

**Weiterentwicklung  
und Anpassung  
der numerischen  
Verfahren zur  
Inventarcharakterisierung  
zwischenlagerter  
radioaktiver Abfälle  
und Bewertung des  
Strahlungseinflusses**

# Weiterentwicklung und Anpassung der numerischen Verfahren zur Inventarcharakterisierung zwischenlagerter radioaktiver Abfälle und Bewertung des Strahlungseinflusses

Fachlicher Abschlussbericht

Margarita Tzivaki  
Marta Meloni  
Oliver Bartos  
Kevin Lawless  
Johannes Nicol  
Klemens Hummelsheim  
Kai Simbruner  
Robert Hanfland  
Anton Travleev

Mai 2025

## **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMUKN) unter dem Förderkennzeichen 4722E03260 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMUKN übereinstimmen.

**Deskriptoren**

Abbrand, Abschirmung, Dosisleistung, hochradioaktive Abfälle, MCNP, Rechenmethoden, SCALE, schwach und mittelradioaktive Abfälle, WANIRAS, Zwischenlagerung

## **Kurzfassung**

Fragen zur Strahlenexposition durch radioaktive Abfälle lassen sich grundsätzlich nur bei genauer Kenntnis der emittierten Dosisleistungen beantworten. Dabei spielen die Inventarcharakterisierung und die Abschirmwirkung des Behälters eine Schlüsselrolle bei der Festlegung geeigneter Randbedingungen, beispielsweise für besondere Anordnungen in Zwischenlagern oder für spezifische Transportanforderungen.

Die GRS verfügt über die notwendigen Programme und Expertisen zur wissenschaftlichen Bewertung sicherheitsrelevanter Fragen im Zusammenhang mit Zwischenlagerung und Transport. Dieses Eigenforschungsvorhaben wurde initiiert, um die Berechnungskette für die Inventarcharakterisierung und Dosisberechnung schwach- (LAW), mittel- (MAW) und hochradioaktiver Abfälle (HAW) zu modernisieren. Zu diesem Zweck wurde die bestehende Methode überprüft und es wurde ein neues aktualisiertes Konzept entwickelt. Dies umfasst die verwendeten Programme und -methoden in den Bereichen Inventarbestimmung, Aktivierungs- und Abschirmberechnungen sowie deren Schnittstellen.

Die neue Rechenkette, gesteuert über die Anwendung WANIRAS, umfasst moderne Berechnungscodes und -methoden, um zuverlässige Vorhersagen über die radiologischen Auswirkungen von Transport und Lagerung von LAW/MAW und HAW zu ermöglichen, die dann für Sicherheitsplanungen und -bewertungen genutzt werden können. Der aktuelle Stand von WANIRAS, umfasst Grundfunktionen der Berechnungskette: Inventarberechnung und Strahlungsfeldberechnung. WANIRAS besteht aus einer grafischen Oberfläche, die der Inputerstellung diverser Rechenprogramme sowie deren Nachbereitung und Schnittstellen dient.

Die Identifizierung repräsentativer Rechenfälle, eine zentrale Aufgabe des Eigenforschungsvorhabens, sowie die Neubewertung und teilweise Erneuerung der verwendeten Software erlaubte es, den Informationstransfer zwischen den Berechnungsschritten zu überarbeiten. Diese Rechenfälle wurden außerdem dazu genutzt, die Kompatibilität mit den früher genutzten Rechenmethoden zu überprüfen. Die Ergebnisse der repräsentativen Rechenfälle, gesteuert durch die entwickelte Anwendung WANIRAS, und der alten Rechenkette stimmen gut überein. Eventuelle Abweichungen konnten durch Anpassung der verwendeten Verfahren und Bibliotheken zufriedenstellend erklärt werden.

In WANIRAS und der begleitenden Dokumentation sind außerdem Beispiele, Leitfäden und unterstützende Werkzeuge implementiert, die auch unerfahrenen Modellierern die Berechnung und Bewertung von Standardproblemen im deutschen Abfallmanagement ermöglichen sollen. Die Bereitstellung einer erweiterbaren Struktur durch die Software WANIRAS, in welcher Wissen und Methoden gebündelt sind, gewährleistet zudem Konsistenz bei Auswertungen und Bewertungen über den Erfahrungsstand einzelner Gutachter hinaus. Darüber hinaus bietet sie einen erweiterbaren Rahmen für den Aufbau weiterer Methoden zur Dosis- und Inventarbewertung, wie beispielsweise die Einbeziehung anderer Transportcodes, sowie eine robuste Methode für Wissensmanagement und -transfer im Bereich der Strahlentransportmodellierung.

## **Abstract**

Questions about radiation exposure from radioactive waste can generally only be answered with precise knowledge of the emitted dose rates. Inventory characterization and the shielding effect of the storage container play a key role in determining suitable boundary conditions, for example, for special arrangements in storage facilities or for specific transport requirements.

GRS has the necessary software and expertise for the scientific evaluation of safety-relevant issues related to nuclear waste storage and transport. This research project was initiated to modernize the calculation chain for inventory characterization and dose calculations for low-level (LAW), intermediate-level (MAW), and high-level radioactive waste (HAW). For this purpose, the existing method was reviewed, and a new, updated concept was developed. This includes the programs and methods used in the areas of inventory determination, activation and shielding calculations, and their interfaces.

The new calculation chain, controlled by the WANIRAS application, includes modern calculation codes and methods to enable reliable predictions of the radiological impacts of transport and storage of LAW/MAW and HAW, which can then be used for safety planning and assessments. The current status of WANIRAS includes basic functions of the calculation chain: inventory calculation and radiation field calculation. WANIRAS consists of a graphical interface used for input generation of various calculation programs, as well as data post-processing and interfaces between calculation codes.

The identification of representative calculation cases, a central task of the project, as well as the re-evaluation and partial renewal of the software used, made it possible to revise the information transfer between the calculation steps. These calculation cases were also used to verify compatibility with the previously used calculation methods. The results of the representative calculation cases, controlled by the developed WANIRAS application, and the previous calculation chain are in good agreement. Any deviations could be satisfactorily explained by adapting the methods and libraries used.

WANIRAS and the accompanying documentation also contain examples, guidelines, and supporting tools designed to enable even inexperienced modelers to calculate and evaluate standard problems relevant to German waste management. The WANIRAS software's provision of an expandable structure, in which knowledge and methods are bundled, also ensures consistency in evaluations and assessments beyond the

experience level of individual experts. Furthermore, it offers a modular framework for developing additional methods for dose and inventory assessment, such as the inclusion of other transport codes, as well as a robust method for knowledge management and transfer in the field of radiation transport modeling.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation.....</b>	<b>1</b>
1.1	Alte Rechenkette .....	1
1.1.1	Aufbau und Programme.....	2
1.1.2	Energiegruppen (Binning) .....	7
1.1.3	Konversionsfaktoren .....	9
1.2	Konzeption der neuen Rechenkette.....	10
1.2.1	Definition der Anforderungen an die neue Rechenkette .....	10
1.2.2	Problemabhängige Anforderungen .....	10
1.2.3	Anforderungen an Codes, Software und IT-Infrastruktur .....	15
1.2.4	Benutzer-Anforderungen.....	15
1.3	Repräsentative Rechenfälle .....	17
1.3.1	Abbrand- und Zerfallsrechnungen für Brennelemente.....	18
1.3.2	Neutronenquellterme von verglasten Abfällen: Borosilikat-Kokille .....	21
1.3.3	Neutronenquellen: Pu-Be-Quelle .....	21
1.3.4	Gamma-Quellen mit Abschirmung: Ionenaustauscherharz in MOSAİK®-Behälter .....	22
1.3.5	Komplexe Abschirmungsgeometrien: Transport- und Lagerbehälter.....	23
1.4	Auswahl der Programme für die neue Rechenkette .....	23
<b>2</b>	<b>WANIRAS .....</b>	<b>29</b>
2.1	Strukturierung von WANIRAS .....	29
2.2	Umsetzung in einer GUI.....	36
2.3	Exemplarische Benutzung .....	38
2.4	Architektur .....	43
2.5	Dokumentation .....	44
2.5.1	Handbuch .....	44
2.5.2	Code Dokumentation .....	46
<b>3</b>	<b>WANIRAS-Parameter für HAW und LAW/MAW.....</b>	<b>47</b>
3.1	Energiegruppen-Auswahl.....	47



3.1.1	Einfluss der Anzahl der Energiegruppen auf Quelltermbestimmung und Dosisleistung .....	48
3.1.2	Empfehlungen .....	54
3.2	Dosisberechnungen und Flux-to-Dose Konversionsfaktoren.....	55
3.2.1	Aktuelle Empfehlungen des ICRP .....	55
3.2.2	Historische Einheiten und Koeffizienten.....	59
3.2.3	Auswahl der angemessenen Konversionskoeffizienten.....	63
3.3	Quelltermbestimmung.....	64
3.4	MCNP®-Tallies zur Dosisberechnung .....	66
3.5	Aktivierung.....	68
3.5.1	Hintergrund und Relevanz für die Rechenkette.....	68
3.5.2	GRSAKTIV-II .....	69
3.5.3	Anwendungsbeispiel: Aktivierung von Strukturmaterialien .....	70
<b>4</b>	<b>HAW-Abfälle.....</b>	<b>75</b>
4.1	Abbrandrechnungen mit SCALE .....	75
4.1.1	ORIGAMI .....	75
4.1.2	ARP+ORIGEN .....	76
4.2	Reaktorbibliotheken .....	77
4.3	Spezialfall verglaste Abfälle .....	79
4.4	Ergebnisse der Vergleichsrechnungen .....	83
4.4.1	Abbrand und Zerfall von UO <sub>2</sub> -Brennelementen .....	83
4.4.2	Niedrig- und Hochabbrand-Brennelemente.....	97
4.4.3	Abbrand und Zerfall von MOX-Brennelementen .....	103
4.4.4	Spezialfall SWR Brennelemente – Uranoxid .....	106
4.5	Dosisbestimmung mit MCNP®.....	110
4.5.1	Generischer Transport- und Lagerbehälter für Brennelemente .....	110
4.5.2	Beispielhafte Dosisberechnung.....	111
<b>5</b>	<b>LAW/MAW-Abfälle .....</b>	<b>119</b>
5.1	Dosisbestimmung mit MCNP®.....	119
5.1.1	Behältermodelle.....	119
5.1.2	Vorlagen für Quellen.....	125

5.2	Vergleich der Ergebnisse.....	126
5.2.1	Photonenquellen.....	126
5.2.2	Neutronenquellen .....	130
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick.....</b>	<b>137</b>
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>143</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>149</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>153</b>
	<b>Abkürzungsverzeichnis.....</b>	<b>157</b>
<b>A</b>	<b>Tabellierte Werte für Dosiskonversionskoeffizienten .....</b>	<b>161</b>
A.1	Photonen .....	161
A.2	Neutronen.....	167



# 1 Motivation

Fragen nach der durch die radioaktiven Abfälle verursachten Strahlenexposition sind im Allgemeinen nur in Verbindung mit der genauen Kenntnis der von den Behältern ausgehenden Dosisleistungen zu beantworten. Dabei spielen die Abbildung des Inventars und die Abschirmwirkung des Behälters eine wesentliche Rolle um die Randbedingungen, z. B. für spezielle Lageranordnungen im Zwischenlager oder für Besonderheiten beim Transport, berücksichtigen zu können.

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Entwicklung einer Rechenkette zur Berechnung der Strahlungseinwirkung von Wärme entwickelnden Abfällen und Abfällen mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung. Dazu ist die bisherige Vorgehensweise auf Aktualität zu überprüfen und eine Konzeption für eine aktualisierte Rechenkette zu erstellen. Dies umfasst die derzeit verwendeten Rechenprogramme und Methoden im Bereich der Inventarbestimmung, der Aktivierungs- und Abschirmungsberechnung und deren Schnittstellen untereinander. Dabei soll das neue System/die Rechenkette die Anforderungen an den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik erfüllen und geeignete Rechenprogramme integriert werden. Zudem sind eventuell Module zu integrieren und Übergänge zwischen den Programmen zu definieren und zu realisieren, um zielgerichtet auf aktuelle und zukünftige Fragestellungen eingehen zu können.

## 1.1 Alte Rechenkette

Die bisherige Rechenkette (im Folgenden als alte Rechenkette bezeichnet) entspricht im Aufbau den Anforderungen für unterschiedliche Geometrien und Abfallsorten die Ortsdosisleistung aus Neutronen- und Gammastrahlung zu berechnen. Ob kleine Gebinde, wie Kapseln oder Fässer, wie auch Großgebäude, wie Container oder Behälter, können nachgebildet werden. Dabei ist immer das Ziel, die von den radioaktiven Quellen ausgehende Strahlung und deren Wirkung auf Mensch und Umwelt zu bestimmen. Die verwendeten Materialien mit ihren Zusammensetzungen und Abmessungen werden als grundlegende Größen verwendet. Die Umsetzung der Abschirmungssituation beginnt mit den verwendeten Materialien und deren Zusammensetzungen. Dabei ist es wichtig, relevante Elemente zu berücksichtigen, die durch ihre Wirkungsquerschnitte Einfluss haben können. Für die Modellierung werden vereinfachte Annahmen bei einer eindimensionalen Teilchen-Transportrechnung getroffen oder die genauen Abmessungen verwendet. Die Strahlungsquelle kann aus unterschiedlichen Anwendungen stammen. Es ist möglich, die Quelle aus bestrahlten Brennelementen zu erstellen. Es lassen sich auch

Quellen aus Einzelnucliden oder Nuclidgemischen bestimmen. Der Zerfall der Nuclide zu dem gewünschten Zeitpunkt ist mit in Betracht zu ziehen, um Folgenuclide zu berücksichtigen. Besondere Reaktionen wie Neutronen aus Anfahrquellen ( $\alpha,n$ ) sind außerdem möglich. Materialien, die durch eine Aktivierung zur Quelle werden, lassen sich ebenfalls berechnen. Daraus werden Neutronen- und Gammastrahlungsquellterme bereitgestellt. Ausgehend davon wird der Teilchentransport durch Materie für die unterschiedlichen Geometrien und Quellen durchgeführt, um die Dosisleistung der Strahlung an bestimmten Aufpunkten zu bestimmen. Mit Hilfe der gewonnenen Informationen lassen sich entsprechende Abschirmungs- oder Strahlenschutzmaßnahmen im Umgang mit den Gebinden ableiten.

Die alte Rechenkette hat die Aufgabe, all diese Informationen zu sammeln und für die Rechenprogramme aufzubereiten. Zwischenergebnisse sind zu interpretieren und als Eingabedateien weiter zu verarbeiten.

### 1.1.1 Aufbau und Programme

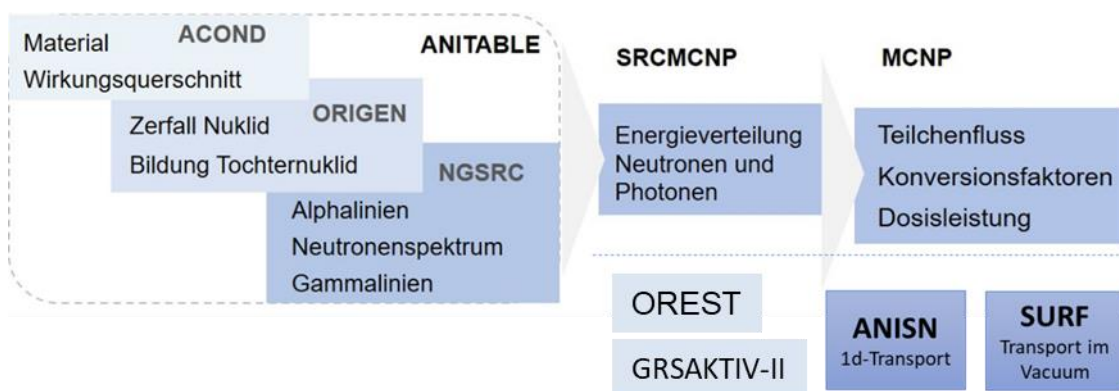
Die alte Rechenkette basiert auf dem Steuerprogramm ANITABLE /HES 99/, mit dessen Hilfe unterschiedliche Rechencodes angesprochen werden können. Über ANITABLE können je nach Problemstellung (Brennelement, Abfallgebinde oder Quelle) die Daten zu Material- und Nuclidvektoren oder Brennelementtyp eingegeben werden. Im Folgenden wird der Abbrand (Brennelement) und/oder der Zerfall der Nuclide berechnet (Gebinde, Quelle). Aus den jeweils resultierenden Material- und Nuclidvektoren wird der normierte Quellterm berechnet, welcher zur Dosisberechnung an ein Teilchentransport-Programm übergeben wird. Die relevanten Prozessschritte sind der entsprechenden Software der bestehenden Rechenkette in Tab. 1.1 zugeordnet.

**Tab. 1.1** Prozessschritte und Software der Rechenkette

Prozessschritt	Eingabe Material und Nuclidvektor	Abbrand	Zerfall	Quellterm-erstellung	Dosisbe-rechnung	Nachbe- reitung
Software	ANITABLE (ACOND)	OREST (ORIGEN)	OREST (ORIGEN)	NGSRC, SRCMCNP	ANISN, SURF, MCNP®	keine

Das Programmsystem ANITABLE wird seit den 1990er Jahren primär für Abschirmrechnungen eingesetzt. ANITABLE enthält als wichtigsten Baustein den bekannten Code ANISN für eindimensionale deterministische Neutronen- und Gamma-Transportrech-

nungen /W.W 67/. Zugeordnet sind als Bausteine die Module ACOND /HES 86/, /HES 88/ für die Bereitstellung unterschiedlicher Breitgruppenbibliotheken, ANISN für den eindimensionalen Strahlentransport und SURF /DEN 83/ für die Ermittlung der Ortsdosisleistungen aus strahlenden Oberflächen in der Umgebung der strahlenden Quellen. Teile der Rechenkette wie ACOND und ANISN sind durch den Einsatz des Monte-Carlo-Programms Monte-Carlo N-Particle Transport Code (MCNP®) /PEL 13/ bereits ersetzt worden. ANITABLE erleichtert die Bedienung dieser gekoppelten Programmabläufe, indem alle notwendigen und oft gemeinsamen Informationen geprüft werden und in sich konsistent aus einer einzigen, übersichtlichen Eingabetabelle gesteuert werden. Im Folgenden wird eine Kurzbeschreibung der Programme nach Abb. 1.1 gegeben.



**Abb. 1.1** Alte Rechenkette mit der Programmabfolge zur Bestimmung der Dosisleistung ausgehend von der Materialzusammensetzung, Geometrie und Quelltermberechnung bis zum Teilchentransport mit ANISN/SURF als 1d- oder MCNP® als 3d-Transportprogramm

In ANITABLE sind ACOND, ORIGEN und NGSRC verknüpft und können über eine Oberfläche bedient werden. Die Eingabedateien für die verknüpften Programme werden automatisch erstellt, die einzelnen Arbeitsschritte sind nachfolgend beschrieben:

- ACOND: Erstellung des Materialgemisches und der Wirkungsquerschnitte auf Basis der Ausgangsdaten (Quellmaterial, Dichte, Masse und Material-Zusammensetzung) /HES 88/.
- ORIGEN: Nuklide zum Zeitpunkt  $t_0$  (Herstellerdatum), Simulation der Aufbau- und der Zerfalls-Nuklide bis zum gewünschten Zeitpunkt  $t_1$  /BEL 73/  
Die Zusammensetzung von Brennelementen nach Reaktoreinsatz, Radioaktivität, Nachzerfallswärme und Strahlungsintensität sind wichtige Parameter für die Sicherheitsbetrachtungen von Lagerbehältern und die von ihnen ausgehende Dosisleistung. Eine Abbrandberechnung, die heterogene Brennelementaufbauten und unter-

schiedliche Anreicherungen berücksichtigt, verbessert solche Aussagen. Je genauer die Parameter im Vorfeld bestimmt werden, umso genauer werden die daraus bestimmten Folgeberechnungen. Besonderheiten wie die Erzeugung von Neutronen aus hochenergetischer Alphastrahlung, wie bei den verglasten hochradioaktiven Abfällen, können berücksichtigt werden. Ähnlich stellt sich die Situation bei schwach- und mittelradioaktiven Abfällen dar. Sie sind meist durch eine Reihe von Leitnukliden charakterisiert. Allerdings werden durch den radioaktiven Zerfall oftmals Tochternuklide gebildet, die für die Abschirmung bzw. die daraus abgeleitete Dosisleistung wichtig sein können. Die GRS-Entwicklung ORIGEN-X /HES 05/ kann Zerfallsnuklide bestimmen. ORIGEN-X wurde erweitert durch die lokale Berücksichtigung von 84-Gruppen Flüssen zu GRSAKTIV-II. Dadurch lassen sich Aktivierungen in Schichten bestimmen, die in schnellen Neutronen-Bereichen bestrahlt und aktiviert werden. Als Alternative kann hier ORIGEN eingesetzt werden. Der Code kann für beliebige Materialmischungen die Neutronenemission aus ( $\alpha,n$ )-Reaktionen bestimmen.

- NGSRC: Über NGSRC wird das gesamte Alpha-Linienspektrum für alle Alpha-Emitter in der Quelle pro  $\text{cm}^3$  Quellmaterial berechnet /QUA 93/. Zu jeder Alpha-Linie für jedes in der Quelle vorhandene ( $\alpha,n$ )-aktive Isotop wird das Neutronenspektrum aus der Summe der Zerfälle des angeregten Zwischenkerns in die verschiedenen Anregungszustände des Endkerns berechnet. Dabei wird eine Normierung vorgenommen, so dass die Neutronenproduktion aus der inelastischen Streuung, die nur wenige Prozent Anteil an der Gesamtneutronenproduktionsrate hat, auf die höherenergetischen Neutronen aus den ( $\alpha,n$ )-Reaktionen verteilt wird. Anschließend werden die Neutronenspektren aller Isotope gemäß ihrem Anteil summiert und mit dem Anteil des inaktiven Materials gemäß ihrer elektronischen Bremskraft gewichtet. Das so gebildete Neutronenspektrum aus ( $\alpha,n$ )-Reaktionen wird mit dem Neutronenspektrum aus Spontanspaltungsreaktionen zu einem Gesamtneutronenspektrum addiert. Es bildet die Neutronenenergie von 0 bis 14 MeV bei einer Auflösung von 1 keV ab.
- OREST: basiert im Wesentlichen auf einer veränderten ORIGEN-Version, kombiniert mit einem Spektralcode (HAMMER). Die Strahlungsgeschichte eines Brennelementes wird in einzelne Abbrandschritte unterteilt, für die das im Brennstoff resultierende Neutronenspektrum und die effektiven Wirkungsquerschnitte der wichtigsten Materialien jeweils neu berechnet werden. Dadurch wird der Einfluss des Auf- und Abbaus wichtiger Spalt- und Absorptionsmaterialien während des Abbrandes auf die neutronenphysikalischen Verhältnisse berücksichtigt. Daraus können weitere Abbrandparameter, wie z. B. Multiplikationsfaktor, Neutronenbilanz oder Beiträge

einzelner Nuklide zur Spaltung berechnet werden /HES 08/. Die Basis ist 1 Megagramm Schwermetallgehalt. Diese Größe ist direkt vorgebar. Die Ergebnisse werden in einer binären Form (gramatbin) abgespeichert und lassen sich mit NGSRC weiterverarbeiten.

- SRCMCNP: Die Übergabe der Informationen von Nuklidzusammensetzung und -eigenschaften werden vom Quelltermgenerator erfasst und energetisch richtig umgesetzt. Über SRCMCNP lassen sich diese in beliebige Energiestrukturen kondensieren und als Quelldefinition in MCNP<sup>®</sup> verwenden. Für die nachfolgende Teilchen-Transportrechnung wird das hochaufgelöste Neutronenspektrum aus NGSRC (vector1) unter Teilchen- und Energieerhaltung auf die Gruppenstruktur der Wirkungsquerschnittsbibliothek (z. B. EURLIB 97 mit 175 Neutronen- und 42 Gammagruppen /KLE 97/) kondensiert. Der Gammaquellterm wird unter Berücksichtigung der Bremsstrahlung berechnet. Dazu bestimmt eine Routine das mittlere Bremsstrahlungsspektrum bei Beta-Emission im Materialgemisch in Abhängigkeit von der Kernladungszahl durch einfache Interpolation der beiden Spektren für H<sub>2</sub>O und UO<sub>2</sub> aus SCALE.
- ANISN: Berechnet den Teilchentransport und löst die eindimensionale, energieabhängige Boltzmann-Transportgleichung mit anisotroper Streuung höherer Ordnung in Platten-, Kugel- oder Zylindergeometrie für Neutronen und Photonen /W.W 67/. Die Boltzmann-Gleichung wird nach dem SN-Verfahren approximiert (Diskrete Ordinaten Methode). Dabei wird der Streuterm in Legendresche Polynome der Ordnung  $l$  entwickelt, die Orts- und Winkelkoordinaten diskretisiert, während die Energieabhängigkeit nach der Vielgruppenmethode behandelt wird.
- SURF: Ausgehend von einer 1D-Teilchentransportrechnung mittels ANISN bis zur Grenzfläche wird mit SURF der 3D-Strahlentransport in Vakuum berechnet und die Dosisleistung bestimmt. Dazu wird die geometrische Schwächung der Strahlung von einer begrenzten Fläche zu einem Aufpunkt im Raum exakt bestimmt /DEN 83/. Dabei kann zwischen ebener Fläche, Zylinder oder Kugeloberfläche unterschieden werden.
- MCNP<sup>®</sup>: Die alte Rechenkette hat die Berechnung sowohl von Wärme entwickelnden Abfällen wie Brennelementen mit ihrem Abbrand, als auch die Aktivitätsbestimmung durch Aktivierung oder radioaktiven Zerfall abgedeckt. Eine der wesentlichen Rechengrößen ist die Neutronen-Flussberechnung, die mit deterministischen Methoden oder mit Monte-Carlo-Verfahren erfolgen kann. Während bei deterministischen Rechenmethoden, z. B. Diskrete Ordinaten Methode bei ANISN, die



Transportgleichung explizit gelöst wird, wird beim Monte-Carlo-Verfahren eine Simulation des Transportweges individueller Teilchen vorgenommen, wobei die Auswahl der Teilchen mit ihren Eigenschaften einem statistischen Prozess unterliegt. Der statistische Fehler ist ein Maß für die Güte der Monte-Carlo-Rechnungen. Er ist keine direkte Angabe der Abweichung des Rechenergebnisses vom genauen physikalischen Wert. Das Monte-Carlo-Verfahren ist aufwendig und rechenintensiv, führt aber wegen der Dreidimensionalität und der Verwendung von Punktwirkungsquerschnittsdaten auch bei komplexen Abschirmungsanordnungen zu guten Ergebnissen, da es nicht auf Vereinfachungen und Näherungen angewiesen ist.

Die Informationen aus der Abbrandrechnung OREST oder dem Nuklid-Zerfall mit ORIGEN werden durch NGSRC sowie SRCMCNP für MCNP<sup>®</sup> aufbereitet und als Quellinformation in Energie und Intensität bereitgestellt. Dies erfolgt für Neutronen und Photonen in zwei getrennten Eingabedateien. SRCMCNP übernimmt die Quellstärke pro Quellvolumen aus NGSRC. Die Größe wird als reziprok des Volumens mit dem Normierungsfaktor NORMFAK in der Eingabe von NGSRC berücksichtigt.

MCNP<sup>®</sup> 6.2 /WER 17/ ist ein Monte-Carlo-(Multi)Teilchentransportprogramm, das den Transport von Neutronen, Photonen (Gammastrahlung), Elektronen oder den gekoppelten Transport von Neutronen und Photonen simulieren kann. Die Teilchenrechnungen sind allerdings separat, getrennt nach Korpuskelart durchzuführen. Die dreidimensionale, realistische Darstellung ermöglicht alle Details zu berücksichtigen. Beim Monte-Carlo-Verfahren wird eine Simulation des Teilchentransportes individueller Teilchen vorgenommen, wobei die Auswahl der Teilcheneigenschaften einem statistischen Prozess unterliegt. Ob und wo im System das Teilchen eine Wechselwirkung erfährt und von welcher Art diese ist, wird durch einen Zufallsgenerator bestimmt. Die physikalischen Eigenschaften des Systems ergeben sich als Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die das Teilchenschicksal beeinflussen. Bei der Berechnung von vielen Teilchenschicksalen erhält man so eine Zustandsbeschreibung des Systems an ausgewählten Orten mit einer statistischen Unschärfe, die von der Teilchenzahl abhängt. Die verwendeten Materialien werden in ihrer chemischen Zusammensetzung nachgebildet. Die nuklearen Reaktionen werden durch Wirkungsquerschnittsbibliotheken für kontinuierliche Energien, basierend auf den evaluierten Datenstandard nach ENDF/B (Evaluated Nuclear Data File) oder JEFF ((Joint Evaluated Fission and Fusion Nuclear) Data Library) verwendet.

Da das Monte-Carlo-Verfahren eine statistische Simulation ist, müssen die Ergebnisse, je nach Detektorart, einer bestimmten Güte entsprechen, um als vertrauensvoll gelten

zu können. Die Umwandlung von Teilchenflüssen in Dosisleistung erfolgt durch die Multiplikation mit Dosiskonversionsfaktoren unterschiedlichster Evaluierungen (bspw. nach ANSI 77 oder ICRP74 /AME 77/, /INT 96/).

Durch die Nutzung von MCNP<sup>®</sup> besteht die Möglichkeit, den Aktivierungscode GRSAKTIV-II /HES 01/ optimal anzuwenden. GRSAKTIV-II ist durch die zonenweise Vorgabe von 84-Gruppen Neutronenflüsse in der Lage fallabhängige Gruppendaten zu erzeugen. Fallabhängig heißt, dass die spektrale Zusammensetzung in nahezu beliebigen Materialien bzw. Orten bestimmt werden kann und damit flussgewichtete Wirkungsquerschnitte erzeugt werden. Die 84 Gruppen werden auf drei ORIGEN-Gruppen, für die Bereiche thermisch, epithermisch und schnell, kondensiert (THERM, RES, FAST). Eine Besonderheit besteht bei GRSAKTIV-II, indem Resonanzselbstabschirmung isotopenweise verändert werden kann. Das spielt bspw. für Uranverunreinigungen im Strukturmaterial eine Rolle. Bei GRSAKTIV-II werden die zu bestrahlenden Materialien als Eingabeparameter verwendet, wie auch die Bestrahlungszeit und die zugehörigen Abklingzeiten. GRSAKTIV-II greift auf ORIGEN als Unterroutine zu und ruft den Code in einer Schleife pro Zone auf.

### **1.1.2 Energiegruppen (Binning)**

Um Ergebnisse von Abbrand- oder Abklingrechnungen weiter für Abschirmungsrechnungen zu nutzen, werden vereinfacht dargestellt die Strahlungseigenschaften von Nukliden oder Teilchen in eine Form von Energiestufung und zugehöriger Intensität umgewandelt. Mit diesem Quellterm können deterministische und probabilistische Programme den Strahlungstransport durch Materie berechnen.

Die frühere Vorgehensweise zur Wahl der Energiegruppen für Abschirmrechnungen war, die aus einer Abbrand- oder Abklingrechnung stammenden Nuklidzusammensetzungen von OREST (Abbrand) /HES 08/ und ORIGEN (Abklingen) /BEL 73/ zu übernehmen und die Strahlungseigenschaften mit Hilfe von Nuklidbibliotheken in Informationen als Gruppenspektrum mit NGSRC (Quellterm) /QUA 93/ zu überführen. Das bedeutet, die Intensitätsangaben Neutronen/s oder Photonen/s pro Energieintervall liegen vollständig in Feingruppen vor. Mit NGSRC wurden für die Neutronen und Gamma-Quelle dazu je 15.000 Daten mit einer Auflösungsbreite von 1 keV errechnet. Danach erfolgt die Kondensierung. Mit dem bei NGSRC eingesetzten Verfahren zur Erhaltung der Teilchen und Energie des Quellterms lassen sich folgende Vorteile erzielen:

- Sowohl die gesamte Quellstärke als auch die Quelleistung bleiben auch bei energetisch grob strukturierten Bibliotheken erhalten.
- Eine Renormierung auf andere Quellgrößen (Teilchen/Sekunde) ist möglich.
- Die gemittelte Teilchenenergie bleibt erhalten.
- Bei der untersten und obersten Gruppe fehlen die entsprechenden Nachbargruppen. Hier wird nur die Energieerhaltung berücksichtigt.

Die Umsetzung ergibt ein Histogramm aus Energie und Intensität, die auf 1 normiert ist. Die Umrechnung auf die echte Quellstärke erfolgt durch einen Normierungsfaktor.

Die Werte für die Gruppen stammen für Neutronen aus analytischen Rechnungen. Demnach wird für die Spontanspaltungsneutronen das Maxwellspektrum berücksichtigt. ( $\alpha,n$ )-Reaktionen werden ebenfalls berücksichtigt. Für die Gamma-Strahlungsbestimmung werden Gammalinienbibliotheken als Basis verwendet, die mit den errechneten Isotopendichten mit den Zerfallskonstanten zu Isotopen-Aktivitäten verknüpft werden. Die Gammalinien pro Energie und Zerfall werden mit der Isotopen-Aktivität multipliziert und gesammelt. Spontanspaltungsphotonen werden als kontinuierliches Spektrum (Mairnschein-Formel) über den gesamten Energiebereich gerechnet. Ebenso wird die Bremsstrahlung (mittleres Spektrum in Abhängigkeit der Kernladungszahl zwischen  $UO_2$  und  $H_2O$  näherungsweise interpoliert) berücksichtigt /QUA 93/.

In den 1970er und 1980er Jahren wurden aus Gründen begrenzter Rechenkapazitäten deterministische Rechenverfahren zur Kritikalitäts- und Abschirmungsrechnung eingesetzt. Erst später hat sich die Nutzung von Monte-Carlo-Verfahren verbreitet. Die deterministischen Rechencodes sind bereits lange in der Anwendung und verwenden dabei überwiegend Breitgruppenquerschnitte, während Monte-Carlo-Codes kontinuierliche Querschnitte nutzen. Kontinuierliche Bibliotheken enthalten in der Regel hunderte von Energiegruppen. Breitgruppen-Bibliotheken bestehen meist aus einigen Dutzend Gruppen. Die erheblich größeren Datenmengen beanspruchen allerdings wesentlich mehr Rechenkapazität und sind somit zeitaufwändiger. Breitgruppen sind durch ihre Kompaktheit sehr viel schneller, werden aber als näherungsweise Lösungen angesehen /OAK 23/. Eine Breitgruppenbibliothek, die mit geeigneten Gewichtungsspektren für eine bestimmte Anwendung entwickelt wurde, kann die berechneten Flüsse schneller und mit geringerem Genauigkeitsverlust im Vergleich zu kontinuierlichen Gruppenberechnung umsetzen (z. B. Gamma-Strahlungsrechnungen). Bibliotheken mit Breitgruppen sind gut

für parametrische Studien geeignet, bei denen eine große Anzahl von Berechnungen für ein bestimmtes Modell durchgeführt werden kann /RIS 11/. Beispielsweise ist die GAMLIB eine reine Gammagruppenbibliothek mit 50 Energiegruppen. Sie wurde speziell für die Berechnung von Pu-haltigen Quellen verwendet.

Die Tab. 1.2 gibt Breitgruppen-Bibliotheken wieder. Daran haben sich dann auch die Quellterme orientiert. Die zugehörigen Datenevaluierungen beschreiben die Wirkungsquerschnittsherkunft. Daran anschließend finden die gleichen Energiegrenzen Verwendung für die Dosiskonversionsfaktoren zur Umrechnung der Flüsse in Dosisleistungen.

**Tab. 1.2** Gekoppelte Neutronen-Gamma Bibliotheken aus SCALE

Datenevaluierung	Neutronen	Gamma	Kennung
ENDV/B-VII.1	200	47	V7.1-200N47G
ENDV/B-VII.1	28	19	V7.1-28N19G
ENDF/B-VII.0	27	19	V7.0-27N19G
ISPRA***	100	20	EURLIB
VITAMIN-C*	171	36	DLC-041
BUGLE**	45	16	DLC-047
NEA-Data Bank	-	50	GAMLIB 50

\* VITAMIN-C (Versatile Integrated Techniques using AMPX and MINX for Investigating Neutronics) 171 Neutronengruppen und 36 Gammagruppen (VITAMIN-C wurde durch das Radiation Shielding Information Computational Center (RSICC, damals RSIC) als DLC-041.) herausgegeben und basiert auf experimentellen schnellen Reaktoren

\*\* Bugle: BUGLE (Broad User Group Library ENDF/B) mit 45 Neutronengruppen and 16 Gammagruppen ist als DLC-047 basiert auf LWR.

\*\*\* EURLIB: 100 Neutronengruppen und 20 Gammagruppen (ISPRA) gekoppelt.  
GAMLIB 50: 50 Gammagruppen erzeugt von der GRS mit AMPX II

Die Bibliotheken lassen sich unter bestimmten Umständen erweitern bzw. aktualisieren. Deshalb sind die o. g. Bibliotheken nur eine Auswahl von vielen Möglichkeiten.

### 1.1.3 Konversionsfaktoren

Zur Umrechnung der Teilchenflüsse in Äquivalentdosiswerte wurden im alten Rechen-system verschiedene Konversionsfaktoren verwendet:

- ANSI-77 (amerikanischer Standard) /AME 77/
- Wagner et al. (BASIS ICRP21) wie im MCNP® Manual hinterlegt /WER 17/
- Leuthold et al. (Basis ICRP 60) wie im MCNP® Manual hinterlegt /WER 17/

- ICRP74 wie im MCNP<sup>®</sup> Manual hinterlegt /WER 17/

Die Option der Interpolation bei den Dosisfaktoren (LIN oder LOG) kann unabhängig verwendet werden. Als Default ist bei ANSI/ANS log-log empfohlen /INT 96/. Es sind aber auch andere Kombinationen möglich (siehe MCNP6<sup>®</sup>-Manual /WER 17/ P.3-222).

## 1.2 Konzeption der neuen Rechenkette

### 1.2.1 Definition der Anforderungen an die neue Rechenkette

Die Prozessschritte der bestehenden Rechenkette (siehe Tab. 1.1) sollen auch in der neuen Rechenkette abgebildet werden. Je nach Problemstellung ergibt sich eine entsprechende Abfolge der Prozessschritte wie in Abb. 1.2 und Abb. 1.3 dargestellt. Die neue Rechenkette soll im letzten Prozessschritt ein Postprocessing der Ergebnisse bieten und die Ergebnisse in einem einfach weiterzuverarbeitenden Format bereitstellen.

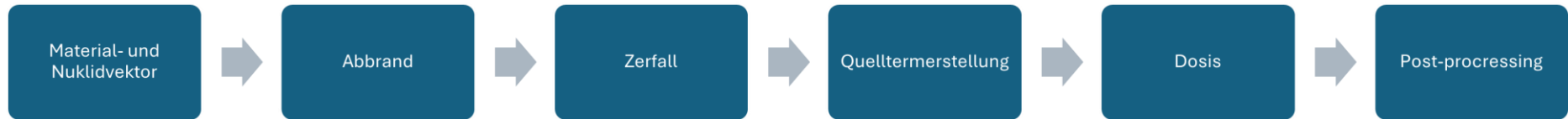
Die Anforderungen für die Modernisierung beziehungsweise Weiterentwicklung der Rechenkette können in folgende drei übergreifende Punkte aufgeteilt werden:

- problemabhängige Anforderungen
- Anforderungen an eingebettete Codes und Software allgemein
- Anforderungen der Benutzer an die Rechenkette

### 1.2.2 Problemabhängige Anforderungen

Im Folgenden werden die Anforderungen an die einzelnen Prozessschritte der Rechenkette beschrieben.

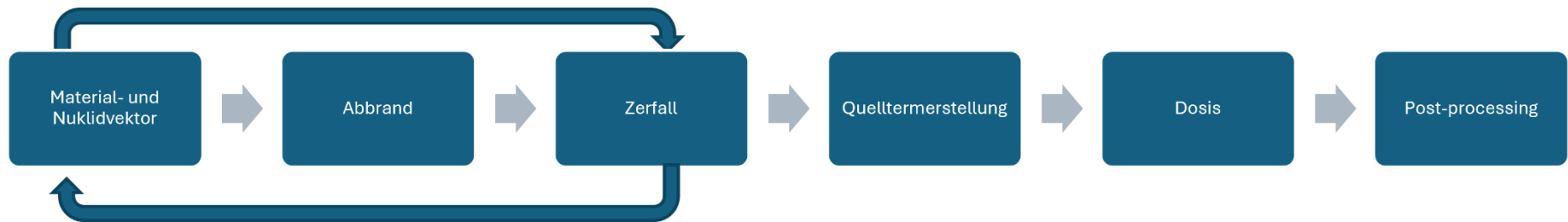
- Bei der **Eingabe von Material und Nuklidvektor**, die die Schnittstelle zum Benutzer darstellt, können die zu berechnenden Nuklide oder Brennelemente angegeben werden. Die Anforderungen an diese Komponente sind hauptsächlich Flexibilität im Input. Eine Eingabe in verschiedenen Einheiten, als Masse oder Aktivität, ist notwendig, ebenso wie eine prozentuale Angabe der Einzelnuklide in einem Material mit festgesetzter Masse oder Aktivität. Sinnvoll wären hier außerdem eine Input-Validierung und ausführliche Erklärungen, um Fehler bei dem Ausführen des Programmes zu vermeiden.



**Abb. 1.2** Graphische Darstellung der abzubildenden Prozessschritte

Im Fall von radioaktiven Quellen fällt der Schritt „Abbrand“ weg.

11



**Abb. 1.3** Graphische Darstellung der abzubildenden Prozessschritte für den Spezialfall verglaste Abfälle

- Bei den Rechnungen zum **Abbrand** von Brennelementen im Reaktorkern ist besonders darauf zu achten, dass ein Programm, und konkret die dazugehörigen Wirkungsquerschnittsbibliotheken, genutzt werden, welche für die Anwendungsfälle validiert ist. Hier ist auch die Rechengeschwindigkeit von Interesse, da Abbrandrechnungen, je nach Komplexität des angewendeten Verfahrens, signifikanten Zeitaufwand brauchen. Auch hier ist Flexibilität im Input relevant, um die in Deutschland genutzten Brennelemente rechnen zu können.
- Für den **Zerfall** des Inventars von Brennelementen und LAW/MAW-Gebinden während der Lagerung existieren ähnliche Anforderungen wie für den Abbrand, vor allem in Bezug auf Validierung und Flexibilität des Inputs. Hier ist es von Vorteil, die Methoden für die Input-Erstellung analog zur bestehenden Rechenkette zu gestalten. Das würde zusätzlich zu der absoluten Angabe von Masse oder Aktivität, auch prozentuale Angaben eines vorher bestimmten Gemisches beinhalten. Eine weitere Anforderung ist die richtige Berechnung des Quellterms basierend auf  $(\alpha, n)$ -Reaktionen.
- Bei der **Schnittstelle** zwischen dem Abklingschritt und dem Strahlungstransportprogramm sind die Minimalanforderungen die Erstellung eines Dosisberechnungskonformen Quellterms und die Formatierung der angemessenen Dosisumwandlungskoeffizienten. Eine flexible Wahl des Quelltermbinnings sowie der rückwärtskompatiblen Umwandlungskoeffizienten, um Vergleiche mit der alten Rechenkette anzustellen, wären ebenfalls von Vorteil. Weitere wünschenswerte Optionen wären hier Eingriffe in das Dosisberechnungsprogramm durch die Auswahl von Quellgeometrien und Abschirmungen.
- Für die Berechnung der **Dosisleistung** an relevanten Aufpunkten soll mit der Monte-Carlo-Modellierungsmethode Strahlungstransport berechnet werden, da diese im Vergleich die akkuratesten Ergebnisse liefert. Diese Methode ist meist mit großem Rechenzeitaufwand verbunden. Daher können auch Alternativen, die auf anderen Modellierungsverfahren basieren, betrachtet werden. Auch hier ist Flexibilität im Input eine wesentliche Anforderung.
- Bei der **Weiterverarbeitung** (Postprocessing) der Ergebnisse aus der Dosisberechnung ist maßgeblich eine Verarbeitung diverser Modellierungsausgaben in einfach lesbare Datensätze bedeutend. Hier wäre eine Option für simple graphische Darstellung der Ergebnisse ebenfalls denkbar. Außerdem ist eine Möglichkeit zur Skalierung oder Normalisierung der Ergebnisse relevant.

Die verwendeten Bibliotheken sollen die involvierten physikalischen Prozesse nach neuestem Stand der Wissenschaft abbilden. Dies betrifft Wirkungsquerschnittsbibliotheken, Nachzerfallsdaten sowie die aktuell von der International Commission for Radiological Protection (ICRP) empfohlenen Konversionskoeffizienten für die Dosisberechnung. Für externe Strahlungsexpositionen sind Dosiskonversionskoeffizienten aus der ICRP-Publikation 116 /INT 10/ relevant. In diesem Bericht sind, in Übereinstimmung mit den Empfehlungen der ICRP /INT 07a/, mit u. a. ICRP/ICRU-Phantomen berechnete Konversionskoeffizienten (Fluenz in Dosis) für die effektive Dosis enthalten. Im Fall der Wirkungsquerschnittsbibliotheken sind dies ENDF/B-VIII.0 (USA, publiziert 2018) /BRO 24/, JEFF-3.3.1 (NEA, publiziert 2017) /NUC 24/, TENDL-2023 (Europa, publiziert 2023) /KON 19/, /KON 24/ und JENDL-5 (Japan, publiziert 2023) /JAP 24a<sup>1</sup>.

Die konkreten Anforderungen an Input- und Output-Formate der einzelnen Prozessschritte sind in Tab. 1.3 dargestellt.

---

<sup>1</sup> Die ENDF-Formate wurden ursprünglich für die Verwendung in den nationalen US-amerikanischen Nukleardatendateien ENDF/B entwickelt. Durch die internationale Verwendung der ENDF-Formate, wurden diese von den ENDF/B-Bibliotheken abgekoppelt („ENDF-6-Format“ vs. „ENDF/B-VI-Bibliothek“). Die Kontrolle über die ENDF-Formate liegt bei der US Cross Section Evaluation Working Group (CSEWG) und die Formatspezifikationen werden über das National Nuclear Data Center am Brookhaven National Laboratory veröffentlicht /LOS 13/. Die CSEWG erwägt, das im Jahre 2011 publizierte Generalized Nuclear Data Format (GND 1.0) als Ersatzformat für das veraltete ENDF-6-Format zu verwenden. Zur Evaluierung der Wirkungsquerschnittsdaten werden Processing-Codes wie z. B. NJOY2016 (ENDF) /LOS 23/, FUDGE (GND) oder die japanische Neuentwicklung FRENDY (ENDF und GND) /JAP 24b/ verwendet.



**Tab. 1.3** Anforderungen an Input und Output für die einzelnen Prozess- und Rechenschritte

Prozessschritt	Material und Nuklidvektor Eingabe	Abbrand	Zerfall	Quelltermerstellung	Dosisberechnung	Postprocessing
Input	Material ( $t = 0$ )	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zusammensetzung</li> <li>• Bestrahlungsregime</li> <li>• BE abhängige Informationen</li> </ul>	Nuklidvektor (nach Abbrand falls Brennstoff)	Nuklidvektor nach Zerfall	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Spektrum (Quelle)</li> <li>• Konversionsfaktoren</li> </ul>	Dosisleistung, Format des Outputs
Output	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Stoffvektor</li> <li>• Nuklidvektor</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zusammen-setzung nach Abbrand</li> <li>• Neuer Stoffvektor und Nuklidvektor</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zusammen-setzung zu Zeit <math>t</math></li> <li>• Neuer Stoffvektor und Nuklidvektor</li> </ul>	Normalisiertes Spektrum	Dosisleistung	.csv Datei, graphische Darstellung der Ergebnisse

### **1.2.3 Anforderungen an Codes, Software und IT-Infrastruktur**

Bei der neuen Rechenkette soll der Benutzer die Rechencodes über ein zentrales Interface ansteuern können. Zu diesem Zweck werden allgemeine Anforderungen an die zu integrierende Software und Codes definiert. Hierzu zählt, dass die zu integrierenden Rechencodes verfügbar sind und dem aktuellen Stand von W&T gerecht werden. Für die Berechnungen von Abbrand, Zerfall und Dosisleistung müssen die Codes validiert und anerkannt sein. Eine weitere notwendige Voraussetzung ist die kontinuierliche und langfristige Pflege und Weiterentwicklung. Aus diesen Gesichtspunkten bieten sich Rechencodes an, die von wissenschaftlichen Instituten oder internationalen Kollaborationen entwickelt und gewartet werden. Von Vorteil ist es außerdem, wenn der Software-Quellcode verfügbar ist und nicht zuletzt, ist auch der Kostenfaktor von Relevanz. Dabei ist freizunehmende Software, ohne Lizenzgebühren und komplexe Lizenzbedingungen, zu bevorzugen.

Einige Rechencodes, z. B. alle auf der Monte-Carlo-Methode basierenden Teilchen-transport Codes, haben erhebliche Zeitkosten, um die Berechnungen auszuführen. Hier ist es sinnvoll, die Rechnungen auf einer Rechencluster-Infrastruktur auszuführen. Eine weitere Anforderung ergibt sich daraus, eine Schnittstelle zum Rechencluster der GRS zu Verfügung zu stellen, welche das Senden und Abrufen von Rechnungen erleichtert.

Schließlich gibt es auch Anforderungen praktischer Natur, sowohl für die zu integrierenden Codes als auch für die Programmierung der Schnittstellen. Für die erste Version der neuen Rechenkette sollten Rechencodes bevorzugt werden, für die Expertise in der GRS vorhanden ist. Dasselbe gilt für die Programmiersprache(n) in denen die Schnittstellen und die Benutzeroberfläche programmiert werden.

### **1.2.4 Benutzer-Anforderungen**

Durch interne Befragungen wurden die Wünsche und Vorstellungen der Benutzer an die aktualisierte Rechenkette ermittelt. Diese Gespräche wurden mit dem Ziel geführt, die Zugänglichkeit zu Rechenmethoden zu verbessern, den Einstieg in computergestützte Rechenmethoden zu vereinfachen und dadurch die Anzahl der potenziellen Nutzer zu vergrößern. Es zeigte sich, dass der Kenntnis- und Erfahrungsstand bei der Anwendung von Modellierungsmethoden für radioaktive Abfälle stark variiert. Dies wurde bei der Planung und Entwicklung berücksichtigt, und es wurden drei Nutzergruppen definiert. Im

Laufe der Entwicklung wurden die Arbeiten regelmäßig an diesen Anforderungen gespiegelt und die Testergebnisse zum Mock-up des User-Interface und zu den Funktionen der Rechenkette, die im Rahmen von Fragestellungen des Fachbereiches getestet wurde, mit einbezogen. Folgende Nutzergruppen wurden definiert:

- **Nutzer ohne Grundkenntnisse von Modellierungsmethoden** sind an einem intuitiven Interface sowie einem anwenderfreundlichen Manual interessiert. Diese User-Gruppe wird die Rechenkette zur Berechnung von Standardfällen mit leicht veränderten Eingabedaten, bspw. zur Bestimmung der Dosisleistung in 1 m Abstand von einem MOSAIK®-Behälter mit sich änderndem Inventar, verwenden. Für diese Nutzer sind eine einfache Progression zwischen Prozessschritten sowie ausreichend dokumentierte Standardfälle von besonderer Bedeutung.
- Für **Nutzer**, die Erfahrung mit nur einem der angesteuerten Rechencodes haben, oder nur **grundlegende Erfahrungen mit der Modellierung** aller Prozessschritte, ist eine Modularität der Rechenkette von Interesse. Dadurch wird die selektive Benutzung von Prozessschritten möglich gemacht. Die Nutzer können ihre gewohnten Routinen für bekannte Prozesse und die entwickelte Software für die Schritte der Rechenkette nutzen, in denen keine ausreichende Erfahrung besteht. Diese User-Gruppe ist am Lösen komplexer Fragestellungen interessiert, wie z. B. die Berechnung des Strahlungsfeldes um einen Transport- und Lagerbehälter, welcher mit Brennelementen eines bestimmten mittleren Abbrandes beladen ist. Des Weiteren soll die Möglichkeit bestehen In- und Output-Dateien für die Rechensoftware manuell vor der Ausführung zu editieren.
- **Modellierer mit umfangreicher Erfahrung** bei verschiedenen Rechencodes priorisieren vor allem die flüssige und unabhängige Funktion von Schnittstellen. Im Detail meint das einen unkomplizierten Transfer von Out- als Input-Datensätzen zwischen verschiedenen Rechencodes sowie ein Daten-Postprocessing. Als Beispiele für Anwendungsfälle können Vergleichsrechnungen mit verschiedenen Zerfallsbibliotheken oder nur teilbeladene Behälter dienen. Hier wird auch großer Wert auf validierte und anerkannte Codes gelegt, die gleichzeitig eine große Flexibilität bieten. Bezüglich des User-Interfaces sind Funktionalitäten, die Prozesse beschleunigen, bspw. Autofill und Hochladen von Datensätzen, erwünscht.

Die Nutzergruppen und ihre Anforderungen an die Rechenkette sowie deren Priorisierung sind in Tab. 1.4 aufgeführt. Alle Entwicklungsschritte der neuen Rechenkette, wurden, soweit möglich, im Rahmen dieser Anforderungen geplant und ausgeführt.

**Tab. 1.4** Anforderungen für verschiedene Nutzergruppen

<b>Nutzergruppe</b>	<b>Nutzer ohne Grundkenntnisse</b>	<b>Nutzer mit Grundkenntnissen</b>	<b>Erfahrener Modellierer</b>
Globale Annahme	Umfangreiches Fachwissen zu HAW-, LAW/MAW-Abfällen und Strahlenschutz ist bei allen Benutzern angenommen.		
Vorausgesetztes Wissen	Keine oder sehr geringe Erfahrung mit Modellerstellung	Erfahrung mit nur einem der Rechen-codes oder grundlegende Erfahrungen mit der Modellierung aller Prozessschritte	Umfangreiche Erfahrung mit Modellierung- und Teilchen-transport-Codes
Anwendungsfall	Schnelle Berechnung eines Standardfalles	Berechnung einer komplexeren Fragestellung	Berechnung von sehr komplexen Fragestellungen, Vergleichsrechnungen
Anforderung User-Interface	Intuitives Interface, ausführliches User Manual	Eingabe von Parametern mit ausreichender Komplexität	Schnelle Autofill-Funktionalität des User-Interfaces
Anforderung Rechencodes	Ausreichend Standardfälle hinterlegt	Bekannte/übliche Rechencodes	Rechencodes mit großer Genauigkeit und Flexibilität
Anforderung allgemeine Infrastruktur	Einfache Progression zwischen Prozessschritten und bei der Interaktion mit dem Rechencluster	Benutzung einzelner Prozessschritte um Codes/Schnittstellen zu bedienen, bei denen Erfahrung fehlt, Möglichkeit zum Editieren von In-/Outputs	Schnittstellen zur Konvertierung von In- und Output in gewünschte Formate, Möglichkeit des Eingriffs in einzelne Prozessschritte
Priorität	Übersichtlichkeit des User-Interface	Modularität der Prozessschritte	Funktion der Schnittstellen

### 1.3 Repräsentative Rechenfälle

Die in den Kap. 1.2.2 und 0 definierten Anforderungen, zusammen mit den definierten repräsentativen Rechenfällen, wurden zur Wahl der ersetzenden Programme herangezogen (siehe Kap. 1.4).

Um die Anforderungen an die neue Rechenkette definieren zu können, wurden mehrere repräsentative Rechenfälle definiert. Diese wurden von Nutzern als die Szenarien identifiziert, welche am häufigsten gerechnet werden, und anfangs zur Priorisierung der Funktionen der neuen Rechenkette genutzt. Die repräsentativen Rechenfälle wurden im Laufe des Eigenforschungsvorhabens zum kontinuierlichen Testen der einzelnen Komponenten genutzt und im Abschluss auch zum Vergleich mit der alten Rechenkette.

Bei der Auswahl der repräsentativen Rechenfälle für die Quelltermerstellung wurden jeweils zwei Beispiele von LAW/MAW und HAW-Abfallgebinden definiert. Jeweils eines diente als Referenz für die Vergleichsrechnung der Dosisbestimmung. Details der jeweiligen Fälle sind im folgenden Kapitel aufgeführt.

### **1.3.1 Abbrand- und Zerfallsrechnungen für Brennelemente**

Für die Berechnung von Abbränden und Zerfallsdaten wurden die folgenden Brennelementtypen ausgewählt:

- Siemens 16x16-20 UO<sub>2</sub> und MOX für Druckwasserreaktoren (DWR)
- ATRIUM 9x9-1 UO<sub>2</sub> und MOX für Siedewasserreaktoren (SWR)

Diese Auswahl deckt einen Großteil der routinemäßigen Rechnungen von Nutzern der Rechenkette. Daher ist in Vergleichsrechnungen festzustellen, was die potenziellen Abweichungen zwischen der alten und der neu zu entwickelnden Rechenkette sind. Die für die Berechnung gewählten Parameter sind in dargestellt. Für die Berechnungen wurde ein Zyklus von 365 Tagen mit Nullleistung und vier Zyklen mit 305 Tagen Bestrahlung und 60 Tagen Revision durchgeführt. Die Brennstableistung betrug jeweils 4,1 MW, 37 MW und 52 MW pro Origen-Basismasse. Die Abbrände wurden bei 5, 40 und 65 GWd/Mg SM berechnet. Die anfängliche Anreicherung und die Leistung während der Bestrahlung wurden wie in angepasst.

