

**Entwicklung und
Anwendung von
Berechnungsinstrumenten
für die spezifische
Freigabe**

Entwicklung und Anwendung von Berechnungsinstrumenten für die spezifische Freigabe

Andreas Artmann
Dirk-Alexander Becker
Susan Britz
André Filby
Julian Fricke
Philipp Horenburg
Maria-Teresa Hussels
Marc Johnen
Henrich Meyering
Holger Seher

November 2025

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMUKN) unter dem Förderkennzeichen 3622S72540 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

Baukasten, Berechnungsinstrument, spezifische Freigabe

Kurzfassung

In Anlehnung an den Ansatz für die uneingeschränkte Freigabe, wird in dem vorliegenden Eigenforschungsvorhaben durch die GRS ein Berechnungsinstrument für die Bestimmung spezifischer Freigabewerte nach Stand von Wissenschaft und Technik in Form eines Baukastensystems entwickelt. Mit Hilfe dieses Ansatzes können zukünftig aufkommende Fragestellungen, z. B. in Zusammenhang mit einer möglichen Überarbeitung der Strahlenschutzverordnung (StrlSchV), sich verändernder Randbedingungen oder auch neuer Szenarien, transparent ermittelt werden. Dabei werden neue internationale Empfehlungen, die derzeit z. B. bei der International Atomic Energy Agency (IAEA) (DS 500) auch unter Beteiligung der GRS in der Endredaktion sind, ebenso berücksichtigt, wie die spezifischen Bedingungen der deutschen Verwertungs- und Entsorgungslandschaft.

Die den aktuellen spezifischen Freigabepfaden zugrundeliegenden Expositionsszenarien und Berechnungsvorschriften wurden durch die GRS im Rahmen des Eigenforschungsvorhabens, wo es möglich war, zunächst in generische Expositionsszenarien überführt und mit den notwendigen Berechnungsvorschriften untersetzt. Ziel war es, durch möglichst generische Expositionsszenarien und den darin verwendeten Berechnungsvorschriften, ein Instrument zur Bestimmung spezifischer Freigabewerte zu entwickeln und hinsichtlich seiner Anwendbarkeit, Flexibilität und Transparenz zu prüfen.

Das Berechnungsinstrument wurde mit der skriptbasierten Programmiersprache Python /VAN 09/ umgesetzt und so dokumentiert, dass die Berechnung einzelner Freigabewerte für sämtliche Radionuklide und zunächst ausgewählte Freigabeszenarien transparent und nachvollziehbar, z. B. durch eine Art „Baukastensystem“, erfolgen kann. Auf diese Art und Weise ist es möglich, die Auswirkungen von sich zukünftig ändernden Randbedingungen, und damit verbundene Parameterwerte, auf bestimmte spezifische Freigabewerte schnell und transparent zu prüfen. Hierfür war zusätzlich, zur programmiertechnischen Dokumentation, die Zusammenstellung wesentlicher Modellparameter sowie der damit verbundenen Wertebereiche in einer Datenbank von zentraler Bedeutung.

Es war nicht Ziel des Eigenforschungsvorhabens, ein Berechnungsinstrument für die aktuellen spezifischen Freigabewerte zu entwickeln. Der für bestimmte Radionuklide relevante Boden- oder Grundwasserpfad wurde mittels numerischer Grundwassermodelle abgebildet. Einfache numerische Modelle wurden erstellt, um maximale Konzentrationen aus dem Modell abzugreifen und als Input für das Python-Modell zu verwenden. Um die

Robustheit der Rechencodes nachzuweisen und das Vertrauen in die numerischen Ergebnisse zu stärken, wurde eine Art Benchmark mit mehreren Rechencodes in Zusammenarbeit mit der Universität Stuttgart durchgeführt.

Im Rahmen des vorliegenden Eigenforschungsvorhabens wurde der K_D -Wert als ein zentraler Parameter für die Grundwassermodellierung eingehend untersucht. Neben einer umfassenden Literaturrecherche wurden darüber hinaus auch Versuche im GRS-eigenen Labor durchgeführt. Erstmals wurde zudem ein methodischer Ansatz zur Bestimmung von Verteilungen ungewisser Parameter aus implizitem Expertenwissen am Beispiel von Sorptionsparametern durchgeführt.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
1	Einleitung/Hintergrund.....	1
2	Begriffsbestimmungen.....	3
3	Darstellung der Forschungsarbeiten und -ergebnisse	7
3.1	Grundlagen/Konzeptionelle Entwicklung des Berechnungsinstruments	7
3.1.1	Freigabepraxis in Deutschland.....	7
3.1.2	Datensammlung und Parameterwerte.....	20
3.1.3	Entwicklung eines generischen Baukastens zur Bestimmung spezifischer Freigabewerte	27
3.2	Umsetzung/Aufbau des Berechnungsinstrument	46
3.2.1	Entwicklung des Python-Programms	46
3.2.2	Dokumentation des Berechnungsinstrumentes.....	54
3.3	Anwendung des Berechnungssystem/Berechnung externe Eingabewerte.....	63
3.3.1	Berechnung externer Eingabewerte.....	63
3.3.2	Überprüfung externer Eingabewerte	96
3.3.3	Berechnung Freigabewerte und Auswertung	97
3.4	Verfolgung des Standes von Wissenschaft und Technik.....	106
4	Zusammenfassung	113
	Literaturverzeichnis.....	117
	Abbildungsverzeichnis.....	131
	Tabellenverzeichnis.....	133
	Abkürzungsverzeichnis.....	135
A	Anhang	139

A.1	Parameterdatenblätter	139
A.2	Probabilistische Daten und Parameterwerte	142
A.3	K_D -Werte (Datenrecherche)	147
A.4	Das K_D -Konzept.....	173
A.5	K_D -Werte GRS-Labor	182
A.6	Implizites Expertenwissen am Beispiel von Sorptionsparametern - Methodischer Ansatz zur Bestimmung von Verteilungen ungewisser Parameter aus implizitem Expertenwissen am Beispiel von Sorptionsparametern	194

1 Einleitung/Hintergrund

Nicht bzw. leicht radioaktiv kontaminierte Materialien fallen in größeren Massen bei der Stilllegung und dem Abbau von kerntechnischen Anlagen oder in deutlich kleineren Massen in Medizin, Forschung oder dem Betrieb kerntechnischer Anlagen an. Diese Massen werden nach Durchlaufen eines in der StrlSchV geregelten behördlich genehmigten Freigabe- bzw. Herausgabeverfahrens zur Wieder- bzw. Weiterverwertung dem Stoffkreislauf zugeführt bzw. fachgerecht beseitigt.

Die Freigabe ist daher ein wichtiger Pfeiler zur Bewältigung der aktuellen und zukünftig anfallenden Reststoffmassen. Nach den §§ 35 und 36 StrlSchV /SSV 24/ können die zuständigen Behörden in der Regel davon ausgehen, dass für Einzelpersonen der Bevölkerung eine effektive Dosis im Bereich von 10 μSv (Mikrosievert) (Dosiskriterium) im Kalenderjahr nicht überschritten wird, wenn die entsprechenden Freigabewerte nach Anlage 4 Tabelle 1 der StrlSchV /SSV 24/ eingehalten werden. Hierbei gelten die Freigabewerte nach Anlage 4 Tabelle 1 Spalte 3 für die uneingeschränkte Freigabe nach § 35 StrlSchV und jene nach Anlage 4 Tabelle 1 Spalten 6 bis 14 für die spezifische Freigabe nach § 36 StrlSchV. Voraussetzung zur Einhaltung des Dosiskriteriums ist neben der Einhaltung der genannten Freigabewerte nach Anlage 4 auch die Einhaltung der Festlegungen zur Freigabe gemäß Anlage 8 StrlSchV /SSV 24/ sowie ggf. des vorgesehenen Entsorgungsweges und, in den Fällen einer Beseitigung oder stoffspezifischen Verwendung oder Verwertung, das festgelegte Entsorgungsziel.

Den Freigabewerten der uneingeschränkten Freigabe liegen international anerkannte Berechnungsmodelle entsprechend der IAEA Safety Reports Series No. 44 (SR 44) zugrunde /IAEA 05/. In diesen Modellen werden festgelegte Standardszenarien in der Art eines Baukastenprinzips zur Berechnung der Freigabewerte für die uneingeschränkte Freigabe herangezogen.

Die Freigabewerte der spezifischen Freigabe wurden, anders als die der uneingeschränkten Freigabe, weitgehend unverändert aus der StrlSchV von 2001 /SSV 17/ übernommen. Die Berechnung dieser Freigabewerte erfolgt durch verschiedene Berechnungsvorschriften für die jeweiligen Freigabeoptionen. Mit Hilfe einer Vielzahl an Szenarien, welche die Ausbreitung der freigegebenen Stoffe in die Umwelt und Stoffkreisläufe und die damit verbunden Expositionen von Einzelpersonen erfassen, werden so für die einzelnen Freigabeoptionen mit den entsprechenden Freigabemodellen die Freigabewerte bestimmt /ART 14/, /ART 20/.

Infolge der vielfältigen Szenarien der einzelnen Freigabemodelle und der damit verbundenen großen Anzahl an Parameterwerten, ist eine Prüfung der bestehenden Freigabewerte, z. B. durch sich ändernde Randbedingungen und damit verbundene Annahmen einzelner Parameterwerte, aktuell nur unter großem Aufwand möglich.

Das Ziel des vorliegenden Eigenforschungsvorhabens ist die Entwicklung eines Berechnungsinstrumentes, das die Bestimmung von Freigabewerten für spezifische Freigabeoptionen unter Berücksichtigung des geltenden Regelwerks und seiner Anforderungen ermöglicht. Das Berechnungsinstrument soll eine transparente und nachvollziehbare Berechnung der Freigabewerte gewährleisten. Zudem wird es so konzipiert, dass sich zukünftig ändernde Randbedingungen sowie damit verbundene Anpassungen der zur Berechnung notwendigen Parameter flexibel integriert werden können. Dadurch lassen sich deren Auswirkungen auf die Freigabewerte analysieren. Ein besonderes Merkmal des Berechnungsmodells ist die vollständige Nachvollziehbarkeit und Transparenz sämtlicher Eingabewerte, um eine verlässliche und anpassungsfähige Bewertung zu ermöglichen.

2 Begriffsbestimmungen

Für das vorliegende Eigenforschungsvorhaben wurden die folgenden Begriffsdefinitionen festgelegt.

Annahmen

Annahmen bilden den Argumentationsrahmen für die verwendeten Modelle. Sie sind grundlegende Voraussetzungen, die getroffen werden, um ein Problem zu vereinfachen oder überhaupt lösbar zu machen. Allgemein werden in der Forschung unter Annahmen Aussagen verstanden, die als gegeben hingenommen werden. Jede wissenschaftliche Aussage beruht auf den zugrunde gelegten Annahmen, und es ist entscheidend, diese Annahmen explizit zu machen.

Randbedingungen (auch Rahmenbedingungen)

Randbedingungen legen fest, wie sich ein System an seinen Grenzen verhält oder wie es mit seiner Umgebung interagiert. Für die spezifische Freigabe sind dies z. B. rechtliche Bestimmungen, spezifische Annahmen und/oder praktische Anforderungen. Rechtliche Vorgaben können dabei z. B. auch aus den Anforderungen umweltgesetzlicher Vorgaben resultieren, da die Abfälle oder Reststoffe in Beseitigungsanlagen weiteren Regulierungen unterliegen.

Freigabeoptionen (auch Freigabepfade)

Als Freigabeoptionen werden die Möglichkeiten zur Freigabe nach Spalte 3 und nach den Spalten 6 bis 14 der Tabelle 1 aus Anlage 4 zur StrSchV bezeichnet. Es bestehen demnach die Freigabeoptionen, Abfälle oder Reststoffe aus dem Strahlenschutzrecht uneingeschränkt (Spalte 3) oder spezifisch, d. h. unter Einhaltung spezifischer Randbedingungen (Spalten 6 bis 14), freizugeben.

Freigabemodell

Das übergeordnete (spezifische) radiologische Freigabemodell für jede Freigabeoption stellt sicher, dass das Dosiskriterium eingehalten wird. Das Dosiskriterium nach § 31 Abs. 2 StrlSchV fordert für die Freigabe, dass Einzelpersonen der Bevölkerung durch die freizugebenden Stoffe und Gegenstände maximal einer effektiven Dosis im Bereich von 10 µSv im Kalenderjahr ausgesetzt werden. Jedes Freigabemodell besteht aus

verschiedenen Szenarien und den damit verbundenen Berechnungsvorschriften und Modellparametern.

Die so gebildeten Szenarien und deren Aggregation zu einer Gesamtbetrachtung über möglichst abdeckende Szenarien für jedes Radionuklid ist in diesem Sinne ein konzeptioneller Modellbildungsprozess. In diesem ist sowohl bzgl. des Szenariodesigns als auch hinsichtlich der Auswahl der Parameter eine gute Abwägung im Sinne eines allgemeingültigen Nachweises erforderlich. Die Szenariodefinition bildet die Schnittstelle zu den eigentlichen Berechnungsvorschriften.

Szenario (Synonym für Expositionsszenario)

Abfolge/Dokumentation von zusammenhängenden, (ursächlich) miteinander verketteten Ereignissen oder Vorgängen mit Blick auf die Frage des Umgangs, der Verwendung oder Weiterverarbeitung eines Stoffes und die Frage, in welchem Umfang dadurch Menschen und Umwelt mit dem betrachteten Stoff in Berührung kommen.

Expositionspfad

Als Expositionspfad wird der Weg radioaktiver Stoffe von der Ableitung aus einer Anlage oder Einrichtung über einen Ausbreitungs- oder Transportvorgang bis hin zu einer inhalativen (Inhalation), oralen (Ingestion) oder dermalen (externe Strahlung) Exposition des Menschen bezeichnet.

Berechnungsvorschriften

Unter einer Berechnungsvorschrift für die Freigabe werden die Gleichungen bzw. Gleichungssysteme innerhalb eines Freigabemodells verstanden, die in ihrer Gesamtheit die Freigabewerte begründen sollen. Es hat sich für die Berechnung etabliert, für einen spezifischen Freigabewert ein Set an Szenarien zu definieren. Für jedes Szenario gibt es mindestens eine oder mehrere mathematische Gleichungen (geschlossene algebraische Systeme), seltener auch ein numerisches Rechenmodell. Gleichungen und numerische Modelle liefern im Ergebnis einen deterministischen Zahlenwert eines Radionuklids als Aktivitätskonzentration. Ob dieser Zahlenwert (ggf. nach Rundung) den Freigabewert bildet, ergibt sich aus dem Vergleich innerhalb des Sets an Szenarien. Durch diesen Vergleich wird sichergestellt, dass jede mögliche Umgangsform mit den Abfällen bzw. Reststoffen durch das restriktivste Szenario - also das mit der potenziell höchsten Strahlenexposition - mit abgedeckt wird.

Freigabewerte

Für jede Freigabeoption werden nuklidspezifische Freigabewerte angegeben. Bei Berücksichtigung dieser Werte in Zusammenhang mit den Anforderungen der Anlage 8 StrlSchV kann davon ausgegangen werden, dass das Dosiskriterium eingehalten wird.

(Modell) Parameter

In die Gleichungen zur Berechnung von Freigabewerten (Berechnungsvorschrift) gehen eine Vielzahl deterministischer Werte ein (z. B. Dosiskoeffizienten, Atemrate, Aufenthaltszeit, ...), für die meist Annahmen getroffen werden, da sie gemeinhin nicht empirisch beobachtbar sind oder als wissenschaftlich gesichert angesehen werden können. Abhängig von den für das Szenario getroffenen Annahmen und Randbedingungen, werden die Parameterwerte für die Berechnungsvorschriften festgelegt.

3 Darstellung der Forschungsarbeiten und -ergebnisse

Im Rahmen des Eigenforschungsvorhabens wurden insgesamt vier Arbeitspakete bearbeitet. Jedes Arbeitspaket hatte dabei spezifische Zielsetzungen, die aufeinander aufbauten und in ihrer Gesamtheit den zentralen Erkenntnisgewinn des Projektes ermöglichten. Die Bearbeitung umfasste sowohl konzeptionelle und theoretische Fragestellungen (Arbeitspaket 1) als auch die praktische Umsetzung und Überprüfung durch geeignete Methoden und Instrumente (Arbeitspakete 2 bis 4). Das folgende Kapitel gibt einen strukturierten Überblick über den Verlauf der Arbeiten und die erzielten Ergebnisse.

3.1 Grundlagen/Konzeptionelle Entwicklung des Berechnungsinstrumentes

3.1.1 Freigabepaxis in Deutschland

Laut Atomgesetz (AtG) /ATG 22/ hat der Bund Anlagen zur Sicherstellung und zur Endlagerung radioaktiver Abfälle einzurichten. Es ist vorgesehen, alle Arten radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen einzulagern /BMU 15/ (befindet sich aktuell in Überarbeitung). Infolge der gesetzlich festgelegten Abfallminimierung und angestrebten Kreislaufwirtschaft hat Deutschland ein besonderes Interesse an der Entlassung von radioaktiven Materialien aus der atom- und strahlenschutzrechtlichen Überwachung, sofern diese das Dosiskriterium erfüllen. Darüber hinaus haben die im Rahmen der Freigabe verwendeten Freigabewerte einen entscheidenden Einfluss auf die verfügbaren Kapazitäten eines Endlagers. Dies ist immer dann zu berücksichtigen, wenn Änderungen in den Freigabeverfahren diskutiert werden.

Das Freigabeverfahren (kurz: Freigabe) ist gesetzlich geregelt und legt fest, unter welchen Voraussetzungen und Bedingungen sichergestellt ist, dass Stoffe, Gegenstände, Anlagenteile, Gebäude oder Gelände aufgrund ihrer radiologischen Unbedenklichkeit aus der atom- und strahlenschutzrechtlichen Überwachung entlassen werden können. Wesentliche Elemente der Freigabe basieren dabei auf den Vorgaben der IAEA sowie des europäischen Regelwerkes /ESK 22/.

3.1.1.1 Wissenschaftliche Grundlage der Freigabe – das Dosiskriterium

Bereits im Juli 1979 setzte die IAEA eine Expertengruppe ein, die sich mit der Frage auseinandersetzte, ab wann die Radioaktivität eines Stoffes (damals unter Berücksichtigung der Versenkung/Entsorgung im Meer) nicht mehr berücksichtigt werden muss /IAEA 81/. Als Maßstab für die Unbedenklichkeit gilt international das sog. De-minimis-Konzept. De minimis steht hierbei kurz für das Rechtsprinzip „de minimis non curat lex“ (das Recht kümmert sich nicht um Kleinigkeiten) und bedeutet, dass der Gesetzgeber keine Regelungen vorsieht, wenn die Auswirkungen zu vernachlässigen sind. In Anlehnung an diesen Begriff ist die „De-minimis-Dosis“ eine Bagatelldosis, für die keine weiteren Strahlenschutzmaßnahmen für notwendig erachtet werden /IAEA 81/. Das De-minimis-Konzept der Freigabe (oder 10- μ Sv-Konzept) beschreibt dabei, wie hoch das Gesundheitsrisiko und die Kontamination sein dürfen, um als vernachlässigbar zu gelten. Die IAEA hat in den Safety Series No. 89 /IAEA 88/ diese Definition formuliert, die noch heute international angewendet wird und in die spätere Revision der Basic Safety Standards der IAEA aufgenommen wurde /IAEA 03/.

Die Freigabe von radioaktiven Stoffen aus kerntechnischen Anlagen ist somit an ein akzeptables Gesundheitsrisiko geknüpft, das auf der Grundlage von wissenschaftlichen Erkenntnissen und ethischen Prinzipien hergeleitet wurde. Die damaligen Überlegungen führten zum Vorschlag einer Begrenzung auf eine zusätzliche jährliche Dosis durch die Freigabe von höchstens 10 bis 100 μ Sv (Dosiskriterium) /IAEA 83/, /IAEA 87/, /IAEA 88/. Dies entspricht einem sehr geringen zusätzlichen möglichen Risiko von etwa 1:1 Mio. pro Jahr. Das dem Risiko zugrunde gelegte Schadensmaß berücksichtigt dabei auch andere mögliche Schäden durch Strahlung, wie z. B. Erbschäden oder eine verkürzte Lebenserwartung. In Ihrer Begründung wies die IAEA darauf hin, dass eine solche „De-minimis-Dosis“ sehr gering im Vergleich zu realen Dosen aus natürlichen Quellen ist (siehe auch Abb. 3.1).

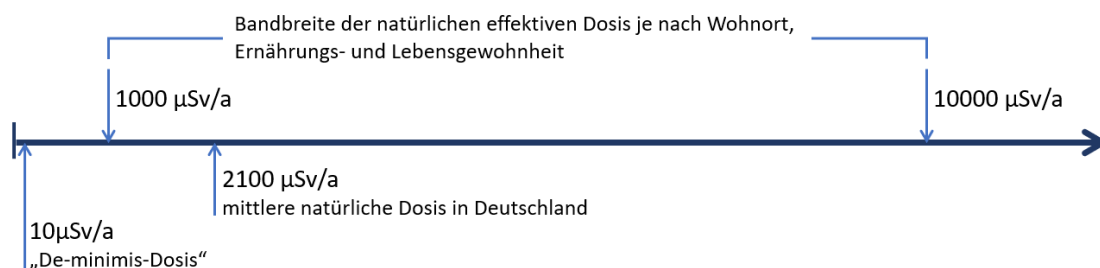


Abb. 3.1 Einordnung des 10 μ Sv-Kriteriums (Dosiskriterium) in die Schwankungsbreite der jährlichen natürlichen Dosis in Deutschland /ESK 22/

Um sicherzustellen, dass ein Dosiswert von 10 μSv pro Jahr für ein bestimmtes Radionuklid eingehalten wird, müssen mathematische Berechnungsmodelle zur Bestimmung der Freigabewerte verwendet werden, da eine solch geringe Dosis nicht zuverlässig mit Messungen ermittelt werden kann /IAEA 83/. Die Freigabewerte basieren dabei auf Szenarien, die sowohl berufliche als auch allgemeine Personen berücksichtigen, die mit dem Material in Kontakt kommen können. Die Dosisbegrenzung von 10 μSv pro Jahr gilt für alle Personen.

Im Rahmen der Diskussionen über das De-minimis-Konzept wurde entsprechend des Artikels 31 des EURATOM-Vertrags /EUR 58/ eine Expertengruppe einbezogen. Diese veröffentlichte im Jahr 1993 mit der Empfehlung RP-65 eine radiologisch fundierte Ableitung von nuklidspezifischen Freigrenzen /EC 93/. Das De-minimis-Dosiskonzept wurde im Jahr 1996 in der Richtlinie 96/29/EURATOM (Grundnormen für den Strahlenschutz) für die Mitgliedsstaaten verbindlich gemacht /EUR 96/.

Im Jahr 2000 richtete die IAEA eine weitere Arbeitsgruppe ein, um auf der Grundlage des De-minimis-Konzepts Werte für die Aktivitätskonzentration abzuleiten, die unabhängig von der späteren Verwendung des Stoffes gelten sollten (uneingeschränkte Freigabe). Diese Freigabewerte sollen dann auch als Freigrenzen, also als Kriterium für die Feststellung, ob eine Genehmigung erforderlich ist, herangezogen werden können. Diese Freigabe- und Freigrenzenwerte wurden von der IAEA erstmals im Jahr 2004 als Guide RS-G 1.7 „Application of the Concepts of Exclusion, Exemption and Clearance“ /IAEA 04/ veröffentlicht und später in der weiteren Überarbeitung der IAEA Basic Safety Standards GSR Part 3 /IAEA 14/ übernommen und damit für die europäischen Mitgliedsstaaten verbindlich /EC 14/.

Zur Unterstützung der Anwendung von Anforderung des GSR Part 3 wurden die Leitfäden GSG-17 „Application of the Concept of Exemption“ /IAEA 23a/ sowie GSG-18 „Application of the Concept of Clearance“ /IAEA 23b/ entwickelt, welche die IAEA Guide RS-G 1.7 aus dem Jahr 2004 ersetzen.

Nach dem aktuellen Wissensstand über die Auswirkungen ionisierender Strahlung hält die Entsorgungskommission (ESK) die Dosisbegrenzung von 10 μSv pro Jahr für die Freigabe für angemessen, da mögliche zusätzliche Gesundheitsrisiken im Vergleich zu den natürlichen Strahlenquellen und ihren Schwankungen vernachlässigbar sind /ESK 22/. Es bleibt jedoch festzuhalten, dass nicht ausgeschlossen werden kann, dass gesundheitliche Risiken ionisierender Strahlung unabhängig von der Dosis vorhanden

sind. Es wird daher vorsorglich davon ausgegangen, dass es keine „sichere Dosis“ gibt, die gemäß dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik keinen Schaden verursacht. Dies bedeutet, dass jede zusätzliche Strahlenbelastung (Dosis), das damit verbundene Risiko erhöht. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass die natürliche Strahldosis die De-minimis-Dosis um ein Vielfaches überschreitet und je nach Ort sehr unterschiedlich sein kann (siehe Abb. 3.1).

3.1.1.2 Freigabe radioaktiver Materialien in Deutschland

Die Freigabe radioaktiver Materialien kann in Deutschland grundsätzlich auf zwei Arten erfolgen: die uneingeschränkte und die spezifische Freigabe. Wobei der Begriff der spezifischen Freigabe erst seit 2018 in der StrlSchV verwendet wird. Sowohl die uneingeschränkte Freigabe als auch die spezifische Freigabe basieren auf dem Dosiskriterium. Die daraus resultierenden Freigabewerte sind in der StrlSchV /SSV 20/ in Anlage 4 Tabelle 1 hinterlegt. Auf die Freigabe nach der StrlSchV von 2001 /SSV 17/ wurde im Bericht zum Vorhaben FKZ 4717E03510 ausführlich eingegangen /ART 20/.

Durch eine Freigabe nach §§ 31 – 42 StrlSchV /SSV 20/ gelten nachweislich unbedenkliche radioaktive Stoffe nicht mehr als radioaktiv im Sinne des Atom- und Strahlenschutzgesetzes. Sie bedürfen demnach keiner weiteren Überwachung mehr und können weiteren Stoffkreisläufen zugeführt werden. Bei der uneingeschränkten Freigabe kann ein Stoff, ohne weitere Spezifizierung seiner Weiternutzung, aus der strahlenschutzrechtlichen Überwachung entlassen werden. Es gelten die in Spalte 3 der Tabelle 1 in Anlage 4 aufgeführten Werte, basierend auf der Richtlinie 2013/59/Euratom /EC 14/ Artikel 30. Bei einer spezifischen Freigabe wird hingegen zwischen verschiedenen Optionen der Entsorgung und einer Weiterverwertung unterschieden. Die einzelnen spezifischen Freigabeoptionen sind in den Spalten 6 – 14 hinterlegt (siehe hierzu auch Abb. 3.2).

3.1.1.2.1 Die uneingeschränkte Freigabe

Für welche Stoffe eine uneingeschränkte Freigabe nach Spalte 3 Tabelle 1 Anhang 4 StrlSchV infrage kommt, ist in Anlage 8 Teil B StrlSchV festgelegt. Es handelt sich um

- feste Stoffe,
- Bauschutt einschließlich anhaftenden Bodens, wenn die freizugebende Masse nicht mehr als 1.000 Megagramm (Mg) im Kalenderjahr beträgt und
- Öle und ölhaltige Flüssigkeiten sowie organische Lösungs- und Kühlmittel.

Die Freigabewerte für eine uneingeschränkte Freigabe sind in der StrlSchV für einzelne Nuklide hinterlegt. Grundlage dafür bildete lange Zeit die Empfehlung der Strahlenschutzkommission (SSK) „Freigabe von Materialien, Gebäuden und Bodenflächen mit geringfügiger Radioaktivität aus anzeige- oder genehmigungspflichtigem Umgang“ /SSK 98/, welche im Rahmen der Aktualisierung der StrlSchV durch die Werte der SR 44 ersetzt und ergänzt wurden /IAEA 05/. Die Art der weiteren Handhabung des freigegebenen Stoffes (Art und Umfang von Recycling oder Entsorgung) spielt, wie der Name sagt, bei der uneingeschränkten Freigabe keine Rolle.

Es wird an dieser Stelle auf eine ausführliche Beschreibung des Modells, der Szenarien und Parameter verzichtet und auf die GRS-Arbeit „Freigabekonzepte einer neuen Strahlenschutzverordnung nach Euratom-Grundnormen 2013 in der Anwendung“ verwiesen /ART 20/.

3.1.1.2.2 Die spezifische Freigabe

Der Begriff der spezifischen Freigabe wurde erstmals im Jahr 2018 in die StrlSchV übernommen und umfasst nun sämtliche Freigabeoptionen, mit Ausnahme der uneingeschränkten Freigabe. Die bis dahin als uneingeschränkte Freigabe benannten Freigabeoptionen der Spalten 6 „Uneingeschränkte Freigabe von Bauschutt und Bodenaushub von mehr als 1.000 Mg/a“, Spalte 7 „Uneingeschränkte Freigabe von Bodenflächen“ und Spalte 8 „Uneingeschränkte Freigabe von Gebäuden zur Wieder- und Weiterverwertung“ werden, wie auch die bisherigen Spalten 9 a-d „Freigabe zur Beseitigung“, Spalte 10 „Freigabe von Gebäuden zum Abriss“ und Spalte 11 „Freigabe von Metallschrott zur Rezyklierung“ im Wesentlichen der spezifische Freigabe zugeordnet (siehe Abb. 3.2).

Die spezifische Freigabe gemäß IAEA GSR Part 3 /IAEA 14/ stellt dabei zunächst eine Möglichkeit (rechtliche Grundlage) dar, Materialien unter bestimmten Bedingungen aus der behördlichen Überwachung zu entlassen:

I.13. Clearance may be granted by the regulatory body for specific situations, on the basis of the criteria of paras I.10 and I.11, with account taken of the physical or chemical form of the radioactive material, and its use or the means of its disposal. Such clearance levels may be specified in terms of activity concentration per unit mass or activity concentration per unit surface area /IAEA 14/.

Im Gegensatz zur uneingeschränkten Freigabe, bei der pauschale Freigabewerte unabhängig vom weiteren Verbleib des Materials gelten, bezieht sich die spezifische Freigabe

auf einen klar definierten Verwendungszweck oder Entsorgungsweg. Sie erlaubt damit die Anwendung realitätsnaher Annahmen und reduziert konservative Überschätzungen der Exposition, sofern eine zuverlässige Begrenzung der Strahlenexposition gewährleistet werden kann. Die in der IAEA GSR Part 3 formulierte Möglichkeit der spezifischen Freigabe wird in der IAEA GSG-18 Application of the Concept of Clearance /IAEA 23b/ in einen methodischen Rahmen gesetzt.

Es ist festzuhalten, dass sich insbesondere die tabellierten Freigabewerte der entsprechenden spezifischen Freigabeoptionen durch die teilweise Neubezeichnung nicht verändert haben. Es wird an dieser Stelle auf eine ausführliche Beschreibung der Modelle, ihrer Szenarien und Parameter verzichtet und auf die GRS-Arbeit „Freigabekonzepte einer neuen Strahlenschutzverordnung nach Euratom-Grundnormen 2013 in der Anwendung“ verwiesen /ART 20/. Im Kapitel 2 dieser Arbeit wird eine Bestandsaufnahme der Freigabepraxis durchgeführt und die zugrundeliegenden radiologischen Modelle, Szenarien, ihre Expositionspfade, Parameter und Randbedingungen werden ausführlich beschrieben.

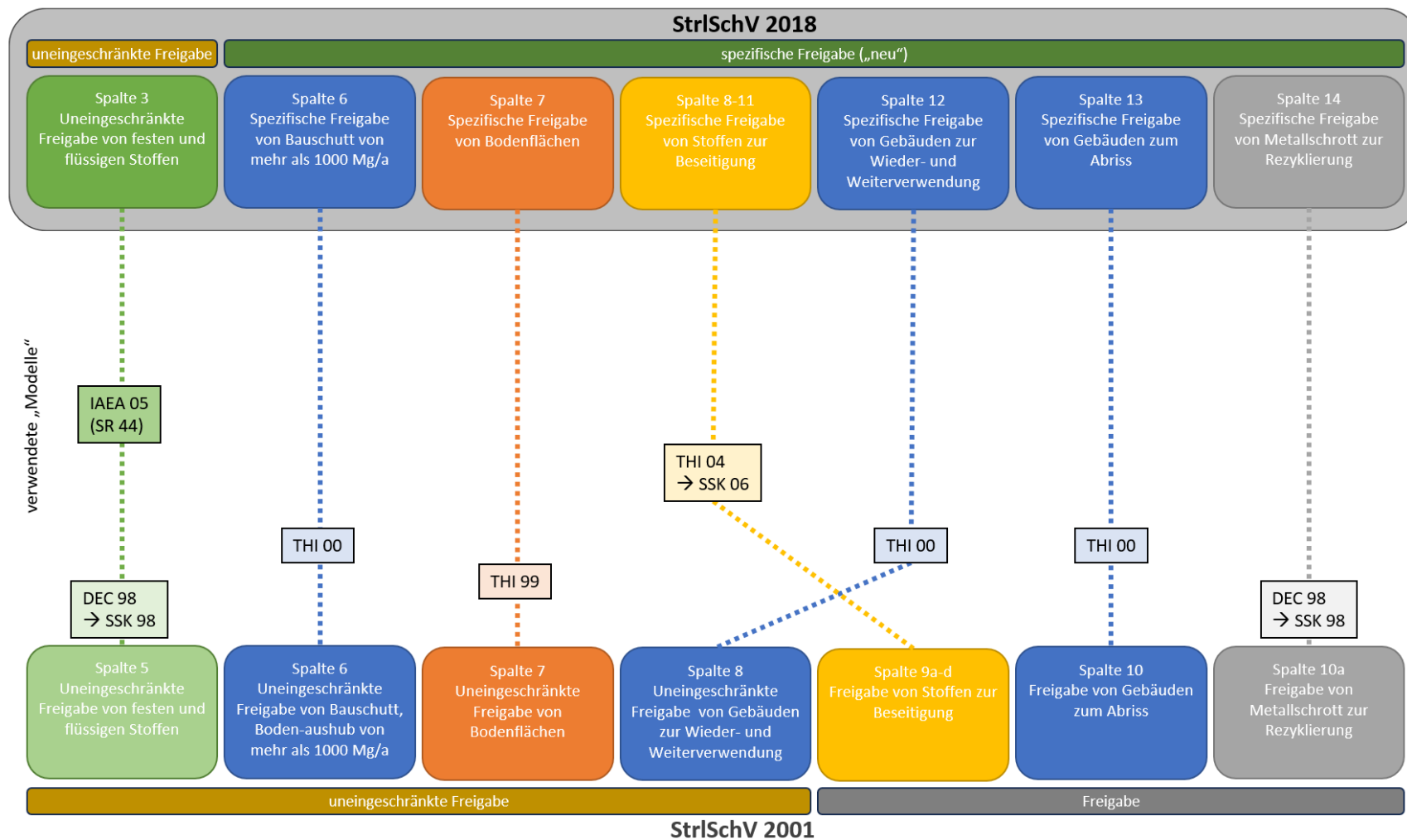


Abb. 3.2 Übersicht über die veränderten Freigabeoptionen und Freigabemodelle der StrlSchV (2018) gegenüber der StrlSchV (2001)

3.1.1.3 IAEA-Empfehlung GSG-18

Im Zuge der Entwicklung generisch-spezifischer Freigabeszenarien gewinnt die IAEA-Empfehlung GSG-18 „Application of the Concept of Clearance“ /IAEA 23b/ zunehmend an Bedeutung. Auch wenn sie keine unmittelbar anwendbaren Freigabewerte oder Standardszenarien enthält, stellt sie eine strukturierte Handlungsanleitung dar, wie Szenarien für die spezifische Freigabe entwickelt und dokumentiert werden sollten. Die Orientierung an GSG-18 bietet damit nicht nur methodische Unterstützung, sondern auch eine Möglichkeit, die Nachvollziehbarkeit und internationale Anschlussfähigkeit eigener Konzepte zu verbessern.

Grundlage einer spezifischen Freigabe ist ein Dosismodell, das alle relevanten Expositionspfade – insbesondere externe Strahlung, Inhalation, Ingestion und indirekte Wege wie die Nahrungskette – nachvollziehbar berücksichtigt. Dabei sind die physikalischen und chemischen Eigenschaften des Materials, der vorgesehene Verbleib und die Art des Umgangs maßgeblich. Die Wahl der Modellparameter orientiert sich an realistischen Bedingungen, etwa reduzierter Aufenthaltsdauer (z. B. 500 Stunden pro Jahr statt 2.000) oder technischen Maßnahmen zur Staubbindung. Auch mögliche Folgeprodukte oder Sekundärpfade – etwa bei der Metallverwertung entstehende kontaminierte Filterstäube – müssen in die Bewertung einbezogen werden.

Die Umsetzung erfolgt entweder auf gesetzlicher Grundlage oder durch behördlichen Einzelentscheid. Voraussetzung ist stets, dass der weitere Verbleib des freizugebenden Materials eindeutig festgelegt und organisatorisch abgesichert ist. Eine spezifische Freigabe kann beispielsweise an die Bedingung geknüpft werden, dass das Material nur an bestimmte Abnehmer, zu bestimmten Zwecken oder in definierten Mengen abgegeben wird. Eine Zwischenlagerung mit unklarer Weiterverwendung oder ein Verkauf an Dritte, die nicht unter die Freigabebedingungen fallen, ist nicht zulässig. Der Inhaber bleibt für die Einhaltung der festgelegten Bedingungen verantwortlich.

Typische Anwendungen für die spezifische Freigabe betreffen Altmetalle zur Verwertung, Bauschutt zur Deponierung, kontaminierte Böden aus Sanierungsmaßnahmen oder Gebäude, die abgerissen oder umgenutzt werden sollen. In solchen Fällen kann durch eine spezifische Bewertung nachgewiesen werden, dass die daraus resultierende Strahlenexposition von Einzelpersonen unterhalb des geltenden Dosisrichtwertes von 10 µSv pro Jahr liegt.

