerstandorte und auf eingelagerte Abfälle mit deutlich höherem Spaltstoffanteil, also abgebrannten Brennstoff, hochangereichertes Uran oder Plutonium, übertragen werden können. Entsprechende Studien stehen noch aus /NDA 10/.

5.6 Schweden

In Schweden wurde im März 2011 von der Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company (Svensk Kärnbränslehantering AB, kurz SKB), einem Tochterunternehmen der schwedischen Kernkraftwerksbetreiber, der Antrag zur Genehmigung eines Endlagers für abgebrannte Kernbrennstoffe nach dem sog. KBS-3 Konzept in Forsmark bei der zuständigen schwedischen Genehmigungsbehörde gestellt. Geplant ist die Fertigstellung und Beginn der Einlagerung der ersten Behälter für das Jahr 2025.

Der geplante Endlagerstandort befindet sich in kristallinem Gestein (Granit) etwa 500 m unter der Oberfläche /SKB 11/. Eingelagert werden sollen hier hauptsächlich abgebrannter Kernbrennstoff aus den schwedischen Leistungsreaktoren sowie in kleineren Mengen Brennstoff aus Forschungsreaktoren /SKB 10/. Insgesamt wird von einer einzulagernden Menge an Brennstoff von ca. 12.000 t Schwermetall in etwa 6.000 Behältern ausgegangen. Davon wird etwa ein Viertel Brennstoff aus Druckwasserreaktoren und drei Viertel Brennstoff aus Siedewasserreaktoren stammen. Die Einlagerung soll in vertikalen Bohrlöchern erfolgen. Als Endlagerbehälter sind kupferummantelte Behälter mit 4 Brennelementen aus Druckwasserreaktoren oder 12 Brennelementen aus Siedewasserreaktoren vorgesehen.

Die Analyse zur Langzeitsicherheit des geplanten Endlagers ist in /SKB 11/ zusammengefasst. Die beinhalteten Arbeiten zur Kritikalitätssicherheit sind im Detail v. a. in /AGR 10/ beschrieben. Sie sind rein deterministischer Natur mit konservativer Modellierung, z. T. auch mit Abbrandkredit. Um für die geplanten Behälter für 4 DWR- bzw. 12 SWR-Brennelementen Unterkritikalität während der (oberirdischen) Handhabung und des Transports zu gewährleisten (d. h. $k_{\text{eff}} < 0,95$), ist die Berücksichtigung des Brennelementabbrands sowohl für den mit DWR-Brennelementen als auch für den mit SWR-Brennelementen gefüllten Behälter notwendig. Dazu wurden die bei der geplanten Behälterkonfiguration, unter Annahme frischen Brennstoffs mit 5 % Anreicherung reaktivsten Brennelementtypen bestimmt: Typ F15x15AFA3G im Fall der DWR-Brennelemente ($k_{\text{eff}} \approx 1,089$) und Svea 96 Optima 3 mit ($k_{\text{eff}} \approx 0,996$). Mit diesen Brennelementen und unter Berücksichtigung vorhandener Unsicherheiten wurden entsprechende Beladepkurven, d. h. entsprechende Mindestabbrände zum Erreichen von $k_{\text{eff}} < 0,95$, erstellt. Dabei wurde sowohl der Fall, dass nur Aktinoiden berücksichtigt wurden, als auch der Fall, dass Aktinoiden und Spaltprodukte berücksichtigt wurden, betrachtet. Daraus ergaben sich z. B. für eine Anreicherung von 4 % Mindestabbrände für DWR-

Brennelemente von etwa 37 GWd/tSM bzw. etwa 30 GWd/tSM und für SWR-Brennelemente von etwa 12 GWd/tSM bzw. 8 GWd/tSM. Der Vergleich mit den zum Zeitpunkt der Analyse verfügbaren Brennelementdaten zeigt, dass nahezu alle zum damaligen Zeitpunkt eingelagerten Brennelemente dieses Beladekriterium erfüllen.

Da für die Behälterbeladung mit DWR-Brennelementen ein maximaler Neutronenmultiplikationsfaktor von deutlich über 1,0 erreicht werden kann, ist zur Sicherstellung der Unterkritikalität auch in der Nachverschlussphase des Endlagers dementsprechend auch die Berücksichtigung des Brennelementabbrands notwendig. Neben dem intakten Behälter wurde daher in /AGR 10/ auch das Langzeitverhalten des Brennstoffs in Form des radioaktiven Zerfalls und einiger Degradationsszenarien betrachtet. Dazu wurden zum einen das Auflösen der Brennelemente und deren Stahlkästen bei ansonsten intaktem Behälterinneren, zum anderen zusätzlich zu den Brennelementen und deren Stahlkästen das Auflösen des inneren Stahlkorpus bei intakter Kupferummantelung unterstellt. Die aufgelösten Bereiche wurden mit verschiedenen Wasseranteilen homogenisiert modelliert. In diesen Fällen wurden Neutronenmultiplikationsfaktoren $k_{\text{eff}} < 0,85$ berechnet, sodass diese Szenarien nicht weiter betrachtet wurden. Des Weiteren wurden Szenarien untersucht, in denen sich lokale Hohlräume im inneren Stahlkorpus des Behälters bilden, die die abschirmende bzw. absorbierende Wirkung des Stahls reduzieren und so zu erhöhten Neutronenmultiplikationsfaktoren führen. Diese Zunahme in k_{eff} wird in den Beladepkurven der Behälter, also in der Bestimmung des Mindestabbrands der Brennelemente je Gebinde, berücksichtigt. Gleiches gilt für die beobachtete Änderung des Neutronenmultiplikationsfaktors durch radioaktiven Zerfall der Aktinoiden in der Abbrandberücksichtigung.

Durch die Berücksichtigung der Degradationsszenarien bei der Bestimmung der Beladepkurven der Behälter wird so auch in der Nachverschlussphase des Endlagers im Prinzip (d. h. abhängig von der Vollständigkeit der betrachteten Degradationsszenarien) ein Multiplikationsfaktor von $k_{\text{eff}} < 0,95$ deterministisch sichergestellt.

Zu Szenarien, die eine mögliche Kritikalität aufgrund einer Ansammlung von Spaltmaterial außerhalb der Behälter, betrachten, wird in /SKB 11/ auf ältere Arbeiten /BEH 78/, /OVE 96/, /OVE 97/, /VAN 95/ bzw. auf Arbeiten zum Yucca Mountain Projekt /NIC 08/ (siehe Kapitel 5.7) Bezug genommen. Aufgrund dieser Arbeiten erfolgt die Schlussfolgerung, dass eine Kritikalität außerhalb der Behälter nur mit einer vernachlässigbar geringen Wahrscheinlichkeit erfolgen kann, sodass diese Möglichkeit der

Entstehung einer Kritikalität nicht weiter verfolgt wurde. Arbeiten zu weiteren Degradationsszenarien wurden im Rahmen der vorliegenden Recherche nicht gefunden.

Von der OECD/NEA wurde 2012 auf Wunsch der schwedischen Regierung ein internationales Peer Review für die von SKB eingereichten Unterlagen zum Genehmigungsantrag ins Leben gerufen /NEA 12/. Die Gutachter-Gruppe kam dabei zu dem Schluss, dass die Unterlagen im Allgemeinen in überzeugender Weise alle notwendigen Sicherheitsaspekte des geplanten Endlagers darlegen. Es wurden verschiedene Verbesserungen und weiterführende Untersuchungen vorgeschlagen. Den hier diskutierten Untersuchungen in /AGR 10/ zur Kritikalitätssicherheit wurden in /NEA 12/ zugestimmt, ohne sie zusätzlich zu kommentieren.