**Tab. 1.5** Zusammenfassung der Parameter für alle Brennelemente Referenzfälle

	<b>Siemens 16x16 UO<sub>2</sub></b>	<b>Siemens 16x16 MOX</b>	<b>Atrium 10x10 UO<sub>2</sub></b>	<b>Atrium 10x10 MOX</b>
BE-Geometrie	16x16-20	16x16-24	10x10-9	10x10-9
Kontrollstäbe innen (cm)	1,29	1,29	1,2619	1,2619
Kontrollstäbe außen (cm)	1,37	1,37	1,2940	1,2940
BE-Kasten innen (cm)	22,88	22,88	13,4	13,4
BE-Kasten außen (cm)	22,88	22,88	13,82	13,82
GAP-Kasten zu Kasten (cm)	0,1	0,1	1,43	1,43
Abbrand (GWd)	5; 40; 60	5; 40; 60	5; 40; 60	5; 40; 60
Basis		Natururan		Natururan
Uranvektor (%)	4,4 U-235 für 5,40 und 65 GWd 0,04 U-234 0,0 U-236 Rest U-238		4,4 U-235 für 5 und 40 GWd 4,9 U-235 für 60 GWd 0,044 U-234 Rest U-238	
Pu-Vektor (%) (5 und 40 GWd), 6,4 % Plutonium		2,02 Pu-238 54,4 Pu-239 25,564 Pu-240 11,328 Pu-241 6,679 Pu-242		2,029 Pu-238 54,4 Pu-239 25,564 Pu-240 11,328 Pu-241 6,679 Pu-242
Pu-Vektor (60 GWd), 7,87 % Plutonium		1,8 Pu-238 59 Pu-239 23 Pu-240 12,2 Pu-241 4 Pu-242		1,8 Pu-238 59 Pu-239 23 Pu-240 12,2 Pu-241 4 Pu-242
Dichte (g/cm <sup>3</sup> )	10,45 (0,9753)	10,45 (0,9753)	10,45	10,45 (0,9753)
Pellet-Durchmesser (cm)	0,911	0,908 (0,911 für 60 GWd)	0,844	0,844
Gap (cm) Pellet-Hüllrohr einfach	0,0095	0,011	0,0014	0,0014

	<b>Siemens 16x16 UO<sub>2</sub></b>	<b>Siemens 16x16 MOX</b>	<b>Atrium 10x10 UO<sub>2</sub></b>	<b>Atrium 10x10 MOX</b>
Cladding-Innendurchmesser (cm)	0,93	0,93	0,8468	0,8468
Cladding-Außendurchmesser (cm)	1,075	1,075	1,005	1,005
Cladding-Dichte (g/cm <sup>3</sup> )	6,50	6,50	6,55	6,55
Cladding-Material	Zircaloy-2	Zircaloy-2	Zircaloy-2	Zircaloy-2
Führungsrohrmaterial	Edelstahl	Edelstahl	Edelstahl	Edelstahl
Gitterabstand (cm) – pitch	1,43	1,43	1,2950	1,2950
Kühlmittel	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser
Kühlwassertemperatur (K)	573.1	573.1	553.1	553.1
Kühlmitteldruck (MPa)	15,8	15,8	7,09	7,09
Kühlmitteldichte (g/cm <sup>3</sup> )	0,7274	0,7274		
Dampfblasengehalt (%)	-	-	40	40
Borkonzentration (ppm)	500	500	-	-
<b>Leistung/Zeit (MWd/MgSM)</b>				
5 GWd	4x305 Tage; 4,1 MW; 100 %	152,5 Tage, 32,79 MW; 100 %	200 Tage; 25 MW; 100 %	200 Tage; 25 MW; 100 %
40 GWd	4x305 Tage; 32,79 MW; 100 %	4x305 Tage, 32,79 MW; 100 %	4x305 Tage; 31,25 MW; 125 %	4x305 Tage; 31,25 MW; 125 %
60 GWd	4x305 Tage; 53,28 MW; 150 % (65 GWd)	4x305 Tage, 32,79 MW; 150 %	5x335 Tage; 35,83 MW; 143,3 %	5x335 Tage; 35,83 MW; 143,3 %
Abklingzeiten (Jahre)	5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 75, 100, 150, 200, 500, 1000, 10000, 100000, 1000000	5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 75, 100, 150, 200, 500, 1000, 10000, 100000, 1000000	5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 75, 100, 150, 200, 500, 1000, 10000, 100000, 1000000	5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 75, 100, 150, 200, 500, 1000, 10000, 100000, 1000000

### **1.3.2 Neutronenquellterme von verglasten Abfällen: Borosilikat-Kokille**

Die neue Rechenkette soll außerdem eine grundlegende Methode zur Berechnung des Inventares von verglasten Abfällen enthalten, welche in der alten Rechenkette nicht einfach berechenbar waren. Die Glasmatrix ist wichtig für die Bestimmung der  $(\alpha,n)$ -Komponente der Neutronenquelle, da die Alphateilchen mit den leichten Elementbestandteilen in der Matrix interagieren, wobei die  $(\alpha,n)$ -Ausbeuten dem Medium entsprechen, das die  $\alpha$ -emittierenden Nuklide enthält /WIE 24/.

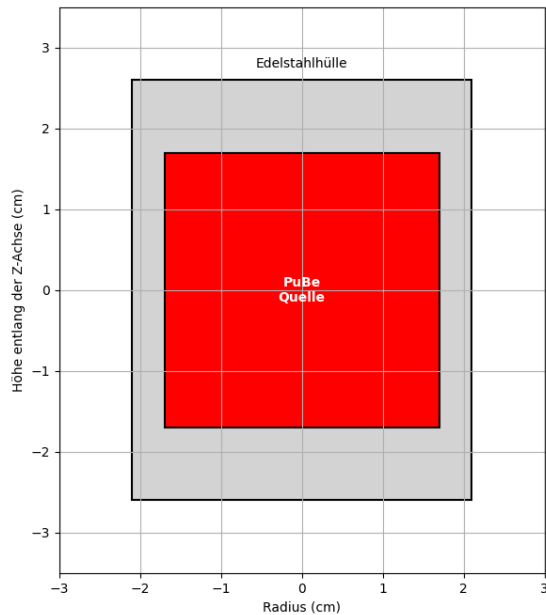
Als Beispielfall wurde hier eine Borosilikat Kokille mit 15 % Abfallanteil von DWR-Brennstoff angenommen. Dafür wurden die in Kap. 1.3.1 definierten DWR-Brennelemente mit 40 GWd/Mg SM Abbrand benutzt. Nach Bestrahlung des Brennstoffs und der anschließenden Nasslagerung, werden die abgetrennten Spaltprodukte und Aktiniden in einer Glasmatrix gebunden.

### **1.3.3 Neutronenquellen: Pu-Be-Quelle**

Als Referenzfall für den  $(\alpha,n)$ -Zerfall wurden Pu-Be-Quellen identifiziert. Pu-Be-Neutronenquellen sind aus den 1960er und 1970er Jahren stammende umschlossene technische Strahlenquellen, die in der ehemaligen UdSSR gefertigt worden sind. Von den Quellen geht eine sehr hohe Gamma- und Neutronenortsdosisleistung aus, deren Neutronenanteil von der  $(\alpha,n)$ -Reaktion stammt. Im Rahmen von Vorarbeiten für eine Entsorgung von in Deutschland lagernden Pu-Be-Quellen sind diese Quellen ein häufiger Rechenfall für die Nutzer der Rechenkette.

Die Abmessungen können je nach Pu-Be-Quelle variieren. Beispielhaft wurde in als Referenzfall eine Neutronenquelle des Typ IBN 11 hinterlegt. Diese hat einen Durchmesser von 34 mm und eine Höhe von 34 mm. Eine schematische Darstellung der Pu-Be-Neutronenquellen des IBN-Typs ist in Abb. 1.4 gegeben. Die Quelle hat eine Aktivität von  $1,4E+12$  Bq und eine Pu-Be-Masse von 136,45 g /KRÜ 21/.





**Abb. 1.4** Querschnitt einer IBN11 Neutronenquelle

Die Abmessungen des Innenvolumens bzw. der Kapsel sind aus Zertifikaten des Herstellerkataloges /FED 20/ und des International Catalogue of Sealed Radioactive Sources and Devices (ICRS) der IAEA /IAE 20/ übernommen worden.

#### 1.3.4 Gamma-Quellen mit Abschirmung: Ionenaustauscherharz in MOSAIK®-Behälter

Als besonders interessant für die Berechnung der Dosisrate durch Gammaemitter wurden LAW-/MAW-Abfallgebinde identifiziert. Diese Abfälle können ein breites Spektrum von Inventaren, Materialien und Gebindegeometrien umfassen. Für einen wohldefinierten Referenzfall zum Testen einer neuen Rechenkette wurde ein MOSAIK®-Behälter gewählt, der Ionenaustauscherharze enthält. Die beim Betrieb von Leichtwasserreaktoren zur Reinigung der Wasserkreisläufe und für die Aufbereitung des radioaktiven Abwassers verwendeten Ionenaustauscherharze sind ein signifikanter Abfallstrom aus dem Betrieb von Kernkraftwerken /KRÜ 24/.

Für die Referenzrechnung wurde Konditionierung durch Kompaktierung, wie in /KRÜ 24/ beschrieben, angenommen. Die Geometrie des MOSAIK®-Behälters orientiert sich an den Endlagerbedingungen Konrad /BRE 15/, detailliert beschrieben in Kap. 5.1.1.2. Die Materialeigenschaften der Quelle für diesen Referenzfall sind in Tab. 1.6 zusammengefasst.

**Tab. 1.6** Eigenschaften der für den Gamma-Referenzfall genutzten Ionenaustauscherharze

<b>Eigenschaft</b>	<b>Wert</b>
Konditionierung	Kompaktiert
Wassergehalt	1 %
Dichte (kg/m <sup>3</sup> )	1,12 (Monolithisch)
Gesamtaktivität (Bq)	3,3 E+12
Aktivitätskonzentration (Bq/m <sup>3</sup> )	Co-60: 3,7E+11, Cs:137: 7,4E+11

### 1.3.5 Komplexe Abschirmungsgeometrien: Transport- und Lagerbehälter

Als Referenzfall für HAW-Abfälle in komplexen Abschirmungsgeometrien wurde die Berechnung der Dosisleistung von bestrahlten DWR-Brennelementen in einem Lager- und Transportbehälter ausgewählt. Als Grundlage für das hier implementierte generische Modell diente der CASTOR® V/19, ein häufig verwendeter Behälter für den Transport bestrahlter Kernbrennstoffe, der von der GNS hergestellt wird. Um die Funktion der neu entwickelten Modelle und Berechnungsmethoden zu testen, wurde eine Vollbeladung mit DWR-Brennelementen mit einem mittleren Abbrand von 40 GWd/Mg SM aus Kap. 1.3.1 angenommen und die Photonen- und Neutronendosis berechnet.

### 1.4 Auswahl der Programme für die neue Rechenkette

Die Strukturierung der neuen Rechenkette setzt eine Reihe von Programmcodes voraus, die durch ein Overlay mit Daten gespeist und angesteuert werden. Unter Berücksichtigung der identifizierten Anforderungen aus Kap. 1.2 werden die in Tab. 1.7 aufgelisteten Programme für die neue Rechenkette gewählt.

**Tab. 1.7** Zusammenfassung des Auswahlverfahrens

Prozessschritt	Interface für die Eingabe (Material und Nuklidvektor)	Abbrand	Zerfall	Quelltermerstellung	Dosisberechnung	Postprocessing
Aktuell genutzte Software	ANITABLE(ACOND)	OREST (ORIGEN)	OREST (ORIGEN)	NGSRC, SRCMCNP	ANISN, SURF, MCNP®	Keine
Generelle Anforderungen	Flexibilität im Input, Input Validierung, integriertes Manual	Validierung, Geschwindigkeit	Beinhaltet aller gängigen Zerfallsketten, ( $\alpha,n$ )-Reaktionen im Oxid, Materialzusammensetzung und Energiespektren im Output	Energiespektrum und Dosiskonversionskoeffizienten MCNP® konform formatiert, ( $\alpha,n$ )-Reaktionen an leichten Elementen, Geometrie Eingabe	1d-deterministischer Strahlungstransport (ANISN), Monte-Carlo Methode, Flexibler Input (Material, Geometrie, Quelle), Geschwindigkeit	Output in einem einfach weiterzuverarbeitenden Format (.csv oder .xlsx), graphische Darstellung der Ergebnisse
Alternative in Betracht gezogene Software	Keine	SCALE 6.2. (POLARIS), CASMOS, Ventina, MOTIVE, Serpent, OpenMC	SCALE 6.2 (ORIGEN), Fispact, Serpent	Cinder	Geant4, SCALE (MAVRIC), Serpent, PHITS, OpenMC	MCNP® Tools, MCNP® Plotter, PHITS
Ausgewählte Software	Neu (WANIRAS) basierend auf Python	SCALE 6.2 (ORIGEN, ORIGAMI)	SCALE 6.2 (ORIGEN)	Neu (WANIRAS) basierend auf Python	MCNP® 6	Neu (WANIRAS) basierend auf Python
Entscheidungsgrundlage	Veränderte Anforderungen und technische Möglichkeiten	Geschwindigkeit, Internationale Validierung	Geschwindigkeit, Internationale Validierung	Veränderte Anforderungen und technische Möglichkeiten	Internationale Validierung	
Option für zukünftige Erweiterung		Serpent, Motive	Serpent, Ventina		SCALE (MAVRIC), PHITS	

Im Folgenden wird auf die gewählte Software der neuen Rechenkette kurz eingegangen:

- Die erste Schnittstelle zum Benutzer, die Eingabe des Nuklid- und Materialvektors, in der alten Rechenkette vom Programm ACOND übernommen, muss als wichtigste Anforderung einen flexiblen Input ermöglichen. Als Verbesserung zum existierenden Programm wurde außerdem der Wunsch nach Validierung des Inputs von erfahrenen Nutzern ausgesprochen. Um die Einarbeitung von neuen Nutzern zu erleichtern, sollte außerdem ein ausführliches Handbuch zur Verfügung gestellt werden. Diesen Anforderungen kann aktuell keine existierende Software nachkommen. Eine korrekte Definition der zu berechnenden Materialien, Nuklide und der weiteren Rechenoptionen ist ausschlaggebend für die weiteren Prozessschritte. Deshalb wird eine **speziell für die Benutzer entwickelte Lösung, eine Graphical User Interface (GUI)**, präferiert. Diese ermöglicht auch die benötigte Flexibilität. Eine eigene Programmierung der GRS ist auch bezüglich einer erleichterten Weiterentwicklung und Anpassung von Vorteil. Für das User Interface selbst, welches die Schnittstelle zum Benutzer in allen Prozessschritten darstellt, wurden hauptsächlich auf der Programmiersprache Python basierte Lösungen in Betracht gezogen. Das ist auf die Allgegenwärtigkeit dieser Programmiersprache im Feld der wissenschaftlichen Programmierung zurückzuführen, da auch hier auf einfache Wartung und Ausweitung Wert gelegt wird
- Der **ORIGEN**-Code (Oak Ridge Isotope Generation) wurde entwickelt zur Berechnung der Nuklidzusammensetzung und Radioaktivität von Spaltprodukten, Aktivierungsprodukten und Produkten der Schwermetalltransmutation. Die Flussberechnung wird dabei von TRITON übernommen. Der Code kann somit schnelle Abbrandrechnungen oder Nuklidzerfälle rechnen. Er weist ausreichend Flexibilität in der Eingabe auf, um alle Abbrandparameter für normale DWR/SWR-Brennelemente unterbringen zu können. Ebenso ist die Eingabe von mehreren Abklingschritten möglich. Der Code kann auch ( $\alpha, n$ )-Reaktionen sowie die Abtrennung von Nukliden bewerkstelligen. Dies kann die Wiederaufarbeitung von Kernbrennstoff simulieren. Ebenfalls lässt der Code Aktivierungsprozesse zu. Vorgerechnete Flussspektren sind allerdings notwendig. Die entsprechenden Brennelementgeometrien sind auch hinterlegt. Dreidimensionale Abbrandrechnungen lassen sich nur in mehreren Abschnitten durchführen. Origen beinhaltet alle gängigen Zerfallsketten. Die Ausgabe-datei beinhaltet die Materialzusammensetzung und gibt auch die Energiespektren für Neutronen- und Gammastrahlung aus.

- Es besteht aber die Möglichkeit Kritikalitätsrechnungen mit dem im **SCALE** vorhandenen Modul KENO durchzuführen. Damit ist SCALE-ORIGEN der ideale Ersatz für die Erstellung des radioaktiven Quellterms aus Abbrand und Zerfall. SCALE wird über Oak Ridge National Laboratory über RSICC verteilt. Damit sind die beiden Punkte Abbrand und Zerfall mit ORIGEN als Alternativprogramm abgedeckt. Als Alternative zu ORIGEN für spätere Entwicklung wurden MOTIVE und Serpent vorge-merkt, GRS-eigene Software. Beide haben den Vorteil gegenüber ORIGEN, dass keine zusätzlichen Kosten für die Lizenzierung anfallen.
- Nach der Berechnung des Quellterms muss dieser an das nachfolgende Dosisbe-rechnungsprogramm weitergegeben werden. Da diese Aufgabe, ähnlich zu der Schnittstelle, einen hohen Grad der Flexibilität benötigt, wurde auch hier beschlos-sen, diese **Komponente intern neu zu programmieren**. Das öffnet auch die Mög-lichkeit, Simulationsprogramme für die vor- und nachgeschalteten Prozessschritte auszutauschen oder zusätzlich zu implementieren. So könnte z. B. SERPENT zur Berechnung eines Quellterms aus dem Abbrand in zukünftigen Versionen verwen-det werden. Die Umwandlung von SERPENT-Output in MCNP<sup>®</sup>-Input könnte dann ohne externe Software weiterverarbeitet werden.
- Für die Dosisberechnung wurde eine Anzahl an Rechenprogrammen gesichtet, um alternative Optionen zu dem aktuell genutzten **MCNP<sup>®</sup>** zu finden, da MCNP<sup>®</sup> be-trächtliche Kosten verursacht und teilweise Restriktionen für den Hintergrund der Benutzer hat. Das Programm MCNP<sup>®</sup> /WER 18/ ist ein universeller Monte-Carlo-Strahlungstransportcode, der für die Simulation von Partikeltransport über weite Energiebereiche konzipiert ist und vom Los Alamos National Laboratory entwickelt wurde. Dieser Code wird kontinuierlich weiterentwickelt, ist international validiert und besitzt eine breite Benutzerbasis im nuklearen Bereich. Da es auch der Code ist, für den intern das größte Know-how existiert, wurde beschlossen, die aktuell bei der GRS genutzte Version von MCNP<sup>®</sup> 6.2 weiter im Rahmen der Rechenkette zu ver-wenden. Bei der Auswahl wurden einige Alternativen in die nähere Auswahl aufge-nommen: Geant 4, eine von CERN entwickelte Open Source Software, ORIGEN MAVRIC und SERPENT. Von den betrachteten Programmen benutzen alle bis auf MAVRIC Monte-Carlo-Methoden, um den Strahlungstransport zu simulieren. MAVERIC hat dementsprechend kürzere Rechenzeiten aufzuweisen. MAVRIC ist daher eine interessante Alternative, welche als potenzielle Weiterentwicklung fest-gehalten wurde, da sie einen signifikanten Mehrwert in Form von deutlich schnelle-ren Rechnungen liefern könnte.

- Ähnlich zu der Schnittstelle zwischen der Quellterm- und Dosisberechnung, gilt es, auch beim Postprocessing der Simulationsdaten, eine hohe Flexibilität zu ermöglichen. Hier ist besonders wichtig, die .out Dateien in ein universelleres Format (.csv oder .xlsx) umzuwandeln. Ein weiteres erwünschtes Feature hier ist die Möglichkeit, Plots zu produzieren. MCNP® verfügt über eine Sammlung an Skripten für die Datenverarbeitung, zusammengefasst unter MCNP®Tools, welche aber nicht ohne weiteres unter Windows nutzbar sind. Um auf die variablen Anforderungen der Nutzer schnell reagieren zu können, wurde hier beschlossen, diese **Anwendung neu zu programmieren**.



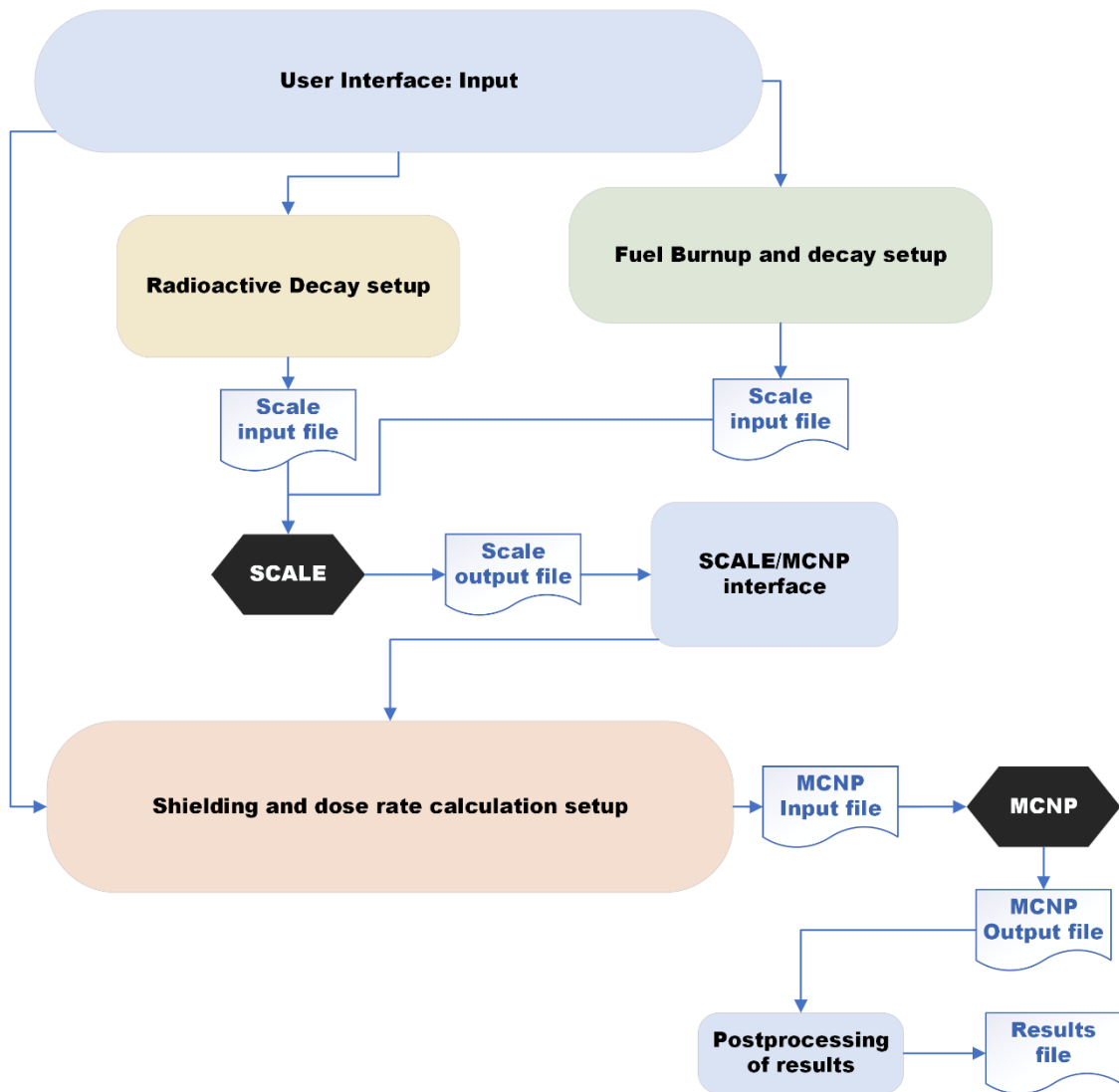
## 2 WANIRAS

Aus den in Kap. 0 beschriebenen Anforderungen an eine Weiterentwicklung der Rechenkette und den repräsentativen Rechenfällen wurde das Konzept für die Anwendung WANIRAS (**W**eiterentwicklung und **A**npassung der **n**umerischen Verfahren zur **I**nventar-  
charakterisierung zwischengelagerter **r**adioaktiver **A**bfälle und Bewertung des **S**trahlungseinflusses) entwickelt. Nach einer Prüfung der, durch die Rechenkette angesteuerten Rechencodes für die einzelnen Prozessschritte, wurde das Konzept, in eine durch eine graphische Oberfläche (GUI) bedienbare Anwendung, umgesetzt. Im Rahmen dieser Weiterentwicklung wurden auch übergreifende Themen, wie die Einbindung von physikalischen Konstanten und Bibliotheken, einer Prüfung auf Aktualität unterzogen.

### 2.1 Strukturierung von WANIRAS

Die Ergebnisse des Auswahlverfahrens der zu ersetzenden und ersetzenden Rechencodes führen zu dem Konzept einer vereinheitlichten Schnittstelle zum Nutzer (User Interface), welche die Schnittstelle zu den ausgewählten Rechencodes SCALE und MCNP<sup>®</sup>, sowie die Schnittstelle zwischen den Rechencodes und das Postprocessing der Daten integriert.





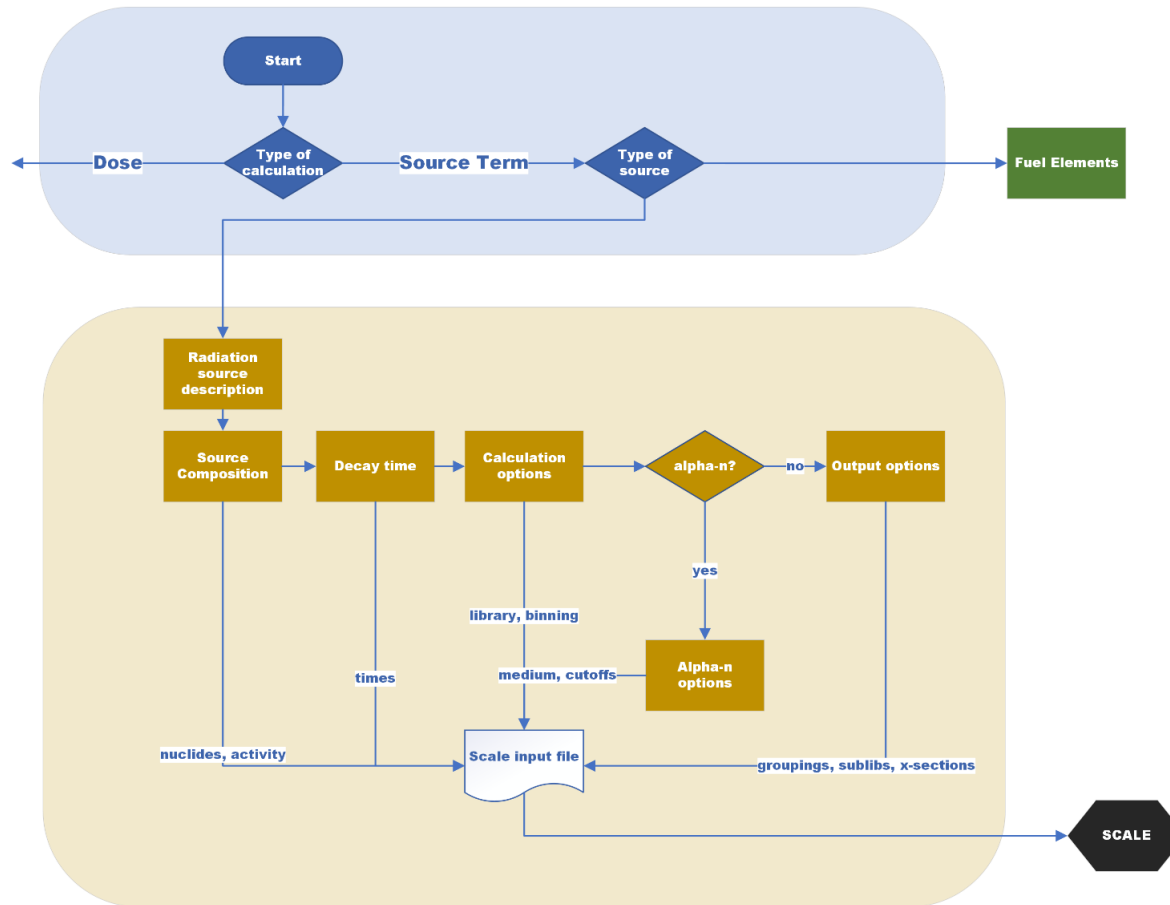
**Abb. 2.1** Schematische Darstellung der Struktur von WANIRAS

Wie aus den Überlegungen in Kap. 1.2 hervorgeht, ist für die einzelnen Prozessschritte eine stetige Weiterentwicklung denkbar, was u. a. auch die Einbindung neuer Rechen-codes beinhaltet. Um eine zukünftige Einbindung nicht zu erschweren, wurde ein modu-lares Konzept erarbeitet, welches die Rechen-codes nicht direkt einbindet, wie es z. B. im bis jetzt benutzten ANITABLE der Fall war. Stattdessen stellt WANIRAS die Infra-struktur zur Verfügung, Input Files in dem für das Zielprogramm angemessenen Format zu erstellen und damit die externe Software aufzurufen. Gleichermäßen werden Output Files gelesen, die relevanten Informationen abgegriffen und, falls nötig, in ein Input File des nächsten Rechen-codes in der Kette umgewandelt. Dieses Vorgehen vereinfacht nicht nur zukünftige Expansion, sondern gibt erfahrenen Nutzern die Option den erstell-ten Input zu bearbeiten, bevor er an den Rechen-code übergeben wird.

Die Abb. 2.1 zeigt eine schematische Darstellung der Strukturierung der neuen Rechenkette. Dabei ist zu beachten, dass die Kommunikation zwischen den verschiedenen WANIRAS-Komponenten (in bunt) und den externen Rechencodes (in schwarz), z. B. zwischen SCALE und der Schnittstelle zu MCNP<sup>®</sup>, ausschließlich durch Textdokumente durchgeführt wird. Das erleichtert auch die zeitnahe Einbindung neuer Versionen der genutzten Rechencodes in die Rechenkette.

Der Prozessablauf in jedem Modul ist in Abb. 2.2 und Abb. 2.3 für die Erstellung von SCALE Input Files für allgemeine radioaktive Quellen und Brennelemente respektive dargestellt. Die Abb. 2.4 zeigt den Prozessablauf der Erstellung von MCNP<sup>®</sup> Input Files und dessen Interaktion mit der SCALE/MCNP<sup>®</sup>-Schnittstelle. Die einzelnen Module sind analog zu Abb. 2.1 farbkodiert. In Pfeilrichtung sind jeweils die einzelnen Abfragen dargestellt, und die übergebenen Parameter werden auf den Pfeilen aufgelistet. Aus Abb. 2.2 und Abb. 2.3 ist ersichtlich, dass die Inputerstellung für SCALE jeweils einen Spezialfall beinhaltet. Im Fall von Quellen und LAW/MAW-Gebinden werden ( $\alpha$ , n)-Quellen, wie z. B. Pu-Be-Quellen, gesondert behandelt, da zusätzliche Berechnungsparameter erforderlich sind. Ähnlich wird in der Input Erstellung für Brennelemente ein zusätzlicher Schritt eingefügt, um die notwendigen Parameter für verglaste Abfälle abzufragen – die Zusammenstellung der Borosilikat Matrix und ( $\alpha$ ,n)- Rechenoptionen.

Das Postprocessing-Modul in WANIRAS führt das Parsing von MCNP<sup>®</sup>-Ausgabedateien durch, um die Extraktion wichtiger Informationen und Ergebnisse zu erleichtern und darzustellen. Eine schematische Darstellung des Aufbaus des Post-processing Moduls ist in Abb. 2.5 zu sehen. Die gewählte Quellstärke und Dosisleistungseinheit sind zusammen mit der gewählten .out- oder .meshtal-Datei und dem gewünschten Arbeitsverzeichnis die einzigen Informationen, die vom Benutzer abgefragt werden.



**Abb. 2.2** Schematische Darstellung der Erstellung von SCALE Input Files für radioaktive Quellen

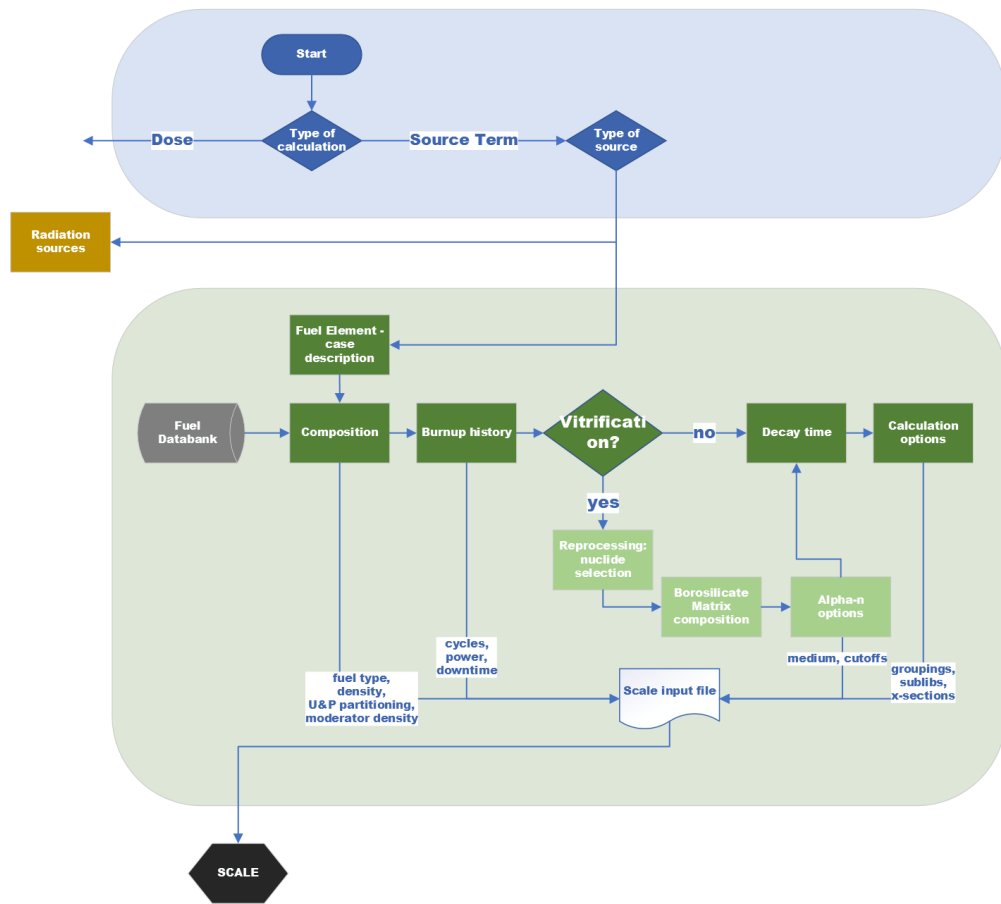


Abb. 2.3 Schematische Darstellung der Erstellung von SCALE Input Files für Brennelemente und Kokillen

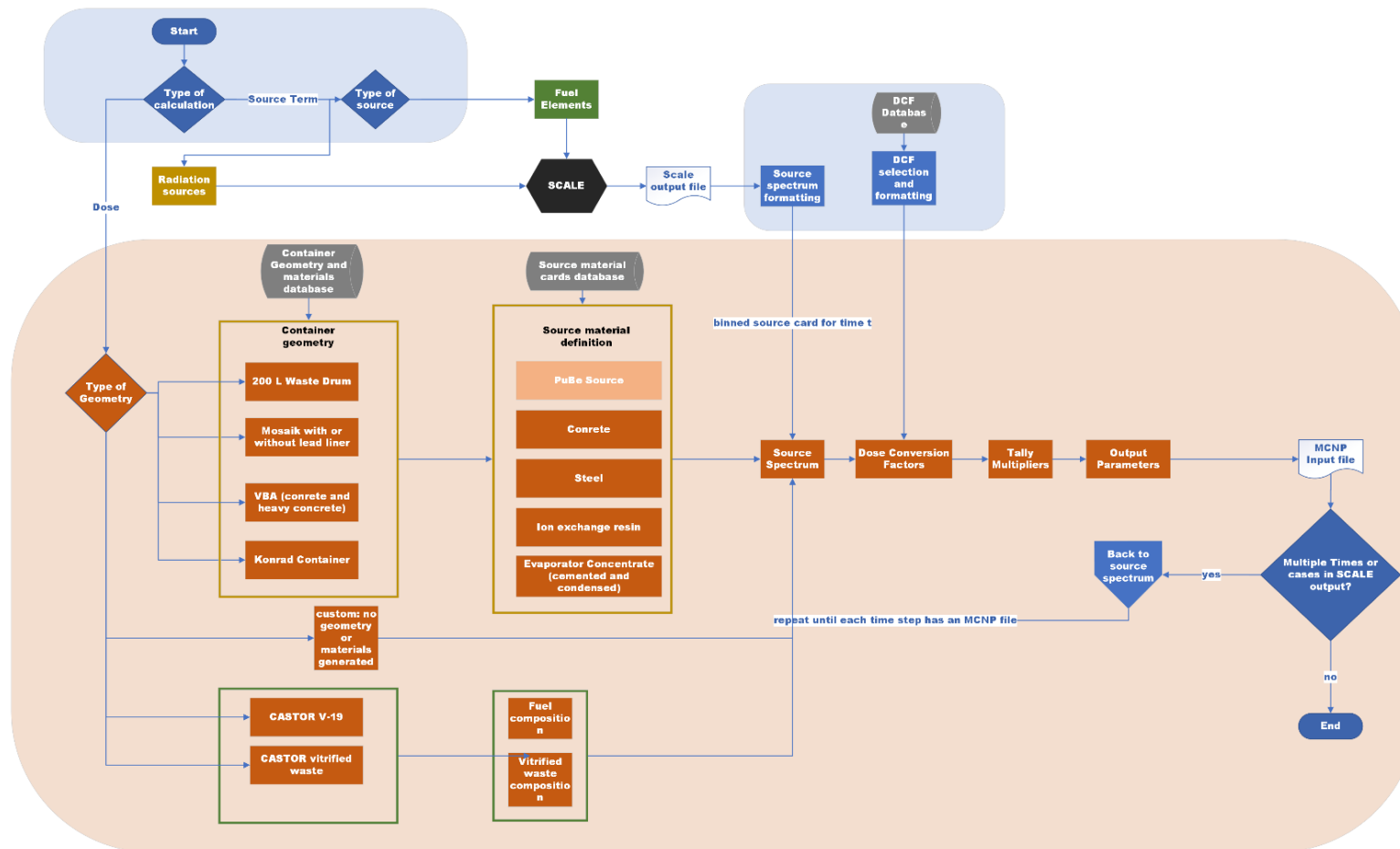


Abb. 2.4 Schematische Darstellung der Schnittstelle zwischen SCALE und MCNP<sup>®</sup> sowie der Erstellung von Input Files für MCNP<sup>®</sup>

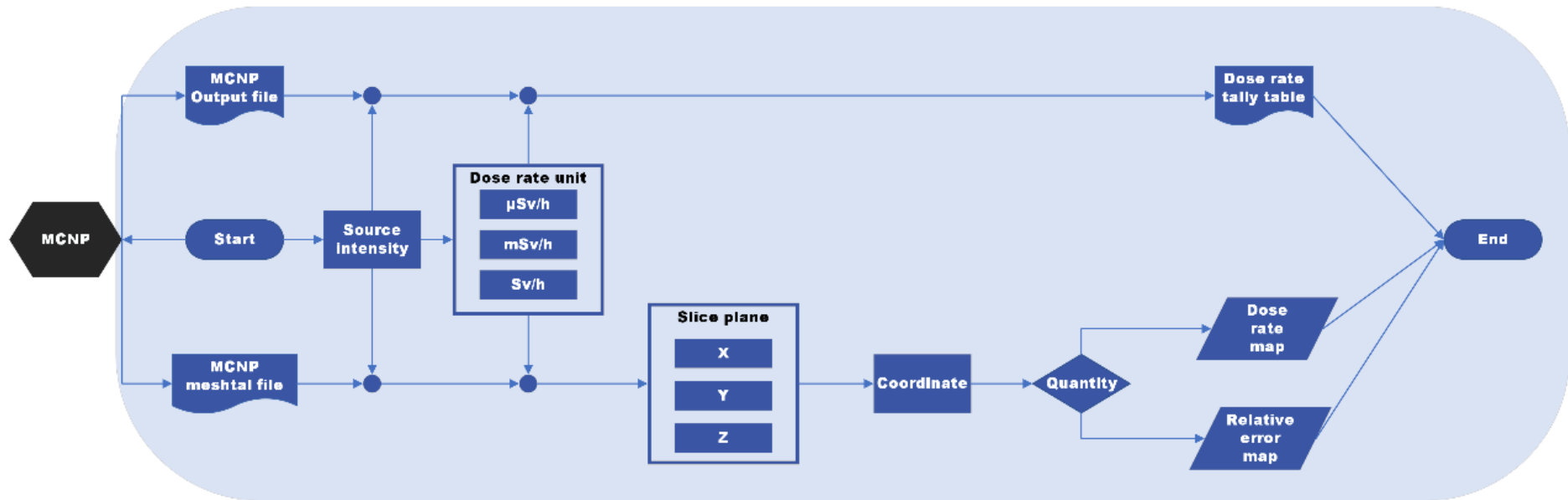


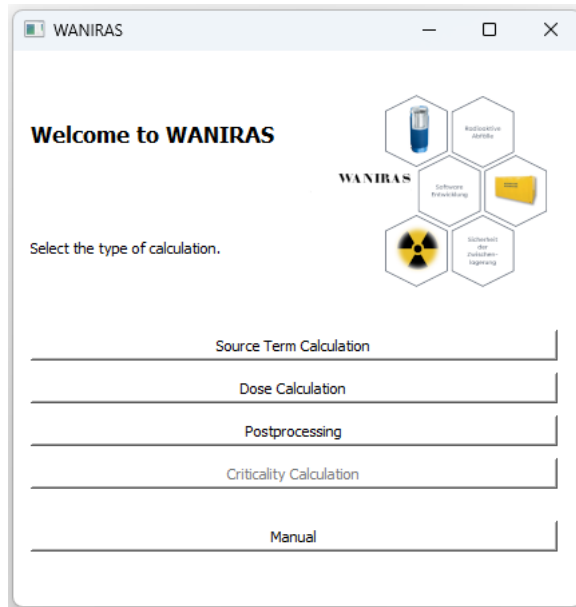
Abb. 2.5 Schematische Darstellung des Postprocessing von MCNP®-Ergebnissen

## 2.2 Umsetzung in einer GUI

Die Erstellung der grafischen Benutzeroberfläche (GUI) basiert auf den Benutzeranforderungen (siehe Kap. 1.2.4). Die GUI ist so konzipiert, dass sie den Bedürfnissen der folgenden drei Benutzergruppen gerecht wird:

- **Nutzer ohne Erfahrung:** Benutzer ohne oder mit wenig Erfahrung können durch bereits hinterlegte Standardwerte für eine Beispielsrechnung schnell und effizient Rechenergebnisse erzeugen.
- **Nutzer mit grundlegender Erfahrung:** Benutzer mit grundlegender Erfahrung können komplexere Rechnungen durchführen und unkomplizierte Werte an ihre Problemstellung anpassen.
- **Nutzer mit umfangreicher Erfahrung:** Benutzer mit umfangreicher Erfahrung können Problemstellungen unterschiedlicher Komplexität berechnen und die Optionen an diese durch Änderung der erzeugten Input-Datei anpassen.

Zur Erstellung der Benutzeroberfläche wurde auf die Python-Bibliothek PyQt zurückgegriffen, die auf einem C++-Framework basiert. Dies ermöglicht durch eine Vielzahl von Tools und Funktionen eine Anpassung der Benutzeroberfläche an die jeweiligen Anforderungen. So wurden bei der Nutzung der GUI thematisch passende Einstellungsmöglichkeiten in einzeln aufrufbaren Fenstern definiert. Neben der einheitlichen Darstellung wurde insbesondere darauf geachtet, komplexe Einstellungsmöglichkeiten zu ermöglichen, ohne die Benutzerfreundlichkeit zu beeinträchtigen. Die Darstellung wurde an die bekannte Windows-Oberfläche angelehnt (siehe Abb. 2.6 als Beispiel für den Startbildschirm für WANIRAS).



**Abb. 2.6** Startoberfläche von WANIRAS

Die GUI wurde mit dem Tool QT Designer entwickelt. Dieses Tool besitzt für die Interaktion von Benutzer und grafischer Oberfläche eine große Anzahl an vordefinierten Elementen (Widgets). In Abb. 2.7 ist beispielhaft eine Oberfläche dargestellt, die unterschiedliche Widgets wie, Button's (QPushButton), Textfelder (QLineEdit) und Dropdown-Menüs (QComboBox) verwendet. In WANIRAS gehören diese zu den am häufigsten verwendeten Elementen.

Die Entwicklung der Oberfläche kann zunächst grafisch durchgeführt werden. Ebenfalls lassen sich die Elemente problemlos in die Programmierumgebung integrieren. Dies ermöglicht eine Weiterentwicklung und die Integration in die Gesamtstruktur von WANIRAS.

Während der Entwicklung der GUI wurde in regelmäßigen Abständen die Oberfläche von Benutzern mit unterschiedlicher Erfahrung getestet und erkannte Fehler sowie Anmerkungen in der Weiterentwicklung berücksichtigt.



2. Fuel Composition

**Select fuel parameters**

Type of fuel

Fuel Element

- ▼ German LWR
  - ▼ 16x16
    - UO2
    - MOX
  - > 18x18
  - > Babcock & Wilcox
  - > Siemens
  - > Westinghouse

Library of Fuel Element mox\_16x16

Density:  g/cm3.

Uranium partition

U-234 0.00%

U-235 0.00%

U-236 0.00%

U-238 0.00%

wt % of Pu in total heavy metal

0.00%

Plutonium partition

Pu-238 0.00%

Pu-239 0.00%

Pu-240 0.00%

Pu-241 0.00%

Pu-242 0.00%

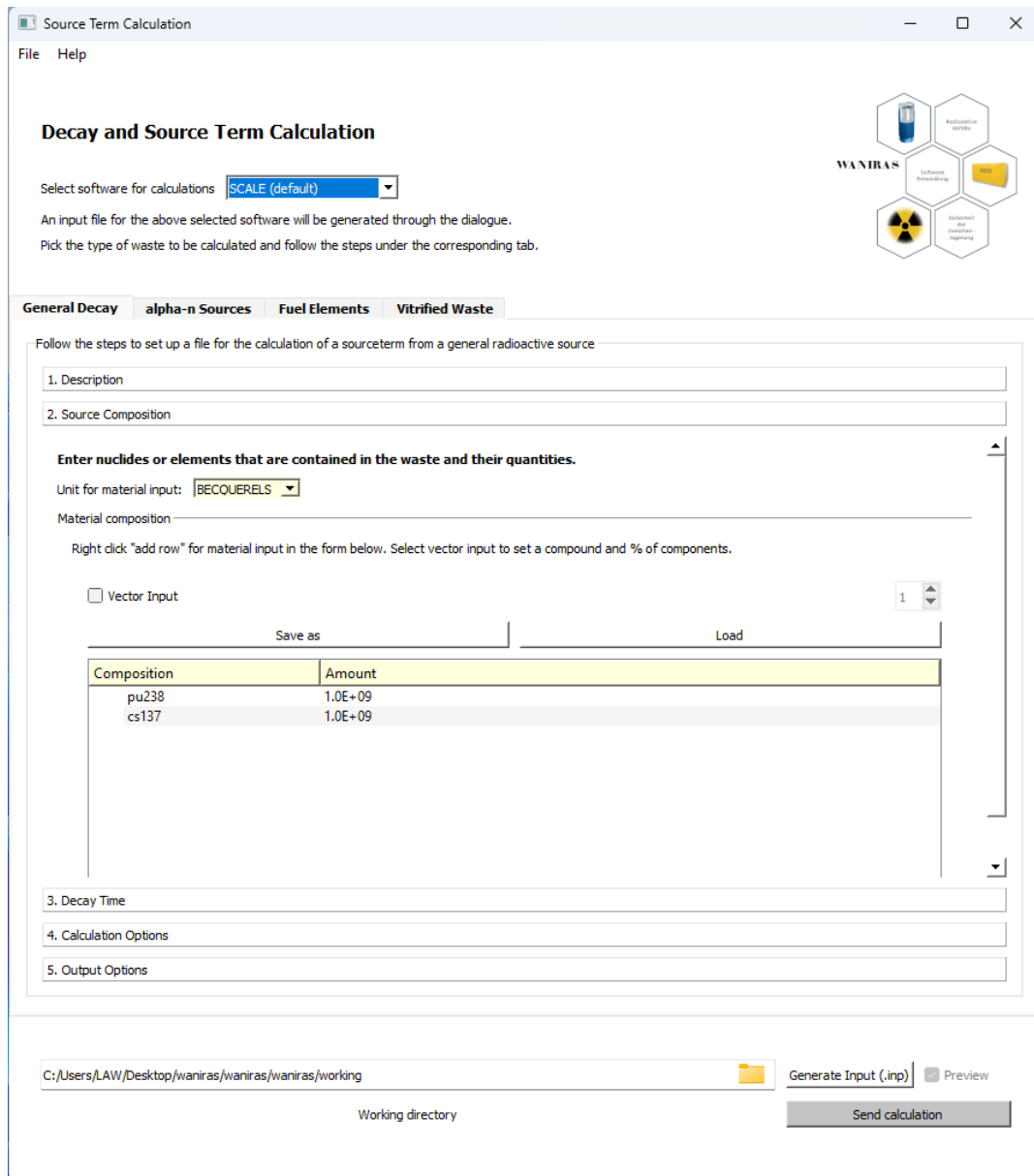
**Abb. 2.7** Exemplarische Erstellung der Brennelementpartitionen

### 2.3 Exemplarische Benutzung

Im nachfolgenden Abschnitt sollen exemplarisch die Benutzung sowie einige Einstellungsmöglichkeiten der entwickelten Benutzeroberfläche WANIRAS gezeigt werden. Eine detaillierte Beschreibung der verschiedenen Rechenschritte ist im WANIRAS-Handbuch dokumentiert.

Die Quelltermerstellung erfolgt in mehreren Schritten:

Nach der Wahl eines geeigneten Namens für die Berechnung wird in einem weiteren Schritt die Quelle erstellt. Hier kann auf hinterlegte Standardwerte zurückgegriffen werden oder es können eigene Werte genutzt werden. In Abb. 2.8 wird eine Quelle mit Pu-238 und Cs-137 verwendet.

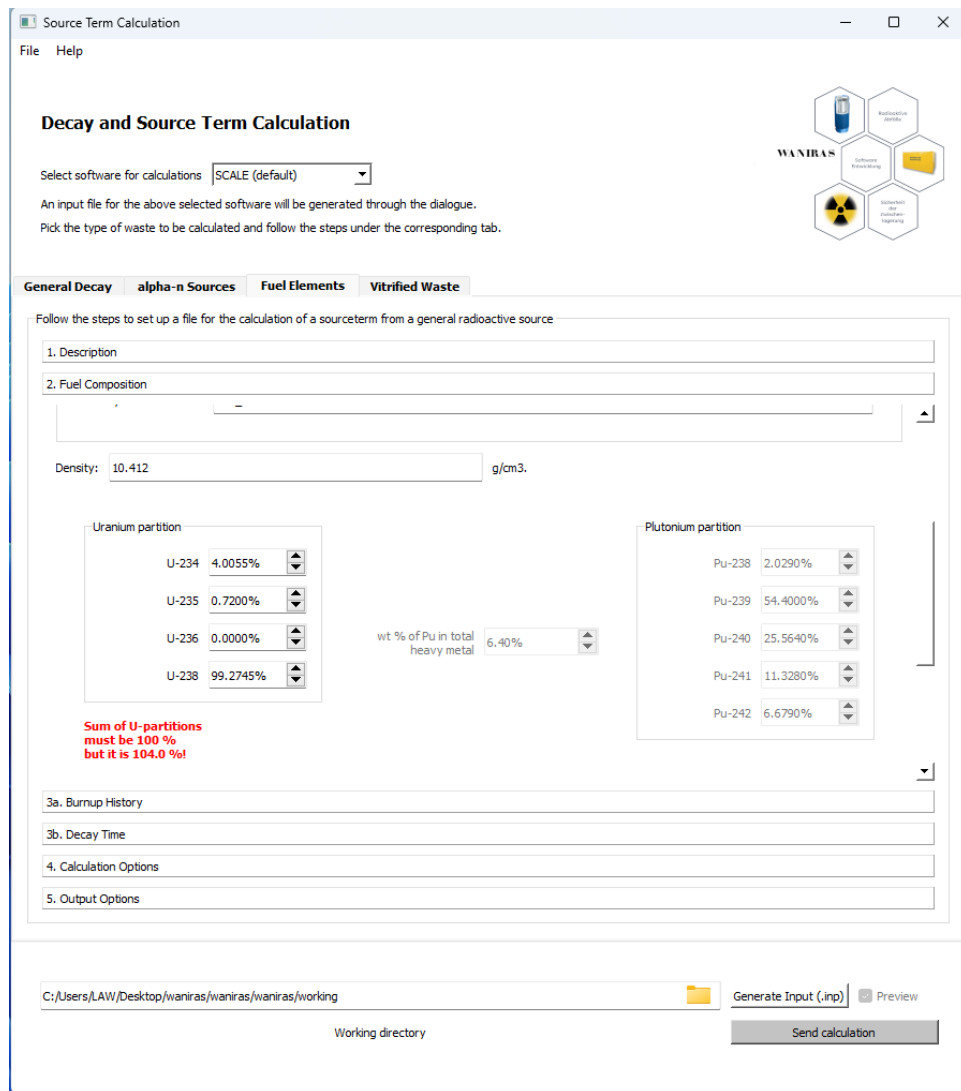


**Abb. 2.8** Quelltermerstellung für „General Decay“

In den nachfolgenden Reitern „Decay Time“, „Calculation Options“ und „Output Options“ können weitere Einstellungen vorgenommen werden. Dazu zählen bspw. die Zerfallszeit, Rechenparameter oder Ausgabeformatierungen. Schließlich wird das Input-File für die SCALE-Berechnung automatisch generiert und im gewählten Verzeichnis gespeichert, sobald der Button „Generate Input“ geklickt wird.

Des Weiteren besteht die Möglichkeit, die Quelltermerstellung für „alpha-n Sources“, „Fuel-Elements“ und „Vitrified Waste“ durchzuführen. Die steigende Komplexität der Problemstellungen ist durch weitere Einstellungsmöglichkeiten für die Quelltermerstellung behandelt. In Abb. 2.9 ist die Erstellung der Nuklidzusammensetzung für die

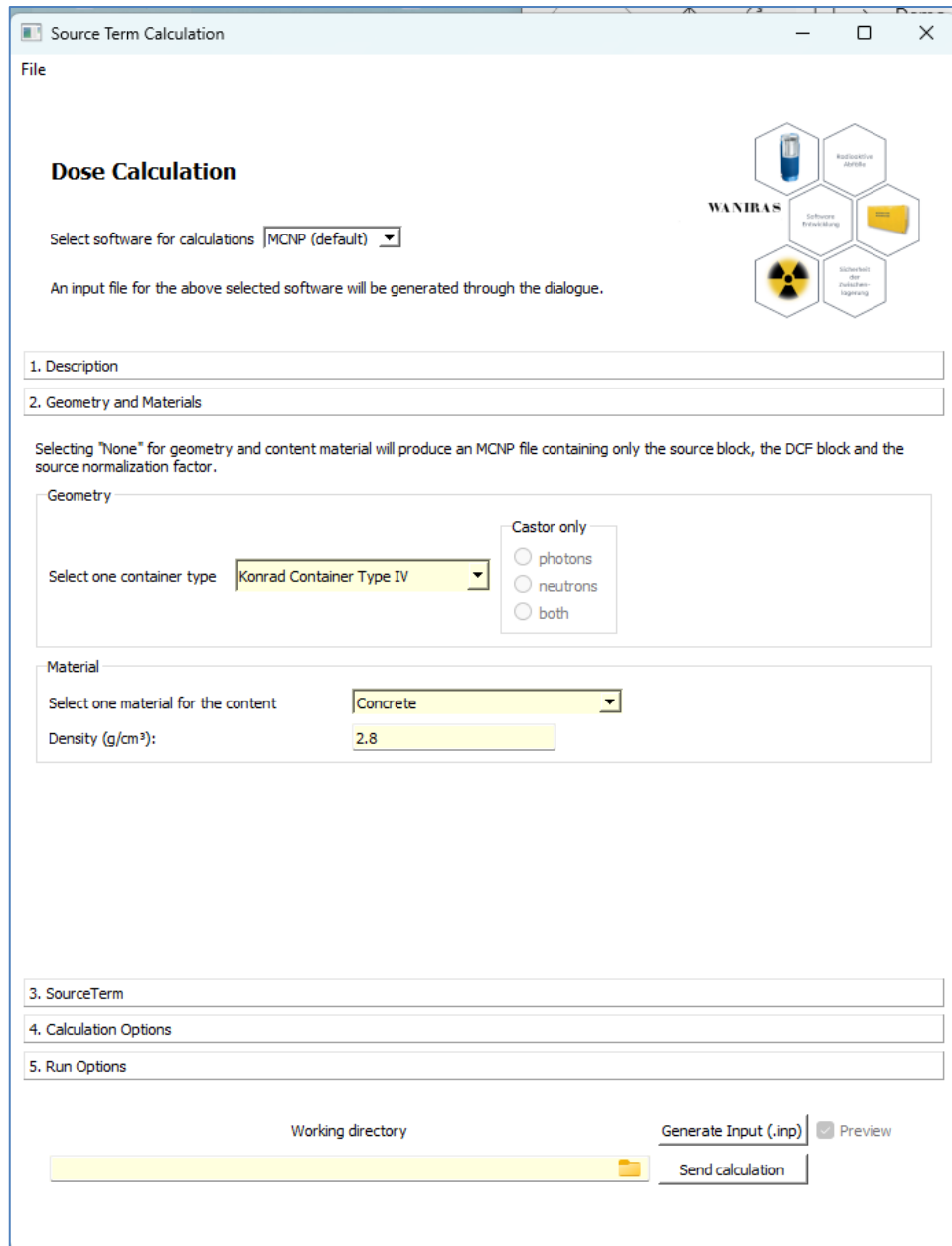
Quelltermberechnung eines Brennelementes dargestellt, wobei nach Wahl des Reaktortyps die Uran-Partitionen für das zu berechnende Brennelement angepasst werden. Dabei wird von der Benutzeroberfläche selbstständig geprüft, ob die gewählten Partitionen vollständig definiert wurden. Sollte dies nicht der Fall sein, erscheint eine Warnmeldung. Nicht benötigte Einstellungsmöglichkeiten werden ausgegraut (siehe Abb. 2.9).