Die Freigabewerte können als Aktivitätskonzentration (Bq/g), Oberflächenkontamination (Bq/cm²) oder Gesamtaktivität (Bq oder Bq/a) angegeben werden. Bei Einhaltung dieser Werte und unter Berücksichtigung der geprüften Annahmen entfällt die strahlenschutzrechtliche Kontrolle. Ein anschließender Transport unterliegt dann ebenfalls nicht mehr den Regelungen für radioaktive Stoffe, sofern dies im Dosismodell berücksichtigt wurde.

Die spezifische Freigabe bietet einen flexiblen und verhältnismäßigen Ansatz zur Entlassung von Materialien aus der strahlenschutzrechtlichen Überwachung. Sie erfordert jedoch eine präzise Dokumentation, belastbare Annahmen und eine lückenlose Nachvollziehbarkeit des Materialverbleibs. Der Erfolg hängt wesentlich davon ab, dass die vorgesehenen Nutzungs- oder Entsorgungswege verbindlich eingehalten werden können. Eine Weitergabe, Zweckentfremdung oder unkontrollierte Streuung der freigegebenen Materialien widerspricht den Voraussetzungen der spezifischen Freigabe und stellt ein regulatorisches Risiko dar – insbesondere dann, wenn internationale Verbringung oder Länder mit abweichenden Regelungen betroffen sind.

Im Folgenden sind die Abschnitte 7.1 bis 7.29 der GSG-18 kurz zusammengefasst. Sie befassen sich umfassend mit der spezifischen Freigabe radioaktiver Materialien als Ergänzung zur generischen Freigabe. Während beide Freigabeformen auf denselben radiologischen Kriterien basieren, erlaubt die spezifische Freigabe eine differenziertere Betrachtung konkreter Anwendungsfälle, Materialien und Verwertungswege. Die dargestellten Regelungen und Empfehlungen zeigen auf, in welchen Fällen spezifische Freigaben sinnvoll und notwendig sind, wie entsprechende Modelle unter Berücksichtigung realer Expositionsszenarien abgeleitet werden und welche Bedingungen dabei einzuhalten sind. Besonderes Augenmerk gilt der praktischen Umsetzung: von der Definition geeigneter Freigabewerte über Anforderungen an Transport und Zielort bis hin zur formellen Absicherung der Einhaltung aller Freigabebedingungen.

Spezifische Freigabe - Allgemein 7.1 bis 7.7

- Gleiche radiologische Grundlage wie bei generischer Freigabe (7.1):
Die spezifische Freigabe basiert auf denselben Dosisgrenzwerten und Kriterien wie die generische Freigabe (nach GSR Part 3, Abs. I.10 und I.11 /IAEA 14/), berücksichtigt jedoch zusätzlich Form, Verwendung und Entsorgungsweg des Materials.
- Notwendigkeit spezifischer Modelle (7.2):
Da generische Modelle sehr konservativ sind, kann eine spezifische Freigabe

sinnvoll sein, wenn Szenarien oder Parameter deutlich abweichen (z. B. Expositionsdauer, Materialmenge, Abschirmung, Aerosolkonzentration).

- **Relevanzprüfung von Szenarien (7.3):**
Bei der spezifischen Bewertung können irrelevante Szenarien des generischen Modells ausgeschlossen werden, um realitätsnähere Bewertungen zu ermöglichen.
- **Berücksichtigung aller Expositionspfade (7.4):**
Auch bei spezifischen Freigaben müssen die gleichen Expositionspfade wie im generischen Modell einbezogen werden: externe Strahlung, Inhalation, Ingestion und Hautkontakt – mit angemessenen Annahmen für Parameterabweichungen.
- **Berücksichtigung nationaler Gegebenheiten (7.5):**
Spezifische Freigaben ermöglichen die Anpassung an landesspezifische Faktoren (industriell, klimatisch, regulatorisch) und vermeiden die unangemessene Anwendung generischer Werte.
- **Behördliche Entscheidung im Einzelfall (7.6):**
Die Aufsichtsbehörde kann spezifische Freigaben erteilen – auch für Materialien mit höheren Aktivitätskonzentrationen als generisch erlaubt – sofern Schutz- und Dosisanforderungen erfüllt sind.
- **Internationale Kompatibilität beachten (7.7):**
Da spezifische Freigaben meist weniger restriktiv sind, können Probleme beim Export entstehen, wenn das Zielland nur generische Werte anerkennt. Dies erfordert Berücksichtigung oder bilaterale Absprachen.

Spezifische Freigabe als zusätzliche Option zur Materialbewirtschaftung (7.8 bis 7.9)

Diese beiden Punkte betonen den praktischen Nutzen der spezifischen Freigabe, setzen aber gleichzeitig klare Bedingungen für deren Anwendung.

- **Ergänzende Option im Abfallmanagement (7.8):**
Die spezifische Freigabe ist eine zusätzliche Möglichkeit zur Behandlung von Materialien aus genehmigten Tätigkeiten, Stilllegungen oder Sanierungen nach einem Notfall. Sie ist Teil eines abgestuften regulatorischen Ansatzes und trägt zur Umsetzung der Abfallhierarchie bei – durch Reduktion radioaktiver Abfälle und Förderung von Wiederverwendung und Recycling.

- Schutzanforderungen am Zielort (7.9):
Vor der Entscheidung zur spezifischen Freigabe muss die Aufsichtsbehörde prüfen, ob die Empfängeranlage geeignete Schutzmaßnahmen bietet – ohne dass eine behördliche Überwachung nötig ist. Falls eine solche Überwachung erforderlich wäre, ist die Freigabe nicht zulässig. Das Material darf dann nur an genehmigte Einrichtungen abgegeben werden.

Ableitung und Anwendung spezifischer Freigabewert (7.10 bis 7.14)

Diese Punkte zeigen, dass spezifische Freigabewerte gezielt, realitätsnah und risikobasiert abgeleitet werden – unter Berücksichtigung des Materials, seiner Nutzung und möglicher Nebenwirkungen.

- Formen der Freigabewerte (7.10):
Spezifische Freigabewerte können auf Basis der Aktivitätskonzentration, Oberflächenkontamination oder Gesamtaktivität (z. B. Bq oder Bq/a) abgeleitet werden. Sie gelten jedoch nur für das jeweilige Material und seinen vorgesehenen Verbleib.
- Annahmen zur Handhabung (7.11):
Es wird grundsätzlich angenommen, dass freigegebenes Material wie vergleichbares nicht-radioaktives Material behandelt wird – also ohne spezielle Strahlenschutzmaßnahmen. Das ermöglicht eine weniger konservative Ableitung der Grenzwerte als bei generischer Freigabe.
- Vermeidung zusätzlicher Regulierung (7.12):
Um zusätzliche Genehmigungen zu vermeiden, sollten spezifische Freigabewerte so gewählt werden, dass sie unterhalb der Freistellungsgrenzwerte (z. B. Tabelle I.1 GSR Part 3) für größere Materialmengen liegen.
- Mengenbegrenzung (7.13):
Es kann erforderlich sein, die Menge an freigegebenem Material pro Zeitspanne (z. B. kg oder t pro Jahr) zu begrenzen, um die Bedingungen des zugrundeliegenden Modells einzuhalten (z. B. bezogen auf die Anzahl der Transporte oder die Kapazität am Zielort).
- Nebenprodukte berücksichtigen (7.14):
Beim Schmelzen von Metallen können sich bestimmte Radionuklide in Staub oder Schlacke anreichern, wodurch dort höhere Aktivitäten als im Ausgangsmaterial auftreten. Das Modell muss sicherstellen, dass auch in diesen Nebenprodukten die Strahlendosis 10 μSv pro Jahr nicht überschreitet.

Oberflächenkontamination bei spezifischer Freigabe (7.15 bis 7.22)

Diese Abschnitte konkretisieren, wann und wie Oberflächenfreigabewerte eingesetzt werden können – insbesondere für Materialien mit messbarer, oberflächlicher Kontamination.

- Unterschied zu generischen Werten (7.15):
Freigabewerte für Oberflächenkontamination bei spezifischer Freigabe unterscheiden sich von generischen Freigabewerten. Sie werden z. B. angewendet bei Metallen zum Einschmelzen, Gebäuden zur Wiederverwendung oder zum Abriss.
- Schutzfunktion der Grenzwerte (7.16):
Die Grenzwerte dienen dem Strahlenschutz – etwa beim Umgang mit kontaminierten Metallteilen oder bei der Nutzung bzw. dem Abriss von Gebäuden (Schutz vor äußerer Strahlung oder Inhalation resuspendierter Aktivität).
- Anwendbarkeit auf messbare Oberflächen (7.17):
Diese Grenzwerte gelten nur für messbare Oberflächenkontamination, bei der die Tiefe der Kontamination durch geeignete Messverfahren erfassbar ist. Sie sind nicht anwendbar auf Boden oder Bauschutt.
- Tiefe der Kontamination (7.18):
Es sollte geklärt werden, ob sich der Grenzwert nur auf die Oberfläche oder auch auf eine dünne Volumenschicht unterhalb der Oberfläche bezieht. Meist ist eine kombinierte Betrachtung sinnvoll.
- Abgrenzung zu Transportregelungen (7.19):
Die Grenzwerte der Transportvorschriften gelten nicht für Freigaben. Sie dienen dem regulierten Transport radioaktiver Stoffe und dürfen nicht zur Freigabe herangezogen werden.
- Relevante Expositionspfade (7.20):
Alle relevanten Pfade müssen im Modell berücksichtigt werden:
 - (a) externe Strahlung
 - (b) Ingestion über Hand-Mund-Kontakt
 - (c) Inhalation durch Wiederaufwirbelung
 - (d) Hautkontamination
- Dosisgrenzwerte (7.21):
Es gelten die allgemeinen Freigabekriterien (GSR Part 3 /IAEA 14/). Zusätzlich ist

bei niedrigwahrscheinlichen Szenarien ein Hautdosisgrenzwert von 50 μSv pro Jahr zu beachten.

- **Einschränkung bei aktivierten Materialien (7.22):**
Bei Materialien mit induzierter Aktivität (z. B. Betonabschirmungen) sind Oberflächengrenzwerte nicht geeignet. Für solche Fälle sind andere Modelle und Bewertungen erforderlich.

Einhalten der Bedingungen bei spezifischer Freigabe (7.23 – 7.29)

Diese Abschnitte verdeutlichen, dass spezifische Freigaben nicht nur von Grenzwerten, sondern auch vom tatsächlichen Verbleib des Materials abhängen, und dass die Verantwortung über die Freigabe hinaus reicht, bis alle Bedingungen erfüllt sind.

- **Verbindlichkeit der Bedingungen (7.23):**
Die spezifische Freigabe ist an konkrete Bedingungen geknüpft, z. B. Menge, Art und Zielort des Materials. Diese Bedingungen müssen erfüllt sein, damit der Freigabeprozess als abgeschlossen gilt. Beispiel: Metall muss tatsächlich eingeschmolzen werden und darf vorher nicht anderweitig verwendet werden.
- **Vereinbarungen zwischen Betreiber und Empfänger (7.24):**
Um die Einhaltung der Bedingungen sicherzustellen, kann eine formale Vereinbarung zwischen dem freigebenden Betreiber und dem Empfänger notwendig sein. Diese kann auch Transportüberwachung oder Empfangsbestätigungen beinhalten. Bei grenzüberschreitender Verbringung müssen internationale Anforderungen beachtet werden.
- **Zweistufiger Freigabeprozess (7.25):**
Der Prozess besteht aus zwei Phasen:
Freigabeentscheidung, wenn alle Kriterien erfüllt und der Verbleib gesichert ist.
Bestätigung, dass das Material wie vorgesehen behandelt oder entsorgt wurde.
- **Besonderheit Altmetall (7.26):**
Die übliche Verwertungskette für Altmetall (z. B. über Schrotthändler) ist nicht geeignet für spezifische Freigabe. Es muss sichergestellt werden, dass das Metall direkt zur Schmelze gelangt.
- **Besonderheit Deponie (7.27):**
Für die Freigabe zur Deponierung müssen Standorteigenschaften der Deponie, Auslaugverhalten, Kapazität und Langzeitverhalten (z. B. nach Ende der

institutionellen Kontrolle) berücksichtigt werden. Eindringsszenarien gelten als niedrigwahrscheinlich (Grenzwert: 1 mSv pro Jahr gemäß GSR Part 3, Abs. I.11 /IAEA 14/).

- **Vollständigkeit der Freigabe (7.28):**
Bei generischer Freigabe ist der Prozess mit der Grenzwerteinhaltung abgeschlossen. Bei spezifischer Freigabe endet die behördliche Verantwortung erst mit Zielerreichung (z. B. tatsächliche Deponierung oder Einschmelzung). Eine Zwischenverwendung kann eine Genehmigungspflicht auslösen.
- **Berücksichtigung des Transports (7.29):**
Das Modell zur Ableitung spezifischer Freigabewerte muss Transportaspekte einbeziehen. Sofern dieselben Dosisgrenzwerte wie bei generischer Freigabe gelten, unterliegt der Transport nicht den Vorschriften der SSR-6 (Transportregelwerk für radioaktive Stoffe). Auch die Zielanlage benötigt keine zusätzliche Genehmigung, wenn die Voraussetzungen erfüllt sind.

Da die vorliegende Eigenforschung auf die Entwicklung praktikabler, sicherheitstechnisch belastbarer Freigabeszenarien abzielt, erscheint ein abschließender Abgleich mit den Anforderungen und Empfehlungen aus GSG-18 sinnvoll (siehe Tab. 3.6).

3.1.2 Datensammlung und Parameterwerte

Für die im Verlauf des Forschungsvorhaben zu entwickelnden generischen Szenarien (Baukasten) wurden zunächst die vorhandenen Modelle und Szenarien sowie zahlreiche Parameterwerte gesammelt und für die weitere Bearbeitung aufbereitet. Dabei stand/steht insbesondere die Transparenz und Nachvollziehbarkeit der Daten im Vordergrund. Es ist jedoch an dieser Stelle darauf hinzuweisen, dass die verwendeten Daten in erster Linie eine Art „Platzhalterfunktion“ haben, da es nicht das Ziel des Forschungsvorhabens ist, Freigabewerte gemäß aktuellem Regelwerk nachzurechnen. Dennoch ist es von entscheidender Bedeutung möglichst realistische Parameterwerte zusammenzutragen, anhand derer die Funktionalität des Berechnungsinstrumentes getestet werden kann.

Bei der Datensammlung und Darstellung von Parameterwerten lag der Fokus insbesondere auf der Form der Bereitstellung dieser Daten, also der Erstellung und Entwicklung entsprechender Datenblätter (Datensammlung), die so gestaltet sind, dass ein späteres Einlesen dieser Daten (sowie angepasster/veränderter Daten) möglich ist. Dabei wurde

besonders darauf geachtet, dass die Quelle der Daten möglichst transparent hinterlegt werden kann und einzelne Parameterwerte, wenn notwendig, mit einem entsprechenden Vermerk angepasst werden können.

Konkrete Datenblätter für die praktische Berechnung im Rahmen des Arbeitspakets 3.3 sind im Anhang A.1 zu finden, ein exemplarisches Datenblatt ist in Abb. 3.3 dargestellt. Die Bearbeitung hat gezeigt, dass die Erstellung solcher Datenblätter infolge der Charakteristik der einzelnen Parameter nicht einem vollumfänglich einheitlichen Format folgen kann und die Datenblätter voneinander abweichen. Die umfänglich/abdeckende Darstellung sämtlicher Parameter im Rahmen des Forschungsvorhabens ist aufgrund der zum Teil sehr umfänglichen Parameterdaten nicht sinnvoll (z. B. Halbwertszeiten sämtlicher Radionuklide o. ä.).

# StrlSchV 2025, Anlage 4, Tabelle 1						
# mass-related clearance values, columns 3, 6-11 and 14 of table 1						
nuclide / parameter	parameter symbol	unit	generic_clearance	demolition_waste	soil_area	landfill_100 i
H-3	cl_m	Bq/g	100	60	3	60000
Be-7	cl_m	Bq/g	10	30	2	300
Be-10	cl_m	Bq/g	100			
C-11	cl_m	Bq/g	10			
C-11 Monoxid, Dioxid	cl_m	Bq/g	10			
C-14	cl_m	Bq/g	1	10	0,04	4000
C-14 Monoxid, Dioxid	cl_m	Bq/g	1			
N-13	cl_m	Bq/g	100			

Abb. 3.3 Beispiel Datenblatt (Ausschnitt) für die nuklidspezifischen Freigabewerte gemäß StrSchV

3.1.2.1 Aufbau der Datenblätter

Die Sammlung an Datenblättern bildet die Grundlage für die meisten im Berechnungsinstrument verwendeten Parameterwerte. Um eine flexible, einheitliche und maschinenlesbare Speicherung dieser Schnittstelle zu gewährleisten, müssen diese Datenblätter als CSV-UTF-8-Dateien vorliegen.

CSV steht für „Comma-Separated Values“ und ist ein einfaches Dateiformat zur Speicherung tabellarischer Daten. Jede Zeile in einer CSV-Datei stellt eine Datenreihe dar, während die Werte durch ein Trennzeichen – meist ein Komma oder Semikolon – voneinander getrennt sind. CSV-Dateien sind weit verbreitet, da sie von vielen Programmen, wie Tabellenkalkulationen, Datenbanken oder Programmiersprachen, problemlos verarbeitet werden können.

Jedes Datenblatt beginnt mit einem sog. „Kommentarblock“, der beliebig viele Zeilen umfassen kann. Diese Kommentarzeilen beginnen zwingend mit einem #-Symbol und enthalten wichtige Hintergrundinformationen zu den im Dokument aufgeführten Parametern und sind, wie die Datenblätter insgesamt, frei editierbar. Typische Inhalte sind z. B.

- Quellenangaben der Daten,
- Bedeutung und Verwendung der Parameter und
- wenn vorliegend, Hinweise auf mögliche Unsicherheiten oder Annahmen bei der Datenerhebung.

Der Kommentarblock dient dazu, die Daten verständlich und nachvollziehbar zu dokumentieren und kann über das Berechnungsinstrument bzw. über den Zugriff auf die CSV-Datei direkt ausgelesen werden.

Nach dem Kommentarblock folgt die eigentliche Tabelle, deren erste Zeile eine Kopfzeile enthält. Die Tabelle kann aus beliebig vielen Spalten und Zeilen bestehen. Dabei enthalten die ersten drei Spalten der „Parameter-Kopfzeile“ vorgegebene Informationen zu dem Parameter bzw. Nuklid, dem im Berechnungsinstrument verwendeten Parametersymbol sowie der Einheit des Parameters in der dritten Spalte. Ab der vierten Spalte folgen dann die einzulesenden und für die Berechnung benötigten Parameterwerte (siehe Tab. 3.1).

Tab. 3.1 Aufbau der Parametertabellen

Spalte	Inhalt	Beschreibung
Spalte 1 – nuclide/parameter	Name des Parameters oder Nuklidbezeichnung	Falls es sich um nuklidspezifische Daten handelt (z. B. Dosiskoeffizienten, Halbwertszeiten), wird hier die Nuklidbezeichnung gemäß StrSchV eingetragen. Andernfalls erfolgt hier die Bezeichnung des Parameters, z. B. Atemrate, Aufenthaltszeit, ...
Spalte 2 – parameter symbol	Bezeichnung des Parameters, wie dieser im Berechnungsinstrument verwendet wird	Diese Bezeichnung entspricht der in den Berechnungsvorschriften verwendeten Nomenklatur.
Spalte 3 – unit	Einheit des Parameterwertes	Gibt die Maßeinheit des Parameters an (z. B. Bq/kg, Sv/Bq, min, ...)
ab Spalte 4	Parameterwerte	Enthält die eigentlichen Werte, die sich beispielsweise auf verschiedene Altersgruppen oder Szenarien beziehen können

Diese Struktur stellt sicher, dass die Parameterwerte einheitlich, klar dokumentiert und leicht in das Berechnungsinstrument integrierbar sind. Zudem ermöglicht das Format eine einfache Erweiterung, falls neue Parameter oder Werte hinzukommen oder vergleichende Rechnungen durchgeführt werden sollten. Die Datenhaltungen ermöglichen es hierbei z. B. vorhandene Datenblätter zunächst zu kopieren, entsprechend neu zu befüllen, zu kommentieren und für eine vergleichende Berechnung im Berechnungsinstrument zu verwenden.

3.1.2.2 Verfügbare Datenblätter

Im Rahmen des Forschungsprojekts wurden nahezu sämtliche Parameterwerte der bisherigen Freigabemodelle systematisch erfasst, gesichtet und aufbereitet. Diese umfassende Sammlung war notwendig, um eine solide Datengrundlage für die Entwicklung des Berechnungsinstrumentes im Arbeitspaket 2 zu schaffen und auch verschiedene Systematiken einzelner Parameter hinsichtlich ihrer Darstellung in der gewählten Datenblattstruktur zu testen.

Die in Tab. 3.2 aufgeführten Datensätze wurden entsprechend des oben ausgeführten Aufbaus des Baukastensystems entwickelt, um die Funktionalität des Berechnungsinstrumentes und den Zugriff auf die entsprechenden Parameterwerte zu testen. Die in Tab. 3.2 aufgeführten Datenblätter sind nicht zwingend vollständig, können aber flexibel ergänzt und angepasst werden. Dies gilt auch für die Benennung des Dateinamens. Die Festlegung einer einheitlichen Struktur bei der Bezeichnung der Datenblätter hat sich bisher als nicht zielführend und notwendig erwiesen, da der Zugriff über das Berechnungsinstrument hierbei eine große Flexibilität erlaubt.

Tab. 3.2 Ausgewählte Datenblätter

Name Datenblatt	Inhalt
Breathing_rate.csv	Atemrate
Concentration_factor_csv	Aufkonzentrationsfaktor in der einatembaren Staubfraktion gem. SR-44
Conversion_factor_csv	Umrechnungsfaktor von oberflächen- auf massenspezifische Werte aus TH100
Decay_before_scenario.csv	Zerfallszeit vor Beginn des Szenarios

Name Datenblatt	Inhalt
Decay_during_scenario_csv	Zerfallszeit während des Szenarios
Dilution_factor	Verdünnungsfaktor
Dosse_coefficients_external_Thi04_area.csv	Dosiskoeffizienten (Fläche) nach THI04
Dosse_coefficients_external_Thi04_mass.csv	Dosiskoeffizienten (Masse) nach THI04
Dosse_coefficients_ingestion_Thi99.csv	Dosiskoeffizienten Ingestion nach THI99
Dosse_coefficients_inhalation_Thi99.csv	Dosiskoeffizienten Inhalation nach THI99
Dust_concentration.csv	Staubkonzentration
Ingestion_soil_Thi99.csv	Ingestionsraten Boden nach THI99
Mass_ingestion.csv	Unbeabsichtigte aufgenommene Bodenmenge
Result_DARTM_SpezL1.csv	Ergebnisse aus DARTM-Software
Result_DARTM_SpezL2.csv	Ergebnisse aus DARTM-Software
Result_DARTM_SpezL3.csv	Ergebnisse aus DARTM-Software
Specific_activity.csv	Spezifische Aktivität
strlschv_2023_anl4_tab1_cl_mass.csv	Massebezogene Freigabewerte gem. StrlSchV23
strlschv_2023_anl4_tab1_cl_surface.csv	Flächenbezogene Freigabewerte gem. StrlSchV23
strlschv_2023_anl4_tab1_half-life.csv	Halbwertszeiten der Radionuklide gem. StrlSchV23
Time_Exposure_default.csv	Expositionszeiten
...	

Durch diese methodische Vorgehensweise kann sichergestellt werden, dass die im Berechnungsinstrument verwendeten Parameterwerte auf einer konsistenten und transparenten Datenbasis beruhen. Zugleich erlaubt das modulare Konzept, dass zusätzliche Parameterwerte/Eingabewerte, z. B. infolge alternativer Szenarien oder sich ändernder Parameterwerte, bei Bedarf, problemlos in das System integriert werden können.

3.1.2.3 Exkurs zur Datenverfügbarkeit

Im Rahmen der vorliegenden Eigenforschungsarbeiten war die Verfügbarkeit, Qualität und insbesondere Transparenz der in den Berechnungsmodellen verwendeten Parameterdaten von zentraler Bedeutung. Da die Parameterwerte der Freigabemodelle auf einer Vielzahl unterschiedlicher Datenquellen basieren, konnten im Zuge verschiedener Aufstockungsanträge gezielt einzelne Aspekte der Datenverfügbarkeit und -art vertieft bearbeitet werden. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind in den Anhängen dieses Abschlussberichts dokumentiert und geben einen umfassenden Überblick über den Stand der Recherche, der durchgeführten Untersuchungen sowie der abgeleiteten methodischen Ansätze. Konkret wurden die folgenden Punkte bearbeitet:

Anhang A.2: Probabilistische Daten und Parameterwerte

Ausführungen zu probabilistischen Daten und Parameterwerten: Hierbei lag das Augenmerk auf der Recherche bekannter Verteilungsfunktionen relevanter Parameter aus der Literatur sowie, soweit möglich, deren Vergleich. Ziel dieser Arbeiten war es, eine fundierte Basis für die Implementierung probabilistischer Methoden in zukünftige Modellierungen zu schaffen.

Anhang A.3: K_D -Werte (Datenrecherche)

In Anhang 2 sind die Ergebnisse einer umfassenden Literaturrecherche zu K_D -Werten zusammengestellt.

Anhang A.4: Das K_D -Konzept

Im Anhang A.4 wird das K_D -Konzept beschrieben und bestimmende Einflussfaktoren auf K_D -Werte werden identifiziert. Konzeptionelle Schwierigkeiten im Zusammenhang mit dem K_D -Konzept werden ebenso beleuchtet wie Aussagen zur Datenverfügbarkeit.

Anhang A.5: K_D -Werte GRS-Labor

Um möglichst realitätsnähere K_D -Werte für bestimmte Element-Feststoff-Systeme im Grundwassersystem im Untergrund einer Deponie in Transportrechnungen berücksichtigen zu können, wurden im Rahmen dieses Vorhabens Sorptionsversuche im Labor der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH durchgeführt. In den Experimenten wurde das Sorptionsverhalten von Eu, U(VI) und Cs untersucht. Für die

Sorptionsversuche wurden, in Anlehnung an im Untergrund einer Deponie, potenzielle vorkommende anorganische Feststoffe exemplarisch ausgewählt.

Anhang A.6: Implizites Expertenwissen

Bei der Freigabe radioaktiver Stoffe sind viele Einflussfaktoren unsicher. Um diese Unsicherheiten zu berücksichtigen, werden u. a. probabilistische Analysen durchgeführt. Dabei werden zahlreiche Modellläufe mit zufällig gewählten Parametern gerechnet, um Wahrscheinlichkeiten und Sensitivitäten zu bewerten. Man unterscheidet aleatorische (zufallsbedingte) und epistemische (wissensbedingte) Unsicherheiten. Da oft keine ausreichenden Messdaten vorliegen, wird Expertenwissen einbezogen, z. B. mithilfe der SHELF-Methode (Sheffield Elicitation Framework) zur strukturierten Expertenbefragung. In einer Demonstrationsstudie wurden Sorptionsparameter (K_D -Werte) mithilfe dieser Methode abgeschätzt. Die hier dargestellten Ansätze sind als ein erster methodischer Einstieg zu verstehen und erheben keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

Die Untersuchung diente als Übung zur Anwendung der SHELF-Methodik zur Bestimmung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen bei unzureichend bekannten Parametern. Sie zeigte, dass SHELF grundsätzlich praktikabel ist. Für einen vollständig bearbeiteten Fall stimmte die ermittelte Verteilung gut mit späteren Labordaten überein, wobei das Ziel nicht die Reproduktion von Messwerten, sondern die Erfassung einer gemeinsamen Expertenschätzung ist. Trotz anfangs stark abweichender Einzelmeinungen konnte im Gruppendialog ein sinnvoller Konsens erzielt werden. Eine rein rechnerische Ableitung aus Einzelmeinungen wäre zwar möglich, aber weniger aussagekräftig und nur bei vielen Experten sinnvoll. Es lässt sich festhalten, dass im Rahmen dieser ersten Untersuchungen bereits wertvolle Erkenntnisse zur praktischen Anwendung der SHELF-Methode gewonnen wurden. Eine ausführliche Darstellung der Methodik und Ergebnisse ist dem Anhang A.6 zu entnehmen.

Die im Rahmen dieser Arbeiten gewonnenen Erkenntnisse stellen einen wichtigen Baustein für die Weiterentwicklung der zukünftigen Freigabemodelle und insbesondere der darin verwendeten Parameter dar und liefern zugleich eine belastbare Grundlage für künftige methodische Erweiterungen.

3.1.3 Entwicklung eines generischen Baukastens zur Bestimmung spezifischer Freigabewerte

Eine der zentralen Aufgaben im Rahmen des Arbeitspaketes 1 bestand in der Konzeption und Ausarbeitung eines generischen Baukastensystems zur Ermittlung spezifischer Freigabewerte. Die Herausforderung lag darin, die bestehenden spezifischen Freigabemodelle mit ihren jeweils unterschiedlichen Szenarien zu analysieren, systematisch zu strukturieren und in eine generalisierbare, modular anwendbare Form zu überführen. Ziel war es, ein flexibles und erweiterbares System zu entwickeln, das eine standardisierte und zugleich anpassungsfähige Grundlage für die spätere rechentechnische Umsetzung im Berechnungsinstrument schafft. Als zentraler Punkt mussten hierzu zunächst generische Szenarien – die Bausteine des Berechnungsinstrumentes – entwickelt werden.

3.1.3.1 Methodisches Vorgehen zur Entwicklung der generischen Szenarien

Die Entwicklung der generischen Modelle erfolgte auf Grundlage eines mehrstufigen Analyse- und Abstraktionsprozesses, der sich in folgende methodische Schritte gliedert:

1. Systematische Erfassung der spezifischen Szenarien:

Sämtliche Szenarien der spezifischen Freigabemodelle wurden gesammelt, strukturiert erfasst und hinsichtlich ihrer Inhalte, Zielgruppen und Anwendungsbereiche dokumentiert.

2. Identifikation gemeinsamer Strukturmerkmale:

Mittels vergleichender Analyse wurden funktionale und strukturelle Gemeinsamkeiten innerhalb der Szenarien herausgearbeitet. Insbesondere wurden

- ähnliche Expositionspfade,
- vergleichbare Randbedingungen und
- übereinstimmende Berechnungsansätze

identifiziert.

3. Entwicklung generischer Szenarien:

Unter Berücksichtigung gemeinsamer Strukturmerkmale wurden die generischen Szenarien sowie die spezifischen Szenarien so entwickelt, dass die charakteristischen Expositionspfade und Berechnungsgrundlagen die zugehörigen spezifischen Modelle abbilden. Die so gebildeten Szenarien wurden modular aufgebaut und in

einem standardisierten Format dokumentiert. In der folgenden rechentechnischen Umsetzung können dabei einzelne Expositionspfade innerhalb der generischen Szenarien ab- und angewählt werden.

Durch diesen methodisch-strategischen Ansatz war es möglich, die ursprünglich vorliegenden rund 54 spezifischen Freigabeszenarien auf fünf generische und acht spezifische Szenarien zu verdichten. Der Klammerwert in der folgenden Aufzählung gibt an, wie viele Szenarien aus den jeweiligen spezifischen Freigabeoptionen in dem neuen Szenario zusammengefasst wurden:

- GEN_A – Aufenthalt (31)
- GEN_G – Grundwasser (6)
- GEN_H – Hautdosis (3)
- GEN_O – Oberflächenwasser (3)
- GEN_S – Ingestion Pflanzen (3)
- SPEZ_BL – Blasinstrumente (1)
- SPEZ_DS – Nachnutzung Deponie (1)
- SPEZ_H3 – Tritium aus Abluft (1)
- SPEZ_IR – Intensivrotte (1)
- SPEZ_L1 – Luft Bodenstrahlung (1)
- SPEZ_L2 – Luft Inhalation (1)
- SPEZ_L3 – Luft Ingestion (1)
- SPEZ_RN – Radon (1)

Parallel dazu wurde auch die Anzahl der betrachteten Expositionspfade von ursprünglich 54 auf 32 reduziert. Diese Reduktion konnte erreicht werden, ohne relevante Details oder wichtige Einflussgrößen zu vernachlässigen. Vielmehr wurde gezielt darauf geachtet, dass die generischen Szenarien alle denkbaren Kombinationen von Expositionspfaden abdecken können, so dass im konkreten Anwendungsfall eine bedarfsgerechte Auswahl und Kombination erfolgen kann.

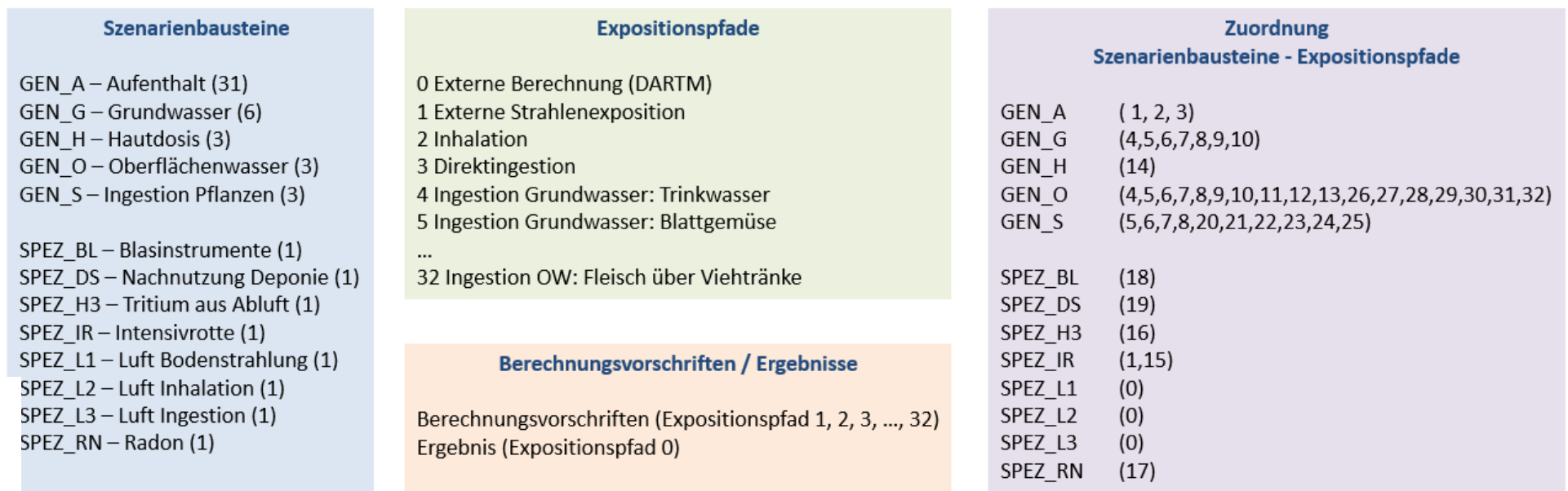


Abb. 3.4 Überblick Aufbau generischer Szenarien für das Berechnungsinstrument

3.1.3.2 Konkrete Ausformulierung der gebildeten generischen Szenarien

3.1.3.2.1 Generische Szenarien

Gen_A (GenericA) – Aufenthalt

Das Gen_A-Szenario dient als umfassendes Standardszenario zur Bewertung potenzieller Strahlenexpositionen durch den Aufenthalt auf oder in der Nähe von spezifischen freizugebenden Materialien. Es ermöglicht die Berücksichtigung sämtlicher relevanter Expositionspfade beim Aufenthalt – externe γ -Bestrahlung, Inhalation und Ingestion – und erlaubt deren bedarfsgerechte Auswahl im jeweiligen Berechnungsfall.

Im Gegensatz zu früheren Einzelszenarien vereint das generische A-Szenario sowohl Szenarien für die Bevölkerung als auch für Beschäftigte. Es deckt damit eine Vielzahl praktischer Anwendungen ab, etwa

- Transport und Lagerung (Deponie, Müllverbrennungsanlage (MVA), Müll-, Schlacke- und Staubbunker),
- Verwertung von Materialien (z. B. Schlacke im Straßenbau, REA-Gips, Metallschrott),
- Arbeitstätigkeiten und Expositionen bei Recycling und Aufbereitung und
- Umwelteinwirkungen wie Aufenthalt auf belasteten Flächen oder der Kontakt mit kontaminiertem Erdreich.

Das Szenario stellt somit eine zentrale Grundlage für die standardisierte, nachvollziehbare und ganzheitliche Bewertung in Freigabeprozessen dar.

Gen_G (GenericGW) - Grundwasser

Das Gen_G-Szenario (GenericGW) ist ein standardisiertes Bewertungsmodell zur Erfassung von Expositionen über den Pfad des Grundwassers. Es richtet sich ausschließlich an die Bevölkerung und fasst insgesamt sechs spezifische Grundwasser-Szenarien zusammen.

Im Fokus stehen dabei potenzielle Aufnahmepfade radioaktiver Stoffe, die über das Trinkwasser oder die Nahrungskette wirksam werden können. Die betrachteten Expositionspfade umfassen

- Trinkwasseraufnahme,
- Konsum von Blattgemüse, bewässert mit kontaminiertem Grundwasser – sowohl allgemein als auch spezifisch für Tritium (H-3) und Kohlenstoff-14 (C-14),
- Konsum anderer Pflanzenarten (ohne Blattgemüse), ebenfalls mit separater Betrachtung für H-3 und C-14,
- Milchaufnahme über die Viehtränke und
- Fleischaufnahme über die Viehtränke.

Das Gen_G-Szenario erlaubt somit eine umfassende Bewertung potenzieller radiologischer Auswirkungen auf die Bevölkerung durch die Nutzung von kontaminiertem Grundwasser in der Lebensmittelproduktion und Trinkwasserversorgung.