5.7 USA

Im Juni 2008 beantragte das U.S. Department of Energy (DOE) bei der zuständigen Behörde, der Nuclear Regulatory Commission (NRC), die Genehmigung zur Errichtung eines Endlagers für hochradioaktivem Abfall, hauptsächlich abgebrannte Kernbrennstoffe, am Standort Yucca Mountain, Nevada. Allerdings wurde bereits 2009 durch Präsident B. Obama entschieden, alle weiteren Arbeiten zum Endlagerstandort Yucca Mountain einzustellen. Als Grund für diese Entscheidung wurde die Lage des Standortes in einem Erdbebengebiet angeführt. Um daraus trotzdem weitere nützliche Erfahrungen für ein späteres anderes Genehmigungsverfahren zu sammeln, soll die Begutachtung des Antrags durch die NRC dennoch abgeschlossen werden.

Der im Zuge des Genehmigungsantrags vom DOE eingereichte umfangreiche „Safety Analysis Report“ /DOE 08/ beschreibt das Konzept und die durchgeführten Sicherheitsanalysen. Einen guten Überblick über das geplante Konzept gibt die „Yucca Mountain Repository License Application – General Information“ /DOE 08a/, der erste Teil des vollständigen Sicherheitsberichts. Das vorgeschlagene Konzept sah die Einlagerung von etwa 11 000 Abfallgebinden mit insgesamt etwa 70 000 t Schwermetall in waagerechten Tunneln mit ca. 5,5 m Durchmesser vor. Dabei handelt es sich hauptsächlich um abgebrannte Brennelemente aus kommerziellen Leistungsreaktoren, aber auch aus Forschungsreaktoren und aus militärischer Nutzung. Für die abgebrannten Brennelemente aus Leistungsreaktoren war eine Lagerung in sogenannten „transport aging and disposal canisters (TAD canisters)“ mit 21 DWR- oder 44 SWR-Brennelementen geplant, die dann ihrerseits für den Einschluss im Endlager noch in

einen zusätzlichen Endlagerbehälter verpackt werden sollten. Bei der Erstellung des „Safety Analysis Report“ /DOE 08/ (Stand November 2008) stand das Design des TAD-Behälter allerdings noch nicht endgültig fest. Andere Brennelemente sollten zunächst in spezielle Brennelementkanister, sogenannte „DOE SNF standardized canisters“, eingeschlossen und zusammen mit verglastem hochradioaktiven Abfall in modifizierten Endlagerbehältern eingelagert werden.

Im Gegensatz zu vielen v. a. in Europa diskutierten Konzepten sah das für Yucca Mountain vorgeschlagene Konzept keine Verfüllung der Einlagerungstrecken vor, weshalb nicht alle Aspekte der betrachteten Szenarien und der daraus erzielten Resultate, insbesondere bei Betrachtung der Nachverschlussphase des Endlagers, direkt auf die europäischen Endlagerkonzepte übertragbar sind. Zudem wurde auch nur ein Zeitraum von 10 000 Jahren nach Verschluss des Endlagers in den Sicherheitsanalysen berücksichtigt, wohingegen in europäischen Konzepten deutlich längere Zeiträume, zumeist 1 000 000 Jahre, betrachtet werden. Dadurch sind in den europäischen Untersuchungen entsprechend größere Bandbreiten bzw. Unsicherheiten in der zeitlichen Entwicklung der jeweiligen Endlager enthalten.

Die Sicherstellung der Unterkritikalität der Endlagerbehälter sollte durch das Behälterdesign (Geometrie und Anzahl der Brennelemente), die in den Behältern vorhandenen Neutronenabsorber, ggf. durch administrative Maßnahmen zur Vermeidung von Fehlbeladungen, sowie im Fall von DWR- und SWR-Brennelementen zusätzlich durch Berücksichtigung des Brennelementabbrands erfolgen. Für Brennelemente, die den geforderten Mindestabbrand nicht erfüllen, waren das Einbringen zusätzlicher Neutronenabsorber in die genutzten Behälter angedacht /DOE 08b/. Das axiale Abbrandprofil der Brennelemente wurde durch die Verwendung eines konservativen Profils bei der Bestimmung der Beladepkurven der Behälter berücksichtigt. Dieses konservative Profil wurde durch Auswertung mehrerer Tausend gemessener Abbrandprofile bestimmt. Zum Zeitpunkt der Antragstellung standen noch Arbeiten zum vollständigen Kritikalitätssicherheitsnachweis für die endzulagernden Brennelemente aus Test- und Forschungsreaktoren aus.

Um die Vielzahl an unterschiedlichen Brennelementtypen aus Leistungsreaktoren (DWR und SWR), der militärischen Nutzung (z. B. U-Boot-Reaktoren) und verschiedenen Forschungsreaktoren von insgesamt einigen Hundert Varianten, die zur Einlagerung anstehen, in effizienter Form berücksichtigen zu können, wurden diese in Gruppen zusammengefasst. Für jede dieser Gruppen wurde ein bezüglich der Reaktivität

konservatives und damit ein die Gruppe repräsentierendes Brennelement, bzw. ein entsprechender Brennstoff identifiziert, mit denen die Analysen durchgeführt wurden /DOE 08/. Auf diese Weise wurden konservative Resultate erzielt, die eine Vielzahl verschiedener Brennelementdesigns abdecken, wodurch die Resultate generell auch auf weitere westliche Brennelementtypen übertragen werden können.

Neben deterministischen Vorgehensweisen flossen in die Kritikalitätssicherheitsanalysen der Betriebsphase des eigentlichen Endlagers sowie der dazugehörigen Einrichtungen zu Transport, Handhabung, Lagerung und Konditionierung der einzulagernden abgebrannten Brennstoffe bzw. Abfälle auch Methoden zur probabilistischen Risikobewertung ein /DOE 08/. Dazu wurden Ereignisabläufe analysiert, die zur Entstehung einer kritischen Anordnung führen können. Die Resultate werden zum einen zur Überprüfung der Wirksamkeit der vorgeschlagenen Maßnahmen zur Vermeidung einer Kritikalität, zum anderen zur Ableitung von zu untersuchenden (Degradations-)Szenarien und zur Auswahl von zu untersuchenden Parametern in den einzelnen Kritikalitätssicherheitsanalysen der Behälter, Anlagen und Prozesse genutzt. Dabei wurde kein Ereignisablauf identifiziert, der mit einer Wahrscheinlichkeit größer als 10^{-4} während des (unterstellten) Zeitraums der Betriebsphase der Anlage zu einer möglichen Kritikalität führen könnte. Aus diesem Grunde wurde auf eine weitere Konsequenzenanalyse verzichtet.