**Abb. 2.9** Erstellung der Uran-Partitionen für ein  $\text{UO}_2$ -Brennelement

Die Berechnung der Dosis erfolgt in mehreren Schritten:

Nach der Eingabe eines Namens kann im Reiter „Geometry and Materials“ eine vordefinierte Geometrie ausgewählt werden, z. B. der Konrad Container Typ IV (siehe Abb. 2.10). Anschließend werden das Material der Quelle, etwa Beton, sowie dessen Dichte festgelegt.



**Abb. 2.10** Auswahl der Geometrie und Materialeigenschaften für die Dosisberechnung

Im nächsten Schritt lässt sich ein Quellterm definieren oder es kann auf vorhandene Standardwerte zurückgegriffen werden. Die Berechnungsoptionen können im letzten Schritt gewählt werden.

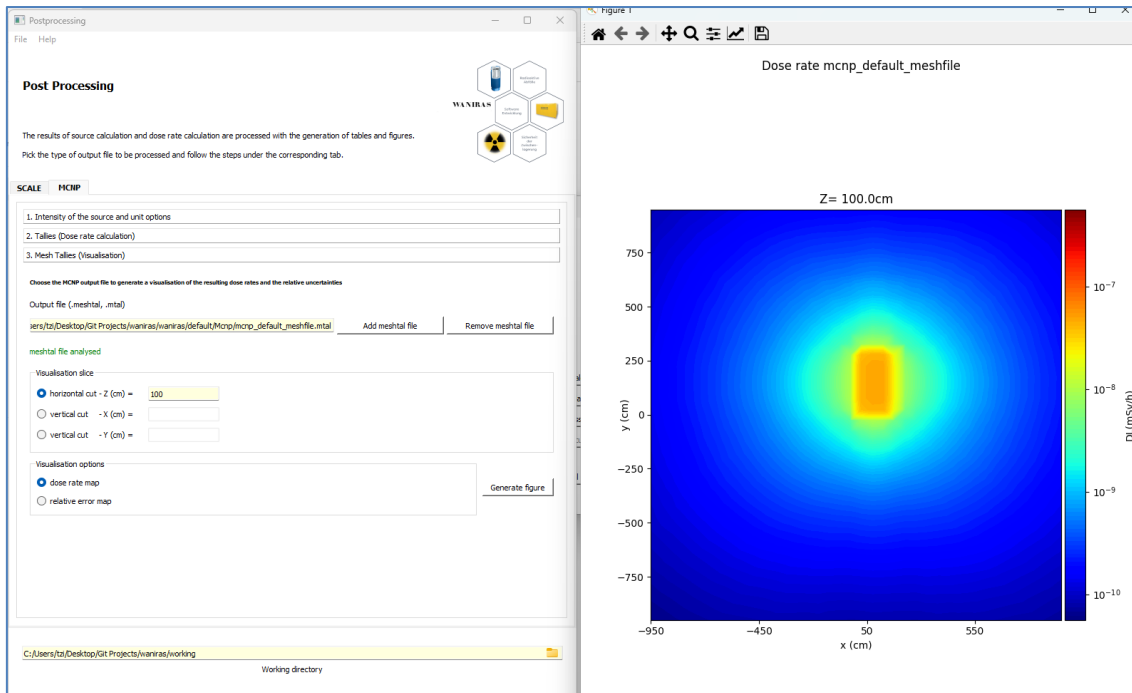
Die Ergebnisse der Berechnung können anschließend im Postprocessing visualisiert werden. Dies erlaubt eine schnelle Überprüfung, und die Darstellungen können für weitere Analysen verwendet werden. Die wichtigsten Ausgabedateien, die bei einer MCNP®-Berechnung erzeugt werden, sind die .out-Datei, die alle Informationen über den

durchgeführten Lauf und die Tally-Ergebnisse enthält, und die .meshtal-Datei, die die Ergebnisse einer Mesh-Tally-Berechnung enthält. Alle Tally-Ergebnisse in MCNP® sind standardmäßig auf ein Quellpartikel normiert und bereits mit den gewählten Dosis-Konversionsfaktoren multipliziert und daher in Einheiten von pSv geliefert. Um eine Dosisleistung auszudrücken, müssen die Tally-Ergebnisse mit der Intensität der Quelle (in Teilchen/s) und mit einem Zeitfaktor multipliziert werden, der in WANIRAS gewählt werden kann, um die Dosisleistung in  $\mu\text{Sv/h}$ ,  $\text{mSv/h}$  oder  $\text{Sv/h}$  zu erhalten.

Aus der gewählten .out-Datei kann WANIRAS Informationen über die Anzahl der Historien (simulierte Partikel), die Tally-Ergebnisse aus den Tally-Fluktuationsdiagrammen und die statistischen Prüfungen extrahieren. Die Tally-Ergebnisse für die endgültige Anzahl von Historien werden dann mit der Intensität und dem Zeitfaktor multipliziert, die der gewählten Dosisleistungseinheit entsprechen, und dem Benutzer in Form einer .xls-Datei zurückgegeben, die für jede Tally die berechnete Dosisleistung zusammen mit dem entsprechenden absoluten Fehler und anderen Tally-Informationen (relativer Fehler, Varianz der Varianz, Steigung, Gütezahl) enthält. Eine zweite Registerkarte in der Excel-Datei zeigt den Abschnitt der Ausgabedatei, der Informationen über statistische Prüfungen enthält.

Die Verarbeitung einer .meshtal-Datei liefert eine Darstellung (oder „Heat map“) der berechneten Dosisleistung und des relativen Fehlers auf einer bestimmten Ebene senkrecht zur X-, Y- oder Z-Achse. Der Benutzer wird daher aufgefordert, die .meshtal-Datei, die ausgewählte Darstellung (Dosisleistung oder relativer Fehler), die Achse für die Visualisierungsebene und die Position der Ebene auf dieser Achse einzugeben.

Durch Betätigen der Schaltfläche „Generate figure“ erscheint ein neues Fenster mit der gewünschten Visualisierung (siehe Abb. 2.11), die dann unter einem eigenen Dateinamen gespeichert werden kann.



**Abb. 2.11** Darstellung der grafischen Auswertung der Dosisberechnung

Auch für die Erstellung des Quellterms gibt es ein eigenes Postprocessing-Tool, das bereits entwickelt wurde. Mit Hilfe des Python-Pakets Plotly werden dabei mehrere anschauliche Diagramme erstellt. Die Integration dieser Funktion in die Benutzeroberfläche steht noch aus.

Der Benutzer hat die Möglichkeit, über den Reiter „File“ die Option „Load Defaults“ auszuwählen. Nach Ausführung dieser Funktionen werden alle für die Erstellung des Input-nötigen Felder mit Beispielwerten ausgefüllt. Für sämtliche Tabs sind Werte hinterlegt, so dass eigene Anpassungen nicht mehr erforderlich sind. Das so erzeugte Input-File kann anschließend an SCALE oder MCNP® übergeben werden.

Im Falle von Unklarheiten bezüglich der Benutzung von WANIRAS besteht die Möglichkeit im Reiter „Help“ die Option „Manual“ zu nutzen. In diesem Fall wird eine Bedienungsanleitung geöffnet, die zu jedem Tab Informationen zu Einstellungsmöglichkeiten bietet und als Anleitung zur Verwendung dienen kann.

## 2.4 Architektur

Der Benutzer bedient WANIRAS über die im vorherigen Abschnitt erwähnte GUI. Darüber kann das vollständige Spektrum der Einstellungsmöglichkeiten abgerufen werden.

Zur Programmierung wurde Python gewählt. Hier wurde darauf geachtet, wie bereits bei den zu integrierenden Rechenodes, validierte und breit genutzte Python-Pakete zu verwenden.

Bei der Entwicklung des Programmcodes wurden die allgemeinen Prinzipien guter Software-Architektur befolgt:

- Einfache und lesbare Klassen und Funktionen
- Vermeidung von Redundanz
- Klare Trennung von Verantwortlichkeiten zwischen den Programmteilen
- Lose Koppelung der Module
- Hohe Kohäsion innerhalb der Module

Soweit möglich, wurden die Prinzipien umgesetzt, um während der Entwicklung die Qualität und Wartbarkeit des Codes sicherzustellen. Insbesondere wurde darauf geachtet, die Eingabedaten der GUI von der Datenverarbeitung zu trennen, um Fehler zu minimieren, sowie Austauschbarkeit und Erweiterung des Codes zu gewährleisten.

Der erstellte Programmcodes ist modular aufgebaut und folgt dem Prinzip der objektorientierten Programmierung (OOP). Dies ermöglicht eine einfache Wartung der einzelnen Komponenten. Die modulare Struktur fördert nicht nur die Wartung und kontinuierliche Weiterentwicklung, sondern auch die Qualitätssicherung der Programmteile.

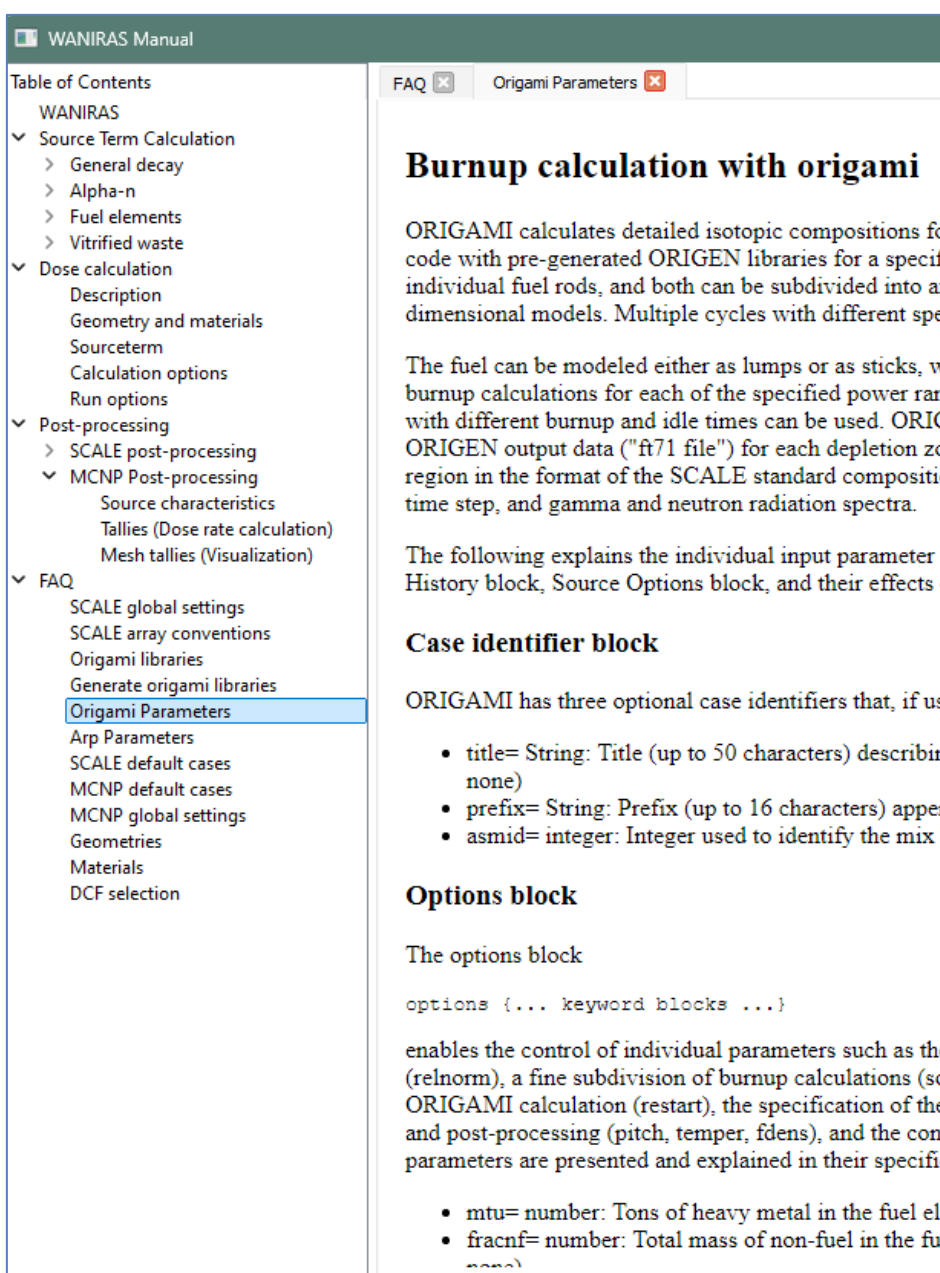
## **2.5 Dokumentation**

### **2.5.1 Handbuch**

Dem Benutzer wird ein Handbuch zur Verfügung gestellt, das über das Startfenster der grafischen Benutzeroberfläche (GUI) aufgerufen werden kann. Es bietet einen Überblick über die verfügbaren Funktionen und stellt in weiteren Unterfenstern, die der Oberfläche der GUI ähneln, zusätzliche Informationen in Textform oder anhand von Screenshots zur Verfügung. Darüber hinaus beschreibt das Handbuch die notwendigen Schritte zur Bedienung der GUI und kann somit als Tutorial genutzt werden. Es hilft dem Benutzer, die Anwendungsmöglichkeiten der GUI zu verstehen und diese für seine eigenen Anfor-

derungen anzupassen und zu nutzen. Für detaillierte Informationen über die Funktionen von SCALE und MCNP® wird auf die entsprechenden Handbücher verwiesen.

Ein Frequently Asked Questions (FAQ) Abschnitt ist als Nachschlagwerk für in den Arbeiten der GRS oft vorkommende Fragen konzipiert. Für die anfängliche Konzeption der Einträge wurde Feedback aus dem Nutzer-Testing zu Rate gezogen. Dieser Abschnitt kann unkompliziert und ohne Programmierkenntnisse erweitert werden, wenn weiterführende Entwicklungen neue Erklärungen benötigen. In Abb. 2.12 ist exemplarisch eine Seite aus dem FAQ-Abschnitt abgebildet. Außerdem ersichtlich sind auch die allgemeineren Inhalte und deren Strukturierung.



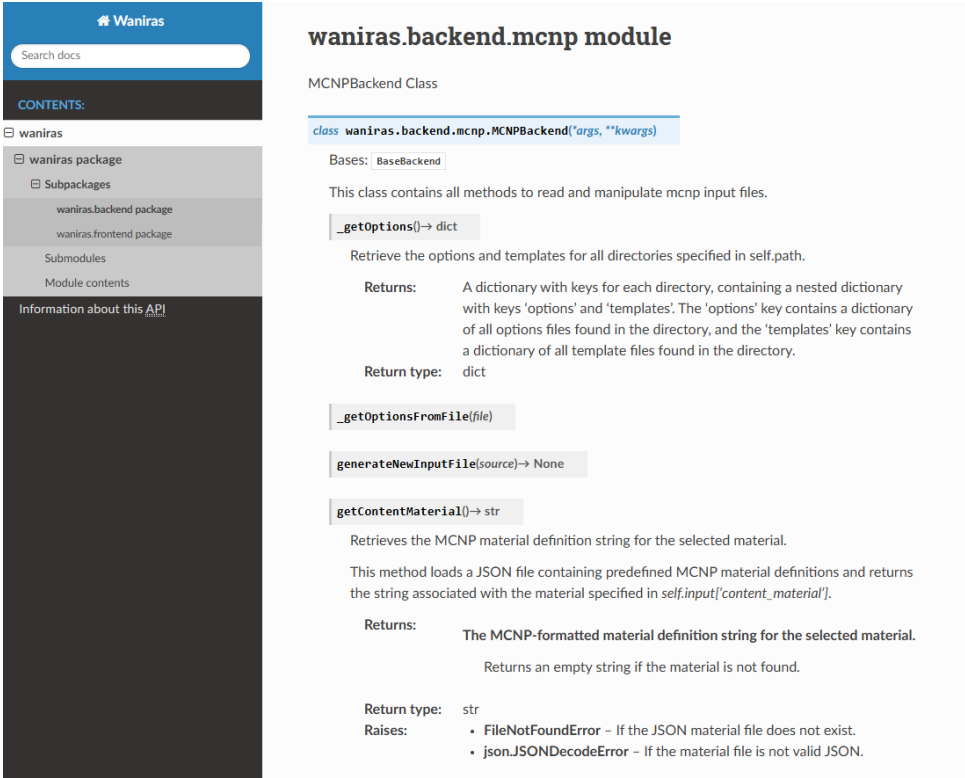
**Abb. 2.12** Beispiel eines Eintrages aus dem FAQ-Abschnitt im Handbuch



Das Manual im html-Format ist in WANIRAS integriert und kann zur Unterstützung bei einzelnen Prozessschritten jederzeit parallel geöffnet werden. Alternativ können einzelne Seiten im Browser geöffnet oder das Manual kann in der pdf-Version gelesen werden.

## 2.5.2 Code Dokumentation

Die Dokumentation von WANIRAS wird mit Sphinx, einem auf Python basierenden Programm zum Generieren von Dokumentationen, generiert und gepflegt. Sphinx erlaubt eine große Flexibilität, da es mit Textdateien arbeitet. Außerdem kann es DocStrings verwenden, die in einen Quellcode eingebunden sind. Die Textdateien haben die Endung .rst, während der Quellcode eine .py-Datei ist. Sphinx verwendet beides, um eine Dokumentation als HTML zu generieren. Es sind auch andere Dateiformate wie LaTeX und andere möglich /SPH 25/. Eine vereinfachte Auszeichnungssprache, auch reStructuredText (RST), muss verwendet werden, um das Layout der Dokumentation zu steuern. Das bedeutet, dass RST sowohl in den .rst-Dateien als auch in den DocStrings in den .py-Dateien verwendet werden muss /SPH 25/. Sphinx empfiehlt ausdrücklich die Verwendung von virtuellen Python-Umgebungen und ist für die Anwendung von WANIRAS direkt in der virtuellen Umgebung des Projekts installiert, um die Dokumentation zu generieren.



The screenshot shows a web interface for the WANIRAS documentation. On the left is a navigation sidebar with a search bar and a tree view of the project structure, including 'waniras package', 'Subpackages', and 'Submodules'. The main content area displays the documentation for the 'waniras.backend.mcnp module'. It identifies the 'MCNPBackend Class' and shows the class definition: `class waniras.backend.mcnp.MCNPBackend(*args, **kwargs)`. It notes that the class inherits from 'BaseBackend'. A description states: 'This class contains all methods to read and manipulate mcnp input files.' Several methods are listed with their signatures and descriptions: `_getOptions() -> dict` (retrieves options and templates), `_getOptionsFromFile(file)`, `generateNewInputFile(source) -> None`, and `getContentMaterial() -> str` (retrieves the MCNP material definition string). The `getContentMaterial()` method's return type is 'str', and it raises `FileNotFoundError` and `json.JSONDecodeError`.

Abb. 2.13 Beispiel eines Eintrages zum Backend in der Code Dokumentation

### **3 WANIRAS-Parameter für HAW und LAW/MAW**

Im Allgemeinen hat die Berechnung der Dosis von HAW andere Anforderungen und Problematiken als die Berechnung von Inventar und Dosis von LAW/MAW. Beispielsweise ist für die Berechnung von HAW-Abfällen, im Vergleich zu LAW-Abfällen, oft eine Berechnung des Abbrandes nötig, bevor das Inventar nach einer bestimmten Lagerzeit berechnet werden kann. Einige der Betrachtungen und Methoden sind allerdings für die gesamte Rechenkette relevant.

Die Umsetzung der Berechnungen für HAW und LAW/MAW-Abfälle finden sich in Kap. 4 und Kap. 5 respektive. Übergreifende Themen, wie die Energiegruppenauswahl (siehe Kap. 3.1) und Flux-to-Dose-Konversionsfaktoren (siehe Kap. 3.2) zur Dosisberechnung werden hier behandelt. Dabei wird auf gängige Praxis und für WANIRAS abgeleitete Empfehlungen eingegangen. WANIRAS-Module, die bei der Berechnung von allen Abfallarten zur Verwendung kommen, wie die Schnittstelle zwischen SCALE und MCNP® (Quelltermbestimmung in Kap. 3.3), sowie die hinterlegten und zur Verfügung stehenden MCNP®-Tallies (siehe Kap. 3.4), sind hier ebenfalls zusammengefasst. Schließlich wird außerdem das Thema der Aktivierung von Materialien behandelt (siehe Kap. 3.5).

#### **3.1 Energiegruppen-Auswahl**

In WANIRAS besteht die Möglichkeit, die Energiegruppen linear oder logarithmisch über einen frei wählbaren Energiebereich festzulegen. Hierbei gilt, je feiner die Struktur gewählt wird, umso geringer wird die Abweichung vom wahren Verlauf. Für die Rechnung heißt das allerdings, dass der Aufwand entsprechend steigt, da für jede Energiegruppe eine konvergierende Lösung errechnet werden muss. Dies führt zu einem stark erhöhten Ressourcenaufwand und zu längeren Rechenzeiten. Wie der Quellterm aufgebaut sein sollte und welche Energiestaffelungen ausgewählt werden können, wird nachfolgend aus den bisher gesammelten Erfahrungen beschrieben. Ebenso wird auf die bisherige und die neue Vorgehensweise der Quelltermbestimmung eingegangen.

Das in WANIRAS verwendete neue Verfahren, den Quellterm mit ORIGEN zu bestimmen, liefert die energetische Verteilung der Strahlungsintensitäten direkt. Mit diesem Quellterm können deterministische und probabilistische Programme den Strahlungstransport durch Materie berechnen. Die Ergebnisse können bspw. direkt für weiterführende Abschirmungsrechnungen mit MCNP® verwendet werden.

### 3.1.1 Einfluss der Anzahl der Energiegruppen auf Quelltermbestimmung und Dosisleistung

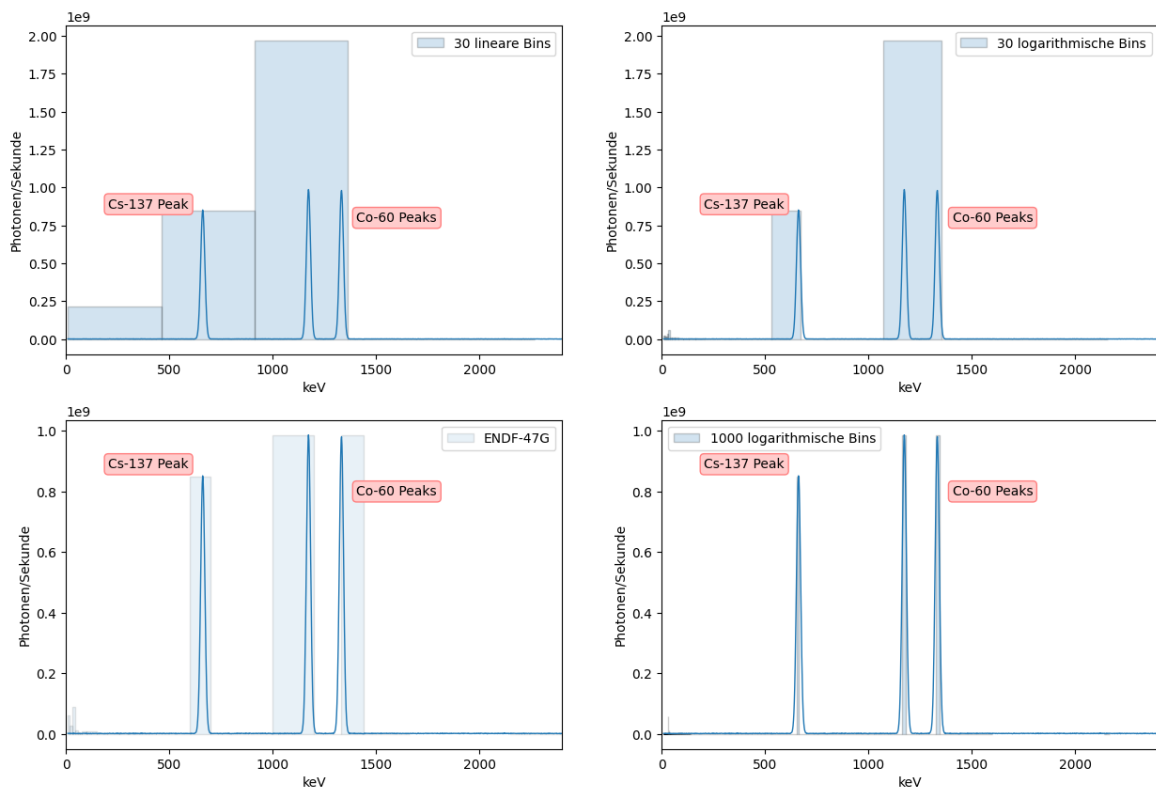
Im Folgenden sollen die Auswirkungen einer variierenden Anzahl an Energiegruppen in der Erstellung des Quellterms auf die Ergebnisse der Dosisleistung beschrieben werden. Für die Auswertung wurden mit einem vereinfachten Modell eines MOSAIK®-Behälters MCNP®-Simulationen (vgl. Kap. 5.1.1.2) durchgeführt. Als Inhalt wurden die Radionuklide Co-60 mit einer Aktivität von  $1,9E+11$  Bq und Cs-137 mit einer Aktivität von  $1,9E+11$  Bq angenommen. Außerdem wurde eine homogene Quellstärke über den gesamten Inhalt des MOSAIK®-Behälters vorausgesetzt.

#### 3.1.1.1 Quellterm

Für die Erstellung des Quellterms wurde zum einen die Anzahl der Energiegruppen als auch eine lineare bzw. logarithmische Einteilung der Energiegruppen untersucht. Die Grenzen der Energiegruppen wurden auf einen Bereich von 0,01 MeV bis 14 MeV festgelegt. Für eine exemplarische Beispielrechnung wurde von einer Aktivität von  $1E+09$  Bq sowohl für Co-60 als auch für Cs-137 ausgegangen.

Zum besseren Verständnis ist das durch die Software SCALE/ORIGEN bestimmte Quelltermspektrum in Abb. 3.2 für eine Auswahl von vier verschiedenen Energiegruppen (30 lineare Bins, 30 logarithmische Bins, 47 Bins entsprechend der V7.1-200N47G Bibliothek (vgl. Kap. 1.1.2) und 1.000 logarithmische Bins) dargestellt. Zusätzlich dazu sind die für Co-60 und Cs-137 typischen Spektrallinien dargestellt. Aus Abb. 3.1 ist ersichtlich, dass 30 Energiegruppen, egal ob linear oder logarithmisch, ungeeignet sind, die charakteristischen Doppelpeaks von Co-60 aufzulösen. Gerade die Einteilung in 30 lineare Bins, welche jeweils einen Abstand von 466 keV aufweisen, teilen das Gammalinienpektrum im Bereich der ersten 1.398 keV in nur drei Energiegruppen auf. Dadurch ergibt sich eine, im Vergleich zu einer feineren Energiegruppeneinteilung, größere Photonenzahl pro Sekunde.

Dementsprechend werden die Wirkungsquerschnitte für einen relativ großen Energiebereich verschmiert, wodurch es zu Abweichungen in den Dosisleistungsberechnungen kommt. Bei einer Einteilung der Energiegruppen entsprechend der V7.1-200N47G Bibliothek und für 1.000 logarithmischen Bins können die charakteristischen Gammapeaks von Co-60 und Cs-137 hingegen gut aufgelöst werden.



**Abb. 3.1** Durch SCALE/ORIGEN errechnete Quelltermspektren für vier verschiedene Energiegruppen (30 lineare Bins, 30 logarithmische Bins, ENDF-47G, 1.000 logarithmische Bins)

Darüber hinaus sind die charakteristischen Gamma-Photonen Peaks von Cs-137 und 60-Co gekennzeichnet.

Weiterhin konnte festgestellt werden, dass die Abweichungen in der Berechnung der Dosisleistung auch von der Aktivität der einzelnen Radionuklide abhängen. Steigt die Co-60-Aktivität bspw. im Vergleich zur Cs-137-Aktivität, hat es signifikantere Auswirkungen in den Abweichungen zu fein aufgelösten Energiegruppen, wenn die charakteristischen Doppelpeaks von Co-60 nicht fein genug aufgelöst werden.

### 3.1.1.2 Berechnung der Dosisleistung mit MCNP®

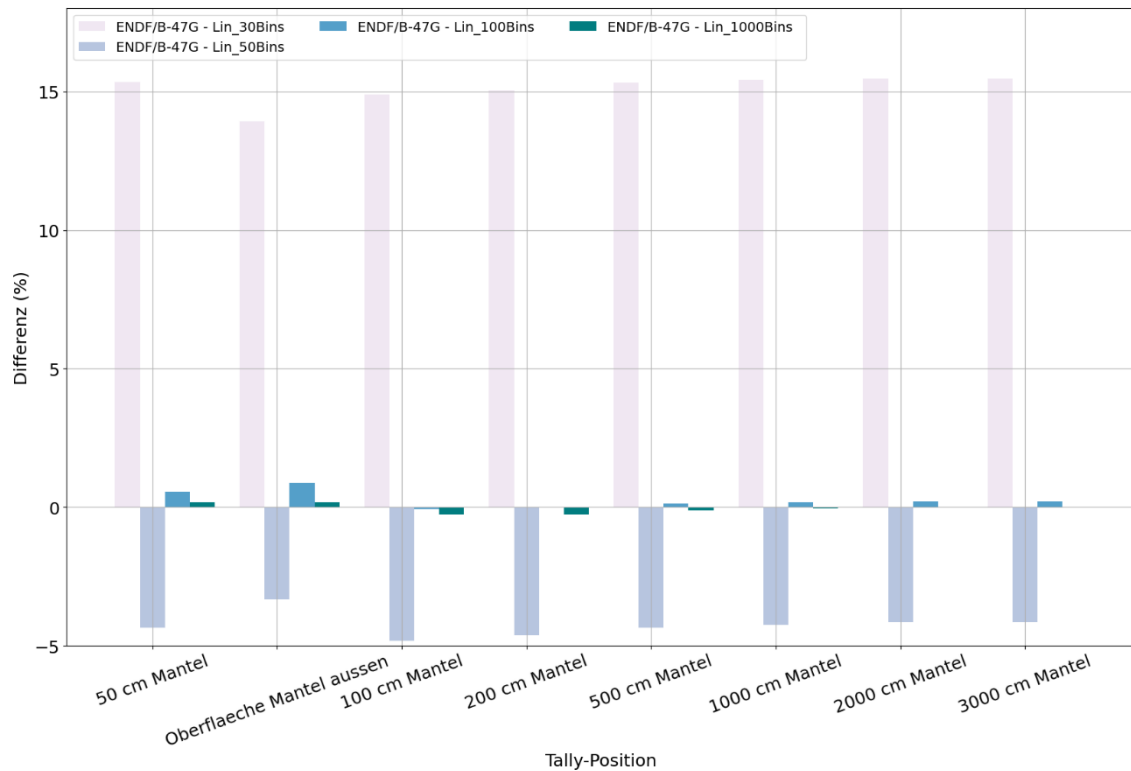
Für die Beurteilung der Einteilung der Energiegruppen wurde die Dosisleistung an verschiedenen Punkten, von der Oberfläche bis zu einer Entfernung von 3 m, simuliert. Sog. Point-Tallies wurden dafür auf mittlerer Höhe und Breite des Behälters in verschiedenen Entfernungen zum Mantel bzw. Deckel positioniert. Außerdem wurde die Dosisleistung mit zwei sog. Surface-Tallies an der Behältermantelfläche innen und außen ermittelt. Da die Ergebnisse aus den Dosisleistungsrechnungen in radialer und axialer Richtung ähnliche Schlussfolgerungen zulassen, werden im Folgenden die Tallies in radialer Richtung

ausgewertet. Außerdem wurde die Dosisleistung nur anhand von Tallies verglichen, welche die statistischen Konvergenztests erfüllen. Die MCNP<sup>®</sup>-Rechnungen wurden mit einer Teilchenanzahl von 1E+07 ausgeführt.

Grundsätzlich konnte festgestellt werden, dass die Anzahl der Energiegruppen als auch die Einteilung in lineare bzw. logarithmische Energiegruppen einen signifikanten Effekt auf die Berechnung der Dosisleistung haben kann. Die Dosisleistung der radioaktiven Quelle in einem VBA-Behälter wurde sowohl an der Oberfläche mit einem Surface-Tally als auch in Entfernungen in einem Bereich von 50 bis 3.000 cm modelliert. Verschiedene Gruppierungen wurden hier gewählt, um die Dosisleistung zu berechnen. Die Dosisleistung wurde zum einen anhand der V7.1-200N47G Bibliothek mit 47 Gamma-Energiegruppen bestimmt. Die 47 Gamma-Bins sind zur Definition des Quellterms, welche in der alten Rechenkette verwendet wird, ähnlich. In der alten Rechenkette wird der Energiebereich von 10 keV bis 14 MeV in 35 Energiegruppen unterteilt.

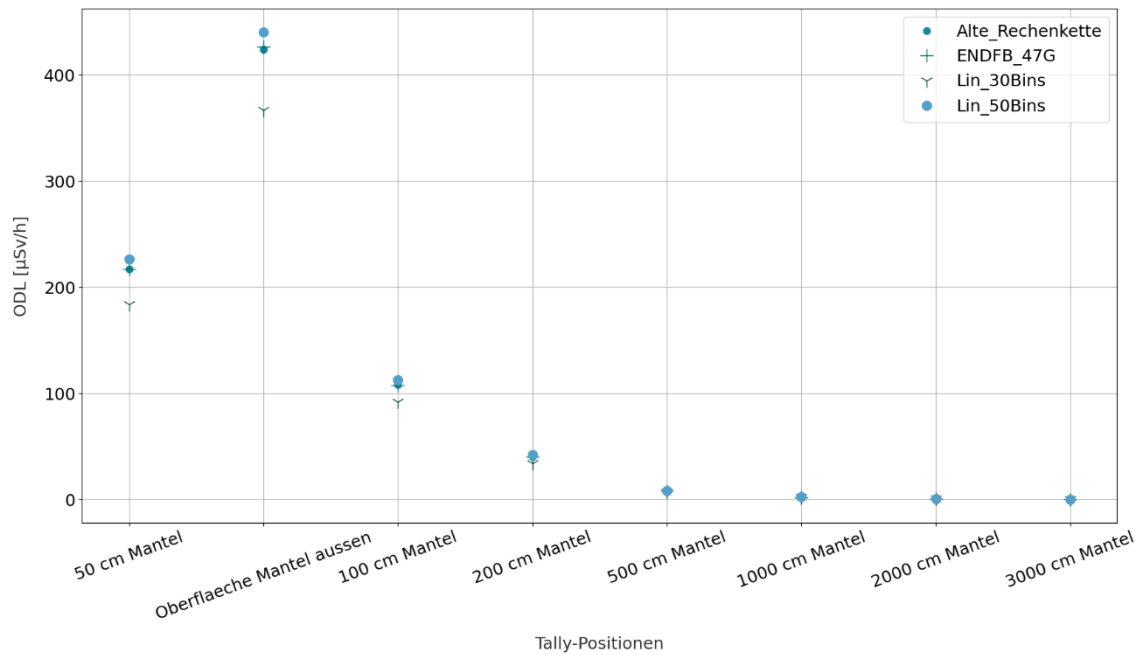
Zu Beginn wurde eine Konvergenzanalyse mit einer unterschiedlichen Anzahl von Energiegruppen in linearer Einteilung vorgenommen (vgl. Abb. 3.2). Es konnte festgestellt werden, dass die Differenz in der Dosisleistung mit einer zunehmenden Anzahl von Energiegruppen im Vergleich zur Einteilung in 47 Gamma-Bins (V7.1-200N47G), welche SCALE für Abschirmrechnungen empfiehlt, abnimmt. Die geringen Abweichungen im Vergleich zur sehr feinen Einteilung in 1.000 Energiegruppen zeigen, dass der Quellterm durch 47 Gamma-Gruppen hinreichend genau beschrieben wird.

Da für die Modellierung keine experimentellen Befunde zur Validierung vorliegen, soll im Folgenden die ENDF/B-Lösung als Referenzlösung angenommen werden. Bei 30 bzw. 50 Energiegruppen können Abweichungen von 15 % (30 lineare Bins) und -5 % (50 lineare Bins) festgestellt werden. Für eine höhere Anzahl an Energiegruppen sinken die Abweichungen auf < 1 %.



**Abb. 3.2** Prozentuale Ergebnisdifferenz der Ortsdosisleistung im Vergleich zur ENDF/B-VII.1 Referenzbibliothek mit 47 Energiegruppen

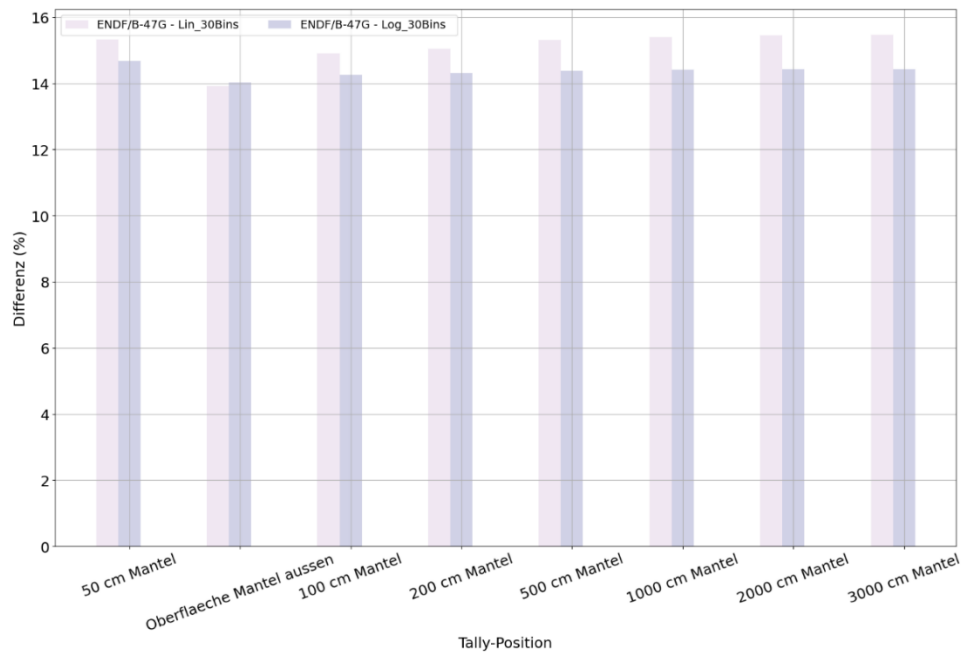
In Abb. 3.3 ist die berechnete Dosisleistung einmal auf Grundlage der alten Rechenkette, der Feingruppen V7.1-200N47G Bibliothek und für 30 lineare und 50 lineare Energiegruppen dargestellt. Die Ergebnisse der alten Rechenkette und der V7.1-200N47G Bibliothek stimmen sehr gut überein. Weiterhin ist auffallend, dass die Ergebnisse in der Berechnung der Dosisleistung nicht automatisch konservativer ausfallen je mehr Energiegruppen verwendet werden.



**Abb. 3.3** Dosisleistung an unterschiedlichen Tally-Positionen bei unterschiedlichen Energiegruppeneinteilungen des Quellterms

### 3.1.1.3 Unterschied logarithmisches und lineares Binning

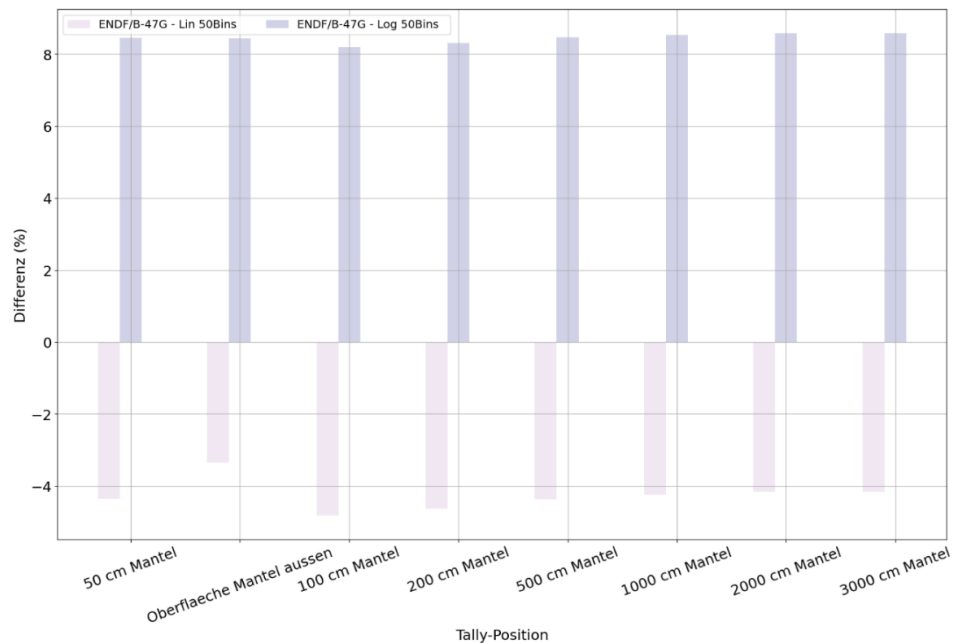
Auch die lineare bzw. logarithmische Einteilung der Energiegruppen kann Auswirkungen auf die Dosisleistung haben (vgl. Abb. 3.4). Abweichungen von ungefähr 14 bis 15 % konnten bei 30 linearen bzw. logarithmischen Bins festgestellt werden.



**Abb. 3.4** Abweichung zur Referenzlösung in % der Dosisleistung für unterschiedliche Energiegruppen (30 lineare und 30 logarithmische Energiegruppen) und Abstände

Erhöht man die Energiegruppenanzahl auf 50 (vgl. Abb. 3.5) fallen die Unterschiede geringer aus. Hier weist die Dosisleistung bei 50 linearen Bins eine kleinere Abweichung zur Referenzlösung auf als für den Fall mit 50 logarithmischen Bins.





**Abb. 3.5** Abweichung zur Referenzlösung in % der Dosisleistung für unterschiedliche Energiegruppen (50 lineare und 50 logarithmische Energiegruppen) und Abstände

### 3.1.2 Empfehlungen

Grundlegend kann festgestellt werden, dass die Energiegruppen, welche die alte Rechenkette verwendet, den Photonen-Quellterm für Abschirmprobleme hinreichend genau definieren. Außerdem konvergiert die Lösung für die Dosisleistung, je feiner die Energiegruppen aufgeteilt werden. Das heißt, je besser die Abtastung des Quellterms, umso genauer kann die Dosisleistung am Behälter berechnet werden. Ein Zusammenhang zwischen einer feineren Einteilung der Energiegruppen und einem Anstieg in den statistisch unzuverlässigen Ergebnissen, welche MCNP® als „statistical failed tallies“ ausgibt, konnte für dieses Problem nicht festgestellt werden. Dies kann jedoch bei einer stärkeren Abschirmung mit weniger Teilchen, welche die Tallies erreichen, durchaus anders sein.

Das in WANIRAS verwendete Verfahren, den Quellterm zerfallskorrigiert mit ORIGEN zu berechnen, liefert die energetische Verteilung der Strahlungsintensitäten direkt und kann für weiterführende Abschirmungsrechnungen als Quelle verwendet werden. Die Energiegruppen sind frei wählbar, sollten aber keinesfalls ohne Kenntnis des Problems festgelegt werden. In welchem Energiebereich die Neutronen bzw. Gammapeaks liegen, kann im Vorfeld ohne User Know-how nicht abgeschätzt werden. Energiestrukturen werden oft anhand von Bibliotheksenergiestrukturen gewählt, die typischerweise für

Abschirmungsrechnungen Einsatz finden. Die Kondensierung der Quelldaten in individuell festgelegte Energiegruppen zu unterteilen, kann Auswirkungen auf das Ergebnis einer Abschirmungsrechnung haben, wenn die verwendete Bibliothek im quellintensiven Energiebereich zu grob definiert ist oder gar Energiebereiche auslässt. Es ist demzufolge empfehlenswert, die voreingestellten Energiegruppen für die Gamma- und Neutronenspektren zu verwenden. Für den Fall, dass mit individuell gewählten Energiegruppen modelliert werden soll, empfiehlt es sich für eine hinreichende Genauigkeit mit mindestens 100 Energiegruppen (linear oder logarithmisch) zu rechnen.

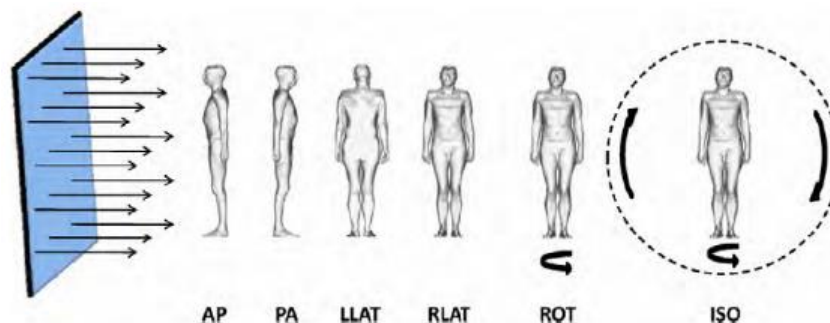
### **3.2 Dosisberechnungen und Flux-to-Dose Konversionsfaktoren**

Bei der Berechnung der Dosis durch externe oder interne Strahlenexposition werden je nach Situation zwei verschiedene Konzepte angewendet /INT 07b/: die personenbezogene Dosisabschätzung, aus der sich personenbezogene Beschränkungen als Dosisgrenzwerte ableiten, und die quellenbezogene Methode. Die quellenbezogene Begrenzung der Dosis wird durch den Dosisrichtwert und den Referenzwert dargestellt, welche im Prozess der Optimierung des Schutzes zur Anwendung kommen. Da bei gewöhnlichen Expositionssituationen nicht mehr als eine bzw. eine Gruppe von Quellen vorherrscht, wird der quellenbezogene Optimierungsgrundsatz vom ICRP als effektivstes Mittel für den Schutz empfohlen.

#### **3.2.1 Aktuelle Empfehlungen des ICRP**

In diesem Rahmen ist die Abschätzung der effektiven Dosis(-leistung) für die in WANIRAS durchgeführten Berechnungen von Abfallgebinden zu verstehen. Wie in ICRP 103 /INT 07b/ spezifiziert, ist die effektive Dosis (in Sievert, Sv) zur Anwendung als Schutzgröße (im Gegensatz zu operationellen Größen) gedacht, auch Körperdosisgröße genannt. Ihre Anwendung liegt bei der prospektiven Dosisabschätzung für die Planung und Optimierung im Strahlenschutz und zum Nachweis der Einhaltung der Dosisgrenzwerte für regulatorische Zwecke. Die effektive Dosis wird berechnet, indem das Produkt aus der geschlechtsgemittelten Organdosis und dem Gewebegewichtungsfaktor aller in der Definition berücksichtigten Organe und Gewebe des menschlichen Körpers summiert wird. Die Gewebegewichtungsfaktoren sollen als gerundete Werte für eine Bevölkerung beiderlei Geschlechts und jeden Alters gelten. Daher werden Umrechnungskoeffizienten für die effektive Dosis für die Referenzperson und nicht für eine bestimmte Person berechnet. Aktuell werden in WANIRAS nur Dosiskonversionsfaktoren (DCF<sub>s</sub>) zu Körperdosisgrößen implementiert.

ICRP 116 /INT 10/ enthält Konversionskoeffizienten für Fluenz in Dosis für die effektive Dosis und die von Organen absorbierte Dosis für verschiedene Arten externer Expositionen, in Übereinstimmung mit den Empfehlungen des ICRP aus dem Jahr 2007. Diese Koeffizienten wurden unter Verwendung der offiziellen ICRP/ICRU-Rechenphantome berechnet, die den männlichen und weiblichen Referenz-Erwachsenen darstellen, in Verbindung mit Monte-Carlo-Codes, die den Strahlungstransport im menschlichen Körper simulieren. Die berücksichtigten idealisierten Ganzkörperbestrahlungsgeometrien sind unidirektionale breite parallele Strahlen entlang der anterior-posterioren, posterior-anterioren, linken lateralen und rechten lateralen Achsen, 360°-Rotationsrichtungen um die Längsachse der Phantome und eine vollständig isotrope Bestrahlung der Phantome (siehe Abb. 3.6). Dies ist im Vergleich zu früheren ICRP-Publikationen eine signifikante Erweiterung der Bestrahlungsgeometrien. Der Energiebereich der, für Abschirmungsrechnungen von Abfallbinden relevanten Strahlungsarten, sind monoenergetische Photonen im Bereich von 10 keV–10 GeV, und Neutronen im Bereich von 0,001 eV bis 10 GeV. Hiermit wird auch der Energiebereich der vorherigen Publikationen signifikant erweitert.



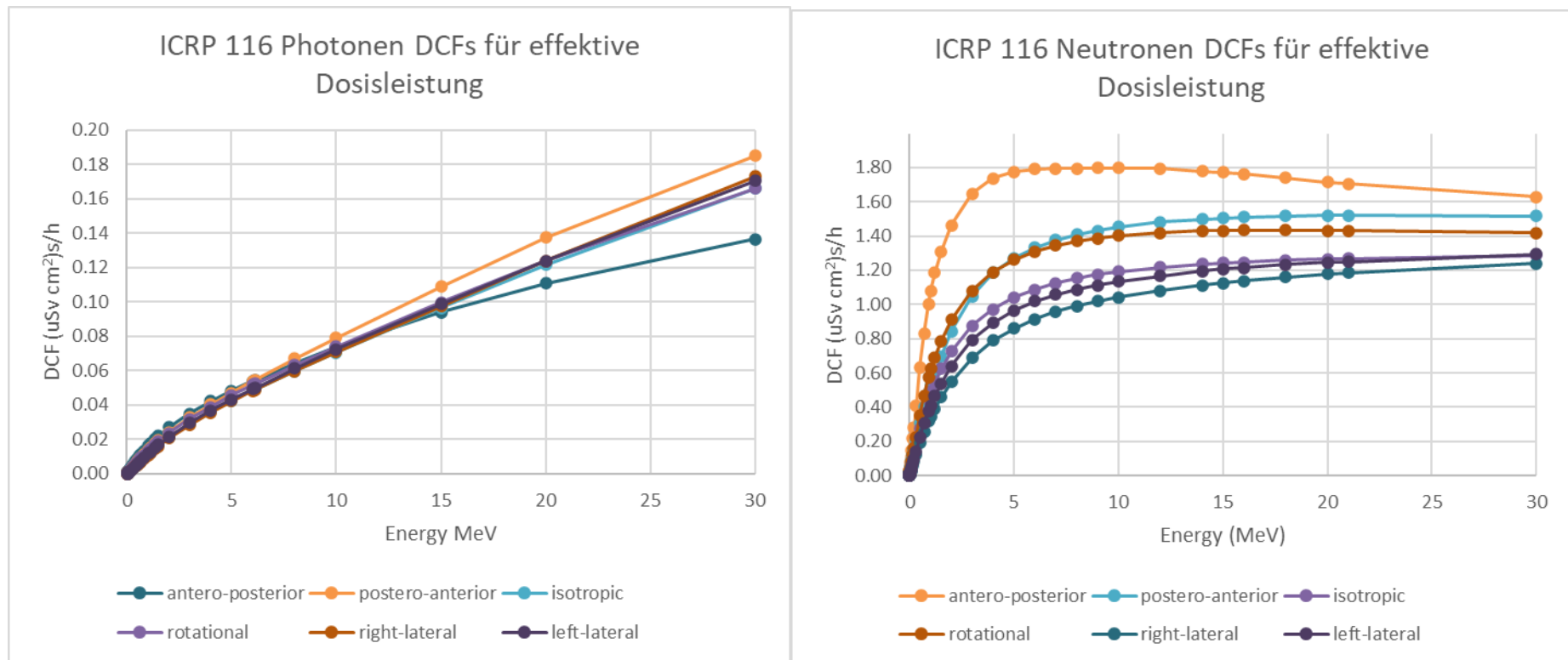
**Abb. 3.6** Schematische Darstellung der betrachteten idealisierten Geometrie

AP (antero-posterior), PA (postero-anterior), LLAT (links lateral), RLAT (rechts lateral), ROT (rotationssymmetrisch), ISO (isotrop)

Die Umrechnungskoeffizienten von Fluenz in effektive Dosis wurden aus den erhaltenen Organdosiskoeffizienten gemäß dem in der ICRP-Publikation 103 beschriebenen Verfahren abgeleitet. Die operationellen Größen aus der ICRP-Veröffentlichung 74 für Photonen, Neutronen und Elektronen bieten weiterhin eine gute Näherung für die Umrechnungskoeffizienten für die effektive Dosis der in der ICRP-Veröffentlichung 74 und dem ICRU-Bericht 57 betrachteten Energiebereiche.

Die Abb. 3.7 zeigt die verschiedenen DCFs für alle in ICRP 116 tabellierten Geometrien in einem für den Strahlenschutz der nuklearen Entsorgung relevanten Energiebereich.

Für die sechs Bestrahlungsgeometrien sind Photonen bis 10 MeV ähnlich und gehen mit steigender Energie auseinander. Dabei ist postero-anterior die konservativste Geometrie, und antero-posterior die Geometrie mit der geringsten Dosis. Für Neutronen ist der größte Unterschied bei Strahlung mit einer Energie von 5 MeV zu beobachten, und die Unterschiede verkleinern sich mit steigenden Energien. Dabei ist antero-posterior die konservativste Geometrie und rechts-lateral die Geometrie mit der geringsten Dosis. Die beobachteten Unterschiede zwischen Geometrien sind der energieabhängigen Eindringtiefe der jeweils betrachteten Strahlung und der Asymmetrie des menschlichen Körpers zuzuschreiben.



**Abb. 3.7** DCFs für alle in WANIRAS implementierten Geometrien aus ICRP 116

### 3.2.2 Historische Einheiten und Koeffizienten

Um Vergleiche und Berechnungen gemäß der alten Rechenkette zu erleichtern, sollte WANIRAS eine erweiterte Liste an DCFs zur Verfügung stehen. Zusätzlich zu den sechs Geometrien aus ICRP 116 /INT 10/ stehen auch die vorhergehenden ICRP-Publikationen zu externen Dosisberechnungen zur Verfügung. Diese umfassen ICRP 21 /INT 71/, basierend auf ICRP 15 /INT 69/ und ICRP 74 /INT 96/, basierend auf ICRP 60 /INT 90/. Das MCNP<sup>®</sup>-Manual tabelliert ebenfalls DCFs: ICRP 21 und ICRP 74 für MCNP<sup>®</sup> 5 und 6 respektive. In MCNP<sup>®</sup> 5 werden für Neutronen und Photonen, außer ICRP 21 DCFs, außerdem auch ANSI/ANS 1977 DCFs zur Verfügung gestellt, welche in WANIRAS auch auswählbar sind. Um einen kompletten Vergleich der Ergebnisse zu ermöglichen, stehen außerdem die von der GRS interpolierten Werte /QUA 93/ aus den ANSI/ANS 1977 /AME 77/ DCFs zur Auswahl (srcmcpn DCFs genannt).

Bei der Anwendung von historischen DCFs zur Berechnung von Dosisgrößen ist allerdings Vorsicht geboten, da sich die Definition von Dosisgrößen und Konzepten im Strahlenschutz seit der Publikation von ICRP 15 signifikant geändert hat. Dies ist besonders relevant, wenn Dosis durch externe Exposition zum Nachweis von regulatorischen Grenzwerten berechnet wird. Hier ist ein genauer Abgleich der Grenzwerte mit dem Ausdruck der durch die DCFs berechnete Dosis unumgänglich. Weitere Veränderungen ergeben sich bei der Berechnung der DCFs von größtenteils analytischen Methoden in früheren Publikationen zu reinen Monte-Carlo-Methoden in den neuesten Ausgaben von ICRP, sowie bei der Definition der genutzten Phantome.

Die Bezeichnungen von Strahlenschutzgrößen haben sich seit den ersten Zusammenstellungen von Berechnungsmethoden signifikant gewandelt. Hier ist besonders auf die Verschiebung des Begriffes der Äquivalentdosis von einer Körperdosisgröße zu einer operationellen Größe zu achten. Die Schutzgrößen (Körperdosisgrößen) haben sich vom Konzept der Äquivalentdosis über die effektive Äquivalentdosis - und deren Vorgänger - RBE-Dosis - bis zur derzeit empfohlenen effektiven Dosis entwickelt. Die operationellen Größen haben sich von der maximalen Äquivalentdosis (MADE) über die Dosisäquivalentindizes bis zu den derzeit empfohlenen Umgebungs-, Richtungs- und Personendosisäquivalentmengen entwickelt.

Die Unterschiede zwischen den zwei neuesten „Recommendations of the ICRP“ (ICRP 60 und ICRP 103) sind nicht so gravierend wie zwischen ICRP 15, ICRP 26 und ICRP 60. Es gab keine grundlegenden Änderungen am System des Strahlenschutzes,

und die Verwendung der Äquivalent- und Effektivdosis blieb unverändert. Es wurden aber einige Überarbeitungen an den Methoden vorgenommen, die zu ihrer Berechnung verwendet wurden.