Gen_O (GenericSW) – Oberflächenwasser

Das Gen_O-Szenario (GenericSW) dient als standardisiertes Modell zur Bewertung radiologischer Expositionen der Bevölkerung über den Pfad des Oberflächenwassers. Es fasst drei spezifische Oberflächenwasser-Szenarien zusammen und erweitert damit die Betrachtung des Gen_G-Szenario (Grundwasser).

Neben den bereits im Gen_G-Szenario berücksichtigten Pfaden

- Trinkwasseraufnahme,
- Verzehr von Blattgemüse (inkl. separater Betrachtung für H-3 und C-14),
- Verzehr anderer Pflanzenarten (inkl. H-3 und C-14),
- Milchaufnahme über Viehtränke und
- Fleischaufnahme über Viehtränke

wird im Gen_O-Szenario zusätzlich der Verzehr von Fischen berücksichtigt, die in kontaminiertem Oberflächenwasser leben.

Das Szenario ermöglicht somit eine erweiterte und realitätsnahe Bewertung möglicher Auswirkungen einer Freisetzung radioaktiver Stoffe in Oberflächengewässer, insbesondere im Hinblick auf die Nahrungsmittelkette und den menschlichen Verzehr.

Gen_H (GenericSkin) – Hautexposition

Das Gen_H-Szenario (GenericSkin) ist ein standardisiertes Bewertungsmodell zur Erfassung der Hautexposition durch radioaktive Stoffe bei beruflichen Tätigkeiten. Es fasst drei spezifische Szenarien zur Hautkontamination zusammen und gilt ausschließlich für Beschäftigte, die im Rahmen ihrer Arbeit potenziell mit kontaminiertem Material in Berührung kommen. Typische Anwendungsfälle sind Tätigkeiten wie

- Abriss kontaminierter Gebäudestrukturen,
- Sanierung oder Renovierung betroffener Bereiche und
- Umgang mit belastetem Staub oder Material, der auf die Haut gelangen kann.

Im Fokus steht die direkte Kontamination der Haut mit radioaktiven Stoffen, z. B. durch Ablagerung von Staubpartikeln während handwerklicher Arbeiten. Das Szenario ermöglicht eine gezielte Abschätzung der potenziellen lokalen Hautdosis, die im Rahmen beruflicher Expositionen auftreten kann. Es ergänzt damit die anderen generischen Szenarien um einen wichtigen Aspekt des Arbeitsschutzes im Strahlenschutzkontext.

Gen_S (GenericL) – Standort

Das Gen_S-Szenario (GenericL) ist ein generisches Szenario zur Erfassung standortbezogener Expositionen der Bevölkerung durch den Verzehr pflanzlicher und tierischer Lebensmittel, die auf oder über kontaminierten Bodenflächen erzeugt wurden. Es fasst drei spezifische Standort-Szenarien zusammen.

Im Zentrum steht die Ingestion radioaktiver Stoffe, die in den Boden eingetragen wurden – etwa über Bauschutt, Rückstände oder Altlasten – und von dort aus in die Nahrungskette gelangen können. Berücksichtigte Expositionspfade sind

- Verzehr von Blattgemüse von kontaminierten Flächen (inkl. getrennte Bewertung für H-3 und C-14),
- Verzehr anderer Pflanzenarten (ohne Blattgemüse, inkl. H-3 und C-14) und

- Milch- und Fleischaufnahme, sofern das Vieh über kontaminierte Böden aufgenommenes Futter verwertet oder direkten Bodenkontakt hat.

Das Gen_S-Szenario dient somit der konservativen Bewertung potenzieller radiologischer Belastungen durch die Nutzung kontaminierter Standorte für die Selbstversorgung. Es trägt insbesondere dazu bei, Risiken durch sekundäre Expositionspfade frühzeitig zu erkennen und zu bewerten.

3.1.3.2.2 Spezifische Szenarien:

Bestimmte Szenarien konnten aufgrund ihrer individuellen Anforderungen und Rahmenbedingungen nicht zusammengefasst werden und werden daher auch im neu entwickelten Berechnungsinstrument als eigenständige, spezifische Szenarien bereitgestellt. Ein Beispiel hierfür ist das Szenario der „Intensivrotte“. Dieses zeichnet sich durch derart spezielle Randbedingungen aus, dass eine Generalisierung weder möglich noch erforderlich ist. Wie auch die übrigen spezifischen Szenarien (Kennzeichnung: SPEZ_...) wird dieses vollständig mathematisch ausformuliert und dem Berechnungsmodul als eigenständiger Baustein zur Verfügung gestellt. Das Berechnungsinstrument gibt aber auch hier die Möglichkeit, individuelle Anpassung, z. B. für eine spezifische Anlage, in einem entsprechenden Datenblatt für die Berechnung zu hinterlegen. Die folgenden spezifischen Szenarien wurden bisher identifiziert:

- SPEZ_BL – Blasinstrumente
- SPEZ_DS – Nachnutzung Deponie
- SPEZ_H3 – Tritium aus Abluft
- SPEZ_IR – Intensivrotte
- SPEZ_L1 – Luft Bodenstrahlung
- SPEZ_L2 – Luft Inhalation
- SPEZ_L3 – Luft Ingestion
- SPEZ_RN – Radon

3.1.3.3 Generische Expositionspfade

Die Dosiswerte für die vorgenannten generischen Szenarien werden unter Anwendung der grundlegenden Expositionspfade externe Strahlenexposition, Inhalation sowie Direktingestion ermittelt. Die entsprechenden Routinen sind, mit Ausnahme des Luftpfades, im Berechnungsinstrument implementiert. Die Dosiswerte für die spezifischen Luftpfad-Szenarien werden mit Hilfe des externen Tools DARTM (Dosis Atmosphärisches Radionuklid-Transport-Modell) berechnet und später im weiteren Verlauf im Berechnungsinstrument berücksichtigt. Im Folgenden werden die Expositionspfade, wie sie im Berechnungsinstrument integriert sind, kurz beschrieben. Die Nummerierung in Klammern verweist auf die zugehörige Klassifikation im Rahmen der hier im Forschungsvorhaben vorgenommenen Python-Implementierung, um eine eindeutige Zuordnung zwischen Dokumentation und Software zu ermöglichen.

Für die Entwicklung generischer Berechnungsvorschriften für die zu berücksichtigenden Expositionspfade erfolgte zunächst eine umfassende Erhebung und Zusammenstellung aller relevanten Szenarien der spezifischen Freigabeoptionen. Für jeden identifizierten Expositionspfad – Inhalation, Ingestion und externe Exposition – wurden sämtliche in der Literatur verfügbaren Formeln (Berechnungsvorschriften) gegenübergestellt. Dabei lag der Fokus auf der Ermittlung der zugrunde liegenden Parameter, Einheiten und deren Nomenklatur, um eine systematische Vergleichbarkeit sicherzustellen.

Im nächsten Schritt wurden identische oder äquivalente Parameter zwischen den verschiedenen Formeln identifiziert und vereinheitlicht. Ziel war es, eine abdeckende und konsistente Formelstruktur für die jeweiligen Expositionspfade zu entwickeln, die gleichzeitig eine einheitliche Nomenklatur verwendet. Diese vereinheitlichte Herangehensweise ermöglicht eine transparente und nachvollziehbare Anwendung der Modelle sowie eine direkte Vergleichbarkeit der Ergebnisse.

Die daraus resultierenden Berechnungsvorschriften ähneln in ihrer Struktur der in SR-44 beschriebenen Herangehensweise. Die Spezifizierung erfolgt im Rahmen des Berechnungsinstruments über die Eingabe spezifischer Parameterwerte, welche die differenzierenden Bedingungen der betrachteten Szenarien quantitativ abbilden. Auf diese Weise wird eine flexible, aber konsistente Berechnungsgrundlage geschaffen, die sowohl für generische als auch für spezifische Freigabesituationen anwendbar ist.

3.1.3.3.1 Externe Berechnung (0: DARTM)

Für bestimmte Fälle werden Dosiswerte nicht im Berechnungsinstrument selbst ermittelt, sondern extern bereitgestellt. Ein typisches Beispiel hierfür ist DARTM. Dabei handelt es sich um einen Spezialfall, bei dem die entsprechenden Dosiswerte direkt durch DARTM ermittelt wird (für die spezifischen Szenarien SPEZ_L1, SPEZ_L2 und SPEZ_L3). Im Berechnungsinstrument erfolgt dann lediglich der Vergleich mit dem zugehörigen generischen Szenario. Eine eigenständige Berechnung ist nicht vorgesehen.

Ein vergleichbares, wenn auch nicht identisches, Vorgehen gilt auch für Übergabewerte (Parameterwerte) aus der Grundwassermodellierung, die ebenfalls extern ermittelt und anschließend im Berechnungsinstrument eingebunden werden.

3.1.3.3.2 Externe Strahlenexposition (1: ExternalRadiation)

Bei der Analyse der verschiedenen spezifischen Freigabeoptionen sowie der jeweils zugrunde liegenden Szenarien und Berechnungsvorschriften für die externe Strahlenexposition wurde eine einheitliche und konsolidierte Berechnungsformel entwickelt. Grundlage hierfür bildete der systematische Vergleich der in den unterschiedlichen Regelwerken und Modellen verwendeten Ansätze, Parameter und Annahmen. Durch die Identifizierung übereinstimmender Parameter und die Harmonisierung der Nomenklatur konnte eine abdeckende Formel abgeleitet werden, die alle relevanten Expositionspfade in konsistenter Form beschreibt. Diese Formel weist in ihrer Struktur eine enge Analogie zur Methodik gemäß SR-44 /IAEA 05/ auf. Die im Berechnungsinstrument verwendete generische Formel zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund externer Strahlenexposition ist im Folgenden dargestellt:

- $$E_{\text{ext}} = A_{\text{RN}} \cdot d_{\text{ext}} \cdot f_d \cdot c \cdot t_e \cdot e^{-\lambda_{\text{RN}} \cdot t_1} \cdot \frac{1 - e^{-\lambda_{\text{RN}} \cdot t_2}}{\lambda_{\text{RN}} \cdot t_2}$$
- $$E_{\text{ext}} = A_{\text{RN}} \cdot d_{\text{ext}} \cdot f_d \cdot c \cdot t_e \cdot \text{decay1} \cdot \text{decay2}$$

Die in der Formel verwendeten Parameter sind in Tab. 3.3 aufgeführt und erläutert.

Tab. 3.3 Parameter zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund externer Strahlendosis

Parameter [parameter]	Formelzeichen [parameter symbol]	Einheit [unit]	Erläuterung
Individualdosis durch äußere Bestrahlung	E_{ext}	Sv/a	Ergebnis der Berechnung
Aktivität des Radionuklids	A_{RN}	Bq/g bzw. Bq/cm ²	1 Bq/g bzw. 1 Bq/cm ² oder Freigabewert StrlSchV
Dosisleistungs- koeffizient	d_{ext}	(Sv/h)/(Bq/g) bzw. (Sv/h)/(Bq/cm ²)	Tabellierter oder extern berechneter Wert, abhängig von Geometrie, Material (Dichte) und ggf. Abschirmung
Verdünnungsfaktor	f_d	-	Ggf. Produkt aus mehreren dimensionslosen Faktoren, die den Anteil des freigegebenen Materials am zu betrachtenden Gesamtmaterial beschreiben
Ggf. Umrechnungsfaktor	c	- bzw. [(Bq/g)/(Bq/cm ²)]	z. B. Umrechnungsfaktor für Aktivität im Bauschutt für Gebäude
Expositionszeit	t_e	h/a	
Zerfallskonstante	λ_{RN}	1/a	$\lambda_{\text{RN}} = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ mit $T_{1/2}$: Halbwertszeit aus Tabelle 1 [in a]
Zeitdauer zwischen Freigabe und Beginn des Szenarios	t_1	a	Falls $t_1 \rightarrow 0$: decay1 $\rightarrow 1$
Zeitdauer während des Szenarios	t_2	a	Falls $t_2 \rightarrow 0$: decay2 $\rightarrow 1$

3.1.3.3.3 Inhalation (2: Inhalation)

In Analogie zum Vorgehen bei der externen Strahlenexposition wurde auch für den Expositionspfad der Inhalation eine einheitliche Herangehensweise angewendet. Als Ergebnis dieses Vergleichs und der Parameterharmonisierung wurde die nachfolgende generische Formel zur Berechnung der Jahresdosis durch Inhalation entwickelt:

- $$E_{\text{inh}} = A_{\text{RN}} \cdot d_{\text{inh}} \cdot f_d \cdot f_c \cdot C_{\text{dust}} \cdot B_r \cdot c \cdot t_e \cdot e^{-\lambda_{\text{RN}} \cdot t_1} \cdot \frac{1 - e^{-\lambda_{\text{RN}} \cdot t_2}}{\lambda_{\text{RN}} \cdot t_2}$$

- $E_{\text{ext}} = A_{\text{RN}} \cdot d_{\text{inh}} \cdot f_d \cdot f_c \cdot C_{\text{dust}} \cdot B_r \cdot c \cdot t_e \cdot \text{decay1} \cdot \text{decay2}$

Die in der Formel verwendeten Parameter sind in Tab. 3.4 zusammengefasst und kurz beschrieben.

Tab. 3.4 Parameter zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund Inhalation

Parameter [parameter]	Formelzeichen [parameter symbol]	Einheit [unit]	Erläuterung
Individualdosis durch Inhalation	E_{inh}	Sv/a	Ergebnis der Berechnung
Aktivität des Radionuklids	A_{RN}	Bq/g bzw. Bq/cm ²	1 Bq/g bzw. 1 Bq/cm ² oder Freigabewert aus StrlSchV
Dosiskoeffizient	d_{inh}	Sv/Bq	Tabellierter Wert, abhängig von Arbeiter/Bevölkerung, ggf. Alter bzw. Partikelgröße (AMAD, Activity Median Aerodynamic Diameter)
Verdünnungsfaktor	f_d	-	ggf. Produkt aus mehreren dimensionslosen Faktoren, die den Anteil des freigegebenen Materials am zu betrachtenden Gesamtmaterial beschreiben
Aufkonzentrationsfaktor	f_c	-	Dimensionsloser Faktor, die (nuklidabhängige) Aufkonzentration in der einatembaren Staubfraktion beschreibt
Staubkonzentration in der Luft	C_{dust}	g/cm ³	
Atemrate	B_r	m ³ /h	
Ggf. Umrechnungsfaktor	c	- bzw. [(Bq/g)/(Bq/cm ²)] oder cm ² /g	z. B. Umrechnungsfaktor für Aktivität im Bauschutt für Gebäude
Expositionszeit	t_e	h/a	
Zerfallskonstante	λ_{RN}	1/a	$\lambda_{\text{RN}} = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ mit $T_{1/2}$: Halbwertszeit aus Tabelle 1 [in a]
Zeitdauer zwischen Freigabe und Beginn des Szenarios	t_1	a	Falls $t_1 \rightarrow 0$: decay1 $\rightarrow$ 1
Zeitdauer während des Szenarios	t_2	a	Falls $t_2 \rightarrow 0$: decay2 $\rightarrow$ 1

3.1.3.3.4 Direktingestion (3: Directingestion)

In Analogie zum Vorgehen bei der externen Strahlenexposition wurde auch für den Expositionspfad der Direktingestion eine einheitliche Herangehensweise angewendet. Als Ergebnis dieses Vergleichs und der Parameterharmonisierung wurde die nachfolgende generische Formel zur Berechnung der Jahresdosis durch Direktingestion entwickelt:

- $E_{\text{ing}} = A_{\text{RN}} \cdot d_{\text{ing}} \cdot f_d \cdot f_c \cdot c \cdot M \cdot e^{-\lambda_{\text{RN}} \cdot t_1} \cdot \frac{1 - e^{-\lambda_{\text{RN}} \cdot t_2}}{\lambda_{\text{RN}} \cdot t_2}$
- $E_{\text{ext}} = A_{\text{RN}} \cdot d_{\text{ing}} \cdot f_d \cdot f_c \cdot c \cdot M \cdot \text{decay1} \cdot \text{decay2}$

Die in der Formel verwendeten Parameter sind in Tab. 3.5 zusammengefasst und kurz beschrieben.

Tab. 3.5 Parameter zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund Direktingestion

Parameter [parameter]	Formelzeichen [parameter symbol]	Einheit [unit]	Erläuterung
Individualdosis durch Direktin- gestion	E_{ing}	Sv/a	Ergebnis der Berechnung
Aktivität des Ra- dionuklids	A_{RN}	Bq/g bzw. Bq/cm ²	1 Bq/g bzw. 1 Bq/cm ² oder Freigabewert aus StrlSchV
Dosiskoeffizient	d_{ing}	Sv/Bq	Tabellierter Wert, abhängig von Arbeiter/Bevölkerung, ggf. Alter bzw. Partikelgröße (AMAD)
Verdünnungsfak- tor	f_d	-	Ggf. Produkt aus mehreren dimensionslosen Faktoren, die den Anteil des freigege- benen Materials am zu be- trachtenden Gesamtmaterial beschreiben
Aufkonzentri- onsfaktor	f_c	-	Dimensionsloser Faktor, die (nuklidabhängige) Aufkon- zentration in der inkorporier- baren Staubfraktion be- schreibt
(Unbeabsichtigt) aufgenommene Menge im Jahr	M	g/a	Wird ggf. als Produkt aus Menge pro Stunde (in g/a) und Expositionszeit pro Jahr (in h/a) zusammengesetzt

Parameter [parameter]	Formelzeichen [parameter symbol]	Einheit [unit]	Erläuterung
Ggf. Umrechnungsfaktor	c	- bzw. [(Bq/g)/(Bq/cm ²)] oder cm ² /g	z.B. Umrechnungsfaktor für Aktivität im Bauschutt für Gebäude
Zerfallskonstante	λ_{RN}	1/a	$\lambda_{RN} = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ mit $T_{1/2}$: Halbwertszeit aus Tabelle 1 [in a]
Zeitdauer zwischen Freigabe und Beginn des Szenarios	t_1	a	Falls $t_1 \rightarrow 0$: decay1 $\rightarrow$ 1
Zeitdauer während des Szenarios	t_2	a	Falls $t_2 \rightarrow 0$: decay2 $\rightarrow$ 1

3.1.3.4 Schnittstellen

In vielen Szenarien spielt die Direktstrahlung eine zentrale Rolle, insbesondere bei der Bewertung von Abschirmmaßnahmen oder der Ermittlung von Dosisleistungen in exponierten Bereichen. Das Berechnungsinstrument bietet hierfür eine flexible Möglichkeit, Ergebnisse aus externen Simulationsprogrammen einzulesen und weiterzuverarbeiten. Es ist wichtig zu betonen, dass diese externen Programme nicht direkt durch das Berechnungsinstrument gesteuert werden. Vielmehr dient das Berechnungsinstrument als Plattform zur Analyse, Visualisierung und Weiterverwendung (Berechnung) bereits vorliegender Ergebnisse.

Ein typisches Anwendungsbeispiel ist die Nutzung von Geant4, einem weit verbreiteten Monte-Carlo-Simulationspaket für den Transport von Teilchen. Auch Programme wie MicroShield oder aufbereitete MC-Resultate aus anderen Quellen können eingebunden werden. Die Einbindung erfolgt über definierte Schnittstellen (definierte Datenblätter) durch welche die Ausgabeformate dieser Programme eingelesen und in die Struktur des Berechnungsinstruments übertragen werden.

Die Programmschnittstellen sind so gestaltet, dass sie eine generische Szenarienbeschreibung ermöglichen. Voraussetzung hierfür ist die Kenntnis der zugrunde liegenden externen Programme. Ist diese gegeben, lassen sich spezifische Expositionsszenarien einfach im Berechnungsinstrument abbilden. Die Daten müssen entsprechend der be-

schriebenen Datenblätter vorliegen, so dass sie vom Berechnungsinstrument interpretiert und intern weiterverarbeitet werden können.

Die einzelnen Programme und deren typischen Ausgabeformate sowie Anwendungsbeispiele werden in Kap. 3.3.1 behandelt.

Durch die Trennung externer Simulation und interner Nachverarbeitung bleibt das Berechnungsinstrument flexibel, transparent und unabhängig. Dies erleichtert nicht nur die Wartung und Weiterentwicklung, sondern ermöglicht auch die Verwendung neuartiger oder institutsinterner Simulationssoftware, solange deren Ergebnisse im passenden Format bereitgestellt werden.

Insgesamt ermöglicht die Schnittstellenarchitektur (über die Datenblattstruktur) eine effiziente Nutzung vorhandener Daten und leistet damit einen wesentlichen Beitrag zur transparenten Bewertung verschiedener Szenarien.

3.1.3.5 Einordnung des generischen Baukastens

Das Baukastensystem basiert auf der Idee, die Freigabemodelle in Form einzelner, kombinierbarer Bausteine (Szenarien) abzubilden. Jeder dieser Bausteine enthält spezifische Informationen zu Expositionspfaden, Berechnungsalgorithmen und zugrundeliegenden Annahmen. Die modulare Struktur ermöglicht es, neue Freigabeszenarien auf einfache Weise durch Neukombination vorhandener Module zu erstellen oder bestehende Szenarien durch gezielte Anpassungen weiterzuentwickeln.

Die zentralen Vorteile dieses Baukastensystems lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- **Hohe Flexibilität:** Durch die modulare Struktur können neue oder veränderte Szenarien effizient aus bestehenden Elementen zusammengesetzt werden. Eine vollständige Neuentwicklung von Szenarien ist in der Regel nicht erforderlich, was den Anpassungsaufwand erheblich reduziert.
- **Erhöhte Transparenz und Nachvollziehbarkeit:** Die standardisierte Strukturierung und sorgfältige Dokumentation der einzelnen Bausteine führt zu einer erhöhten Verständlichkeit der Modelllogik. Dies erleichtert nicht nur die interne Nachverfolgung, sondern auch die Kommunikation mit externen Fachstellen und Aufsichtsbehörden.
- **Zukunftsfähigkeit und Anpassungsfähigkeit:** Das System wurde so gestaltet, dass es zukünftige Entwicklungen – etwa neue wissenschaftliche Erkenntnisse oder geän-

derte gesetzliche Rahmenbedingungen – aufnehmen kann. Änderungen lassen sich durch das Ergänzen, Ersetzen oder Anpassen einzelner Bausteine unkompliziert umsetzen und, im Vergleich zu den bisherigen Ergebnissen, deren Auswirkungen analysieren.

- Optimierte Effizienz in der Modellierung und Berechnung: Die Reduktion der Modellvielfalt und die Vereinheitlichung der Expositionspfade führen zu einer deutlich verringerten Komplexität in der praktischen Anwendung. Dies trägt zu einer Beschleunigung der Rechenprozesse bei und reduziert den Ressourcenbedarf sowohl in der Modellierung als auch im laufenden Betrieb.
- Erweiterbarkeit für zukünftige Anwendungsbereiche: Da das System nicht auf einen spezifischen Anwendungsfall beschränkt ist, kann es zukünftig auch für andere Kontexte der Freigabebewertung genutzt oder erweitert werden. Die Generalisierung erlaubt eine Übertragbarkeit auf verwandte Fragestellungen innerhalb des Strahlenschutzes.
- Konformität des generischen Baukastens mit den Anforderungen bzw. Empfehlungen der IAEA-Empfehlung GSG-18 „Application of the Concept of Clearance“ /IAEA 23b/ (siehe Tab. 3.6)

Das im Rahmen von Arbeitspaket 1 entwickelte generische Konzept stellt somit nicht nur eine methodische Innovation im Einklang mit der IAEA-GSG-18 Empfehlung dar, sondern bildet auch die fundamentale Grundlage für die im Arbeitspaket 2 vorgesehene rechen-technische Implementierung. In diesem nächsten Schritt wird das Baukastensystem in ein softwaregestütztes Berechnungsinstrument überführt, dass die automatisierte Auswahl, Kombination und Berechnung der definierten Szenarien ermöglicht.

Tab. 3.6 Überblick über die gem. GSG-18 empfohlenen zu berücksichtigenden Punkte bei der spezifischen Szenarienbildung im Vergleich zu dem generischen Ansatz des im Eigenforschungsvorhaben beschriebenen Berechnungsinstrument

GSG -18 Abschnitt	Thema	Kernaussage	GSG-18 Konformität des Berechnungsmodells
Spezifische Freigabe - Allgemein 7.1 bis 7.7			
7.1	Grundlage der spezifischen Freigabe	Die spezifische Freigabe basiert auf denselben Dosisgrenzwerten und Kriterien wie die generische Freigabe	Wird entsprechend des Regelwerks eingehalten. Auch die durch das Berechnungsinstrument ermittelten Freigabewerte gewährleisten bei entsprechender Anwendung die Einhaltung des Dosiskriteriums.
7.2	Limitierungen des generischen Modells	Generische Modelle sind konservativ. Spezifische Modelle bei abweichenden Szenarien erforderlich	Das Berechnungsinstrument ermöglicht insbesondere durch seine flexible Datenabfrage (Dateninput), als auch durch die flexible Zusammenstellung möglicher Szenarien Konservativitäten (wenn möglich) zu reduzieren.
7.3	Ausschluss irrelevanter Szenarien	Nicht relevante generische Szenarien können ausgeschlossen werden.	Wird durch das Berechnungsinstrument individuell ermöglicht.
7.4	Einzubeziehende Expositionspfade	Gleich wie im generischen Modell: externe Bestrahlung, Inhalation, Ingestion, Hautkontamination	Sämtliche Expositionspfade können im Berechnungsmodell entsprechend den gewählten Szenarien berücksichtigt werden.
7.5	Berücksichtigung nationaler Gegebenheiten	Industrielle, regulatorische, klimatische Besonderheiten können einfließen.	Entsprechende Anpassung sind über die Datenblätter individuell möglich.
7.6	Entscheidung durch Aufsichtsbehörde	Freigabe auch bei Überschreiten generischer Werte möglich	Wird nicht unmittelbar durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.7	Internationale Aspekte	Exportproblematik bei weniger restriktiven spezifischen Werten	Wird nicht unmittelbar durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.

GSG -18 Abschnitt	Thema	Kernaussage	GSG-18 Konformität des Berechnungsmodells
Spezifische Freigabe als zusätzliche Option zur Materialbewirtschaftung (7.8 bis 7.9)			
7.8	Rolle in der Abfallhierarchie	Fördert Wiederverwendung, reduziert radioaktiven Abfall	Durch entsprechend spezifizierbarer und vor allem transparenter Berechnungswerte, könnte das Berechnungsinstrument dazu beitragen radioaktive Abfallströme zu reduzieren und ggf. eine Wiederverwertung (wo möglich) zu fördern.
7.9	Schutzmaßnahmen am Zielort	Erforderliche Schutzmaßnahmen ohne behördliche Überwachung notwendig	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
Ableitung und Anwendung spezifischer Freigabewert (7.10 bis 7.14)			
7.10	Einheiten für Freigabewerte	z. B. Aktivitätskonzentration, Oberflächenkontamination, Gesamtaktivität	Kann im Berechnungsmodell berücksichtigt werden.
7.11	Annahmen für Handhabung	Behandlung wie nicht-radioaktives Material – ohne Sondermaßnahmen	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.12	Vermeidung zusätzlicher Genehmigungen	Grenzwerte unterhalb der Freistellungs-grenze halten	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.13	Mengenbegrenzung	z. B. Transportanzahl oder Gesamtmasse pro Jahr	Kann im Berechnungsmodell berücksichtigt werden.
7.14	Berücksichtigung von Nebenprodukten	Staub und Schlacke bei Metallschmelzen beachten	Kann im Berechnungsmodell berücksichtigt werden.
Oberflächenkontamination bei spezifischer Freigabe (7.15 bis 7.22)			
7.15	Oberflächengrenzwerte – Anwendungen	z. B. Metall zum Einschmelzen, Gebäude zur Wiederverwendung	Kann im Berechnungsmodell berücksichtigt werden.
7.16	Zweck der Grenzwerte	Schutz bei Handhabung, Nutzung oder Umbau	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.

GSG -18 Abschnitt	Thema	Kernaussage	GSG-18 Konformität des Berechnungsmodells
7.17	Anwendbarkeit	Nur auf messbare Oberflächen – nicht für Boden, Bauschutt	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.18	Tiefe der Kontamination	Oberfläche und direkt darunterliegende Schicht berücksichtigen	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.19	Abgrenzung zu Transportgrenzwerten	SSR-6 Grenzwerte gelten nicht für Freigabe.	Die Freigabewerte können entsprechend des Regelwerks berechnet werden.
7.20	Einzubeziehende Pfade bei Oberflächen	Externe Bestrahlung, Inhalation, Ingestion, Haut	Entsprechende Expositionspfade können im Berechnungsinstrument berücksichtigt werden.
7.21	Dosisgrenzwerte	50 mSv/a für Haut in seltenen Szenarien	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.22	Einschränkungen	Nicht anwendbar bei aktivierten Materialien	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
Einhalten der Bedingungen bei spezifischer Freigabe (7.23 – 7.29)			
7.23	Bedingungserfüllung	Freigegebenes Material muss wie vorgesehen verwendet werden.	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.24	Vertragliche Absicherung	Zwischen Ursprungs- und Zielbetreiber vereinbaren	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.25	Zweistufiger Freigabeprozess	1. Freigabe; 2. Nachweis der Bedingungserfüllung	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.26	Besonderheit Altmetall	Direkte Lieferung zur Schmelze notwendig	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.27	Besonderheit Deponie	Kapazität, Auslaugverhalten, Nachsorgezeitraum berücksichtigen	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.

GSG -18 Abschnitt	Thema	Kernaussage	GSG-18 Konformität des Berechnungsmodells
7.28	Unterschied zu generischer Freigabe	Vollständigkeit erst bei Zielerreichung (z. B. Schmelze)	Wird nicht unmittelbar (positiv/negativ) durch das Berechnungsinstrument beeinflusst.
7.29	Transportaspekt	Transport und Zielanlage müssen im Modell berücksichtigt werden	Alle wesentlichen Szenarien können im Modell berücksichtigt und angepasst werden.

3.2 Umsetzung/Aufbau des Berechnungsinstrument

3.2.1 Entwicklung des Python-Programms

Die Entwicklung des vorliegenden Python-Programms im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhaben wurde durch regelmäßige Treffen zwischen den Programmentwicklern sowie der fachlichen Projektmitarbeitern begleitet, bei denen grundlegende Anforderungen, Ziele und Rahmenbedingungen abgestimmt wurden. In diesen Gesprächen wurde festgelegt, welche Funktionalitäten das Programm abdecken soll, welche Schnittstellen zu berücksichtigen sind und wie die Dokumentation sowie die Nachvollziehbarkeit sichergestellt werden können. Von Beginn an spielten dabei eine saubere Implementierung sowie Themen wie Transparenz, Versionierung und einheitliche Dokumentationsstandards eine zentrale Rolle.

Die Konzeption wurde so angelegt, dass die Software modular aufgebaut ist und mit etablierten Python-Bibliotheken arbeitet. Darüber hinaus wurden Vorgaben für automatisierte Tests, den Umgang mit Rundungsregeln und die Einheitenumrechnung mit Hilfe des Pakets `pint` /GRE 25/ in den Entwicklungsprozess integriert.

3.2.1.1 Programmstruktur

Das Programm wurde in Python umgesetzt, einer Programmiersprache, die sich durch eine klare Syntax, eine vielseitige Standardbibliothek sowie die flexible Erweiterbarkeit durch externe Module auszeichnet. Die modulare Architektur ermöglicht es, funktionale Einheiten logisch in Modulen und Klassen zu organisieren. Ein Modul umfasst dabei entweder eine einzelne Datei oder einen Ordner mit mehreren Dateien, die sowohl aus der Standardbibliothek als auch aus externen oder selbstentwickelten Quellen stammen können. Innerhalb eines Moduls lassen sich mehrere Klassen und Funktionen definieren. Zudem besteht die Möglichkeit, ganze Module oder gezielt einzelne Klassen und Funktionen zu importieren, um deren Funktionalität wiederzuverwenden.

Das git-Repository des Programmcodes hat als oberste Organisation die folgenden Unterverzeichnisse:

- `data`-Unterverzeichnis, in dem alle Datenblätter (siehe Beispiele in Anhang. A.1) abgelegt sind

- `doc`-Unterverzeichnis, in dem die Quelldateien der Programmdokumentation abgelegt sind
- `jupyter`-Unterverzeichnis, in dem die Beispiel Jupyter Notebooks abgelegt sind
- `options`-Modul für den Programmcode
- `tests`-Modul für alle Tests des Programmcodes

Diese klare Trennung ermöglicht eine flexible Weiterentwicklung, einfaches Debugging sowie die Wiederverwendbarkeit einzelner Komponenten.

3.2.1.2 Python-Laufzeitumgebung

Eine Python-Laufzeitumgebung bezeichnet die Gesamtheit der Softwarekomponenten und Konfigurationen, die erforderlich sind, um Python-Code auszuführen. Sie umfasst typischerweise den Python-Interpreter, installierte Bibliotheken sowie Umgebungsvariablen und Paketverwaltungswerkzeuge. Laufzeitumgebungen ermöglichen die isolierte Ausführung von Programmen, wodurch Versionskonflikte zwischen verschiedenen Projekten vermieden und reproduzierbare Entwicklungsbedingungen geschaffen werden können. In der Praxis lassen sich unterschiedliche Laufzeitumgebungen nutzen, je nach Anforderungen an Modularität, Portabilität und Kompatibilität. Ein verbreitetes Beispiel ist die Standardumgebung von Python, die durch die Installation des offiziellen Python-Distributionspakets bereitgestellt wird und grundlegende Funktionalitäten sowie die Standardbibliothek enthält. Eine weiterentwickelte Alternative stellt die Conda-Umgebung /ANA 25/ dar, die insbesondere im wissenschaftlichen und datenanalytischen Kontext Anwendung findet. Conda erlaubt die Verwaltung von Abhängigkeiten und Umgebungen über ein eigenes Paketmanagementsystem und unterstützt neben Python auch andere Programmiersprachen. Durch die Nutzung solcher Umgebungen wird die Entwicklung robuster, skalierbarer und besser wartbarer Softwarelösungen gefördert.

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die Nutzenden eine entsprechende Laufzeitumgebung auf dem Rechner installiert haben.

3.2.1.3 Verwendete Python-Module

Für die Entwicklung des Berechnungsinstruments wurde auf etablierte Open-Source-Pakete zurückgegriffen. Die in Tab. 3.7 genannten Pakete sowie die aktuell verwendeten Versionsnummern sind in der `pyproject.toml` Datei im Quellcode dokumentiert.

Alle Abhängigkeiten sowie das Programm können mit dem folgenden Befehl in der Standard- und Conda-Laufzeitumgebung installiert werden:

```
pip install -e .
```

Um die Abhängigkeiten für die Dokumentation (`pages`), Jupyter Notebooks (`jupyter`) und dem Testen (`test`) zu installieren, können die folgenden Befehle unter Windows verwendet werden:

```
pip install -e .[test]
pip install -e .[pages]
pip install -e .[jupyter]
```

Tab. 3.7 Für die Ausführung des Berechnungsinstruments nötige Python-Module

Name	Beschreibung	Benötigt für/bei
pint	Paket zur Umrechnung von Einheiten	Laufzeit des Programms
pandas	Paket zur Datenanalyse	Laufzeit des Programms
numpy	Paket für wissenschaftliches Rechnen	Laufzeit des Programms
pytest	Testumgebung für Python	Durchführung von Test
pytest-cov	Codeabdeckung für pytest	Durchführung von Tests
sphinx	Dokumentation des Quellcode	Quellcodedokumentation
pydata-sphinx-theme	Darstellung der Dokumentation	Quellcodedokumentation
myst-parser	Parser für Markdown in sphinx	Quellcodedokumentation
sphinx-autoapi	Automatische Dokumentation von Python-Modulen	Quellcodedokumentation
notebook	Bereitstellung von Jupyter Notebooks	Jupyter Notebooks
jupyterlab-git	Einbindung von git unter Jupyter Notebooks	Jupyter Notebooks

3.2.1.4 Jupyter Book

Jupyter Notebooks /JUP 25/ stellen ein leistungsfähiges Werkzeug für die Entwicklung und Dokumentation von Softwareprojekten dar. Sie ermöglichen es, Programmcode in kleinen, ausführbaren Zellen zu organisieren und direkt mit erläuterndem Text, mathematischen Formeln (mittels LaTeX-Integration) und Grafiken zu kombinieren. Dadurch wird ein iteratives und exploratives Arbeiten gefördert, da Ergebnisse unmittelbar nach Ausführung des Codes sichtbar werden. Insbesondere im wissenschaftlichen Kontext bieten Jupyter Notebooks den Vorteil, komplexe Berechnungen, Datenanalysen und Visualisierungen transparent und nachvollziehbar zu dokumentieren. Diese Eigenschaften machen sie zu einem zentralen Bestandteil moderner, reproduzierbarer Forschung und Lehre.

Im git-Repository des Programmcodes sind Beispiel Jupyter Notebooks enthalten, die die Verwendung des Berechnungsinstruments zeigen.

3.2.1.5 Versionsverwaltung mit GitLab

Der Quellcode des Berechnungsinstruments wird in einem git-Repository auf Basis von GitLab verwaltet. GitLab erweitert die Funktionalitäten von git und dient als zentrales Werkzeug für:

- Versionskontrolle: Jede Änderung wird nachvollziehbar gespeichert.
- Branching-Strategien: Ermöglichen parallele Entwicklung (z. B. Feature-Branches).
- Merge Requests: Sicherstellen, dass Änderungen überprüft und abgestimmt werden.
- Automatisierte Tests: Durchführen von automatisierten Tests nach jedem neuen push von Code auf den GitLab-Server.
- Automatisierte Erstellung der online Dokumentation: Nach jeder Veränderung des Quellcodes (z. B. durch einen push oder merge) im `main`-Branch wird die Online-Dokumentation automatisch erstellt.
- Releases: Durch eine automatisierte Erstellung von Releases ist es möglich, immer die gleichen Inhalte zur Verfügung zu stellen. Diese werden durch das GitLab zusammengestellt.