Für die Nachverschlussphase des Endlagers wurden unterschiedliche Brennstoffanordnungen, die nach möglichen Degradations- und Rekonfigurationsszenarien für die repräsentativen Brennelemente bzw. Brennstoffe der unterschiedlichen Brennstoffgruppen erwartet werden können, im Hinblick auf die Bildung einer kritischen Anordnung untersucht /RAD 04/ /BEC 04a/ /BEC 04b/. Dabei zeigte keine der untersuchten Konfigurationen bei Berücksichtigung der ggf. im Behälter vorgesehenen Neutronenabsorber einen Neutronenmultiplikationsfaktor oberhalb der zulässigen Grenzwerte. Da bei einigen Konfigurationen die Einhaltung des Grenzwertes für den Neutronenmultiplikationsfaktors nur mit vorhandenem Neutronenabsorber möglich ist, wurde auch die Möglichkeit einer fehlerhaften Bestückung eines Behälters mit Neutronenabsorbern bzw. des Fehlens der Neutronenabsorber aufgrund von Nachlässigkeiten in der Qualitätskontrolle bei Herstellung oder Beladung des Behälters untersucht. Die Wahrscheinlichkeit des Fehlens oder eines fehlerhaft eingebrachten Neutronenabsorbers wurde jedoch als zu gering abgeschätzt, als dass dies in der weiteren Sicherheitsanalyse zu berücksichtigen wäre /MCC 08/. Zusätzlich wurden weitere verschiedene Szenarien, die zu einer möglichen Kritikalität führen könnten, im Hinblick auf ihre Eintrittswahr-

scheinlichkeit untersucht. Dazu wurden zum einen qualitative Argumentationen genutzt, um solche Szenarien zu entwickeln /MCC 08/, zum anderen wurde eine systematische Evaluierung möglicher Abläufe mittels sog. Ereignisbaum-/Fehlerbaum-Analysen durchgeführt /BEC 04/. Im letzteren Fall wurden u. a. Eintrittswahrscheinlichkeiten für die betrachteten Szenarien und die Wahrscheinlichkeiten zur Bildung einer kritischen Konfiguration abgeleitet. Auch hier wurde für den Zeitraum von bis zu 10 000 Jahren nach Verschießen des Endlagers kein Ereignisablauf gefunden, der mit einer Wahrscheinlichkeit größer als 10^{-4} zu einer Kritikalität führt. Dabei wurden Degradationsszenarien inklusive sogenannter „early failure“ Modelle für die Einlagerungsstrecken, der sogenannten „Drip shields“ und der verschiedenen Behälter, Degradationsszenarien für die verschiedenen Abfallformen, die chemischen und physikalischen Bedingungen innerhalb und außerhalb (im Nahfeld) der Behälter, sowie die thermo-hydrologischen Bedingungen des Endlagers einschließlich möglichem Nuklidtransport einbezogen.

Kritikalitätssicherheit von Behältern mit Brennelementen einiger US-amerikanischer Forschungsreaktoren wurde z. B. in /KIM 07/ untersucht. Die unterstellten Szenarien sind dabei so allgemein gehalten, dass sie und die ermittelten Resultate sowohl auf den Transport und die Lagerung als auch auf die Endlagerung der Behälter übertragen werden können. Dabei wurde Brennstoff mit einer Anreicherung von 20,6 Gew.-% bzw. 93,2 Gew.-% ^{235}U in Brennelementbüchsen mit 20 bis 30 Brennelementen, d. h. mit insgesamt etwa 9 kg bis 32 kg spaltbaren Materials (^{235}U) betrachtet. In den Szenarien wurde das Auflösen bzw. Zerstören der Brennstoffmatrix bei intakter mit Wasser gefluteter Brennelementbüchse oder im trockenen Zustand unterstellt, wobei die mechanischen Strukturen der Brennelementpositionen je nach Szenario als intakt oder als aufgelöst bzw. zerstört angenommen wurden. Zusätzlich zu einer einzelnen Brennelementbüchse wurde auch ein generischer Transportbehälter mit sieben bzw. neun Brennelementbüchsen unter der Annahme einiger der zuvor diskutierten Szenarien untersucht.

Die untersuchten, konservativen teils hypothetischen Szenarien in /KIM 07/ ergaben in allen Fällen Neutronenmultiplikationsfaktoren von $k_{\text{eff}} < 1,0$. Lediglich in einem Fall, gefluteter Behälter mit aufgelöstem Brennstoff der reaktivsten Zusammensetzung und der größten Brennstoffmasse im angenommenen Brennelementbehälter, wurde ein Multiplikationsfaktor geringfügig über 0,95 ermittelt. Hier ist allerdings anzumerken, dass in /KIM 07/ lediglich ein Teil der denkbaren Szenarien untersucht wurde.

Des Weiteren zeigt /KIM 07/, dass eine Validierung der vorgenommenen Analyse insbesondere für die nicht gefluteten Konfigurationen nur schwer durchzuführen ist. Untersuchungen zur Ähnlichkeit zweier ausgewählter Konfigurationen und einiger potentiell geeigneter Experimente aus dem International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments /NEA 04/ mittels der Werkzeuge TSUNAMI und TSUNAMI-IP aus dem SCALE-Paket /SCA 05/ zeigten, dass keines der untersuchten Experimente eine hinreichende Ähnlichkeit zu den betrachteten Szenarien aufweist.

Zusätzlich zu möglichen kritischen Konfigurationen in einem Endlagerbehälter wurden im Rahmen des Yucca Mountain Project Möglichkeiten zur Bildung kritischer Anordnungen außerhalb der Behälter nach deren Degradation betrachtet. Eine solche Analyse wird z. B. in /NIC 08/ diskutiert. Sie betrachtet vor allem die möglichen Ausbreitungspfade des Brennstoffs nach der Degradation des Behälters und berücksichtigt verschiedene Konfigurationen mit Akkumulation von Brennstoff im Wirtsgestein außerhalb des Behälters. Dazu wird neben in Glas eingeschmolzenen HLW auch Brennstoff aus Test- bzw. Forschungsreaktoren mit einer Anreicherung von 20 Gew.-% ^{235}U betrachtet. Als Szenario wird unterstellt, dass das eingelagerte Uran nach Wasserzutritt in den Behälter ausgewaschen wird und sich am Boden der Einlagerungsstrecke unterhalb des Behälters ansammelt. In Abhängigkeit der Wahl der geologischen und geochemischen Parameter können so in einzelnen Fällen Mengen und Konzentrationen an Uran akkumuliert werden, die kritische Anordnungen ergeben können. Diese bedingen teils sehr konservative Annahmen für die Werte der verschiedenen geologischen bzw. geochemischen Parameter, sodass in allen dieser Fälle spezifische Wertekombinationen der relevanten Parameter vorliegen, die in /NIC 08/ als sehr unwahrscheinlich bzw. als praktisch ausgeschlossen eingeschätzt werden. Auf dieser Basis wurde so auch die Bildung einer kritischen Anordnung als entsprechend unwahrscheinlich eingeschätzt.

Neben der Kritikalitätssicherheit wurden im Rahmen des Yucca Mountain Project auch mögliche Risiken für die Integrität des Endlagers aufgrund möglicher kritischer Exkursionen diskutiert /DOE 08/. Dazu wurden zum einen Abschätzungen zu deren Eintrittswahrscheinlichkeiten, zum anderen Abschätzungen zu deren möglichen Auswirkungen auf das Endlager betrachtet. Dazu gibt z. B. /RAH 03/ Abschätzungen der zu erwartenden Dosis im Endlager aufgrund einer postulierten Exkursion in einem der Abfallgebinde an.

5.8 Zusammenfassung

Im Rahmen der durchgeführten Literaturrecherche wurden internationale Arbeiten der letzten Jahre zur Kritikalitätssicherheit bei der Endlagerung abgebrannter Kernbrennstoffe aus kommerziellen Leistungsreaktoren und Forschungsreaktoren zusammengefasst. Als wesentliche Quellen erwiesen sich dabei die seit 2008 in einigen Ländern gestellten Genehmigungsanträge zur Errichtung von Endlagern für abgebrannte Kernbrennstoffe. Hierzu gehören Finnland, Schweden und die USA, wenn auch in den USA der vorgesehene Endlagerstandort bereits wieder aufgegeben wurde. Auch in weiteren Ländern, vor allem Frankreich und Großbritannien, wurden von den jeweiligen mit der Endlagerungsforschung befassten Institutionen die durchgeführten Arbeiten in umfangreichen Berichten zusammengefasst.