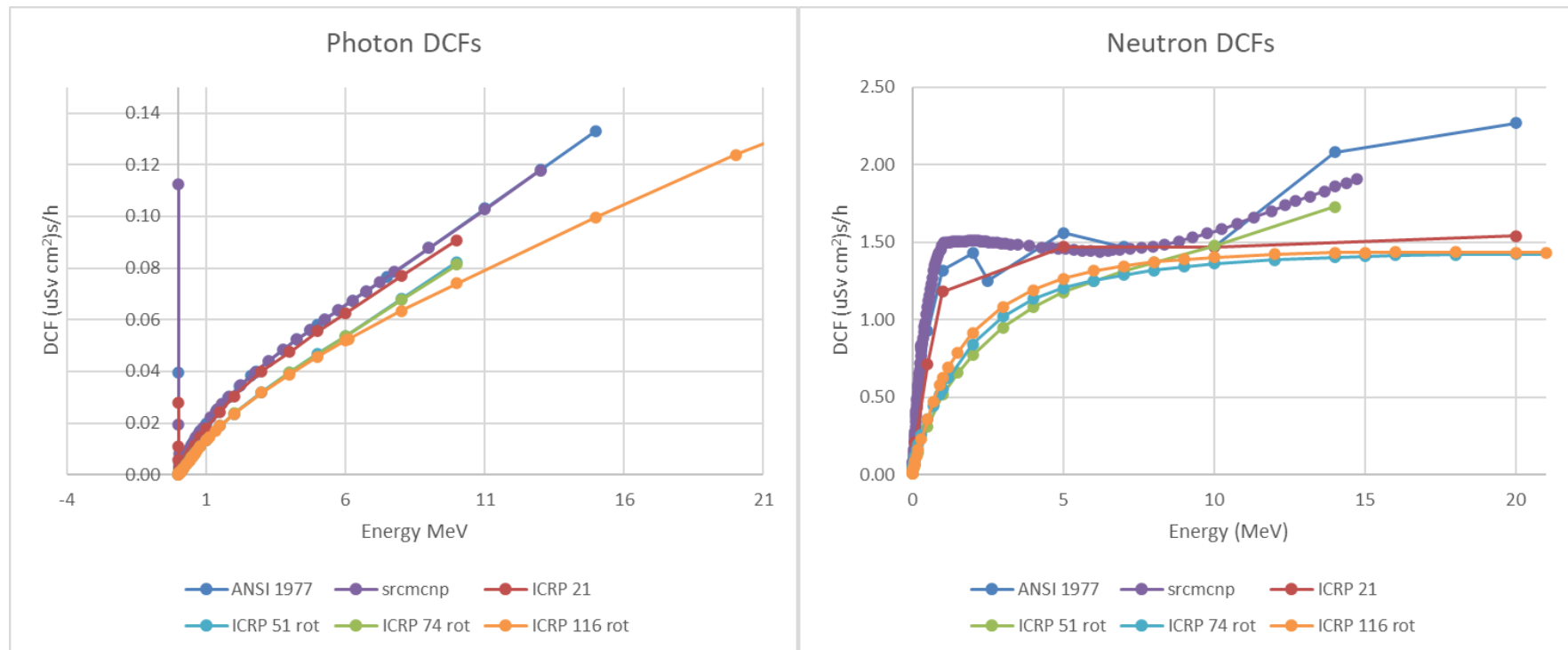
Im Folgenden ist eine Zusammenfassung der für die Berechnung der Dosis durch externe Exposition wichtigsten Punkte /INT 07a/:

- Änderungen an den Werten der Strahlungsgewichtungsfaktoren, die für Neutronen verwendet werden, wobei die Werte für Neutronen als kontinuierliche Funktion der Neutronenenergie angegeben werden
- Die Dosis aus externer Exposition wird unter Verwendung von Referenz-Rechnerphantomen des menschlichen Körpers berechnet, die auf medizinischen tomographischen Bildern basieren. Die Verwendung verschiedener mathematischer Modelle wird durch geschlechtsspezifische Mittelung der Werte ersetzt, die mit männlichen und weiblichen Phantomen erzielt wurden.
- Überarbeitete alters- und geschlechtsspezifische Gewebegewichtungsfaktoren, basierend auf aktualisierten Risikodaten und als gerundete Werte für eine Bevölkerung beiderlei Geschlechts und jeden Alters anwendbar
- Die Effektivdosis wird für eine Referenzperson und nicht für eine Einzelperson berechnet und soll für die prospektive Dosisbewertung zur Planung und Optimierung und zum Nachweis der Einhaltung von Dosisgrenzwerten für regulatorische Zwecke verwendet werden. Die effektive Dosis wird weder für epidemiologische Bewertungen empfohlen, noch sollte sie für detaillierte, spezifische retrospektive Untersuchungen der individuellen Exposition und des Risikos verwendet werden.

Vergleicht man die Ergebnisse der Berechnungen der Körperdosisgrößen für die Referenzphantome im Vakuum, die in ICRP 116 vorgestellt wurden, mit denen aus der ICRP-Veröffentlichung 74 und dem ICRU-Bericht 57 (ICRU, 1998) für Photonen und Neutronen, so sind die beobachteten Unterschiede bei den Verhältnissen der Körperdosisgrößen für Photonen hauptsächlich auf die Unterschiede zwischen den verwendeten Phantomen und den Werten der verwendeten Gewebegewichtungsfaktoren zurückzuführen. Die Unterschiede bei Neutronen sind hauptsächlich auf die Änderung der Strahlungsgewichtungsfaktoren zurückzuführen.

Die Abb. 3.8 zeigt einen Vergleich von historischen und aktuellen DCFs. Generell ist festzustellen, dass ältere DCFs konservativer sind als die aktuell von ICRP empfohlenen. Alle hier aufgeführten DCFs sind in WANIRAS implementiert und in Anhang A tabelliert.





**Abb. 3.8** Vergleich von historischen DCFs für Photonen und Neutronen mit DCFs aus ICRP 116 mit iso-Geometrie

### 3.2.3 Auswahl der angemessenen Konversionskoeffizienten

Im Allgemeinen wird empfohlen, die aktuellen Dosiskonversionskoeffizienten aus ICRP 116 für Bestimmungen der Dosis zu benutzen. Dies gilt vor allem, wenn Schutzgrößen zum Vergleich mit Grenzwerten verglichen sollen. Bei konkreten Expositionssituationen sind die DCFs aus ICRP 116 eine passende Approximation an die operationellen Größen. Falls explizit operationelle Größen benötigt werden, sind die in ICRU 51 und ICRP 74 aufgeführten Methoden und Konversionskoeffizienten zu benutzen. Um Verwirrung zwischen operationellen und Körperdosisgrößen zu vermeiden, sind diese allerdings nicht in WANIRAS aufgeführt.

Für die Auswahl der passenden Geometrie gilt es situationsabhängig, die entsprechenden Expositionssituationen zu betrachten. Beispielsweise wird für LAW/MAW-Abfälle eine Dosisberechnung typischerweise durchgeführt, um diese Werte gegen die Grenzwerte der Annahmebedingungen Konrad zu vergleichen. Hier gilt es die Ortsdosisleistung jedes Abfallgebindes von  $2E-03$  Sv/h Mittelwert an der Oberfläche und von  $1E-2$  Sv/h lokalen Maximalwert nicht zu überschreiten. In 1 m Abstand von der Oberfläche bei zylindrischen Abfallgebinden und in 2 m Abstand bei quaderförmigen Abfallgebinden darf die Ortsdosisleistung (einschließlich des Anteils durch Neutronen) nicht mehr als  $1E-04$  Sv/h betragen /BRE 15/. Da es hier um den Vergleich mit einem regulatorischen Grenzwert geht, wird die effektive Dosis berechnet. Als Geometrie kann die konservativste für den jeweiligen Strahlungstyp gewählt werden, PA (posterior-anterior) für Photonen und AP (anterior-posterior) für Neutronen. Die Geometrie, die einer Expositionssituation am nächsten kommen würde, wäre hier allerdings rotationssymmetrisch, in der Annahme, dass eine Person sich in der unmittelbaren Umgebung des Gebindes frei bewegen würde. Die Dosisleistung an der Oberfläche wird vom Text der Annahmebedingungen nicht konkretisiert auf eine Kontakt- oder Organdosis für die Hand. Auch hier ist zum Vergleich mit den Grenzwerten die generische effektive Dosis angemessen. Dabei ist immer zu beachten, dass die effektive Dosis nicht für detaillierte, spezifische retrospektive Untersuchungen der individuellen Exposition und des Risikos einer Einzelperson verwendet wird. Die effektive Dosis wird für eine Referenzperson berechnet und soll für die prospektive Dosisbewertung zur Planung und Optimierung und zum Nachweis der Einhaltung von Dosisgrenzwerten für regulatorische Zwecke verwendet werden /INT 10/.

Die in WANIRAS hinterlegten und zur Auswahl verfügbaren DCFs für Photonen und Neutronen sind

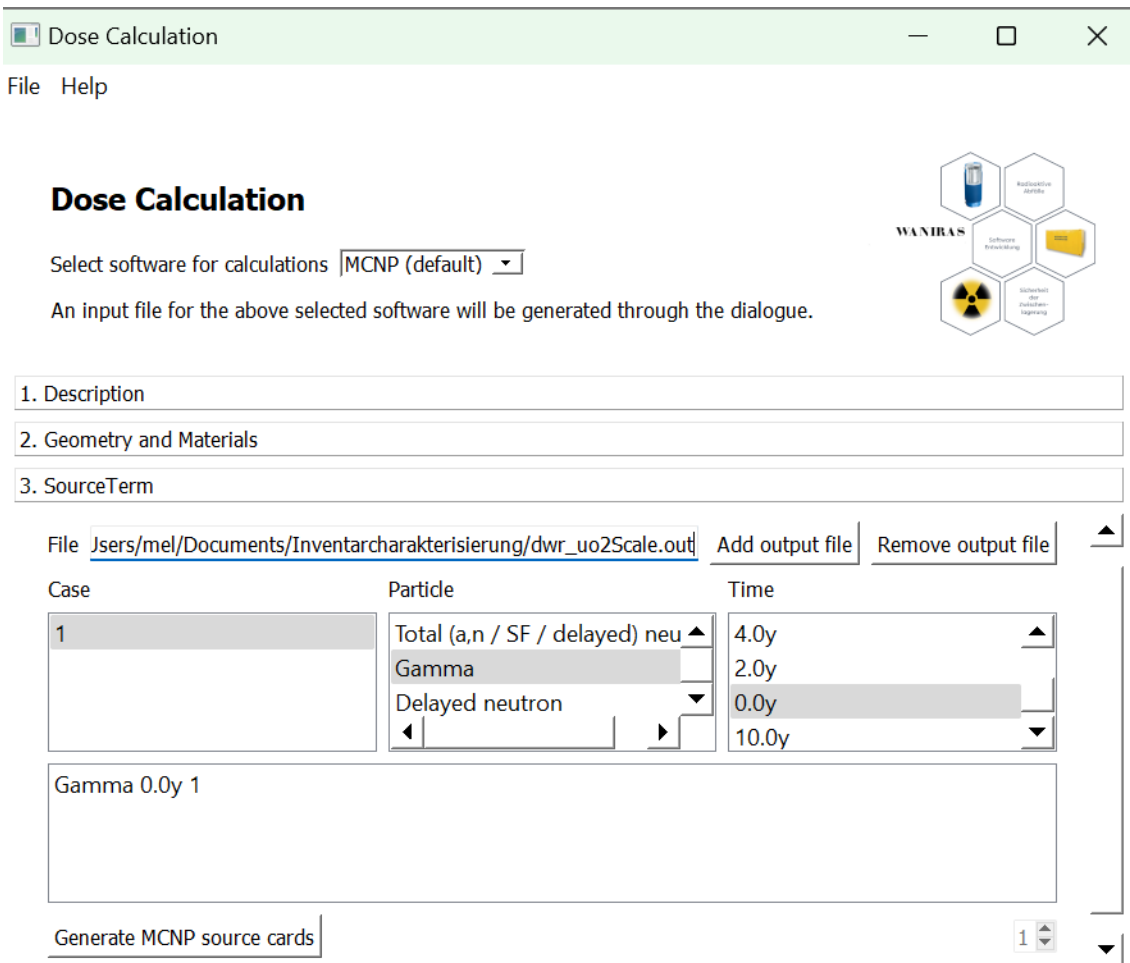
- ICRP 116 (anterio-posterior, postero-anterior, rotational, isotropic) /INT 10/,
- ICRP 74 (anterio-posterior, postero-anterior, rotational, isotropic) /INT 96/,
- ICRP 21 /INT 71/,
- ANSI 1977 /AME 77/ und
- SRCMCNP basierend auf ANSI 1977 /QUA 93/, /INT 07c/.

Wenn historische DCFs verwendet werden, ist besonders auf die Definition der berechneten Dosisgrößen zu achten. Die Unterschiede zur Berechnung der effektiven Dosis zwischen ICRP 116 und ICRP 74 belaufen sich größtenteils auf eine Modernisierung der genutzten Phantome. In ICRP 51 wird die alte Dosisgröße - effektive Äquivalentdosis – berechnet. und in ICRP 21 bestand noch keine Differenzierung zwischen operationellen und Körperdosisgrößen. Hier wird die Äquivalentdosis durch die DCFs berechnet. Ähnlich verhält es sich mit den im MCNP®-Handbuch aufgeführten DCFs aus ANSI 1977. Im Fall von Photonen ist von der Benutzung von DCFs aus ANSI 1977 und den davon abgeleiteten SRCMCNP DCFs sowie ICRP 21 abzuraten. Hier gibt es einen Anstieg im Niedrigenergiebereich, der in folgenden Publikationen nicht so weitergeführt worden ist. Dies kann zu ausgeprägter Überbewertung von Bremsstrahlungsphotonen führen. In WANIRAS sind diese DCF-Sätze nur für die Rückwärtskompatibilität der Dosisberechnungen hinterlegt.

### **3.3 Quelltermbestimmung**

Ein gesondertes Modul in WANIRAS ermöglicht die Aufnahme einer Strahlungsquelle in ein MCNP-Modell aus den Ergebnissen einer SCALE-Berechnung.

Unter dem Menüpunkt „3. Quellterm“ kann der Benutzer die Ausgabedatei einer SCALE-Berechnung auswählen (Schaltfläche „Datei hinzufügen“). WANIRAS analysiert dann die ausgewählte Datei und zeigt dem Benutzer die Wahl des Berechnungsfalls („case“), die Strahlungsarten und die verschiedenen Zeitpunkte, für die die Berechnung durchgeführt wurde, an (siehe Abb. 3.9).



**Abb. 3.9** WANIRAS-Schnittstelle für den Auswahl der Quellenoptionen aus einer SCALE-Datei

Nachdem der Benutzer die Art der Quelle ausgewählt hat, die in das MCNP®-Modell aufgenommen werden soll, liest WANIRAS das entsprechende Energiespektrum aus der SCALE-Datei und konvertiert es in das MCNP®-Format, mit Energie-Bins in MeV und den entsprechenden Intensitäten in Photonen pro Sekunde.

Das Ergebnis ist im Fenster „MCNP Source Cards“ (siehe Abb. 3.10) zu sehen, das durch Drücken des Knopfes „Generate MCNP source cards“ erscheint.

```

MCNP Source Cards
? X

sc1
  origin=C:/Users/mel/Documents/Inventarcharakterisierung/dwr_uo2Scale.out
  case='1'
  type='Gamma' time='0.0y'
si1 h $
  1.00000e-03 1.00000e-02 2.00000e-02 3.00000e-02 4.50000e-02
  6.00000e-02 7.00000e-02 7.50000e-02 1.00000e-01 1.50000e-01
  2.00000e-01 3.00000e-01 4.00000e-01 4.50000e-01 5.10000e-01
  5.12000e-01 6.00000e-01 7.00000e-01 8.00000e-01 1.00000e+00
  1.33000e+00 1.34000e+00 1.50000e+00 1.66000e+00 2.00000e+00
  2.50000e+00 3.00000e+00 3.50000e+00 4.00000e+00 4.50000e+00
  5.00000e+00 5.50000e+00 6.00000e+00 6.50000e+00 7.00000e+00
  7.50000e+00 8.00000e+00 1.00000e+01 1.20000e+01 1.40000e+01
sp1 d $ total_: 1.33130e+19, total          1.33: 1.30000e+20, unbinned
6.36: 5.00000e+13, binned          1.33: 1.30000e+20, binned(%)
1.00: 0.00000e+00
  0.00000e+00 1.25090e+18 1.53300e+18 6.67240e+17 7.06430e+17
  3.16950e+17 2.10990e+17 3.96160e+17 5.15850e+17 1.02180e+18
  4.44600e+17 8.97640e+17 6.65600e+17 2.41690e+17 3.56880e+17
  9.33760e+15 5.19750e+17 5.09720e+17 5.26360e+17 7.80960e+17
  6.34260e+17 8.50280e+15 2.60160e+17 1.86300e+17 2.13960e+17
  1.96770e+17 1.23400e+17 5.51320e+16 2.91720e+16 1.72910e+16
  6.92860e+15 5.56060e+15 2.94640e+15 9.63100e+14 7.72630e+13
  4.13140e+12 2.84770e+12 6.99190e+11 2.67030e+07 3.46090e+04

```

**Abb. 3.10** Fenster „MCNP source cards“ mit den ausgewählten Quellenoptionen in MCNP®-Format

Die Kommentarzeile „sc1“ enthält die gewählten Quellenoptionen, einschließlich des Namens der verwendeten SCALE-Ausgabedatei, während der Kommentar zur Wahrscheinlichkeitsverteilung „sp1“ die über alle Bins summierte Gesamtphotonenintensität enthält, was für die Normalisierung der Ergebnisse in der Nachbearbeitungsphase von Bedeutung ist.

### 3.4 MCNP®-Tallies zur Dosisberechnung

MCNP® 6 bietet eine Reihe von verschiedenen Detektoren (Tallies), mit denen unterschiedliche Größen der Simulationen geliefert werden. Einige von ihnen werden in WANIRAS für die Dosisleistungsberechnungen verwendet. Es ist wichtig, zu beachten, dass die Tally-Ergebnisse immer auf die Anzahl der Histories (simulierte Teilchen)

normiert sind. Die in WANIRAS zur Verfügung stehenden Tally-Typen werden im Folgenden kurz beschrieben:

**F2:** Die Tallies vom Typ F2 sind sog. „Oberflächen-Tallies“. Sie liefern den Teilchenfluss über eine beliebige Oberfläche. Die Ergebnisse werden in Teilchen/cm<sup>2</sup> angegeben. In den Behältervorlagen in WANIRAS wurde ein Tally vom Typ F2 verwendet, um die Dosisleistung über die Mantelfläche jedes Behälters zu berechnen.

**F5:** Tallies vom Typ F5 (Ring-Tallies und Point-Tallies) werden als „Next-Event-Estimator“ bezeichnet, weil sie nicht die Teilchen berücksichtigen, die den Detektor tatsächlich erreichen. Stattdessen berechnen sie für jede Kollision die Wahrscheinlichkeit, dass das nächste Ereignis am Ort des Detektors stattfindet. Die Ergebnisse des Tally werden in Teilchen/cm<sup>2</sup> ausgedrückt. Um Singularitäten bei Kollisionen in der Nähe des Detektionspunktes zu vermeiden, kann ein Radius  $r_0$  angegeben werden, um eine „Ausschluss-sphäre“ um das Tally zu definieren. Dieser wird jedoch auf null gesetzt, wenn sich der Detektionsort in einem Leerraum befindet, wie es bei den Vorlagen in WANIRAS der Fall ist. F5-Tallies können Punktdetektoren oder Ringdetektoren sein. Bei Ringdetektoren ist der Erfassungspunkt nicht fest, sondern wird unter den Punkten auf einem Ring mit bestimmter Achse und Radius gesampelt. In WANIRAS wurden Ringdetektoren des Typs F5Z, bei denen die Ringachse in z-Richtung verläuft, für alle zylindersymmetrischen Behälter verwendet. F5-Tallies werden in WANIRAS im Abstand von 0 m, 1 m, 2 m vom Mantel eines jeden Behälters eingesetzt.

**Fmesh:** Mesh-Tallies sind Gitternetze, welche der Problemgeometrie überlagert werden. Jede Zelle des Gitters wirkt dann wie eine Volumen-Tally der Art F4: Sie liefert den Fluss durch die Zelle gemittelt über ihr Volumen in Einheiten von Teilchen/cm<sup>2</sup>. Eine Mesh-Tally kann eine kartesische Geometrie (XYZ) oder eine zylindrische Geometrie (RZT) haben. Das Gitternetz wird durch die Angabe der Anzahl der Zellen in einem bestimmten Abstand in jede Richtung definiert. Mesh-Tallies werden keiner statistischen Prüfung unterzogen, so dass ihre Ergebnisse nur eine Schätzung des Flusses und seines relativen Fehlers liefern, aber sie können nützlich sein, um die Dosisleistung in einem größeren Gebiet zu visualisieren und werden dafür in allen WANIRAS-Vorlagen eingesetzt. Die Größe der Voxel ist nicht homogen und reicht von 50x50x50 cm bis 100x100x100 cm. Bei zylindrischen Meshes entspricht der Winkelabstand jedes Voxels 10 Grad.

Für eine detaillierte Beschreibung der Nutzung des jeweiligen Tallies wird auf das MCNP®-Handbuch verwiesen /WER 17/. Die Verwendung der verschiedenen Arten von Tallies in verschiedenen Fällen in WANIRAS ist in Tab. 3.1 zusammengefasst.

**Tab. 3.1** Zusammenfassung der Tallies für die in WANIRAS hinterlegten Geometrievorlagen zur Dosisberechnung

	<b>F2</b>	<b>F5 (Abstand von der Oberfläche)</b>	<b>FMesh</b>
Keine Abschirmung	keine	keine	keine
Punktquelle	keine	Punkt (0 cm, 100 cm, 200 cm, 1000 cm)	XYZ 50x50x50 cm bis 100x100x100 cm
Konrad Container Typ IV	Mantel	Punkt (0 cm, 100 cm, 200 cm)	XYZ 50x50x50 cm bis 100x100x100 cm
VBA	Mantel	Ring (0 cm, 100 cm, 200 cm radial), Punkt (0 cm, 100 cm, 200 cm axial)	RZT 10 Grad mit 50x50 cm bis 100x100 cm
MOSAIK®	Mantel	Ring (0 cm, 100 cm, 200 cm radial), Punkt (0 cm, 100 cm, 200 cm axial)	RZT 10 Grad mit 50x50 cm bis 100x100 cm
Generischer Transport- und Lagerbehälter	keine	Ring (0 cm, 100 cm, 200 cm)	RZT

### 3.5 Aktivierung

#### 3.5.1 Hintergrund und Relevanz für die Rechenkette

Bei der Berechnung von Neutronen Strahlungsfeldern müssen auch Effekte von Aktivierung der Quelle auf das in Abschirmrechnungen benutzte Radionuklidinventar betrachtet werden. Im Fall von wärmeentwickelnden Abfällen (HAW) ist die Aktivierung durch den Neutronenfluss beim Abbrand im ausgewählten Code SCALE integriert, so dass das Inventar der berechneten Brennelemente sowohl aus Spaltprodukten und Zerfallsprodukten als auch aus Aktivierungsprodukten und deren Zerfallsprodukten besteht.

Nach der Bestrahlung des Brennstoffes im Reaktor ist der erwartete Neutronenfluss im Behälter ca. fünf Größenordnungen niedriger als im Reaktor. Dementsprechend niedriger ist die Produktionsrate von Aktivierungsprodukten. Es wird hier nicht erwartet, dass eine für Dosisberechnungen relevante Veränderung zustande kommen kann.

Rechnungen haben gezeigt, dass der Beitrag durch aktiviertes Behältermaterial eher vernachlässigbar klein ist im Vergleich zum radioaktiven Zerfall von HAW und der daraus erzeugten Dosisleistung /GES 10/. Rechnungen zum Anteil von Aktivierungsprodukten können szenario-spezifisch mit iterativen Verfahren berechnet werden.

Für LAW/MAW-Abfälle ist die Aktivierung der Quelle nicht relevant, da die Neutronenflüsse sehr viel niedriger sind, beziehungsweise in vielen Gebinden nicht existent. In beiden Fällen (LAW/MAW und HAW) kann allerdings die Aktivierung von Strukturmaterialien durch den Einfluss von Neutronenquellen im Gebinde bzw. Behälter von Interesse sein. Für HAW-Abfälle ist die Bestimmung der im Reaktorbetrieb erzeugten Aktivierung der Materialien und Nuklide, die es beim Rückbau zu beachten und zu zerlegen bzw. verpacken gilt, von Interesse. Messungen aus bestrahlten SWR-Brennelementkästen ergaben überraschenderweise eine starke Alphastrahlung. Auch wurden Spaltproduktgammas gemessen, die nur aus der Aktivierung von Uranverunreinigung im Zirkaloy stammen konnten.

Eine Berechnung dieser Aktivierung ist aktuell bei der GRS durch den In-house-code GRSAKTIV-II oder durch ein Modul der Software SCALE möglich. Dies wird aktuell im Rahmen der Inventarcharakterisierung nicht betrachtet, da hier der Fokus auf dem Inventar der Quellen selbst liegt.

### **3.5.2 GRSAKTIV-II**

Für HAW-Abfälle wurden der GRS-Code GRSAKTIV-II und SCALE betrachtet und auf seine Eignung in der weiterzuentwickelnden Rechenkette untersucht. Die Aktivierung des Brennstoffes ist in SCALE bei den Abbrandrechnungen integriert.

Für Brennelementstrukturteile wurde mit der Entwicklung von GRSAKTIV-II der Bedarf an einem fortgeschrittenen Rechenverfahren zur Aktivierungsberechnung von Brennelement- und Core-Bauteilen abgedeckt. Ebenso können Core-ferne Bereiche wie Betonstrukturen oder Rohrleitungen aktiviert werden. Die neutronenspektrale Einsatzbereichserweiterung wurde erreicht durch den Ersatz der ursprünglichen Dreigruppenrechnung mittels einer zugeordneten modifizierbaren 84-Gruppenbibliothek für alle wichtigen Isotope. Dabei werden nicht nur die resonanzkorrigierten Isotope, sondern alle reaktivitätsrelevanten Isotope der 84-Gruppenbibliothek von der Vielgruppenwichtung, auch bei sehr harten Spektren, rechenmethodisch zufriedenstellend erfasst. Die 84 Gruppenflüsse lassen sich bspw. durch die Kopplung mit MCNP<sup>®</sup> erzeugen. MCNP<sup>®</sup>



berechnet die Flüsse an beliebigen Stellen mit Hilfe von Mesh-Tallies. Die 84 Gruppenflüsse werden dann von GRSAKTIV-II zur Erstellung problemabhängiger Wirkungsquerschnitte verwendet. Damit lässt sich die Aktivierung der Materialien berechnen, die sich an definierten Stellen befinden.

### **3.5.3 Anwendungsbeispiel: Aktivierung von Strukturmaterialien**

Während des Reaktoreinsatzes werden die inaktiven Strukturteile des Brennelementes wie Abstandshalter, Hüllrohre, Steuerstabführungsrohre usw. aktiviert. Die bestimmenden Größen sind die Zusammensetzung des Materials sowie die Bestrahlungshistorie. Die Aktivierung muss bestimmt werden, damit zusätzliche Quellen zur Auslegung der Behälter bzw. bei der Handhabung der Brennelemente Berücksichtigung finden können.

Die Kenntnis der Materialzusammensetzung ist ein wichtiger Teil der Aktivierung. Geringe Verunreinigungen können für neue nicht erwartbare Nuklide bzw. Strahlungsquellen sorgen.

Beispielhaft wird die in /HUM 01/ berechnete Aktivierung eines Brennelementes (16x16 DWR-Brennelement mit 45 GWd/MgSM) mit Strukturteilen beschrieben. Hier wird anhand dieses Beispiels eine Nachrechnung mit neueren Bibliotheken durchgeführt. Vorbereitende Abbrandrechnungen bestimmen die Nuklidzusammensetzung im Brennstoff während und nach dem Reaktoreinsatz sowie die Neutronenflussverhältnisse im aktiven Bereich des Brennelementes.

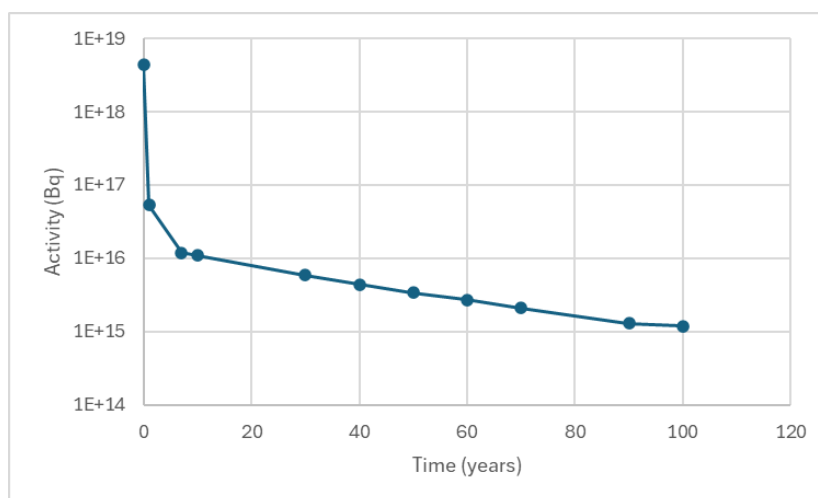
Das Brennelement besteht für die Aktivierungsrechnungen aus drei Zonen. Dazu wird pro Zone ein Fluss bzw. die entsprechende Flussabsenkung im Verhältnis zum aktiven Bereich angegeben.

**Tab. 3.2** Zonen- und Materialaufteilung für die Brennelement-Aktivierungsrechnung

	Masse/BE	Absenkung	Material	Massenanteil
Aktive Zone	159,51 kg	1	Zr	139,2 kg/BE
			austenitischer Edelstahl (1.4541)	20,31 kg/BE
Spaltgasraum	33,50 kg	0,2739662	Zr	17,8 kg/BE
			Edelstahl 1.4568	4,915 kg/BE
			austenitischer Edelstahl (1.4541)	7,8 kg/BE
			Inc 718	1,91 kg/BE
			AL <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1,078 kg/BE
Kopf-/Fuß	34,10 kg	0,0232556	austenitischer Edelstahl (1.4541)	29,8 kg/BE
			Inc X 750	4,32 kg/BE

Für die Aktivierung sind neben den Massenangaben und den Neutronenflüssen die genauen elementaren Materialzusammensetzungen wichtig. Sie wurden aus der Literatur referenziert /STA 74/. Die Zirkaloy-4-Zusammensetzung mit Verunreinigungen enthält Spuren von Uran nach /VDM /.

OREST liefert das Ergebnis der Abbrandrechnung für den Abbrand von 45 GWd/MgSM. Als Ergebnisgrößen stehen neben der Aktivität auch die Nachzerfallswärme, Neutronen- und Gammaraten für die einzelnen Nuklide und Elemente bereit. Die Abklingzeiten nach Entladung aus dem Reaktor (0 Jahre) reichen von 1 bis 100 Jahre. Als Beispiel ist die Gesamtaktivität des Kernbrennstoffs für ein Brennelement aufgeführt (siehe Abb. 3.11). Bis 100 Jahren wird die Aktivität der Spaltprodukte Cs-137/Ba-137m und Sr-90/Y-90 bestimmt.



**Abb. 3.11** Gesamtaktivität Brennstoff pro BE (533 kg/BE)

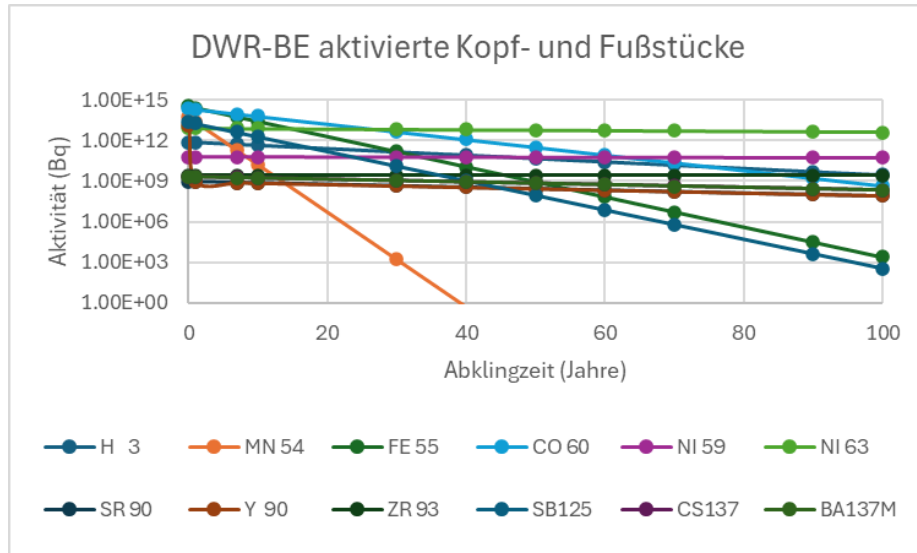
Zur Spektralberechnung wird der für Neutronen in Leichtwasserreaktoren relevante Energiebereich von 0 bis 10 MeV in drei Energiegruppen eingeteilt (THERM, RES und FAST) /HES 08/ mit den dazugehörigen Spektralindizes (siehe Tab. 3.3), welche die Verteilung im jeweiligen Energiebereich beschreiben. Diese Einteilung entspricht auch der Aufteilung der Wirkungsquerschnitte in ORIGIN.

Die Abbrandrechnung mit OREST liefert die ORIGIN Spektralindizes für den aktiven Brennelementbereich (Position der Pellets im Brennstab) sowie die errechneten Flüsse gemittelt über den Abbrand. Für die Aktivierungsrechnungen können der thermische oder der Gesamtfluss verwendet werden. Im Beispiel wird vom thermischen Fluss ausgegangen. Aus Rechnungen zur Flussänderung von Zone 1 zu Zone 2 und Zone 3 ergeben sich Anpassungsfaktoren und somit neue Indizes für jede der drei Zonen (siehe Tab. 3.3). Wird ein 84 Gruppenfluss für die entsprechende Zone angegeben, so werden die Spektralindizes überschrieben und neu berechnet.

**Tab. 3.3** Energiegruppen für die Rechnung sowie neu bestimmte Spektralindizes für die drei Zonen des Brennelementes

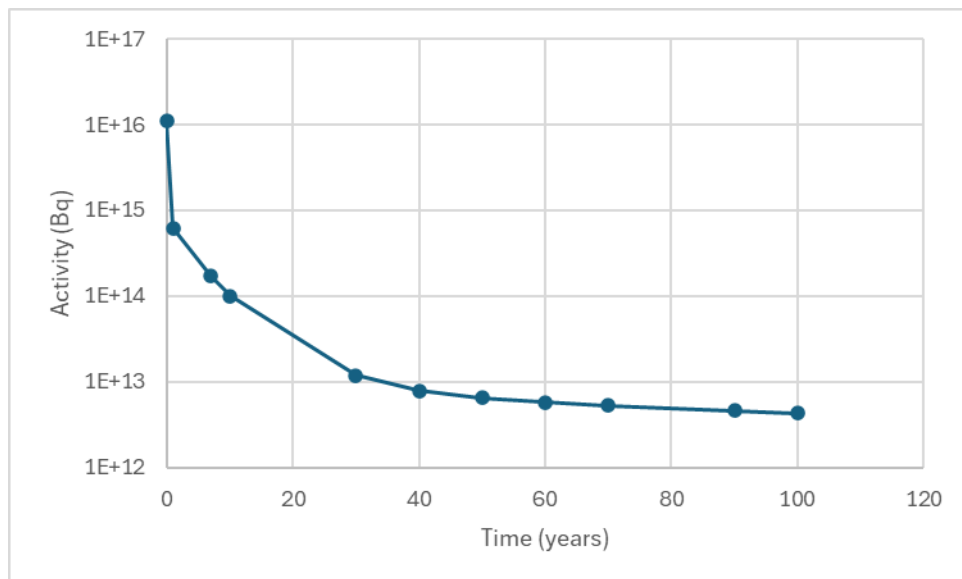
Energiegruppe	Beschreibung	Energie	Fluss (n/s*cm <sup>2</sup> )	Zone	Anpassungsfaktor
THERM	Thermischer Fluss	0 eV – 10 MeV	3,723E+13	Zone 1	0,541
				Zone 2	0,609
				Zone 3	0,642
RES	Epithermischer Fluss	0,5 eV – 1 MeV	2,079E+14	Zone 1	0,385
				Zone 2	0,153
				Zone 3	0,070
FAST	Schneller Fluss	1 MeV – 10 MeV	7,483E+13	Zone 1	2,915
				Zone 2	1,123
				Zone 3	0,539

GRSAKTIV-II verwendet die Massen der Einzelzonen und berechnet pro Zone die entstandenen Aktivitäten. Anschließend können die Ergebnisse entsprechend ihrer Massenanteile zusammengemischt werden. Damit wird für die drei Zonen ein Gesamtergebnis errechnet. Das Ergebnis für die Strukturmaterialien, zusammengefasst für alle drei Zonen, ergibt den Aktivitätsverlauf, wie in Abb. 3.13 dargestellt. Die Einzelnuclide sind in Abb. 3.12 dargestellt.



**Abb. 3.12** Dominante Nuklide aus der Aktivierung der Kopf- und Fußstücke eines DWR-BE

Nach 100 Jahren bestimmt das Nuklid Ni-63 zu 98 % die Aktivität. Es hat eine Halbwertszeit von etwa 100 Jahren und ist ein reiner Beta-Strahler.



**Abb. 3.13** Gesamtaktivität der aktivierten Strukturmaterialien pro BE



## **4 HAW-Abfälle**

### **4.1 Abbrandrechnungen mit SCALE**

Für eine Berechnung des Inventars in HAW-Gebinden und damit auch des Quellterms für die Dosisberechnung, wird zu Beginn eine Abbrandrechnung durchgeführt. Durch Charakterisierung des Brennelementtyps sowie der Abbrandhistorie im Reaktor können die produzierten Spaltprodukte berechnet werden. Mit WANIRAS als Schnittstelle wird zur Quelltermberechnung der Abbrandcode SCALE angesteuert. Abhängig von der gewünschten Detailtiefe und Art der Brennelemente können im Rahmen dieses Codes verschiedene Pakete angesteuert werden und deren Ergebnisse für die Abschirmungsrechnung an MCNP6 weitergereicht werden. In WANIRAS sind Methoden zur Berechnung mit den Paketen ORIGAMI (für Uranoxid-Brennelemente) und ARP (für Mischoxid-Brennelemente) hinterlegt.

#### **4.1.1 ORIGAMI**

ORIGEN Assembly Isotopics (ORIGAMI) ist ein Computerprogramm, das detaillierte Isotopenzusammensetzungen für Leichtwasserreaktor-Brennelemente für  $\text{UO}_2$ -Brennstoffe berechnet. Es verwendet den ORIGEN-Transmutationscode und vorgenerierte ORIGEN-Bibliotheken für eine bestimmte Brennelement-Leistungsverteilung. Es besteht die Möglichkeit, ganze Brennelemente oder einzelne Brennstäbe zu modellieren und beide in axiale Zonen zu untergliedern.

ORIGAMI automatisiert diese Berechnungen und unterstützt sowohl null- als auch dreidimensionale Modelle. Es können mehrere Zyklen mit unterschiedlichen spezifischen Leistungen und Bestrahlungszeiten berechnet werden. Außerdem bietet ORIGAMI detaillierte Darstellungen der Isotopenverteilung im Brennelement. Vorgenerierte Bibliotheken tabellieren die gemittelten Ein-Gruppen-Querschnitte zur genauen Reproduktion der Isotope. Durch den Einsatz spezifischer Bibliotheken für einzelne Stäbe kann die Genauigkeit in Bezug auf reale Brennelementgeometrie erhöht werden. Die aktuelle Beschränkung der Bibliotheksspezifikation auf die Stabebene berücksichtigt sowohl zulässige axiale Moderatorendichte als auch die Leistungsverteilung.

Darüberhinaus werden durch ORIGAMI Dateien wie ORIGEN-Binärdateien, Nuklidkonzentrationen nach axialer Zone sowie zerfallswärmeabhängige Quellen für thermische

Analysen erzeugt. Eine Interpolation für MOX-basierte Brennstoffe wird allerdings derzeit von ORIGAMI nicht unterstützt.

#### **4.1.2 ARP+ORIGEN**

ORIGAMI kann derzeit für MOX-Brennstoffe keine Abbrandrechnungen durchführen, daher wird im Folgenden die Alternative einer Abbrandrechnung für MOX-Brennstoffe mittels ARP- und ORIGEN-Modulen beschrieben.

#### **ARP**

Das ARP-Modul führt eine mehrdimensionale Interpolation an einer Reihe von speziell vorbereiteten ORIGEN-Bibliotheken durch. Dabei kommen Interpolationsmethoden zum Einsatz. Die mit dieser Version von SCALE ausgelieferten ORIGEN-Reaktorbibliotheken sind im Kap. 4.2 beschrieben. Des Weiteren wird dargelegt, wie Anwender eigene Bibliotheken erstellen können. Das ARP-Modul wurde umfassend für Leichtwasserreaktor-Brennstoff validiert. Zudem wurden Benchmarking-Studien für MOX-Brennstoff durchgeführt /OAK 23/.

Die Parametrisierung für Brennstoff auf Uranbasis (z. B.  $\text{UO}_2$ ), wie er in den meisten Leichtwasserreaktoren zu finden ist, erlaubt die schnelle Interpolation von der jeweils verwendeten Brennstoffanreicherung und -dichte sowie des Abbrands.

Die Parametrisierung für MOX-Brennstoff enthält eine Mischung aus Plutonium und Uranoxid und erlaubt die Interpolation auf den Gesamtplutoniumgehalt im Schwermetall, den Plutonium-Isotopenvektor (Pu-Vektor), der die relativen Konzentrationen der Pu-Isotope definiert, die Brennstoffdichte sowie den Abbrand.

Die Variation der Absorptionsquerschnitte in Abhängigkeit vom Plutoniumgehalt ist nahezu linear. Die Interpolation auf den Pu-Vektor ist komplexer als die Urananreicherung für  $\text{UO}_2$ -Brennstoff, da der Vektor aus den folgenden fünf verschiedenen Isotopen besteht:  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Pu}$  und  $^{242}\text{Pu}$ . Des Weiteren sind die Elemente des Vektors voneinander abhängig, so dass eine unabhängige Bewertung nicht möglich ist, da die Summe des gesamten Vektors 100 % ergeben muss. Das Schema für den Pu-Vektor basiert auf der Auswertung einer umfangreichen Datenbank von Plutoniumzusammensetzungen, die tatsächlichen MOX-Brennelementen europäischen Ursprungs

entstammen. Es kann angenommen werden, dass die Parametrisierung alle Pu-Isotope umfassen muss.

## 4.2 Reaktorbibliotheken

Mit dem ARP-Code können abbrandabhängige Wirkungsquerschnittsbibliotheken erstellt werden. Hierzu wird über im Voraus generierte Reaktorwirkungsquerschnittsbibliotheken interpoliert, die mithilfe von Reaktorphysik-Transportmethoden erstellt wurden. Die im SCALE verteilten Reaktorwirkungsquerschnittsbibliotheken umfassen eine Vielzahl gängiger kommerzieller Leistungsreaktor- und Brennstoffanordnungsdesigns. Einige relevante vordefinierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken, die für die Verwendung mit ORIGEN bzw. ORIGAMI geeignet sind, sind in Tab. 4.1 gelistet.

**Tab. 4.1** Standard Wirkungsquerschnittsbibliotheken für verschiedene Reaktor- und Brennelementtypen /WIE 24/

Reaktortyp	Brennelement-Design	Name der Reaktorbibliothek
DWR UO <sub>2</sub> und MOX	Babcock & Wilcox 15x15	bw15x15, mox_bw15x15
	Siemens 14x14	s14x14, mox_s14x14
	Siemens 18x18	s18x18, mox_s18x18
	Westinghouse 14x14	w14x14, mox_w14x14
	Westinghouse 15x15	w15x15, mox_w15x15
	Westinghouse 17x17	w17x17, mox_w17x17
	Westinghouse 17x17-OFA	w17x17_ofa, mox_w17x17_ofa
	Westinghouse CE 14x14	ce14x14, mox_ce14x14
	Westinghouse CE 16x16	ce16x16, mox_ce16x16
SWR UO <sub>2</sub> und MOX	ABB 8x8-1	abb8x8-1, mox_abb8x8-1
	ATRIUM 9x9-1	atrium9x9-9, mox_atrium9x9-9
	ATRIUM 10x10-9	atrium10x10-9, mox_atrium10x10-9
	General Electric 7x7-0	ge7x7-0, mox_ge7x7-0
	General Electric 8x8-1	ge8x8-1, mox_ge8x8-1
	General Electric 8x8-2	ge8x8-2, mox_ge8x8-2
	General Electric 9x9-2	ge9x9-2, mox_ge9x9-2
	General Electric 10x10-4	ge10x10-8, mox_ge10x10-8
	SVEA 64 (8x8-1)	svea64-1, mox_svea64-1



Reaktortyp	Brennelement-Design	Name der Reaktorbibliothek
	SVEA 96 (10x10-4)	svea96-0, mox_svea96-0
	SVEA 100 (10x10-0)	svea100-0, mox_svea100-0

Alle in SCALE enthaltenen Bibliotheken basieren auf ENDF/B-VII.1 und den 252-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken und sind mit dem SCALE TRITON-Modul erstellt worden. MOX-Bibliotheken verwenden denselben Satz von DWR- und SWR-Gitteranordnungen, wobei MOX-Zusammensetzungen den UO<sub>2</sub>-Brennstoff ersetzen. Weitere Details und primär Literaturangaben zu den Brennelementdesigns und zu den Betriebsdaten des Reaktors sowie zu den in den Bibliotheken variablen Parameter (z. B. Anreicherungsbereich, Abbrandbereich etc.) sind mit dem SCALE-Benutzerhandbuch veröffentlicht.

Außerdem besteht die Möglichkeit benutzerdefinierte ORIGEN-Wirkungsquerschnittsbibliotheken für verschiedene Brennstofftypen zu generieren. Im Folgenden wird beispielhaft das Verfahren beschrieben, welches angewendet wurde, um für die Anwendung in WANIRAS Bibliotheken für deutsche Druckwasserreaktoren bereit zu stellen.

Der erste Schritt besteht darin, ein physikalisches Modell des Brennstoffgitters und der Eigenschaften der zu berücksichtigenden Reaktorordnung zu erstellen. Für eine gegebene anfängliche Brennstoffanreicherung wird eine TRITON-Abbrandberechnung mit einer der Abbrandanalysesequenzen von SCALE durchgeführt. TRITON kann entweder eine 2D-Darstellung des Brennstoffgitters unter Verwendung des NEWT-Diskretionsordnungs-Transportcodes oder eine 3D-Darstellung des Gitters unter Verwendung des KENO-Monte-Carlo-Transportcodes verwenden. TRITON ermöglicht es, mehrere Brennstofftypen zu definieren und unabhängig voneinander abzubrennen.

Die Abbrandanalysesequenzen werden verwendet, um die Bestrahlung und den Abbrand des Brennstoffs über die erforderliche Bestrahlungshistorie zu simulieren. Eine Abbrandanalyse wird mit einer Reihe von Zeitintervallen oder Zyklen modelliert. Während der Simulation werden Wirkungsquerschnitte, die repräsentativ für den Mittelpunkt jedes Zyklus sind, durch die Abbrandsequenz erstellt und in der Bibliothek gespeichert. Zusätzlich werden Wirkungsquerschnitte, die repräsentativ für die Bedingungen von unbestrahltem Brennstoff sind, in der Bibliothek gespeichert, um anfängliche Wirkungsquerschnitte zu repräsentieren.

Die Erfahrung in der Erstellung von LWR-Brennstoffbibliotheken hat gezeigt, dass Abbrand-Simulationen mit Abbrandschritten von 3.000 MWd/Mg SM ausreichen, um die Wirkungsquerschnittsvariationen zu repräsentieren. Jeder Satz abhängiger Wirkungsquerschnitte wird innerhalb der einzelnen Bibliothek gespeichert, und jeder Satz wird nacheinander nach seiner Position in der Bibliothek abgerufen. Der Satz an Position 1 enthält Wirkungsquerschnitte für frischen Brennstoff, und die verbleibenden Wirkungsquerschnittssätze (Positionen) entsprechen den Abbrandstufen, die den Mittelpunkt jedes Abbrandschritts in der Sequenzberechnung charakterisieren.

Für Brennstoffe mit mehreren Anreicherungsgehalten wird das oben beschriebene Verfahren für jede Anreicherung wiederholt. Für Brennstoffe mit nur einem Anreicherungsgehalt (z. B. Natururan) ist nur ein Abbrand erforderlich. Änderungen der Wirkungsquerschnitte mit der Anreicherung werden im Allgemeinen mit etwa 1,0 Gew.-%-Schritten repräsentiert, z. B. 0,5, 1,5, 2,0, 3,0, 4,0, 5,0, 6,0, 7,0, 8,0 und 8,5 Gew.-% von  $^{235}\text{U}$ . Bei SWR, welche erhebliche Schwankungen der Moderatorichte beinhalten, muss auch der Effekt der Dichteschwankung des Moderators auf die Wirkungsquerschnitte berücksichtigt werden. Die empfohlenen Werte der Moderatorichte für SWR liegen in der Regel zwischen 0,1 und 0,9 g/cm<sup>3</sup>, mit Inkrementen von etwa 0,2 g/cm<sup>3</sup>. Wie bei der Anreicherung können auch bei der Moderatorichte wenige Punkte für viele Anwendungen ausreichen. Die Schwankungen der Moderatorichte wurde für DWR-Bibliotheken, die am ORNL entwickelt wurden, aufgrund der relativ geringen Variationen, nicht berücksichtigt. Wenn die Variation in der Moderatorichte berücksichtigt werden soll, müssen die Bibliotheken für jede Kombination aus Anreicherung und Moderatorichte berechnet werden. Dies kann eine beträchtliche Anzahl von Abbrandanalysesimulationen erfordern, um alle erforderlichen Wirkungsquerschnittsbibliotheken zu berechnen. Das Hilfsprogramm SCALE/ORIGEN Library Generator (SLIG) automatisiert die Erstellung von Eingabedateien.

### **4.3 Spezialfall verglaste Abfälle**

Die Umsetzung der Berechnung des Inventars von verglasten Abfällen orientiert sich an der in ORIGEN/SCALE implementierten Methode. Für diesen Fall stehen in SCALE Batch-Verarbeitungsoptionen zur Verfügung. Dabei werden verschiedene Komponenten der Nuklidzusammensetzungen in verschiedene Ströme getrennt und diese werden im Anschluss zu neuen Zusammensetzungen zusammengeführt.

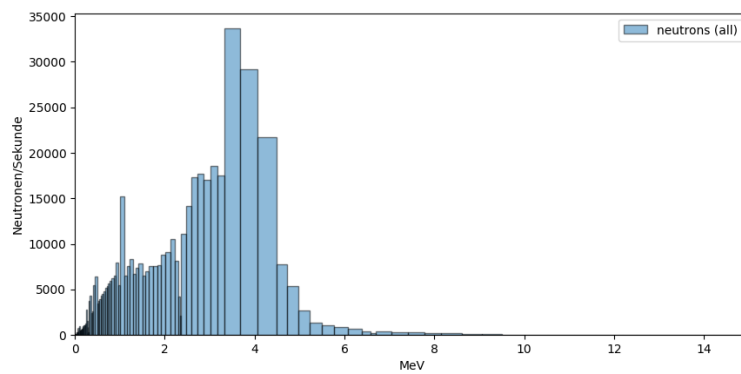
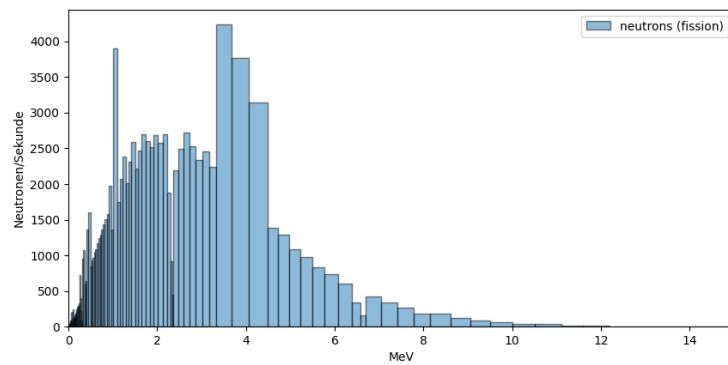
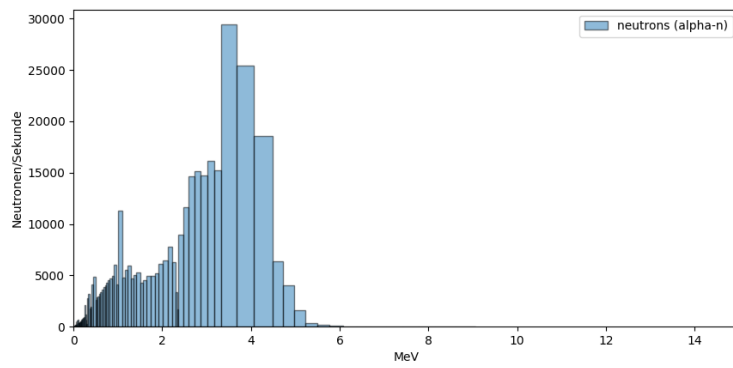
Für verglaste Abfälle wird diese Option verwendet, um zwei Ströme zu kombinieren: einen aus bestrahltem Brennstoff und einen aus der Glasmatrixzusammensetzung. Zunächst wird eine Abbrandrechnung durchgeführt, um die Zusammensetzung des bestrahlten Kernbrennstoffs zu bestimmen. Der nächste Schritt ist der Zerfall des Inventars während der Lagerung des bestrahlten Brennelementes bis zur Wiederaufarbeitung. Dabei werden nur ausgewählte Elemente beibehalten, in diesem Fall sind das Se (99,8 %), Rb, Sr, Te, Cs, Ba, Dy (77,8 %) und U, Np, Pu, Am, Cm (1 %). Die Glasmatrixzusammensetzungen werden dann im dritten Schritt definiert. Im letzten Schritt werden jeweils ein Anteil der Isotope des zweiten (Zerfall) und dritten (Glasmatrix) Schrittes gemischt. Dabei besteht auch die Möglichkeit im Zerfallsschritt eine kürzere Zeit zu wählen, um die Abhängigkeit von der Zeit zu testen, zu der die ausgewählten Isotope mit der Glasmatrix gemischt werden.

Eine genaue Berechnung der Neutronenquelle in einer Glasmatrix erfordert die Kombination der oxidischen Brennstoffzusammensetzungen nach der Bestrahlung mit der definierten Glasmatrix. Die Option „BOROSILICATE“ in der Definition der Neutronenquelle kann in SCALE gewählt werden. Bei dieser Matrixoption wird davon ausgegangen, dass sich die Neutronenquellennuklide in einer Borosilikatmatrix befinden, deren Zusammensetzung in Tab. 4.2 dargestellt ist. In der „Vitrified Waste“ Option in WANIRAS ist diese Einstellung für den Nutzer über die als „default“ hinterlegten Werte voreingestellt.

**Tab. 4.2** Zusammensetzung der Gläser für die Borosilikat Option in ORIGEN/SCALE /WIE 24/ (Elemente mit  $(\alpha,n)$ -Ertrag)

Ordnungszahl	Element	Gewicht %	Atom %
3	Li	2.18	6.296
5	B	2.11	3.913
8	O	46.4	58.138
9	F	0.061	0.0644
11	Na	7.65	6.671
12	Mg	0.49	0.404
13	Al	2.18	1.62
14	Si	25.4	18.13
17	Cl	0.049	0.0277
20	Ca	1.08	0.54
25	Mn	1.83	0.668
26	Fe	8.61	3.091
28	Ni	0.7	0.239
40	Zr	0.88	0.193
82	Pb	0.049	0.0047

Die Quelltermberechnungen für verglaste Abfälle wurden beispielhaft für 100 kg Glasmatrix, basierend auf der beschriebenen Methodik durchgeführt, um das implementierte Konzept in WANIRAS zu testen. Wie in Kap. 1.3.2 beschrieben, wurde dafür ein bestrahltes 16x16 UO<sub>2</sub>-Brennelement als Referenzfall definiert. Nach fünf Jahren Lagerung werden die in der Glaskokille befindlichen Nuklide abgetrennt und mit einer Borosilikatmatrix vermischt, welche dann weitere 40 Jahre gelagert wird. Das resultierende Neutronen-Quelltermpektrum und dessen Anteile sind in Abb. 4.10 zu sehen. Hier ist ersichtlich, dass das Gesamtneutronenspektrum von Neutronen aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen dominiert ist, weswegen die richtige Auswahl der ( $\alpha$ ,n)-Quelle in SCALE hier besondere Bedeutung hat.



**Abb. 4.1** Neutronenspektren von verglasten Abfällen

Anteile von  $(\alpha,n)$  (oben) und Fission (mitte) und gesamt (unten) nach 40 Jahren Lagerzeit.

**Tab. 4.3** Aktivität, Neutronenraten und deren Anteil an der Gesamtneutronenrate über die gesamte Lagerzeit

Zeit (Jahre)	Aktivität (Bq)	Gammaleistung (Watt)	Neutronenrate (1/s)	Neutronenrate aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen (1/s)	Anteil an Gesamtneutronenrate	Fissionsneutronen (1/s)	Anteil an Gesamtneutronenrate
0	1.81E+15	8.04E+01	8.58E+05	3.86E+05	45 %	4.72E+05	55 %
5	1.51E+15	4.61E+01	7.82E+05	3.91E+05	50 %	3.91E+05	50 %
10	1.32E+15	3.63E+01	7.18E+05	3.94E+05	55 %	3.24E+05	45 %
15	1.17E+15	3.15E+01	6.63E+05	3.94E+05	59 %	2.69E+05	41 %
20	1.04E+15	2.79E+01	6.16E+05	3.92E+05	64 %	2.24E+05	36 %
30	8.22E+14	2.21E+01	5.39E+05	3.84E+05	71 %	1.55E+05	29 %
40	6.50E+14	1.76E+01	4.81E+05	3.73E+05	77 %	1.08E+05	23 %

Die Progression der Aktivität und die Neutronenraten sind in Tab. 4.3 dargestellt. Auch hier ist ersichtlich, dass sich der Anteil von ( $\alpha$ ,n)-Neutronen über die gesamte Lagerzeit von 45 % der Gesamtneutronenrate zu 77 % der Neutronenrate verschiebt und damit dominant für die Darstellung des Neutronenflusses ist. Die Aktivität verringert sich in 40 Jahren um ungefähr 1,5 Größenordnungen.