Durch die Versionierung ist die Nachvollziehbarkeit jeder einzelnen Änderung gegeben, was insbesondere in Projekten mit mehreren Beteiligten unverzichtbar ist.

3.2.1.6 Quellcodedokumentation

Die Dokumentation des Quellcodes erfolgt hauptsächlich über die Verwendung von Docstrings /GOO 01/ in der Numpy variante /NUM 25/. Als Beispiel ist im Folgenden die Dokumentation für eine Funktion `calculate` wiedergegeben:

```
def calculate(self, radionuclide: str, result_convert : bool = True) ->
str | float | int | pint.Quantity:
    """Calculate the current path for a given radionuclide

    Parameters
    -----
    radionuclide: str
        Name of radionuclide the calculation is made
    result_convert : bool = True
        If set to True, the result will be converted to the unit
        given in :py:class:`~GenericPath.resulting_units`

    """
```

Die Ausgabe für die Online-Dokumentation ist in Abb. 3.5 dargestellt.

calculate(*radionuclide*, *result_convert=True*)

Calculate the current path for a given radionuclide

Parameters:

radionuclide: str
Name of radionuclide the calculation is made

result_convert : bool = True
If set to True, the result will be converted to the unit given in [resulting_units](#)

Return type:
str | float | int | pint.Quantity

Abb. 3.5 Beispielhafte Ausgabe der Dokumentation für die Funktion `calculate` im Module `options.paths.generic_path`

Neben der Dokumentation des Quellcodes sind im `doc`-Verzeichnis noch weitere Dateien enthalten, die ebenfalls zur Online-Dokumentation verwendet werden. Bei Änderungen im `main`-Branch des git-Repository wird automatisiert eine neue Dokumentation erstellt. Außerdem wird diese in ein Release mit aufgenommen.

3.2.1.7 Bezug zur GRS-internen Softwareentwicklungsrichtlinie

Die Entwicklung am vorliegenden Programmcode wurde in Einstimmung mit der GRS-internen Softwareentwicklungsrichtlinie als sogenanntes Software-Entwicklungs-Projekt (SWEP) eingestuft. Dadurch sollen Standards eingehalten werden, in denen die GRS nach ISO 9001 und ISO 21001 zertifiziert ist. Ein SWEP besteht aus sämtlichen Arbeiten im Lebenszyklus des Berechnungsinstruments, also insbesondere Design, Entwicklung, Verifizierung und Validierung sowie Berücksichtigung von Erfahrungen der Nutzer, Wartung und Pflege. Wobei letztere Punkte durch die Neuentwicklung des Berechnungsinstruments nicht durchgeführt werden konnte.

Ein SWEP wird von einem SWEP-Verantwortlichen bereichs- und standortübergreifend geleitet. Im aktuellen Projekt war dies Dr. Holger Seher. Außerdem wurde ein GRS-interner QS-Plan erstellt, der die Umsetzung der Qualitätssicherungsmaßnahmen, die Abhängigkeiten von Software Dritter (siehe Tab. 3.7) darstellt und die Einteilung in die Kategorisierung des SWEP nach dem Anwendungsgebiet beschreibt. Hier wurde die Kategorie B gewählt, da die aktuelle Version des Programmcodes für die Berechnungen in einem Forschungs- und Entwicklungsprojekt erstellt wurde. Sollte der Code perspektivisch für Nachweise in Aufsichts- und Genehmigungsverfahren, Gutachten oder Stellungnahmen verwendet werden, würde die Kategorie auf A wechseln. Hieraus würden sich weitere Qualitätssicherungsmaßnahmen ergeben. Ein Beispiel ist, dass Softwareentwickler und Tester der Software personell getrennt sein müssen.

Dieses Projekt wurde im Sinne von SWEP umgesetzt, insbesondere durch

- die Verwendung von GitLab zur Versionierung des Quellcodes und
- die Durchführung von automatisierten Tests.

3.2.1.8 Transparenz

Ein zentrales Entwicklungsziel war Transparenz in der Softwareentwicklung sowie bei der Nutzung des Berechnungsinstruments. Das bedeutet:

- Alle Annahmen und Rechenschritte sind nachvollziehbar.
- Der Quellcode ist so kommentiert, dass er auch von Dritten verstanden werden kann.
- Ergebnisse werden dokumentiert und können durch interne Tests überprüft werden.

Dies fördert nicht nur die interne Qualitätssicherung, sondern auch das Vertrauen in die Rechenergebnisse.

3.2.1.9 Einheitenumrechnung mit `pint`

Eine Herausforderung bei der Entwicklung des Berechnungsinstruments war die konsistente Behandlung von physikalischen Einheiten. Gerade bei der Eingabe und fest einprogrammierten Umrechnungen von Einheiten können gravierende Fehler passieren, die zu fehlerhaften oder falschen Ergebnissen führen. Um diese Herausforderung anzugehen, wurde entschieden, mit dem Python-Modul `pint` /GRE 25/ zu arbeiten. Dieses Modul ermöglicht die Definition und Umrechnung verschiedenster Einheiten basiert auf einem sog. Einheitenregister (`UnitRegistry`). Sollten Einheiten nicht vorhanden sein, können diese dem Register leicht hinzugefügt werden. Bei der Verwendung eines Einheitenregisters muss darauf geachtet werden, dass immer das gleiche Register verwendet wird. Sonst gibt es eine `pint`-interne Fehlermeldung. Um dieses Problem zu umgehen, wird ein einheitliches Register für alle Klassen im Berechnungsinstrument verwendet.

Es wurde konsequent darauf geachtet, dass die Einheiten vom Einlesen aus den CSV-Dateien, über die Nutzereingabe bis zum Ergebnis verwendet werden.

3.2.1.10 Durchführung von Tests

Im Rahmen der durchgeführten Softwaretests kommt das Python-Modul `pytest` (siehe Tab. 3.7) zum Einsatz. Es dient der systematischen und automatisierten Ausführung von Testfällen, die zur Qualitätssicherung und Funktionsüberprüfung der entwickelten Komponenten beitragen. `Pytest` ermöglicht eine übersichtliche Strukturierung der Tests sowie die Wiederverwendung von Testdaten durch sog. `Fixtures`. Darüber hinaus unterstützt das Framework die Parametrisierung von Tests und liefert aussagekräftige Fehlermeldungen, die eine effiziente Analyse und Behebung von Problemen erleichtern. Durch den Einsatz von `pytest` wird die Nachvollziehbarkeit und Reproduzierbarkeit der Testergebnisse sichergestellt. Um sicher zu gehen, dass die meisten Zeilen des Quellcodes durch die Tests abgedeckt sind, wird die `pytest`-Erweiterung `pytest-cov` verwendet.

Die Testfälle können auf der lokalen Entwicklungsumgebung laufen gelassen werden. Zusätzlich werden sie nach Änderungen am Quellcode automatisiert auf dem GitLab-

Server ausgeführt. Im Falle von Fehlern in den Testfällen werden die Entwickler automatisch per E-Mail darüber informiert.

Während des Testlaufs gibt das `pytest`-Modul Informationen zu den einzelnen Tests aus:

```
collected 182 items

tests\test_data.py ..... [ 3%]
tests\test_helper_func_import.py ... [ 5%]
tests\test_helper_func_unit.py ..... [ 8%]
tests\test_option_calculate.py ... [ 10%]
tests\test_options_create.py ... [ 11%]
tests\test_options_predefined.py ..... [ 19%]
tests\test_path_functionalities.py
..... [ 44%]
tests\test_paths_in_scenarios.py ..... [ 50%]
tests\test_paths_predefined.py ..... [ 60%]
tests\test_scenarios.py ..... [ 68%]
tests\test_scenarios_calculate.py ..... [ 75%]
tests\test_scenarios_in_options.py ..... [ 80%]
tests\test_scenarios_predefined.py ..... [ 88%]
tests\test_utils_round.py ..... [100%]
===== 182 passed =====
```

Sollten Fehler auftreten werden diese in der obigen Textausgabe rot markiert, die weiteren Tests durchlaufen und nach dem Ende des Testlaufs wird eine Fehlermeldung ausgegeben:

```
tests\test_data.py ..... [ 3%]
tests\test_helper_func_import.py ..F [ 5%]
tests\test_helper_func_unit.py ..... [ 8%]
...
===== 1 failed, 181 passed =====
```

Das `pytest-cov`-Modul berechnet die durchlaufenen Codezeilen basierend auf den Aufrufen (engl.: `statements`, Abgekürzt: `Stmts`) und der fehlenden Aufrufe (`Miss`):

Name	Stmts	Miss	Cover
options/__init__.py	6	0	100%
options/data.py	97	9	91%
options/generic.py	196	0	100%
options/paths/__init__.py	17	0	100%
options/paths/exposition.py	25	0	100%
options/paths/external_radiation.py	11	0	100%
options/paths/generic_path.py	189	0	100%
options/paths/ingestion.py	172	0	100%
options/paths/inhalation.py	32	0	100%
options/predefined.py	126	0	100%
options/scenarios/__init__.py	162	0	100%
options/scenarios/generic_scenario.py	206	0	100%
options/utils.py	92	0	100%

TOTAL	1331	9	99%
-------	------	---	-----

Allerdings ist bei den Tests zu beachten, dass nicht nur auf die Codeabdeckung geachtet wird, sondern z. B. auch Extremwerte, Programm Abbrüche und Fehlermeldungen getestet werden. Dies wurde in der Erstellung der Testfälle berücksichtigt.

3.2.1.11 Rundung von Werten

Die Rechnungen im Berechnungssystem erfolgen mit den Genauigkeiten der Gleitkommazahlen von `Python`. Diese werden in einem `pandas.DataFrame` gespeichert. Am Ende der Berechnungen können die Ergebnisse mit einer eigenen Funktion `options.utils.round_log` gerundet werden. Die Funktionalität beruht auf den Vorgaben der IAEA SR 44 /IAEA 05/, wobei zwischen logarithmischer und dekadischer Rundung unterschieden wird. Dies ist notwendig, da unterschiedliche Rundungsstrategien gefordert sein könnten.

Eine positive logarithmische Zahl wird auf Basis einer logarithmischen Skala mit benutzerdefinierten Schwellenwerten gerundet. Liegt der Eingabewert zwischen $3 \cdot 10^x$ und $3 \cdot 10^{x+1}$, wird er auf 10^{x+1} aufgerundet. Andernfalls erfolgt die Rundung auf die nächstgelegene Zehnerpotenz entsprechend seiner Größenordnung.

3.2.2 Dokumentation des Berechnungsinstrumentes

In der Dokumentation in diesem Kapitel wird davon ausgegangen, dass auf dem Windows-Rechner der Benutzer eine `Python`-Laufzeitumgebung wie sie in Kap. 3.2.1.2 beschrieben ist, vorhanden ist.

Für eine ausführlichere Beschreibung des Programmcodes wird auf die Online-Dokumentation verwiesen.

3.2.2.1 Installation der Abhängigkeiten

Um die für die Ausführung notwendigen `Python`-Module zu installieren, kann im untersten Verzeichnis des Programmcodes der Befehl

```
pip install -e .
```

genutzt werden. Die Abhängigkeiten werden aus der `pyproject.toml`-Datei ausgelesen und installiert.

Das Beispiel, auf dem diese Beschreibung aufsetzt, basiert auf einem Jupyter Notebook (siehe Kap. 3.2.1.4) welches im `jupyter`-Verzeichnis unter `examples` abgelegt ist. Um auf der `Python`-Laufzeitumgebung die Jupyter Notebooks zur Verfügung zu stellen, müssen zusätzlich noch die entsprechenden Abhängigkeiten mit dem Befehl

```
pip install -e [jupyter]
```

installiert werden. Nach der Installation kann über den Befehl

```
jupyter lab
```

die Oberfläche der Jupyter Notobooks gestartet werden. Hierzu sollte sich ein Browser Fenster mit der Oberfläche öffnen. Empfehlenswert ist, den obigen Befehl im `jupyter`-Verzeichnis auszuführen, da dieses Verzeichnis als unterstes Verzeichnis in der Web-oberfläche des `jupyter lab` angezeigt wird.

3.2.2.2 Verwenden vordefinierter Freigabeoptionen

Im Berechnungsinstrument gibt es verschiedene vordefinierte Freigabeoptionen. Diese sind in Tab. 3.8 angegeben. Als Beispiel für die Verwendung der `Python`-Klassen wird im Weiteren auf die `SubstanceCombustion` eingegangen, da diese Freigabeoption auch im Kap. 3.3.3 für die Darstellung der Berechnung der Freigabewerte verwendet wird.

Tab. 3.8 Vordefinierte Freigabeoptionen

Name	Name der Pythonklasse
Bauschutt	DemolitionWaste
Bodenflächen	SoilAreas
Metallschrott zum Recycling	MetalDebrisRecycling
Gebäude, Räume, Raumteile und Bauteile zur Wieder- und Weiterverwendung	BuildingFurtherUse
Gebäude, Räume, Raumteile und Bauteile zum Abriss	BuildingForDemolition
Festen Stoffen zur Beseitigung auf Deponien	SolidsLandfill
Stoffe zur Beseitigung in Verbrennungsanlagen	SubstanceCombustion

Der im Folgenden dargestellte Code ist im `example`-Verzeichnis als lauffähiges Jupyter Notebook mit dem Dateinamen `use_predefined.ipynb` vorhanden:

```
from options.predefined import SubstanceCombustion
sc = SubstanceCombustion(verbose=False)
sc.radionuclides = ['Ag-108m+', 'Ba-133', 'C-14', 'Cl-36', 'Co-60', 'Cs-137+', 'H-3', 'I-129', 'Mn-54', 'Ni-59', 'Pu-238', 'Pu-239+', 'Sr-90+', 'Tc-99', 'U-238+']
sc.print_scenarios_paths()
calc = sc.calculate()
```

Erklärung der einzelnen Aufrufe

Zu Beginn des Skriptes wird die benötigte Klasse aus dem Python-Modul geladen:

```
from options.predefined import SubstanceCombustion
```

Im Anschluss daran wird die Klasse initialisiert und in der Variable `sc` gespeichert:

```
sc = SubstanceCombustion(verbose=False)
```

An dieser Stelle gibt es mehrere mögliche Einstellungen für den Nutzenden. Für den Klassenaufruf kann ein Parameter `verbose` gesetzt werden. Mit der Angabe `verbose=True` werden Informationen zum Programmablauf ausgegeben. Mit `verbose=False` werden nur Warnungen ausgegeben. Als Default-Wert wird `verbose=False` gesetzt.

Nachdem die Klasse initiiert ist, können die gewünschten Radionuklide definiert werden. Ohne die Angabe von Radionukliden bricht eine Rechnung ab:

```
sc.radionuclides = ['Ag-108m+', 'Ba-133', 'C-14', ..., 'Tc-99', 'U-238+']
```

Im obigen Beispiel werden die gewünschten Radionuklide über eine Liste von Strings direkt eingegeben.

Eine Liste aller eingelesener Radionuklide kann über den Befehl

```
print(sc.default_data.unique_radionuclides)
```

abgefragt werden. Die eingelesenen Daten werden im Attribut `default_data` gespeichert. Die o. g. Funktion `unique_radionuclides` liest die Radionuklide aus dem `DataFrame default_data.data` aus.

Die Szenarien und Pfade für die aktuelle Freigabeoption können angezeigt werden:

```
sc.print_scenarios_paths()
```

Die Ausgabe für diesen Aufruf sieht wie folgt aus und beinhaltet den Namen des Szenarios, die in diesem Szenario verwendeten exponierten Personen sowie die Namen der Pfade. Die Ausgabe kann mit den Angaben in Tab. 3.27 verglichen werden, wo die Szenarien und Pfade für die Freigabeoption `SubstanceCombustion` angegeben sind.

```
transport
- exposed persons: worker
- paths:
  - ExternalRadiation
entranceWIP
- exposed persons: worker
- paths:
  - ExternalRadiation
  - Inhalation
...
- exposed persons: resident
- paths:
  - SpecialL2
ingestionExternal
- exposed persons: resident
- paths:
  - SpecialL3
```

Nachdem die Angaben zu den Radionukliden gemacht wurden, kann die Rechnung gestartet werden:

```
calc = sc.calculate()
```

Die Ergebnisse werden in die Variable `calc` zurückgegeben. Diese ist eine Klasse des Typen `Results` und beinhaltet vier `DataFrames`:

- `results: DataFrame` mit den Ergebnissen der Rechnungen in den Spalten `nuclides`, `scenario`, `path` und `results`. Die Spalten sind sortiert nach Nuklid Mas-sezahl, Szenario und Pfadname.

- `totals`: `DataFrame` mit den aufsummierten Werten aller Pfade eines Szenarios. Es stehen die Spalten `nuclide`, `scenario` und `total` zur Verfügung. Sie sind sortiert nach Nuklid Massezahl und Szenario.
- `clearance`: `DataFrame` mit den Berechnungen der Freigabewerte. Hierzu wird das Szenario mit dem höchsten Wert eines Radionuklids ausgewählt (Spalte `total`). Aus dem entsprechenden Wert wird über die Formel
$$10 \mu\text{Sv/a} \cdot \text{Max} \cdot 1 \text{ Bq/g}$$
in den Freigabewert umgerechnet (Spalte `clearance`). Der Freigabewert wird nach den in Kap. 3.2.1.11 angegebenen Prinzipien gerundet (Spalte `rounded`).
- `input`: `DataFrame` mit den Eingabewerten der Rechnungen ausgelesen aus `sc.data` und `sc.default_data.data`.

Weitere Eingabemöglichkeiten

Im Folgenden Beispiel wird der obige Code um die Eingabe der in Tab. 3.29 gezeigten spezifischen Annahmen zur Berechnung der Freigabewerte erweitert. Das vollständige Skript ist in einem Jupyter Notebook mit dem Dateinamen `report_option_combustion.ipynb` abgelegt.

```

////////////////////////////////////
from options.predefined import SubstanceCombustion
sc = SubstanceCombustion(verbose=False)
ur = sc.unit_registry
sc.radionuclides = ['Ag-108m+', 'Ba-133', 'C-14', 'Cl-36', 'Co-60', 'Cs-137+', 'H-3', 'I-129', 'Mn-54', 'Ni-59', 'Pu-238', 'Pu-239+', 'Sr-90+', 'Tc-99', 'U-238+']
sc.path_variables(scenario="transport", path="ExternalRadiation",
    variables={
        "dext": "A",
        "te": 30 * ur.hour / ur.year,
        "t1": 1 * ur.day,
        "t2": 1 * ur.day
    }
)
sc.path_variables(scenario="entranceWIP", path="ExternalRadiation",
    variables={
        "dext": "B",
        "te": 3 * ur.hour / ur.year,
        "t1": 1 * ur.day,
        "t2": 1 * ur.day
    }
)
...

calc = sc.calculate()
////////////////////////////////////

```

In diesem Beispiel wird zur Eingabe von Variablen für die Berechnung der Pfade die Funktion `path_variables` genutzt. Um den gleichen `UnitRegistry` für die Eingabe der Einheiten der Variablen zu verwenden, wird mit dem `pint.UnitRegistry`, der in `sc.unit_registry` verfügbar ist, gearbeitet. Würde dies nicht geschehen, würde `pint` eine Fehlermeldung ausgeben.

Tab. 3.9 Parameter für den Aufruf der Funktion `GenericOption.path_variables`

Eine ausführliche Beschreibung der Attribute ist in der Online-Dokumentation gegeben.

Parameter	Typ	Default	Beschreibung
scenario	str		Id des Szenarios, in dem der Pfad vorhanden ist
path	str		Id des Pfads, für den die Variablen gesetzt werden soll
variables	dict		Variablen zeigen den angegebenen Pfad als Key:Value Paare in einem dict. Es müssen hier nicht alle Variablen der Pfade angegeben werden. Standardmäßig werden die Variablen aus den eingelesenen Daten zur Berechnung verwendet.

3.2.2.3 Erstellen eigener Freigabeoptionen

Neben der in Kap. 3.2.2.2 beschriebenen Verwendung von vordefinierten Freigabeoptionen können auch beliebige neue Optionen erstellt werden. Das vollständige Skript ist in einem Jupyter Notebook mit dem Dateinamen `create_user_option.ipynb` abgelegt.

```

////////////////////////////////////
from options import create_option
from options.scenarios import create_scenario
from options.paths import create_path
from options.utils import ExposedPersons
user_option = create_option(option_id="my user option", verbose=False)
user_option.radionuclides = ['C-14', 'U-238+', 'Cs-137+']

user_scenario = create_scenario(scenario_id="my user scenario", ver-
bose=user_option.verbose, unit_registry=user_option.unit_registry, ex-
posed_persons=[ExposedPersons.WORKER.name])
user_option.add_scenario(user_scenario)

ur = user_option.unit_registry
user_path = create_path(path_id="my user path", verbose=user_option.ver-
bose, unit_registry=ur)
user_path.expression = "a * dext * fd * c * te * decay(l, t1) * decay2(l,
t2)"
user_path.variables = {
    'a': 1.0 * (1/ur.sec) / ur.gram,
    'dext': 2.0 * (ur.sievert / ur.year) / ((1/ur.sec) / ur.gram),
    'fd': 1.0 * ur.dimensionless,
    'te': 1.0 * ur.hour / ur.year,
    'c': 1.0 * ur.dimensionless,

```

```

        'l': 6.9E-05 / ur.year,
        't1': 100.0 * ur.year,
        't2': 100.0 * ur.year,
    }
    user_path.resulting_units = ur.sievert / ur.year
    user_scenario.add_path(user_path)

    user_option.calculate()

```

Zur Erstellung einer Option, eines Szenarios oder eines Pfades stehen die Funktionen `create_option`, `create_scenario` und `create_path` zur Verfügung. Eine nähere Beschreibung der Parameter dieser Funktionen ist in Tab. 3.14, Tab. 3.15 und Tab. 3.16 dargestellt.

3.2.2.4 Beschreibungen der Klassen und Funktionen

Das folgende Kapitel soll einen kurzen Überblick über die Parameter der im Kap. 3.2.2.3 verwendeten Funktionen geben. Für eine detaillierte Beschreibung wird auf die Online-Dokumentation verwiesen

Vordefinierte Freigabeoptionen

Die in Tab. 3.8 angegebenen Freigabeoptionen erben ihre Funktionalitäten von der Klasse `GenericOption`. Mögliche Parameter beim Funktionsaufruf sind in Tab. 3.10 gegeben.

Tab. 3.10 Parameter für den Aufruf der vordefinierten Freigabeoption in Tab. 3.8

Parameter	Typ	Default	Beschreibung
verbose	bool	False	Bei der Angabe von <code>True</code> wird für diese Freigabeoption eine Ausgabe geschrieben.

Klasse `GenericOption`

Auf dieser Klasse basieren alle vordefinierten Freigabeoptionen. Daher sind die in Tab. 3.12 und Tab. 3.13 genannten Attribute und Funktionen auch in den vordefinierten Freigabeoptionen verfügbar.

Tab. 3.11 Parameter für den Aufruf der Klasse `GenericOption`

Die hier angegebenen Parameter werden bei der Initialisierung der Klasse verwendet

Parameter	Typ	Default	Beschreibung
option_id	str		Gibt die Id der Option an.
verbose	bool	False	Bei der Angabe von <code>True</code> wird für diese Freigabeoption eine Ausgabe geschrieben.

Tab. 3.12 Attribute der Klasse `GenericOption`

Die hier genannten Attribute stehen in der Klasse zur Verfügung. Sie können dazu verwendet werden, Informationen aus der Klasse auszulesen und auch in die Klasse zu schreiben. Eine ausführliche Beschreibung der Attribute ist in der Online-Dokumentation gegeben.

Attribut	Typ	Beschreibung
data	DataFrame	Bei der Initialisierung der Klasse eingelesene Daten aus <code>default_data</code> sowie Daten aus von den Nutzern vorgegebenen CSV-Dateien
default_data	Data	Daten, die bei der Initialisierung der Klasse eingelesen wurden
option_id	str	Id der Freigabeoption
radionuclides	list[str]	Liste aller Radionuklide, die für diese Freigabeoption gerechnet werden sollen
results	List[Results]	Liste der mit dieser Klasse gerechneten Ergebnisse. Für jede Rechnung gibt es einen Eintrag in dieser Liste.
scenarios	list	Liste aller Szenarien dieser Freigabeoption
unit_registry	UnitRegistry	Eintrag mit dem <code>pint.UnitRegistry</code> , mit dem die Einheiten erzeugt wurden (siehe auch Kap. 3.2.1.9)
user_data	Data	Vom Nutzer eingelesenen Daten
verbose	bool	Wenn es auf <code>True</code> gesetzt ist, erfolgt eine Ausgabe für die Freigabeoption.

Tab. 3.13 Funktionen der Klasse `GenericOption`

Eine ausführliche Beschreibung der Funktionen ist in der Online-Dokumentation gegeben.

Funktion	Rückgabe	Beschreibung
<code>add_result(result)</code>	keine	Fügt ein Ergebnis der Rechnungen der Freigabeoption hinzu. Erwartet wird eine Klasse vom Typ <code>Results</code> .
<code>add_scenario(*scenario)</code>	keine	Fügt ein Szenario oder mehrere Szenarien der Freigabeoption hinzu. Erwartet wird als Eingabe eine Klasse vom Typ <code>GenericScenario</code> .
<code>calculate()</code>	keine	Startet die Berechnung der Freigabewerte für die Freigabeoption
<code>get_scenario(scenario_id)</code>	<code>GenericScenario</code>	Gibt das Szenario mit der angegebenen Id zurück
<code>path_variables(scenario, path, variables)</code>	keine	Ermöglicht es, für den angegebenen Pfad eines Szenarios Variablen zur Berechnung anzugeben.
<code>print_scenarios_paths()</code>	keine	Schreibt Informationen zu den Szenarien und Pfaden der Freigabeoption auf die Konsole aus
<code>remove_scenario(scenario_id)</code>	Keine	Löscht das Szenario mit der angegebenen Id aus der Freigabeoption

Verfügbare Funktionen

Im Code-Beispiel in Kap. 3.2.2.3 wurden drei Funktionen genannt, die zur Verfügung stehen, um Optionen, Szenarien und Pfade zu erzeugen. Im Folgenden sind die Parameter für diese Funktionen dargestellt.

Tab. 3.14 Parameter für den Aufruf der Funktion `create_option`

Die Funktion gibt eine Klasse des Typen `GenericOption` zurück.

Parameter	Typ	Default	Beschreibung
<code>option_id</code>	<code>str</code>		Id für diese Freigabeoption
<code>verbose</code>	<code>bool</code>	<code>False</code>	Wenn es auf <code>True</code> gesetzt ist, erfolgt eine Ausgabe für die Freigabeoption.

Tab. 3.15 Parameter für den Aufruf der Funktion `create_scenario`

Die Funktion gibt eine Klasse des Typen `GenericScenario` zurück.

Parameter	Typ	Default	Beschreibung
scenario_id	str		Id für dieses Szenario
unit_registry	UnitRegistry	None	Eintrag mit dem <code>pint.UnitRegistry</code> , das in diesem Szenario verwendet werden soll. Wird keine Angabe gemacht, wird ein neues Register erzeugt.
verbose	bool	False	Wenn es auf <code>True</code> gesetzt ist, erfolgt eine Ausgabe für dieses Szenario.
exposed_persons	list	None	Exponierte Personen für dieses Szenario

Tab. 3.16 Parameter für den Aufruf der Funktion `create_path`

Die Funktion gibt eine Klasse des Typen `GenericPath` zurück.

Parameter	Typ	Default	Beschreibung
path_id	str		Id für diesen Pfad
unit_registry	UnitRegistry	None	Eintrag mit dem <code>pint.UnitRegistry</code> , das in diesem Pfad verwendet werden soll. Wird keine Angabe gemacht, wird ein neues Register erzeugt.
verbose	bool	False	Wenn es auf <code>True</code> gesetzt ist, erfolgt eine Ausgabe für diesen Pfad.
exposed_persons	list	None	Exponierte Personen für diesen Pfad

3.3 Anwendung des Berechnungssystem/Berechnung externe Eingabewerte

3.3.1 Berechnung externer Eingabewerte

3.3.1.1 Externe Gammastrahlung – Schnittstelle Geant4

Im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens wurde ein simulativer Ansatz zur Bestimmung der Dosisleistung in komplexen geometrischen Szenarien verfolgt. Zum Einsatz kam dabei die Monte-Carlo-Simulationsplattform Geant4, ein am CERN entwickelten Open-Source C++-Framework zur Modellierung der Wechselwirkung von Teilchen mit Materie. Geant4 erlaubt die detaillierte Abbildung von physikalischen Prozessen und komplexen Geometrien, findet breite Anwendung in der Hochenergiephysik, Medizinphysik, Raumfahrt und im Strahlenschutz und bietet gegenüber klassischen,

GUI-basierten Point-Kernel-Strahlenschutzprogrammen wie MicroShield entscheidende Vorteile hinsichtlich Flexibilität, Genauigkeit und Anpassbarkeit. Insbesondere die Einschränkung auf Photonen in MicroShield im Vergleich zur Betrachtung sämtlicher Teilchenarten in Geant4, die eventbasierte explizite Simulation aller Wechselwirkungen von Teilchen mit Materie sowie die detaillierte Verfolgung von Sekundärteilchen (z. B. Bremsstrahlung) in komplexen Geometrien ist hierbei für viele Fragestellungen entscheidend.

Die im Eigenforschungsvorhaben entwickelte Schnittstelle dient dazu, Dosiskonversionsfaktoren der externen Gammastrahlung für spezifische Anwendungsszenarien nutzbar zu machen. Dies ermöglicht eine effiziente und präzise Dosisleistungsberechnung in Situationen, in denen standardisierte Softwarelösungen aufgrund geometrischer oder physikalischer Einschränkungen an ihre Grenzen stoßen.

Der Ablauf der Simulation in Geant4 für die Berechnung der Schnittstellendaten gliedert sich in vier zentrale Schritte:

- Szenarienspezifische Geometrie-Definition in Geant4
- Generische Teilchensimulation
- Erzeugung von Transferfunktionen
- Anwendung im Projektkontext

Mit dieser Methodik wird eine Brücke geschlagen zwischen generischer, umfassender Teilchensimulation und praktischen Anforderungen im Strahlenschutz – insbesondere dort, wo konventionelle Werkzeuge wie MicroShield nicht ausreichen.

Schritt 1 – Szenarienspezifische Geometrie-Definition in Geant4

Für jedes betrachtete Szenario wird zunächst eine eigenständige Geant4-Simulation aufgesetzt. Dazu ist die präzise Festlegung der Geometrie erforderlich. Hierzu zählen alle im Szenario relevanten Objekte wie z. B. Behälter, Schüttgut, Abschirmungen oder Fahrzeuge, inklusive ihrer räumlichen Ausdehnung, Materialeigenschaften und Dichte. Zusätzlich werden die Positionen festgelegt, an denen Dosisleistungen bestimmt werden – beispielsweise an der Position des Fahrers. Die radioaktive Quelle wird ebenfalls geometrisch beschrieben (z. B. Volumen und Lage des kontaminierten Schüttguts), jedoch noch ohne radionuklidspezifische Informationen. Aufgrund der Komplexität solcher

Geometrien kann eine einzelne Simulation mehrere Tage bis Wochen Rechenzeit beanspruchen.

Schritt 2 – Generische Teilchensimulation

Anstelle einer Simulation konkreter Radionuklide erfolgt in diesem Schritt eine generische Simulation mit monoenergetischen Primärteilchen. Dabei werden alle relevanten Teilchenarten über einen für die spätere Anwendung relevanten Energiebereich hinweg modelliert. Typischerweise umfasst dies:

- Photonen: 10 keV bis ca. 15 MeV
- Elektronen: 10 keV bis ca. 10 MeV
- Positronen: 10 keV bis ca. 10 MeV
- Neutronen: 1E-6 MeV bis 14 MeV

Die Simulation berücksichtigt sämtliche relevanten physikalischen Prozesse – einschließlich Wechselwirkungen mit den verschiedenen Materialien sowie der Entstehung und Bewegung sekundärer Teilchen. So wird z. B. auch die Bremsstrahlung von Elektronen explizit abgebildet. Alle Teilchen, die das definierte Detektorvolumen erreichen, werden detektiert, und die Simulation liefert für jede Teilchenart und Energie eine energieabhängige Fluenzverteilung.

Schritt 3 – Erzeugung von Transferfunktionen

Basierend auf den simulierten Spektren (energieabhängige Fluenz) werden unter Verwendung international anerkannter Dosiskonversionskoeffizienten – etwa aus ICRP Publikation 116 /ICRP 10/ – sog. Transferfunktionen erstellt. Dabei handelt es sich um die Summe (über die Energien der Spektren) aus Fluenz Dosiskonversionskoeffizienten. Falls keine Unterscheidung zwischen den Sekundärteilchen nötig ist, wird weiterhin über die Beiträge der verschiedenen Sekundärteilchen summiert. Das Ergebnis sind Dosisleistungen (z. B. mSv/h) pro Bq in Abhängigkeit der Primärenergie einer Teilchenart (siehe z. B. ein Ausschnitt in Tab. 3.17).

Tab. 3.17 Ausschnitt aus der Berechnung mit Geant4, Dosisleistungen (z. B. mSv/h) pro Bq in Abhängigkeit der Primärenergie

Photons			Electrons			Positrons		
Energy	total dose	delta total dose	Energy	total dose	delta total dose	Energy	total dose	delta total dose
MeV	mSv/h	mSv/h	MeV	mSv/h	mSv/h	MeV	mSv/h	mSv/h
0.05	6.94E-18	9.56E-19	5.00E-02	0	0	5.00E-02	1.80E-07	1.27E-12
0.06	1.97E-16	5.22E-18	6.00E-02	0	0	6.00E-02	2.16E-07	1.28E-12
0.07	1.44E-15	1.47E-17	7.00E-02	2.60E-21	1.95E-21	7.00E-02	2.52E-07	1.27E-12
0.08	4.74E-15	3.97E-17	8.00E-02	2.07E-20	6.67E-21	8.00E-02	2.88E-07	1.26E-12
0.09	1.02E-14	8.59E-17	9.00E-02	4.89E-20	1.10E-20	9.00E-02	3.24E-07	1.27E-12
0.1	1.77E-14	1.17E-16	1.00E-01	1.63E-19	1.96E-20	1.00E-01	3.60E-07	1.27E-12
0.12	3.80E-14	1.85E-16	1.20E-01	7.56E-19	6.42E-20	1.20E-01	4.32E-07	1.27E-12
0.15	7.48E-14	2.85E-16	1.50E-01	2.11E-18	1.10E-19	1.50E-01	5.40E-07	1.28E-12
0.18	1.16E-13	3.86E-16	1.80E-01	5.64E-18	1.87E-19	1.80E-01	6.48E-07	1.26E-12
0.2	1.46E-13	1.44E-15	2.00E-01	1.43E-17	3.04E-19	2.00E-01	7.20E-07	1.28E-12
0.25	2.14E-13	1.93E-15	2.50E-01	3.58E-17	5.07E-19	2.50E-01	9.00E-07	1.27E-12
0.3	2.92E-13	2.47E-15	3.00E-01	6.83E-17	7.43E-19	3.00E-01	1.08E-06	1.27E-12
0.35	3.78E-13	3.05E-15	3.50E-01	1.13E-16	9.93E-19	3.50E-01	1.26E-06	1.27E-12
0.4	4.56E-13	3.57E-15	4.00E-01	1.76E-16	1.31E-18	4.00E-01	1.44E-06	1.27E-12
0.5	6.16E-13	4.64E-15	5.00E-01	4.81E-16	4.40E-18	5.00E-01	1.80E-06	1.30E-12
0.511	6.33E-13	4.75E-15	6.00E-01	8.11E-16	7.03E-18	6.00E-01	2.16E-06	1.28E-12
0.6	7.80E-13	5.71E-15	7.00E-01	1.28E-15	1.15E-17	7.00E-01	2.52E-06	1.29E-12
0.662	8.96E-13	6.44E-15	8.00E-01	1.81E-15	1.42E-17	8.00E-01	2.88E-06	1.30E-12
0.7	9.70E-13	6.89E-15	9.00E-01	2.56E-15	1.76E-17	9.00E-01	3.24E-06	1.30E-12

Schritt 4 – Anwendung im Projektkontext

Die erstellten Transferspektren bilden die eigentliche Schnittstelle zwischen Geant4 und der Anwendung im Projekt. Sie stellen eine generische Grundlage dar, auf der spezifische Berechnungen für konkrete Radionuklide oder Nuklidgemische durchgeführt werden können. Mithilfe nuklidspezifischer Daten – z. B. aus ICRP 107 /ICRP 08/ – lassen sich die jeweiligen Emissionsspektren hinsichtlich Energie, Teilchenart und Intensität einlesen und mit den zuvor erstellten Transferfunktionen kombinieren. Durch Summation der Produkte aus Intensität und Dosisleistung pro Energiepunkt ergibt sich schließlich die Gesamtdosisleistung. Mit Hilfe eines festgelegten Dosislimits kann auf dieser Basis eine maximale zulässige Aktivität bestimmt werden.

Diese methodische Trennung von Geometrie, Teilchensimulation und Nuklidinformationen erlaubt eine hohe Flexibilität und Wiederverwendbarkeit der Geant4-Daten und stellt sicher, dass auch für neue oder variierende Fragestellungen, z. B. weitere Radionuklide oder alternative Nukliddaten, belastbare Ergebnisse bereitgestellt werden können. Über die hier im Eigenforschungsvorhaben entwickelte Datenblattstruktur (siehe Kap. 3.1.2.1) können diese Daten dem Berechnungsinstrument zur Verfügung gestellt werden.

3.3.1.2 Luftpfad – Schnittstelle DARTM

Die folgenden Ausführungen fassen die Aussagen und Berechnungen aus dem GRS-Bericht 506 zusammen /ART 22/. Für detaillierte Ausführungen wird auf den entsprechenden Bericht verwiesen.