Insgesamt zeigt die durchgeführte Studie eine gewisse Bandbreite in den länderspezifischen Vorgehensweisen zur Gewährleistung der Kritikalitätssicherheit in der Nachverschlussphase eines Endlagers. Diese reichen von deterministischen Kritikalitätsausschlüssen bis hin zu Risiko-basierten Bewertungen einer möglichen Kritikalität. Dementsprechend unterscheiden sich auch die Gewichtungen und der jeweilige Stand der Forschungsarbeiten von Land zu Land:

In Finnland und Schweden verfolgt man den Ansatz, mögliche Degradationsszenarien in der Nachverschlussphase und deren Auswirkungen auf die Reaktivität der Behälter in die Erstellung der Beladepkurven der Behälter zu berücksichtigen. Auf diese Weise wird versucht, auch die Nachverschlussphase des Endlagers in der Kritikalitätssicherheitsanalyse der Behälter zu erfassen und so die Langzeitkritikalitätssicherheit zu gewährleisten. Nationale Studien zu Eintrittswahrscheinlichkeiten und möglichen Konsequenzen einer Kritikalität in der Nachverschlussphase wurden in diesen Ländern bislang nicht in größerem Umfang durchgeführt bzw. publiziert.

Aufgrund der Wiederaufarbeitung von abgebrannten Kernbrennstoffen in Frankreich und Großbritannien wurden in diesen Ländern die Forschungsaktivitäten zu einer möglichen Kritikalität unter Endlagerbedingungen verstärkt auf die Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen aus der Wiederaufarbeitung mit Restmengen an spaltbarem Material ausgerichtet. Die direkte Endlagerung abgebrannter Kernbrennstoffe wird aber dennoch als Option betrachtet und untersucht. Neben der Kritikalitätssicherheit der Behälter bzw. Abfallgebinde wurden in diesen Ländern auch weiterführende Untersuchungen zu deren Verhalten in der Nachverschlussphase durchgeführt. Insbesondere

re britische Arbeiten beinhalten weitgehende Analysen zu Eintrittswahrscheinlichkeiten und Konsequenzen einer Kritikalität unter Endlagerbedingungen. Dies ist durch den britischen Ansatz einer Risiko-basierten Bewertung von Ereignissen begründet. Hier steht nicht der grundsätzliche Ausschluss einer Kritikalität im Vordergrund, sondern die Reduzierung des Risikos, also der Kombination aus Eintrittswahrscheinlichkeiten und Konsequenzen, auf ein akzeptables Maß.

Der in den USA bei dem ehemaligen Endlagerkonzept in Yucca Mountain verfolgte Ansatz wies aufgrund der geplanten Einlagerung ohne Verfüllung der Einlagerungstrecken bestimmte Eigenschaften auf, die in den in Europa verfolgten Konzepten nicht vorhanden sind. Die entsprechenden Arbeiten zur Kritikalitätssicherheit beinhalten umfangreiche Studien zur Degradation der Behälter und des eingelagerten Kernbrennstoffs sowie zu Eintrittswahrscheinlichkeiten und Konsequenzen einer Kritikalität.

6 Quellenverzeichnis

- /AGR 10/ L. Agrenius, „Criticality safety calculations of disposal canisters“, SKB Public Report, SKBdoc 1193244, August 2010.
- /ALT 09/ Alt, S., Herbert, H.-J., Krone, J., Sailer, M., Schmidt, G. and Tholen, M. (2009): Konzept für eine abgestufte Nachweisführung zum Schutz des Grundwassers vor chemotoxischen Stoffen in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle, Öko-Institut e.V., DBE Technology GmbH, GRS mbH, http://chemotox.oeko.info/dokumente/APVI_Nachweiskonzept.pdf.
- /AND 05/ ANDRA, „Dossier 2005 Granite – Synthesis – Assets of granite formations for deep geological disposal“, ANDRA, Châtenay-Malabry Cedex, Frankreich, Juni 2005;
ANDRA, „Dossier 2005 Argile – Synthesis – Evaluation of the feasibility of a geological repository in an argillaceous formation“, ANDRA, Châtenay-Malabry Cedex, Frankreich, Juni 2005.
- /AND 05a/ ANDRA, „Dossier 2005 Argile – Tome Safety evaluation of a geological repository“, ANDRA, Châtenay-Malabry Cedex, Frankreich, Juni 2005.
- /AND 05b/ ANDRA, „Synthèse des études de sûreté-criticité d’un stockage en formation argileuse profonde“, Rapport Andra n° C.NT.AMES.04.0041, 2005.
- /ANT 05/ M. Anttila, „Criticality safety calculations for three types of final disposal canisters. Olkiluoto, Finland: Posiva Oy. Working Report 2005-13;
M. Anttila, „Radioactive characteristics of the spent fuel of the Finnish nuclear power plants. Olkiluoto, Finland: Posiva Oy. Working Report 2005-71.
- /BAL 08/ B. Baltes: Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen, Atw 53, Jg. (2008), S. 92 – 96.

- /BEC 04/ Bechtel SAIC Company, „Configuration Generator Model“, CAL-DS0-NU-000002 REV 00B, Las Vegas, Nevada, 2004.
- /BEC 04a/ Bechtel SAIC Company, „Intact and Degraded Mode Criticality Calculations for the Codisposal of TMI-2 Spent Nuclear Fuel in a Waste Package“, CAL-DSD-NU-000004 REV 00A, Las Vegas, Nevada, März 2004.
- /BEC 04b/ Bechtel SAIC Company, „Intact and Degraded Mode Criticality Calculations for the Codisposal of ATR Spent Nuclear Fuel in a Waste Package“, CAL-DSD-NU-000007 REV 00A, Las Vegas, Nevada, Oktober 2004.
- /BEH 78/ P. Behrenz, K. Hannerz, „Criticality in a spent fuel repository in wet crystalline rock“, KBS TR 108, Svensk Kärnbränslehantering AB, 1978.
- /BEH 11/ M. Behler, V. Hannstein, R. Kilger, M. Kirsch, E.F. Moser, M. Wagner, „Erstellung und Validierung von Beladepkurven für einen generischen Transport- und Lagerbehälter für abgebrannte LWR-Brennelemente mit Abbrandkredit unter Berücksichtigung von Spaltprodukten“, GRS-A-3608, Juli 2011.
- /BEV 09/ B.B. Bevard, J.C. Wagner, C.V. Parks, M. Aissa, „Review of Information for Spent Nuclear Fuel Burnup Confirmation“, NUREG/CR-6998, USNRC Job Code Y6517, Dezember 2009.
- /BFS 03/ Bundesamt für Strahlenschutz, „Genehmigung zur Aufbewahrung von Kernbrennstoffen im Standort-Zwischenlager in Niederaichbach der E.ON Kernkraft GmbH und der E.ON Bayern AG“, Az.: GZ-V1 – 8551 510 vom 22. September 2003.
- /BMU 09/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit: „Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle“, Berlin, Stand Juli 2009.
- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit: „Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle“, Berlin, Stand 30. September 2010.