#### 4.4 Ergebnisse der Vergleichsrechnungen

##### 4.4.1 Abbrand und Zerfall von $UO_2$ -Brennelementen

Der Vergleich von Abbrand- und Zerfallsrechnungen zwischen der alten und neuen Rechenkette für  $UO_2$ -Brennelemente wurde anhand eines 16x16 DWR-Brennelementes durchgeführt. Dafür wurde der in Kap. 1.3.1 beschriebene Beispielfall in der alten Rechenkette ausgeführt und im Folgenden mit WANIRAS dupliziert. Um einen Vergleich möglich zu machen, wurde das Inventar in Form von Masse und Aktivität über 40 Jahre verglichen. Ein besonderes Augenmerk lag auf dem Vergleich des Photon- und Neutronenspektrums, da dieses an MCNP<sup>®</sup> zur Dosisberechnung weitergegeben wird. Für einen qualitativen Vergleich wurden Abweichungen in Prozent immer als Differenz der Größe [alt-neu]/(Durchschnitt der Größen) berechnet. Folglich bedeuten positive Abweichungen, dass die betrachtete Größe in der alten Rechenkette einen höheren Wert hat.

Die Inventare der Brennelemente sind beispielhaft für fünf Jahre Lagerung in Abb. 4.2 dargestellt. Abweichungen zwischen der neuen und alten Rechenkette in der Masse der

fünf dominantesten Nuklide sind unter 1 %, mit Ausnahme von U-236, dessen Abweichung -8,7 % beträgt (siehe Tab. 4.4 und Abb. 4.2 markiert in blau).

**Tab. 4.4** Abweichungen zwischen den Rechenkettten nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit (Masse) für die fünf massenreichsten Nuklide, sowie für einige Nuklide, die signifikant zur Strahlenbelastung beitragen

Nuklid	1 Jahr	10 Jahre	40 Jahre
U-238	0,1 %	0,1 %	0,1 %
O-16	0,1 %	0,1 %	0,1 %
U-235	-0,4 %	-0,4 %	-0,5 %
Pu-239	0,1 %	0,1 %	0,1 %
U-236	-8,7 %	-8,7 %	-8,7 %
Cs-137	0.4%	0.4%	0.2%
Rh-103	-0.7%	-0.7%	-0.7%
Sr-90	0.2%	0.0%	-1.9%

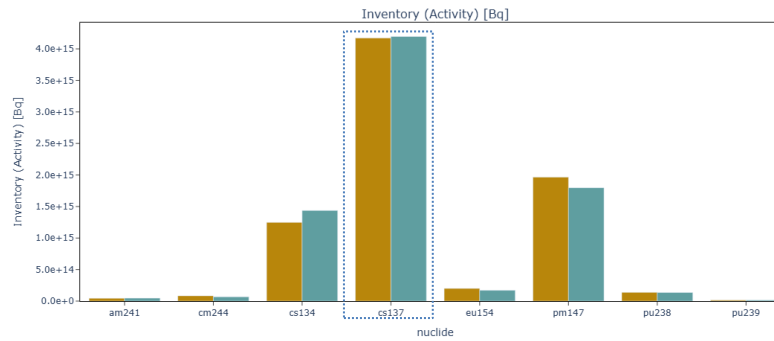
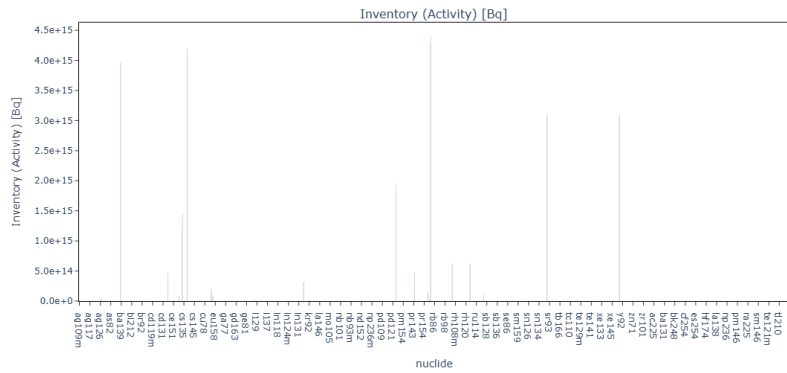
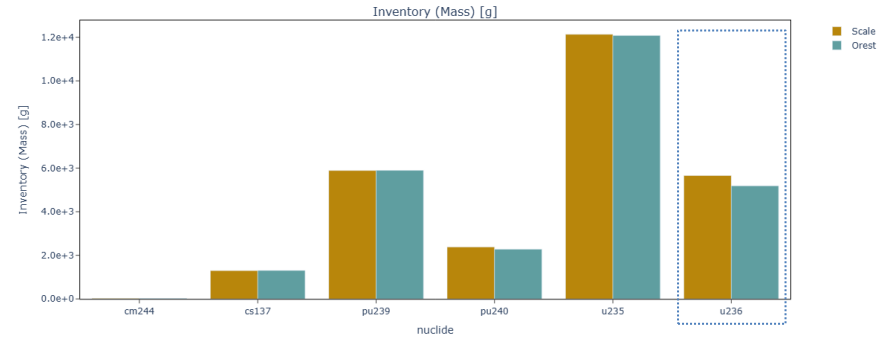
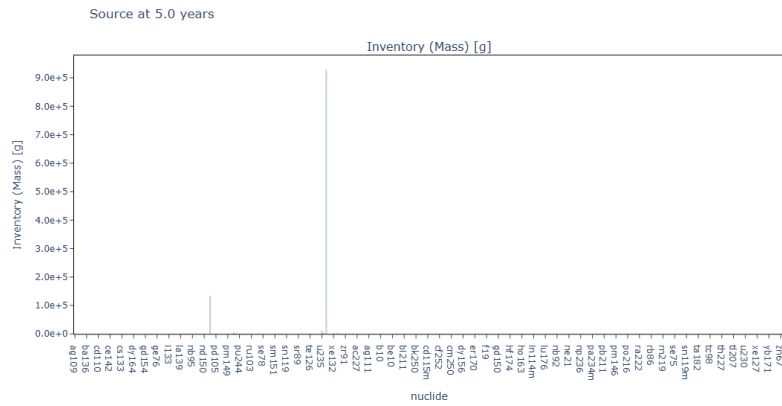
Ähnlich wurde die Abweichung der Aktivität der zehn dominantesten Nuklide betrachtet (siehe Abb. 4.2). Auch hier sind die Abweichungen in der Größenordnung von 1 %. Die größten Abweichungen wurden bei den Nukliden Cs-134 (14 %), Pm-147(-9 %) sowie Pu-241 (3 %) beobachtet. Nach längeren Lagerzeiten gewinnt außerdem Cm-244 an Bedeutung. Bei 40 Jahren ist der Wert, den die alte Rechenkette für dieses Nuklid berechnet, um 22 % kleiner als der in der neuen Rechenkette berechnete Aktivitätswert. Die zeitliche Progression der relevanten Nuklide ist auch in Abb. 4.3 dargestellt.

Für den gesamten Zeitraum der Betrachtung von 40 Jahren wurden außerdem die Progression (siehe Abb. 4.3) und Abweichungen von einigen Größen ausgewertet. Wie in Tab. 4.5 ersichtlich, sind vor allem die Unterschiede bei Zeitpunkt Null (discharge) auffällig, wo die von SCALE berechnete Aktivität um ein fünffaches höher als die entsprechende Größe in OREST ist. Das ist auf Unterschiede in der Handhabung des discharge Zeitpunktes in SCALE zurückzuführen. Im Allgemeinen ist allerdings festzuhalten, dass vor allem die Aktivität nur geringe Abweichungen hat. Die Abweichungen der Emissionsraten von Neutronen und Photonen sind höchstwahrscheinlich auf die Benutzung modernerer Nuklidbibliotheken in SCALE zurückzuführen und werden im Folgenden genauer betrachtet. Das in WANIRAS gekoppelte SCALE 6.2 nutzt eine auf ENDFB VII.1 basierende Zerfallsbibliothek. Die in NGSRC hinterlegten Wirkungsquerschnitte basieren auf einer speziell entwickelten Bibliothek mit Daten aus JEF2.2, ENDFB-VI.7, Jendl3.2 und EAF97.

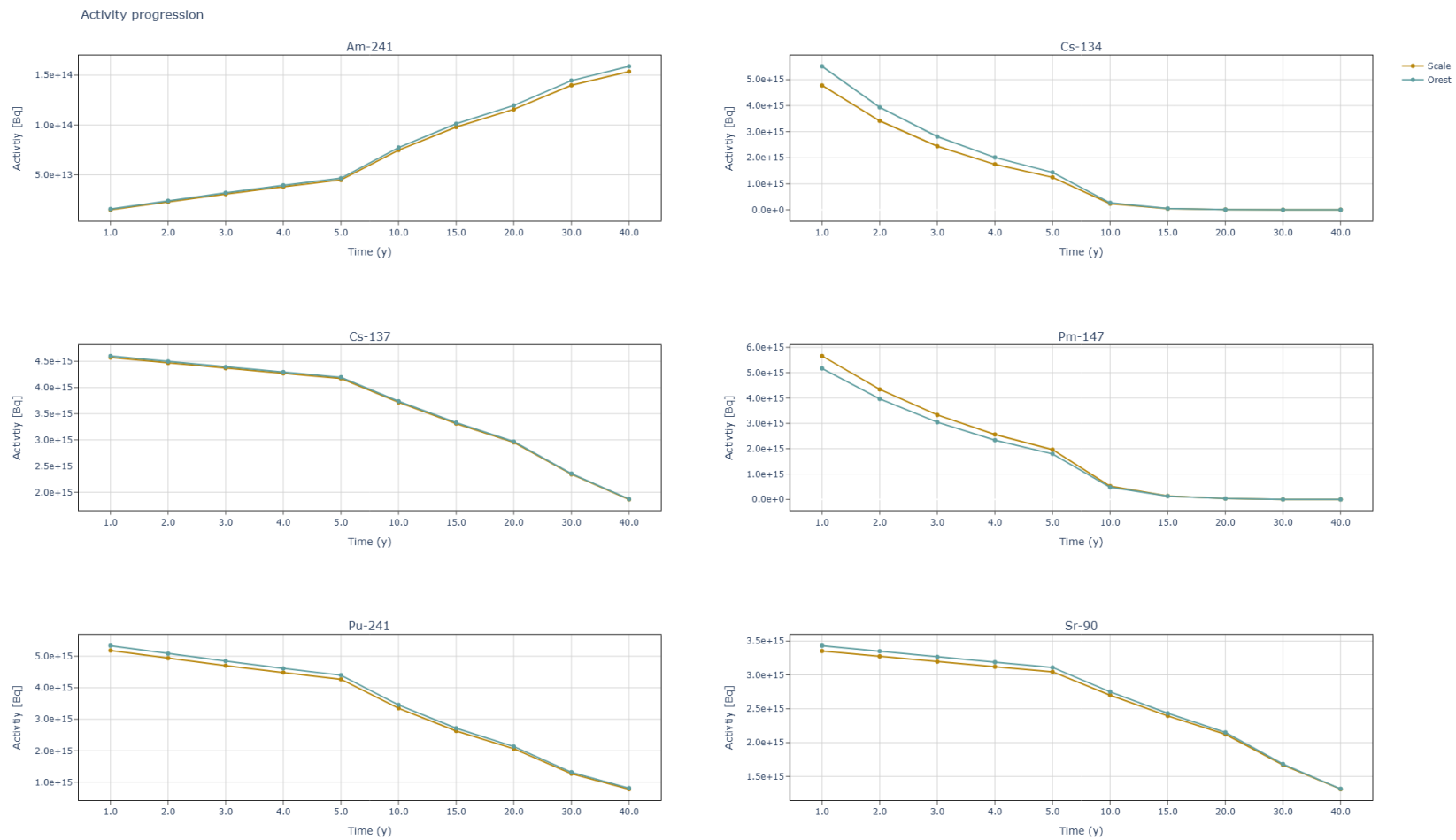
**Tab. 4.5** Abweichungen zwischen den Rechenkettten für die Photonenrate, Neutronenrate (( $\alpha$ ,n)- sowie Fissionskomponente), Aktivität, Masse und Gammaleistung für ein 16x16 DWR-BE mit einem Abbrand von 40 GWd/Mg SM

Zeit (Jahre)	Photonenrate (1/s)	Neutronenrate (1/s)	Neutronenrate aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen (1/s)	Fissionsneutronen (1/s)	Aktivität (Bq)	Masse (g)	Gammaleistung (Watt)
0	9 %	-200 %	3 %	-11 %	-128 %	0 %	-172 %
1	-18 %	-15 %	2 %	-16 %	1 %	0 %	8 %
2	-16 %	-17 %	1 %	-17 %	1 %	0 %	9 %
3	-13 %	-17 %	0 %	-18 %	1 %	0 %	9 %
4	-12 %	-18 %	0 %	-18 %	1 %	0 %	8 %
5	-11 %	-17 %	0 %	-18 %	1 %	0 %	8 %
10	-15 %	-17 %	2 %	-18 %	1 %	0 %	6 %
15	-17 %	-17 %	3 %	-18 %	1 %	0 %	5 %
20	-17 %	-17 %	4 %	-18 %	1 %	0 %	5 %
30	-18 %	-16 %	6 %	-18 %	1 %	0 %	5 %
40	-18 %	-15 %	7 %	-17 %	1 %	0 %	5 %

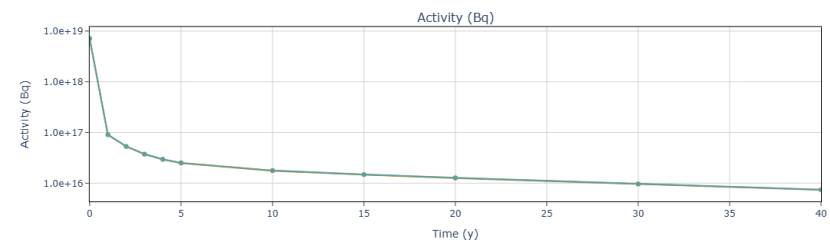
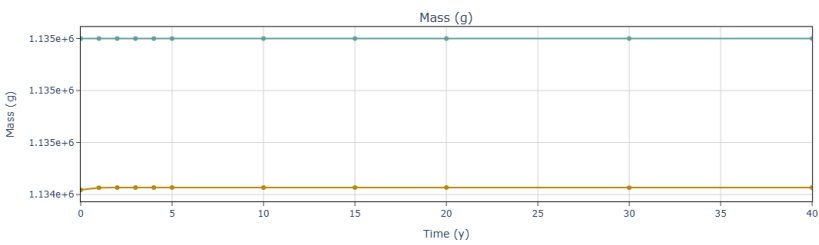
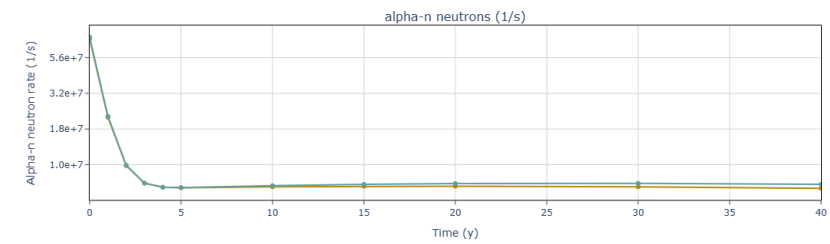
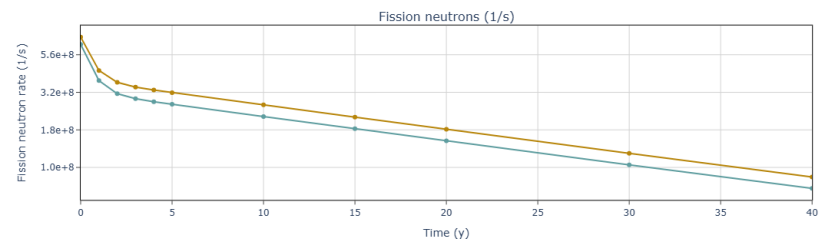
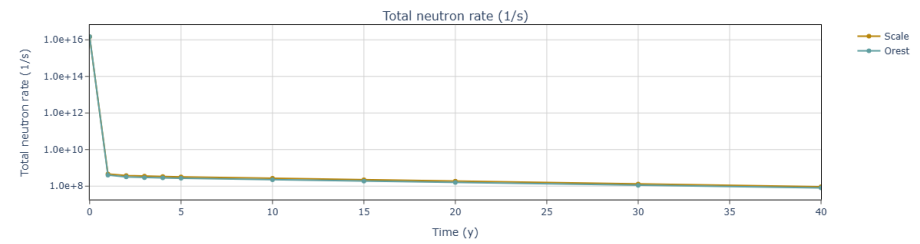
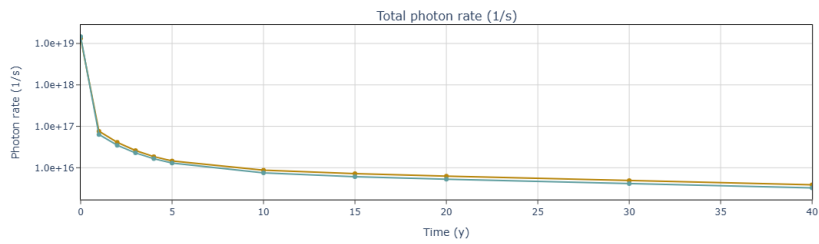




**Abb. 4.2** Massen und Aktivitätsinventar eines 16x16 DWR-BE (40GWd) und Vergleich der Rechencodes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette nach fünf Jahren Abklingzeit



**Abb. 4.3** Zeitlicher Verlauf Aktivität von sechs Nukliden im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette



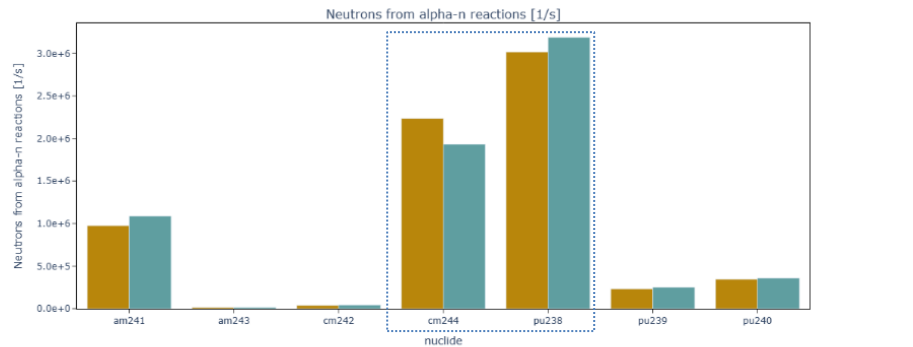
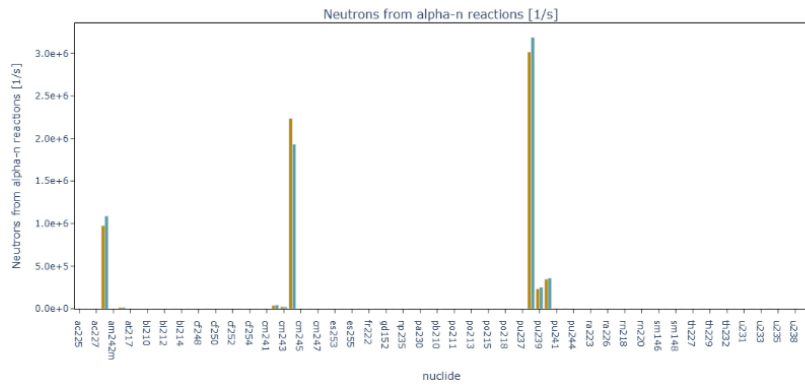
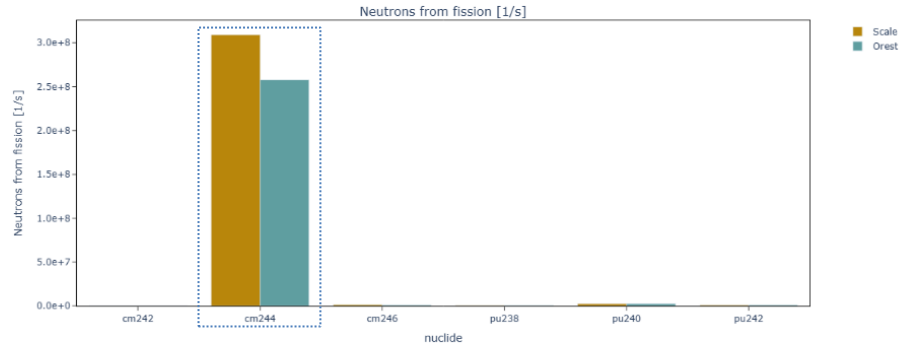
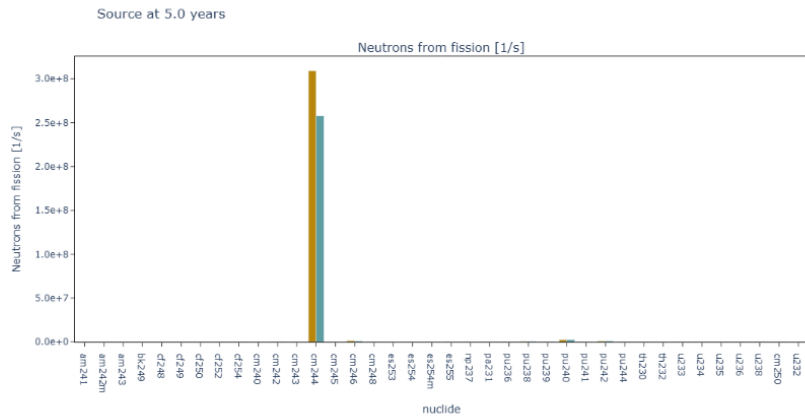
**Abb. 4.4** Zeitlicher Verlauf von Photonenrate, Neutronenrate, Rate von Fissionsneutronen, Rate von ( $\alpha,n$ )- Neutronen, Masse und Aktivität im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette

#### 4.4.1.1 Neutronen

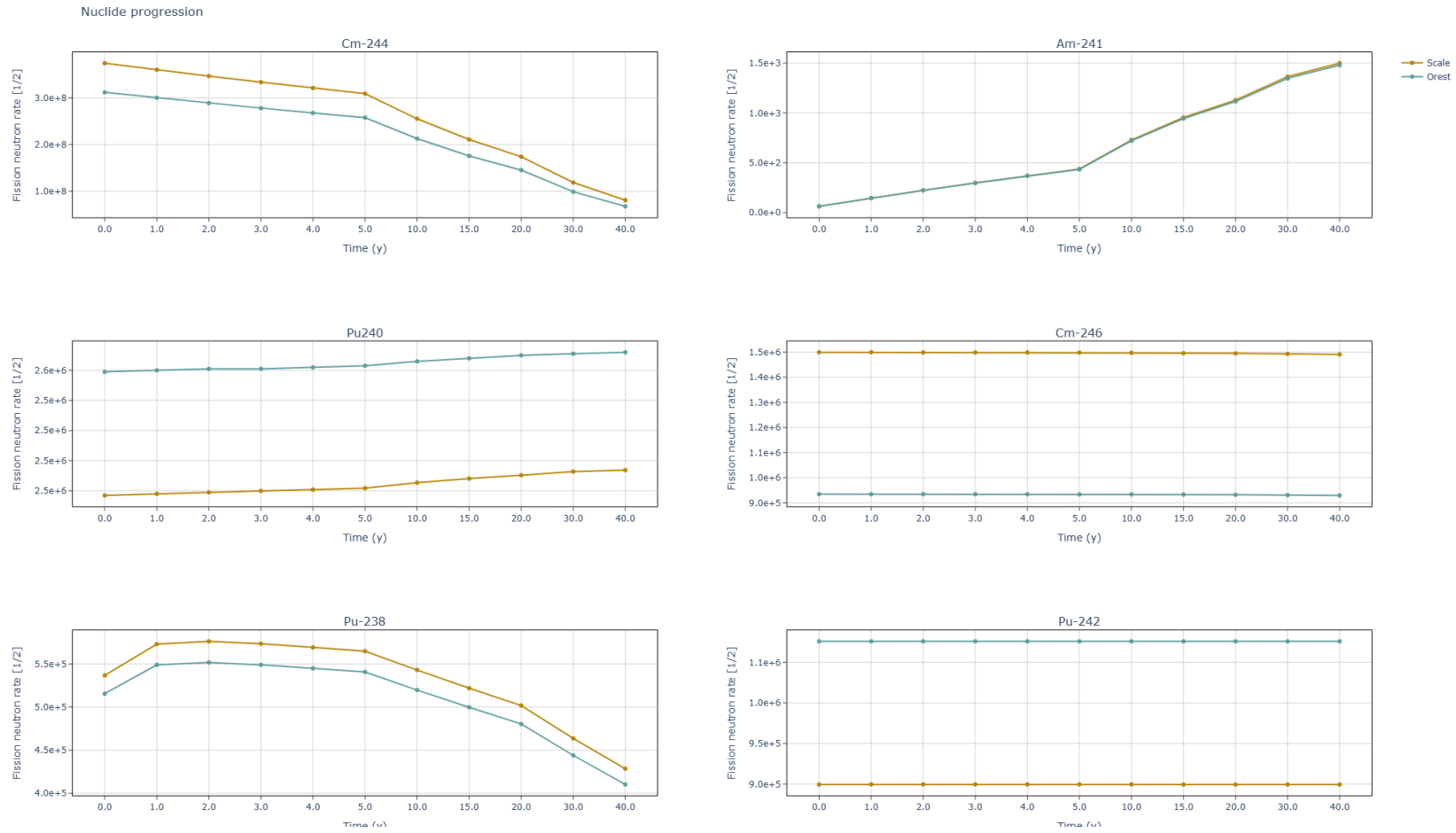
Die dominanten Anteile des Neutronenflusses sind beispielhaft für fünf Jahre Lagerung in Abb. 4.5 für den Fissionsanteil sowie den ( $\alpha$ ,n)-Anteil des Neutronenspektrums dargestellt. Hierbei ist zu beachten, dass der Anteil der Neutronen aus Fission das gesamte Spektrum deutlich dominiert.

Abweichungen zwischen der neuen und alten Rechenkette im Neutronenfluss der dominantesten Nuklide aus Fissionsreaktionen sind hier deutlicher zu sehen, konzentrieren sich aber auf spezielle Nuklide. Die größten Abweichungen sind für Cm-246 zu beobachten und liegen bei -46 % (die SCALE Ergebnisse sind größer als die der alten Rechenkette mit OREST). Für Cm-244, welches ab dem dritten Lagerjahr über 90 % Anteil am Neutronenfluss hat, wird eine Abweichung von -18 % zwischen alter und neuer Rechenkette beobachtet. Ähnlich verhält es sich mit dem weiteren Curium Isotop Cm-242. Da eine bekannte Schwäche für Curium in den Berechnungsmethoden der alten Rechenkette bekannt war, kann von einer Verbesserung durch die Nutzung neuer Wirkungsquerschnittsbibliotheken in SCALE ausgegangen werden. Im Kontext der Bedeutung von Cm-244 für den Neutronenfluss wird dadurch die in Tab. 4.5 aufgezeigte Abweichung im Neutronenfluss erklärt. Im Gegenzug zu Curium, welches in der neuen Rechenkette einen höheren Neutronenfluss produziert, haben die zwei Plutoniumisotope Pu-240 und Pu-242, deren Beitrag zum Neutronenfluss ebenso zu den fünf dominantesten gehört, eine Abweichung von 3 % und 18 % respektive. Die zeitliche Progression der relevanten Nuklide für den gesamten Zeitraum der Betrachtung von 40 Jahren ist in Abb 4.6 dargestellt.

Für Neutronen aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen (siehe Abb. 4.5) können die Abweichungen für Curium und Plutonium zwischen SCALE und OREST ebenfalls beobachtet werden. Die größten Abweichungen weist Cm-244 mit -15 % auf, gefolgt von Cm-243 mit -12 %. Pu-238, Pu-239 und Pu-240 haben respektive 6 %, 9 % und 4 % Abweichung. Das heißt, die neue Rechenkette berechnet einen kleineren Anteil von Neutronen aus diesen Reaktionen. Am-241 hat eine Abweichung von 11 %.



**Abb. 4.5** Anteil des Zerfalls von Nukliden an der Neutronenproduktion eines 16x16 DWR-BE (40 Gwd/MgSM) und Vergleich der Rechenkodes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette (Abklingzeit fünf Jahre)



**Abb 4.6** Zeitlicher Verlauf der Neutronenrate für die sechs dominantesten Nuklide im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette

#### 4.4.1.2 Photonen

In Tab. 4.5 ist ersichtlich, dass die Photonenrate eine Abweichung von -11 % bis -18 % hat. Diese Differenzen der Photonenrate zwischen alter und neuer Rechenkette sind komplexer nachzuvollziehen als Neutronenraten, da SCALE keinen nach Nukliden aufgeschlüsselten Output des Photonenflusses anbietet. Alternativ kann man hier die Gammaleistung in Watt sowie die Masse und Aktivität der einzelnen Nuklide betrachten, um Aufschluss über die zum Photonenfluss beitragenden Nuklide zu bekommen. Die am prominentesten zur Gammaleistung beitragenden Nuklide sind in Tab. 4.6 aufgeführt. Dabei ist zu beachten, dass das erste Nuklid in der Liste (für 1 Jahr, für 10 und 40 Jahre) einen Großteil der Gammaleistung beiträgt, Cs-134 50 % für ein Jahr, Ba-137m 79 % für zehn Jahre und Ba-137m 98 % für 40 Jahre Lagerzeit. Die Abweichungen für diese Nuklide zwischen den zwei Codes sind mit 14 % für Cs-134 und 5 bis 6 % für Ba-137m verhältnismäßig gering.

**Tab. 4.6** Abweichungen zwischen den Rechenketten für die fünf Nuklide, die am meisten zur Gammaleistung beitragen nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit

1 Jahr		10 Jahre		40 Jahre	
Nuklid	Abweichung	Nuklid	Abweichung	Nuklid	Abweichung
<b>Cs-134</b>	<b>14,3 %</b>	<b>Ba-137m</b>	<b>5,5 %</b>	<b>Ba-137m</b>	<b>5,3 %</b>
Ba-137m	5,5 %	Cs-134	14,0 %	Eu-154	-15,6 %
Rh-106	-0,3 %	Eu-154	-15,5 %	Am-241	12,0 %
Nb-95	3,3 %	Sb-125	-13,8 %	Y-90	unter dem cutoff in SCALE
Zr-95	0,2 %	y-90	unter dem cutoff in SCALE	Cs-137	nicht unter den Top 5 in SCALE

Auffallend ist allerdings, dass einige der üblicherweise betrachteten Nuklide signifikante Abweichungen zwischen den beiden Codes haben (siehe Abb. 4.7). Die Gammaleistung von Cs-137 und Y-90 ist in SCALE mehrere Größenordnungen niedriger als in OREST berechnet, und Sr-90 liegt sogar unter dem SCALE Cutoff.

Bis auf Ba-137m, das per Gammazerfall zerfällt, zerfallen alle hier diskutierten Nuklide durch Beta-Zerfall. Die Photonenemissionen kommen folgendermaßen aus isometrischen Transitionen der Kerne, die dem Beta-Zerfall folgen. Es ist daher anzunehmen, dass dieser Effekt auf die Reaktionsdaten der intern genutzten Bibliotheken in den

respektiven Codes zurückzuführen ist. Ein Vergleich mit einem weiteren Zerfallscode und einem Benchmark ist hier in Zukunft möglich, um diesen Effekt genau zu charakterisieren.

Im, in der alten Rechenkette gekoppelten Programm, NGSRC können die nuklidspezifischen Anteile am Photonenfluss für einzelne Zeitpunkte ausgegeben werden. Ein Vergleich der Massen dieser Nuklide kann weiteren Aufschluss über die Unterschiede der hinterlegten Zerfallsdaten geben. In Tab. 4.7 sind die Abweichungen der Masse (in g) zwischen den Rechenkett für Nuklide, die signifikant zur Photonenemission beitragen tabelliert. Die größten Differenzen werden mit -22 % für Sb-125 festgestellt.

**Tab. 4.7** Abweichungen zwischen den Rechenkett für Nuklide, die signifikant zur Photonenemission beitragen nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit (Masse)

Nuklid	1 Jahr	10 Jahre	40 Jahre
Ba-137m	unter dem cutoff in SCALE		
Y-90	2,6 %	2,1 %	0,5 %
Rh-106	unter dem cutoff in SCALE		
Cs-134	14,1 %	13,9 %	13,1 %
Sb-125	-12,7 %	-14,8 %	-22,1 %

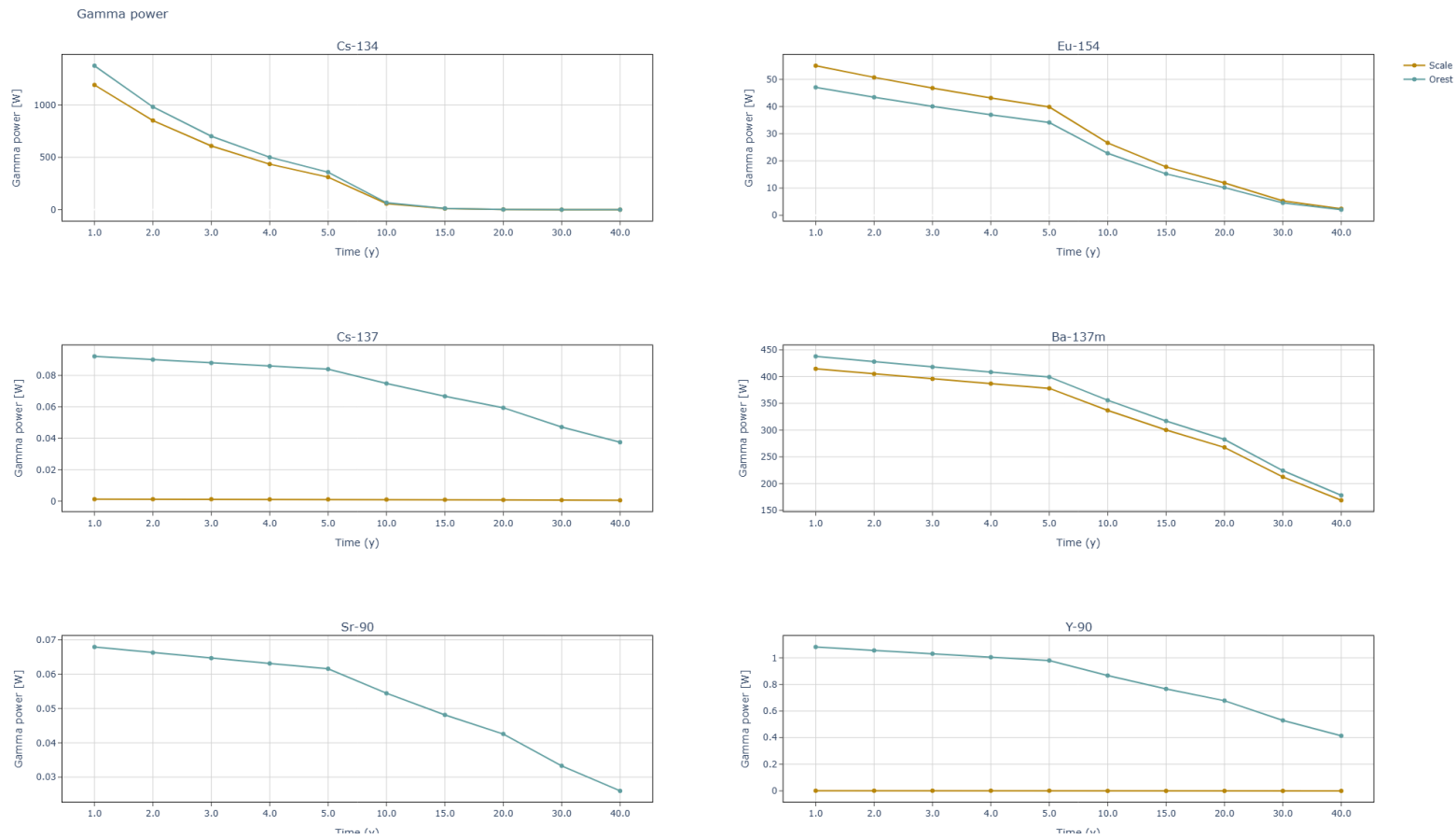
Für Brennelemente fallen diese Divergenzen zwischen den Rechenkett allerdings nicht ins Gewicht, da die Gammaleistung hauptsächlich durch Ba-137m getragen wird, für das die Abweichungen zwischen den verglichenen Codes bei ca. 5 % liegen, wodurch auch der in Tab. 4.5 beobachtete Unterschied in der Gammaleistung zustande kommt. Hier kommt außerdem hinzu, dass die Aktivität von Cs-137, und somit auch Ba-137m, welches sich im Gleichgewicht mit Cs-137 befindet, in OREST größer als in SCALE ist (siehe Abb. 4.14). Wenn diese Zerfallskette allerdings genauer betrachtet wird, stellt sich heraus, dass die Differenz in Aktivität nicht gleich für diese beiden Nuklide ist. Wie in Tab. 4.8 dargestellt ist, ist es wahrscheinlich, dass die Berechnung des säkularen Gleichgewichtes dieser zwei Nuklide basierend auf unterschiedlichen Bibliotheken durchgeführt wird. Inwiefern diese Divergenzen für Quellen, die größtenteils aus Cäsium bestehen, relevant sind, kann bei den Vergleichsrechnungen für LAW/MAW Abfälle in Kap. 5 betrachtet werden.



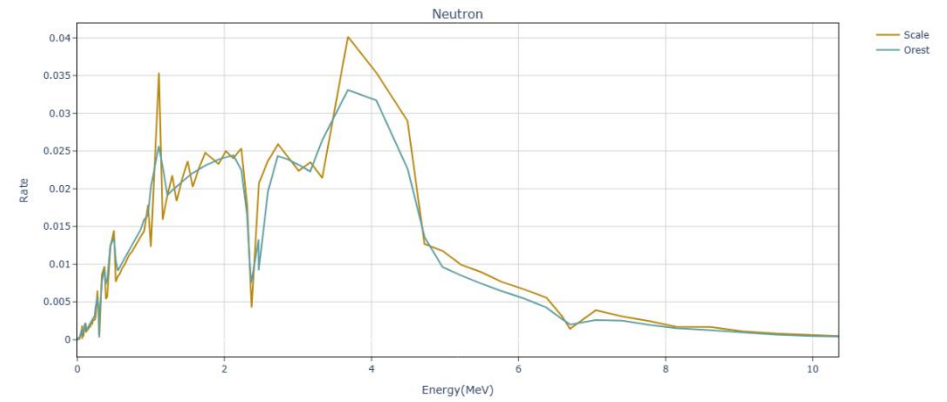
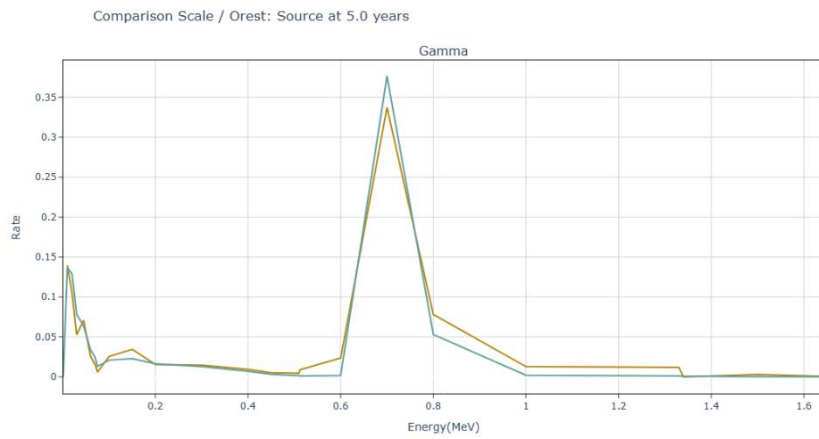
**Tab. 4.8** Abweichungen zwischen den Rechenkettten für Cs-137 und Ba-137m nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit (Aktivität)

	1 Jahr			10 Jahre			40 Jahre		
	OREST $\times 10^{15}$	SCALE $\times 10^{15}$	% Diff,	OREST $\times 10^{15}$	SCALE $\times 10^{15}$	% Diff	OREST $\times 10^{15}$	SCALE $\times 10^{15}$	% Diff,
Cs-137	4,60	4,57	0,6 %	3,74	3,72	0,5 %	1,87	1,86	0,4 %
Ba-137m	4,35	4,33	0,3 %	3,53	3,52	0,2 %	1,77	1,76	0,1 %

Die Abb. 4.8 zeigt den Vergleich der normierten resultierenden Spektren, die an den nächsten Schritt in der Rechenkette, die Dosisberechnung, weitergegeben werden. Trotz der „glatteren“ Kurven der alten Rechenkette ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Energien vergleichbar, was im Folgenden auch zu guter Übereinstimmung der Ergebnisse in der Dosisberechnung führt.



**Abb. 4.7** Zeitlicher Verlauf der Gammaleistung für sechs Nuklide im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette



**Abb. 4.8** Photonen und Neutronenspektrum eines 16x16 DWR-BE (40 GWd/MgSM) und Vergleich der Rechencodes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette (5 Jahre Lagerzeit)

#### 4.4.2 Niedrig- und Hochabbrand-Brennelemente

Um den Einfluss der veränderten Recheninfrastruktur besser zu quantifizieren, wurden außerdem die Spezialfälle von Niedrig- (5 GWd/MgSM) und Hochabbrand-Brennelementen (65 GWd/MgSM) verglichen.

In Tab. 4.9 und Tab. 4.10 sind die Differenzen der Rechenmethoden für Niedrig- und Hochabbrand-Brennelemente respektive quantifiziert. Im Vergleich zu Durchschnitts- oder Hochabbrand-Brennelementen ist ersichtlich, dass die Differenz der Neutronenrate für Niedrigabbrand-Brennelemente deutlich geringer ist. Dies ist auf das dominante Nuklid, welches zur Neutronenrate beiträgt, zurückzuführen. Im Vergleich zum 40 GWd/MgSM Fall ist dies für Brennelemente mit 5 GWd/MgSM Abbrand nicht Cm-244, sondern Pu-240 (siehe Abb. 4.10, markiert in blau), auch wenn der Massenanteil deutlich geringer ist (siehe Abb. 4.9, markiert in blau). In der neuen Rechenkette (SCALE) wird der Fissionsneutronenfluss ausgehend von Pu-240 im Vergleich zur alten Rechenkette (OREST) als geringer berechnet. Diese Tendenz in der neuen Rechenkette wurde auch für den Abbrand von 40 GWd/MgSM beobachtet. Diese Divergenz des Neutronenflusses zwischen den zwei Rechencodes, ihre Abhängigkeit von den Nukliden Pu-240 und Cm-244 und deren gegenläufige Tendenz in SCALE und OREST ist über die Gesamtlagerzeit zu beobachten, illustriert anhand der Fissionsneutronenrate (siehe Abb. 4.11).

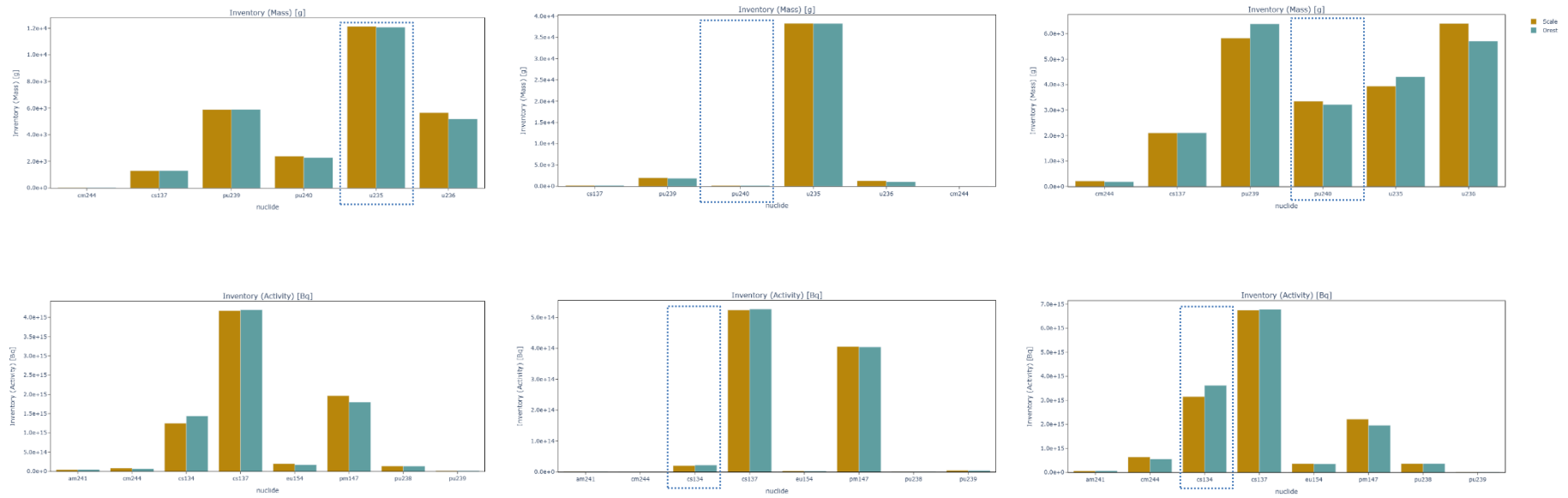
Auch für die restlichen Größen und Nuklide sind Trends wie für die Durchschnitts- abbrand-Brennelemente zu beobachten. Eine Ausnahme bildet der zeitliche Verlauf der Neutronenproduktion durch ( $\alpha$ ,n)Zerfall. In Abb. 4.12 sieht man hier einen anfänglichen Abfall und darauffolgenden Anstieg der Neutronenrate bei den Niedrigabbrand-Brennelementen. Das ist auf das entstehende Am-241 zurückzuführen, welches in diesem Fall einen proportional größeren Anteil hat (siehe Abb. 4.10, markiert in blau).

**Tab. 4.9** Abweichungen zwischen den Rechenkettten für ein 16x16 DWR-BE mit einem Abbrand von 5 GWd/MgSM

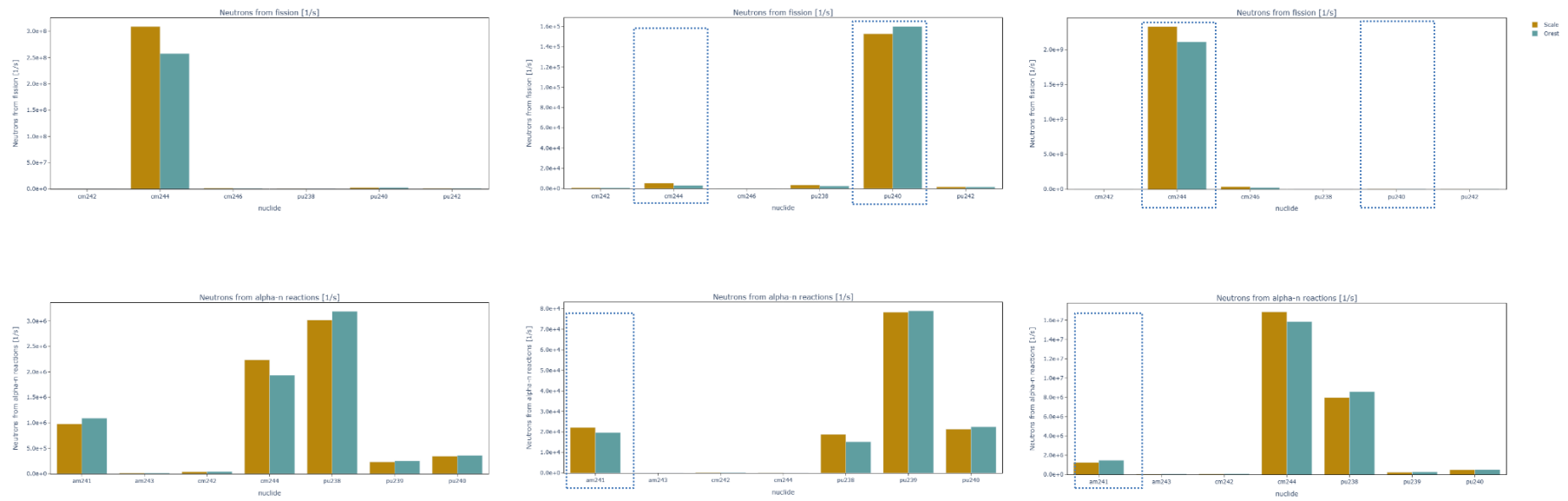
Zeit (Jahre)	Photonenrate (1/s)	Neutronenrate (1/s)	Neutronenrate aus ( $\alpha,n$ )-Reaktionen (1/s)	Fissionsneutronen (1/s)	Aktivität (Bq)	Masse (g)
0	11 %	-200 %	-14 %	-26 %	-138 %	0 %
1	-25 %	-11 %	-7 %	-14 %	0 %	0 %
2	-26 %	-3 %	-3 %	-3 %	0 %	0 %
3	-24 %	-1%	-3 %	1 %	0 %	0 %
4	-21 %	0 %	-3 %	2 %	0 %	0 %
5	-20 %	0 %	-3 %	2 %	0 %	0 %
10	-19 %	0 %	-4 %	3 %	1 %	0 %
15	-19 %	0 %	-4 %	3 %	1 %	0 %
20	-19 %	-1 %	-4 %	3 %	0 %	0 %
30	-20 %	-1 %	-5 %	4 %	0 %	0 %
40	-20 %	-1 %	-5 %	4 %	0 %	0 %

**Tab. 4.10** Abweichungen zwischen den Rechenkettten für ein 16x16 DWR-BE mit einem Abbrand von 65 GWd/MgSM

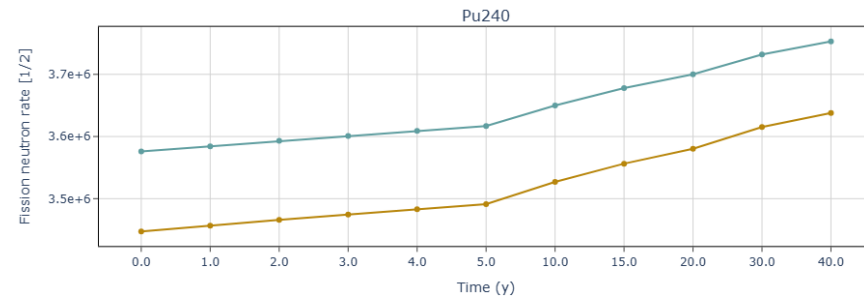
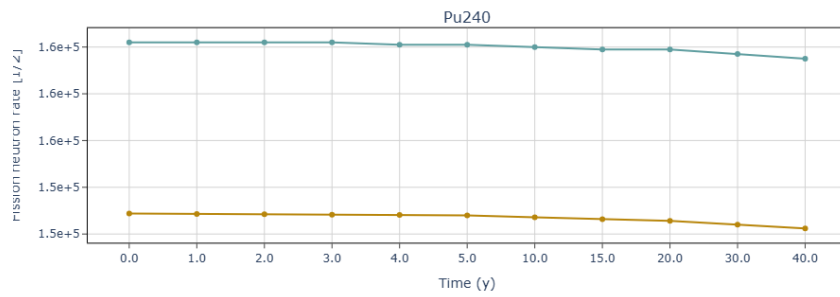
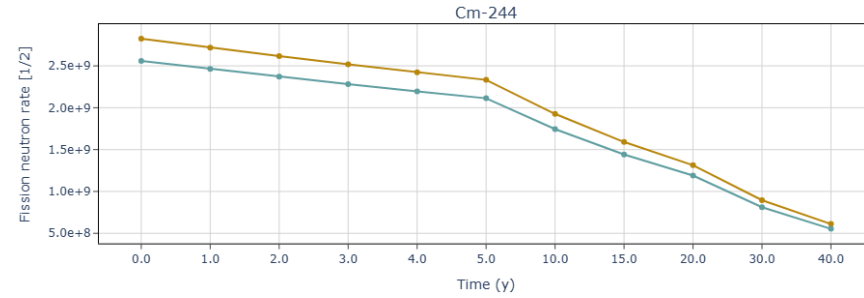
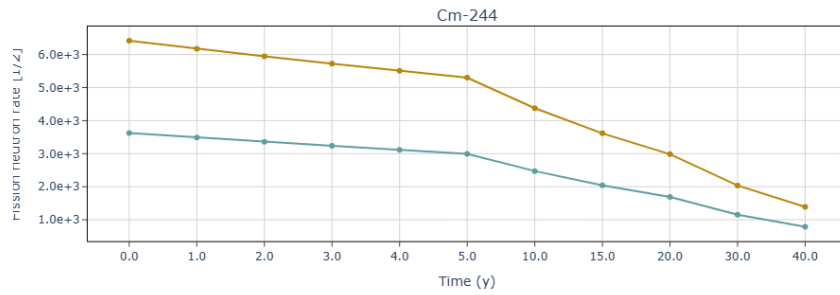
Zeit (Jahre)	Photonenrate (1/s)	Neutronenrate (1/s)	Neutronenrate aus ( $\alpha,n$ )-Reaktionen (1/s)	Fissionsneutronen (1/s)	Aktivität (Bq)	Masse (g)
0	8 %	-200 %	7 %	-10 %	-123 %	0 %
1	-16 %	-11 %	4 %	-11 %	2 %	0 %
2	-13 %	-11 %	1 %	-11 %	2 %	0 %
3	-10 %	-11 %	0 %	-11 %	2 %	0 %
4	-8 %	-11 %	0 %	-11 %	2 %	0 %
5	-7 %	-11 %	0 %	-11 %	2 %	0 %
10	-12 %	-10 %	1 %	-11 %	2 %	0 %
15	-16 %	-10 %	2 %	-11 %	2 %	0 %
20	-16 %	-10 %	3 %	-11 %	1 %	0 %
30	-17 %	-11 %	5 %	-11 %	1 %	0 %
40	-17 %	-11 %	6 %	-11 %	1 %	0 %



**Abb. 4.9** Vergleich der Inventare von 16x16 DWR-BE mit 40 (links), 5 (mitte) und 65 (rechts) GWd/MgSM nach 5 Jahren Lagerzeit

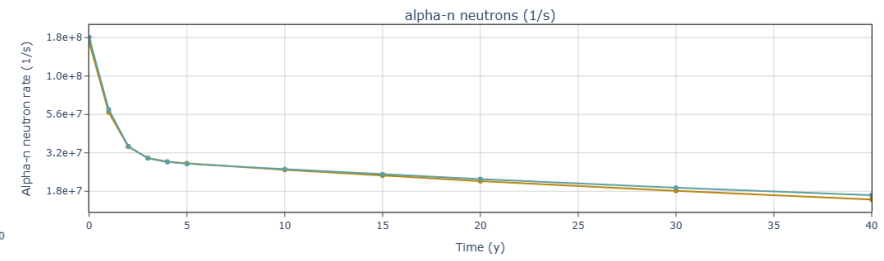
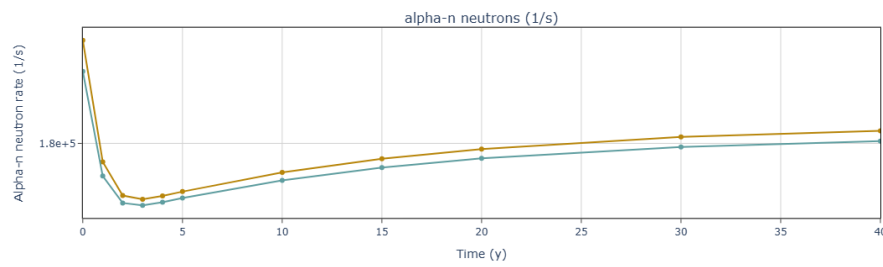


**Abb. 4.10** Vergleich der dominanten Nuklide am Neutronenfluss von 16x16 DWR-BE mit 40 (links), 5 (mitte) und 65 (rechts) GWd/MgSM nach 5 Jahren Lagerzeit



**Abb. 4.11** Zeitlicher Verlauf der Fissionsneutronenrate für Cm-244 und Pu-240 im Vergleich der Codes der alten (Orest) und neuen (SCALE) Rechenkette für 5 (links) und 65 (rechts) GWd/MgSM Abbrand





**Abb. 4.12** Zeitlicher Verlauf der Rate von  $(\alpha,n)$ -Neutronen im Vergleich der Codes der alten (Orest) und neuen (SCALE) Rechenkette. DWR 16x16 Brennelementen mit 5 (links) und 65 (rechts) GWd/MgSM Abbrand

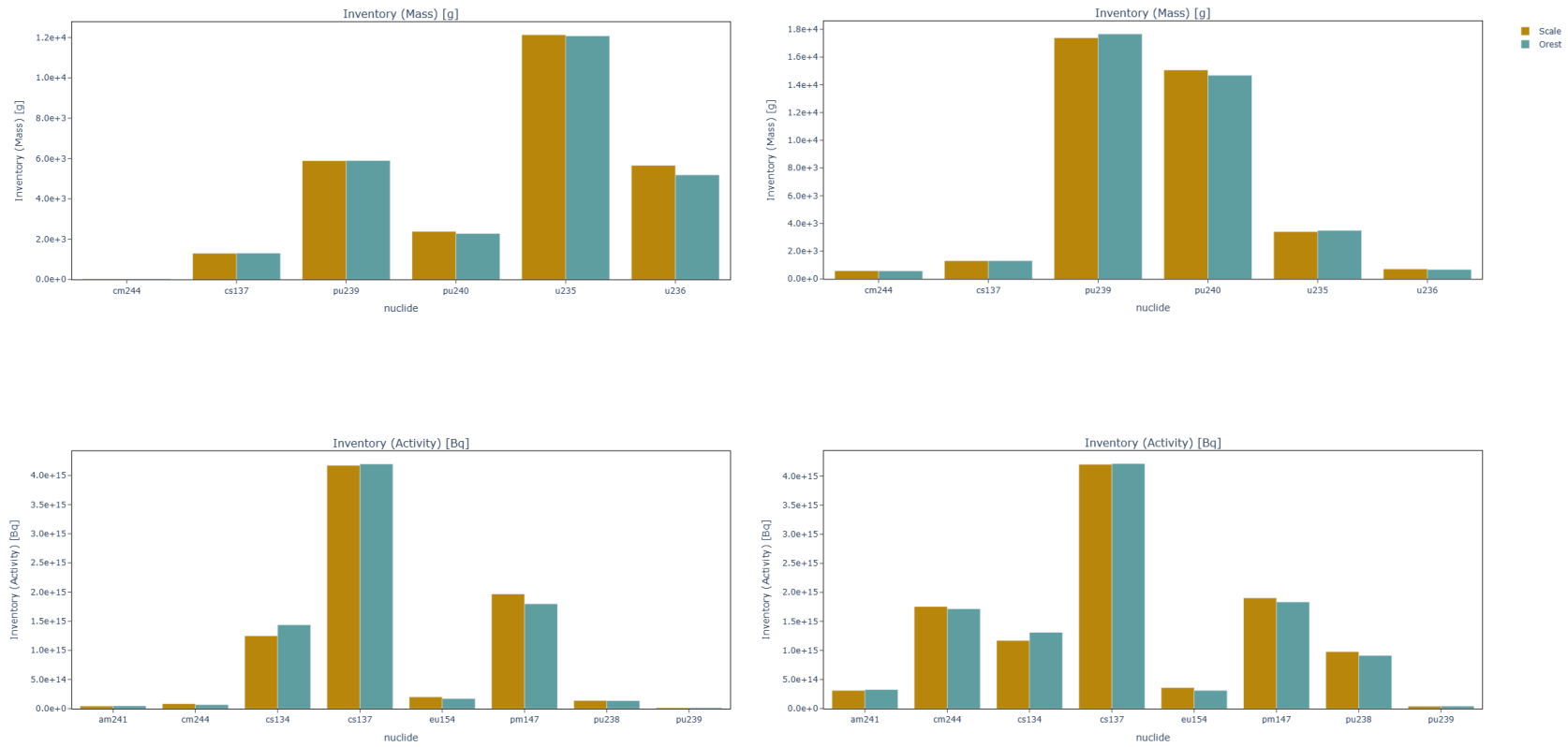
#### 4.4.3 Abbrand und Zerfall von MOX-Brennelementen

Um den Einfluss der verschiedenen in SCALE möglichen Methoden zur Abbrandberechnung zu quantifizieren, wurden für DWR auch MOX-Brennelemente berechnet und mit den Ergebnissen der alten Rechenkette verglichen. Hierfür wird das SCALE-Modul ARP in Kombination mit ORIGAMI verwendet, da das für UO<sub>2</sub> genutzte Modul ORIGAMI aktuell keine MOX-Brennstoffe berechnen kann (siehe auch Kap. 1.3.1). WANIRAS ist so konfiguriert, dass mit der Auswahl von MOX-Brennelementen das passende Modul von SCALE angesteuert werden kann.