Das Programmsystem ARTM (Atmosphärisches Radionuklid-Transport-Modell), das auf der TA Luft sowie dem Programmpaket AUSTAL2000 basiert, stellt den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik zur Berechnung der Ausbreitung und Deposition luftgetragener radioaktiver Stoffe dar. Es ist umfassend dokumentiert, verifiziert und in zahlreichen Anwendungsfällen validiert worden. Gemeinsam mit dem vom Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) entwickelten Modul DARTM zur Berechnung der Strahlenexposition bei Ableitungen in die Atmosphäre ist ARTM Bestandteil der benutzerfreundlichen Oberfläche GO-ARTM. Diese grafische Bedienoberfläche ermöglicht eine einfache Steuerung von ARTM und DARTM sowie eine visuelle Darstellung der Berechnungsergebnisse.

Die Simulation der atmosphärischen Ausbreitung sowie der trockenen und nassen Deposition erfolgt in GO-ARTM mit einem Lagrangeschen Partikelmodell gemäß der Richtlinie VDI 3945, Blatt 3. Dabei können verschiedene Quelltypen, Quellgeometrien und auch zeitlich variable Emissionen berücksichtigt werden. Das System erlaubt die Modellierung aller relevanten Radionuklide, wie sie in der Nuklidliste der KTA 1503.1 enthalten sind. Auch chemisch-physikalische Eigenschaften der Radionuklide, sofern sie Einfluss auf das Ausbreitungsverhalten haben, fließen in die Berechnung ein.

Die atmosphärische Turbulenz wird entsprechend der Richtlinie VDI 3783 Blatt 8 modelliert. Als Eingangsgrößen dienen dabei entweder meteorologische Zeitreihen oder statistische Verteilungen meteorologischer Parameter, so dass ein zeitlich und räumlich differenziertes Bild der Ausbreitungsverhältnisse entsteht. In strukturiertem Gelände oder bei Vorhandensein von Gebäuden werden Wind- und Turbulenzfelder mithilfe des diagnostischen Strömungsmodells TALdia, das Teil von AUSTAL2000 ist, berechnet.

Das System ermöglicht darüber hinaus die Berechnung flächendeckender Jahresmittelwerte sowie die Berücksichtigung spezifischer Zeiträume wie der Vegetationsperiode. Um Rechenzeit und Speicherplatz zu sparen, kann bei Bedarf die Ausgabe bestimmter Felder (etwa zur Gamma-Wolkenstrahlung) reduziert oder unterdrückt werden.

Für die Dosisberechnung steht zusätzlich das GRS-Dosismodell zur Verfügung, das als Windows-Anwendung automatisch die von ARTM erzeugten Ausgabedateien verarbeitet. Die in der Allgemeinen Verwaltungsvorschrift (AVV) definierten Dosisfaktoren und Transferparameter sind dabei bereits hinterlegt. Vergleichsrechnungen mit dem DARTM-Modell des BfS sowie dem AUSBRDOS-Modell des Forschungszentrums Jülich zeigen die Kompatibilität und wissenschaftliche Fundierung des Systems.

In die Berechnung gehen verschiedene Parameter ein, die die Emission, Ausbreitung und Aufnahme radioaktiver Stoffe betreffen. Dazu zählen die Quellhöhe und Emissionsrate, die Art und Menge der freigesetzten Radionuklide sowie deren chemisch-physikalische Eigenschaften. Meteorologische Daten wie Wind, Turbulenz, Niederschlag und Temperatur bestimmen die Ausbreitung und Deposition in der Atmosphäre. Zusätzlich fließen Geländedaten, Aufenthaltszeiten von Personen im Freien, altersabhängige Atemraten, Verzehrsmengen sowie Dosiskoeffizienten zur Bewertung der Strahlenexposition ein. Die Betriebsdauer der Anlage und die zeitliche Verteilung der Emissionen werden ebenfalls berücksichtigt.

Dosisberechnung nach DARTM

Auf der Basis der mit ARTM durchzuführenden Ausbreitungs- und Ablagerungsrechnungen können mit dem in /THI 16/ beschriebenen Dosismodell der GRS die effektiven Dosen aller Nuklide für die Pfade Inhalation, Gammabodenstrahlung und Ingestion nach /BMU 12/ jeweils getrennt berechnet werden. Diese getrennte Berechnung stellt sicher, dass der Dosisbeitrag eines dominierenden Pfades nicht den ungünstigsten Aufpunkt bei den anderen Pfaden beeinflusst.

Bodenstrahlung (Szenario SPEZ_L1)

Die Maximalwerte der Bodenstrahlung sind in der Regel dominiert durch nasse Deposition von Radionukliden und liegen unmittelbar am Kamin für die Referenzperson Kleinkind (0 bis 1 Jahre).

Die Tab. 3.18 enthält beispielhafte Ergebnisse der Dosisberechnung für die Bodenstrahlung des Szenario SPEZ_L1. Für jedes Nuklid (Spalte 1) ist zunächst dargestellt, welche Dosis sich für die Emission von 1 Bq/s ergibt (Spalte 2). In der 3. Spalte ist die Emissionsrate $\dot{A}_{10\mu Sv}$ wiedergegeben, die eine Dosis von 10 μSv hervorrufen würde. Spalte 4 enthält diejenige Aktivitätskonzentration f in Bq/g, die diese Dosis von 10 μSv erzeugen

würde. Für das Berechnungsinstrument wird über das entsprechende Datenblatt jeweils Spalte 1 und 5 übergeben. Wobei in Spalte 5 die Jahresdosis ($\mu\text{Sv/a}$) für eine spezifische Aktivität von 1 Bq/g angegeben wird. Im weiteren Verlauf der Berechnung, wird dieser Wert dann mit den anderen Dosiswerten verglichen und ggf. für die Freigabewerte relevant.

Tab. 3.18 Beispielhafte Ergebnisse der Dosisberechnung mit ARTM für die Bodenstrahlung

Nuklid	Dosis für 1 Bq/s [μSv]	$\dot{A}_{10\mu\text{Sv}}$ [Bq/s]	f [Bq/g]	Dosis für 1 Bq/g [$\mu\text{Sv/a}$]
Ag-108m	2,4E-06	4,1E+00	2,6E+01	3,85E-01
Ba-133	2,1E-07	4,7E+01	3,0E+04	3,33E-04
C-14	0,0E+00	-	-	
Cl-36	0,0E+00	-	-	
Co-60	6,2E-07	1,6E+01	1,0E+04	1,00E-03
Cs-137	5,9E-07	1,7E+01	1,1E+02	9,09E-02
H-3	0,0E+00	-	-	
I-129	3,9E-08	2,5E+02	1,6E+03	6,25E-03
Mn-54	3,6E-08	2,8E+02	1,8E+05	5,56E-05
Ni-59	6,1E-10	1,6E+04	1,0E+07	1,00E-06
Pu-238	1,1E-09	8,9E+03	5,6E+06	1,79E-06
Pu-239	6,3E-10	1,6E+04	1,0E+07	1,00E-06
Sr-90	0,0E+00			
Tc-99	0,0E+00			
U-238	4,5E-08	2,2E+02	1,4E+05	7,14E-05

Inhalation (Szenario SPEZ_L2)

Beispielhafte Maximalwerte der bodennahen Konzentrationen ergeben sich, für die unter denen im GRS-Bericht 506 angenommenen Parameterwerten /ART 22/, in einer Entfernung von etwa 530 m nordöstlich des angenommenen Kamins.

Die Tab. 3.19 enthält die Ergebnisse der Dosisberechnung für die Inhalation (Szenario SPEZ_L2). Der Aufbau und Inhalt der Tabelle ist analog zu Tab. 3.18.

Tab. 3.19 Ergebnisse der Dosisberechnung mit ARTM für die Inhalation

Nuklid	Dosis für 1 Bq/s [μSv]	$\dot{A}_{10\mu Sv}$ [Bq/s]	f [Bq/g]	Dosis für 1 Bq/g [μSv/a]
Ag-108m	2,2E-10	4,6E+04	2,9E+05	3,45E-05
Ba-133	5,9E-11	1,7E+05	1,1E+08	9,09E-08
C-14	3,4E-11	2,9E+05	9,3E+03	1,08E-03
Cl-36	4,3E-11	2,3E+05	1,5E+07	6,67E-07
Co-60	1,8E-10	5,5E+04	3,5E+07	2,86E-07
Cs-137	2,3E-10	4,4E+04	2,8E+05	3,57E-05
H-3	1,5E-12	6,6E+06	2,1E+05	4,76E-05
I-129	2,1E-10	4,7E+04	3,0E+05	3,33E-05
Mn-54	8,8E-12	1,1E+06	7,2E+08	1,39E-08
Ni-59	2,6E-12	3,9E+06	2,4E+09	4,17E-09
Pu-238	6,5E-07	1,6E+01	9,8E+03	1,02E-03
Pu-239	7,0E-07	1,4E+01	9,0E+03	1,11E-03
Sr-90	9,4E-10	1,1E+04	6,7E+06	1,49E-06
Tc-99	7,6E-11	1,3E+05	8,3E+07	1,20E-07
U-238	4,7E-08	2,1E+02	1,3E+05	7,69E-05

Ingestion (Szenario SPEZ_L3)

Die Ingestion von kontaminierten Lebensmitteln wird durch nasse oder trockene Deposition abgelagerter Nuklide dominiert. Die Referenzperson ist auch hier das Kleinkind (0 bis 1 Jahre), das mit Muttermilch ernährt wird.

Die Tab. 3.20 enthält die Ergebnisse der Dosisberechnung für die Ingestion kontaminierter Lebensmittel (Sekundäringestion) (SPEZ_L3). Der Aufbau und Inhalt der Tabelle ist analog zu den vorherigen Tabellen Tab. 3.18 und Tab. 3.19.

Tab. 3.20 Ergebnisse der Dosisberechnung mit ARTM für die Ingestion kontaminierter Lebensmittel

Nuklid	Dosis für 1 Bq/s [μSv]	$\dot{A}_{10\mu Sv}$ [Bq/s]	f [Bq/g]	Dosis für 1 Bq/g [μSv/a]
Ag-108m	2,237E-06	4,5E+00	2,8E+01	3,57E-01
Ba-133	4,796E-08	2,1E+02	1,3E+05	7,69E-05
C-14	2,411E-11	4,1E+05	1,3E+04	7,69E-04
Cl-36	1,321E-05	7,6E-01	4,8E+01	2,08E-01
Co-60	1,221E-07	8,2E+01	5,2E+04	1,92E-04
Cs-137	2,359E-07	4,2E+01	2,7E+02	3,70E-02
H-3	1,299E-09	7,7E+03	2,4E+02	4,17E-02
I-129	1,745E-06	5,7E+00	3,6E+01	2,78E-01
Mn-54	8,084E-09	1,2E+03	7,8E+05	1,28E-05
Ni-59	5,721E-09	1,7E+03	1,1E+06	9,09E-06
Pu-238	5,710E-06	1,8E+00	1,1E+03	9,09E-03
Pu-239	6,021E-06	1,7E+00	1,0E+03	1,00E-02
Sr-90	3,015E-06	3,3E+00	2,1E+03	4,76E-03
Tc-99	5,192E-07	1,9E+01	1,2E+04	8,33E-04
U-238	5,921E-07	1,7E+01	1,1E+04	9,09E-04

Für die spezifischen Expositionspfade SPEZ_L1 – Luft Bodenstrahlung, SPEZ_L2 – Luft Inhalation und SPEZ_L3 – Luft Ingestion werden die Dosiswerte direkt über DARTM berechnet und können dann über die entsprechenden Datenblätter in das Berechnungsinstrument eingelesen werden. Eine genaue Auflistung der für das Programm notwendigen Parameter und möglicher Parameterwerte ist dem GRS-Bericht 506 zu entnehmen /ART 22/.

3.3.1.3 Grundwasserpfad

Der Grundwasserpfad unterhalb einer Deponie mit freigegebenen sehr schwach radioaktiven Abfällen ist ein wichtiger Pfad für bestimmte Radionuklide in der Freigabe. In diesem Projekt wurde im Zuge des Arbeitspakets 3 die Radionuklidkonzentration entsprechend den regulatorischen Anforderungen mittels numerischer Grundwassermodelle berechnet, die zur Dosisberechnung genutzt werden können. Der Fokus lag auf einem Vergleich verschiedener numerischer Codes, um zusätzliches Vertrauen in die Berechnung der Radionuklidkonzentration mittels numerischer Grundwassermodelle zu

gewinnen, da bisher häufig nur vereinfachte analytische Methoden für Berechnung der Radionuklidkonzentration für die spätere Dosisberechnung verwendet wurden. Die hier vorgestellten Ergebnisse sollen auch in Form eines Papers veröffentlicht werden.

3.3.1.3.1 Rechencodes

Neben den analytischen Berechnungen zur Konzentration der Radionuklide im Grundwasser /THI 04/ wurden nur erste vereinzelte numerische Berechnungen zur Grundwasserströmung und zum Stofftransport durchgeführt /ART 20/, /MER 12/, /SEH 16/. Der Vergleich der Codes soll vorhandene Unterschiede in der Implementierung verschiedener Strömungs- und Stofftransportprozesse aufzeigen und so das Vertrauen in numerische Grundwassermodelle in der Freigabe stärken. Numerische Grundwassermodelle werden für verschiedene Fragestellungen und in verschiedenen Bereichen wie der Endlagerung oder zur Betrachtung des Wasserhaushalts, dem Einfluss von Pumpbrunnen oder der Versalzung von Grundwasserleitern /SCH 22/, /RÜB 22/, /WIN 22/ eingesetzt. Mit zunehmender technischer Entwicklung und steigender Rechenleistung können Modelle immer komplexer und umfangreicher gestaltet werden. Ein Modell ist zwar nicht in der Lage die Realität exakt wiederzugeben, ermöglicht es aber begründete Abschätzungen zu machen und ein besseres Systemverständnis zu erhalten. Die drei verwendeten Grundwassermodellierungscodes werden nachfolgend kurz beschrieben.

3.3.1.3.1.1 d^{3f++}

Der Code „distributed density-driven flow“ (d^{3f++}) ist ein Finite-Volumen-Code, der unter der Federführung der GRS in Kooperation mit verschiedenen Universitäten entwickelt wurde, um spezifische Fragestellungen zur Grundwasserströmung mit dem Fokus auf dichtegetriebener Strömung in großen, komplexen Gebieten bearbeiten zu können /FEI 99/, /FEI 04/. d^{3f++} kann und wurde bereits in der Langzeitsicherheitsanalyse für die Endlagersuche, der Modellierung der Versalzung von oberflächennahen Grundwasserleitern an der Küste, der Modellierung von Klüften und Kluftnetzwerken und der Betrachtung von Subrosionsprozessen im Untergrund angewandt. Der Code soll in Zukunft als Open-Source-Code verfügbar gemacht werden.

3.3.1.3.1.2 DuMu^x

„Dune for Multi-{Phase, Component, Scale, Physics, ...} flow and transport in porous media“ (DuMu^x) ist ein Finite-Elemente-Code, der vom Lehrstuhl für Hydromechanik und

Hydrosystemmodellierung (LH2) der Universität Stuttgart entwickelt und gehostet wird /KOC 21/. Der Code ist Open-Source und unter GitLab verfügbar. Das Hauptziel von DuMu^x ist es, einen nachhaltigen und konsistenten Rahmen für die Umsetzung und Anwendung von Konzepten und konstitutiven Beziehungen für poröse Medien zu schaffen. Es wurde erfolgreich auf Gasspeicherszenarien, Umweltsanierungsprobleme, den Transport therapeutischer Wirkstoffe durch biologisches Gewebe, die Wechselwirkung zwischen Wurzeln und Boden, die Kopplung von Untergrund und Atmosphäre, die Modellierung von Porennetzwerken sowie die Strömung und den Transport in zerklüfteten porösen Medien angewendet.

3.3.1.3.1.3 SPRING

Der Reencode Simulation of Processes in Groundwater (SPRING) wurde von der delta h Ingenieurgesellschaft mbH entwickelt und als konventionelle proprietäre Software vermarktet /KÖN 23/. Er verbindet die Funktionen von geographischen Informationssystemen (GIS) mit der numerischen Modellierung. Mithilfe der Finite-Elemente-Methode können 1D-, 2D-, 2D/3D- und 3D-Modelle erstellt werden. SPRING ermöglicht die Berechnung von mehrdimensionalen Grundwasserströmungs-, Oberflächengewässer-, Wärme- und Stofftransportmodellen.

3.3.1.3.1.4 Vergleich der Gleichungssysteme

Für den Transport gelöster Stoffe in der Flüssigkeit werden verschiedene Prozesse berücksichtigt. Dazu gehören Advektion, Diffusion, Dispersion, Adsorption und Zerfall. Im Folgenden wird eine kurze Beschreibung der Stofftransportprozesse und der grundlegenden Implementierung in numerischen Grundwassermodellen gezeigt:

$$\underbrace{\frac{\partial(\phi S_w c X^k)}{\partial t}}_{\text{Speicherterm}} + \underbrace{\nabla(c X^k v_f)}_{\text{Advektion}} - \nabla \cdot \left(c \left(\underbrace{D_{\text{eff}}^k}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{D_{\text{disp}}^k}_{\text{Dispersion}} \right) \nabla X^k \right) = q$$

Zunächst wurden die Gleichungssysteme für die Strömungs- und Transportprozesse der drei Codes auf Basis der zur Verfügung stehenden Dokumentationen miteinander verglichen. Es konnten Unterschiede in den Gleichungssystemen identifiziert werden. Es werden nachfolgend keine Herleitungen, sondern nur die Transportgleichung mit den Unterschieden der Codes beschrieben. Die Unterschiede zwischen den Gleichungen in

DuMu^x im Vergleich zu SPRING und d^{3f++} sind rot markiert, während Diskrepanzen zwischen DuMu^x und d^{3f++} im Vergleich zu SPRING blau und grün markiert sind:

$$\frac{\partial(\phi S_w X^k + q_s X_s^k (1 - \phi))}{\partial t} + S_\alpha \mathbf{v}_f \nabla X^k - \nabla \cdot \left(\left(\phi S_\alpha \tau D_\alpha^k + S_\alpha (\alpha_1 - \alpha_t) \frac{\mathbf{v}_f \mathbf{v}_f^T}{|\mathbf{v}_f|} + \alpha_t |\mathbf{v}_f| \mathbf{I} \right) \nabla X^k \right) = q$$

Die Sorption wird in DuMu^x im Term nur mit der Gesteinsdichte multipliziert mit dem Sorptionskoeffizienten multipliziert. In SPRING und d^{3f++} wird der Wert noch mit 1 minus der Porosität multipliziert. Dieser Unterschied wurde für die Vergleichsrechnungen ebenfalls so in DuMu^x umgesetzt. Ein weiterer Unterschied in den Rechencodes ist die Tortuosität, dem Grad der Gewundenheit der Transportwege in porösen Medien. In DuMu^x ist dieser Wert standardmäßig mit 0,5 belegt, in d^{3f++} mit 1 und in SPRING ist die Tortuosität nicht implementiert. Für die Vergleichsrechnungen wurde die Tortuosität in DuMu^x auf 1 gesetzt, um eine bessere Vergleichbarkeit zu erreichen. In der SPRING-Dokumentation ist in der Transportgleichung mehrfach die Sättigung berücksichtigt, die in DuMu^x und d^{3f++} nur vor dem Dispersionsterm genannt wird, nicht erneut vor dem Advektionsterm, da dort schon die relative Permeabilität die geringere Sättigung mitberücksichtigt. Für die bessere Vergleichbarkeit wurden diese Unterschiede für die Berechnungen aneinander angepasst.

3.3.1.3.2 Modellannahmen

Die Modelle sind abstrakt und einfach gehalten, so dass Unterschiede in den Rechencodes auf die Implementierung und nicht auf die Komplexität des Modells zurückzuführen sind. Mit dem Vergleich der Codes wird die Robustheit der Codes gestärkt und soll zu zusätzlichem Vertrauen in numerische Methoden führen.

Es wurden zwei verschiedene Modelle erstellt. Zum einen wurde ein einfaches quasi 1D-Modell eines 9 m hohen Bodenprofils erstellt. Der oberste Meter bildet kontaminierten Boden ab. Dieser stellt den Bodenaushub eines potenziellen Kernkraftwerksgeländes dar, der an anderer Stelle aufgebracht wird. Versickerndes Niederschlagswasser laugt die Schadstoffe aus dem Boden und transportiert diese weiter in die Tiefe.

Das zweite Modell bildet eine vereinfachte Deponie mit einem anschließenden Grundwasserleiter ab. Die Deponie umfasst den Deponiekörper, eine Entwässerungsschicht

und eine 1 m mächtige geologische Barriere der Deponieklasse 1 (DK1) nach /DEPV 24/.

Innerhalb der Modelle wurden folgende Vereinfachungen und Annahmen getroffen:

Die Kontamination befindet sich zu Beginn der Simulation bereits im Boden (2D-Säulenmodell) und innerhalb des teilgesättigten Deponiekörpers (2D-Deponie). Es wird keine zusätzliche Konzentration über Modellränder ins Modell eingetragen und die Deponie mit ihren Komponenten besteht bereits (es wird keine Aufschüttung der Deponie betrachtet). Die nach /DEPV 24/ vorgegebenen Schichten oberhalb des Deponiekörpers (Oberflächenabdichtung, Entwässerungsschicht, Renaturierungsschicht) werden nicht betrachtet, da konservativ von einem direkten Eindringen von Sickerwasser in die Deponie ausgegangen wird. Dichtungsbahnen sind eigentlich für eine Lebensdauer von 100 Jahren ausgelegt, würden ein Eindringen von Sickerwasser verhindern, ebenso das Auslaugen von Schadstoffen aus dem Deponiekörper ins Grundwasser /LAGA 20/.

Zum ersten Zeitschritt ist die Sättigung innerhalb der Deponie bereits stationär eingestellt, und es besteht ein gesättigter Bereich an der Basis des Deponiekörpers. Die Sättigung ist stark abhängig von den van Genuchten-Parametern /VAN 80/, für die ungesättigte Strömung entsprechend der Richards-Gleichung mit α = Kehrwert des Wassereingangsdrucks, n = Porenraumindex, $S_{w,r}$ = Wassergehalt und $S_{n,r}$ = Restsättigung (siehe Tab. 3.21).

Tab. 3.21 Van Genuchten-Parameter beider Modelle

α [m ² N ⁻¹]	n [-]	$S_{w,r}$ [-]	$S_{n,r}$ [-]
1,4E-3	3	1,0	0,2

3.3.1.3.2.1 Bodenmodell

Das Bodenmodell bietet mit dem einfachen generischen quasi 1D-Aufbau eine gute Basis für den Codevergleich. Im Zuge des Eigenforschungsvorhabens waren keine stochastischen heterogenen Parametervariationen im Modellgebiet angedacht, so dass Boden als homogenes poröses Medium in einem 2D-Modell abgebildet wird. Eine zusätzliche dritte Dimension bietet für die Transportzeiten vom kontaminierten Boden hin zur Basis des Grundwasserleiters keinen Mehrwert, da mit den Randbedingungen kein lateraler Grundwasserstrom betrachtet wird. Die Transportberechnungen werden

durchgeführt, um den Freigabepfad nach /SSV 24/ Spalte 7 „spezifische Freigabe von Boden in Bq g⁻¹“ abzubilden.

An der Modelloberfläche wird eine stationäre Neumann-Randbedingung mit einer Einstromrate von 0,25 m a⁻¹ an der Modelloberkante, an der Modellbasis eine Dirichlet-Randbedingung mit einer Lagehöhe von 9 m (gesättigter Rechenfall) und einmal von 5 m (ungesättigter Rechenfall) angesetzt. Die seitlichen Modellränder sind geschlossen.

Die Mächtigkeit, Durchlässigkeit, Porosität und Dichte der Schichten variieren nur in der Durchlässigkeit der Bodenschicht gegenüber den unterlagernden Schichten (siehe Tab. 3.22).

Tab. 3.22 Hydraulische Parameter des Bodenmodells

Schicht	Höhe [m]	Permeabilität [m ²]	Porosität [-]	Dichte [kg m ⁻³]
Kontaminierter Boden	1	1,3E-11	0,2	1800
Ungesättigte Zone	3	1,3E-12	0,2	1800
Gesättigte Zone	5	1,3E-12	0,2	1800

Die Anfangskonzentration im kontaminierten Boden beträgt 1 kg kg⁻¹ bei einer Mächtigkeit von 1 m und 0 kg kg⁻¹ für den Rest der Bodensäule. Das infiltrierende Regenwasser hat eine Konzentration von 0 kg kg⁻¹, so dass die Gesamtmasse der Kontamination bereits zu Beginn der Simulation im Modell enthalten ist. Vor der Transportmodellierung wurden in einem instationären Strömungsmodell die anfänglichen Sättigungs- und Druckbedingungen des stationären Zustandes berechnet. Die Fluidichte und die Viskosität werden mit Werten von 1E3 kg m⁻³ und 1E-3 kg s⁻¹ festgelegt.

Die Dispersion variiert, wie in Tab. 3.23 beschrieben, wobei die transversale Dispersionslänge 10 % der longitudinalen Dispersionslänge beträgt. Der Diffusionskoeffizient beträgt für die Simulationen 0 oder 1E-9 m² s⁻¹, abhängig vom Rechenfall. Der Sorptionskoeffizient hat eine Bandbreite von keiner Adsorption 0 m³ kg⁻¹ bis 1E-3 m³ kg⁻¹. Mit dieser Konfiguration von Simulationen, können mögliche Unterschiede in den numerischen Codes für die verschiedenen Transportprozesse identifiziert werden.

Tab. 3.23 Transportparameter für die Rechenfälle des Bodenmodells

Rechenfall	Ges./Unges.	α_L [m]	α_T [m]	D_{eff}^K [m ² s ⁻¹]	K_d [m ³ kg ⁻¹]
1	Ges.	0	0	0	0
2	Ges.	0,1	0,01	0	0
3	Ges.	0	0	1E-9	0
4	Ges.	0	0	0	1E-4
5	Ges.	0,1	0,01	1E-9	1E-5
6	Ges.	0,1	0,01	1E-9	1E-4
7	Ges.	0,1	0,01	1E-9	1E-3
8	Ges.	1	0,1	1E-9	1E-5
9	Ges.	1	0,1	1E-9	1E-4
10	Ges.	1	0,1	1E-9	1E-3
11	Unges.	0	0	0	0
12	Unges.	0,1	0,01	0	0
13	Unges.	0	0	1E-9	0
14	Unges.	0	0	0	1E-4
15	Unges.	0,1	0,01	1E-9	1E-5
16	Unges.	0,1	0,01	1E-9	1E-4
17	Unges.	0,1	0,01	1E-9	1E-3
18	Unges.	1	0,1	1E-9	1E-5
19	Unges.	1	0,1	1E-9	1E-4
20	Unges.	1	0,1	1E-9	1E-3

3.3.1.3.2.2 Deponiemodell

Das 2D-Deponiemodell ist gegenüber dem Bodenmodell komplexer. Die Berechnungen werden zur Betrachtung des Freigabepfades nach /SSV 24/ Spalte 10 „Spezifische Freigabe von festen Stoffen bis 1000 Mg a⁻¹ zur Beseitigung auf Deponien in Bq g⁻¹“ durchgeführt. Das Modell umfasst eine 300 m breite und 25 m hohe Deponie. Darunter befindet sich eine 0,5 m mächtige Entwässerungsschicht, gefolgt von einer 1 m mächtigen

geologischen Barriere, entsprechend der Deponieverordnung (siehe Tab. 3.24). Unterhalb dieser drei Kompartimente befindet sich ein Grundwasserleiter (GWL). Der Boden erstreckt sich über eine Länge von 850 m und hat eine Mächtigkeit von 20 m. Um numerische Randeffekte am Übergang zwischen geologischer Barriere und dem Boden zu reduzieren, ist die Deponie nicht direkt am linken Rand des Modells angeordnet, sondern leicht zur Mitte des Modells hin ausgerichtet (siehe Abb. 3.6).

Die Modellstruktur weist einen natürlichen Gradienten von $0,025 \text{ m m}^{-1}$ in der Modellgeometrie auf. Dieses Gefälle ist auch im Deponiekörper, der Entwässerungsschicht und der geologischen Barriere vorhanden. An der Modelloberfläche wurde eine stetige Neumann-Randbedingung mit einer Zuflussrate von $0,25 \text{ m a}^{-1}$ angesetzt. Am linken und rechten Modellrand wurden Dirichlet-Randbedingungen in Form einer 14 m mächtigen gesättigten Zone angenommen. Die seitlichen Ränder der Deponie, der Entwässerungsschicht und der geologischen Barriere sind geschlossen. Infiltrationswasser von der Oberfläche kann nicht an den seitlichen Rändern der Deponie ausfließen. Dies führt zu höheren Konzentrationen in der geologischen Barriere und im Grundwasserleiter und ist somit als konservativ anzusehen, da die gesamte ins Modell eingetragene Masse durch die geologische Barriere in das Grundwasser transportiert und nicht über das Sickerwasser abgefangen wird.

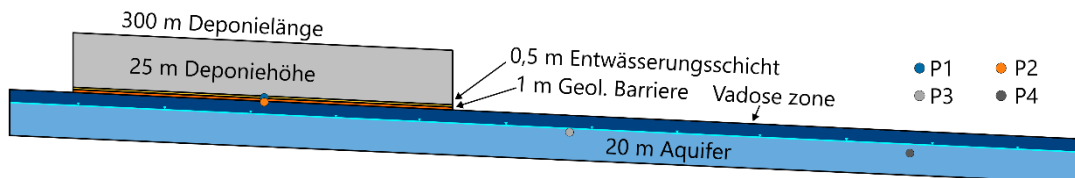


Abb. 3.6 Modellgeometrie der Deponie mit Observationspunkten

Tab. 3.24 Koordinaten der Randknoten für das Deponiemodell

X [m]	Y [m]	Beschreibung
0	21,25	GWL Modellbasis links
0	41,25	GWL Modelloberfläche links
50	40	Kontakt GWL zur geol. Barriere links
50	41	Kontakt geol. Barriere zu Entwässerungsschicht links
50	41,5	Kontakt Entwässerungsschicht zu Deponiematerial links
50	66,5	Deponieoberfläche links
350	59	Deponieoberfläche rechts
350	34	Kontakt Entwässerungsschicht zu Deponiematerial rechts
350	33,5	Kontakt geol. Barriere zu Entwässerungsschicht recht
350	32,5	Kontakt GWL zur geol. Barriere rechts
850	20	GWL Modellbasis rechts
850	0	GWL Modelloberfläche rechts

Die Anfangskonzentration in der Deponie beträgt 1 kg kg^{-1} über die gesamte Deponiehöhe von 25 m. Die übrigen Kompartimente haben eine Anfangskonzentration von 0 kg kg^{-1} . Die Konzentration des infiltrierenden Regenwassers hat ebenfalls eine Konzentration von 0 kg kg^{-1} , wie im Bodenmodell. Vor der Transportmodellierung wurden in einem instationären Strömungsmodell die anfänglichen Sättigungs- und Druckbedingungen des stationären Zustandes berechnet. Viskosität und Fluidichte entsprechen den Werten des Bodenmodells.

Die Porosität und die Gesteinsdichte sind in den verschiedenen Schichten gleich (siehe Tab. 3.25). Die Durchlässigkeitswerte variieren in Abhängigkeit vom angenommenen Kompartiment. Das Deponiematerial, die Entwässerungsschicht und der Grundwasserleiter wurden als hydraulisch gut durchlässig charakterisiert (konservativ). Die geologische Barriere wurde nach den Durchlässigkeiten nach DepV umgesetzt. Die van Genuchten-Parameter für die ungesättigte Strömung sind in Tab. 3.21 aufgeführt.

Tab. 3.25 Hydraulische Parameter des Deponiemodells

Schicht	Höhe [m]	Permeabilität [m^2]	Porosität [-]	Dichte [kg m^{-3}]
Deponiekörper	25	1,3E-12	0,2	1800
Entwässerungsschicht	0,5	1,3E-11	0,2	1800
Geologische Barriere	1	1,3E-16	0,2	1800
Ungesättigte Zone	6	1,3E-12	0,2	1800
Gesättigte Zone	14	1,3E-12	0,2	1800

Die Dispersivität wurde für die verschiedenen Rechenfälle entsprechend Tab. 3.26 variiert. Die transversale Dispersion entspricht dabei 10 % der longitudinalen Dispersionslänge. Der Diffusionskoeffizient wurde für die Rechenfälle auf $1\text{E-}9 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ festgelegt. Die Sorptionskoeffizienten reichen von keiner Sorption ($0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$) bis $1\text{E-}4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Tab. 3.26 Transportparameter für die unterschiedlichen Rechenfälle für das Bodenmodell

Rechenfall	α_L [m]	α_T [m]	D_{eff}^K [$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$]	K_d [$\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$]
1	0,1	0,01	1E-9	0
2	0,1	0,01	1E-9	1E-5
3	0,1	0,01	1E-9	1E-4
4	1	0,1	1E-9	0
5	1	0,1	1E-9	1E-5
6	1	0,1	1E-9	1E-4

Die Durchbruchkurven der Konzentration bei den Koordinaten (200/36,25; 200/37,25; 440/21,6 und 707/14) werden über die Zeit geplottet, um die Ergebnisse der verschiedenen Rechencodes miteinander zu vergleichen.

3.3.1.3.3 Ergebnisse Grundwassermodelle

3.3.1.3.3.1 Bodenmodell

Für die Auswertung werden mehrere Rechenfälle in einer Abbildung gezeigt. Bei der großen Anzahl von Rechenfällen wurden jedoch nicht alle Durchbruchkurven in einem Diagramm geplottet, um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten. Die ersten vier Rechenfälle zeigen die einzelnen Stofftransportprozesse und mögliche Unterschiede auf (siehe Tab. 3.23). Für Rechenfall 1 ist abgesehen von der Advektion kein weiterer Transportprozess berücksichtigt. Die Ergebnisse zeigen für alle drei Codes identische Verlaufskurven (siehe Abb. 3.7). Dies gilt auch für die Rechenfälle 3 (Diffusion) und 4 (Sorption). Für den Rechenfall 2 (Dispersion) zeigt sich eine stärkere Dispersion im Code DuMu^x. Der Ursprung dieses Effektes konnte im Verlauf des Projektes nicht eindeutig identifiziert werden, da die mathematische Beschreibung der Dispersion in allen Codes gleich ist und die Anfangs- und Randbedingungen in diesem Rechenfall gleich sind. Unter den verwendeten Randbedingungen und Parametern führt die Dispersion zu einer stärkeren Verteilung der Konzentration gegenüber dem rein advektiven Transport. Mit einem Sorptionskoeffizienten von $1\text{E-}4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ benötigt der Tracer bzw. ein Radionuklid fast doppelt so lange, um durch das Modell zum Beobachtungspunkt an der Modellbasis transportiert zu werden. Die Sorption führt im Gegensatz zur Dispersion und Diffusion zu keiner Verteilung der Konzentration, sondern lediglich zu einer Verzögerung des Stofftransportes. In diesem und den folgenden Rechenfällen erhöht sich die im Modell vorhandene Gesamtstoffmasse bei höheren Sorptionskoeffizienten, da zu Beginn der Berechnung mehr Masse an der Oberfläche des porösen Mediums gebunden ist. Aus diesem Grund variieren die Integrale der Stoffmenge für die Rechenfälle mit unterschiedlichen Sorptionskoeffizienten. Dieser Umstand ist in allen folgenden Berechnungen zu berücksichtigen.

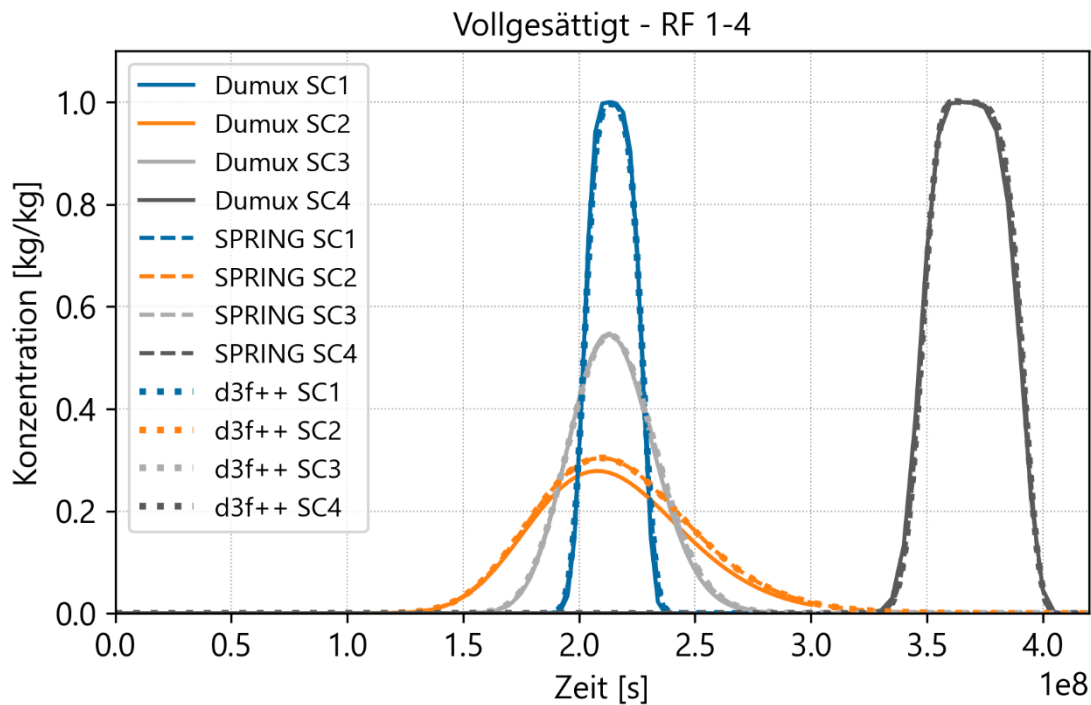


Abb. 3.7 Konzentrationsdurchbruchkurven für die Rechenfälle 1 bis 4 für die drei verschiedenen Codes DuMu^x, d³f++ und SPRING

Blaue Kurve: advektiver Transport; orangene Kurve: Advektion und Dispersion; graue Kurve: Advektion und Diffusion; schwarze Kurve: Advektion und Sorption

Der Einfluss variabler Sorptionskoeffizienten, die auch dem Wertebereich einer Vielzahl von Radionukliden entsprechen, zeigen die Rechenfälle 5 bis 7 mit gleicher Dispersionslänge und Diffusionskoeffizienten (siehe Abb. 3.8). Durch die Prozesse der Dispersion und Diffusion kommt es zu einer stärkeren Verteilung des Schadstoffs im Modell gegenüber dem rein advektiven Transport. Die Durchbruchkurven der Codes zeigen gleiche Tendenzen auf. Einzig der Effekt der stärkeren Dispersion in DuMu^x unterscheidet die Konzentrationen im Bereich von $0,27 \text{ kg kg}^{-1}$. Mit zunehmender Sorption verzögert sich der Transport durch das Modell um ein Vielfaches. Mit einem Sorptionskoeffizienten von $1\text{E-}3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ vergehen bis zur maximalen Konzentration von $0,27 \text{ kg kg}^{-1}$ etwas mehr als 50 Jahre ($1,578\text{E}+9$ Sekunden).