- /BRU 96/ Rene Brun, Fons Rademakers, „ROOT - An Object Oriented Data Analysis Framework“, Proceedings AIHENP'96 Workshop, Lausanne, Sep. 1996, Nucl. Inst. & Meth. in Phys. Res. A 389 (1997) 81-86, siehe auch <http://root.cern.ch/>.
- /CAN 10/ R. Cannepin, “Simulation of the mobilization and transport of radionuclides in a repository for high level waste in clay formations and application to criticality assessment”, INSTN Internship Report, GRS Garching, 2010.
- /CAO 11/ D. Cao, „Investigation for Application of BUC in Disposal of SNF in China”, International Workshop on Burnup Credit Criticality Calculation Methods and Applications, Peking, 25 – 28 Oktober 2011.
- /CUM 06/ R. Cummings, P. N. Smith, and K. Ghabaee, „Understanding Criticality Under Repository Conditions: Results of Static Calculations”, Serco Assurance Report SA/ENV-0770 Issue 2, 2006.
- /CUM 08/ R. Cummings, C. P. Jackson und M. Kelly, Report to Nuclear Decommissioning Authority, „Repository Post-closure Criticality Consequences Assessment”, Serco Report, SERCO/TAS-1017, Issue 1.1, Juli 2008.
- /CHE 11/ M. Chernykh, H. Kühn, S. Tittelbach, R. Graf, W. Filbert, “Criticality safety analyses for the direct final disposal of CASTOR® V spent fuel and storage casks“, Proc. International Conference of Nuclear Criticality (ICNC), Edinburgh UK, 19. – 22. September 2011.
- /DAR 11/ W.P. Darby, D.M. Nuttall, P. Purcell, G. Hostford, „Transport Criticality Assesment Methodologies for the RWMD Spent Fuel Disposal Canister Transport Container“, International Conference on Nuclear Criticality (ICNC 2011), Edinburgh, Schottland, UK, 19. – 23. September 2011.
- /DEH 96/ M.D. DeHart, “Sensitivity And Parametric Evaluations Of Significant Aspects Of Burnup Credit for PWR Spent Fuel Packages” ORNL/TM-12973, May 1996.

- /DEH 99/ M. D. DeHart, Parametric Analysis of PWR Spent Fuel Depletion Parameters for Long-Term Disposal Criticality Safety, ORNL/TM-1999/99, Lockheed Martin Energy Research Corp., Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn., August 1999.
- /DIN 94/ Deutsche Norm DIN 25478:1994-07 „Einsatz von Berechnungssystemen beim Nachweis der Kritikalitätssicherheit“, Deutsches Institut für Normung (DIN) e.V., Beuth Verlag, Berlin, Juli 1994.
- /DIN 07/ Deutsche Norm DIN 25712, „Kritikalitätssicherheit unter Anrechnung des Brennstoffabbrands bei Transport und Lagerung bestrahlter Leichtwasserreaktor-Brennelemente in Behältern“, Deutsches Institut für Normung (DIN) e.V., Beuth Verlag, Berlin, Juli 2007.
- /DIN 11/ Deutsche Norm DIN 25472 „Kritikalitätssicherheit bei der Endlagerung ausgedienter Kernbrennstoffe“, Deutsches Institut für Normung (DIN) e.V., Beuth Verlag, Berlin, November 2011.
- /DIN 13/ Deutsche Norm E DIN 25712, „Kritikalitätssicherheit unter Anrechnung des Brennstoffabbrands bei Transport und Lagerung bestrahlter Leichtwasserreaktor-Brennelemente in Behältern“, Deutsches Institut für Normung (DIN) e.V., Beuth Verlag, Berlin, Entwurf März 2013.
- /DIR 11/ Dirac Delta science and engineering encyclopedia, Webseite <http://www.diracdelta.co.uk>.
- /DOE 08/ U.S. Department of Energy, Office of Civilian Radioactive Waste Management, „Yucca Mountain Repository License Application - Safety Analysis Report“, DOE/RW-0573, Update No. 1, Docket No. 63–001, November 2008.
- /DOE 08a/ U.S. Department of Energy, Office of Civilian Radioactive Waste Management, „Yucca Mountain Repository License Application – General Information“, DOE/RW-0573, Update No. 1, Docket No. 63–001, November 2008.

- /DOE 08b/ U.S. Department of Energy, Office of Civilian Radioactive Waste Management, „Transportation, Aging and Disposal Canister System Performance Specification“, WMO-TADCS-000001, Rev. 1 ICN 01, Washington, D.C., März 2008.
- /DOE 08c/ U.S. Department of Energy, Office of Civilian Radioactive Waste Management, „Screening analysis of criticality features, events and processes for license application“, ANL-DS0-NU-000001 REV 00, Februar 2008.
- /ESK 11/ ESK–Stellungnahme vom 27.05.2011 “Anforderungen an bestrahlte Brennelemente aus entsorgungstechnischer Sicht“.
- /GMA 04/ B. Gmal, U. Hesse, K. Hummelsheim, R. Kilger, B. Krzykacz–Hausmann, E.F. Moser „Untersuchungen zur Kritikalitätssicherheit in der Nachverschlussphase eines Endlagers für ausgediente Kernbrennstoffe in unterschiedlichen Wirtsformationen“, GRS-A-3240, 2004.
- /GMA 09/ B. Gmal, R. Kilger, B. Krzykacz-Hausmann, H.-J. Herbert, F.-E. Moser, J. Peschke, „Weiterführende Bearbeitung spezieller Themen im Rahmen generischer Sicherheitsanalysen zur Kritikalität von Kernbrennstoffen in der Nachverschlussphase eines geologischen Endlagers“, GRS-A-3486, August 2009.
- /HES 86/ U. Hesse, W. Denk, H. Deitenbeck, „OREST - Eine direkte Kopplung von HAMMER und ORIGEN zur Abbrandsimulation von LWR-Brennstoffen“, GRS-63, Nov. 1986.
- /HES 04/ U. Hesse, R. Kilger, „Methodenbeschreibung und erste Abschätzungen zur Langzeitexkursion im Rahmen der Untersuchungen zur Kritikalität im Endlager“, Technischer Bericht, GRS, Mai 2004.
- /HES 09/ U. Hesse, „Weiterentwicklung eines gekoppelten Rechenprogramms zur generischen Konsequenzanalyse von kritischen Spaltstoffsystemen unter geologischen Bedingungen“, GRS-A-3487, August 2009.

- /HIC 11/ T.W. Hicks, T.D. Baldwin, „Immobilisation of Plutonium in Polymer Encapsulants: Criticality Assessment“, International Conference on Nuclear Criticality (ICNC 2011), Edinburgh, Schottland, UK, 19. – 23. September 2011.
- /HUO 11/ X. Huo, „The Introduction to the Application and Research of Burnup credit in China“, International Workshop on Burnup Credit Criticality Calculation Methods and Applications, Peking, 25 – 28 Oktober 2011.
- /IAE 07/ IAEA TECDOC 1547 „Advances in Applications of Burnup Credit to Enhance Spent Fuel Transportation, Storage, Reprocessing and Disposition; Proceedings of a Technical Meeting held in London 29 August – 2 September 2005“ (2007).
- /KIE 03/ B. Kienzler, D. Bosbach, A. Bauer, L. Niemann, E. Smailos, P. Zimmer, Geochemisch begründete Eingangsparameter für Kritikalitätsanalysen, Institut für Nukleare Entsorgung (INE), Forschungszentrum Karlsruhe, FZK-INE 002/03, November 2003.
- /KIL 04/ R. Kilger, U. Quade, „Kritikalität in der Nachbetriebsphase eines Endlagers“, GRS-A-3242, Dezember 2004.
- /KIL 11/ R. Kilger, E. F. Moser, M. Wagner, B. Gmal, „Internationaler Wissensstand zu den 15 wichtigsten Spaltprodukten hinsichtlich des Abbrandkredits“, GRS-A-3604, Juni 2011.
- /KIM 07/ S. S. Kim, C. Pope, L. L. Taylor, „Criticality Analysis for Proposed Maximum Fuel Loading in a Standardized SNF Canister with Type 1a Baskets“, INL/EXT-07-12326, Februar 2007.
- /KIR 11/ M. Kirsch, M. Wagner, R. Kilger, „Applications of the SUnCISTT: Monte Carlo Sampling on Uncertain Technical Parameters in Criticality and Burn-Up Calculations“, *Proc. International Conference of Nuclear Criticality (ICNC2011)*, Edinburgh UK, 19. – 22. September 2011.
- /MAS 09/ R. M. Mason, et al., „A Suite of Calculations Using the QSS and RT Models“, Serco Report SA/ENV-0944 Issue 2, Dezember 2009;

R. M. Mason, et al., „Further Calculations using the QSS and RT Models”, Serco Report SERCO/TAS - 1004 Issue 4, März 2010.