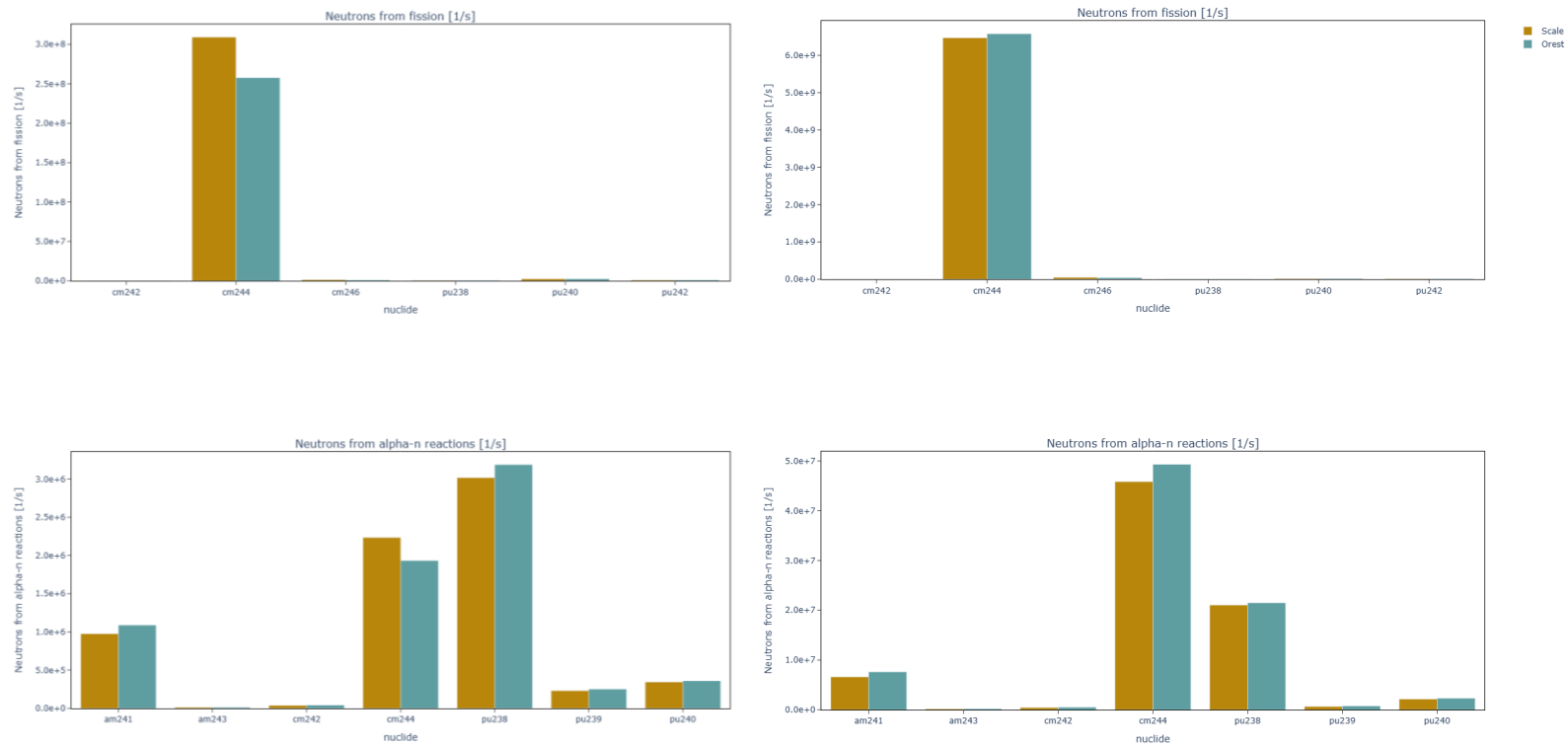
In Tab. 4.11 sind die Differenzen der Rechenmethoden für MOX und DWR-Brennelemente über den Betrachtungszeitraum von 40 Jahren quantifiziert. Nuklidspezifische Massen- und Aktivitätsdifferenzen zwischen den Rechenkettens sind vergleichbar mit denen für UO<sub>2</sub> (siehe Abb. 4.13). Wie auch bei den Uranoxid-Brennelementen ist die mit SCALE durch WANIRAS berechnete Photonenrate höher als in der alten Rechenkette. Über WANIRAS wird eine um 2 % niedrigere Neutronenrate berechnet, die auf die höhere Neutronenausbeute von Cm-244 in OREST zurückgeführt werden kann (siehe Abb. 4.14). Im Allgemeinen sind für die betrachteten Größen die Differenzen und zeitlichen Verläufe vergleichbar mit denen der DWR-Brennelemente.

**Tab. 4.11** Abweichungen zwischen den Rechenkettens für ein 16x16 DWR-MOX-BE mit einem Abbrand von 40 GWd/MgSM

Zeit (Jahre)	Photonenrate (1/s)	Neutronenrate (1/s)	Neutronenrate aus (α,n)- Reaktionen (1/s)	Fissionsneutronen (1/s)	Aktivität (Bq)
0	11 %	-200 %	7 %	0 %	-127 %
1	-21 %	1 %	7 %	1 %	1 %
2	-19 %	2 %	7 %	1 %	1 %
3	-16 %	2 %	7 %	2 %	2 %
4	-13 %	2 %	7 %	2 %	2 %
5	-12 %	2 %	7 %	2 %	2 %
10	-12 %	2 %	7 %	2 %	2 %
15	-14 %	2 %	7 %	2 %	2 %
20	-14 %	2 %	7 %	2 %	2 %
30	-14 %	2 %	8 %	1 %	2 %
40	-14 %	2 %	8 %	1 %	1 %



**Abb. 4.13** Vergleich der Inventare von 16x16 DWR-UO<sub>2</sub>-BE (links) und 16x16 MOX-BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit



**Abb. 4.14** Vergleich der dominanten Nuklide am Neutronenfluss von 16x16 DWR-UO<sub>2</sub>-BE (links) und 16x16 MOX-BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit

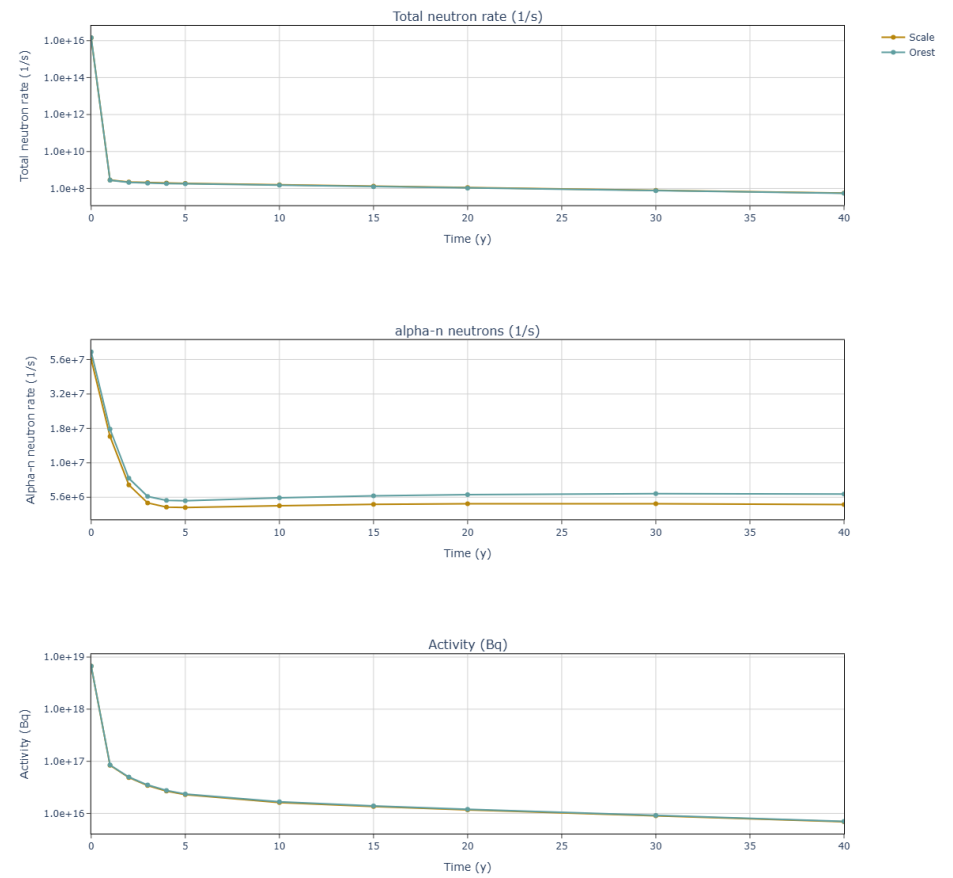
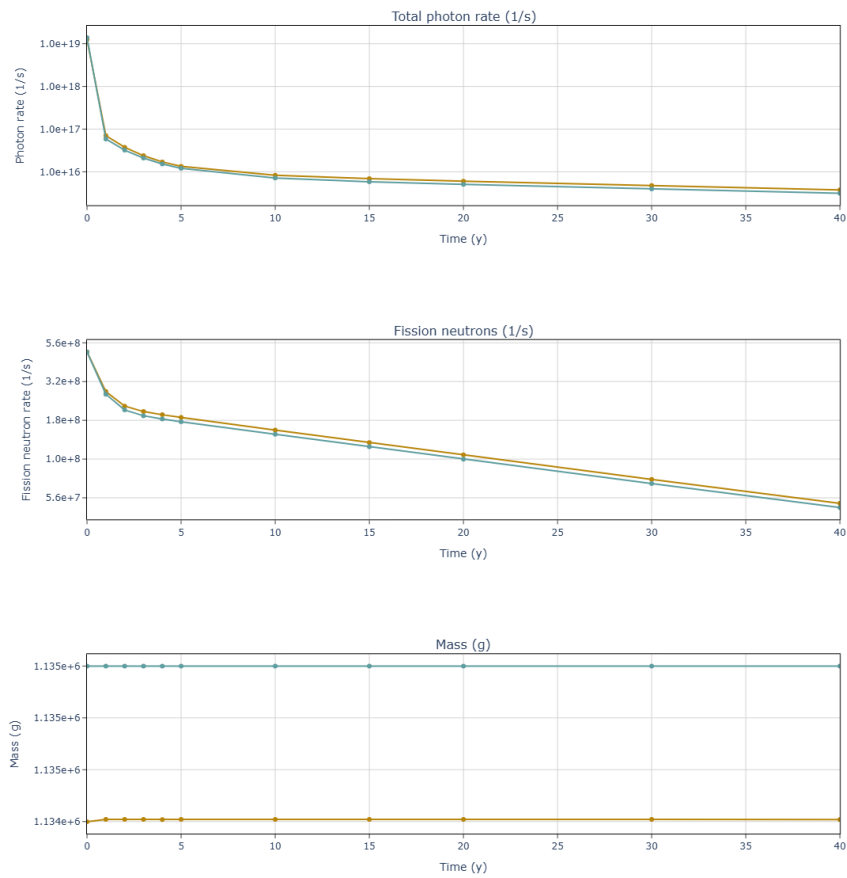
#### 4.4.4 Spezialfall SWR Brennelemente – Uranoxid

Um den Einfluss der verschiedenen Abbrandbibliotheken besser zu quantifizieren, wurden außerdem die Spezialfälle von UO<sub>2</sub> und MOX-Brennelementen im Siedewasserreaktor verglichen. Hierfür wurden in SCALE mitgelieferte Reaktorbibliotheken verwendet (siehe Kap. 1.3.1).

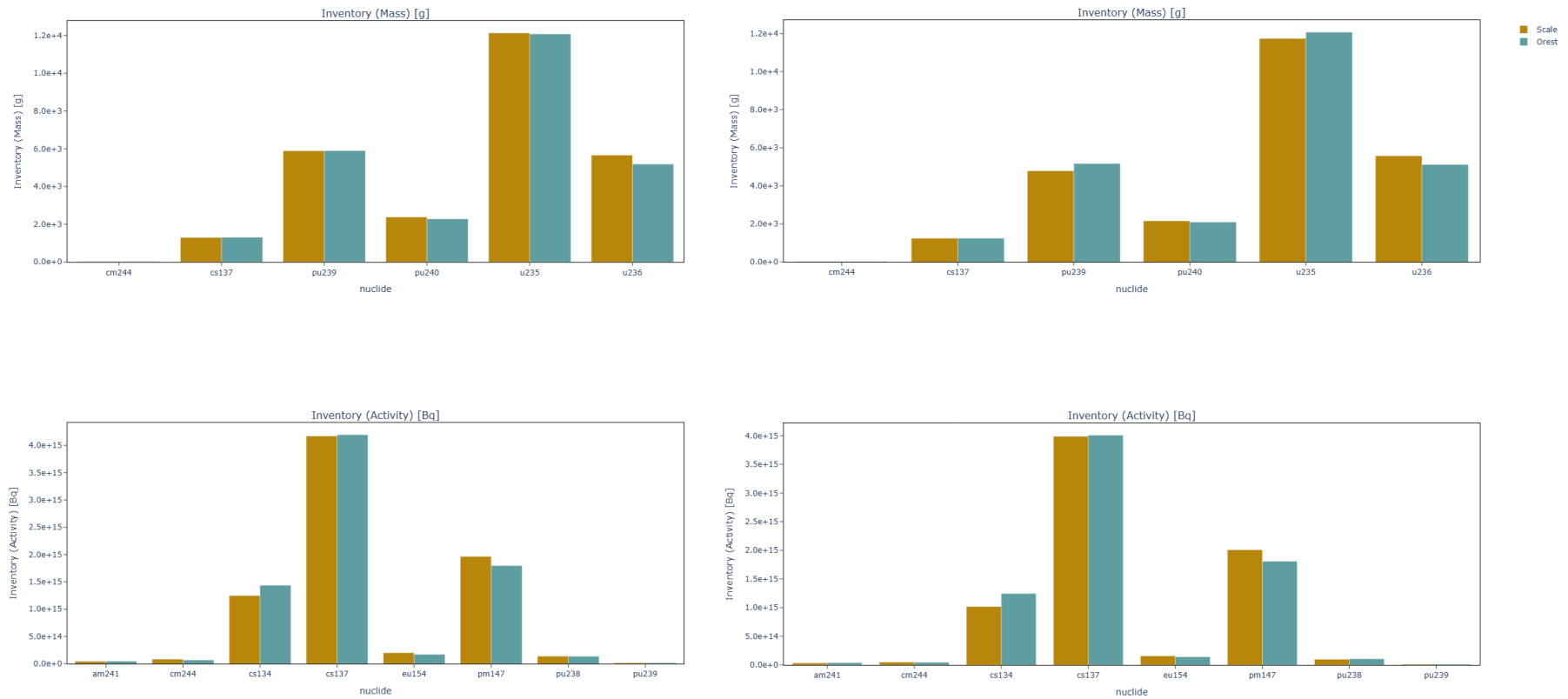
In Tab. 4.12 sind die Differenzen der Rechenmethoden für UO<sub>2</sub>-SWR-Brennelemente beispielhaft quantifiziert. Im Allgemeinen sind für die betrachteten Größen die Differenzen und zeitlichen Verläufe vergleichbar mit denen der DWR-Brennelemente (siehe Abb. 4.15). Im Vergleich zu DWR-Brennelementen ist die Differenz der Neutronenrate zwischen den Rechenkettens deutlich geringer für SWR-Brennelemente: -18 bis -15 % und -6 bis -4 % respektive. Auch hier wird die Gesamtneutronenrate von der Rate der Fissionsneutronen bestimmt, welche in WANIRAS mit SCALE höher sind als in der alten Rechenkette. Die Differenzen der Neutronen aus (α,n)-Reaktionen sind mit 11 bis 18 % allerdings größer als bei DWR-Brennelementen des gleichen Abbrandes und sind auf die allgemein niedrigere Neutronenrate sowie die Unterschiede in den Wirkungsquerschnittsdaten für Cm-244 und Pu-238 zurückzuführen. Diese Divergenz des Neutronenflusses zwischen den zwei Rechencodes, ist auch in den vorher betrachteten Fällen dokumentiert.

**Tab. 4.12** Abweichungen zwischen den Rechenkettens für ein 10x10 SWR-UO<sub>2</sub>-BE mit einem Abbrand von 40 GWd/MgSM

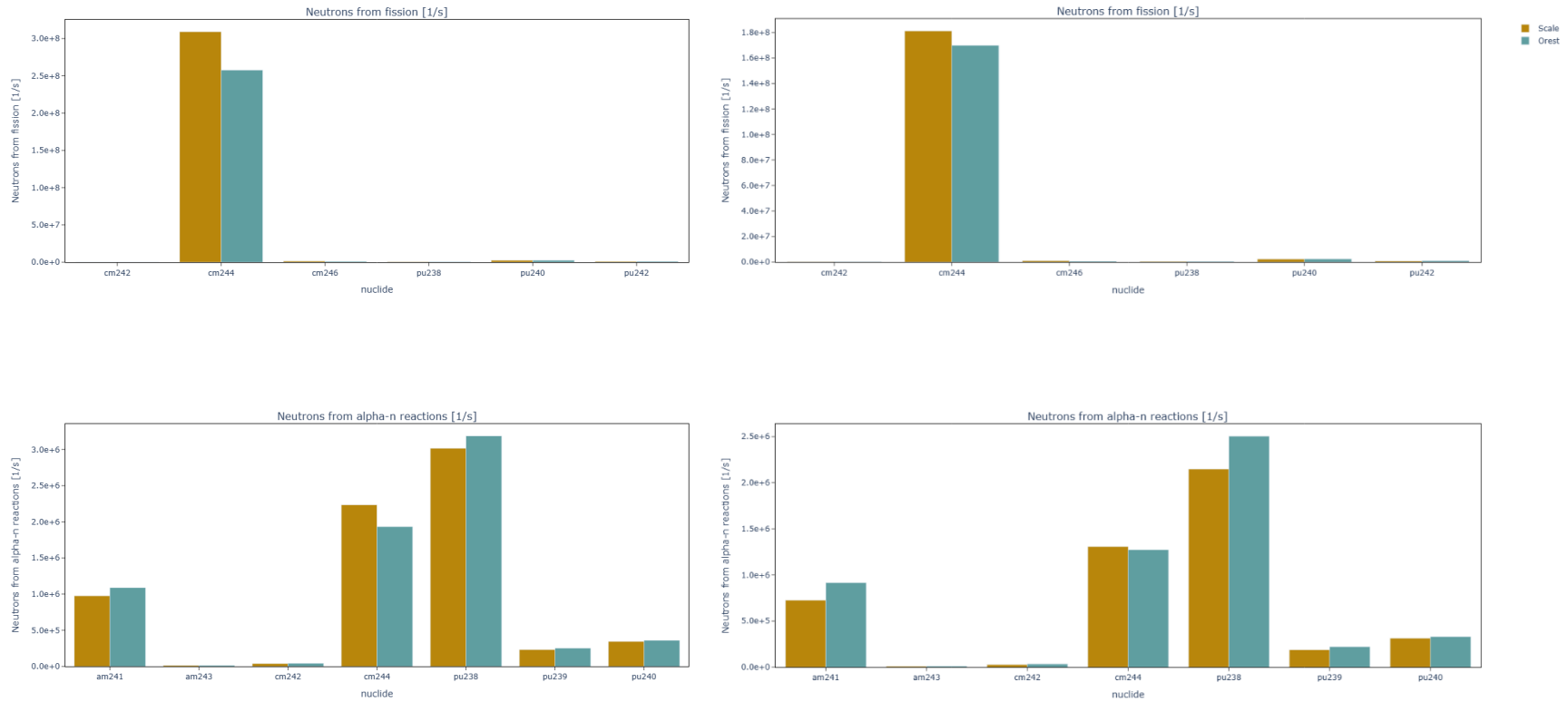
Zeit (Jahre)	Photonenrate (1/s)	Neutronenrate (1/s)	Neutronenrate aus (α,n)-Reaktionen (1/s)	Fissionsneutronen (1/s)	Aktivität (Bq)	Masse (g)
0	10 %	-200 %	13 %	0 %	-129 %	0 %
1	-18 %	-3 %	12 %	-4 %	2 %	0 %
2	-16 %	-5 %	11 %	-6 %	2 %	0 %
3	-13 %	-6 %	11 %	-6 %	3 %	0 %
4	-11 %	-6 %	11 %	-6 %	3 %	0 %
5	-11 %	-6 %	11 %	-6 %	3 %	0 %
10	-15 %	-6 %	13 %	-6 %	3 %	0 %
15	-17 %	-5 %	14 %	-6 %	3 %	0 %
20	-18 %	-5 %	15 %	-6 %	3 %	0 %
30	-18 %	-5 %	17 %	-6 %	2 %	0 %
40	-18 %	-4 %	18 %	-6 %	2 %	0 %



**Abb. 4.15** Zeitlicher Verlauf von Photonenrate, Neutronenrate, Rate von Fissionsneutronen, Rate von ( $\alpha,n$ )- Neutronen, Masse und Aktivität im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette



**Abb. 4.16** Vergleich der Inventare von 16x16 DWR- $\text{UO}_2$ -BE (links) und SWR- $\text{UO}_2$ -BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit



**Abb. 4.17** Vergleich der dominanten Nuklide am Neutronenfluss von 16x16 DWR-UO<sub>2</sub>-BE (links) und SWR-UO<sub>2</sub>-BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand



## 4.5 Dosisbestimmung mit MCNP®

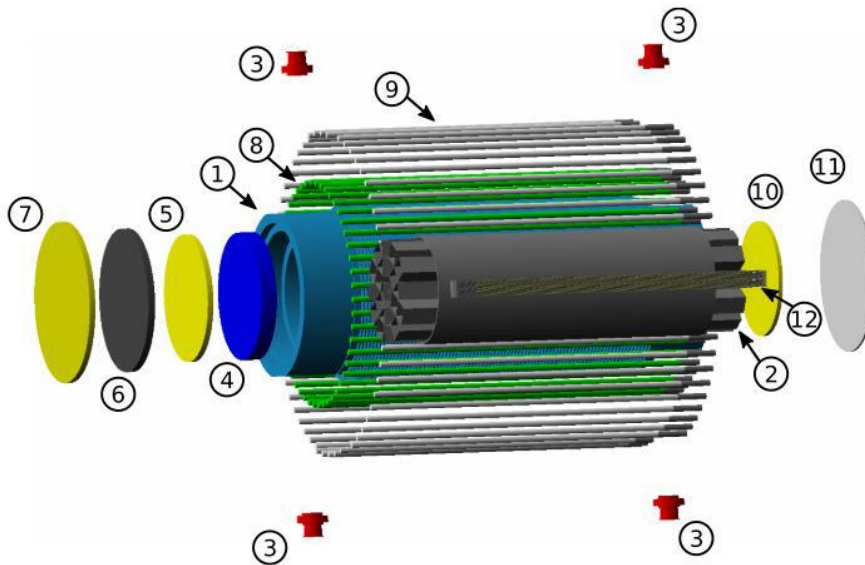
### 4.5.1 Generischer Transport- und Lagerbehälter für Brennelemente

WANIRAS bietet Vorlagen für das MCNP®-Modell der Geometrie eines generischen Transport- und Lagerbehälters. Das MCNP®-Modell basiert auf dem Geant4-Modell, das für eine Studie in /BRA 24/ erstellt wurde. Als Grundlage für das Geant4-Modell diente der CASTOR® V/19, ein häufig verwendeter Behälter für die Lagerung und den Transport bestrahlter Kernbrennstoffe, der von GNS hergestellt wird /GNS 23/. Die Abmessungen des Behälters sind in Tab. 4.13 gezeigt.

**Tab. 4.13** Abmessungen des generischen Transport- und Lagerbehälters

Größen	Maße
Höhe	594 cm
Radius (inkl. Kühlrippen)	122 cm
Tragkorbradius	74 cm
Anzahl der Schächte für Brennelemente	19

Die Hauptkomponenten des Modells sind in Abb. 4.18 dargestellt und in Tab. 4.14 aufgelistet. Im Vergleich zu einem realistischeren Modell wurden mehrere Vereinfachungen vorgenommen, z. B. bei den Formen der Kühlrippen und des Tragezapfens. Außerdem werden die 19 bestrahlten Brennelemente homogen in 19 Schächte verteilt, ohne Unterscheidung in einzelne Brennstäbe. Diese Vereinfachungen verringern die Berechnungszeit für MCNP® ohne die Ergebnisse in Bezug auf die Dosisleistung wesentlich zu beeinflussen.



**Abb. 4.18** Explosionszeichnung des generischen Behältermodells /BRA 24/

**Tab. 4.14** Einzelne Komponente des generischen Behältermodells und deren Materialien wie in Abb. 4.18 dargestellt

	<b>Komponente</b>	<b>Material</b>
1	Behälterkörper	SphäroGuss GGG-40
-2	Tragkorb	Edelstahl
-12	Schächte	Borierter Edelstahl
8, 9	Absorberstangen mit Stopfen und Federn	Polyethylen und Edelstahl
3	Tragezapfen	Edelstahl
	Kühlrippen	Edelstahl
11	Bodenplatte	Edelstahl
10	Absorberplatte (Bodenbereich)	Polyethylen
4	Primärdeckel	Edelstahl
5	Absorberplatte (Deckelbereich)	Polyethylen
6	Sekundärdeckel	Edelstahl
7	Schutzplatte	Edelstahl

#### 4.5.2 Beispielhafte Dosisberechnung

Für die beispielhafte Dosisberechnung wurde als Quellterm im generischen Transport- und Lagerbehälter ein Brennelement gewählt, das schon in den Vergleichsrechnungen betrachtet wurde: ein 16x16 DWR-Brennelement mit einem Abbrand von 40 GWd/MgSM. Das Quelltermespektrum für Photonen- und Neutronendosis ist in Abb. 4.19 dargestellt. Unter der Annahme einer Lagerung im Abklingbecken von fünf

Jahren und anschließender Verpackung in den generischen Transport- und Lagerbehältern wurde die Photonen- und Neutronendosis mit  $10^{10}$  und  $10^8$  Teilchen respektive simuliert. Da die Abbrand- und Abklingrechnungen für Brennelemente für 1 MgSM in SCALE berechnet wurden, muss die berechnete Intensität entsprechend der gesamten in einem Behälter gelagerten Brennstoffmasse skaliert werden. Dies kann in WANIRAS auf zwei verschiedenen Wegen erreicht werden. Im Postprocessing Fenster von WANIRAS ist die Multiplikation aller Ergebnisse (Fluss multipliziert mit dem energieabhängigen Dosiskonversionskoeffizient) vorgesehen. So können normierte Dosisberechnungen für ein Quelltermespektrum durchgeführt werden und ohne langwierige Monte-Carlo-Simulation an die gewünschte Intensität der Quelle angepasst werden. Alle Rechnungen wurden mit ICRP 116 DCFs für die effektive Dosis in ROT-Geometrie durchgeführt.

Die resultierenden Dosisleistungen von Photonen und Neutronen in verschiedenen Abständen vom Behältermantel wurden mit MCNP® berechnet und sind in Abb. 4.20 dargestellt. Die dargestellten radialen Abstände sind 0 m, 1 m und 2 m in einer Höhe von 288,6 cm, was der Mitte der Brennelemente entspricht. Die dargestellten Werte sind Ergebnisse von Ring-Tallies.

#### **4.5.2.1 Photonen**

Zum betrachteten Zeitpunkt (fünf Jahre Lagerzeit) ist die auf 10,184 Mg skalierte Photonenintensität gleich  $1,48 \times 10^{17}$  Photonen/s. Die Abb. 4.21 zeigt die Dosisleistung, wie sie in großflächig radialen Mesh-Tallies dargestellt wird.

Die rechte Seite von Abb. 4.21 zeigt, den der Dosisleistung entsprechenden relativen Fehler. Dieser steigt mit fallender Dosisleistung und steigender Distanz zum Behältermantel durch die Anzahl der Teilchen, die zu einer Flussberechnung an den entsprechenden Gittervoxeln des Detektors zur Verfügung stehen. Die große Abschirmung des Behälters und der hohe Absorptionskoeffizient seiner Materialien führt dazu, dass die Simulation von  $10^{10}$  Photonen nicht ausreicht, um Tally-Ergebnisse mit einem Fehler von weniger als 10 % zu erhalten. Ein Vergleich der verschiedenen hier implementierten Tallies und deren Fehler illustriert diesen Punkt in Tab. 4.15. Hieraus ist ersichtlich, dass für diesen Fall die Ring-Tallies eine deutlich bessere Performance liefern als andere Tallies. Für eine Verbesserung des relativen Fehlers in den Ergebnissen und dadurch auch für eine Verbesserung der Belastbarkeit der Ergebnisse, muss dieses Modell mit erweiterter Varianzreduktionsverfahren erweitert werden.

**Tab. 4.15** Vergleich der verschiedenen MCNP®-Tallies und der relativen Fehler für die Photonendosisleistung

	Ring (0, 100, 200 cm) Tallies		MESH Tallies <sup>1</sup>	
Abstand [cm]	Dosisleistung [μSv/h]	Relativer Fehler	Dosisleistung [μSv/h]	Relativer Fehler
0	11,46	0,148	773,97	0,17
100	15,30	0,172	3,65	1
200	8,08	0,099	2,99	1

<sup>1</sup>: Ergebnis des MESH Tally Voxels, das den Abstand aus der ersten Spalte enthält.

#### 4.5.2.2 Neutronen

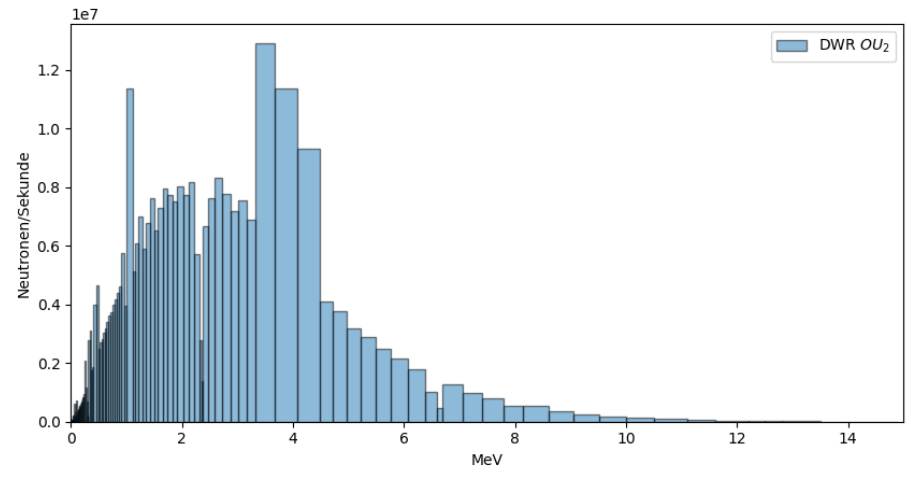
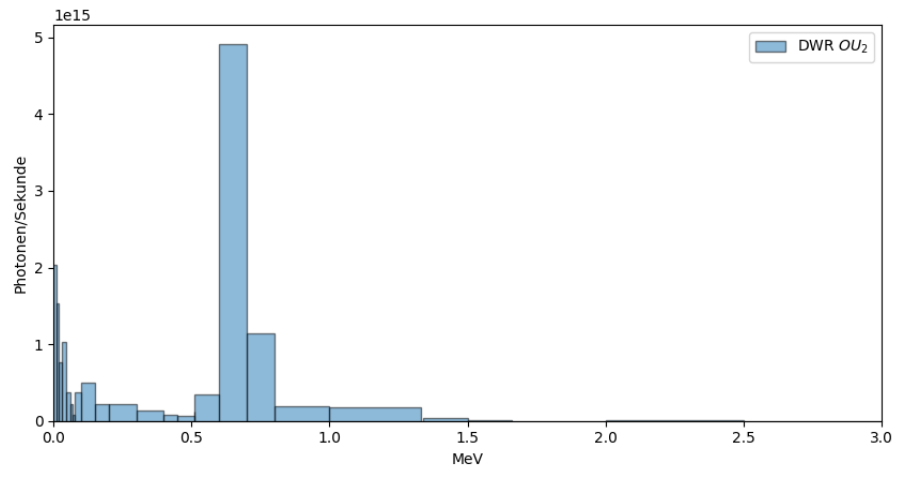
Zum betrachteten Zeitpunkt (fünf Jahre Lagerzeit) ist die auf 10,184 Mg skalierte Neutronenintensität gleich  $3,28 \times 10^9$  Neutronen/s. Die Abb. 4.22 zeigt die Dosisleistung, wie sie in großflächig radialen Mesh-Tallies dargestellt wird. Die Dosisleistung fällt in den ersten 200 cm um den Faktor 2,4 ab.

Die rechte Seite von Abb. 4.22 zeigt, den der Dosisleistung entsprechenden relativen Fehler. Analog zu den Betrachtungen für Photonen steigt dieser mit fallender Dosisleistung und steigender Distanz zum Behältermantel. Im Vergleich zur Photonendosisleistung ist der Fehler deutlich geringer. Die Tab. 4.16 zeigt den Vergleich der verschiedenen hier implementierten Tallies und deren Fehler. Auch hier sieht man, dass für diesen Fall die Ring-Tallies eine deutlich bessere Performance liefern als andere Tallies. Für eine Verbesserung des relativen Fehlers in den Ergebnissen und dadurch auch für eine Verbesserung von deren Belastbarkeit, muss dieses Modell mit erweiterten Varianzreduktionsverfahren erweitert werden.

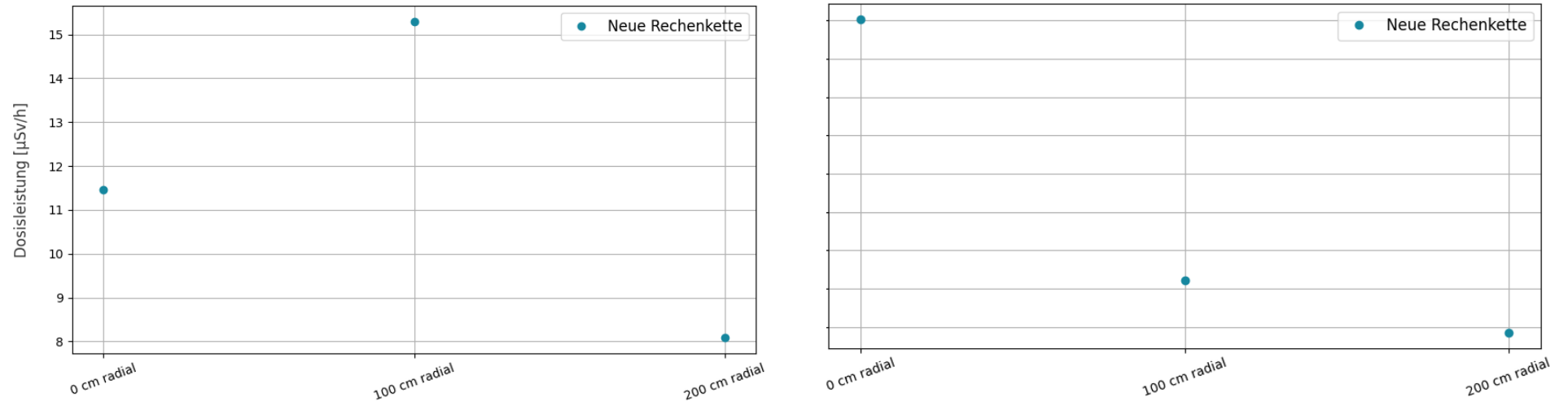
**Tab. 4.16** Vergleich der verschiedenen MCNP®-Tallies und der relativen Fehler für die Neutronendosisleistung

	Ring (0,100, 200 cm) Tallies		MESH Tallies <sup>1</sup>	
Abstand [cm]	Dosisleistung [μSv/h]	Relativer Fehler	Dosisleistung [μSv/h]	Relativer Fehler
0	14,02	0,0133	32,52	0,0154
100	7,22	0,0026	8,05	0,0248
200	5,86	0,0017	6,58	0,0216

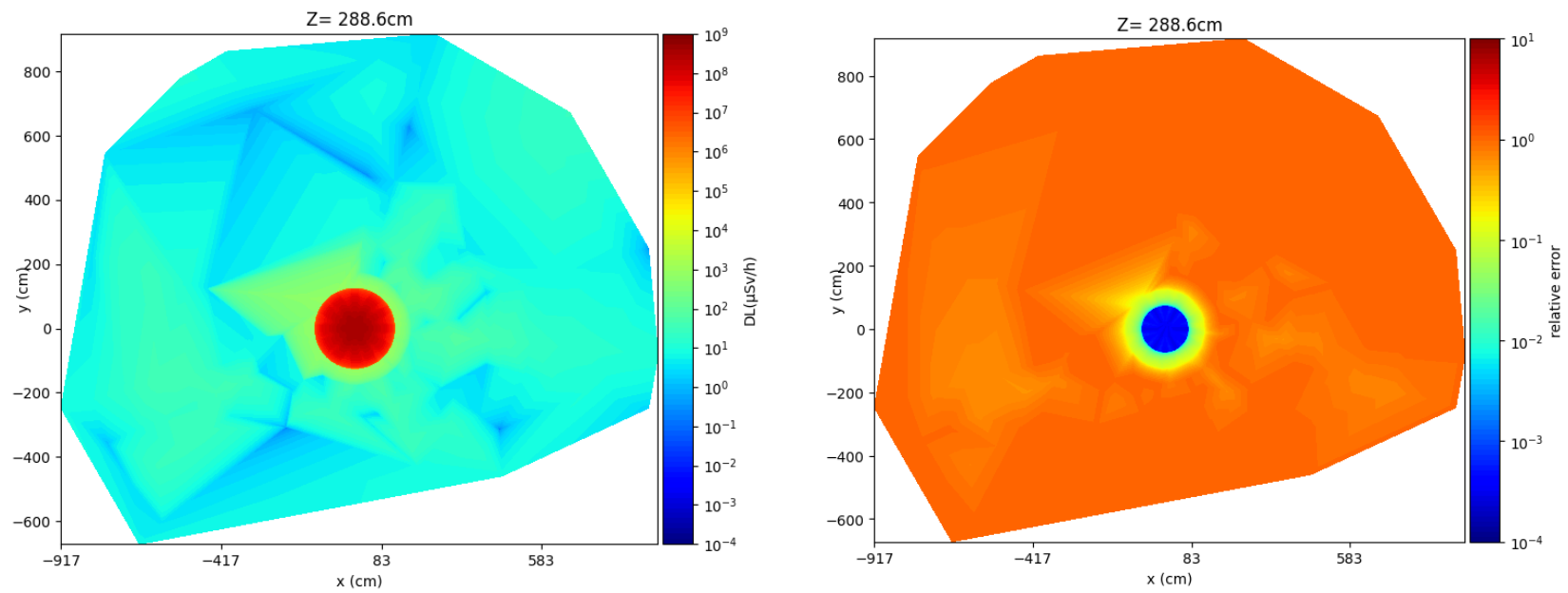
<sup>1</sup>: Ergebnis des MESH Tally Voxels, das den Abstand aus der ersten Spalte enthält.



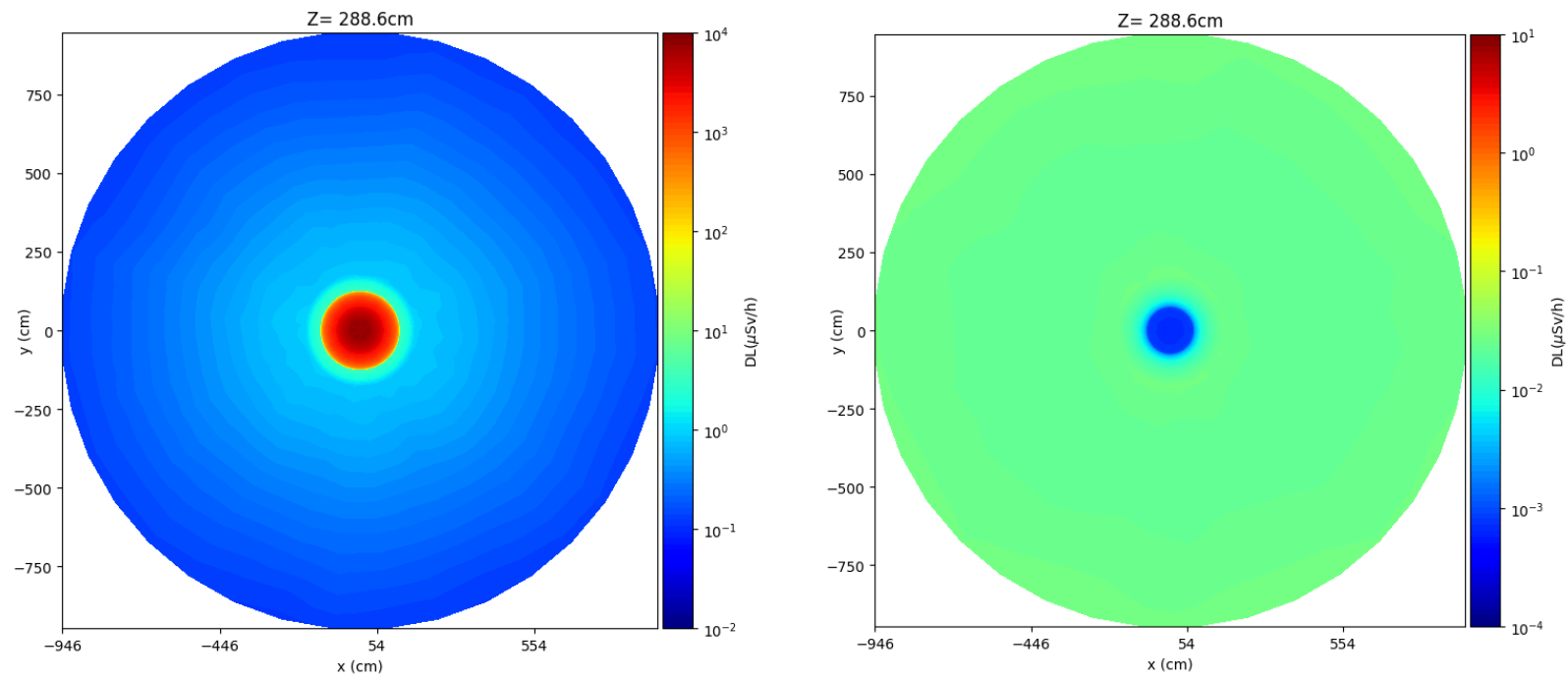
**Abb. 4.19** Photonen- und Neutronenspektrum eines DWR-BE mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit



**Abb. 4.20** Dosisleistung von Photonen (links) und Neutronen (rechts) in  $\mu\text{Sv/h}$  in verschiedenen Abständen von der Oberfläche des Behälters in einer Höhe von 288,6 cm



**Abb. 4.21** Radiale Dosisleistung von Photonen und der relative Fehler in einer Höhe von 288,6 cm in der näheren Umgebung des Behälters



**Abb. 4.22** Radiale Neutronendosisleistung und der relative Fehler in einer Höhe von 288,6 cm in der näheren Umgebung des Behälters





## **5 LAW/MAW-Abfälle**

### **5.1 Dosisbestimmung mit MCNP®**

Für eine Berechnung des Quellterms in LAW/MAW-Gebinden wird mit WANIRAS als Schnittstelle der Rechencode SCALE angesteuert. Im Rahmen dieses Codes wird für die Bestimmung des Quellterms das Paket ORIGEN angesteuert. Dessen Ergebnisse werden im Anschluss über eine weitere Schnittstelle (beschrieben in Kap. 3.3) an den Abschirmungscode MCNP® 6 weitergereicht. Ein Fokus der Entwicklungsarbeiten für die Charakterisierung von LAW/MAW-Abfällen ist die Bereitstellung von Geometrien für die Abschirmrechnungen. So wurden Templates von in Deutschland genutzten Abfallgebinden entwickelt und in WANIRAS hinterlegt. Diese beinhalten die Behälterabmessungen, Behältermaterialien und einige vordefinierte Quellmaterialien zur Befüllung der Behälter. Wie in Kap. 3.4 beschrieben, werden außerdem Tallies zur Dosisbestimmung vordefiniert.

#### **5.1.1 Behältermodelle**

Für die Abschirmung von LAW-Gebinden stehen in WANIRAS mehrere Optionen zur Verfügung:

- Keine Geometrie
- Punkt-Quelle
- Mosaik® mit Bleiliner
- Mosaik® ohne Bleiliner
- VBA aus Normalbeton
- VBA aus Schwerbeton
- Konrad Container Typ IV

Behältermodelle wurden in MCNP® im Allgemeinen als Macrobody-Geometrien umgesetzt. Diese Methode zur Definition von Geometrien hat im Vergleich zur traditionelleren Methode der Definition von 3D-Körpern über deren Oberflächen den Vorteil, dass sie deutlich übersichtlicher und dadurch, vor allem für ungeübte Modellierer,

benutzerfreundlicher ist. Mit Macrobodyes kann man, für konzentrische Geometrien, ebenso Importances definieren.

Importance Biasing ist eine in Abschirmrechnungen beliebte Methode zur Modellierung von Abschirmungen mit hohen Absorptionskoeffizienten oder großer Dicke. Wenn dadurch ein zu großer Anteil der Quelltermteilchen in der Abschirmung absorbiert wird, ist unter Umständen die Anzahl der nach der Abschirmung detektierten Teilchen nicht groß genug, um statistisch relevante Ergebnisse zu erzielen. Bei der Anwendung von Importances wird ein Material in Schichten geteilt, deren Dicke in etwa der mittleren Weglänge der zu absorbierenden Teilchen entspricht. An jeder Schichtgrenzfläche wird die Anzahl der Teilchen um einen „Importance Factor“ erhöht. Diese Skalierung ermöglicht es, Bereiche von größerem Interesse hervorzuheben und eine bessere Berechnung des Teilchenflusses zu ermöglichen. Bereiche von geringem Interesse können für die Betrachtung ausgeblendet werden, indem die Importance auf Null gesetzt wird. Damit kann Rechenzeit eingespart werden.

Varianzreduktion durch Implementierung von Schichten und Importances kann die statistische Relevanz von Flussberechnungen deutlich verbessern, benötigt allerdings signifikante Rechenkapazitäten. Für optimale Simulationen müssen diese Effekte gegeneinander aufgewogen werden. In der aktuellen Version von WANIRAS wurde im Rahmen der User-Freundlichkeit und Modularität auf Importance Biasing und andere Varianzreduktionsmethoden verzichtet. Wie auch in Kap. 4.5 dargestellt, sind diese für statistisch relevante Simulationen teilweise unumgänglich. Da das Konzept der Varianzreduktion ein sehr vielfältiges ist, soll in zukünftigen Weiterentwicklungen eine einheitliche und benutzerfreundliche Herangehensweise herausgearbeitet werden.

Die verfügbaren Vorlagen in WANIRAS sind in den folgenden Abschnitten zusammengefasst.

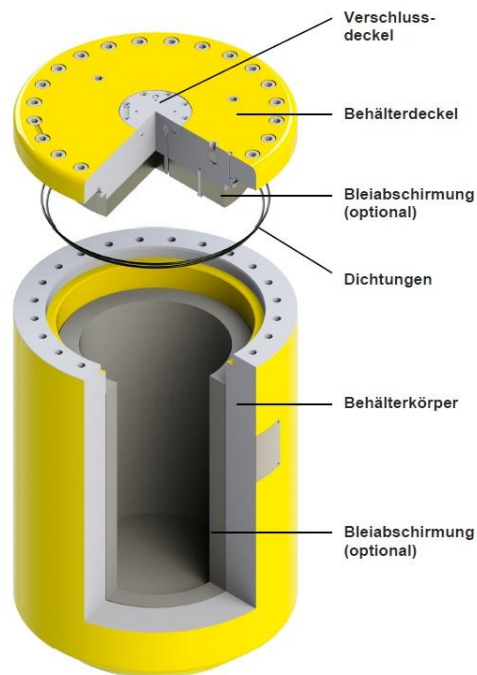
#### **5.1.1.1 Generische MCNP®-Templates**

Die Vorlage für „keine Geometrie“ bietet eine fast leere Vorlage, in die der Benutzer die Quelleninformationen über die WANIRAS-Schnittstelle einfügen kann.

Die Vorlage für „Punktquelle“ enthält keine abschirmende Geometrie, aber die Quelle ist als Punktquelle im Koordinatenursprung des Systems definiert. Für die Berechnung der Dosisleistung in 1 m und 2 m Entfernung sind Ring-Tallies vorgesehen.

### 5.1.1.2 MOSAIK<sup>®</sup>-Behälter

In WANIRAS können zwei generische Modelle eines MOSAIK<sup>®</sup>-Behälter – mit und ohne Bleiliner – genutzt werden. MOSAIK<sup>®</sup>-Behälter bestehen aus Gusseisen mit Kugelgrafit und können bei Bedarf zusätzlich mit bis zu 12 cm mächtigen Blei-Linern zur Ertüchtigung der Abschirmung von Gammastrahlung versehen werden (siehe Abb. 5.1).



**Abb. 5.1** Aufbau eines MOSAIK<sup>®</sup>-Behälters /GES 19/

Die Tab. 5.1 fasst die Behältergeometrie, basierend auf /GES 19/, zusammen. Diese Dimensionen wurden in der in WANIRAS hinterlegten Geometrievorlage genutzt. Der MOSAIK<sup>®</sup>-Behälter wurde mit und ohne Bleiliner als Macrobody umgesetzt. Durch die hohe Behälterdichte und die damit verbundenen Absorptionskoeffizienten gibt es klare Effekte auf die statistische Relevanz der Dosisberechnungen, vor allem wenn die Version mit dem Bleiliner genutzt wird (siehe auch Diskussion in Kap. 5.2.1.2).

**Tab. 5.1** Abmessungen für einen MOSAIK®-Behälter vom Typ M II-15 EI /BRE 15/, /GES 19/

Größen	Maße
Innendurchmesser	740 mm
Außendurchmesser	1060 mm
Innenhöhe	1140 mm
Außenhöhe	1500 mm
Bleieinsatz	0 – 120 mm
Wanddicke	160 mm
Nutzvolumen	165 – 490 cm <sup>3</sup>

### 5.1.1.3 VBA

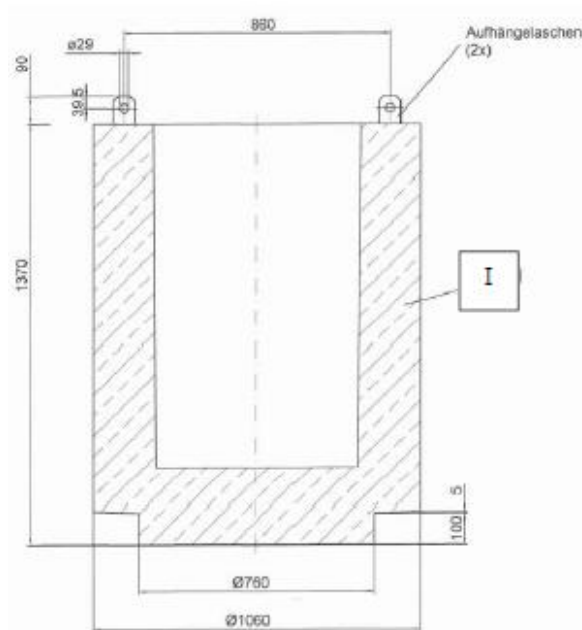
Die Verlorene Betonabschirmung (VBA) besteht aus einem Armierungskorb und einer Betonummantelung aus Normal- oder Schwerbeton (siehe Abb. 5.2 und Tab. 5.2) und bildet einen Außenbehälter für die Endlagerung fester oder verfestigter radioaktiver Abfallstoffe in 200-I-Fässern. Je nach Typ werden VBA mit oder ohne Deckel vergossen. Laschen zum Transport sind bei allen Typen von VBA zu finden /MEL 15/.

Die in WANIRAS verfügbaren Vorlagen basieren auf den MCNP®-Modellen in /KRÜ 24/, die sich wiederum an den entsprechenden Vorgaben der Endlagerungsbedingungen Konrad orientieren /BRE 15/. Das in WANIRAS implementierte VBA-Gebinde besteht aus einem 200-I-Fass, das sich in einer Betonabschirmung des Typs I befindet. Diese kann aus Normalbeton oder Schwerbeton bestehen. Der Deckel wird ebenfalls in der Betonart der VBA modelliert. Die geometrischen Daten dieser Behältergeometrie sowie eine schematische Darstellung sind in Tab. 5.2 und Abb. 5.2 zusammengefasst.

**Tab. 5.2** Daten zur VBA aus Normalbeton (NBA) und Schwerbeton (SBA) und zum 200-I-Fass /KTE 15/

Größe	200-I-Fass	NBA	SBA
Höhe (mm)	928	1370	1370
Außendurchmesser (mm)	579	1060	1060
Innendurchmesser (mm)	576	650 - 670	650 - 670
Wandstärke Mantel (mm)	2,5	195 – 205 konisch	195 – 205 konisch

Größe	200-I-Fass	NBA	SBA
Wandstärke Boden (mm)	4	250	250
Materialdichte (g/cm <sup>3</sup> )	7,85 (Stahl)	2,4 (Beton)	3,5 (Beton)



**Abb. 5.2** Schematische Darstellung der VBA Typ I /KTE 15/

Wie in Kap. 5.1.1 beschrieben sind die VBA-Gebinde als Macrobodies modelliert. Durch den relativ niedrigen (im Vergleich zu Blei) Absorptionskoeffizienten von Beton sind zwar Effekte in den von MCNP® berechneten Fehlern zu erwarten, doch die statistische Relevanz der Ergebnisse wird nicht beeinträchtigt. Das wurde mit exemplarischen Testrechnungen eines VBA-Gebindes mit einer Photonenquelle (Co-60 und Cs-137) bestätigt.

Wie aus den in Tab. 5.3 ersichtlichen Ergebnissen dieser Testrechnungen gibt es nur eine kleine Verlängerung der Rechenzeit für – als Macrobodies – definierte Geometrien im Vergleich zu – als Oberflächen definierte – Geometrien. Der von MCNP® berechnete Fehler von Punkt-Tallies ist ungefähr eine Größenordnung größer für Macrobodies als für Oberflächen, aber noch weit unter 10 %. Wenn Schichten mit Importances eingefügt werden, verlängert sich die Rechenzeit signifikant. Interessant ist im Fall des VBA, dass sich der von MCNP® berechnete Fehler nur minimal vergrößert, wenn man die Geometrie mit Schichten mit der Geometrie ohne Schichten vergleicht.

Für den Fall der VBA mit dem Abschirmungsmaterial Beton ist festzuhalten, dass eine Berechnungsmethode ohne Varianzreduktion gut umzusetzen ist und zuverlässige Ergebnisse liefert.