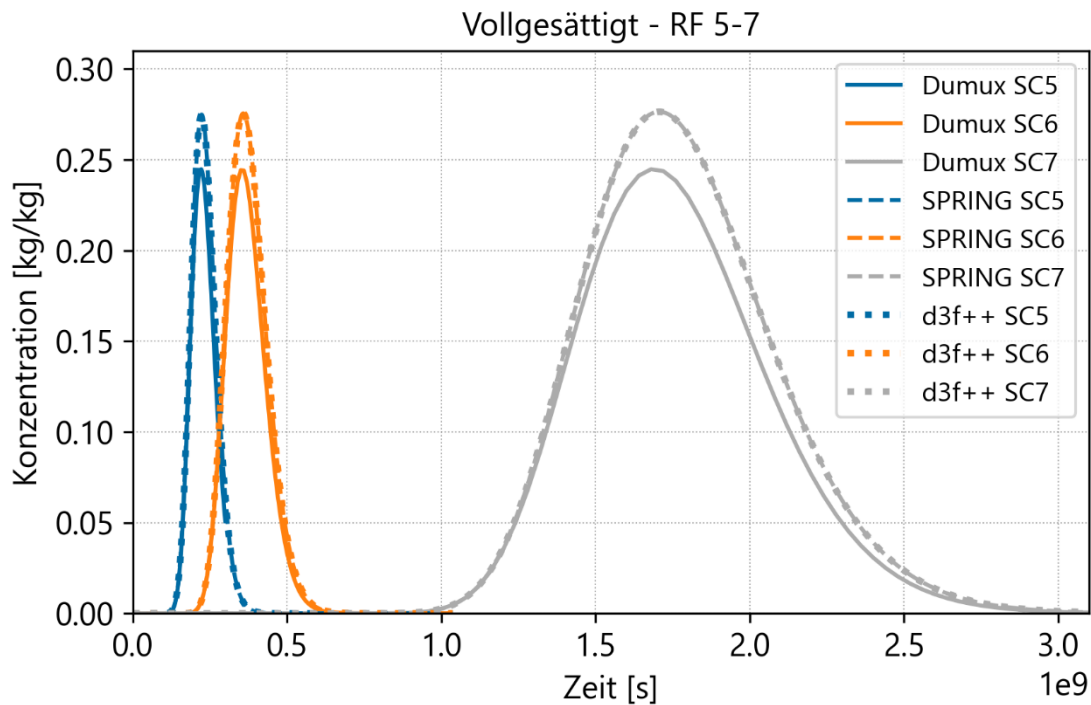


Abb. 3.8 Konzentrationsdurchbruchkurven für die Rechenfälle 5 bis 7 für die drei verschiedenen Codes DuMu^x, d³f++ und SPRING

Alle Fälle verwenden dieselbe Dispersion (0,1 m), denselben Diffusionskoeffizienten $1\text{E-}9\text{ m}^3\text{ s}^{-1}$ und unterscheiden sich in den Sorptionskoeffizienten.

Blaue Kurve: $1\text{E-}5\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; orangene Kurve: $1\text{E-}4\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; graue Kurve: $1\text{E-}3\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$.

Mit einer Erhöhung der Dispersionslängen um das Zehnfache kommt es zu stärkeren Differenzen zwischen den Durchbruchkurven von d³f++ und SPRING gegenüber denen von DuMu^x. Die Konzentrationsmaxima treten in DuMu^x geringfügig früher auf und weisen geringere Konzentrationen auf (siehe Abb. 3.9). Für d³f++ und SPRING liegen die Peaks bei $0,12\text{ kg kg}^{-1}$, für DuMu^x bei $0,05\text{ kg kg}^{-1}$. Der Effekt der Unterschiede in der Dispersion nimmt demnach bei zunehmender Dispersionslänge weiter zu. Bei allen Codes wird die Durchbruchskurve mit höherer Dispersion breiter und flacher. Bei DuMu^x scheint der Effekt mit kleiner Gitterweite und größeren Dispersionslängen stärker auszufallen. Dabei ist zu betonen, dass die Dispersionslängen von einem Meter bei einer Gitterweite von 1 cm im Bodenmodell sehr hoch ist und diese Dispersionslänge hier als generische und nicht physikalisch realistische Größe anzusehen ist.

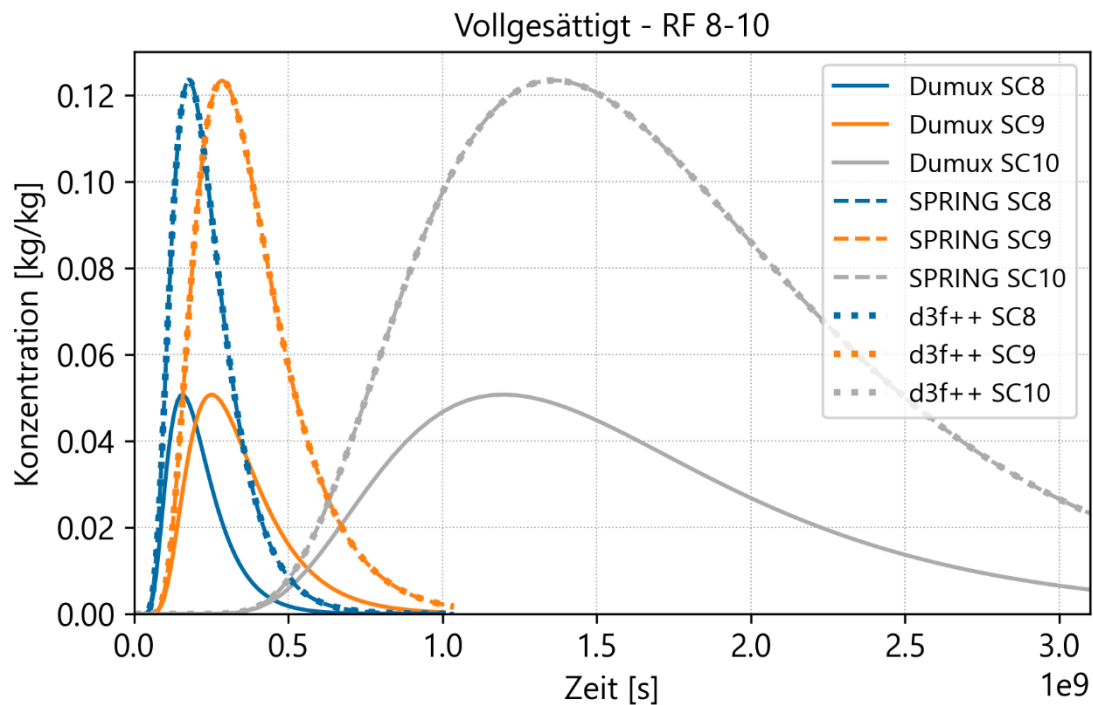


Abb. 3.9 Konzentrationsdurchbruchkurven für die Rechenfälle 8 bis 10 für die drei verschiedenen Codes DuMu^x, d³f++ und SPRING

Alle Fälle verwenden dieselbe Dispersion (1 m), denselben Diffusionskoeffizienten $1\text{E-}9\text{ m}^2\text{ s}^{-1}$ und unterscheiden sich in den Sorptionskoeffizienten.

Blaue Kurve: $1\text{E-}5\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; orangene Kurve: $1\text{E-}4\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; graue Kurve: $1\text{E-}3\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$

Die Rechenfälle 11 bis 20 sind Berechnungen des Bodenmodells mit ungesättigten Bedingungen. Wie bei den gesättigten Berechnungen sind die Tendenzen der Durchbruchkurven gleich (siehe Abb. 3.10). Es ist ein zeitlicher Versatz der Konzentrationsmaxima zwischen den Codes vorhanden. Der zeitliche Versatz ist im Rahmen der Modellgröße und des Simulationszeitraums vernachlässigbar gering. Der Ursprung dieses Versatzes liegt möglicherweise in der Implementierung des ersten Zeitschrittes für die ungesättigte Strömungsberechnung. DuMu^x berechnet für den ersten Zeitschritt Geschwindigkeit und Sättigung zur Berechnung des Richards-Modells aus. In d³f++ und SPRING geht der Transportberechnung eine instationäre Strömungsberechnung bis zum stationären Zustand voraus, dessen Ergebnisse die Anfangsbedingungen für die Transportberechnung darstellen. Diese Unterschiede in den Randbedingungen erschweren den optimalen Vergleich der Ergebnisse.

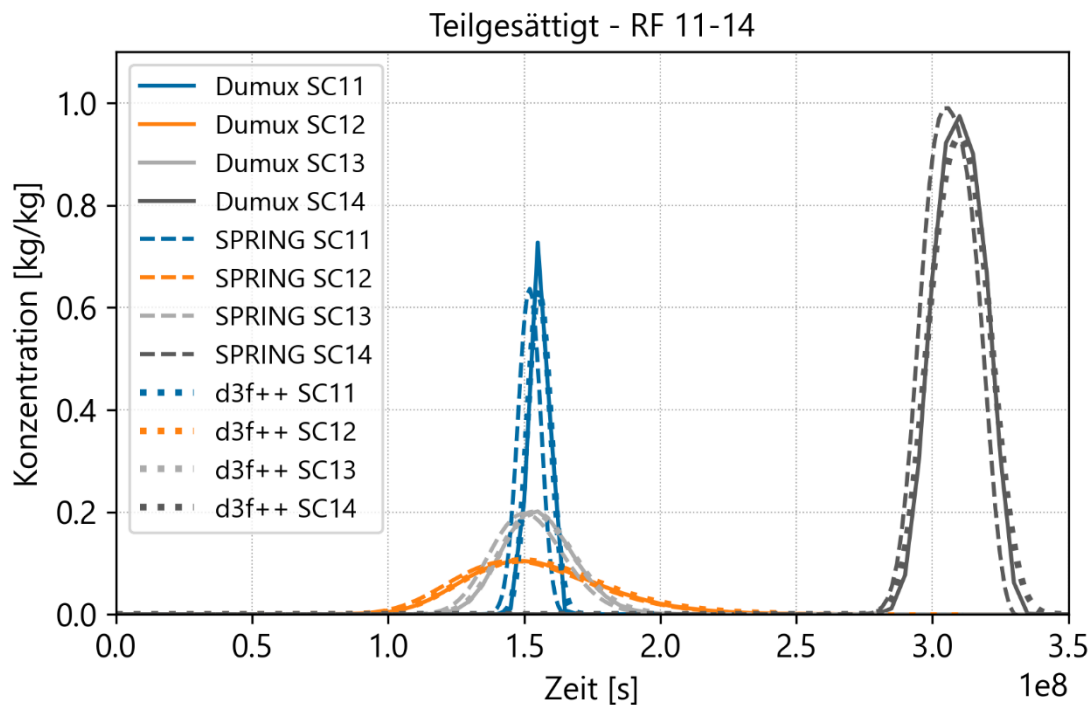


Abb. 3.10 Konzentrationsdurchbruchkurven für die Rechenfälle 11 bis 14 mit ungesättigter Zone für die drei verschiedenen Codes DuMu^x, d³f++ und SPRING

Blaue Kurve: advektiver Transport; orangene Kurve: Advektion und Dispersion; graue Kurve: Advektion und Diffusion; schwarze Kurve: Advektion und Sorption

Die Konzentrationsmaxima sind im Modell mit ungesättigter Zone gegenüber den Berechnungen im vollgesättigten Modell, in Abhängigkeit vom Sorptionskoeffizienten, geringer (siehe Abb. 3.11). Mit dem Sorptionskoeffizienten $1\text{E-}3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$, bei dem zu Beginn der Berechnung viel Material am Boden adsorbiert ist, sind geringere Unterschiede in den Konzentrationen zu sehen als bei geringeren Sorptionskoeffizienten. Je geringer die Sorption, desto geringer die am Boden anhaftende Stoffmasse, die durch das Modell transportiert werden kann. Die hohe Sorption gleicht die geringere Stoffmasse entsprechend der geringeren Sättigung wieder aus. Bei geringerer Sorption liegen die Konzentrationen anstatt $0,27 \text{ kg kg}^{-1}$ bei $0,2 \text{ kg kg}^{-1}$ mit $1\text{E-}4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ oder $0,11 \text{ kg kg}^{-1}$ mit $1\text{E-}5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Für den Rechenfall mit Sorptionskoeffizienten $1\text{E-}3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ wird in DuMu^x eine höhere Konzentration im ungesättigten Fall im Vergleich zum gesättigten Fall berechnet. Diese Tendenz ist für d³f++ und SPRING nicht erkennbar. Mit $1\text{E-}4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ und $1\text{E-}5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ gleichen sich die Konzentrationskurven von DuMu^x, d³f++ und SPRING und weichen nicht voneinander ab, wie es im gesättigten Modell der Fall war.

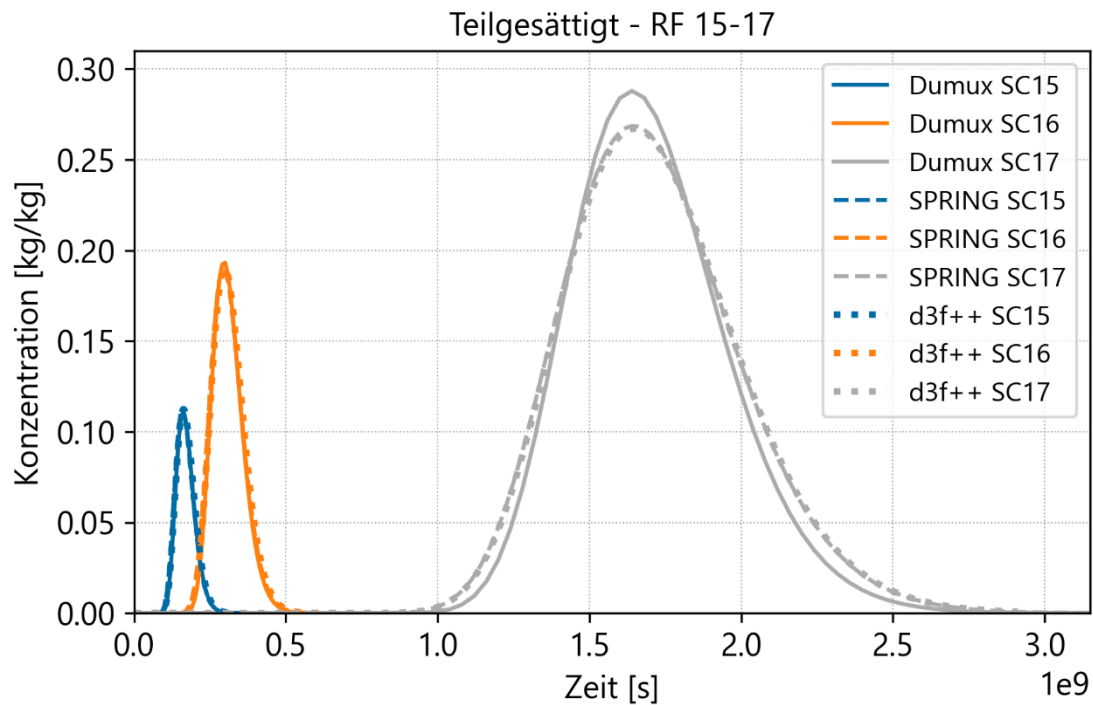


Abb. 3.11 Konzentrationsdurchbruchkurven für die Rechenfälle 15 bis 17 mit ungesättigter Zone für die drei verschiedenen Codes DuMu^x, d³f++ und SPRING

Alle Fälle verwenden dieselbe Dispersion (0,1 m), denselben Diffusionskoeffizienten $1\text{E-}9\text{ m}^2\text{ s}^{-1}$ und unterscheiden sich in den Sorptionskoeffizienten.

Blaue Kurve: $1\text{E-}5\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; orangene Kurve: $1\text{E-}4\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; graue Kurve: $1\text{E-}3\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$

Entsprechend der höheren Dispersionslänge sind die Konzentrationen in DuMu^x erneut geringer gegenüber den Konzentrationen aus den Berechnungen mit d³f++ und SPRING, wie es bereits in den gesättigten Berechnungen (Rechenfälle 8 bis 10) der Fall war. Die zuvor genannten Tendenzen bleiben auch in den Rechenfällen 18 bis 20 bestehen (siehe Abb. 3.12). Die Konzentrationsmaxima liegen hier bei DuMu^x etwa 10 % unterhalb der Berechnungen mit SPRING und d³f++. Die Zeitpunkte der Maximalkonzentrationen stimmen überein.

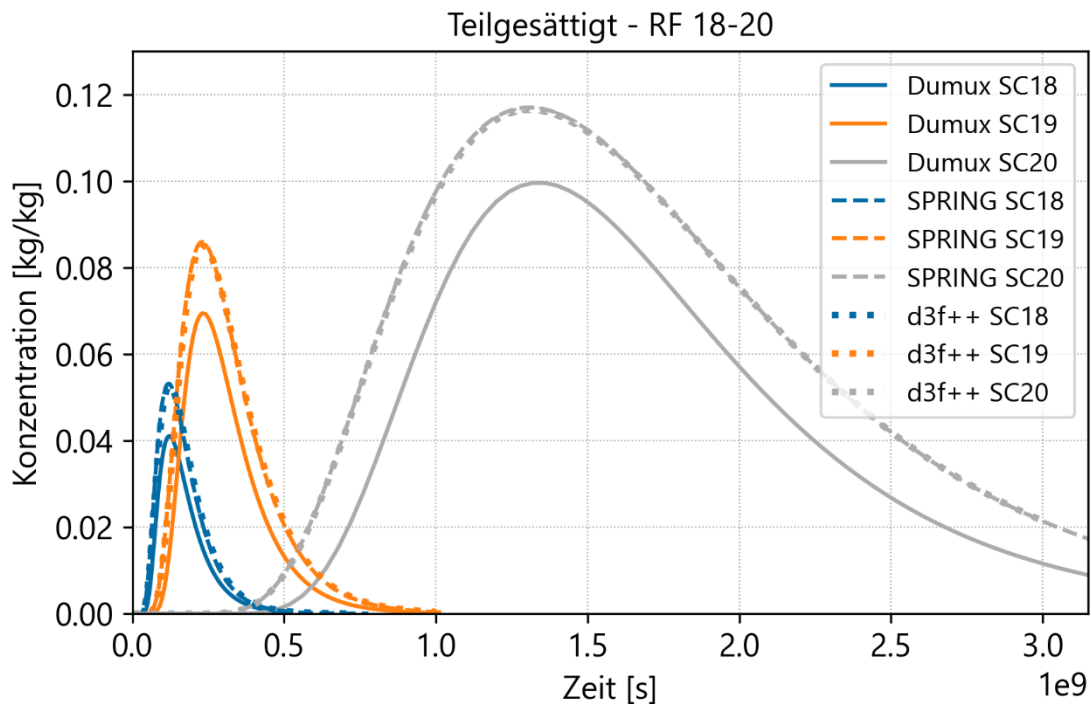


Abb. 3.12 Konzentrationsdurchbruchkurven für die Rechenfälle 18 bis 20 mit ungesättigter Zone für die drei verschiedenen Codes DuMu^x, d³f++ und SPRING

Alle Fälle verwenden dieselbe Dispersion (1 m), denselben Diffusionskoeffizienten $1\text{E-}9\text{ m}^2\text{ s}^{-1}$ und unterscheiden sich in den Sorptionskoeffizienten.

Blaue Kurve: $1\text{E-}5\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; orangene Kurve: $1\text{E-}4\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$; graue Kurve: $1\text{E-}3\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}$

Insgesamt zeigen die Berechnungen gute Übereinstimmungen der Ergebnisse. d³f++ und SPRING weisen für das Bodenmodell für alle Rechenfälle nahezu identische Ergebnisse auf. Die Ergebnisse aus DuMu^x zeigen ebenfalls gute Übereinstimmungen zu den anderen beiden Codes, aber es gibt Unterschiede in den maximalen Konzentrationen durch einen höheren Dispersionsanteil, der die Durchbruchkurve zusätzlich abflacht. Im Projektverlauf konnte in DuMu^x der Grund für den höheren Dispersionsanteil nicht gefunden werden. Dieser Effekt tritt zwar in fast allen Rechenfällen auf, ist jedoch nur wesentlich in Rechenfällen, bei denen die Dispersionslänge im Verhältnis zur Gitterweite zu hoch ist. Neben dem Unterschied durch die Dispersion war eine weitere Schwierigkeit beim Vergleichen der Codes die Definition der gleichen Anfangs- und Randbedingungen. Durch die unterschiedlichen Umsetzungen der stationären und instationären Zustände im Modell konnten in den ungesättigten Fällen nicht immer die identischen Anfangsbedingungen angenommen werden.

3.3.1.3.3.2 Deponiemodell

Im Deponiemodell werden die Durchbruchskurven an vier Koordinaten verglichen. Die ersten beiden Punkte befinden sich mittig unterhalb des Deponiekörpers direkt oberhalb und unterhalb der geologischen Barriere (Koordinaten: 200/37,25 und 200/36,25), um die Barrierewirkung zu untersuchen. Ein Punkt befindet sich im nahgelegenen Abstrom der Deponie (Koordinaten: 440/21,6), und ein weiterer Punkt liegt von der Mitte der Deponie aus betrachtet in 500 m Entfernung von der Deponie (Koordinaten: 707/14). Unterschiede in den Strömungs- und Transportprozessen und deren Implementierung wurden bereits im Bodenmodell betrachtet, so dass hier von Rechenfällen ohne Dispersion und Diffusion abgesehen wurde. Die Rechenfälle unterscheiden sich durch die variierenden Sorptionskoeffizienten, repräsentativ für das Sorptionsverhalten verschiedener Radionuklide, und der Veränderung der Dispersionslängen. Da die Dispersion im Bodenmodell deutliche Auswirkungen auf die Konzentrationskurven hatte, soll der Einfluss auch im Deponiemodell untersucht werden.

Rechenfall 1 berücksichtigt Advektion, Dispersion und Diffusion. Es wird keine Sorption betrachtet, und der Sorptionskoeffizient beträgt $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Der Tracer wird durch die angenommene Grundwasserversickerung zur Basis der Deponie in Richtung der Entwässerungsschicht und der geologischen Barriere transportiert. Die Konzentration steigt im Bereich der geologischen Barriere schnell auf die Anfangskonzentration innerhalb der Deponie von 1 kg kg^{-1} an (siehe Abb. 3.13). Ohne Sickerwasserentnahme im Modell wird das auf der Deponieoberfläche versickernde Wasser durch den Deponiekörper in Richtung des Grundwassers gedrückt und der Transport in den Grundwasserleiter durch die geologische Barriere nur verzögert. Der Transport durch die ein Meter mächtige geologische Barriere kann als konservativ angesehen werden. Mit geringerer Versickerungsrate und der Ableitung von Sickerwasser würde die Konzentration im Grundwasser deutlich geringer sein /ART 20/. An P3 wurde der Tracer bereits durch die ungesättigte Zone und Teile des Aquifers transportiert. Nach etwas mehr als elf Jahren beträgt die Konzentration bei d^{3f++} und SPRING $0,54 \text{ kg kg}^{-1}$, bei DuMu^x beträgt die maximale Konzentration $0,234 \text{ kg kg}^{-1}$. Bei SPRING ist, wie bei den ungesättigten Rechenfällen des Bodenmodells, ein geringfügiger zeitlicher Versatz bei den Peaks zu erkennen. Der Stofftransport durch die geologische Barriere und den Aquifer ist in d^{3f++} etwas schneller, so dass die Konzentrationsmaxima von d^{3f++} und DuMu^x etwa zu gleicher Zeit auftreten. Bei SPRING ist das Konzentrationsmaxima zeitlich etwa anderthalb Jahre später an Beobachtungspunkt P3. SPRING rechnet ohne Upwind-Verfahren, wohingegen in d^{3f++} eine Stabilisierung durch Upwind partiell oder ganz dazugeschaltet werden kann.

DuMu^x konvergiert ohne Upwind-Verfahren nur mit kleinen Zeitschrittweiten, so dass hier das Upwind-Verfahren genutzt wurde. In weiteren Berechnungen mit d^{3f++} wurde ebenfalls mit Upwind gerechnet, um den Einfluss von Upwind-Verfahren auf die Ergebnisse zu prüfen. Die Ergebnisse werden in der Abbildung nicht gezeigt, gleichen sich aber an die Ergebnisse von DuMu^x an. Ohne Sickerwasserentnahme im Modell wird das auf der Deponieoberfläche versickernde Wasser durch den Deponiekörper in Richtung des Grundwassers gedrückt und der Transport in den Grundwasserleiter durch die geologische Barriere nur verzögert. Der Transport durch die ein Meter mächtige geologische Barriere kann als konservativ angesehen werden. Mit geringerer Versickerungsrate und der Ableitung von Sickerwasser würde die Konzentration im Grundwasser deutlich geringer sein /ART 20/. An P3 wurde der Tracer bereits durch die ungesättigte Zone und Teile des Aquifers transportiert. Nach etwas mehr als elf Jahren beträgt die Konzentration bei d^{3f++} und SPRING 0,54 kg kg⁻¹, bei DuMu^x beträgt die maximale Konzentration 0,38 kg kg⁻¹. Bei d^{3f++} ist ein geringfügiger zeitlicher Versatz bei den Peaks zu erkennen. Der Stofftransport durch die geologische Barriere und den Aquifer ist in d^{3f++} etwas schneller, so dass die Konzentrationsmaxima von SPRING und DuMu^x etwa zu gleicher Zeit auftreten. Bei d^{3f++} ist das Konzentrationsmaxima zeitlich etwa anderthalb Jahre früher an Beobachtungspunkt P3. SPRING rechnet ohne Upwind-Verfahren, wohingegen in d^{3f++} eine Stabilisierung durch Upwind partiell oder ganz dazugeschaltet werden kann. DuMu^x konvergiert ohne Upwind-Verfahren nur mit kleinen Zeitschrittweiten, so dass hier das Upwind-Verfahren genutzt wurde. In weiteren Berechnungen mit d^{3f++} wurde ebenfalls mit Upwind gerechnet, um den Einfluss von Upwind-Verfahren auf die Ergebnisse zu prüfen. Die Ergebnisse werden in der Abbildung nicht gezeigt, gleichen sich aber an die Ergebnisse von DuMu^x an. Die in Abb. 3.13 gezeigten Unterschiede können demnach auf die stärkere Dispersion und das zusätzliche Upwind-Verfahren in DuMu^x zurückgeführt werden. An Beobachtungspunkt P4 wird der zeitliche Versatz der Maximalkonzentration stärker. Das Konzentrationsmaximum wird bei d^{3f++} zuerst erreicht, etwa drei Jahre vor dem Peak in SPRING. Insgesamt gleichen sich die Konzentrationen der drei Codes mit größerer Distanz zur Deponie aneinander an. Der Tracer verteilt sich durch die verschiedenen Transportmechanismen zunehmend im Grundwasser und reduziert die maximale Konzentration im Abstrom.

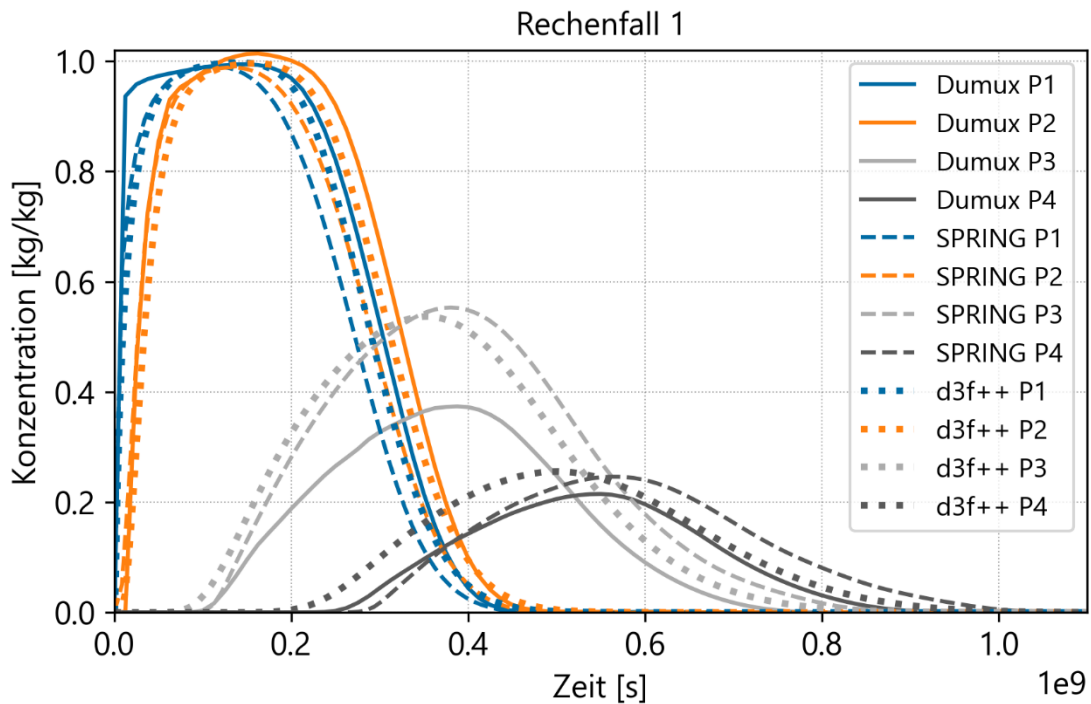


Abb. 3.13 Konzentrationsdurchbruchkurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 1

Bei Rechenfall 2 wird der Sorptionskoeffizient im gesamten Modellgebiet auf $1\text{E-}5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ erhöht. Auf die Konzentrationsdurchbruchkurven hat der höhere Sorptionskoeffizient nur einen geringen Einfluss (siehe Abb. 3.14). Die Konzentrationskurve ober- und unterhalb der geologischen Barriere zeigt für einen längeren Zeitraum die maximale Konzentration von 1 kg kg^{-1} , und die Transportzeit durch die geologische Barriere ist länger. An den Beobachtungspunkten P3 und P4 liegen die Punkte der höchsten Konzentration später, verglichen mit den Berechnungen ohne Sorption. Die Verhältnisse der Kurvenverläufe unter den Codes bleiben bestehen. d³f++ zeigt tendenziell etwas frühere Peaks, DuMu^x geringere Konzentrationen an Beobachtungspunkt P3. Die Konzentrationsverläufe bei den Beobachtungspunkten P1, P2 und P4 zeigen gute Übereinstimmungen mit geringen zeitlichen Versätzen. Insgesamt sind höhere Konzentrationen in allen Codes gegenüber den Berechnungen ohne Sorption zu sehen.

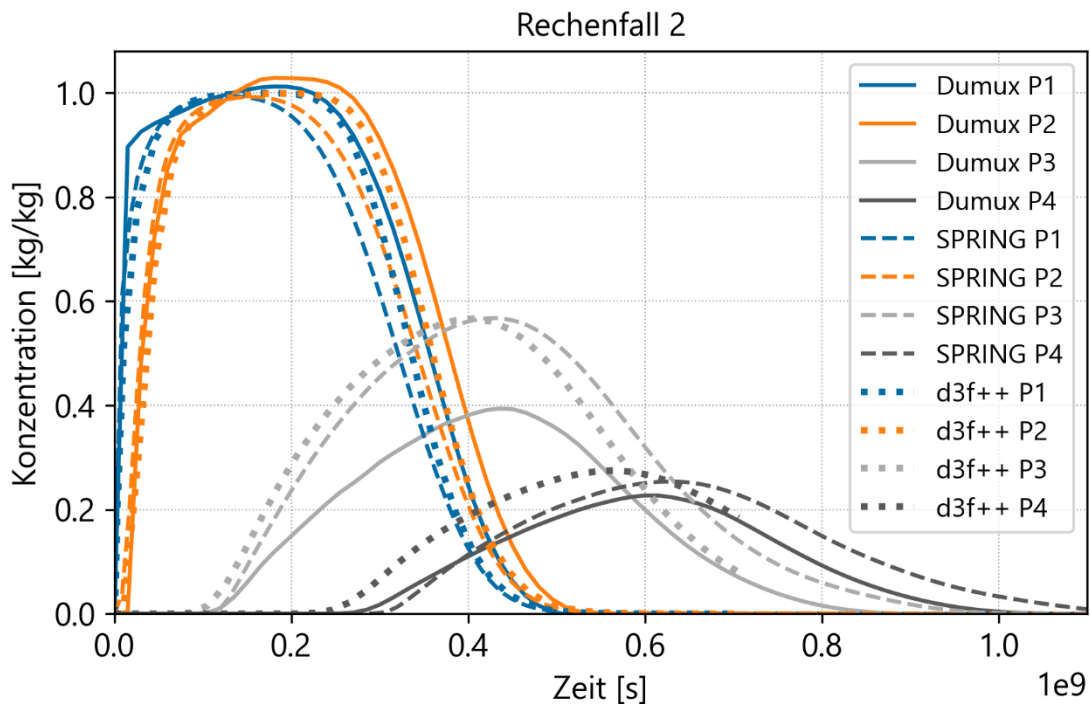


Abb. 3.14 Konzentrationsdurchbruchkurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 2

Bei Rechenfall 3 wird der Sorptionskoeffizient im gesamten Modellgebiet auf $1\text{E-}4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ erhöht. Die Erhöhung des Sorptionskoeffizienten führt zu einer sichtbaren Verzögerung des Stofftransports in der Deponie und im Aquifer (siehe Abb. 3.15). An den Beobachtungspunkten P1 und P2 bilden sich für SPRING und d^{3f++}, aufgrund des Rückhalts durch die Sorption, Plateaus bei einer Konzentration von 1 kg kg^{-1} aus. In DuMu^x steigt die Konzentration kurzzeitig auf mehr als 1 kg kg^{-1} , da nachströmende Stoffmasse sich an den Beobachtungspunkten akkumuliert. Der Konzentrationsverlauf ist aber sehr ähnlich zu d^{3f++} und SPRING. Für SPRING sind in den Konzentrationskurven Oszillationen an den Beobachtungspunkten P1 und P2 unterhalb der Deponie zu erkennen, die in DuMu^x und d^{3f++} nicht vorhanden sind und auf fehlende numerische Stabilität ohne Upwindverfahren zurückzuführen sind. Bei Beobachtungspunkt P3 zeigt DuMu^x geringere Konzentrationen im Simulationszeitraum gegenüber SPRING und d^{3f++} auf und folgt damit dem Trend der Rechenfälle 1 und 2. An Beobachtungspunkt P4 nähern sich die Konzentrationen aller drei Codes aneinander an und liegen zwischen $0,25$ und $0,29 \text{ kg kg}^{-1}$. In d^{3f++} wird die höchste Konzentration als erstes erreicht, gefolgt von DuMu^x nach etwa $1,1\text{E}+8$ Sekunden und SPRING nach $1,2\text{E}+8$ Sekunden. Die Radionuklide werden etwa halb so schnell transportiert, wie mit $1\text{E-}5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ oder ohne Sorption.

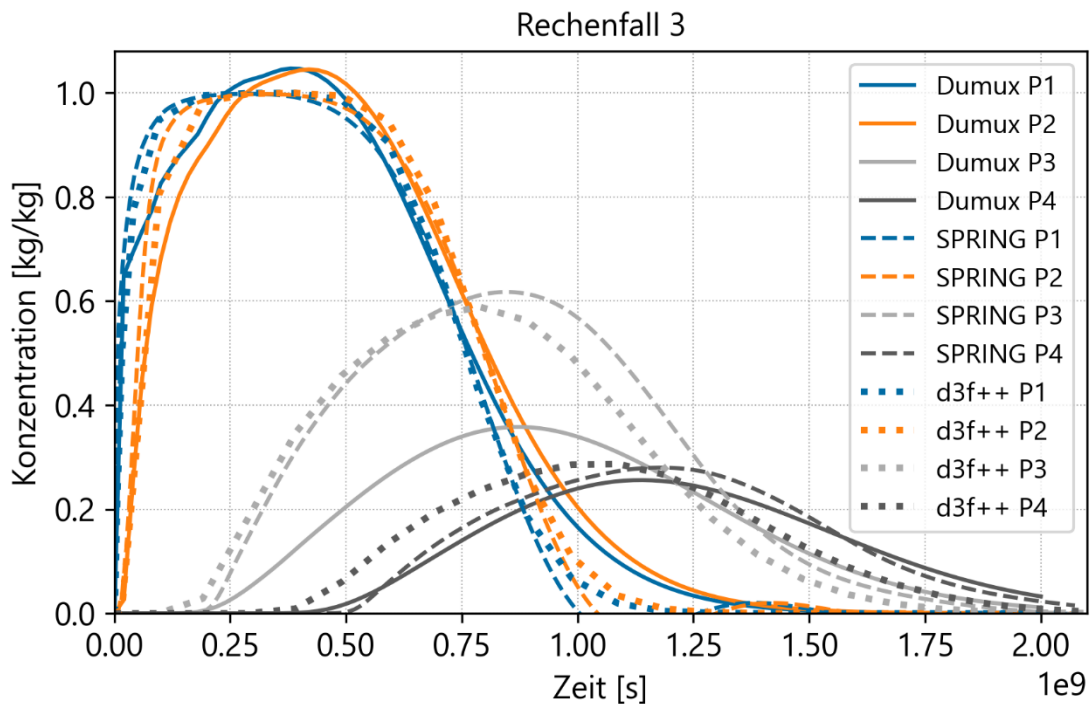


Abb. 3.15 Konzentrationsdurchbruchkurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 3

In den Rechenfällen 4 bis 6 wird gegenüber den Rechenfällen 1 bis 3 die Dispersionslänge von 0,1 m auf 1 m erhöht. Im Bodenmodell stellt eine Dispersionslänge von 1 m im Verhältnis zur Gitterweite einen hohen Wert dar, im Deponiemodell kann dieser Wert durchaus realistisch sein. Mit einer höheren Dispersion kommt es zu einer schnelleren Konzentrationsverteilung in allen Modellschichten. In keinem der Codes wird an den vier Beobachtungspunkten eine maximale Konzentration von 1 kg kg^{-1} erreicht.