/MAS 09a/ R. M. Mason, et al., „A Summary of Verification, Validation, Benchmarking, Uncertainty and Sensitivity for the FETCH, QSS and RTM Computer Models. Serco Report SERCO/TAS/P3648/W001 Issue 2, Dezember 2009.

/MCC 08/ J. A. Mc Clure „Screening Analysis of Criticality Features, Events, and Processes for License Application“, Sandia National Laboratories, ANL-DS0-NU-000001 REV 00, Las Vegas, Nevada, Februar 2008.

/NAU 91/ R. Naudet. Oklo: Des Réacteurs Nucléaires Fossils Etude Physique. Commissariat à l’Energie Atomique, Paris, 1991.

/NDA 10/ Nuclear Decommissioning Authority, „Geological Disposal – An overview of the generic Disposal System Safety Case”, NDA/RWMD/010, Dezember 2010;

Nuclear Decommissioning Authority, „Geological Disposal – Generic Transport Safety Case main report”, NDA/RWMD/019, Dezember 2010;

Nuclear Decommissioning Authority, „Geological Disposal – Generic Operational Safety Case main report”, NDA/RWMD/020, Dezember 2010;

Nuclear Decommissioning Authority, „Geological Disposal – Generic Environmental Safety Case main report”, NDA/RWMD/021, Dezember 2010.

/NDA 10a/ Nuclear Decommissioning Authority, „Geological Disposal – Criticality safety status report”, NDA/RWMD/038, Dezember 2010.

/NEA 04/ OECD-NEA-Data-Bank / “International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments”, NEA/NSC/DOC(95)03, September 2004.

/NEA 12/ OECD/NEA “The Post-closure Radiological Safety Case for a Spent Fuel Repository in Sweden”, An International Peer Review of the SKB Licence-application Study of March 2011, OECD, NEA No. 7084, März 2012.

- /NEU 02/ J. C. Neuber, "Bounding Approach in Burnup Credit Criticality Safety Analysis", Requirements, practices and developments in burnup credit applications, Proceedings of a Technical Committee meeting held in Madrid, 22-26 April 2002, IAEA-TECDOC-1378, IAEA, Vienna, (2003) 185–196.
- /NEU 03/ J. C. Neuber, "Generation of Bounding Axial Burnup Profiles as a Continuous Function of Average Burnup", Proc. International Conference on Nuclear Criticality (ICNC), Tokai Mura, Japan, 2003.
- /NEU 08/ J. C. Neuber, "Burn-up Credit Criticality Benchmark Phase II-C: Impact of the Asymmetry of PWR Axial Burn-up Profiles on the End Effect." ISBN 978–92–64–99049–4, OECD 2008.
- /NIC 08/ J.-P. Nicot, „Methodology for bounding calculations of nuclear criticality of fissile material accumulations external to a waste container at Yucca Mountain, Nevada“, Applied Geochemistry, 23, pp 2065–2081, 2008.
- /NIR 98/ United Kingdom Nirex Limited, „Post-closure Performance Assessment: Topical Report on Post-closure Criticality Safety Assessment“, Nirex Science Report S/98/004, 1998.
- /NIR 07/ United Kingdom Nirex Limited, „Generic Repository Studies - Generic Waste Package Specification, Volume 2 – Justification“, Nirex Report N/104, Juni 2007.
- /OVE 96/ V. M. Oversby. Criticality in a high level waste repository: A review of some important factors and an assessment of the lessons that can be learned from the Oklo reactors. SKB (Svensk Kärnbränslehantering) technical report 96-07, Juni 1996.
- /OVE 97/ V. M. Oversby, „Criticality in a repository for spent fuel: lessons from Oklo“, in: McKinley I G, McCombie C (eds). Scientific basis for nuclear waste management XXI: Symposium in Davos, Schweiz, 23 September – 3 Oktober, 1997, Materials Research Society Symposium Proceedings 506, p 781, 1998.

- /PAI 99/ C. C. Pain, C. R. E. de Oliveira und A. J. H. Goddard, „A Study of the Application of the FETCH Transient Criticality Model to Repository Post-Closure Safety Studies“, Proceedings ICNC 1999, Versailles, September 1999.
- /PAR 99/ C. V. Parks, M. D. DeHart, and J. C. Wagner, “Review and Prioritization of Technical Issues Related to Burnup Credit for LWR Fuel“, NUREG/CR-6665, ORNL/TM-1999/303, Oak Ridge TN, USA, 1999.
- /POS 12/ POSIVA, „Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto - Description of the Disposal System 2012“, POSIVA 2012-05, POSIVA OY, Dezember 2012.
- /POS 12a/ POSIVA, „Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto - Features, Events and Processes 2012“, POSIVA 2012-07, POSIVA OY, Dezember 2012.
- /POS 12b/ POSIVA, „Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto - Synthesis 2012“, POSIVA 2012-12, POSIVA OY, Dezember 2012.
- /RAD 04/ H. Radulescu, D. Moscalu und M. Saglam, „DOE SNF Phase I and II Summary Report“, Bechtel SAIC Company, TDR-DSD-MD-000001 REV 00, Las Vegas, Nevada, März 2004.
- /RAH 03/ M. Rahimi, J. Weldy, „Estimating In-Package Criticality Impact on Yucca Mountain Repository Performance“, Proceedings of 10th International High-Level Radioactive Waste Management Conference, Las Vegas, 30 März – 2. April 2003.
- /RAN 11/ K.M. Rantamäki, „Criticality Safety Analysis of Final Disposal of TRIGA Mark II Fuel in Finland“, Proceedings of International Conference on Nuclear Criticality, Edinburgh, Schottland, 19. – 23. September 2011.
- /SCA 05/ „SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation“, Version 5.0, ORNL/TM-2005/39, ORNL (2005).

- /SCA 09/ "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation", ORNL/TM-2005/39, Version 6, Vols. I-III, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, January 2009. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-750.
- /SCA 11/ SCALE: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, June 2011. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-785.
- /SER 11/ R.M. Mason. Comparison of the QSS Model with the Oklo Natural Reactor. SERCO/TS/P6386/W001 Issue 2, April 2011.
- /SKB 10/ Svensk Kärnbränslehantering AB, „Spent nuclear fuel for disposal in the KBS-3 repository“, SKB, Technical Report TR-10-13, Dezember 2010.
- /SKB 10a/ Svensk Kärnbränslehantering AB, „Fuel and canister process report for the safety assessment SR-Site“, SKB, Technical Report TR-10-46.
- /SKB 11/ Svensk Kärnbränslehantering AB, „Long-term safety for the final repository for spent nuclear fuel at Forsmark, Main report of the SR-Site project“, Volume I – III, SKB TR-11-01, März 2011.
- /SME 05/ J. Smellie. Analogue evidence for naturally occurring criticalities. NDA Radioactive Waste Management Bibliography, PPDocs reference 496993, Livelink 6766166, 2005.
- /VAN 95/ R. A. Van Konynenburg, „Comments on the draft paper “Underground supercriticality from plutonium and other fissile material” written by C. D. Bowman and F. Venneri (LANL)“. Report UCRL-ID-120990 COM, University of California, 1995.
- /VSG 12/ “Endlagerauslegung und -optimierung“, Bericht zum Arbeitspaket 6 der Vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-281, Juni 2012.