**Tab. 5.3** Vergleich der Rechenzeit zwischen verschiedenen Geometriedefinitionen (Rechnung mit  $10^8$  Teilchen)

Schichten	Geometrie	Rechenzeit (Minuten)	Ring Tally Mantel	Fehler	Point Tally 30 cm	Fehler <sup>2</sup>
ja	Surfaces	2652,82	38,6	0,004	0,0123	0,0013
nein	Surfaces	1048,77	38,8	0,0048	0,0123	0,001
nein	Macrobody	1175,85	38,47	0,0045	0,0123	0,012

<sup>2</sup> Anmerkung zur statistische Qualität des Tallys:  
 0,5 bis 1 nicht nutzbar  
 0,2 bis 0,5 Innerhalb einiger Faktoren  
 0,1 bis 0,2 Fragwürdig  
 < 0,10 Generell zuverlässig, außer beim Point-Tally  
 < 0,05 Generell zuverlässig beim Point-Tally

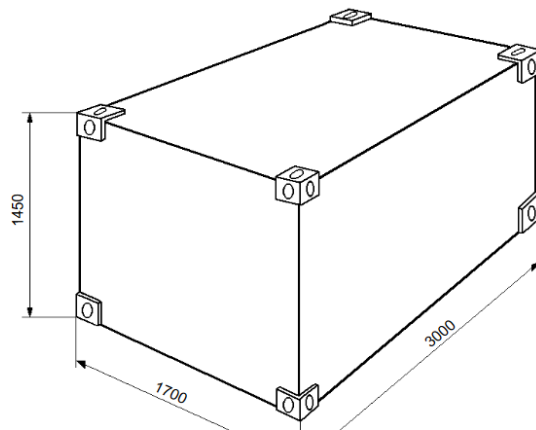
#### 5.1.1.4 Konrad-Container Typ IV

In WANIRAS ist eine Behälterkonfiguration für Konrad-Container Typ IV nutzbar. Die Abmessungen und eine Abbildung sind nachfolgend gezeigt (siehe Tab. 5.4 und Abb. 5.3).

Die Wände des Behälters bestehen aus Stahl. Die Seitenwände haben eine Dicke von 3 mm, der Deckel und der Boden haben eine Dicke von 5 mm. Analog zu den weiteren LAW/MAW-Behältern ist dieses Gebinde als Macrobody in MCNP® definiert. Wegen der dünnen Behälterwände sind auch hier keine Varianzreduktionsmethoden nötig, um statistisch signifikante Ergebnisse zu erzielen.

**Tab. 5.4** Abmessungen des Konrad-Containers Typ IV /BRE 15/

Größen	Außenmaße
Länge	3000 mm
Breite	1700 mm
Höhe	1450 mm
Bruttovolumen	7,4 m <sup>3</sup>



**Abb. 5.3** Konrad-Container Typ IV /BFS 15/

### 5.1.2 Vorlagen für Quellen

In den hinterlegten Behältermodellen in WANIRAS sind die Behältermaterialien schon festgelegt. Da die Befüllung allerdings größere Variationen im Material sowie in der Dichte haben kann, ist dieser Teil schwieriger für die intuitive Benutzung zu standardisieren. Die Auswahl der Behälterbefüllung erfolgt über die GUI (siehe Abb. 2.10), wober der Nutzer ein MCNP®-Szenario erstellen kann und eine Quelle mit der gewünschten Zusammensetzung manuell hinzufügen kann. Für einfache Fälle sind einige Materialien in WANIRAS vordefiniert, so dass Nutzer die im vorherigen Schritt definierten Behälter mit Abfällen, wie z. B. Ionenaustauscherharzen und Verdampferkonzentraten befüllen können. Für die Benutzung in Konrad-Containern stehen außerdem noch homogener Verfüllbeton sowie Stahl zur Verfügung. In Tab. 5.5 sind die elementaren Zusammensetzungen aller in WANIRAS aktuell auswählbaren Quellmaterialien zusammengefasst. Bei der Zusammensetzungen von Ionenaustauscherharzen und Verdampferkonzentraten wurde auf die Recherchen aus /KRÜ 24/ zurückgegriffen. Hierbei ist anzumerken, dass die Dichte dieser Materialien nicht vorgegeben wird. Erfahrungsgemäß ist dies die Größe, welche die resultierende Dosisleistung am meisten beeinflusst, aber auch die Größe, die für jedes Abfallgebinde sehr variabel ist. Daher wurde die Entscheidung getroffen, die Festlegung dem Nutzer zu überlassen. Richtwerte für Ionenaustauscherharze, Verdampferkonzentrate sowie ihre konditionierten Formen können aus /KRÜ 24/ referenziert werden.



**Tab. 5.5** In WANIRAS verfügbare Materialien für die Zusammensetzung von Abfällen

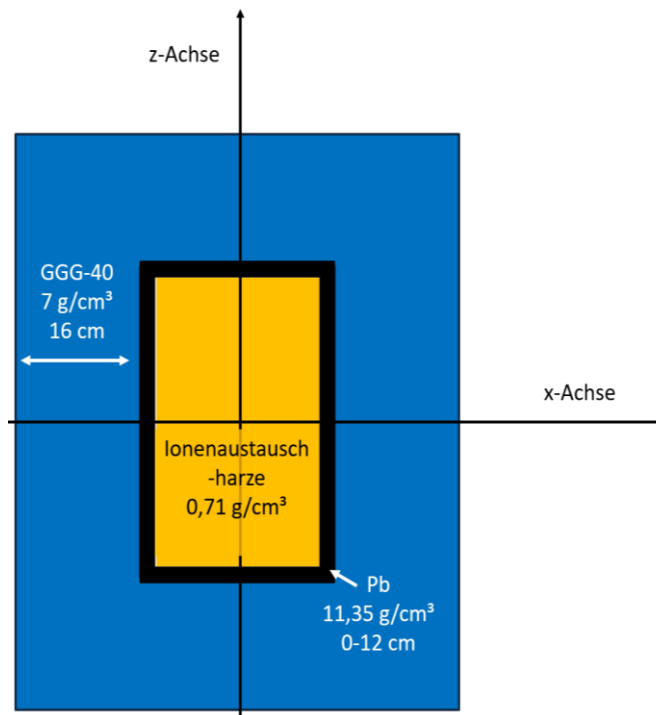
Materialart	Zusammensetzung
Verfüllbeton /MCC 11/ (NIST)	2,21 % H; 0,25 % C; 57,49 % O; 1,52 % Na; 0,13 % Mg; 2 % Al; 30,46 % Si; 1 % K; 4,3 % Ca; 0,64 % Fe
Metallabfälle	0,12 % C; 0,045 % P; 0,045 % S; 0,6 % Mn; 99,19 % Fe
Ionenaustauscher kompaktiert /KRÜ 24/	5,74 % H; 77,46 % C; 16,80 % O
Verdampferkonzentrate konzentriert /KRÜ 24/	3,39 % H; 44,88 % O; 51,73 % Na
Verdampferkonzentrate betoniert /KRÜ 24/	1,4 % H; 47,43 % O; 5,03 % Al; 17,29 % Si; 0,8 % S; 1,66 % K; 23,58 % Ca; 2,8 % Fe

## 5.2 Vergleich der Ergebnisse

### 5.2.1 Photonenquellen

Ausgehend von den Daten zu den Ionenaustauscherharzen und MOSAIK®-Behältern wurde für diese Quelle eine zerfallskorrigierte Zusammensetzung und ein Gammalinien-spektrum berechnet. Vergleiche für diese Gebindegeometrie (siehe Abb. 5.4) fanden mit den Rechnungen zu Ionenaustauscherharzen aus /KRÜ 24/ statt, die noch mit der alten Rechenkette durchgeführt wurden.

Die Dosisleistung für die Vergleichsrechnungen wurde mit Hilfe der in WANIRAS implementierten Modelle bestimmt. Die Dosisleistung wurde in radialer Richtung sowie in axialer Richtung (entlang der z-Achse) im Abstand von 0, 100 und 500 cm berechnet.



**Abb. 5.4** Querschnitt eines MOSAIK®-Behälters gefüllt mit Ionenaustauscherharzen /KRÜ 24/

In Tab. 5.6 ist der für die verwendete Nuklidvektor angegeben. Für die Berechnung wurden Aktivitätskonzentrationen von kompaktierten DWR-Ionenaustauscherharzen aus der Literatur und vorhergehenden Arbeiten genutzt /KRÜ 24/.

**Tab. 5.6** Nuklidkonzentration für die Modellierung der Ionenaustauscherharze

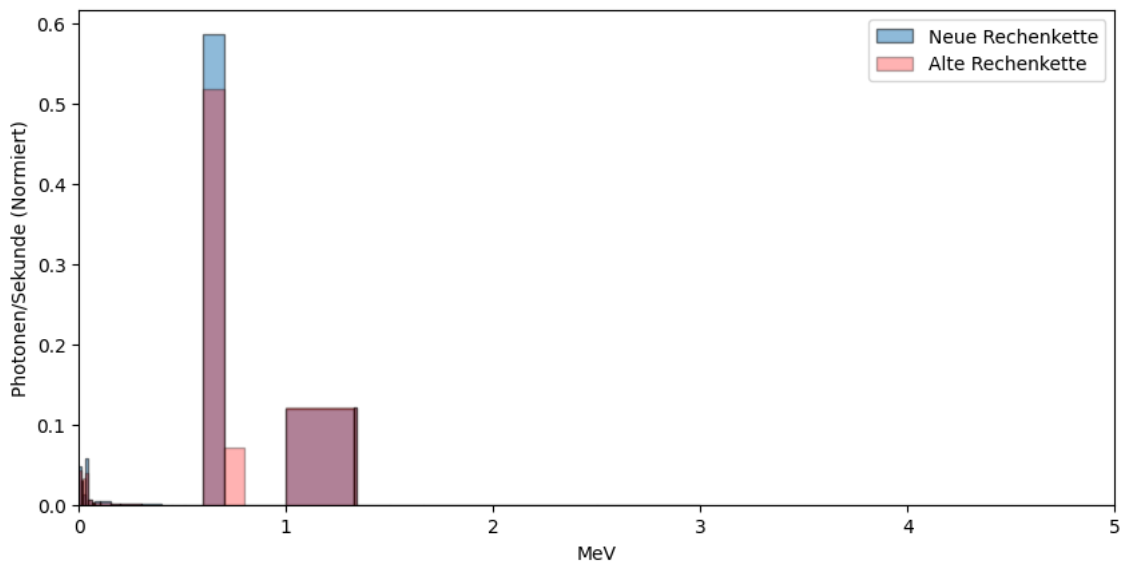
Isotop	Aktivität (Bq/m <sup>3</sup> ) /KRÜ 24/
Cs-137	1,9E+12
Co-60	3,7E+11

Die Dichte der Ionenaustauscherharze hat einen signifikanten Einfluss auf die Ortsdosisleistung der Quelle. Für die Berechnung wurde beziehend auf die Rechnungen aus /KRÜ 24/ eine Dichte der kompaktierten Harze von 1,22 g/cm<sup>3</sup> angenommen.

### 5.2.1.1 Quellterm Ionenaustauscherharze

Mit den durch die alte bzw. neue Rechenkette berechneten und zerfallskorrigierten Nuklidzusammensetzungen der Gammaquelle zum Zeitpunkt  $t_0 = 1$  Jahr kann das Gesamtgammalinienpektrum berechnet werden. In Abb. 5.5 ist das normierte Gammalinienpektrum, basierend auf beiden Rechenmethoden, visualisiert. Das Gammalinienpek-

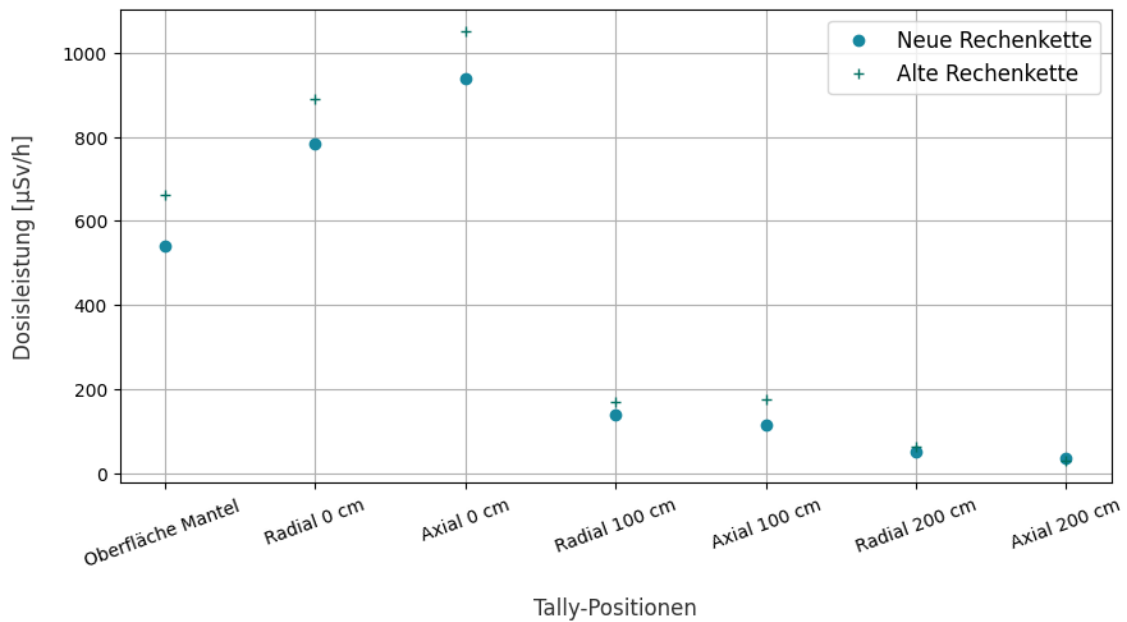
trum wird in der alten Rechenkette und in WANIRAS durch zwei relevante Peaks abgebildet: der Cs-/Ba-137 Zerfallspeak um 0,66 MeV und die zwei Co-60 Zerfallspeaks um 1,1 und 1,3 MeV, zusammengefasst in einem Energiebin. Die Gesamtphotonenrate ist vergleichbar mit  $3,98E+12$  für die alte Rechenkette und  $3,95E+12$  Photonen/Sekunde für WANIRAS. Ein Unterschied lässt sich allerdings in der Breite des Cäsium Peaks feststellen, der in SCALE deutlich schmaler und höher ist.



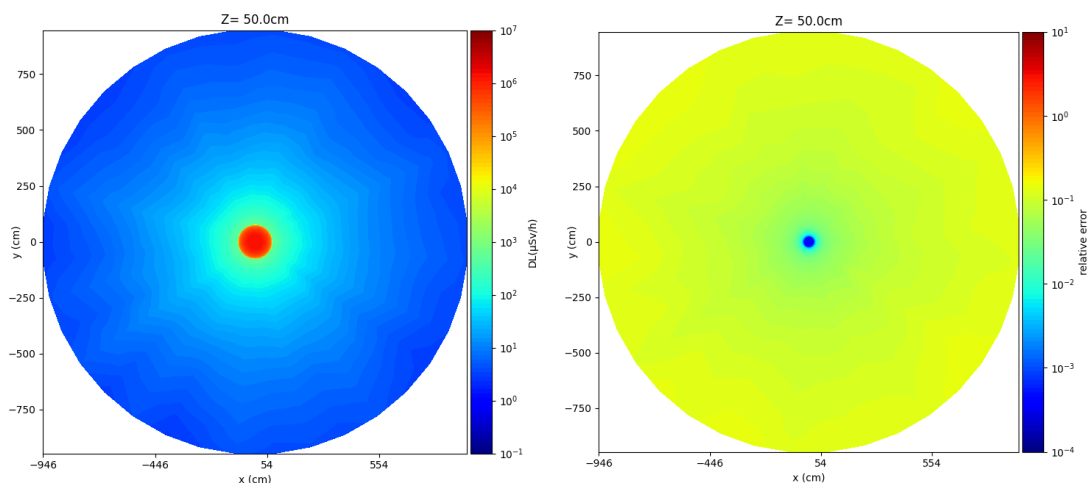
**Abb. 5.5** Photonenspektrum von Ionenaustauscherharzen berechnet durch die alte und neue Rechenkette (t = 1 Jahr)

### 5.2.1.2 Vergleich der Dosisleistung von Ionenaustauscherharzen

Basierend auf den Quelltermdaten wurde die Ortsdosisleistungen mit einem MCNP® 6-Modell bestimmt. Der Vergleich der Dosisleistung in radialer als auch axialer Richtung zum Zeitpunkt t = 1 Jahr zwischen der alten und neuen Rechenkette ist in Abb. 5.6 und Abb. 5.7 dargestellt. Die Werte sind in Tab. 5.7 tabelliert. Im Allgemeinen gibt es eine gute Übereinstimmung zwischen der alten und neuen Rechenkette mit Abweichungen zwischen 6 % (Ring-Tally auf der Oberfläche) und 21 % (Punkt-Tally bei 1 m in axialer Richtung).



**Abb. 5.6** Gamma-Dosisleistung der Ionenaustauscherharze zum Zeitpunkt  $t = 1$  Jahr mit der alten Rechenkette und WANIRAS



**Abb. 5.7** Dosisleistung und relativer Fehler von konzentrierten Ionenaustauscherharzen im MOSAIK®-Behälter ( $t = 1$  Jahr)

In Tab. 5.7 sind außerdem die von MCNP® berechneten relativen Fehler von beiden Simulationen aufgeführt. Das ist zum einen eine Größe, die dem Nutzer helfen soll, die statistische Relevanz seiner Rechnungen zu evaluieren und zum anderen wird diese Größe in den MCNP® internen statistischen Checks der Tallies genutzt. Generell kann angemerkt werden, dass der relative Fehler für Ring-Tallies geringer ist als für Punkt-Tallies. Einen Effekt der Geometrieimplementierung als Macrobody ohne Importance biasing ist außerdem evident darin, dass der relative Fehler in der neuen Rechenkette für alle Werte höher ist als in der alten Rechenkette, in einer Instanz sogar über 10 %.

Wenn größere Distanzen und damit kleinere Teilchenfluenzen berechnet werden sollen, kann dieser Effekt durchaus wichtig werden und eine Art der Varianzreduktion sollte durchgeführt werden.

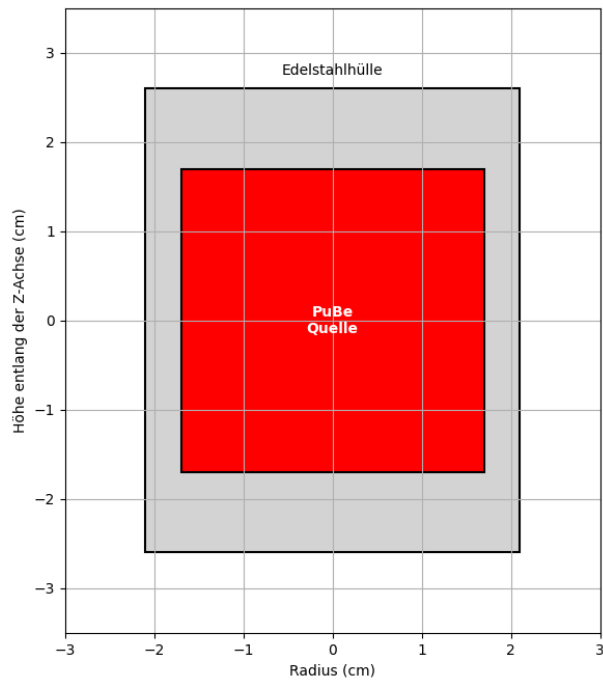
**Tab. 5.7** Von MCNP® berechnete Dosisleistung in der alten Rechenkette und in WANIRAS

Abstand [cm]	Alte Rechenkette		WANIRAS	
	Dosisleistung [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	Relativer Fehler	Dosisleistung [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	Relativer Fehler
0 (Oberflächen-Tally)	662,36	0,003	539,24	0,005
0 radial (Ring Tally)	891,24	0,008	783,11	0,021
0 axial (Point Tally)	1050,50	0,036	938,59	0,122
100 radial (Ring Tally)	169,75	0,002	140,49	0,003
100 axial (Point Tally)	174,78	0,004	115,04	0,006
200 radial (Ring Tally)	63,53	0,002	51,95	0,003
200 axial (Point Tally)	28,91	0,003	37,28	0,005

### 5.2.2 Neutronenquellen

Ausgehend von Daten zu Plutonium-Beryllium-Neutronenquellen (Pu-Be-Quelle) wurde für eine Neutronenquelle eine zerfallskorrigierte Zusammensetzung als auch ein Gammalinien- und ein Neutronenspektrum berechnet.

Die Dosisleistung der Pu-Be-Quelle wurde anhand von 3D-Modellen mit zylindrischer Geometrie mit Hilfe der alten Rechenkette und WANIRAS bestimmt. Die Dosisleistung wurde in radialer Richtung sowie in axialer Richtung (entlang der z-Achse, vgl. Abb. 5.8) im Abstand von 0 bis 300 cm simuliert. Aufgrund der dickeren Edelstahlschicht im Kopf- und Bodenbereich der Quelle kann generell festgestellt werden, dass die Ortsdosisleistung in axialer Richtung bei gleicher Entfernung jeweils um 10 bis 20 % geringer ausfällt als in radialer Richtung.



**Abb. 5.8** Querschnitt einer IBN11 Neutronenquelle

In Tab. 5.9 ist der für die Vergleichsrechnung verwendete Plutonium-Vektor angegeben. Der Plutonium-Vektor ist über massenspektrometrische Untersuchungen von 65 Quellen vom Los Alamos National Laboratory bestimmt worden /LAN 15/.

**Tab. 5.8** Plutonium-Vektoren (Angaben in Gew.-%)

Isotop	LANL /LOS 15/
Pu-238	0,4
Pu-239	89,73
Pu-240	9,63
Pu-241	0,24
Summe	100,00

**Tab. 5.9** Zusammensetzung und daraus berechnete Neutronenquellstärke und Aktivität von IBN11, V zum Zeitpunkt  $t = 0$

Nuklid	Neutronenquellstärke [n/s]	Aktivität [Bq]	Masse [g]
<b>IBN11, V = 30,87 cm<sup>3</sup></b>			
<b>Be</b>	0	0	44,83
<b>Pu-238</b>	1,4683E+07	2,96E+11	0,47
<b>Pu-239</b>	7,4482E+06	1,88E+11	82,11
<b>Pu-240</b>	2,9466E+06	7,41E+10	8,82
<b>Pu-241</b>	6,8074E+02	8,44E+11	0,22
<b>Summe</b>	2,5079E+07	1,40E+12	136,45

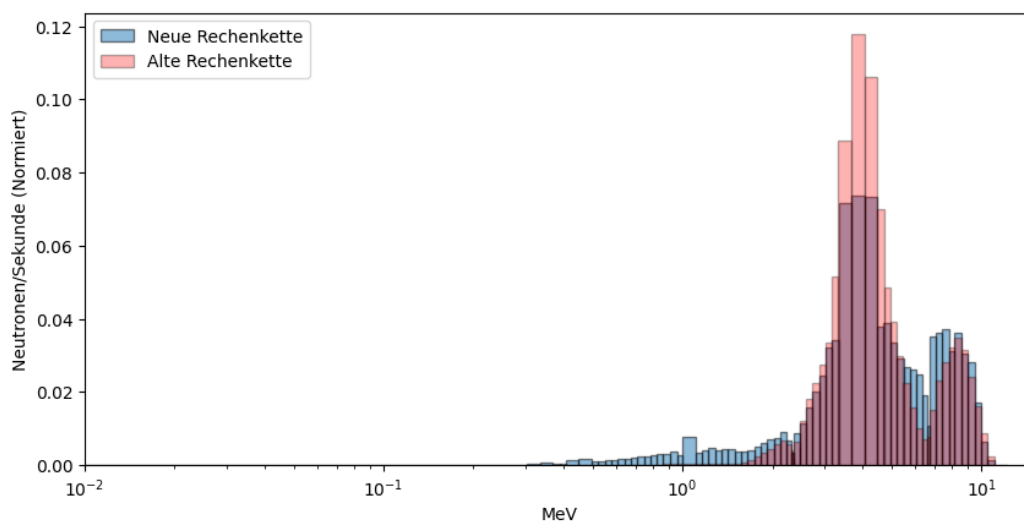
Die Dichte von Pu-Be<sub>13</sub> hat darüber hinaus einen signifikanten Einfluss auf die Neutronenquellstärke und Ortsdosisleistung der Quelle. Für die Berechnung wurde bezugnehmend zu den Rechnungen aus /KRÜ 21/ eine Dichte von 4,42 g/cm<sup>3</sup> angenommen.

### 5.2.2.1 Quellterm Pu-Be-Quelle

Der Quellterm setzt sich aus verschiedenen Komponenten zusammen. Eine Komponente setzt sich aus Gamma- und Röntgenstrahlung aus Nuklidzerfällen ( $\alpha$ -,  $\beta$ -Zerfall, interner Übergang), Gamma- und Bremsstrahlung der Beta-Strahlung zusammen. Außerdem werden durch eine Reihe verschiedener Reaktionen Neutronen erzeugt, dessen Hauptbeitrag die ( $\alpha$ ,n)-Reaktion liefert. Alphateilchen werden von den umgebenden Berylliumkernen (Be-9) eingefangen, bilden einen angeregten Verschmelzungskern C-13\*, der sich über die Emission eines Neutrons zu C-12 abregt. Die ( $\alpha$ ,n)-Neutronen entstehen im unmittelbaren Bereich der Alpha-Emitter, da die Alphateilchen im umgebenden Material nur eine sehr geringe Reichweite haben. Zudem werden Neutronen durch Spontanspaltung der in den Quellen vorhandenen Nuklide erzeugt. Einen eher untergeordneten Beitrag spielen die durch inelastische Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Beryllium (Be-9) erzeugten Neutronen. Außerdem können die primär erzeugten ( $\alpha$ ,n)-Neutronen weitere Neutronen durch Sekundärreaktionen in der Quelle erzeugen. Das Neutronenspektrum der Pu-Be-Quelle setzt sich zu über 99,9 % aus ( $\alpha$ ,n)-Neutronen zusammen.

Mit den durch die alte bzw. neue Rechenkette berechneten und zerfallskorrigierten Nuklidzusammensetzungen der Pu-Be-Quelle zum Zeitpunkt  $t_0$  können die jeweiligen Gesamtgammalinien- und Gesamtneutronenspektren berechnet werden. In Abb. 5.9 ist das normierte Neutronenspektrum, und in Abb. 5.10 ist das normierte Gammalinienpektrum der Quelle visualisiert. Das Gesamtneutronenspektrum der IBN11-Quelle weist zwei

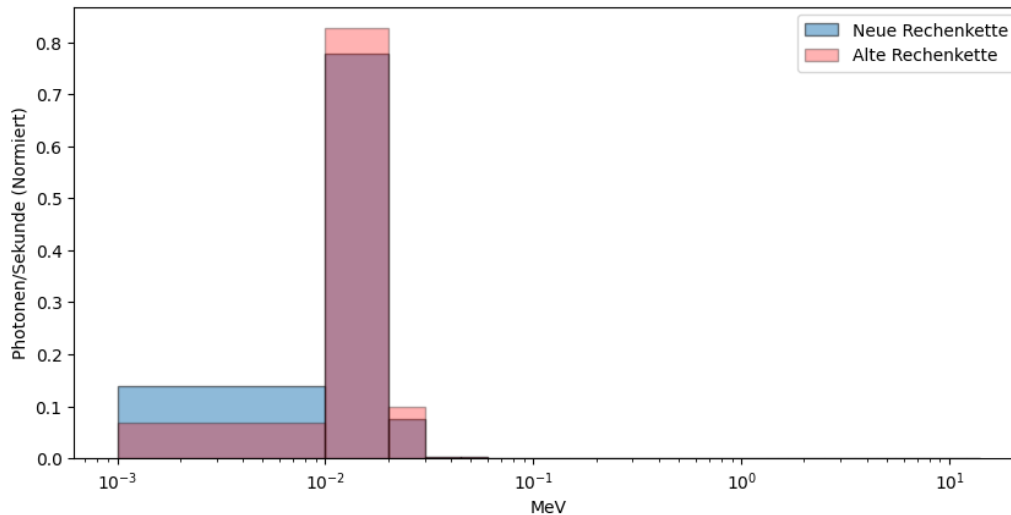
Peaks der emittierten Neutronen auf. Es gibt einen Hauptpeak bei 4 MeV und einen Peak bei ungefähr 8 MeV (vgl. Abb. 5.9). Auffällig ist, dass die Anzahl an Neutronen pro Sekunde mit einer Energie von ungefähr 4 MeV bei der alten Rechenkette deutlich höher ausfällt als bei der Vergleichsrechnung durch WANIRAS. Der normierte Peak sinkt von ungefähr 0,12 Neutronen pro Sekunde (alte Rechenkette) auf ungefähr 0,075 Neutronen pro Sekunde (WANIRAS). Dafür fällt der zweite kleinere Peak der neuen Rechenkette breiter aus. Die Gesamtneutronenraten liegen bei  $7,109\text{E}+05$  Neutronen/Sekunde/cm<sup>3</sup> für die alte Rechenkette und bei  $8,1270\text{E}+05$  Neutronen/Sekunde/cm<sup>3</sup> für die Rechnung mit WANIRAS. Die Gesamtneutronenraten weichen folglich um ungefähr 12,5 % voneinander ab.



**Abb. 5.9** Gesamtneutronenspektrum der IBN11 Pu-Be-Quelle berechnet durch die alte und neue Rechenkette

Im Gammalinienpektrum der Quelle IBN11 sind die Gammalinien aller, in der Quelle enthaltenen, Gammastrahler abgebildet (siehe Abb. 5.10). Das Gammalinienpektrum wird in der alten Rechenkette und WANIRAS durch drei relevante Energiegruppen abgebildet. Im Energiebereich von  $1\text{E}-3$  bis  $1\text{E}-2$  MeV berechnet WANIRAS eine höhere Anzahl an Photonen pro Sekunde. Für Photonen mit einer höheren Energie berechnet hingegen die alte Rechenkette eine minimal höhere Anzahl an Photonen. Die Gesamtphotonenrate ist mit  $1,582\text{E}+09$  Photonen/Sekunde/cm<sup>3</sup> (alte Rechenkette) um 7 % niedriger als die Gesamtphotonenrate für WANIRAS, welche  $1,7058\text{E}+09$  Photonen/Sekunde/cm<sup>3</sup> beträgt.





**Abb. 5.10** Gesamtgammalinienpektrum der IBN11 Pu-Be-Quelle berechnet durch die alte und neue Rechenkette

### 5.2.2.2 Vergleich der Dosisleistung einer Pu-Be-Quelle

Basierend auf den Quelltermdaten wurde die Dosisleistung mit einem MCNP®6-Modell bestimmt. Der Vergleich der Dosisleistung in radialer als auch axialer Richtung der Pu-Be-Quelle vom Typ IBN11 zwischen der alten und neuen Rechenkette ist in Tab. 5.10 dargestellt. Die Gesamtdosisleistung setzt sich eigentlich aus den einzelnen Beiträgen der Neutronen- und Gammadosisleistung zusammen. Da die Neutronendosisleistung die Gammadosisleistung jedoch um zwei bis drei Größenordnungen übertrifft, werden, zur Auswertung der Ergebnisse, ausschließlich die Beiträge der Neutronendosisleistung herangezogen. In Tab. 5.10 und Abb. 5.11 sind die berechneten Gesamtdosisleistungen der Neutronenquelle vom Typ IBN11 in Abhängigkeit des Abstands dargestellt.

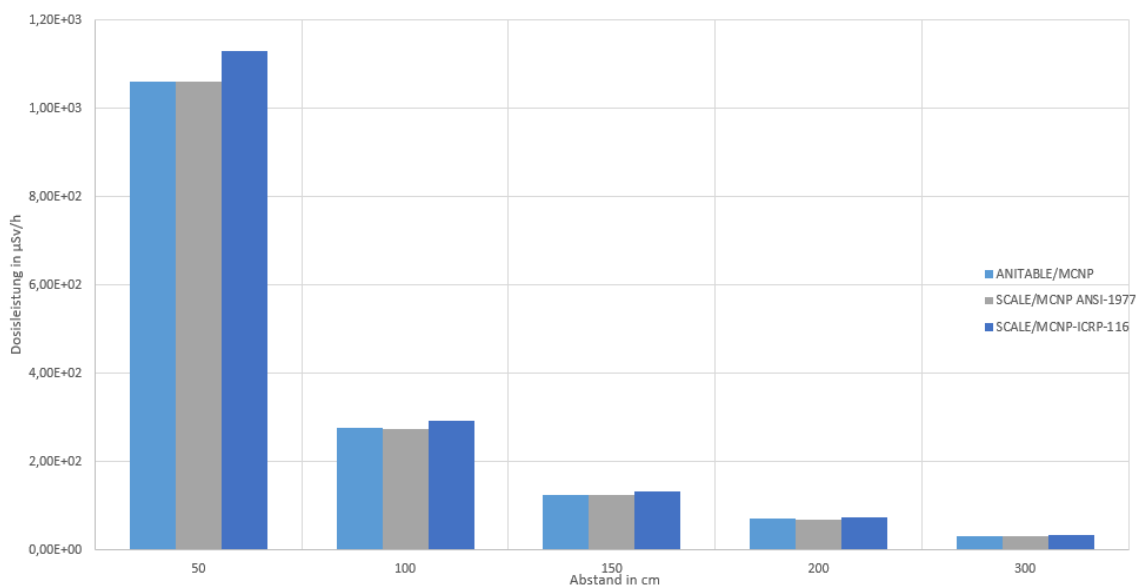
**Tab. 5.10** Berechnete Neutronen-Dosisleistung der Pu-Be-Quellen (Zeitpunkt  $t = 0$ )

	Dosisleistung Alte Rechenkette		Dosisleistung Neue Rechenkette		Dosisleistung Neue Rechenkette	
DCF	ANSI 1977		ANSI 1977		ICRP-116	
Abstand [cm]	radial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	axial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	radial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	axial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	radial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	axial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]
0	9,91E+05	9,91E+05	9,87E+05	9,87E+05	1,05E+06	1,05E+06
50	1,06E+03	9,18E+02	1,06E+03	9,13E+02	1,13E+03	9,78E+02
100	2,76E+02	2,40E+02	2,75E+02	2,38E+02	2,94E+02	2,56E+02
150	1,25E+02	1,08E+02	1,24E+02	1,08E+02	1,32E+02	1,15E+02

DCF	Dosisleistung Alte Rechenkette		Dosisleistung Neue Rechenkette		Dosisleistung Neue Rechenkette	
	ANSI 1977		ANSI 1977		ICRP-116	
	radial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	axial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	radial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	axial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	radial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]	axial [ $\mu\text{Sv/h}$ ]
200	7,05E+01	6,13E+01	7,02E+01	6,10E+01	7,49E+01	6,54E+01
300	3,16E+01	7,05E+01	3,14E+01	2,73E+01	3,35E+01	2,93E+01

Für den Vergleich wurde die Dosisleistung zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  verglichen. Ein besonderes Augenmerk lag vor allem auf dem Neutronenspektrum, da dieses für die Dosisleistung der Pu-Be-Quellen deutlich relevanter ist. Vergleicht man die die Dosisleistung der alten mit der neuen Rechenkette bei Verwendung gleicher Dosiskonversionsfaktoren, so sind die Unterschiede vernachlässigbar. Durch Verwendung anderer Dosiskonversionsfaktoren vergrößern sich die Abweichungen auf teilweise 10 %.

Die Berechnungen wurden für eine ausgewählte Quelle durchgeführt. Bereits im Abstand von 50 cm ist die Dosisleistung um drei bis vier Größenordnungen niedriger als an der Manteloberfläche. Die Dosisleistung schwankt an der Oberfläche zwischen  $991 \text{ E}+05 \mu\text{Sv/h}$  (alte Rechenkette) und  $987 \text{ E}+05 \mu\text{Sv/h}$  (neue Rechenkette) bei Verwendung der gleichen Dosiskonversionsfaktoren. In 50 cm Entfernung ist die Ortsdosisleistung bereits um zwei Größenordnungen abgefallen und beträgt  $106 \text{ E}+03 \mu\text{Sv/h}$  (alte und neue Rechenkette). Die Abweichungen in der Ortsdosisleistung zwischen alter und neuer Rechenkette betragen fast ausschließlich weniger als 1 %.



**Abb. 5.11** Neutronen-Ortsdosisleistung der Pu-Be-Quellen zum Zeitpunkt  $t = 0$  für die alte und neue Rechenkette

Die Ergebnisse der neuen Rechenkette wurden mit den Dosiskonversionsfaktoren aus SRCMCNP als auch ICRP-116 ausgewertet.



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Mit geeigneten Rechenmethoden lassen sich verlässlich Vorhersagen für die radiologischen Auswirkungen des Transports und der Lagerung von wärmeentwickelnden Abfällen sowie Abfällen mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung erstellen, welche folglich für sicherheitstechnische Planungen und Bewertungen genutzt werden können. Das beinhaltet sowohl die vollständige Charakterisierung des Inventars sowie Berechnungen des Strahlungsfeldes im Umfeld der Gebinde. Die stofflichen Zusammensetzungen der Abfallprodukte sind durch die Simulation des radioaktiven Zerfalls und der Aktivierung über die gesamte Lagerzeit zu charakterisieren. Dieses so erweiterte Gesamtnuklidspektrum stellt eine realistischere Bewertungs- und Ausgangsbasis hinsichtlich der Dosisleistungsbestimmung der Gebinde dar.

Die GRS besitzt die notwendigen Programme und das Know-how zur wissenschaftlichen Bewertung von sicherheitstechnischen Fragen der Zwischenlagerung und des Transports. Für eine Modernisierung der Rechenkette zur Inventarcharakterisierung wurde dieses Forschungsvorhaben initiiert. Ziel dieses Vorhabens war es, weniger neue Simulationsprogramme zu entwickeln, sondern die dafür notwendigen bereits existierenden Rechenprogramme und Methoden der GRS im Bereich der Inventarbestimmung, der Aktivierungs- und Abschirmungsberechnung zu optimieren, d. h. an den aktuellen Stand von W&T anzupassen sowie zu bündeln und zu verbinden.

Dies wurde durch die Identifikation von repräsentativen Rechenfällen und eine Reevaluation und teilweises Ersetzen der genutzten Software erreicht. Eine zentrale Aufgabe des Vorhabens war es, die Informationsübergabe zwischen den Rechenschritten zu überarbeiten und an die identifizierten Rechenfälle anzupassen. Der Stand der entwickelten Anwendung WANIRAS umfasst grundlegende Funktionen der Rechenkette: Inventarberechnung und Strahlungsfeldberechnung. Diese wurden auf einen Satz an einfachen Rechenfällen, bestehend aus wärme- und nicht-wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen plus Behälter, optimiert.

Dabei wurde festgestellt, dass die neue Rechenkette, angesteuert über die Anwendung WANIRAS, gut mit den Ergebnissen der alten Rechenkette übereinstimmt. Dort, wo Abweichungen existieren, konnten diese zufriedenstellend durch eine Anpassung der Verfahren und genutzten Bibliotheken erklärt werden.

Ein nennenswerter Teil dieses Vorhabens war die Entwicklung von Beispielen, Richtlinien und Hilfestellungen, die es auch unerfahrenen Modellierern ermöglichen sollen, Standardprobleme aus dem deutschen Abfallmanagement zu berechnen und auszuwerten. Dies trägt signifikant zum Kompetenzauf- und -ausbau sowie dessen Erhalt auf diesem Themengebiet in der GRS bei. Die Bereitstellung einer ausbaufähigen Struktur durch die Anwendung WANIRAS, in der das Wissen und die Methoden gebündelt werden, garantiert außerdem Konsistenz in Auswertungen und Bewertungen, über das Maß der Erfahrung einzelner Programmierer hinaus.

Um noch zielgerichteter auf die bestehenden und zukünftigen Fragestellungen sowie auf komplexere Anwendungsfälle (z. B. variable Abschirmungen, komplexe Geometrien, andere Brennstoffe und Abbrandgeometrien etc.) eingehen zu können, ist es zielführend, wenn diese Vorgehensweise durch folgende Schritte weiterentwickelt und optimiert würde:

### **Erweiterung der Standardfälle von LAW/MAW-Abfällen**

Hier besteht das Interesse darin, spezifische Fragen zur Zusammensetzung der Quellterme und deren Änderungen während der Zwischenlagerung zu klären. Ein Beispiel wäre der nuklidspezifische Anteil zur Gesamtdosis in Fällen mit mehreren Tochternukliden.

Der Stand zum Ende dieses Vorhabens sind mehrere Module für die Berechnung der Dosis von LAW/MAW-Gebinden anhand einer vom Nutzer angegebenen Liste von Nukliden. Die Auswahl der Abschirmungsgeometrien beinhaltet das 200-l-Fass, einen MOSAIK®-Behälter, einen Konrad-Container mit Beton verfüllt sowie die VBA. Für die Zusammensetzung der Abfälle werden Beispiele von Verdampferkonzentraten, Harzen (jeweils anhand der Leitnuklide Co-60 und Cs-137) und Pu-Be-Quellen zu Verfügung gestellt. Die Dosis wird für das angegebene Inventar ausgerechnet.

Bei den Arbeiten zu den Quelltermen von MAW/LAW-Abfällen, wurde festgestellt, dass es weitere Nuklide gibt, z. B. Ag108m, Eu152, Eu154, Kr85, Ra226, Sr90, Th230, Th232, U235, U238, deren relativer Anteil an der Gesamtdosis als potenziell interessant in LAW/MAW-Abfallprodukten identifiziert wurde. Hier wäre es sinnvoll, wenn weitere Beispiele, die über die Leitnuklide hinausgehen, zur Verfügung gestellt werden würden. Außerdem wäre es für eine bessere Bewertung sinnvoll, eine Option zur Berechnung des relativen Anteils eines Nuklids an der Gesamtdosis bereitzustellen.

## **Optimierung der Rechenmethoden**

Die Rechenzeit für Monte-Carlo-Methoden, ist, wie aus diesem Bericht ersichtlich, ein wiederkehrendes Problem, das schnellere strahlenschutztechnische Auswertungen komplexerer Systeme einschränkt. Zur Rechenzeitoptimierung bei Monte-Carlo-Simulationen können z. B. Varianzreduktion oder die Einbindung fortschrittlicher Rechenmethoden betrachtet werden.

In diesem Vorhaben wurden MCNP®-Rechnungen für Szenarien, in denen eine dichte Abschirmung zu Problemen mit der transportierten Teilchenanzahl führt (Transport- und Lagerbehälter und MOSAIK®-Modell), durchgeführt. Dementsprechend wird eine deutlich höhere Anzahl an Teilchen benötigt, was gleichbedeutend mit längeren Berechnungszeiten ist. Bis zu einem gewissen Grad kann dies durch eine Aufteilung in mehrere Schichten und eine entsprechende Skalierung der „importances“ in jeder Schicht umgangen werden.

Das hierbei identifizierte Problem besteht darin, dass die Entwicklung dieser Szenarien ein iterativer Prozess und dementsprechend aufwändig in Standardfällen und Rechenbeispielen festzuhalten ist. Außerdem gibt es hier einen gegenläufigen Effekt der Rechenzeitverlängerung durch komplexere Schichtgeometrien. Optionen, um diese Problematik anzugehen, müssen auf ihre Effizienz und Machbarkeit untersucht werden. Eine mögliche Lösung wäre der Einsatz weiterer Programme (Advantage oder MAVRIC) gekoppelt mit MCNP®, um Varianzreduktion über verschiedene Techniken zu betrachten und Rechnungen mit großen Abschirmungen effizienter zu machen.

## **User-Interface-Optimierung**

Für die Entwicklung von WANIRAS wurden potentielle und aktuelle Nutzer und deren Prioritäten sowie Anwendungsfälle identifiziert. Nach der Umsetzung wurde jedes Modul durch eine begrenzte Anzahl an Nutzern getestet sowie mit der Vorgänger-Rechenkette verglichen und Kommentare wurden zur Verbesserung umgesetzt. Dies betraf teilweise die Funktionsfähigkeit, aber auch die Benutzerfreundlichkeit der entwickelten Oberfläche. Da Wissensmanagement und -weitergabe ein wichtiger Bestandteil dieses Vorhabens ist, wurde hier vor allem mit der Prämisse gearbeitet, dass die Benutzerfreundlichkeit, vor allem unter nicht erfahrenen Modellierern, die Haupthürde der Benutzung darstellt.

Es wird erwartet, dass mit dem Anstieg der Nutzeranzahl und der neuen Szenarien, Probleme und Bugs im Interface aufgezeigt werden, die zeitnah korrigiert werden müssen. Durch erweitertes Testen und nachfolgende Verbesserungen soll das WANIRAS-Interface auf den Bedarf der Nutzer angepasst werden, um einer größtmöglichen Benutzerbasis zu dienen. Dafür sollte eine Erweiterung der Rechenstandardfälle und Eingabemethoden, basierend auf dem Feedback und dem Bedarf der Nutzer, stattfinden. Denkbar und notwendig wären z. B. eine erweiterte Liste von Transport- und Lagerbehältern, Brennelementtypen und LAW-Behältern.

### **Lösung softwarespezifischer Fragestellungen zum Deployment und Integration mit dem GRS-Rechenserver**

Aktuell sind der Versand von Rechnungen an den Rechencluster, grundlegende Status-Checks und die Speicherung der Ergebnisse implementiert. Dabei wurde schon identifiziert, dass erweiterte Funktionen wie z. B. Fehlermeldungen von Nutzen sein könnten. Möglichkeiten der Umsetzung dieser Optionen in der Zukunft könnten zu einem effizienteren Arbeitsfluss in der Rechenkette führen.

### **Weiterverarbeitung der Modellierungsergebnisse**

Besonderes Augenmerk soll auch auf die Weiterverarbeitung der Daten gelegt werden. Das beinhaltet eine fragestellungsspezifische Auswertung der Simulationsdaten, Hilfen zur Interpretation und statistischen Auswertung sowie Validierungsoptionen. Die Möglichkeiten zur effektiven Kommunikation der Simulationsergebnisse soll hier durch Visualisierung verbessert werden. Dafür können native Optionen in den Simulationsprogrammen genutzt werden, bspw. Mesh-Tallies aus MCNP®, aber auch speziell für die Nutzer entwickelte Methoden.

Die Bereitstellung der Ergebnisse in einer Form, in der sie weiterverarbeitet werden können, ist im aktuellen Entwicklungsstand schon gegeben. Konkret bedeutet das, dass Tabellen aus dem „.out“ Format von SCALE und MCNP® separat abgespeichert werden können (z. B. im .csv oder .xlsx Format) und relevante Informationen an den Nutzer weitergegeben werden. Zur Kommunikation der Ergebnisse ist es allerdings oft interessant, Strahlungsfelder von Gebäuden, zusätzlich zu Dosisberechnungen an bestimmten Abständen, visuell darzustellen.

Um diese Anforderung umzusetzen, bietet sich die Visualisierung von Mesh-Tallies in MCNP®, abhängig von der Geometrie (zylindrisch oder kartesisch) und der Quellstärke, an. Beispiele und Standardfälle für solche Visualisierungen könnten dem Nutzer zur Verfügung gestellt werden. Alternativ könnten die Visualisierungsoptionen in MCNP® betrachtet werden. Die grafische Darstellung von Photonen- und Neutronenquellspektren wäre außerdem wertvoll und sollte als Option zur Weiterentwicklung betrachtet werden.

### **Vorbereitende Arbeiten zur langfristigen Weiterentwicklung von WANIRAS**

Analog zu seinem Vorgänger ist eine langfristige Nutzung von WANIRAS und dementsprechend auch kontinuierliche Weiterentwicklung an den sich verändernden Stand der Wissenschaft angestrebt. Daher sollte eine kontinuierliche Prüfung stattfinden, ob die Einbindung einer weiteren Backend-Software (bspw. die GRS-eigene Software VENTINA) praktisch möglich und technisch wünschenswert ist. Die dafür benötigten Voraussetzungen müssten herausgearbeitet und zusammengestellt werden.

Zum Abschluss dieses Forschungsvorhabens ist WANIRAS ein Interface für die standardmäßig verwendeten Rechencodes SCALE und MCNP®, angepasst an die deutschen Gegebenheiten. Allerdings sind die genutzten Programme lizenzpflichtig und man ist an die Rechenmethoden gebunden, die von der externen Software vorgegeben sind. Eine Einbindung von in Entwicklung befindlicher in-house Software (bspw. VENTINA mit MOTIVE) könnte eine weitere Rechenoption, die keine (oder nur begrenzte) externe Lizenzen erfordert, zur Verfügung zu stellen.

Ferner ist bei der entwickelten Anwendung WANIRAS die standardmäßige Wartung und Anpassung an externe Updates nötig. Neuauflagen der dahinter geschalteten Programme (SCALE/MCNP®) müssen zeitnah implementiert und getestet werden. Gleichmaßen erfordern Weiterentwicklungen und Veränderungen in den genutzten python-Paketen (z. B. PyQt), sowie in der GRS-Recheninfrastruktur, Überwachung und Anpassung, so dass die fehlerfreie Verfügbarkeit der Rechenkette sichergestellt werden kann.

Im Rahmen der ganzheitlichen dosimetrischen Charakterisierung von Abfallbinden könnten Betrachtungen zu Aktivierung von Strukturmaterialien als separater Rechenschritt zwischen Quelltermerstellung und Dosisberechnung mit aufgenommen werden





## Literaturverzeichnis

- /AME 77/ American National Standard Institute (ANSI): Neutron and gamma-ray flux-to-dose rate factors. Standard ANSI/ANS-6.1.1-1977:1977, American Nuclear Society (ANS): La Grange Park, IL, USA, 1977.
- /BEL 73/ M. J. Bell: ORIGEN - The ORNL Isotope Generation and Depletion Code, Im Rahmen RS1110 erweiterte GRS-Version 2000. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), ORNL-4628, UC-32, 152 S., Mai 1973.
- /BFS 15/ P. Brennecke: Anforderungen an endzulagernde radioaktive Abfälle, Endlagerungsbedingungen, Stand: Dezember 2014, Endlager Konrad. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), SE-IB-29/08-REV-2: Salzgitter, Februar 2015.
- /BRO 24/ Brookhaven National Laboratory: ENDF/B-VIII.0 Evaluated Nuclear Data Library. National Nuclear Data Center, Stand vom 28. Mai 2024, erreichbar unter <https://www.nndc.bnl.gov/endl-b8.0/>, abgerufen am 27. August 2024.
- /DEN 83/ W. Denk: SURF, ein Programm zur Berechnung der Bestrahlung aus Oberflächen. Interner GRS-Bericht, Juli 1983, updated Version 1988.
- /ENG 67/ W.W. Engle, JR.: A User's Manual for ANISN, A One Dimensional Discrete Ordinates Transport Code with Anisotropie Scattering. K-1693, 1967.
- /FED 20/ Federal State Unitary Enterprise "Mayak Production Association": Radioisotope products, The Mayak PA is the leading Russian producer and one of the world's largest manufacturers of radionuclide ionizing radiation sources (IRS) and other isotope products. The enterprise produces over 200 types of sources of alpha, beta, gamma and neutron radiation based on cobalt-60, iridium-192, cesium-137, americium-241, plutonium-238, plutonium-239, promethium-147, strontium-90, iron-55 and others, carbon-14 preparations, helium-3 gas for Russian consumers and for export. Erreichbar unter <https://www.po-mayak.ru/upload/iblock/bfd/bfd3bbcbd97066fa41086d0bc3b2ccda.pdf>, abgerufen am 16. Juni 2020.
- /GNS 19/ Gesellschaft für Nuklear Service mbH (GNS): MOSAIK Produktinfo. Hrsg.: GNS: Essen, Januar 2019.

- /GNS 23/ GNS Gesellschaft für Nuklear-Service mbH: CASTOR® V/19 Produktinfo. Erreichbar unter [https://www.gns.de/media/qxtlz0wd/castor\\_v19\\_produk-tinfo\\_2023\\_10\\_de\\_v01.pdf](https://www.gns.de/media/qxtlz0wd/castor_v19_produk-tinfo_2023_10_de_v01.pdf), Stand von 2023.
- /GRS 10/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Sicherheitstechnische Aspekte der langfristigen Zwischenlagerung von bestrahlten Brennelementen und verglastem HAW, GRS-A-3597. 2010.
- /GRS 21/ Krüger, J., Bartos, O., Hummelsheim, K., Kaufholz, P.: Beratung und Unterstützung zu entsorgungsspezifischen Fragestellungen vor der Endlagerung zu radioaktiven Abfällen in der Bundesrepublik Deutschland - Predisposal Waste Management, Erfassung und Charakterisierung von in Deutschland lagernden PuBe-Neutronenquellen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-A-4031, 2021.
- /GRS 24c/ Krüger, J.: Weiterentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik bei der Sicherheit der Behandlung bestrahlter Brennelemente, Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle und radioaktiver Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung, AP 2 Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS-717, Bd. 717, 163 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Januar 2024.
- /GRS 24b/ Braunroth, T., Rowold, F.: Weiterentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik bei der Sicherheit der Behandlung bestrahlter Brennelemente, Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung, Teilbericht zum AP 1.6: Methodenbewertung zerstörungsfreier Prüfmethode. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS, Bd. 716, GRS-716, 75 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Januar 2024.
- /HES 99/ Hesse, U., Sieberer, J.: ANITABLE-99, das GRS-Codesystem für Abschirmungsrechnungen mit ANISN, EURLIB-97 erweiterte UNIX-Version mit gekoppelten Abschirm- und Reaktivitätsrechnungen. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, September 1999.

- /HES 01/ Hesse U., H. K.: GRSAKTIV-II, Programmsystem zur Berechnung der Aktivierung von Brennelement- und Core-Bauteilen in Vielgruppendarstellung, GRS-A-3002. Juli 2001.
- /HES 08/ Hesse, U., Denk, W., Deitenbeck, H.: OREST- Eine direkte Kopplung von HAMMER und ORIGEN zur Abbrandsimulation von LWR-Brennstoffen, 1984, Version 2008, GRS-63. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2008.
- /HUM 01/ Hummelsheim, K., Hesse, U.: Abbrand- und Aktivierungsrechnungen von UO<sub>2</sub>- und MOX-Brennelementen für DWR unter Berücksichtigung der Verunreinigungen in Brennstoff und Strukturmaterial, GRS-A-2924. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, März 2001.
- /IAE 20/ IAEA - International Atomic Energy Agency: International Catalogue of Sealed Radioactive Sources and Devices, The ICSRS is a comprehensive catalogue of the data of manufacturers on sealed radioactive sources and the devices in which they are or can be used. The system includes data on sources, the devices housing the sources, and details of manufacturers and suppliers worldwide. Erreichbar unter <https://www.iaea.org/resources/databases/international-catalogue-of-sealed-radioactive-sources-and-devices>, abgerufen am 1. August 2020.
- /ICRP 69/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): P15 Protection against Ionizing Radiation from External Sources, A Report by Committee 3 of the International Commission on Radiological Protection. ICRP, 40 S., 1969.
- /ICRP 71/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): P21 Data for Protection against Ionizing Radiation from External Sources: Supplement to ICRP Publication 15, A Report by Committee 3 of the International Commission on Radiological Protection. ICRP, 47 S., 1971.
- /ICRP 90/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): P60 1990 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection, ICRP Publication 60. 211 S., 1990.

- /ICRP 96/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): P74 Conversion Coefficients for use in Radiological Protection against External Radiation, ICRP Publication 74. Annals of the ICRP, Bd. 26 (3-4), 1996.
- /ICRP 07a/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): P103 The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection, ICRP Publication 103. Ann. ICRP 37(2-4), 339 S., 2007.
- /ICRP 07b/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Supporting Guidance Document - Interpretation of Bioassay Data, ICRP Committee 2 (Doses from Radiation Exposures); Draft document. 2007.
- /ICRP 10/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): P116 Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures, ICRP Publication 116. Ann. ICRP 40(2-5), 261 S., 2010.
- /INT 07/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Die Empfehlungen von 2007 der Internationalen Strahlenschutzkommission, ICRP-Veröffentlichung 103; Verabschiedet im März 2007, Deutsche Ausgabe herausgegeben vom Bundesamt für Strahlenschutz. 2007.
- /JAP 24a/ Japan Atomic Energy Agency (JAEA): Errata of JENDL-5 sublibraries. Nuclear Data Centre, Stand vom 27. August 2024, erreichbar unter [https://www.ndc.jaea.go.jp/jendl/j5/JENDL-5\\_Errata.html](https://www.ndc.jaea.go.jp/jendl/j5/JENDL-5_Errata.html), abgerufen am 27. August 2024.
- /JAP 24b/ Japan Atomic Energy Agency (JAEA): FRENDY. Nuclear Science and Engineering Center - Research Group for Reactor Physics and Thermal Hydraulics Technology, Stand vom 27. August 2024, erreichbar unter [https://rpg.jaea.go.jp/main/en/program\\_frendy/](https://rpg.jaea.go.jp/main/en/program_frendy/), abgerufen am 27. August 2024.
- /KLE 97/ J. Kleinert, M. Matthes : EURLIB97, 175 Neutronen- und 42 Gamma-Multigruppenbibliothek für Abschirmungs- und Transportrechnungen. IKE Stuttgart Forschungsinstitut für Kerntechnik und Energiewandlung, KE 6 - FB 88, Dezember 1997.