Im Rechenfall 4 zeigt DuMu^x die höchsten Konzentrationen an den Beobachtungspunkten P1 und P2 und einen langsameren Austrag aus der Deponie in den Grundwasserleiter, entsprechend des weniger steilen Konzentrationsverlaufes gegenüber SPRING und d^{3f++} (siehe Abb. 3.16). Diese Codes weisen an den Modellpunkten P1 und P2 geringere Konzentrationen gegenüber DuMu^x auf. Die Ursache können die Unterschiede in den Anfangsbedingungen der Sättigung sein, die durch die unterschiedlichen Modellansätze verursacht wird. Der Konzentrationsverlauf ist bei den beiden Codes SPRING und d^{3f++} identisch. Im Abstrom sind die Konzentrationsverläufe aller Codes leicht unterschiedlich mit einem früheren Peak in d^{3f++} und der höchsten Konzentration von SPRING. d^{3f++} zeigt in den Berechnungen häufig den schnellsten Transport durch die ungesättigte Zone unterhalb der Deponie in das Grundwasser. An den

Beobachtungspunkten P3 und P4 führt die größere Dispersionslänge zu einer Angleichung der Konzentrationen der verschiedenen Rechencodes gegenüber den Rechenfällen 1 bis 3.

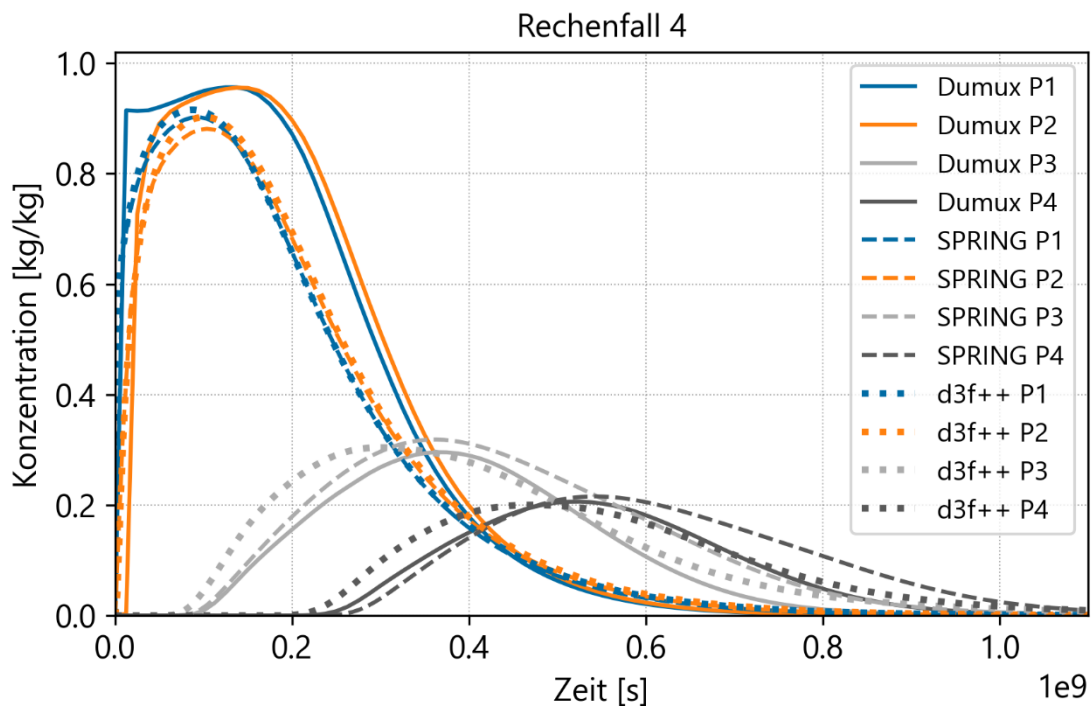


Abb. 3.16 Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 4

In Rechenfall 5 sind die Konzentrationen für die Beobachtungspunkte P1 und P2 für die Codes SPRING und d^{3f++} in etwa gleich. Die Konzentrationsdurchbruchskurven von DuMu^x liegen über denen der anderen beiden Codes (siehe Abb. 3.17). Die Verlaufskurven der drei Rechencodes stimmen für diesen Rechenfall an den Beobachtungspunkten P1 und P2 sehr gut überein. Bei DuMu^x sinkt die Konzentration, wie bereits bei Rechenfall 4, langsamer ab, verglichen mit SPRING und d^{3f++}. Der Tracer wird langsamer durch die Entwässerungsschicht und die geologische Barriere transportiert.

Die Ergebnisse des Rechenfalls 5 zeigen für den Zeitpunkt der Konzentrationsmaxima keine deutlichen Unterschiede verglichen mit Rechenfall 2 auf. Die Dispersion hat nur geringen Einfluss auf den Zeitpunkt des Peaks. Die Dispersionslänge hat jedoch einen Einfluss auf die Konzentrationsverteilung und die Höhe der Konzentration. Durch die stärkere Dispersion wird der Tracer stärker mit dem Frischwasser vermischt. An Beobachtungspunkt P3 halbiert sich die maximale Konzentration fast im Vergleich zu Rechenfall 2, bei Beobachtungspunkt P4 ist der Effekt geringer. Bei einer geringeren Dispersionslänge vermischt sich das Frischwasser im Grundwasser weniger schnell als mit

größerer Dispersionslänge, so dass bei P3 die Vermischung für Rechenfall 2 noch nicht so stark ausgeprägt ist, wie bei Rechenfall 5. Durch den Transport im Grundwasser vermischt sich der Tracer zunehmend mit dem Frischwasser und bei P4 ist die Vermischung so weit fortgeschritten, dass die unterschiedlichen Dispersionslängen keinen wesentlichen Unterschied machen.

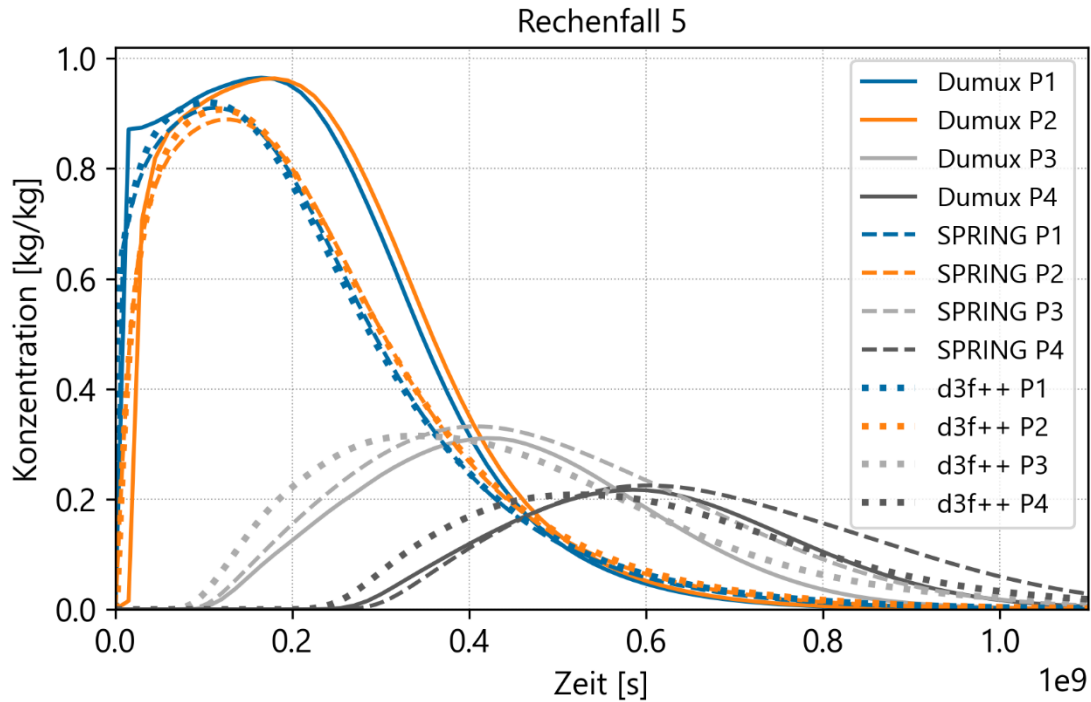


Abb. 3.17 Konzentrationsdurchbruchkurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 5

Rechenfall 6 zeigt, wie die anderen Rechenfälle mit größerer Dispersionslänge, eine geringere Maximalkonzentration an den Beobachtungspunkten P1 und P2 auf (siehe Abb. 3.18). Auch die für die Rechenfälle 4 und 5 beschriebenen Trends der verschiedenen Codes zueinander bleiben für diesen Rechenfall bestehen. Wie auch zwischen Rechenfall 2 und 5 kommt es auch von Rechenfall 3 zu 6 zu einer deutlichen geringeren Maximalkonzentration an P3 mit einem leichten Versatz des Zeitpunktes des Konzentrationsmaximums. Der Tracer erreicht durch die stärkere Vermischung früher den Konzentrationspeak.

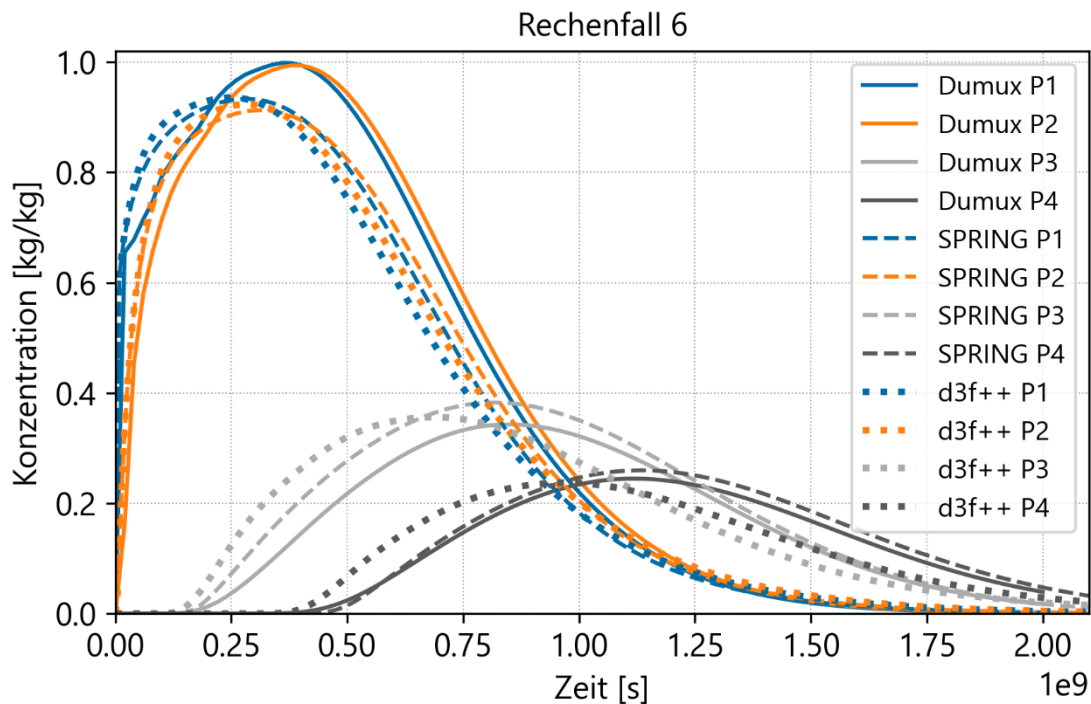


Abb. 3.18 Konzentrationsdurchbruchkurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 6

3.3.1.3.4 Fazit Grundwasserpfad

In diesem Arbeitspaket wurden numerische Grundwassermodellierungen durchgeführt. Es wurden ein Bodenmodell und ein Deponiemodell aufgesetzt. Da bisher nur sehr geringe Mengen anfallender Rückbauabfälle auf Deponien eingebracht wurden, gibt es keine Möglichkeit zur Kalibrierung oder Validierung der numerischen Modelle. Aus diesem Grund wurden die drei Rechencodes d^{3f++}, DuMu^x und SPRING miteinander verglichen, um das Vertrauen in numerische Modellierungen zu stärken und gegebenenfalls Unterschiede in der Implementierung von Stofftransportprozessen zu identifizieren. Es wurden zusätzlich Parametervariationsrechnungen für die zwei Modelle durchgeführt, um die Auswirkungen der Parameterveränderungen auf die Stoffkonzentration zu untersuchen.

Die Gleichungssysteme für die Strömung- und Transportprozesse wurden erfolgreich miteinander verglichen. Es wurden Unterschiede für die Beschreibung der Sorption und der Tortuosität im Diffusionsterm identifiziert, die für die Vergleichsrechnungen in DuMu^x angepasst wurden. Nach Anpassungen dieser zwei Parameter zeigen die Modellrechnungen eine stärkere Dispersion in DuMu^x, dessen Ursprung nicht identifiziert werden konnte. Dennoch zeigen die Durchbruchkurven für beide Modelle gute Übereinstimmung.

mungen für alle drei numerischen Rechencodes. Die Stofftransportprozesse der Advektion, der Diffusion, der Sorption und des Zerfalls werden alle mathematisch gleich umgesetzt.

Die Transportzeiten von kontaminiertem Boden und aus einer Deponie ins Grundwasser sind vor allem von der potenziellen Sorptionsfähigkeit der Radionuklide abhängig. Transportparameter wie die Diffusion spielten in den Berechnungen eine geringere Rolle. Die Dispersion steht eher im Bezug zur Gitterweite und Modellgröße und muss daran angepasst werden. Die Materialeigenschaften und die zu betrachtenden Radionuklide haben großen Einfluss auf das Transportverhalten. Die Schwierigkeit besteht in der Bestimmung der Sorptionskoeffizienten für die Radionuklide. In den hier gezeigten Modellrechnungen wurden verschiedene Sorptionskoeffizienten angewandt, um mögliche Auswirkungen auf die Transportzeiten aufzuzeigen, wobei der Fokus der Rechnungen der Vergleich der Codes untereinander ist. Für diesen Vergleich kann ein positives Fazit gezogen werden. Die Konzentrationen befinden sich im Bereich einer Größenordnung, und die Prozesse, die die Abweichungen verursachen, konnten identifiziert werden. Die Arbeiten haben auch gezeigt, dass ein Codevergleich mit einem vermeintlich einfachen Gitter notwendig ist, um Unterschiede in den Codes sicher identifizieren zu können, die in komplexeren Modellen durch unterschiedliche Prozesse verwaschen werden könnten. Die Berechnungen erhöhen die Robustheit numerischer Codes als Grundlage für die Konzentrationsberechnung des Grundwasserpfades zur Dosisberechnung. Analytische Modelle sind einfacher nachzuvollziehen, bilden die Realität aber ungenauer ab. Mit diesen Arbeiten sollte/konnte gezeigt werden, dass auch numerische Modelle für Konzentrationsberechnung des Grundwasserpfades geeignet sind, es aber für eine einheitliche Berechnungsgrundlage klarer Parameterbeschreibungen und Anfangs- und Randbedingungen für ein mögliches Modell bedarf.

3.3.2 Überprüfung externer Eingabewerte

Der Arbeitspunkt 3.2 „Überprüfung externer Eingabewerte“ wurde im Rahmen der Ausführungen im Kap. 3.3.1.3 behandelt und dort näher erläutert. In diesem Zusammenhang wurden verschiedene Grundwassermodelle geprüft, die externe Daten für die Freigabeberechnung bereitstellen. Ziel dieser Überprüfung war es, die Qualität, Nachvollziehbarkeit und Konsistenz der von diesen Modellen gelieferten Eingabewerte sicherzustellen. Dabei wurde insbesondere geprüft, ob die Modellansätze und Berechnungsverfahren geeignet sind, verlässliche und konsistente Daten für die weitere Verarbeitung im Freigabemodell bereitzustellen. Der fachliche Austausch zu den Ergebnissen dieser Über-

prüfung sowie zur Einbindung der Daten in den Berechnungsprozess ist im vorangegangenen Abschnitt ausführlich dargestellt. Auf diese Weise konnte sichergestellt werden, dass die externen Eingabewerte auf einer belastbaren methodischen Grundlage basieren und die anschließende Freigabeberechnung fundiert unterstützt wird.

3.3.3 Berechnung Freigabewerte und Auswertung

In diesem Kapitel wird eine spezifische Freigabeoption definiert und auf Basis generischer Szenarien im Sinne des unter Arbeitspaket 1 (siehe Kap. 3.1.3) entwickelten Berechnungsinstruments beschrieben. Dabei werden sämtliche für die Berechnung relevanten Parameter identifiziert, erfasst und im Anhang A.1 dokumentiert. Anschließend erfolgt die exemplarische Berechnung von Freigabewerten mithilfe des im Arbeitspaket 2 (siehe Kap. 3.2) umgesetzten Berechnungsinstruments. Anhand ausgewählter Beispiele wird die Funktionalität und Anwendbarkeit des Berechnungswerkzeugs demonstriert und überprüft.

3.3.3.1 Freigabeoption, Szenarienauswahl und Parameterwertfestlegung

Für die beispielhafte Berechnung exemplarischer Freigabewerte wurde in Anlehnung an die StrlSchV, Anlage 4, Tabelle 1, Spalten 9 und 11, eine vereinfachte, fiktive spezifische Freigabeoption „Abfallverbrennung“ (im Berechnungsinstrument als Substance Combustion bezeichnet) zusammengestellt. Diese Freigabeoption berücksichtigt sowohl die Exposition von Arbeitern (Worker) als auch der Bevölkerung (Resident), umfasst mehrere generische Szenarien (GenericA) und greift dabei zudem auf externe Ergebniswerte (DARTM) zurück. Im Folgenden werden die einzelnen Expositionspfade, die zugehörigen Datenblätter (siehe Tab. 3.28) sowie gegebenenfalls abweichende Parameterannahmen aufgeführt (siehe Tab. 3.29).

In der zusammengestellten spezifischen Freigabeoption „Abfallverbrennung“ werden folgende Szenarien betrachtet (siehe Tab. 3.27).

Tab. 3.27 Ausgewählte Szenarien für die fiktive spezifische Freigabeoption „Abfallverbrennung“

scenario name	based on	exposed person	pathways
transport	GenericA	worker	external radiation
entranceWIP	GenericA	worker	external radiation inhalation
wasteBunker	GenericA	worker	external radiation
slagBunker	GenericA	worker	external radiation inhalation
dustBunker	GenericA	worker	external radiation inhalation
slagRoadPathConstructionWorker	GenericA	worker	external radiation inhalation
slagRoadPathConstructionResident	GenericA	Resident	external radiation
stayBesidesProduct	GenericA	worker	external radiation
SpezialL1	extern	Resident	extern
SpezialL2	extern	Resident	extern
SpezialL3	extern	Resident	extern

Infolge der im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhaben verfügbaren externen DARTM-Berechnungen, welche in der fiktiv gewählten Freigabeoption „Abfallverbrennung“ einbezogen werden, wurden die Berechnungen der Freigabewerte für die folgenden zehn Radionuklide durchgeführt: Ag-108m+, Ba-133, Cl-36, Co-60, Cs-137, I-129, Mn-54, Ni-59, Sr-90+ und Tc-99.

Tab. 3.28 Verwendete Datenblätter und zugeordnete Expositionspfade

Name Datenblatt	Expositionspfad	Bemerkung
Dilution_factor.csv	- ext. Strahlenexposition - Inhalation - Ingestion	f_d = Datenblatt
Conversion_factor.csv	- ext. Strahlenexposition - Inhalation - Ingestion	c = Datenblatt
Strlschv_2023_anl4_tab1_half-life.csv	- ext. Strahlenexposition - Inhalation - Ingestion	λ (Umrechnung)
Decay_before_scenario.csv	- ext. Strahlenexposition - Inhalation - Ingestion	t_1 = spezifisch
Decay_during_scenario.csv	- ext. Strahlenexposition - Inhalation - Ingestion	t_2 = spezifisch
Time_Exposure_default.csv	- ext. Strahlenexposition - Inhalation	t_e = spezifisch
Concentration_factor.csv	- Inhalation - Ingestion	f_c = Datenblatt
Dose_coefficients_external_THI04_mass.csv	- ext. Strahlenexposition	d_{ext} = spezifisch
Dose_coefficients_inhalation_thi99.csv	- Inhalation	d_{inh} = spezifisch
Dust_concentration.csv	- Inhalation	C_{dust} = Datenblatt
Breathing_rate.csv	- Inhalation	br = Datenblatt
Mass_ingestion.csv	- Ingestion	M = Datenblatt
Result_DARTM_SpezL1.csv	- ext. Strahlenexposition	extern
Result_DARTM_SpezL2.csv	- Inhalation	extern
Result_DARTM_SpezL3.csv	- Ingestion	extern

In Tab. 3.29 werden die von den Datenblättern abweichenden Parameterwerte für die einzelnen spezifischen Szenarien dargestellt.

Tab. 3.29 Spezifische Annahmen für die einzelnen spezifischen Szenarien

Spezifisches Szenario	Expositionspfad	Bemerkung
Transport (worker) – GenericA	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie A /THI 04/}$ $t_e = 30 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 1 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 1 \text{ d /SSK 06/}$
	Inhalation	entfällt in Betrachtung
EntranceWIP (worker)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie B /THI 04/}$ $t_e = 3 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 1 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 1 \text{ d /SSK 06/}$
	Inhalation	$f_d = 1 \text{ (konservativ)}$ $f_c = 10 \text{ /THI 04/}$ $c_{\text{dust}} = 0,0002 \text{ g/cm}^3 \text{ /SSK 06/}$ $t_e = 3 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 1 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 0 \text{ d /SSK 06/}$
Wastebunker (worker)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie F /THI 04/}$ $f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/240000 = 0,004 \text{ /SSK 06/}$ $t_1 = 1 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 5 \text{ d /SSK 06/}$
	Inhalation	entfällt in Betrachtung
SlagBunker (worker)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie F /THI 04/}$ $f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/60000 = 0,02 \text{ /SSK 06/}$ $t_e = 1000 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 7 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 0 \text{ d /SSK 06/}$
	Inhalation	$f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/60000 = 0,02 \text{ /SSK 06/}$ $f_c = 1 \text{ (konservativ)}$ $c_{\text{dust}} = 0,001 \text{ g/cm}^3 \text{ /SSK 06/}$ $t_e = 100 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 7 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 0 \text{ d /SSK 06/}$
DustBunker (worker)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie F /THI 04/}$ $f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/2400 = 0,4 \text{ /SSK 06/}$ $t_e = 100 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 7 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 0 \text{ d /SSK 06/}$
	Inhalation	$f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/2400 = 0,4 \text{ /SSK 06/}$ $f_c = 1 \text{ (konservativ)}$ $c_{\text{dust}} = 0,001 \text{ g/cm}^3 \text{ /SSK 06/}$ $t_e = 50 \text{ h/a /SSK 06/}$ $t_1 = 7 \text{ d /SSK 06/}$ $t_2 = 0 \text{ d /SSK 06/}$
Slagroadorpathconstruction-worker (worker)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie G /THI 04/}$ $f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/60000 = 0,02 \text{ /SSK 06/}$

Spezifisches Szenario	Expositionspfad	Bemerkung
		$t_e = 200 \text{ h/a}$ /SSK 06/ $t_1 = 30 \text{ d}$ /THI 04/ $t_2 = 8 \text{ h}$ /SSK 06/
	Inhalation	$f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/60000 = 0,02$ /SSK 06/ $f_c = 1$ (konservativ) $c_{\text{dust}} = 0,001 \text{ g/cm}^3$ /SSK 06/ $t_e = 200 \text{ h/a}$ /SSK 06/ $t_1 = 30 \text{ d}$ /THI 04/ $t_2 = 8 \text{ h}$ /SSK 06/
Slagroadorpathconstructionresident (resident)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie G}$ /THI 04/ $f_d = M_{\text{frei}}/M_{\text{ges}} = 1000/60000 = 0,02$ /SSK 06/ $t_e = 2000 \text{ h/a}$ (gem. THI 04) $t_1 = 30 \text{ d}$ /THI 04/ $t_2 = 365 \text{ d}$ /THI 04/
Staybesidesproduct (worker)	ext. Strahlenexposition	$d_{\text{ext}} = \text{Geometrie H}$ /THI 04/ $f_{d1} = M_{\text{frei}}/M_{\text{Sr}} = 1000/6000 = 0,17$ /SSK 06/ $f_{d2} = 0,2$ /SSK 06/ Mischung mit anderem Schrott $f_d = f_{d1} * f_{d2}$ $t_e = 2000 \text{ h/a}$ /THI 04/ $t_1 = 30 \text{ d}$ /THI 04/ $t_2 = 365 \text{ d}$ /THI 04/

3.3.3.2 Beispiel: Berechnung exemplarischer, spezifischer Freigabewerte

Im Folgenden wird Schritt für Schritt die Berechnung von exemplarischen (fiktiven) Freigabewerten mit Hilfe des Berechnungsinstrumentes gezeigt. Dabei erfolgt zunächst die Berechnungen mit den in Kap. 3.3.3.1 gemachten Angaben.

- Initialisierung [1], Laden des vordefinierten Modells mit entsprechenden Szenarien, Pfaden und generischer Parameterwerte aus den Datenblättern [2], Auswahl an Radionukliden [3], Anzeigen der im Modell verwendeten Szenarien und Expositionspfade (siehe Abb. 3.19)

Option from final report

This is the option we used as example in the final report of the project Berechnungsgrundlage (FKZ 3622572540).

This Jupyter includes all the calculations and explanations for users.

```
[1]: # To be able to import the options module we need to add the root directory to the system path. Python then is able to find the required module.
import sys
sys.path.append('../..')
# Import predefined option for further use
from options.predefined import SubstanceCombustion

[2]: # Create an instance of the predefined option class
sc = SubstanceCombustion(verbose=False)
ur = sc.unit_registry

[3]: # Add radionuclides to the instance
sc.radionuclides = ['Ag-109m+', 'Ba-133', 'Cl-36', 'Co-60', 'Cs-137+', 'I-129', 'Mn-54', 'Ni-59', 'Sr-90+', 'Tc-99']

[4]: # List all scenario ids and their corresponding paths
sc.print_scenarios_paths()
```

```
transport
- exposed persons: worker
- paths:
  - ExternalRadiation
entranceWIP
- exposed persons: worker
- paths:
  - ExternalRadiation
  - Inhalation
wasteBunker
- exposed persons: worker
- paths:
  - ExternalRadiation
slagBunker
- exposed persons: worker
- paths:
  - ExternalRadiation
  - Inhalation
```

Abb. 3.19 Screenshot Jupyter-Book Initialisierung Berechnungsvorgang [1] bis [3]

- Möglichkeit der Eingabe spezifischer Parameterwerte (z. B. entsprechend Tab. 3.29)
- Auszug aus [5] (siehe Abb. 3.20)

```
[5]: # Set user input for paths
sc.path_variables(scenario="transport", path="ExternalRadiation",
variables={
    "dext": "A",
    "te": 30 * ur.hour / ur.year,
    "t1": 1 * ur.day,
    "t2": 1 * ur.day
})
sc.path_variables(scenario="entranceWIP", path="ExternalRadiation",
variables={
    "dext": "B",
    "te": 3 * ur.hour / ur.year,
    "t1": 1 * ur.day,
    "t2": 1 * ur.day
})
sc.path_variables(scenario="entranceWIP", path="Inhalation",
variables={
    "fd": 1 * ur.dimensionless,
    "fc": 10 * ur.dimensionless,
    "cdust": 0.0002 * ur.gram/ur.cm**3,
    "te": 3 * ur.hour / ur.year,
    "t1": 1 * ur.day,
    "t2": 0 * ur.day
})
```

Abb. 3.20 Screenshot Jupyter-Book zur Eingabe individueller Parameterwerte [5]

- Berechnung der nuklidspezifischen Dosis pro Jahr für 1 Bq/g [6] sowie ggf. Ausgabe von Warnungen, z. B. zu fehlenden Nukliden in nuklidspezifischen Datenblättern und/oder zu fehlenden Parameterwerten in Datenblättern

- Anzeige der Berechnungsergebnisse für jedes ausgewählte Nuklid sowie für alle verwendeten Szenarien und Expositionspfade [7], wenn Werte für die Berechnung fehlen wird „nan“ (not a number) ausgegeben (Abb. 3.21)

```
[6]: # calculate results
calc = sc.calculate()
```

WARNING:root:Inhalation: there is no datapoint for nuclide 'Ba-133' and symbol 'dinh'. Please check your data!

WARNING:root:Inhalation: there is no datapoint for nuclide 'Ba-133' and symbol 'dinh'. Please check your data!

WARNING:root:Inhalation: there is no datapoint for nuclide 'Ba-133' and symbol 'dinh'. Please check your data!

WARNING:root:Inhalation: there is no datapoint for nuclide 'Ba-133' and symbol 'dinh'. Please check your data!

WARNING:root:Special1: There is no value for symbol E_Spez1 in the dataset for nuclide Cl-36. Please check your data!

WARNING:root:Special1: There is no value for symbol E_Spez1 in the dataset for nuclide Sr-90+. Please check your data!

WARNING:root:Special1: There is no value for symbol E_Spez1 in the dataset for nuclide Tc-99. Please check your data!

```
[7]: display(calc.results)
```

	nuclide	scenario	path	result
62	Cl-36	dustBunker	ExternalRadiation	0.0 sievert / year
72	Cl-36	dustBunker	Inhalation	0.00017519999224206538 sievert / year
12	Cl-36	entranceWIP	ExternalRadiation	0.0 sievert / year
22	Cl-36	entranceWIP	Inhalation	5.255999966751708e-05 sievert / year
122	Cl-36	groundRadiationExternal	Special1	nan sievert / year
...	...	...	...	...
84	Cs-137+	slagRoadOrPathConstructionWorker	ExternalRadiation	1.2096893742388087e-07 sievert / year
94	Cs-137+	slagRoadOrPathConstructionWorker	Inhalation	2.2037905431677302e-05 sievert / year
114	Cs-137+	stayBesidesProduct	ExternalRadiation	8.587972032489429e-07 sievert / year

Abb. 3.21 Screenshot Jupyter-Book Start der Berechnung [6] sowie Ausgabe erster Zwischenergebnisse [7]

- Anzeige der Gesamtergebnisse in Dosis/Jahr für jedes Szenario und jedes Nuklid [8]
- Möglichkeit der Darstellung aller Berechnungsparameter [9], hier auskommentiert (siehe Abb. 3.22)

```
[8]: display(calc.totals)
```

	nuclide	scenario	total
28	Cl-36	slagRoadOrPathConstructionResident	0.0 sievert / year
29	Cl-36	stayBesidesProduct	0.0 sievert / year
22	Cl-36	transport	0.0 sievert / year
24	Cl-36	wasteBunker	0.0 sievert / year
31	Cl-36	inhalationExternal	6.670000000000002e-13 sievert / year
...	...	...	...
50	Cs-137+	slagRoadOrPathConstructionResident	1.1958435320975627e-06 sievert / year
47	Cs-137+	slagBunker	1.1928716740957578e-05 sievert / year
49	Cs-137+	slagRoadOrPathConstructionWorker	2.2158874369101184e-05 sievert / year
45	Cs-137+	entranceWIP	3.324599281403542e-05 sievert / year
48	Cs-137+	dustBunker	0.0001121383336462669 sievert / year

110 rows × 3 columns

```
[9]: #display(calc.input)
```

Abb. 3.22 Screenshot Jupyter-Book Berechnung Zwischenergebnisse [8] und mögliche Darstellung der Berechnungsparameter [9]

- Darstellung der dosisbestimmenden Szenarien für die ausgewählten Nuklide, Umrechnung in Freigabewerte unter Berücksichtigung des 10 µSv-Kriteriums (ungerundet und gerundet gemäß SR-44) [10] (siehe Abb. 3.23)

[10]: `display(calc.clearance)`

	nuclide	scenario	total	clearance	rounded
2	Cl-36	dustBunker	0.00017519999224206538 sievert / year	0.057077628098199246 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
6	Mn-54	dustBunker	3.827235373226778e-05 sievert / year	0.2612852104669201 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
7	Ni-59	dustBunker	3.119999454651352e-06 sievert / year	3.2051287653566156 becquerel / gram	10 becquerel / gram
3	Co-60	dustBunker	0.00024909487541370127 sievert / year	0.04014534615933716 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
8	Sr-90+	dustBunker	0.0008971860732664863 sievert / year	0.01114595990505278 becquerel / gram	0.01 becquerel / gram
9	Tc-99	dustBunker	9.59999942316528e-05 sievert / year	0.10416667292572435 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
0	Ag-108m+	dustBunker	0.00018251419956514183 sievert / year	0.05479025754613062 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
5	I-129	dustBunker	0.000864000900826566 sievert / year	0.011574072867334226 becquerel / gram	0.01 becquerel / gram
1	Ba-133	slagRoadOrPathConstructionResident	5.92897641725208e-07 sievert / year	16.866317718691032 becquerel / gram	10 becquerel / gram
4	Cs-137+	dustBunker	0.0001121383336462669 sievert / year	0.08917557158950082 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram

Abb. 3.23 Screenshot Jupyter-Book nuklidspezifische Ausgabe des freigabebestimmenden Szenarios, der damit verbundenen Jahresdosis und den hieraus resultierenden Freigabewerten [10]

3.3.3.3 Beispiel: Anpassung von Parametern für die Berechnung

Um die Flexibilität des Berechnungsinstruments im Rahmen des Eigenforschungsvorhabens zu demonstrieren, wurden die unter Kap. 3.3.3.2 beschriebenen Berechnungen angepasst. Dabei wurde der nuklidspezifische Verdünnungsfaktor im Szenario „dustbunker“ modifiziert, um die Partitionierung der ausgewählten Radionuklide in der Staubfraktion entsprechend der einzelnen Nuklideigenschaften zu berücksichtigen. In der ersten Berechnung wurde dieser Parameter noch nicht einbezogen. Die Anpassung erfolgte gemäß den in Tab. 3.30 dargestellten Werten im Jupyter Book [5] (siehe Abb. 3.24). Die Auswirkungen dieser Anpassung auf die berechneten Dosiswerte sind in Abb. 3.25 dargestellt.

Tab. 3.30 Veränderung des Verdünnungsfaktor f_d im „dustbunker“ Szenario infolge veränderter nuklidspezifischer Anteile in der Staubfraktion /THI 04/

Radionuklid	Nuklidspezifischer Anteil im Staub (alt)	Nuklidspezifischer Anteil im Staub (angepasst)
Cl-36	1	0,1
Mn-54	1	0,01
Ni-59	1	0,01
Co-60	1	0,01
Sr-90+	1	0,01
Tc-99	1	0,01
Ag-108m+	1	1
I-129	1	1
Ba-133	1	0,01
Cs-137+	1	1

- Anpassung des Verdünnungsfaktors fd zur Berücksichtigung der Partitionierung, hier dargestellt für eine Partitionierung von 10 % im Staub (CI-36) (siehe Abb. 3.24)

```
sc.path_variables(scenario="dustBunker", path="ExternalRadiation",
variables={
    "dext": "F",
    "fd": 0.4 * 0.1 * ur.dimensionless,
    "te": 100 * ur.hour / ur.year,
    "t1": 7 * ur.day,
    "t2": 0 * ur.day
})
sc.path_variables(scenario="dustBunker", path="Inhalation",
variables={
    "fd": 0.4 * 0.1 * ur.dimensionless,
    "fc": 1 * ur.dimensionless,
    "cdust": 0.001 * ur.gram/ur.cm**3,
    "te": 50 * ur.hour / ur.year,
    "t1": 7 * ur.day,
    "t2": 0 * ur.day
})
```

Abb. 3.24 Screenshot manuelle Anpassung des Verdünnungsfaktors fd (Ausschnitt)

- Ergebnis unter Berücksichtigung des Einflusses der Partitionierung (siehe Abb. 3.25)

[10]: `display(calc.clearance)`

	nuclide	scenario	total	clearance	rounded
2	Mn-54	entranceWIP	1.0976073294571954e-05 sievert / year	0.9110726333200914 becquerel / gram	1 becquerel / gram
3	Ni-59	entranceWIP	9.359999766279132e-07 sievert / year	10.6837609505361 becquerel / gram	10 becquerel / gram
1	Co-60	entranceWIP	7.26158793650814e-05 sievert / year	0.13771092614226021 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
4	Sr-90+	entranceWIP	0.00026926225677585924 sievert / year	0.037138513654827815 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram
5	Tc-99	entranceWIP	2.8799999753449396e-05 sievert / year	0.34722222519471707 becquerel / gram	1 becquerel / gram
0	Ba-133	slagRoadOrPathConstructionResident	5.92897641725208e-07 sievert / year	16.866317718691032 becquerel / gram	10 becquerel / gram

[10]: `display(calc.clearance)`

	nuclide	scenario	total	clearance	rounded
0	Cl-36	entranceWIP	5.255999966751708e-05 sievert / year	0.19025875310612228 becquerel / gram	0.1 becquerel / gram

Abb. 3.25 Screenshot Jupyter-Book, nuklidspezifische Ausgabe des freigabebestimmenden Szenarios, der damit verbundenen Jahresdosis und den hieraus resultierenden Freigabewerten [10] nach Anpassung des Verdünnungsfaktors

Durch die Anpassung des Verdünnungsfaktors im Berechnungsmodell am Beispiel der Berücksichtigung der Staubpartitionierung von 1 % (bzw. 10 % für CI-36) im „dustbunker-Szenario“ wurde der Einfluss der Staubfraktionierung überprüft. Der Vergleich mit der Ausgangsberechnung, in der ein vollständiger (100 %) Übergang aller Radionuklide in den Staub angenommen wurde, zeigt eine deutliche und nachvollziehbare Veränderung sowohl der berechneten Dosiswerte als auch der resultierenden Freigabewerte (siehe Tab. 3.31). Für alle betrachteten Nuklide ist infolge der reduzierten Staubpartitionierung eine Abnahme der berechneten Dosis und damit eine Erhöhung der Freigabewerte zu beobachten.