/WAG 03/ J. C. Wagner, M. D. DeHart, C. V. Parks, "Recommendations for addressing axial burnup in PWR burnup credit analysis", ORNL/TM-2001/273, 2003.

/WAG 03a/ J. C. Wagner and C. V. Parks, "Recommendations on the Credit for Cooling Time in PWR Burnup Credit Analyses", NUREG/CR-6781 (ORNL/TM-2001/272), prepared for the U.S. Nuclear Regulatory Commission by Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn., January 2003.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Multiplikationsfaktoren k_{inf} für infinite Stabgitter von Brennstoffen mit unterschiedlichen Anreicherungen und Abbränden in Wasser.	6
Abb. 2.2	Infiniter Multiplikationsfaktor und kritische Kugelmassen homogener Mischungen aus bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 % Anreicherung und 12 GWd/tSM Abbrand und Wasser.	7
Abb. 2.3	Infiniter Multiplikationsfaktor und kritische Kugelmassen von homogenen Mischungen aus bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 % Anreicherung und 50 GWd/tSM Abbrand und Wasser.	9
Abb. 2.4	Kritische Kugelmassen von bestrahltem Kernbrennstoff mit 4,4 % Anreicherung und 12 GWd/tSM Abbrand mit reinem Wasser und FEBEX Porenwasser.	10
Abb. 2.5	Vergleich zweier Geometriemodelle für einen POLLUX-Behälter mit vollständig korrodierten Brennstäben, Einbauten und Innenbehälter.....	20
Abb. 2.6	Geometriemodell 'Trennfläche im Zylinder'. Schnittebenen senkrecht (linkes Bild) und parallel (rechtes Bild) zur Behälterachse.....	23
Abb. 2.7	Vergleich der Geometriemodelle 'Seriell angeordneten Zylinder' und 'Zylinderschalen' (rechtes Bild) mit Zonen für UO ₂ und UO ₃ x2H ₂ O. Querschnitt parallel zur Behälterachse (heterogene Spaltstoffverteilung)	24
Abb. 2.8	Schematische Darstellung des Dreizehn-Zonen-Modells für die BSK-3-Brennstabkokille	28
Abb. 2.9	Effektive Multiplikationsfaktoren für einen POLLUX-Behälter mit korrodiertem Innenbehälter und aufgeweitetem Brennstabgitter in Abhängigkeit vom Wasseranteil im Korrosionsprodukt Fe(OH) ₃	33
Abb. 2.10	Zeitliche Entwicklung der effektiven Multiplikationsfaktoren k_{eff} bei einer BSK-3-Brennstabkokille im Modell der Stabgitter-Aufweitung im Verlauf des Korrosionsprozesses	35
Abb. 2.11	Unsicherheiten der kumulierten Verteilungen von P(crit) im Szenario 1a (POLLUX-Behälter mit abgebranntem Brennstoff)	47

Abb. 2.12	Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten für Szenario 1a (Konsequenz 1)	49
Abb. 2.13	Vergleich der Kennwertverläufe für Konsequenz 1 mit den zeitabhängigen Verläufen der Wahrscheinlichkeiten für die Referenzwerte der Eingabegrößen von Szenario 1a (neu) und Szenario 1 (alt)	51
Abb. 2.14	Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von P(crit) bezogen auf Zeitintervalle mit 5000 Jahren Dauer für Szenario 1a (POLLUX-Behälter mit abgebranntem Brennstoff)	52
Abb. 2.15	Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten und Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen für Szenario 1a (neu) und Szenario 1 (alt)	53
Abb. 2.16	Zeitabhängiger Verlauf des R ² -Anpassungswertes für Konsequenz 1 (kumulierte Wahrscheinlichkeiten) im Szenario 1a.....	55
Abb. 2.17	Zeitabhängige Sensitivitäten der 14 Parameter von Szenario 1a (Konsequenz 1)	57
Abb. 2.18	Zeitabhängiger Verlauf des R ² -Wertes für Szenario 1a (Konsequenz 2) auf der Basis der metrischen Werte	59
Abb. 2.19	Zeitabhängiger Verlauf des R ² -Wertes für Konsequenz 2 für Szenario 1a auf der Basis der Spearmanschen Rangkorrelation	60
Abb. 2.20	Zeitabhängige Sensitivität der 14 Parameter bzgl. der Konsequenz 2 für Szenario 1a	61
Abb. 2.21	Vergleich der Kennwertverläufe für Szenario 1b und Konsequenz 1 mit den zeitabhängigen Verläufen der Wahrscheinlichkeiten für die Referenzwerte der Eingabegrößen von Szenario 1b (neu) und Szenario 1 (alt)	65
Abb. 2.22	Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von P(crit) für 5000-Jahresintervalle für Szenario 1b.....	66
Abb. 2.23	Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten der 100 Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus der Unsicherheitsanalyse für Szenario 1b (Konsequenz 2)	67

Abb. 2.24	Vergleich der kumulierten Kennwertverläufe mit den zeitabhängigen Verläufen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen zu Szenario 1c (Brennstabkockille BSK-3 mit unbestrahltem Spaltstoff).....	71
Abb. 2.25	Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten der 100 Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus der Unsicherheitsanalyse für Szenario 1c (Brennstabkockille BSK-3 mit unbestrahltem Brennstoff) und Konsequenz 2.....	72
Abb. 2.26	Unsicherheit der kumulierten Verteilungen von P(crit) im Szenario 2a (POLLUX-Behälter mit Stabgitter-Aufweitung, Beladung mit unbestrahltem Brennstoff).....	76
Abb. 2.27	Zeitabhängiger Verlauf verschiedener Kennwerte aus den Unsicherheiten der kumulierten Verteilungen (Konsequenz 1) für Szenario 2a	77
Abb. 2.28	Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von P(crit) bezogen auf 5000-Jahresintervalle für Szenario 2a	78
Abb. 2.29	Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten und Verlauf von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen (Szenario 2a).....	79
Abb. 2.30	Zeitabhängiger Verlauf des R ² -Wertes für Konsequenz 1 im Szenario 2a	81
Abb. 2.31	Zeitabhängiger Verlauf der auf der Basis der Spearmanschen Rangkorrelation ermittelten R ² -Werte für Konsequenz 1 im Szenario 2a	82
Abb. 2.32	Zeitabhängige Sensitivität (rangbasiert) der 8 Parameter für Konsequenz 1 bei Szenario 2a	83
Abb. 2.33	Zeitabhängiger Verlauf des R ² -Wertes für Konsequenz 2 im Szenario 2a (auf der Basis der metrischen Werte).....	84
Abb. 2.34	Zeitabhängiger Verlauf des rangbasierten R ² -Anpassungsmaßes für Konsequenz 2 im Szenario 2a	85
Abb. 2.35	Zeitabhängige Sensitivitäten (rangbasiert) der 8 Parameter für Konsequenz 2 des Szenarios 2a	86

