

vSU-Softchain

Kurztitel/ ggf. Akronym:	vSU-Softchain
Projektziel:	Entwicklung von OpenSource-Code für Zerfallsberechnungen
Auftragsgegenstand:	Im Rahmen der vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen und anderen Bestandteilen des Standortauswahlverfahrens sind Berechnungen zum radioaktiven Zerfall im Nuklidinventar notwendig. Hierzu wird ein OpenSource-Code entwickelt, der dann u. a. für die Transportmodellierung eingesetzt werden kann.
Projektpartner:	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
Projektlaufzeit:	2022 – 2023
Vergabenummer:	46001170
Weiterführende Informationen:	www.grs.de

Projektbeschreibung

Im Rahmen der Standortauswahl eines Endlagers für hochradioaktiven Abfall gemäß Standortauswahlgesetz (StandAG) muss die Langzeitsicherheit möglicher Standorte in den vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (vSU) nachgewiesen werden. Zentraler Bestandteil der vSU ist eine umfangreiche Analyse des Endlagersystems (§ 7EndlSiUntV) die unter anderem das Verhalten des Endlagersystems im Bewertungszeitraum von einer Million Jahren analysiert. Für die Analyse des Endlagersystems ist die Anwendung von gekoppelten Transportmodellen notwendig, welche auch den Zerfall der Radionuklide der eingelagerten Kernbrennstoffe berücksichtigen. Darüber hinaus wird für die Entwicklung von Endlagerbehältern die genaue Kenntnis des einzulagernden, zeitlich veränderlichen Nuklidinventars sowohl zum Zeitpunkt der Einlagerung als auch für die Dauer des Einlagerungsprozesses benötigt. Hieraus lassen sich wichtige Informationen wie zum Beispiel die Wärmeentwicklung im Behälter aufgrund des radioaktiven Zerfalls und die Aktivität differenziert nach Zerfallsarten ermitteln.

Die in einem künftigen Endlager für hochradioaktive Abfälle einzulagernden bestrahlten Kernbrennstoffe enthalten in der Größenordnung von einigen hundert bis tausend unterschiedlichen Radionukliden, die aufgrund der Neutronenbestrahlung im Reaktor durch Kernspaltung und Neutroneneinfangreaktionen entstanden sind. Diese Radionuklide zerfallen zum Teil über eine ganze Reihe von ebenfalls radioaktiven Zwischenprodukten, bis sich schließlich ein stabiles Nuklid bildet. Die beschriebenen Zerfallswege werden „Zerfallsketten“ genannt und können in einigen Fällen sehr komplex sein: Sie können je nach Radionuklid Verzweigungen aufweisen, wenn das zerfallende Nuklid auf mehrere Arten zu verschiedenen Zwischenprodukten

zerfallen kann. Ein zusätzliches Charakteristikum der Zerfallsketten sind die unterschiedlichen Halbwertszeiten, die sich um viele Zehnerpotenzen unterscheiden können. In der ^{235}U Zerfallsreihe treten beispielsweise Halbwertszeiten zwischen wenigen Millisekunden (^{215}Po) und hundert Millionen Jahren (^{235}U) auf.

Aufgrund der angesprochenen Komplexitäten werden für die numerische Berechnung der Zerfallsprozesse spezialisierte Simulationsprogramme benötigt. Insbesondere bei der Anwendung in Stofftransportmodellen, bei denen für sehr viele Zeitschritte und Gitterknoten bzw. -zellen Millionen von einzelnen Berechnungsschritten durchgeführt werden müssen, ist es wichtig, dass diese Programme hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit optimiert sind.

Vor dem Hintergrund der im Standortauswahlverfahren erforderlichen Transparenz ist die Nutzung von frei verfügbaren, quelloffenen Programmen sinnvoll. Weltweit werden unterschiedliche Simulationswerkzeuge zur Nuklidinventarmodellierung entwickelt. Diese unterliegen häufig Lizenz- und Exportbeschränkungen, oder sind hinsichtlich ihres Funktionsumfangs oder ihrer Geschwindigkeit beschränkt. Zum anderen sind diese Programme oft in erster Linie für die Nuklidkettenverfolgung unter Neutronenbestrahlung im Reaktor ausgelegt und nicht für die Berechnung von reinen Zerfallsprozessen optimiert, wie sie im Bereich der Endlagersicherheitsanalysen auftreten.

Im Vorhaben vSU-Softchain wird eine vollständige Softwarelösung zur Nuklidkettenverfolgung entwickelt, die unter einer Open-Source-Lizenz veröffentlicht wird, um maximale Transparenz zu ermöglichen. Das Programm hat drei voneinander abgegrenzte Einsatzzwecke:

- Als effiziente Programmbibliothek zur Einbindung in Stofftransportmodelle zur Analyse eines Endlagersystems
- Als eigenständiges Werkzeug für separate Analysen, u. a. in der Endlagerbehälterentwicklung
- Als Webanwendung zur Illustration von Zerfallsketten für die interessierte Öffentlichkeit

Um diesen Zielen gerecht zu werden, sind entsprechende Programmmodule in der Entwicklung. Diese umfassen eine in der Programmiersprache C++ geschriebene Programmbibliothek zur Berechnung der Zerfallsprozesse und ein in der Skriptsprache Python entwickeltes Softwarepaket zur Ansteuerung dieser Programmbibliothek, um Berechnungen durchzuführen und auszuwerten. Über dieses Paket kann außerdem die Nuklidinventarberechnung in andere Python-basierte Programme eingebunden werden, beispielsweise für spezifische Analysen in der Behälterentwicklung. Weiterhin wird auf dieses Paket ein Webinterface aufsetzen, um interaktiv Zerfallsprozesse darzustellen. Schließlich wird ein weiteres Python-Paket entwickelt, das die für die Berechnungen benötigten Daten der Nuklide (Halbwertszeiten, Zerfallsenergien, Zerfallskanäle) einliest und so aufbereitet, dass sie von der Programmbibliothek direkt verwendet werden können.

Literaturverzeichnis

EndlSiUntV: Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung vom 6. Oktober 2020 (BGBl. I S. 2094, 2103)

StandAG: Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 1 des Gesetzes vom 7. Dezember 2020 (BGBl. I S. 2760) geändert worden ist