- /KON 19/ Koning, A. J., Rochman, D., Sublet, J.-C., Dzysiuk, N., Fleming, M., van der Marck, S.: TENDL: Complete Nuclear Data Library for Innovative Nuclear Science and Technology. Nuclear Data Sheets, Bd. 155, S. 1–55, DOI 10.1016/j.nds.2019.01.002, 2019.
- /KON 24/ Konning, A. J., Rochman, D.: TENDL-2023 nuclear data library, TALYS-based evaluated nuclear data library. Paul Scherrer Institut (PSI), IAEA - International Atomic Energy Agency, Stand vom 20. August 2024, erreichbar unter [https://tendl.web.psi.ch/tendl\\_2023/tendl2023.html](https://tendl.web.psi.ch/tendl_2023/tendl2023.html), abgerufen am 27. August 2024.
- /KTE 15/ Melzer, J., Bayiha, P.-S., Himmerkus, F.: Zulassung von Altbehältern - Die Verlorene Betonabschirmung (VBA). Hrsg.: Kontec, 2015.
- /LAN 15/ Los Alamos National Laboratory: Characterization of Previously Recovered Russian Origin PuBe Sources for Isotopic Content by Los Alamos National Laboratory. 2015.
- /LOS 13/ Los Alamos National Laboratory (LANL): Introduction to the ENDF Formats. Ts- Nuclear Information Service, Stand vom 14. Februar 2013, erreichbar unter <https://t2.lanl.gov/nis/endf/intro01.html>, abgerufen am 27. August 2024.
- /LOS 23/ Los Alamos National Laboratory (LANL): NJOY—Nuclear Data Processing Code. Stand vom 25. Juli 2023, erreichbar unter <https://www.njoy21.io/>, abgerufen am 27. August 2024.
- /NUC 24/ Nuclear Energy Agency (NEA): JEFF-3.3. Stand vom 27. August 2024, erreichbar unter <https://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/jeff33/index.html>, abgerufen am 27. August 2024.
- /OAK 23/ Oak Ridge National Laboratory (ORNL): SCALE 6.3.1 User Manual — SCALE 6.3.1 documentation. Stand vom 20. April 2023, erreichbar unter <https://scale-manual.ornl.gov/>, abgerufen am 22. April 2024.
- /ORN 24/ Wieselquist, W., Lefebvre, R.: SCALE 6.3.2 User Manual. DOI 10.2172/2361197, 2024.

- /PEL 13/ Pelowitz, D. B.: MCNP6 User's Manual, Version 1.0, Manual Rev. 0. Los Alamos National Laboratory, LA-CP-13-00634, Rev. 0, 765 S., Mai 2013.
- /PNN 11/ McConn, R. J., Gesh, J. J., Pagh, P. T., Rucker, R. A., Williams, R. G.: Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling. Hrsg.: Pacific Northwest National Laboratory, 2011.
- /QUA 93/ Quade, U., Hesse, U.: Optimierung von Verfahren zur Berechnung der Ortsdosisleistung von Plutonium und plutoniumhaltigen Brennelementen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-A-1963, September 1993.
- /RIS 11/ Risner, J. M., Wiarda, D., Dunn, M. E., Miller, T. M., Peplow, D. E., Patton, B. W.: Production and Testing of the VITAMIN-B7 Fine-Group and BUGLE-B7 Broad-Group Coupled Neutron/Gamma Cross-Section Libraries Derived from ENDF/B-VII.0 Nuclear Data. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), NUREG/CR-7045, ORNL/TM-2011/12, 129 S., September 2011.
- /SPH 25/ Sphinx: Sphinx documentation. Stand vom 2. März 2025, erreichbar unter <https://www.sphinx-doc.org/en/master/>, abgerufen am 15. April 2025.
- /STA 74/ Stahlschlüssel Wegst GmbH Verlag: Nachschlagewerk Stahlschlüssel, Entschlüsseln von Stahlbezeichnungen und Auffinden von Vergleichswerkstoffen. Auflage 10. 1974.
- /VDM / VDM Vereinigte deutsche Metallwerke AG/Duisburg: Chemische Zusammensetzung von Zirkaloy-2 und Zirkaloy-4 (ASTM-B-353-RA-2), Tabelle 5, Kap. III 7-1.
- /WER 17/ Werner, C. J.: MCNP6 User's Manual, Version 6.2, Manual Rev.0. Los Alamos National Laboratory, LA-UR-17-29981, Oktober 2017.
- /WER 18/ Werner, C. J.: MCNP Version 6.2, Release Notes, LA-UR-18-20808. Hrsg.: Los Alamos National Laboratory (LANL), LANL, 41 S.: Los Alamos, NM, USA, 2018.

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Alte Rechenkette mit der Programmabfolge zur Bestimmung der Dosisleistung ausgehend von der Materialzusammensetzung, Geometrie und Quelltermberechnung bis zum Teilchentransport mit ANISN/SURF als 1d- oder MCNP <sup>®</sup> als 3d-Transportprogramm .....	3
Abb. 1.2	Graphische Darstellung der abzubildenden Prozessschritte .....	11
Abb. 1.3	Graphische Darstellung der abzubildenden Prozessschritte für den Spezialfall verglaste Abfälle .....	11
Abb. 1.4	Querschnitt einer IBN11 Neutronenquelle.....	22
Abb. 2.1	Schematische Darstellung der Struktur von WANIRAS.....	30
Abb. 2.2	Schematische Darstellung der Erstellung von SCALE Input Files für radioaktive Quellen .....	32
Abb. 2.3	Schematische Darstellung der Erstellung von SCALE Input Files für Brennelemente und Kokillen .....	33
Abb. 2.4	Schematische Darstellung der Schnittstelle zwischen SCALE und MCNP <sup>®</sup> sowie der Erstellung von Input Files für MCNP <sup>®</sup> .....	34
Abb. 2.5	Schematische Darstellung des Postprocessing von MCNP <sup>®</sup> -Ergebnissen.....	35
Abb. 2.6	Startoberfläche von WANIRAS .....	37
Abb. 2.7	Exemplarische Erstellung der Brennelementpartitionen .....	38
Abb. 2.8	Quelltermerstellung für „General Decay“ .....	39
Abb. 2.9	Erstellung der Uran-Partitionen für ein UO <sub>2</sub> -Brennelement .....	40
Abb. 2.10	Auswahl der Geometrie und Materialeigenschaften für die Dosisberechnung.....	41
Abb. 2.11	Darstellung der grafischen Auswertung der Dosisberechnung .....	43
Abb. 2.12	Beispiel eines Eintrages aus dem FAQ-Abschnitt im Handbuch .....	45
Abb. 2.13	Beispiel eines Eintrages zum Backend in der Code Dokumentation .....	46
Abb. 3.1	Durch SCALE/ORIGEN errechnete Quelltermspektren für vier verschiedene Energiegruppen (30 lineare Bins, 30 logarithmische Bins, ENDF-47G, 1.000 logarithmische Bins) .....	49
Abb. 3.2	Prozentuale Ergebnisdifferenz der Ortsdosisleistung im Vergleich zur ENDF/B-VII.1 Referenzbibliothek mit 47 Energiegruppen .....	51



Abb. 3.3	Dosisleistung an unterschiedlichen Tally-Positionen bei unterschiedlichen Energiegruppeneinteilungen des Quellterms .....	52
Abb. 3.4	Abweichung zur Referenzlösung in % der Dosisleistung für unterschiedliche Energiegruppen (30 lineare und 30 logarithmische Energiegruppen) und Abstände .....	53
Abb. 3.5	Abweichung zur Referenzlösung in % der Dosisleistung für unterschiedliche Energiegruppen (50 lineare und 50 logarithmische Energiegruppen) und Abstände .....	54
Abb. 3.6	Schematische Darstellung der betrachteten idealisierten Geometrie .....	56
Abb. 3.7	DCFs für alle in WANIRAS implementierten Geometrien aus ICRP 116 .....	58
Abb. 3.8	Vergleich von historischen DCFs für Photonen und Neutronen mit DCFs aus ICRP 116 mit iso-Geometrie .....	62
Abb. 3.9	WANIRAS-Schnittstelle für den Auswahl der Quellenoptionen aus einer SCALE-Datei .....	65
Abb. 3.10	Fenster „MCNP source cards“ mit den ausgewählten Quellenoptionen in MCNP®-Format .....	66
Abb. 3.11	Gesamtaktivität Brennstoff pro BE (533 kg/BE) .....	71
Abb. 3.12	Dominante Nuklide aus der Aktivierung der Kopf- und Fußstücke eines DWR-BE .....	73
Abb. 3.13	Gesamtaktivität der aktivierten Strukturmaterialien pro BE .....	73
Abb. 4.1	Neutronenspektren von verglasten Abfällen .....	82
Abb. 4.2	Massen und Aktivitätsinventar eines 16x16 DWR-BE (40GWd) und Vergleich der Rechencodes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette nach fünf Jahren Abklingzeit .....	86
Abb. 4.3	Zeitlicher Verlauf Aktivität von sechs Nukliden im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette .....	87
Abb. 4.4	Zeitlicher Verlauf von Photonenrate, Neutronenrate, Rate von Fissionsneutronen, Rate von ( $\alpha$ ,n)- Neutronen, Masse und Aktivität im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette .....	88
Abb. 4.5	Anteil des Zerfalls von Nukliden an der Neutronenproduktion eines 16x16 DWR-BE (40 GWd/MgSM) und Vergleich der Rechencodes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette (Abklingzeit fünf Jahre) .....	90

Abb 4.6	Zeitlicher Verlauf der Neutronenrate für die sechs dominantesten Nuklide im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette .....	91
Abb. 4.7	Zeitlicher Verlauf der Gammaleistung für sechs Nuklide im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette .....	95
Abb. 4.8	Photonen und Neutronenspektrum eines 16x16 DWR-BE (40 GWd/MgSM) und Vergleich der Rechencodes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette (5 Jahre Lagerzeit) .....	96
Abb. 4.9	Vergleich der Inventare von 16x16 DWR-BE mit 40 (links), 5 (mitte) und 65 (rechts) GWd/MgSM nach 5 Jahren Lagerzeit .....	99
Abb. 4.10	Vergleich der dominanten Nuklide am Neutronenfluss von 16x16 DWR-BE mit 40 (links), 5 (mitte) und 65 (rechts) GWd/MgSM nach 5 Jahren Lagerzeit.....	100
Abb. 4.11	Zeitlicher Verlauf der Fissionsneutronenrate für Cm-244 und Pu-240 im Vergleich der Codes der alten (Orest) und neuen (SCALE) Rechenkette für 5 (links) und 65 (rechts) GWd/MgSM Abbrand.....	101
Abb. 4.12	Zeitlicher Verlauf der Rate von ( $\alpha$ ,n)-Neutronen im Vergleich der Codes der alten (Orest) und neuen (SCALE) Rechenkette. DWR 16x16 Brennelementen mit 5 (links) und 65 (rechts) GWd/MgSM Abbrand.....	102
Abb. 4.13	Vergleich der Inventare von 16x16 DWR-UO <sub>2</sub> -BE (links) und 16x16 MOX-BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit.....	104
Abb. 4.14	Vergleich der dominanten Nuklide am Neutronenfluss von 16x16 DWR-UO <sub>2</sub> -BE (links) und 16x16 MOX-BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit.....	105
Abb. 4.15	Zeitlicher Verlauf von Photonenrate, Neutronenrate, Rate von Fissionsneutronen, Rate von ( $\alpha$ ,n)- Neutronen, Masse und Aktivität im Vergleich der Codes der alten (OREST) und neuen (SCALE) Rechenkette .....	107
Abb. 4.16	Vergleich der Inventare von 16x16 DWR-UO <sub>2</sub> -BE (links) und SWR-UO <sub>2</sub> -BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit.....	108
Abb. 4.17	Vergleich der dominanten Nuklide am Neutronenfluss von 16x16 DWR-UO <sub>2</sub> -BE (links) und SWR-UO <sub>2</sub> -BE (rechts) mit 40 GWd/MgSM Abbrand.....	109
Abb. 4.18	Explosionszeichnung des generischen Behältermodells /BRA 24/ .....	111

Abb. 4.19	Photonen- und Neutronenspektrum eines DWR-BE mit 40 GWd/MgSM Abbrand nach 5 Jahren Lagerzeit.....	114
Abb. 4.20	Dosisleistung von Photonen (links) und Neutronen (rechts) in $\mu\text{Sv/h}$ in verschiedenen Abständen von der Oberfläche des Behälters in einer Höhe von 288,6 cm.....	115
Abb. 4.21	Radiale Dosisleistung von Photonen und der relative Fehler in einer Höhe von 288,6 cm in der näheren Umgebung des Behälters .....	116
Abb. 4.22	Radiale Neutronendosisleistung und der relative Fehler in einer Höhe von 288,6 cm in der näheren Umgebung des Behälters.....	117
Abb. 5.1	Aufbau eines MOSAIK <sup>®</sup> -Behälters /GES 19/ .....	121
Abb. 5.2	Schematische Darstellung der VBA Typ I /KTE 15/.....	123
Abb. 5.3	Konrad-Container Typ IV /BFS 15/ .....	125
Abb. 5.4	Querschnitt eines MOSAIK <sup>®</sup> -Behälters gefüllt mit Ionenaustauscherharzen /KRÜ 24/ .....	127
Abb. 5.5	Photonenspektrum von Ionenaustauscherharzen berechnet durch die alte und neue Rechenkette (t = 1 Jahr) .....	128
Abb. 5.6	Gamma-Dosisleistung der Ionenaustauscherharze zum Zeitpunkt t = 1 Jahr mit der alten Rechenkette und WANIRAS .....	129
Abb. 5.7	Dosisleistung und relativer Fehler von konzentrierten Ionenaustauscherharzen im MOSAIK <sup>®</sup> -Behälter (t = 1 Jahr).....	129
Abb. 5.8	Querschnitt einer IBN11 Neutronenquelle.....	131
Abb. 5.9	Gesamtneutronenspektrum der IBN11 Pu-Be-Quelle berechnet durch die alte und neue Rechenkette.....	133
Abb. 5.10	Gesamtgammalinienpektrum der IBN11 Pu-Be-Quelle berechnet durch die alte und neue Rechenkette.....	134
Abb. 5.11	Neutronen-Ortsdosisleistung der Pu-Be-Quellen zum Zeitpunkt t = 0 für die alte und neue Rechenkette .....	135

## Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1	Prozessschritte und Software der Rechenkette .....	2
Tab. 1.2	Gekoppelte Neutronen-Gamma Bibliotheken aus SCALE.....	9
Tab. 1.3	Anforderungen an Input und Output für die einzelnen Prozess- und Rechenschritte.....	14
Tab. 1.4	Anforderungen für verschiedene Nutzergruppen.....	17
Tab. 1.5	Zusammenfassung der Parameter für alle Brennelemente Referenzfälle .....	19
Tab. 1.6	Eigenschaften der für den Gamma-Referenzfall genutzten Ionenaustauscherharze .....	23
Tab. 1.7	Zusammenfassung des Auswahlverfahrens.....	24
Tab. 3.1	Zusammenfassung der Tallies für die in WANIRAS hinterlegten Geometrievorlagen zur Dosisberechnung.....	68
Tab. 3.2	Zonen- und Materialaufteilung für die Brennelement- Aktivierungsrechnung .....	71
Tab. 3.3	Energiegruppen für die Rechnung sowie neu bestimmte Spektralindizes für die drei Zonen des Brennelementes .....	72
Tab. 4.1	Standard Wirkungsquerschnittsbibliotheken für verschiedene Reaktor- und Brennelementtypen /WIE 24/.....	77
Tab. 4.2	Zusammensetzung der Gläser für die Borosilikat Option in ORIGEN/SCALE /WIE 24/ (Elemente mit $(\alpha,n)$ -Ertrag) .....	80
Tab. 4.3	Aktivität, Neutronenraten und deren Anteil an der Gesamtneutronenrate über die gesamte Lagerzeit .....	83
Tab. 4.4	Abweichungen zwischen den Rechenkettens nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit (Masse) für die fünf massenreichsten Nuklide, sowie für einige Nuklide, die signifikant zur Strahlenbelastung beitragen .....	84
Tab. 4.5	Abweichungen zwischen den Rechenkettens für die Photonenrate, Neutronenrate ( $(\alpha,n)$ - sowie Fissionskomponente), Aktivität, Masse und Gammaleistung für ein 16x16 DWR-BE mit einem Abbrand von 40 GWd/Mg SM .....	85
Tab. 4.6	Abweichungen zwischen den Rechenkettens für die fünf Nuklide, die am meisten zur Gammaleistung beitragen nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit .....	92

Tab. 4.7	Abweichungen zwischen den Rechenkettten für Nuklide, die signifikant zur Photonenemission beitragen nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit (Masse).....	93
Tab. 4.8	Abweichungen zwischen den Rechenkettten für Cs-137 und Ba-137m nach 1, 10 und 40 Jahren Abklingzeit (Aktivität) .....	94
Tab. 4.9	Abweichungen zwischen den Rechenkettten für ein 16x16 DWR-BE mit einem Abbrand von 5 GWd/MgSM.....	98
Tab. 4.10	Abweichungen zwischen den Rechenkettten für ein 16x16 DWR-BE mit einem Abbrand von 65 GWd/MgSM.....	98
Tab. 4.11	Abweichungen zwischen den Rechenkettten für ein 16x16 DWR-MOX-BE mit einem Abbrand von 40 GWd/MgSM.....	103
Tab. 4.12	Abweichungen zwischen den Rechenkettten für ein 10x10 SWR-UO <sub>2</sub> -BE mit einem Abbrand von 40 GWd/MgSM .....	106
Tab. 4.13	Abmessungen des generischen Transport- und Lagerbehälters .....	110
Tab. 4.14	Einzelne Komponente des generischen Behältermodells und deren Materialien wie in Abb. 4.18 dargestellt.....	111
Tab. 4.15	Vergleich der verschiedenen MCNP®-Tallies und der relativen Fehler für die Photonenendosisleistung .....	113
Tab. 4.16	Vergleich der verschiedenen MCNP®-Tallies und der relativen Fehler für die Neutronenendosisleistung.....	113
Tab. 5.1	Abmessungen für einen MOSAIK®-Behälter vom Typ M II-15 EI /BRE 15/, /GES 19/.....	122
Tab. 5.2	Daten zur VBA aus Normalbeton (NBA) und Schwerbeton (SBA) und zum 200-I-Fass /KTE 15/ .....	122
Tab. 5.3	Vergleich der Rechenzeit zwischen verschiedenen Geometriedefinitionen (Rechnung mit 10 <sup>8</sup> Teilchen) .....	124
Tab. 5.4	Abmessungen des Konrad-Containers Typ IV /BRE 15/ .....	124
Tab. 5.5	In WANIRAS verfügbare Materialien für die Zusammensetzung von Abfällen .....	126
Tab. 5.6	Nuklidkonzentration für die Modellierung der Ionenaustauscherharze ...	127
Tab. 5.7	Von MCNP® berechnete Dosisleistung in der alten Rechenkette und in WANIRAS.....	130
Tab. 5.8	Plutonium-Vektoren (Angaben in Gew.-%).....	131

Tab. 5.9	Zusammensetzung und daraus berechnete Neutronenquellstärke und Aktivität von IBN11, V zum Zeitpunkt $t = 0$ .....	132
Tab. 5.10	Berechnete Neutronen-Dosisleistung der Pu-Be-Quellen (Zeitpunkt $t = 0$ ) .....	134
Tab. A. 1	Dosiskonversionsfaktoren für Photonen.....	161
Tab. A. 2	Dosiskonversionsfaktoren für Neutronen .....	167



## Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bezeichnung	Kurzbeschreibung
ACOND		Führt die Berechnung der Kernzahldichten aus Materialgemischen aus. Des Weiteren werden Breitgruppen-Wirkungsquerschnitte für alle Zonen von ANISN bereit gestellt.
ANISN	A One Dimensional Discrete Ordinates Transport Code With Anisotropic Scattering	ANISN ist ein FORTRAN Programm, das die eindimensionale Boltzmann-Transportgleichung für Platten-, Zylinder- oder Kugelgeometrie löst. Als sekundäre Berechnung kann der detaillierte Fluss, der als Lösung der Boltzmann-Gleichung generiert wird, verwendet werden, um eine Gruppenreduktion der Querschnitte durchzuführen.
ANITABLE		Ermöglicht gekoppelte Abschirmungs- und Reaktivitätsrechnungen. Ist ein Inputprozessor, der die Eingabedaten erfasst und prüft. Es erfolgt eine automatisierte Erstellung der Eingabedateien für alle darauffolgenden Programm-Module wie ACOND, ANISN, NGSRC, SURF und ORIGEN. Das System erleichtert die Bedienung dieser gekoppelten Programmabläufe, indem alle notwendigen und oft gemeinsamen Informationen geprüft werden und in sich konsistent aus einer einzigen, übersichtlichen Eingabetabelle gesteuert werden.
ANSI	American National Standards Institute	Eine private, gemeinnützige, amerikanische Organisation zur Koordinierung der Entwicklung freiwilliger Normen in den Vereinigten Staaten.
BUGLE	Broad User Group Library ENDF/B	Aus den Kerndaten von ENDF/B abgeleitete Bibliotheken mit Breitgruppen Querschnittsdaten. Ihr Haupteinsatzgebiet sind LWR-Abschirmrechnungen
CSEWG	Cross Section Evaluation Working Group	
DCF	Dose Conversion Factor	Dosiskonversionskoeffizienten zur Berechnung der Dosisleistung
DWR	Druckwasserreaktor	
ENDF	Evaluated Nuclear Data File	Das Format für die Speicherung und Abfrage ausgewerteter nuklearer Daten für Anwendungen der Nukleartechnologie
ENDF/B	Evaluated Nuclear Data File	Die von der Cross Section Evaluation Working Group (CSEWG) genehmigte Wirkungsquerschnitts Bibliothek.
Eurlib	European Library	120 Gruppen gekoppelte Neutronen-, Gamma-Bibliothek erstellt von ISPRA
FAQ	Frequently Asked Questions	
GAMLIB	Gamma Library	Breitgruppen-Gamma-Wirkungsquerschnittsbibliothek mit 50 Gamma-Gruppen
GRSAKTIV-II		Programmsystem zur Berechnung der Aktivierung. Das Programm ist nicht mehr auf weiche Neutronenspektren beschränkt sondern hat einen erweiterten Einsatzbereich und kann auch bei harten Neutronenspektren, wie sie beim DWR im Stahl



Abkürzung	Bezeichnung	Kurzbeschreibung
		des Reaktordruckbehälters herrschen, eingesetzt werden.
HAW	High activity waste	Hochradioaktiver Abfall
ICRP74	International Commission on Radiological Protection	Internationale Strahlenschutzkommission
JEFF	Joint Evaluated Fission and Fusion	Die JEFF-Suite nuklearer Datenbibliotheken enthält eine Reihe unterschiedlicher Datentypen, darunter Daten zur Wechselwirkung von Neutronen und Protonen, Daten zum radioaktiven Zerfall, Daten zur Spaltungsausbeute und Daten zum thermischen Streugesetz.
KENO		ein dreidimensionales (3D) Monte-Carlo-Kritikalitätstransportprogramm, das als Teil des SCALE-Codesystems entwickelt und gepflegt wird. Derzeit werden in SCALE zwei Versionen des Codes unterstützt (KENO V.a und KENO-VI).
LAW	Low activity waste	Niedrig radioaktiver Abfall
MADE	Maximal Dose Equivalent	Maximale Äquivalentdosis (historische Dosisgröße)
MAW	Medium activity Waste	Mittelradioaktiver Abfall
MCNP	Monte-Carlo N-Particle Transport Code	Simulation von Teilchenwechselwirkungen zwischen Neutronen, Photonen und Elektronen usw.
MOTIVE	Modular Tool for Transport and Inventory Calculation	GRS-Code, zur Bestimmung des Nuklidinventars und daraus abgeleiteter Größen, das auf modulare Weise externe Programme zur dreidimensionalen Neutronenflussberechnung und zur Nuklidinventarberechnung koppelt.
NBA	Normalbeton	
NGSRC	Neutron and gamma source generator	Quelltermgenerator NGSRC errechnet aus den OREST oder ORIGEN erstellten Gamma- und Neutronenstrahlung die Quellstärken einschließlich der (a,n)-Neutronen und der Bremsstrahlung. Das Quellspektrum wird für die Neutronen und für die Gammas in beliebige Energiegruppen unter Teilchen- und Energieerhaltung kondensiert. und für ANISN oder MCNP bereitgestellt.
OOP	objektorientierte Programmierung	
OREST		OREST ist die Kopplung eines Spektralcodes (HAMMER), der eine Brennstabzelle neutronenphysikalisch berechnet und dem Zerfallscode ORIGEN zur Bestimmung des Nuklidinventars in abgebranntem LWR-Brennstoff. Die Zelle ist durch einen Brennstoffbereich (Pellet), einen Heliumspalt, einen Hüllrohrbereich und einen Moderatorbereich (H <sub>2</sub> O) beschrieben .
ORIGAMI	ORIGEN Assembly Isotopics	Ein SCALE Coder zur Berechnung der Isotopenzusammensetzungen bei Abbrand von UO <sub>2</sub> -Brennstoff für Leichtwasserreaktoren unter Verwendung des ORIGEN-Transmutationscodes mit vorgenerierten ORIGEN-Bibliotheken.

Abkürzung	Bezeichnung	Kurzbeschreibung
ORIGEN	Oak Ridge Isotope Generation code	Ein SCALE Coder zur Berechnung zeitabhängige Konzentrationen, Aktivitäten und Strahlungsquellensterme für eine große Anzahl von Isotopen, die gleichzeitig durch Neutronentransmutation, Kernspaltung und radioaktiven Zerfall erzeugt oder abgebaut werden.
ORIGEN-X		Erweiterung der ORIGEN-Bibliothek, um zusätzliche Zerfallskanäle von Strukturmaterialien, Aktiniden und Spaltprodukte berücksichtigen zu können.
RST	reStructuredText	
SBA	Schwerbeton	
SCALE	Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation	Das SCALE-Codesystem ist eine weit verbreitete Modellierungs- und Simulationssuite für nukleare Sicherheitsanalysen und -designs, die von der Abteilung für Reaktoren und nukleare Systeme (RNSD) des ORNL entwickelt, gewartet, getestet und verwaltet. SCALE bietet einen Toolkit für Kritikalitätssicherheit, Reaktorphysik, Strahlenschutz, Charakterisierung radioaktiver Quellsterme sowie Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen.
Serpent		Ein dreidimensionaler Code für den kontinuierlichen Energietransport von Neutronen und Photonen, der seit 2004 am Technischen Forschungszentrum Finnland (VTT) entwickelt wird.
SLIG	SCALE/ORIGEN Library Generator (SLIG)	Eine externe Anwendung zur Erstellung zur Erstellung von SCALE Eingabedateien
SRCMCNP		Bereitet für MCNP den Quellsterm aus den vorherigen NGSRC Rechenergebnissen. Das selbständige Programm gibt Neutronen und Gammaquellsterme für MCNP Rechenläufe aus.
SURF		Ausgehend von ANISN-Resultaten, die als Neutronen- und Gammaflüsse vorliegen, wird der 3-d-Strahlentransport ins Vakuum aus begrenzten Oberflächen zu den gewünschten Aufpunkten berechnet und die Dosisleistung bestimmt. Im Nahfeld wird die geometrische Abschwächung der Strahlung im Vakuum ausgehend von realen Körpern zu beliebig entfernten oder positionierten Aufpunkten berechnet. Dabei wird für begrenzte Oberflächen der Strahlentransport im Vakuum exakt gelöst.
SWR	Siedewasserreaktor	
TRITON	Transport Rigor Implemented with Time-dependent Operation for Neutronic depletion	Der TRITON-Computercode ist eine Mehrzweck-SCALE-Steuersequenz für Transport, Abbrand sowie Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse.
VBA	Verlorene Betonabschirmung	
VENTINA	VErsatile Numerical Tool for INventory cAlculations	VENTINA ist ein von der GRS entwickeltes flexibles Softwaremodul für die Lösung der nuklearen Abbrandgleichungen (Bateman-Equations). Es wird im Stand-Alone-Modus für nulldimensionale Abbrandprobleme, sowie als mikroskopisches Abbrandmodul in der Kopplung an ein Abbrandprogramm wie MOTIVE eingesetzt.
VITAMIN	Versatile Integrated Techniques using AMPX and MINX for Investigating Neutronics	Aus den Kerndaten von ENDF/B abgeleitete Bibliotheken mit Feingruppen Querschnittsdaten. Ihr Haupteinsatzgebiet sind LWR-

Abkürzung	Bezeichnung	Kurzbeschreibung
		Abschirmrechnungen. VITAMIN-B6 und B7 haben 199 Neutronengruppen und 42 Gammagruppen
WANIRAS	Weiterentwicklung und Anpassung der numerischen Verfahren zur Inventarcharakterisierung zwischengelagerter radioaktiver Abfälle und Bewertung des Strahlungseinflusses	In diesem Vorhaben entwickelte Anwendung zur Berechnung der Strahlenexposition in der Zwischenlagerung

**A Tabellierte Werte für Dosiskonversionskoeffizienten**

**A.1 Photonen**

**Tab. A. 1** Dosiskonversionsfaktoren für Photonen

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/(p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/(p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
0,01	3,96E-06	0,0055	0,11244	0,01	2,78E-06	1,00E-02	0,062	0,0000	0,02	0,029
0,03	5,82E-07	0,015	0,019517	0,015	1,11E-06	1,50E-02	0,157	0,0310	0,033	0,071
0,05	2,90E-07	0,025	0,008002	0,02	5,88E-07	2,00E-02	0,238	0,0868	0,0491	0,11
0,07	2,58E-07	0,0375	0,00394	0,03	2,56E-07	3,00E-02	0,329	0,1610	0,0863	0,166
0,1	2,83E-07	0,0525	0,002813	0,04	1,56E-07	4,00E-02	0,365	0,2220	0,123	0,199
0,15	3,79E-07	0,065	0,002595	0,05	1,2E-07	5,00E-02	0,384	0,2600	0,152	0,222
0,2	5,01E-07	0,0725	0,002577	0,06	1,11E-07	6,00E-02	0,4	0,2860	0,17	0,24
0,25	6,31E-07	0,0875	0,00267	0,08	1,2E-07	8,00E-02	0,451	0,3440	0,212	0,293
0,3	7,59E-07	0,125	0,003261	0,1	1,47E-07	1,00E-01	0,533	0,4180	0,258	0,357
0,35	8,78E-07	0,175	0,004385	0,15	2,38E-07	1,50E-01	0,777	0,6240	0,396	0,534
0,4	9,85E-07	0,25	0,00631	0,2	3,45E-07	2,00E-01	1,03	0,8440	0,557	0,731
0,45	1,08E-06	0,35	0,00878	0,3	5,56E-07	3,00E-01	1,56	1,3000	0,891	1,14
0,5	1,17E-06	0,425	0,010327	0,4	7,69E-07	4,00E-01	2,06	1,7600	1,24	1,55
0,55	1,27E-06	0,48	0,011242	0,5	9,09E-07	5,00E-01	2,54	2,2000	1,58	1,96

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
0,6	1,36E-06	0,511	0,012019	0,6	1,14E-06	6,00E-01	2,99	2,6200	1,92	2,34
0,65	1,44E-06	0,556	0,012818	0,8	1,47E-06	8,00E-01	3,83	3,4300	2,6	3,07
0,7	1,52E-06	0,65	0,014421	1	1,79E-06	1,00E+00	4,6	4,1800	3,24	3,75
0,8	1,68E-06	0,75	0,016041	1,5	2,44E-06	1,50E+00	6,24	5,8000	4,7	5,24
1	1,98E-06	0,9	0,018336	2	3,03E-06	2,00E+00	7,66	7,2100	6,02	6,56
1,4	2,51E-06	1,165	0,022071	3	0,000004	3,00E+00	10,2	9,7100	8,4	8,9
1,8	2,99E-06	1,335	0,024297	4	4,76E-06	4,00E+00	12,5	12,0000	10,6	11
2,2	3,42E-06	1,42	0,025367	5	5,56E-06	5,00E+00	14,7	14,1000	12,6	13
2,6	3,82E-06	1,58	0,027315	6	6,25E-06	6,00E+00	16,7	16,2000	14,6	14,9
2,8	4,01E-06	1,83	0,030204	8	7,69E-06	8,00E+00	20,8	20,2000	18,5	18,9
3,25	4,41E-06	2,25	0,034707	10	9,09E-06	1,00E+01	24,7	24,2000	22,3	22,9
3,75	4,83E-06	2,75	0,039612							
4,25	5,23E-06	3,25	0,04413							
4,75	5,60E-06	3,75	0,048335							
5	5,80E-06	4,25	0,052281							
5,25	6,01E-06	4,75	0,056008							
5,75	6,37E-06	5,25	0,060069							
6,25	6,74E-06	5,75	0,063749							
6,75	7,11E-06	6,25	0,067426							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
							AP	PA	LAT	ROT
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
7,5	7,66E-06	6,75	0,071103							
9	8,77E-06	7,25	0,074783							
11	1,03E-05	7,75	0,078468							
13	1,18E-05	9	0,08771							
15	1,33E-05	11	0,10263							
		13	0,11775							

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
0,01	0,048518	0,018426	0,01278	0,01278	0,024222	0,020135	0,01	0,0685	0,0184	0,0189	0,0182	0,0337	0,0288
0,015	0,125424	0,018283	0,017129	0,017129	0,047736	0,038376	0,015	0,156	0,0155	0,0416	0,039	0,0664	0,056
0,02	0,20496	0,030408	0,025368	0,02604	0,077616	0,060816	0,02	0,225	0,026	0,0655	0,0573	0,0986	0,0812
0,03	0,299936	0,092288	0,056382	0,065178	0,137711	0,103103	0,03	0,313	0,094	0,11	0,0891	0,158	0,127
0,04	0,338052	0,15873	0,087945	0,103389	0,182754	0,139854	0,04	0,351	0,161	0,14	0,114	0,199	0,158
0,05	0,357238	0,20672	0,111435	0,130815	0,213503	0,165053	0,05	0,37	0,208	0,16	0,133	0,226	0,18
0,06	0,378012	0,244494	0,131495	0,152592	0,239292	0,185538	0,06	0,39	0,242	0,177	0,15	0,248	0,199
0,08	0,439931	0,312833	0,170078	0,192796	0,295027	0,229943	0,07	0,413	0,271	0,194	0,167	0,273	0,218

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
0,1	0,517174	0,38213	0,211841	0,237811	0,35616	0,277508	0,08	0,444	0,301	0,214	0,185	0,297	0,239
0,15	0,752344	0,574441	0,330049	0,37138	0,534308	0,4193	0,1	0,519	0,361	0,259	0,225	0,355	0,287
0,2	1,004088	0,78324	0,469944	0,52644	0,731024	0,581224	0,15	0,748	0,541	0,395	0,348	0,528	0,429
0,3	1,50834	1,2144	0,76866	0,8487	1,13712	0,91632	0,2	1	0,741	0,552	0,492	0,721	0,589
0,4	1,99584	1,64619	1,0773	1,17747	1,53846	1,26063	0,3	1,51	1,16	0,888	0,802	1,12	0,932
0,5	2,46568	2,06822	1,3923	1,5113	1,93256	1,6065	0,4	2	1,57	1,24	1,13	1,52	1,28
0,6	2,90816	2,4708	1,704	1,83748	2,31176	1,94256	0,5	2,47	1,98	1,58	1,45	1,92	1,63
0,8	3,7269	3,22875	2,31732	2,4723	3,02949	2,59407	0,511	2,52	2,03	1,62	1,49	1,96	1,67
1	4,48341	3,9336	2,90997	3,08877	3,71457	3,21393	0,6	2,91	2,38	1,93	1,78	2,3	1,97
2	7,4896	6,80255	5,4964	5,71535	6,57605	5,8437	0,662	3,17	2,62	2,14	1,98	2,54	2,17
4	12,0153	11,1078	9,6316	9,8373	10,9989	9,9704	0,8	3,73	3,13	2,59	2,41	3,04	2,62
6	15,9873	14,8764	13,3147	13,4596	14,8925	13,6206	1	4,49	3,83	3,23	3,03	3,72	3,25
8	19,9191	18,6327	17,0046	17,085	18,7734	17,2659	1,117	4,9	4,22	3,58	3,37	4,1	3,6
10	23,76	22,296	20,64	20,616	22,584	20,832	1,33	5,59	4,89	4,2	3,98	4,75	4,2
							1,5	6,12	5,39	4,68	4,45	5,24	4,66
							2	7,48	6,75	5,96	5,7	6,55	5,9
							3	9,75	9,12	8,21	7,9	8,84	8,08
							4	11,7	11,2	10,2	9,86	10,8	10
							5	13,4	13,1	12	11,7	12,7	11,8

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
							6	15	15	13,7	13,4	14,4	13,5
							6,129	15,1	15,2	13,9	13,6	14,6	13,7
							8	17,8	18,6	17	16,6	17,6	16,6
							10	20,5	22	20,1	19,7	20,6	19,6
							15	26,1	30,3	27,4	27,1	27,7	26,8
							20	30,8	38,2	34,4	34,4	34,4	33,8
							30	37,9	51,4	47,4	48,1	46,1	46,1
							40	43,1	62	59,2	60,9	56	56,9
							50	47,1	70,4	69,5	72,2	64,4	66,2
							60	50,1	76,9	78,3	82	71,2	74,1
							80	54,5	86,6	92,4	97,9	82	87,2
							100	57,8	93,2	103	110	89,7	97,5
							150	63,3	104	121	130	102	116
							200	67,3	111	133	143	111	130
							300	72,3	119	148	161	121	147
							400	75,5	124	158	172	128	159
							500	77,5	128	165	180	133	168
							600	78,9	131	170	186	136	174
							800	80,5	135	178	195	142	185



ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
							1000	81,7	138	183	201	145	193
							1500	83,8	142	193	212	152	208
							2000	85,2	145	198	220	156	218
							3000	86,9	148	206	229	161	232
							4000	88,1	150	212	235	165	243
							5000	88,9	152	216	240	168	251
							6000	89,5	153	219	244	170	258
							8000	90,2	155	224	251	172	268
							10000	90,7	155	228	255	175	276

## A.2 Neutronen

Tab. A. 2 Dosiskonversionsfaktoren für Neutronen

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	µSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
2,50E-08	7,34E-06	5,50E-08	3,83E-02	2,50E-08	8,86E-06	2,50E-08	4	2,6	1,3	2,3
1,00E-07	7,34E-06	2,57E-07	4,60E-02	1,00E-07	8,34E-06	1,00E-07	4,4	2,7	1,4	2,4
1,00E-06	8,92E-06	4,73E-07	4,85E-02	1,00E-06	9,10E-06	1,00E-06	4,82	2,81	1,43	2,63
1,00E-05	9,08E-06	6,07E-07	4,83E-02	1,00E-05	8,70E-06	1,00E-05	4,46	2,78	1,33	2,48
1,00E-04	8,36E-06	7,79E-07	4,82E-02	1,00E-04	8,34E-06	1,00E-04	4,14	2,63	1,27	2,33
1,00E-03	7,52E-06	1,06E-06	4,80E-02	1,00E-03	7,40E-06	1,00E-03	3,83	2,49	1,19	2,18
1,00E-02	8,90E-06	1,35E-06	4,76E-02	1,00E-02	7,14E-06	1,00E-02	4,53	2,58	1,27	2,41
1,00E-01	1,63E-04	1,65E-06	4,73E-02	1,00E-01	1,54E-04	2,00E-02	5,87	2,79	1,46	2,89
5,00E-01	1,02E-03	2,12E-06	4,68E-02	5,00E-01	7,85E-04	5,00E-02	10,9	3,64	2,14	4,7
1,00E+00	1,45E-03	2,72E-06	4,62E-02	1,00E+00	1,25E-03	1,00E-01	19,8	5,69	3,57	8,15
2,00E+00	1,33E-03	3,49E-06	4,54E-02	5,00E+00	1,15E-03	2,00E-01	38,6	8,6	6,94	15,3
2,50E+00	1,13E-03	4,49E-06	4,44E-02	1,00E+01	1,00E-03	5,00E-01	87	30,8	18,7	38,8
5,00E+00	1,25E-03	5,76E-06	4,32E-02	2,00E+01	9,24E-04	1,00E+00	143	53,5	33,3	65,7
7,00E+00	1,03E-03	7,40E-06	4,27E-02			1,50E+00	183	85,8	52,1	93,7
1,00E+01	9,56E-04	9,50E-06	4,20E-02			2,00E+00	214	120	71,8	120
1,40E+01	1,56E-03	1,22E-05	4,12E-02			3,00E+00	264	174	105	162

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
2,00E+01	1,82E-03	1,57E-05	4,02E-02			4,00E+00	300	215	131	195
		2,01E-05	3,89E-02			5,00E+00	327	244	151	219
		2,58E-05	3,80E-02			6,00E+00	347	265	167	237
		3,31E-05	3,76E-02			7,00E+00	365	283	181	253
		4,26E-05	3,72E-02			8,00E+00	380	296	194	266
		5,46E-05	3,66E-02			1,00E+01	410	321	218	292
		7,02E-05	3,59E-02			1,40E+01	480	415	280	365
		9,01E-05	3,49E-02							
		1,16E-04	3,38E-02							
		1,49E-04	3,35E-02							
		1,91E-04	3,32E-02							
		2,45E-04	3,27E-02							
		3,14E-04	3,21E-02							
		4,04E-04	3,13E-02							
		5,18E-04	3,03E-02							
		6,66E-04	2,97E-02							
		8,55E-04	2,95E-02							
		1,10E-03	2,92E-02							
		1,41E-03	2,88E-02							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		1,81E-03	2,83E-02							
		2,14E-03	2,78E-02							
		2,37E-03	2,80E-02							
		2,55E-03	2,83E-02							
		2,68E-03	2,85E-02							
		2,89E-03	2,87E-02							
		3,20E-03	2,90E-02							
		3,53E-03	2,94E-02							
		4,01E-03	2,99E-02							
		4,92E-03	3,08E-02							
		6,32E-03	3,23E-02							
		8,11E-03	3,43E-02							
		9,86E-03	3,65E-02							
		1,12E-02	3,90E-02							
		1,34E-02	4,32E-02							
		1,72E-02	5,03E-02							
		2,06E-02	5,89E-02							
		2,27E-02	6,55E-02							
		2,39E-02	6,94E-02							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		2,45E-02	7,15E-02							
		2,54E-02	7,33E-02							
		2,65E-02	7,58E-02							
		2,78E-02	7,85E-02							
		3,02E-02	8,28E-02							
		3,31E-02	9,06E-02							
		3,74E-02	1,02E-01							
		4,34E-02	1,19E-01							
		4,94E-02	1,39E-01							
		5,95E-02	1,65E-01							
		6,70E-02	1,94E-01							
		6,97E-02	2,11E-01							
		7,58E-02	2,25E-01							
		8,10E-02	2,43E-01							
		8,45E-02	2,57E-01							
		9,23E-02	2,76E-01							
		1,05E-01	3,08E-01							
		1,14E-01	3,43E-01							
		1,20E-01	3,68E-01							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		1,26E-01	3,87E-01							
		1,32E-01	4,08E-01							
		1,39E-01	4,29E-01							
		1,46E-01	4,52E-01							
		1,54E-01	4,75E-01							
		1,62E-01	4,94E-01							
		1,70E-01	5,14E-01							
		1,79E-01	5,34E-01							
		1,88E-01	5,56E-01							
		1,97E-01	5,79E-01							
		2,08E-01	6,03E-01							
		2,18E-01	6,28E-01							
		2,29E-01	6,54E-01							
		2,41E-01	6,82E-01							
		2,60E-01	7,19E-01							
		2,80E-01	7,67E-01							
		2,91E-01	8,04E-01							
		2,96E-01	8,23E-01							
		2,98E-01	8,31E-01							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		3,00E-01	8,36E-01							
		3,18E-01	8,50E-01							
		3,51E-01	8,83E-01							
		3,78E-01	9,22E-01							
		3,98E-01	9,51E-01							
		4,29E-01	9,84E-01							
		4,74E-01	1,03E+00							
		5,11E-01	1,08E+00							
		5,37E-01	1,12E+00							
		5,64E-01	1,16E+00							
		5,93E-01	1,20E+00							
		6,24E-01	1,23E+00							
		6,56E-01	1,27E+00							
		6,89E-01	1,31E+00							
		7,25E-01	1,35E+00							
		7,62E-01	1,37E+00							
		8,01E-01	1,39E+00							
		8,42E-01	1,41E+00							
		8,85E-01	1,43E+00							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		9,34E-01	1,45E+00							
		9,82E-01	1,48E+00							
		1,06E+00	1,50E+00							
		1,14E+00	1,50E+00							
		1,19E+00	1,50E+00							
		1,26E+00	1,50E+00							
		1,32E+00	1,50E+00							
		1,39E+00	1,50E+00							
		1,46E+00	1,50E+00							
		1,53E+00	1,50E+00							
		1,61E+00	1,51E+00							
		1,70E+00	1,51E+00							
		1,78E+00	1,51E+00							
		1,87E+00	1,51E+00							
		1,97E+00	1,51E+00							
		2,07E+00	1,51E+00							
		2,18E+00	1,51E+00							
		2,27E+00	1,51E+00							
		2,33E+00	1,51E+00							



ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		2,36E+00	1,50E+00							
		2,42E+00	1,50E+00							
		2,47E+00	1,50E+00							
		2,53E+00	1,50E+00							
		2,66E+00	1,50E+00							
		2,80E+00	1,50E+00							
		2,94E+00	1,49E+00							
		3,09E+00	1,49E+00							
		3,25E+00	1,49E+00							
		3,50E+00	1,48E+00							
		3,87E+00	1,48E+00							
		4,28E+00	1,47E+00							
		4,61E+00	1,46E+00							
		4,84E+00	1,46E+00							
		5,09E+00	1,45E+00							
		5,35E+00	1,45E+00							
		5,63E+00	1,45E+00							
		5,92E+00	1,44E+00							
		6,22E+00	1,44E+00							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	AP pSv cm <sup>2</sup>	PA pSv cm <sup>2</sup>	LAT pSv cm <sup>2</sup>	ROT pSv cm <sup>2</sup>
		6,48E+00	1,45E+00							
		6,65E+00	1,45E+00							
		6,88E+00	1,45E+00							
		7,23E+00	1,46E+00							
		7,60E+00	1,46E+00							
		7,96E+00	1,47E+00							
		8,37E+00	1,48E+00							
		8,83E+00	1,51E+00							
		9,28E+00	1,53E+00							
		9,76E+00	1,56E+00							
		1,03E+01	1,58E+00							
		1,08E+01	1,62E+00							
		1,13E+01	1,66E+00							
		1,19E+01	1,70E+00							
		1,24E+01	1,74E+00							
		1,27E+01	1,77E+00							
		1,32E+01	1,79E+00							
		1,37E+01	1,83E+00							
		1,40E+01	1,86E+00							

ANSI/ANS-6,1,1-1977		SRCMCNP		ICRP 21		ICRP 51				
							AP	PA	LAT	ROT
Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	μSv cm <sup>2</sup> /h	Energy MeV	(rem/h)/ (p/cm <sup>2</sup> s)	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
		1,44E+01	1,88E+00							
		1,47E+01	1,91E+00							

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
1,00E-09	5,24	3,52	1,36	1,68	2,99	2,4	1,00E-09	3,09E+00	1,85E+00	1,04E+00	8,93E-01	1,70E+00	1,29E+00
1,00E-08	6,55	4,39	1,7	2,04	3,72	2,89	1,00E-08	3,55E+00	2,11E+00	1,15E+00	9,78E-01	2,03E+00	1,56E+00
2,50E-10	7,6	5,16	1,99	2,31	4,4	3,3	2,50E-08	4,00E+00	2,44E+00	1,32E+00	1,12E+00	2,31E+00	1,76E+00
1,00E-07	9,95	6,77	2,58	2,86	5,75	4,13	1,00E-07	5,20E+00	3,25E+00	1,70E+00	1,42E+00	2,98E+00	2,26E+00
2,00E-07	11,2	7,63	2,92	3,21	6,43	4,59	2,00E-07	5,87E+00	3,72E+00	1,94E+00	1,63E+00	3,36E+00	2,54E+00
5,00E-07	12,8	8,76	3,35	3,72	7,27	5,2	5,00E-07	6,59E+00	4,33E+00	2,21E+00	1,86E+00	3,86E+00	2,92E+00
1,00E-06	13,8	9,55	3,67	4,12	7,84	5,63	1,00E-06	7,03E+00	4,73E+00	2,40E+00	2,02E+00	4,17E+00	3,15E+00
2,00E-06	14,5	10,2	3,89	4,39	8,31	5,96	2,00E-06	7,39E+00	5,02E+00	2,52E+00	2,11E+00	4,40E+00	3,32E+00
5,00E-06	15	10,7	4,08	4,66	8,72	6,28	5,00E-06	7,71E+00	5,30E+00	2,64E+00	2,21E+00	4,59E+00	3,47E+00
1,00E-05	15,1	11	4,16	4,8	8,9	6,44	1,00E-05	7,82E+00	5,44E+00	2,65E+00	2,24E+00	4,68E+00	3,52E+00
2,00E-05	15,1	11,1	4,2	4,89	8,92	6,51	2,00E-05	7,84E+00	5,51E+00	2,68E+00	2,26E+00	4,72E+00	3,54E+00
5,00E-05	14,8	11,1	4,19	4,95	8,82	6,51	5,00E-05	7,82E+00	5,55E+00	2,66E+00	2,24E+00	4,73E+00	3,55E+00

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
1,00E-04	14,6	11	4,15	4,95	8,69	6,45	1,00E-04	7,79E+00	5,57E+00	2,65E+00	2,23E+00	4,72E+00	3,54E+00
2,00E-04	14,4	10,9	4,1	4,92	8,56	6,32	2,00E-04	7,73E+00	5,59E+00	2,66E+00	2,24E+00	4,67E+00	3,52E+00
5,00E-04	14,2	10,7	4,03	4,86	8,4	6,14	5,00E-04	7,54E+00	5,60E+00	2,62E+00	2,21E+00	4,60E+00	3,47E+00
1,00E-03	14,2	10,7	4	4,84	8,34	6,04	1,00E-03	7,54E+00	5,60E+00	2,61E+00	2,21E+00	4,58E+00	3,46E+00
2,00E-03	14,4	10,8	4	4,87	8,39	6,05	2,00E-03	7,61E+00	5,62E+00	2,60E+00	2,20E+00	4,61E+00	3,48E+00
5,00E-03	15,7	11,6	4,29	5,25	9,06	6,52	5,00E-03	7,97E+00	5,95E+00	2,74E+00	2,33E+00	4,86E+00	3,66E+00
1,00E-02	18,3	13,5	5,02	6,14	10,6	7,7	1,00E-02	9,11E+00	6,81E+00	3,13E+00	2,67E+00	5,57E+00	4,19E+00
2,00E-02	23,8	17,3	6,48	7,95	13,8	10,2	2,00E-02	1,22E+01	8,93E+00	4,21E+00	3,60E+00	7,41E+00	5,61E+00
3,00E-02	29	21	7,93	9,74	16,9	12,7	3,00E-02	1,57E+01	1,12E+01	5,40E+00	4,62E+00	9,46E+00	7,18E+00
5,00E-02	38,5	27,6	10,6	13,1	22,7	17,3	5,00E-02	2,30E+01	1,57E+01	7,91E+00	6,78E+00	1,37E+01	1,04E+01
7,00E-02	47,2	33,5	13,1	16,1	27,8	21,5	7,00E-02	3,06E+01	2,00E+01	1,05E+01	8,95E+00	1,80E+01	1,37E+01
1,00E-01	59,8	41,3	16,4	20,1	34,8	27,2	1,00E-01	4,19E+01	2,59E+01	1,44E+01	1,23E+01	2,43E+01	1,86E+01
1,50E-01	80,2	52,2	21,2	25,5	45,4	35,2	1,50E-01	6,06E+01	3,49E+01	2,08E+01	1,79E+01	3,47E+01	2,66E+01
2,00E-01	99	61,5	25,6	30,3	54,8	42,4	2,00E-01	7,88E+01	4,31E+01	2,72E+01	2,34E+01	4,47E+01	3,44E+01
3,00E-01	133	77,1	33,4	38,6	71,6	54,7	3,00E-01	1,14E+02	5,81E+01	3,97E+01	3,42E+01	6,38E+01	4,94E+01
5,00E-01	188	103	46,8	53,2	99,4	75	5,00E-01	1,77E+02	8,59E+01	6,37E+01	5,44E+01	9,91E+01	7,71E+01
7,00E-01	231	124	58,3	66,6	123	92,8	7,00E-01	2,32E+02	1,12E+02	8,55E+01	7,26E+01	1,31E+02	1,02E+02
9,00E-01	267	144	69,1	79,6	144	108	9,00E-01	2,79E+02	1,36E+02	1,05E+02	8,93E+01	1,60E+02	1,26E+02
1,00E+00	282	154	74,5	86	154	116	1,00E+00	3,01E+02	1,48E+02	1,15E+02	9,74E+01	1,74E+02	1,37E+02

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
1,20E+00	310	175	85,8	99,8	173	130	1,20E+00	3,30E+02	1,67E+02	1,30E+02	1,10E+02	1,93E+02	1,53E+02
2,00E+00	383	247	129	153	234	178	1,50E+00	3,65E+02	1,95E+02	1,50E+02	1,28E+02	2,19E+02	1,74E+02
3,00E+00	432	308	171	195	283	220	2,00E+00	4,07E+02	2,35E+02	1,79E+02	1,53E+02	2,54E+02	2,03E+02
4,00E+00	458	345	198	224	315	250	3,00E+00	4,58E+02	2,92E+02	2,21E+02	1,92E+02	3,01E+02	2,44E+02
5,00E+00	474	366	217	244	335	272	4,00E+00	4,83E+02	3,30E+02	2,49E+02	2,20E+02	3,31E+02	2,71E+02
6,00E+00	483	380	232	261	348	282	5,00E+00	4,94E+02	3,54E+02	2,69E+02	2,40E+02	3,51E+02	2,90E+02
7,00E+00	490	391	244	274	358	290	6,00E+00	4,98E+02	3,71E+02	2,84E+02	2,55E+02	3,65E+02	3,03E+02
8,00E+00	494	399	253	285	366	297	7,00E+00	4,99E+02	3,83E+02	2,95E+02	2,67E+02	3,74E+02	3,13E+02
9,00E+00	497	406	261	294	373	303	8,00E+00	4,99E+02	3,92E+02	3,03E+02	2,76E+02	3,81E+02	3,21E+02
1,00E+01	499	412	268	302	378	309	9,00E+00	5,00E+02	3,98E+02	3,10E+02	2,84E+02	3,86E+02	3,27E+02
1,20E+01	499	422	278	315	385	322	1,00E+01	5,00E+02	4,04E+02	3,16E+02	2,90E+02	3,90E+02	3,32E+02
1,40E+01	496	429	286	324	390	333	1,20E+01	4,99E+02	4,12E+02	3,25E+02	3,01E+02	3,95E+02	3,39E+02
1,50E+01	494	431	290	328	391	338	1,40E+01	4,95E+02	4,17E+02	3,33E+02	3,10E+02	3,98E+02	3,44E+02
1,60E+01	491	433	293	331	393	342	1,50E+01	4,93E+02	4,19E+02	3,36E+02	3,13E+02	3,98E+02	3,46E+02
1,80E+01	486	435	299	335	394	345	1,60E+01	4,90E+02	4,20E+02	3,38E+02	3,17E+02	3,99E+02	3,47E+02
2,00E+01	480	436	305	338	395	343	1,80E+01	4,84E+02	4,22E+02	3,43E+02	3,23E+02	3,99E+02	3,50E+02
3,00E+01	458	437	324	0	395	0	2,00E+01	4,77E+02	4,23E+02	3,47E+02	3,28E+02	3,98E+02	3,52E+02
5,00E+01	437	444	358	0	404	0	2,10E+01	4,74E+02	4,23E+02	3,48E+02	3,30E+02	3,98E+02	3,53E+02
7,50E+01	429	459	397	0	422	0	3,00E+01	4,53E+02	4,22E+02	3,60E+02	3,45E+02	3,95E+02	3,58E+02

ICRP 74							ICRP 116						
	AP	PA	RLAT	LLAT	ROT	ISO		AP	PA	LLAT	RLAT	ROT	ISO
Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	Energy MeV	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>	pSv cm <sup>2</sup>
1,00E+02	429	477	433	0	443	0	5,00E+01	4,33E+02	4,28E+02	3,80E+02	3,70E+02	3,95E+02	3,71E+02
1,30E+02	432	495	467	0	465	0	7,50E+01	4,20E+02	4,39E+02	3,99E+02	3,92E+02	4,02E+02	3,87E+02
1,50E+02	438	514	501	0	489	0	1,00E+02	4,02E+02	4,44E+02	4,09E+02	4,04E+02	4,06E+02	3,97E+02
1,80E+02	445	535	542	0	517	0	1,30E+02	3,82E+02	4,46E+02	4,16E+02	4,13E+02	4,11E+02	4,07E+02
							1,50E+02	3,73E+02	4,46E+02	4,20E+02	4,18E+02	4,14E+02	4,12E+02
							1,80E+02	3,63E+02	4,47E+02	4,25E+02	4,25E+02	4,18E+02	4,21E+02
							2,00E+02	3,59E+02	4,48E+02	4,27E+02	4,29E+02	4,22E+02	4,26E+02
							3,00E+02	3,63E+02	4,64E+02	4,41E+02	4,51E+02	4,43E+02	4,55E+02
							4,00E+02	3,89E+02	4,96E+02	4,72E+02	4,83E+02	4,72E+02	4,88E+02
							5,00E+02	4,22E+02	5,33E+02	5,10E+02	5,23E+02	5,03E+02	5,21E+02
							6,00E+02	4,57E+02	5,69E+02	5,47E+02	5,63E+02	5,32E+02	5,53E+02
							7,00E+02	4,86E+02	5,99E+02	5,79E+02	5,97E+02	5,58E+02	5,80E+02
							8,00E+02	5,08E+02	6,23E+02	6,03E+02	6,20E+02	5,80E+02	6,04E+02
							9,00E+02	5,24E+02	6,40E+02	6,21E+02	6,38E+02	5,98E+02	6,24E+02
							1,00E+03	5,37E+02	6,54E+02	6,35E+02	6,51E+02	6,14E+02	6,42E+02
							2,00E+03	6,12E+02	7,40E+02	7,30E+02	7,47E+02	7,18E+02	7,67E+02
							5,00E+03	7,16E+02	9,24E+02	9,63E+02	9,79E+02	9,06E+02	1,01E+03
							1,00E+04	9,33E+02	1,17E+03	1,23E+03	1,26E+03	1,14E+03	1,32E+03

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

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

**85748 Garching b. München**

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

**10719 Berlin**

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

**38122 Braunschweig**

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

[www.grs.de](http://www.grs.de)