Abb. 2.36	Unsicherheit der kumulierten Verteilungen (Konsequenz 1) von P(crit) im Szenario 2b (Brennstabkockille BSK-3 mit unbestrahltem Spaltstoff und Stabgitter-Aufweitung)	90
Abb. 2.37	Vergleich der Kennwertverläufe zu den zeitabhängigen Verläufen auf der Basis von Referenzwerten der Eingabegrößen für Konsequenz 1 von Szenario 2b.....	91
Abb. 2.38	Unsicherheiten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen von P(crit) für Szenario 2b und Konsequenz 2	93
Abb. 2.39	Zeitabhängiger Verlauf von Kennwerten der 100 Wahrscheinlichkeitsverteilungen aus der Unsicherheitsanalyse für Szenario 2b und Konsequenz 2	94
Abb. 2.40	Mittelwert- und Referenzkurven für Konsequenz 1 für die Szenarien 1a – 1c.....	100
Abb. 2.41	Vergleich der Mittelwert- und Referenzkurven für Konsequenz 2 für die Szenarien 1a – 1c.....	101
Abb. 2.42	Vergleich der zeitlichen Verläufe von 95%-Quantilen und oberen einseitigen (95%,95%)-Toleranzgrenzen in 5000-Jahresintervallen (Konsequenz 2) für die Szenarien 1a – 1c.....	101
Abb. 3.1	Vergleich der Leistungsverläufe von Testrechnungen mit verschiedenen Dopplerkoeffizienten	127
Abb. 3.2	Beispiele einer Leistungsverteilung einer Testrechnung mit einem Dopplerkoeffizient von $\Delta k/\Delta T = 2 \cdot 10^{-5} \text{ 1/K}$ und verschiedenen Dichterrückkopplungskoeffizienten.....	128
Abb. 3.3	Überblick über die Oklo-Reaktorzonen im Franceville Becken, Gabun	131
Abb. 3.4	Zeitlicher Verlauf der Leistung in der Oklo Reaktorzone 2 nach dem QSS-Modell	134
Abb. 3.5	Zeitlicher Verlauf der Temperatur in der Oklo Reaktorzone 2 nach dem QSS-Modell	135
Abb. 3.6	Zeitlicher Verlauf der ^{235}U Konzentration in der Oklo Reaktorzone 2 nach dem QSS-Modell.....	135

Abb. 3.7	Geometrisches Modell der Oklo Spalt- und Randzone.....	136
Abb. 3.8	Verlauf der mit PUNKT-V6 errechneten Leistung für das Oklo-Modell bei einer Zulaufzeitdauer von $3E+8$ s.....	145
Abb. 3.9	Verlauf der mit PUNKT-V6 errechneten Leistung für das Oklo-Modell bei einer Zulaufzeitdauer von $3E+10$ s.....	146
Abb. 3.10	Verlauf der mit PUNKT-V6 errechneten Leistung für das Oklo-Modell bei einer Zulaufzeitdauer von $3E+12$ s.....	146
Abb. 4.1	Zeitliche Änderung der Aktinoidenkonzentrationen in einem repräsentativen abgebrannten Kernbrennstoff während der Nachverschlussphase.....	165
Abb. 4.2	Zeitlicher Verlauf des infiniten Multiplikationsfaktors k_{inf} über 1 Mio. Jahre für einen repräsentativen abgebrannten Kernbrennstoff.....	165
Abb. 4.3	Multiplikationsfaktoren k_{inf} für infinite Stabanordnungen mit 4,4 % Anfangsanreicherung und 50 GWd/tSM Abbrand mit statistisch variieren Abbrandbedingungen und Abklingzeiten	168

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Chemische Zusammensetzung von Opalinuston-Lösung für die geochemischen Berechnungen.....	12
Tab. 2.2	Wässrige chemische Zusammensetzung der resultierenden Lösung nach der Reaktion von Opalinuston-Lösung mit abgebranntem Kernbrennstoff.	12
Tab. 2.3	Mineralzusammensetzung nach der chemischen Gleichgewichtsreaktion von 1 kg bestrahltem Kernbrennstoff mit Opalinuston-Lösung mit Wassergehalt 1 kg.	14
Tab. 2.4	Effektive Multiplikationsfaktoren und Standardabweichungen für homogene und heterogene Spaltstoffverteilungen in einem korrodierten POLLUX-Innenbehälter in Abhängigkeit von der ²³⁵ U-Anreicherung.	20
Tab. 2.5	Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen zum POLLUX-Behälter mit korrodierten Brennstäben und Einbauten bei Verwendung von unterschiedlichen Geometriemodellen und Brennstoffverteilungen.	25
Tab. 2.6	Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen zum Dreizehn-Zonen-Modell des BSK-3 Behältermodells	29
Tab. 2.7	Urاندichten und relative Anteile an den Spaltungen pro Spaltstoffzone für das Dreizehn-Zonen-Modell mit einer minimalen Urاندichte von 1,25 gU/cm ³ in der obersten Spaltstoffzone.	30
Tab. 2.8	Effektive Multiplikationsfaktoren und zugehörige Standardabweichungen für die Brennstabkokille BSK-3 bei einer vollständigen Befüllung mit einer homogenen Spaltstoff-Wasser-Mischung mit und ohne Hüllrohrmaterial	31
Tab. 2.9	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des ursprünglichen Szenario 1 nach /GMA 09/.....	38
Tab. 2.10	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 1a	39

Tab. 2.11	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 1b	40
Tab. 2.12	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 1c.....	41
Tab. 2.13	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des ursprünglichen Szenario 2 nach /GMA 09/.....	42
Tab. 2.14	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 2a	42
Tab. 2.15	Referenzwerte und Unsicherheiten der Parameter des modifizierten Szenario 2b	42
Tab. 2.16	Parameterwerte zu ausgewählten Kurvenverläufen der kumulierten Wahrscheinlichkeitsverteilung P(crit) für Szenario 1a	48
Tab. 2.17	Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 1a	54
Tab. 2.18	Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 1b.....	68
Tab. 2.19	Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 1c	73
Tab. 2.20	Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 2a	80
Tab. 2.21	Numerische Werte zu den jeweiligen 5000-Jahresintervallen im Zeitraum der ersten 100 000 Jahre für Szenario 2b.....	95
Tab. 2.22	Referenz- und Kennwerte aller Szenarien für Konsequenz 1 nach 500 000 Jahren.....	98
Tab. 2.23	Maxima der Referenz- und Kennwerte einschließlich der zugehörigen Zeitintervalle für alle Szenarien und für Konsequenz 2	102
Tab. 2.24	Übersicht über die relevanten Parameter der Sensitivitätsanalysen für Konsequenz 1 (K1) und Konsequenz 2 (K2) bei allen Szenarien	103
Tab. 3.1	Materialzusammensetzung der Oklo Spaltzone 2	137

Tab. 3.2	Mit XSDRN berechnete Werte für keff für die Exkursionsmodellierung der Oklo Spaltzone 2 in Abhängigkeit der Materialzusammensetzung	138
Tab. 3.3	Kernzahldichten und Wirkungsquerschnitte des Modells „OKLO-Start“	140
Tab. 3.4	Kernzahldichten und Wirkungsquerschnitte des Modells „OKLO-160“	140
Tab. 3.5	Kernzahldichten und Wirkungsquerschnitte des Modells „OKLO-460“	143
Tab. 3.6	Übersicht der ermittelten Temperaturkoeffizienten für Spaltmaterial und Moderator	143
Tab. 4.1	Berechnete Multiplikationsfaktoren für einen generischen Endlagerbehälter Typ POLLUX bei Annahme eines vollständig korrodierten Innenbehälters für unterschiedlich abgebrannte Brennstoffe in Abhängigkeit vom Wasseranteil	156

Verteiler

Druckexemplare:

Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU)

Referat RS III 2 1 x

Bundesamt für Strahlenschutz (BfS)

Dr. Schäfer (SE 2.2) 4 x
Bibliothek 1 x

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

Bibliothek (HOG) 1 x
Autor (KIG) 1 x

Gesamt 8 x

PDF-Version:

Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU)

Referat RS III 2

Bundesamt für Strahlenschutz (BfS)

Herr Dr. Udo Volland AG-F

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

Geschäftsführer (WFP, STJ)
Bereichsleiter (SAN, STC, VER, MOE, PRG, UHL, STU)
Autoren (BEH, KIH, CPN, GMA, HER, KIG, MOF, PEJ, RFL,
Mingliang Xie)
Projektcontrolling (KUF)
TECDO (NIT)

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de