Anhand dieses Beispiels wurde vor allem das Berechnungsinstrument hinsichtlich seiner Flexibilität und Transparenz getestet. Es konnte gezeigt werden, dass mit Hilfe des Programms der Einfluss einzelner Parameter schnell, nachvollziehbar und transparent analysiert werden kann. Die resultierenden Änderungen in den Berechnungsergebnissen lassen sich direkt interpretieren und in ihrer Bedeutung für die Gesamtbewertung der Freigabeszenarien einordnen. Die hier dargestellten Berechnungen dienen daher in erster Linie der Demonstration der Leistungsfähigkeit des Programms zur gezielten Analyse und Bewertung einzelner Parameter im Rahmen der Freigabemodellierung.

Tab. 3.31 Gegenüberstellung der Ergebnisse der Berechnung der Freigabewerte (FG-Werte) vor und nach Anpassung der Staubfraktionierung

Nuklid	100 % im Staub				Angepasst für 1 % Staubpartitionierung (bzw. 10% für CI-36)			
	Szenario	Dosis [Sv/a]	Freigabewert [Bq/g]	FG gerundet [Bq/g]	Szenario	Dosis [Sv/a]	Freigabewert [Bq/g]	FG gerundet [Bq/g]
Cl-36	dustBunker	1,75E-04	5,71E-02	0,1	entranceWIP	5,26E-05	1,90E-01	0,1
Mn-54	dustBunker	3,83E-05	2,61E-01	0,1	entranceWIP	1,10E-05	9,11E-01	1
Ni-59	dustBunker	3,12E-06	3,21E+00	10	entranceWIP	9,36E-07	1,07E+01	10
Co-60	dustBunker	2,49E-04	4,01E-02	0,1	entranceWIP	7,26E-05	1,38E-01	0,1
Sr-90+	dustBunker	8,97E-04	1,11E-02	0,01	entranceWIP	2,69E-04	3,71E-02	0,1
Tc-99	dustBunker	9,60E-05	1,04E-01	0,1	entranceWIP	2,88E-05	3,47E-01	1
Ag-108m+	dustBunker	1,83E-04	5,48E-02	0,1				
I-129	dustBunker	8,64E-04	1,16E-02	0,01				
Ba-133	slagRoadOr-PathConstructionResident	5,93E-07	1,69E+01	10	slagRoadOr-PathConstructionResident	5,93E-07	1,69E+01	10
Cs-137+	dustBunker	1,12E-04	8,92E-02	0,1				

3.4 Verfolgung des Standes von Wissenschaft und Technik

Im Rahmen des laufenden Eigenforschungsvorhabens stellt die kontinuierliche Verfolgung wissenschaftlicher und technischer Entwicklungen eine zentrale Querschnittsaufgabe dar. Diese ist essenziell, um neue Erkenntnisse, methodische Ansätze und internationale Entwicklungen frühzeitig zu identifizieren und in die eigene Forschungs- und Bewertungsarbeit zu integrieren. Dies gilt insbesondere im Bereich des Strahlenschutzes und der Freigabe radioaktiver Stoffe, der sich durch dynamische regulatorische Anforderungen und wachsende gesellschaftliche Sensibilität auszeichnet.

Von besonderer Bedeutung ist hierbei die Auseinandersetzung mit internationalen Vorgaben und Empfehlungen, wie sie u. a. von der IAEA bereitgestellt werden. So gibt etwa

der IAEA Safety Guide GSG-18 („Application of the Concept of Clearance“) /IAEA 23a/ einen umfassenden Rahmen für die Anwendung des Freigabekonzepts und stellt sicherheitstechnische sowie administrative Anforderungen an die Entlassung radioaktiver Stoffe aus der regulatorischen Kontrolle dar. Die dort formulierten Leitlinien betonen u. a. die Bedeutung transparenter Bewertungsverfahren, nachvollziehbarer Dosisabschätzungen sowie der Kommunikation mit relevanten Interessengruppen.

Vor diesem Hintergrund kommt der Teilnahme an nationalen und internationalen Fachkonferenzen eine doppelte Funktion zu: Einerseits dienen sie der Reflexion eigener Forschungsansätze im Licht internationaler Standards, andererseits ermöglichen sie einen fachlich fundierten Austausch mit Akteuren aus Wissenschaft, Aufsicht, Praxis und Politik. Gerade durch die Diskussion eigener Beiträge im Rahmen solcher Veranstaltungen werden wissenschaftliche Ergebnisse überprüfbar, weiterentwickelbar und interdisziplinär anschlussfähig.

Die Teilnahme an den Konferenzen safeND 2023 und 2025, GeoSaxonia 2024 sowie dem Freigabesymposium TÜV 2024 – teils mit aktiven Beiträgen in Form von Vorträgen oder Postern – leistete einen wesentlichen Beitrag zur Verfolgung wissenschaftlicher und technischer Entwicklungen im Rahmen des laufenden eigenen Eigenforschungsvorhabens.

Insbesondere die eingebrachten und im Fachkreis diskutierten Beiträge ermöglichten einen gezielten Austausch zu methodischen Ansätzen, aktuellen Problemstellungen und strategischen Fragen in den Bereichen nukleare Entsorgung, Freigabe radioaktiver Stoffe und Grundwassermodellierung. Im Folgenden sind die besuchten Konferenzen kurz erläutert.

safeND 2023

Im Rahmen der kontinuierlichen wissenschaftlichen Begleitung und Beobachtung des Forschungsstandes zur nuklearen Entsorgung erfolgte vom 13. bis 15. September 2023 die Teilnahme am internationalen Forschungssymposium safeND 2023, ausgerichtet durch das Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE). Die Veranstaltung bot ein interdisziplinäres Forum für den Austausch aktueller Forschungsergebnisse mit Bezug zur sicheren Entsorgung radioaktiver Abfälle.

Das Schwerpunktthema 2023 lautete: „Resiliente Systeme für die nukleare Entsorgung unter Berücksichtigung aktueller und zukünftiger Krisenszenarien“. Im Zentrum standen Überlegungen zur Ausgestaltung technischer, institutioneller und gesellschaftlicher Resilienz angesichts globaler Herausforderungen wie der COVID-19-Pandemie, geopolitischer Konflikte mit Auswirkungen auf nukleare Infrastruktur, Angriffen auf kritische Versorgungssysteme sowie klimawandelbedingten Einflüssen.

Darüber hinaus umfasste das Symposium ein breites Spektrum weiterer relevanter Themenfelder:

- Stilllegung kerntechnischer Anlagen
- Zwischenlagerung, Transport und Konditionierung radioaktiver Abfälle
- Standortauswahlverfahren und Endlagerkonzepte für unterschiedliche Abfallkategorien
- Safeguards und Aspekte der Non-Proliferation
- Alternative Entsorgungsoptionen
- Langzeitinformationsbewahrung, Semiotik und Risikokommunikation
- Gesellschaftliche Beteiligungsprozesse und Governance-Fragen
- Historische, rechtliche und ökonomische Rahmenbedingungen

Die Veranstaltung bot wertvolle Impulse zur Weiterentwicklung sicherheitstechnischer, kommunikativer und institutioneller Strategien im Bereich der nuklearen Entsorgung. Insbesondere die internationale Perspektive sowie die thematische Breite trugen zur Identifikation aktueller Wissenslücken und zur Priorisierung zukünftiger Forschungsbedarfe bei.

13. Freigabesymposium 2024

Im Jahr 2024 erfolgte die aktive Teilnahme am 13. Freigabesymposium der TÜV NORD EnSys, das sich seit 1998 als etabliertes Fachforum zur Entlassung radioaktiver Stoffe aus dem Geltungsbereich des Strahlenschutzrechts (sog. Freigabe) etabliert hat. Die Veranstaltung bot nationalem und internationalem Fachpublikum aus Behörden, Sachverständigenorganisationen, Forschung, Industrie und Entsorgungseinrichtungen die

Gelegenheit zum intensivem fachlichen Austausch über aktuelle Entwicklungen, Herausforderungen und Lösungsansätze im Bereich der Freigabe.

Im Mittelpunkt des diesjährigen Symposiums stand die nationale Praxis der Freigabe, ergänzt durch Beiträge aus dem europäischen Ausland. Insbesondere angesichts der Vielzahl laufender Rückbauprojekte kerntechnischer Anlagen in Deutschland gewinnt die schadlose Verwertung gering radioaktiver Stoffe zunehmend an gesellschaftlicher und fachlicher Relevanz. Dabei wurde auch auf die Bedeutung der Wissenssicherung und des Nachwuchsförderungspotenzials in diesem spezialisierten Fachbereich hingewiesen.

Im Rahmen des Symposiums wurde ein eigener Fachbeitrag mit dem Thema „Verbringung freigegebener Materialien in ein Versatzbergwerk – eine Einordnung“ eingebracht. Der Vortrag thematisierte die Möglichkeiten und Rahmenbedingungen zu einer möglichen, spezifischen Freigabe zum Versatz von Materialien in ein Versatzbergwerk. Dabei wurden sowohl die rechtlichen als auch die technischen und kommunikativen Aspekte der Einordnung diskutiert. Der Beitrag leistete einen fachlichen Impuls zur Bewertung bestehender Verwertungsoptionen und adressierte zugleich Fragen der Akzeptanz, Nachvollziehbarkeit und Risikokommunikation gegenüber der Öffentlichkeit.

Die Teilnahme sowie die aktive Mitgestaltung durch den Fachvortrag trugen zur Sichtbarkeit und Vernetzung im Bereich der praktischen Anwendung der Freigaberegelungen sowie zur Diskussion alternativer Entsorgungspfade bei.

GeoSaxonia 2024

Im Zeitraum vom 23. bis 26. September 2024 erfolgte die Teilnahme an der GeoSaxonia 2024, der Jahrestagung der Deutschen Geologischen Gesellschaft – Geologische Vereinigung (DGGV), die unter dem Motto „Geosciences Without Borders“ in Dresden stattfand. Die Veranstaltung wurde in Kooperation mit der Technischen Universität Dresden, der Senckenberg Gesellschaft für Naturforschung, der TU Bergakademie Freiberg sowie der Karls-Universität Prag organisiert und bot ein interdisziplinäres Forum für Geowissenschaftlerinnen und Geowissenschaftlern aus Europa und darüber hinaus.

Ziel der Konferenz war es, aktuelle wissenschaftliche Fragestellungen im Bereich der Geowissenschaften über institutionelle und nationale Grenzen hinweg zu diskutieren. Das Programm umfasste Plenar- und Keynote-Vorträge, thematische Sessions, Poster-

präsentationen, Exkursionen sowie einen intensiven fachlichen Austausch zwischen Forschung und Praxis.

Im Rahmen der thematischen Session 05.c) „Groundwater under quality stress – hydro-geochemical consequences of human action“ wurden erste Ergebnisse dieses Eigenforschungsvorhaben in dem Vortrag „Numerical groundwater and transport modelling of radionuclides on a generic landfill“ präsentiert /JOH 24/.

Der Beitrag befasste sich mit der numerischen Modellierung von Grundwasserströmung und Stofftransport von Radionukliden im Umfeld einer generischen Deponie. Ziel war die Analyse möglicher Migrationen unter variierenden hydrogeochemischen Randbedingungen. Die vorgestellten Modellierungen liefern wichtige Grundlagen für die Bewertung von Langzeitverhalten potenzieller Reststofflagerungen im Kontext des Strahlenschutzes.

Die aktive Mitwirkung an der Tagung stärkte die interdisziplinäre Vernetzung im Bereich Hydrogeologie und Umweltgeochemie und trug zur wissenschaftlichen Diskussion über den Einfluss menschlicher Eingriffe auf die Grundwasserqualität bei.

14. Freigabesymposium 2025

Das ursprünglich für 2025 geplante 14. Freigabesymposium der TÜV NORD EnSys wurde auf das Folgejahr verschoben und konnte daher im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhaben nicht besucht werden.

safeND 2025

Im Zeitraum vom 17. bis 19. September 2025 erfolgte die Teilnahme am dritten internationalen Forschungssymposium safeND 2025, veranstaltet durch das BASE. Die Tagung widmete sich aktuellen wissenschaftlichen und gesellschaftlichen Fragestellungen im Kontext der sicheren Entsorgung radioaktiver Abfälle. Das diesjährige Schwerpunktthema lautete „Time as a safety factor: opportunities and challenges of timely nuclear waste disposal“.

Im Mittelpunkt standen die sicherheitsrelevanten Implikationen zeitlicher Faktoren in der Endlagerpolitik. Neben geologischen, ingenieurtechnischen und simulationsbasierten Fragestellungen wurde insbesondere die zeitkritische Umsetzung von Entsorgungsstrategien als eigenständiger Sicherheitsaspekt adressiert. Thematisiert wurden Risiken, die sich aus der derzeit zumeist oberirdischen Lagerung hochradioaktiver Abfälle ergeben,

insbesondere im Hinblick auf geopolitische Instabilitäten, institutionelle Veränderungen und den Klimawandel.

Im Rahmen des wissenschaftlichen Programms wurden Teile der Ergebnisse des vorliegenden Eigenforschungsvorhabens durch folgenden Posterbeitrag präsentiert „Modelling contaminant transport of soil and landfills: A benchmark study of three numerical codes“. Der Beitrag stellte eine vergleichende Untersuchung zur Modellierung von Schadstofftransporten im Boden und Deponieumfeld unter Verwendung dreier numerischer Simulationscodes vor. Ziel war es, Stärken und Limitationen der verschiedenen Modellansätze im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit für Fragestellungen im Kontext nuklearer Entsorgung zu evaluieren. Im Nachgang der Veranstaltung ist geplant ein entsprechendes Paper zu veröffentlichen (Ende 2025, in Arbeit).

4 Zusammenfassung

Das Eigenforschungsvorhaben zielte darauf ab, ein methodisches und technisches Fundament zur Entwicklung eines Berechnungsinstrumentes für die spezifische Freigabe radioaktiver Stoffe zu schaffen. Die Forschungstätigkeiten waren in vier Arbeitspakete gegliedert.

Arbeitspaket 1: Grundlagen und methodische Entwicklungen

Im Arbeitspaket 1 wurden die Grundlagen der Freigabepraxis in Deutschland kurz aufgearbeitet. Ein Schwerpunkt lag auf der Erhebung, Analyse und Strukturierung relevanter Parameterwerte, die für die Berechnung spezifischer Freigabewerte von zentraler Bedeutung sind.

Besondere Aufmerksamkeit erhielt der K_D -Wert, der bei der Modellierung der Radionuklid- ausbreitung im Grundwasser einen bedeutenden Einfluss haben kann. Im Rahmen des Projekts wurden hierzu intensive Recherchen sowie Forschungsarbeiten durchgeführt und ein methodischer Ansatz erprobt, mit deren Hilfe Verteilungen unsicherer Parameter aus implizitem Expertenwissen abgeleitet werden können. Dies wurde exemplarisch anhand von Sorptionsparametern getestet und zeigte, dass Expertenwissen in strukturierter Form grundsätzlich in Berechnungen einbezogen werden kann.

Als zentraler Punkt des Eigenforschungsvorhaben wurde auf Basis der umfangreichen Daten- und Methodenanalysen ein generischer Baukasten zur Bestimmung spezifischer Freigabewerte konzipiert, welcher im Einklang mit der IAEA-Empfehlung GSG-18 steht. Dieser Baukasten bildet die methodische Grundlage für eine flexible, transparente und reproduzierbare Anwendung.

Arbeitspaket 2: Softwaretechnische Umsetzung

Im Arbeitspaket 2 erfolgte die softwareseitige Umsetzung des im Arbeitspaket 1 entwickelten Baukastens. Die Implementierung erfolgte durch Python, um eine möglichst breite Nachvollziehbarkeit, Flexibilität und Erweiterbarkeit sicherzustellen. Die Python-Umsetzung stellt die technische Basis des Berechnungsinstrumentes dar und ermöglicht es, die entwickelten Ansätze in einem praxisnahen Werkzeug nutzbar zu machen.

Durch die modulare Struktur der Software können einzelne Rechenverfahren, Datenquellen und Modelle flexibel integriert und bei Bedarf weiterentwickelt werden. Diese Offenheit für Erweiterungen ist ein wesentlicher Erfolgsfaktor des Projekts.

Arbeitspaket 3: Vertiefende Forschungsarbeiten und Schnittstellenentwicklung

Im Arbeitspaket 3 lag der Fokus auf der wissenschaftlichen Vertiefung und der Einbindung externer Modelle in die Berechnung von Freigabewerten. In enger Zusammenarbeit mit dem Unterauftragnehmer, der Universität Stuttgart, wurden umfangreiche Forschungsarbeiten zum Grundwassertransport durchgeführt. Hierbei wurden verschiedene Modellansätze verglichen und deren jeweilige Stärken und Schwächen herausgearbeitet. Die erzielten Ergebnisse werden zusätzlich in einem separaten Fachartikel veröffentlicht, um sie der wissenschaftlichen Fachöffentlichkeit zugänglich zu machen.

Ein weiterer Schwerpunkt lag auf der Bearbeitung von Schnittstellen zu externen Eingabewerten. Dies betraf insbesondere

- die externe Gammastrahlung (Modell: GEANT4),
- den Luftpfad (Modell: DARTM) und
- den Grundwassertransport (Modelle: SPRING und d^{3f++}).

Um die Zusammenarbeit zwischen den verschiedenen Modellwelten zu erleichtern, wurden geeignete Datenblätter entwickelt, die eine strukturierte Übergabe relevanter Eingabedaten an das Berechnungsinstrument gewährleisten (dies beinhaltet auch die notwendigen Parameterdaten aus dem Arbeitspaket 1). Diese Schnittstellenarbeit war entscheidend für die Praxistauglichkeit des Werkzeugs, da sie die transparente Integration etablierter externer Programmergebnisse ermöglicht.

Abschließend wurden mit dem Berechnungsinstrument exemplarische Freigabewerte bestimmt. Diese Beispielrechnungen dienten dazu, die Funktionsweise des Tools zu veranschaulichen, die Praxistauglichkeit zu demonstrieren und das Potenzial des Instruments für die Anwendung in unterschiedlichen Szenarien sichtbar zu machen.

Arbeitspaket 4: Wissenschaftlicher Austausch und Beobachtung der Technikentwicklung

Das Arbeitspaket 4 widmete sich der kontinuierlichen Beobachtung von Wissenschaft und Technik. Dazu zählte insbesondere die Teilnahme an einschlägigen Fachkonferenzen sowie die Präsentation eigener Beiträge im internationalen Fachumfeld. Durch diese enge Anbindung an die wissenschaftliche Community konnten aktuelle Entwicklungen zeitnah berücksichtigt und in die Projektarbeit integriert werden.

Die Teilnahme an diesen Veranstaltungen trug wesentlich dazu bei, die Anschlussfähigkeit der Projektergebnisse an den internationalen Stand von Forschung und Technik sicherzustellen.

Ausblick und Weiterentwicklungspotenziale

Das abgeschlossene Forschungsvorhaben hat mit der Konzeption und Umsetzung des Berechnungsinstrumentes einen wichtigen Grundstein gelegt. Zugleich wurde deutlich, dass für eine nachhaltige Etablierung und breite Anwendung weitere Entwicklungsschritte erforderlich sind. Zukünftige Arbeiten sollten sich insbesondere auf folgende Punkte konzentrieren:

- **Erhöhung der Robustheit:** Das Berechnungsinstrument sollte hinsichtlich Stabilität und Verlässlichkeit in unterschiedlichsten Anwendungsszenarien weiter ausgebaut werden.
- **Optimierung des Datenimports:** Eine zentrale Herausforderung bleibt die reibungslose und transparente Integration heterogener Datenquellen. Hier gilt es, den Importprozess weiter zu vereinfachen und Fehlertoleranzen zu erhöhen.
- **Steigerung der Usability:** Damit das Instrument nicht nur für einen kleinen Expertenkreis, sondern auch für ein erweitertes Nutzerfeld anwendbar ist, müssen Benutzerfreundlichkeit, Transparenz und Dokumentation kontinuierlich verbessert werden.

Durch diese Weiterentwicklungen kann das Instrument langfristig zu einem etablierten Werkzeug werden, das praxisnah, belastbar und anwenderfreundlich ist.

Das Eigenforschungsvorhaben hat wesentliche Grundlagen geschaffen, um spezifische Freigabewerte methodisch fundiert und technisch unterstützt entsprechend dem Stand von Wissenschaft und Technik bestimmen zu können. Mit dem entwickelten Baukasten

und der Python-Umsetzung steht nun ein flexibles Berechnungsinstrument zur Verfügung, das Schnittstellen zu externen Modellen und Parameterwerten berücksichtigt und dessen Potenzial durch erste Beispielanwendungen belegt wurde.

Die Weiterentwicklung des Werkzeugs hinsichtlich Robustheit, Datenintegration und Benutzerfreundlichkeit ist eine zentrale Aufgabe der kommenden Jahre, um den Nutzen des Instruments dauerhaft sicherzustellen.

Literaturverzeichnis

- /ANA 25/ Anaconda Inc.: Conda Documentation. Erreichbar unter <https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/index.html>, abgerufen am 16. Oktober 2025.
- /ART 14/ Artmann, A., Larue, J., Seher, H., Weiß, D.: Anwendung und Weiterentwicklung von Modellen für Endlagersicherheitsanalysen auf die Freigabe radioaktiver Stoffe zur Deponierung, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-Bericht, GRS-342, ISBN 978-3-944161-22-8: Köln, 2014.
- /ART 20/ Artmann, A., Eberhard, H., Filby, A., Hussels, M.-T., Johnen, M., Seher, H., Thielen, H., Weyand, T.: Freigabekonzepte einer neuen Strahlenschutzverordnung nach Euratom-Grundnormen 2013 in der Anwendung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-506, 349 S., ISBN 978-3-946607-91-5: Köln, Oktober 2020.
- /ART 22/ Artmann, A., Hussels, M.-T.: Reststoffe und freigegebene Stoffe sowie ihre Massenströme aus Stilllegung und Abbau kerntechnischer Anlagen in Deutschland, Abschlussbericht zum Vorhaben 4718E03520. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-A-4066, Juni 2022.
- /ATG 22/ Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren (Atomgesetz) (AtG) in der Fassung von 15. Juli 1985 (BGBl. I S. 1565), zuletzt geändert 4. Dezember 2022 (BGBl. I S. 2153) (BGBl. I 2022 (BGBl. I S. 2153)).
- /ATK 06/ Atkins, P. W., Paula, J. de: Physikalische Chemie, 4. vollständig überarbeitete Auflage. Wiley-VCH, 2006.
- /BAE 83/ Baes III, C. F., Sharp, R. D.: A Proposal for Estimation of Soil Leaching and Leaching Constants for Use in Assessment Models. Journal of Environmental Quality, Bd. 12, Nr. 1, S. 17–28, 1983.

- /BAJ 22/ Baják, P., Csondor, K., Pedretti, D., Muniruzzaman, M., Surbeck, H., Izsák, B., Vargha, M., Horváth, Á., Pándics, T., Erőss, A.: Refining the conceptual model for radionuclide mobility in groundwater in the vicinity of a Hungarian granitic complex using geochemical modeling. *Applied Geochemistry*, Bd. 137, S. 105201, DOI 10.1016/j.apgeochem.2022.105201, 2022.
- /BAR 04/ Barthel, R.: Kd-Konzept und seine Anwendung für ausgewählte Radionuklide, zusammengefasst in einem Vortrag des Autos auf der 17. Sitzung der AG "Freigabe" der SSK am 11.05.2004 (Anlage 4 zum Ergebnisprotokoll SSK/A303-17). Hrsg.: Brenk Systemplanung GmbH, 25. April 2004 (Entwurf).
- /BAR 15/ Barthel, R., Thierfeldt, S.: Ressortforschungsberichte zur kerntechnischen Sicherheit und zum Strahlenschutz, Vergleichende Betrachtung der probabilistischen/stochastischen und deterministischen Modellierung von Expositionen im Hinblick auf die Belastbarkeit des Modellergebnisses und die Anforderung an die Qualität der Eingangsdaten - Vorhaben 3609S50002, Endbericht zum Vorhaben FKZ: 3609S50002. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), BfS-RESFOR, 101/15, 566 S.: Salzgitter, 27. Januar 2015.
- /BMU 12/ Allgemeine Verwaltungsvorschrift zu § 47 der Strahlenschutzverordnung (Ermittlung der Strahlenexposition durch die Ableitung radioaktiver Stoffe aus Anlagen oder Einrichtungen) in der Fassung vom 28. August 2012 (Bundesanzeiger), zuletzt geändert 1. Dezember 2012 (BAnz. 2012, Nr. BAnz AT 05.09.2012 B1, S. 1–74).
- /BMU 15/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB): Programm für eine verantwortungsvolle und sichere Entsorgung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle, Nationales Entsorgungsprogramm. August 2015.
- /BRA 00/ Bradbury, M. H., Baeyens, B.: A generalised sorption model for the concentration dependent uptake of caesium by argillaceous rocks. *Journal of Contaminant Hydrology*, Bd. 42, Nr. 2-4, S. 141–163, DOI 10.1016/S0169-7722(99)00094-7, 2000.

- /BRE 06/ Brenk Systemplanung GmbH: Kd-Konzept und seine Anwendung für natürlich Radionuklide. 2006.
- /BRI 18/ Britz, S.: Europium sorption experiments with muscovite, orthoclase, and quartz: Modeling of surface complexation and reactive transport. Ph.D. Thesis, TU Braunschweig: Braunschweig, 2018.
- /DEC 98/ Deckert, A., Thierfeldt, S.: Berechnung massenspezifischer Freigabewerte für schwach radioaktive Reststoffe. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU-1998-520, August 1998.
- /DEPV 24/ Verordnung über Deponien und Langzeitlager (Deponieverordnung - DepV) in der Fassung vom 27. April 2009 (BGBl. I 2009, Nr. 22, S. 900-950), zuletzt geändert 3. Juli 2024 (BGBl. I 2024).
- /DIN 87/ Deutsches Institut für Normung e.V. (DIN): Baugrund und Grundwasser. DIN 4022:1987, 1987.
- /DUN 12/ Duner, W., Herbert, H.-J., Hohenbrink, T., Iden, S. C., Reichelt, C., Willms, T., Zische, U.: AURA, Untersuchungen zur Auslaugbarkeit langlebiger Radionuklide aus Bauschutt, GRS-258. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-939355-33-5, Oktober 2012.
- /EC 93/ Harvey, M., Mobbs, S., Cooper, J., Chapuis, A. M., Sugier, A., Schneider, T., Lochard, J., Janssens, A.: Principles and Methods for Establishing Concentrations and Quantities (Exemption values) Below which Reporting is not Required in the European Directive, XI-028/93. Commission of the European Communities, Radiation Protection, Nr. 65, 100 S.: Brüssel, 1993.

- /EC 14/ Richtlinie 2013/59/Euratom des Rates vom 5. Dezember 2013 zur Festlegung grundlegender Sicherheitsnormen für den Schutz vor den Gefahren einer Exposition gegenüber ionisierender Strahlung und zur Aufhebung der Richtlinien 89/618/Euratom, 90/641/Euratom, 96/29/Euratom, 97/43/Euratom und 2003/122/Euratom (Richtlinie 2013/59/Euratom) in der Fassung vom 5. Dezember 2013 (Amtsblatt der Europäischen Union), zuletzt geändert 6. Februar 2014 (Amtsblatt der Europäischen Union 2014, Nr. L 13, S. 1–73).
- /EPA 99/ United States Environmental Protection Agency (EPA): Understanding Variation in Partition Coefficient, K_d , Values, Volume I. 0199.
- /ESK 22/ Entsorgungskommission (ESK): Freigabe radioaktiver Stoffe und Herausgabe nicht radioaktiver Stoffe aus dem Abbau von Kernkraftwerken, INFORMATIONSPAPIER – Langfassung mit ausführlichen Erläuterungen. 21 S., 1. September 2022.
- /EUR 58/ Europäische Union: Vertrag zur Gründung der Europäischen Atomgemeinschaft, EURATOM. 1. Januar 1958.
- /EUR 96/ Richtlinie 96/29/Euratom des Rates vom 13. Mai 1996 zur Festlegung der grundlegenden Sicherheitsnormen für den Schutz der Gesundheit der Arbeitskräfte und der Bevölkerung gegen die Gefahren durch ionisierende Strahlungen (96/29/Euratom) in der Fassung vom 13. Mai 1996 (Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften), zuletzt geändert 29. Juni 1996 (Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften 1996, Nr. L 159, S. 1–114).
- /FEI 99/ Fein, E., Schneider, A.: d3f - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-139, ISBN 3-923875-97-5, 1999.
- /FEI 04/ Fein, E. (Hrsg.): Software Package r³t, Model for Transport and Retention in Porous Media. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-192, ISBN 3-931995-60-7, April 2004.

- /FRI 23/ Fricke, J.: Surface complexation and reactive transport modeling: Batch sorption and column experiments of Ni with quartz, K-feldspar, and muscovite. Doktorarbeit, TU Braunschweig, 2023.
- /GEC 13/ Geckeis, H., Lützenkirchen, J., Polly, R., Rabung, T., Schmidt, M.: Mineral-water interface reactions of actinides. Chemical reviews, Bd. 113, Nr. 2, S. 1016–1062, DOI 10.1021/cr300370h, 2013.
- /GIL 74/ Giles, C. H., Smith, D., Huitson, A.: A general treatment and classification of the solute adsorption isotherm. I. Theoretical. Journal of Colloid and Interface Science, Nr. 47, S. 755-765, 1974.
- /GOO 01/ Goodger, D., van Rossum, G.: PEP 257 – Docstring Conventions. Erreichbar unter <https://peps.python.org/pep-0257/>, Stand vom 29. Mai 2001.
- /GRE 25/ Grecco, H. E.: Pint: makes units easy. Erreichbar unter <https://pint.readthedocs.io/en/stable/>, abgerufen am 16. Oktober 2025.
- /GRI 82/ Grimm, W. D.: Sedimentpetrographische Untersuchungen an Proben aus dem Raum Gorleben. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), 1982.
- /IAEA 81/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Considerations concerning "de minimis" quantities of radioactive waste suitable for dumping at sea under a general permit, Report of an advisory group meeting organized by the IAEA and held in Vienna 2-6 July 1979. IAEA TECDOC, Nr. 244: Vienna, 1981.
- /IAEA 83/ International Atomic Energy Agency (IAEA): De minimis concepts in radioactive waste disposal, Considerations in Defining de Minimis Quantities of Solid Radioactive Waste for Uncontrolled Disposal by Incinerations and Landfill. IAEA TECDOC, Nr. 282: Vienna, 1983.
- /IAEA 87/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Exemption of Radiation Sources and Practices from Regulatory Control, Interim Report. IAEA TECDOC, Nr. 401: Vienna, 1987.

- /IAEA 88/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Principles for the exemption of radiation sources and practices from regulatory control, IAEA Safety Guides. IAEA Safety Series, No. 89, 23 S., ISBN 9201238886: Vienna, 1988.
- /IAEA 94/ IAEA: Handbook of parameter values for the prediction of radionuclide transfer in temperate environments. Technical Report Series, Nr. 364: Wien, 1994.
- /IAEA 03/ International Atomic Energy Agency (IAEA): International Basic Safety Standards for Protection Against Ionizing Radiation and for the Safety of Radiation Sources, CD-ROM Edition 2003. IAEA Safety Series, 115/CD: Vienna, 2003.
- /IAEA 04/ International Atomic Energy Agency (IAEA) (Hrsg.): Application of the Concepts of Exclusion, Exemption and Clearance, Safety Guide RS-G-1.7. IAEA Safety Standards Series: Vienna, Austria, 2004.
- /IAEA 05/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Derivation of activity concentration values for exclusion, exemption and clearance (SR 44). Safety Reports Series, Bd. 44, 61 S., ISBN 9201131046: Vienna, 2005.
- /IAEA 14/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Radiation Protection and Safety of Radiation Sources: International Basic Safety Standards, General Safety Requirements Part 3 No. GSR Part 3. IAEA Safety Standards: Vienna, Austria, 2014.
- /IAEA 23a/ International Atomic Energy Agency (IAEA) (Hrsg.): Application of the Concept of Exemption, General Safety Guide No. GSG-17. IAEA Safety Standards, GSG-17, 148 S.: Vienna, Austria, 2023.
- /IAEA 23b/ International Atomic Energy Agency (IAEA) (Hrsg.): Application of the Concept of Clearance, General Safety Guide No. GSG-18. IAEA Safety Standards: Vienna, 2023.

- /ICRP 07/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection, Publication 103. Annals of Nuclear Energy, Bd. 37, Nr. 2-4, 2007.
- /ICRP 08/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Nuclear Decay Data for Dosimetric Calculations, ICRP Publication 107. Annals of the ICRP, Bd. 38, Nr. 3, 2008.
- /ICRP 10/ International Commission on Radiological Protection (ICRP): Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures, ICRP Publication 116. Annals of the ICRP, Bd. 40, Nr. 2-5, S. 1–257, DOI 10.1016/j.icrp.2011.10.001, 2010.
- /JOH 24/ Johnen, M., Seher, H., Artmann, A., Meyering, H., Winter, R., Class, H., Flemisch, B.: Numerical groundwater and transport modelling of radionuclides on a generic landfill. Präsentation, DOI 10.48380/xstc-ss08, Geosaxonia 2024, DGGV: Dresden, 2024.
- /JUP 25/ Jupyter Team: Jupyter Notebook Documentation. Erreichbar unter <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/>, abgerufen am 20.10.25.
- /KAM 20/ Kamboj, S., Gnanapragasam, E., Cheng, J.-J., Lepoire, E., Wang, C., Biwer, B., Yu, C.: Default Parameter values and Distribution in RESRAD-ONSITE V7.s, RESRAD-BUILD V3.5, and RESRAD-OFFSITE V4.0 Computer Codes. Hrsg.: U.S. Nuclear Regulatory Commission (NRC), NUREG/CR-7267: Argonne, Illinois, Februar 2020.
- /KAM 24/ Kamboj, S., Gnanapragasam, E., Cheng, J.-J., LePoir, D., Wang, C., Biwer, B., Yu, C.: Default Parameter Values and Distribution in RESRAD-ONSITE V7.2, RESRAD-BUILD V3.5, and RESRAD-OFFSITE V4.0 Computer Codes. Office of Nuclear Regulatory Research, NUREG/CR, Nr. 7267, 2024.

- /KOC 21/ Koch, T., Gläser, D., Weishaupt, K., Ackermann, S., Beck, M., Becker, B., Burbulla, S., Class, H., Coltman, E., Emmert, S., Fetzer, T., Grüninger, C., Heck, K., Hommel, J., et al.: DuMux 3 – an open-source simulator for solving flow and transport problems in porous media with a focus on model coupling. *Computers & Mathematics with Applications*, Bd. 81, S. 423–443, DOI 10.1016/j.camwa.2020.02.012, 2021.
- /KÖN 23/ König, C. M., Becker, M., Brömme, K., Diehl, A., König, T., Rosen, B., Rüber, O., Schröder, S., Seidel, T., Zimmermann, C.: *Simulation of Processes in Groundwater (SPRING), Benutzerhandbuch für Version 6*. delta h, ISBN 978-3-00-073433-5: Witten, 2023.
- /LAGA 20/ LAGA Ad-hoc-AG „Deponietechnik“ (Hrsg.): *Bundeseinheitlicher Qualitätsstandard 2-2 „Mineralische Basisabdichtungskomponenten aus vergüteten natürlichen mineralischen Baustoffen“*. 31 S., 2. Dezember 2020.
- /LEE 06/ Lee, S.-G., Lee, K. Y., Cho, S. Y., Yoon, Y. Y., Kim, Y.: Sorption properties of ¹⁵²Eu and ²⁴¹Am in geological materials: Eu as an analogue for monitoring the Am behaviour in heterogeneous geological environments. *Geosciences Journal*, Bd. 10, Nr. 2, S. 103–114, DOI 10.1007/BF02910354, 2006.
- /LES 24/ Lessing, J., Neumann, J., Lützenkirchen, J., Bok, F., Moisei-Rabung, S., Schild, D., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M.: Natural and synthetic plagioclases: Surface charge characterization and sorption of trivalent lanthanides (Eu) and actinides (Am, Cm). *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Bd. 688, S. 133529, DOI 10.1016/j.colsurfa.2024.133529, 2024.
- /LIC 02/ Lichner, L., Cipakova, A.: Cadmium distribution coefficients and Cd transport in structured soils. *Rostlinna Vyroba*, Nr. 3, S. 96–100, 2002.
- /LIM 07/ Limousin, G., Gaudet, J.-P., Charlet, L., Szenknect, S., Barthes, V., Krimissa, M.: Sorption Isotherms: A review on physical bases, modelling and measurement. *Applied Geochemistry*, Nr. 22, S. 249–275, 2007.

- /MER 12/ Merk, R.: Numerical modeling of the radionuclide water pathway with HYDRUS and comparison with the IAEA model of SR 44. *Journal of Environmental Radioactivity*, Bd. 105, S. 60–69, DOI 10.1016/j.jenvrad.2011.10.014, 2012.
- /NEU 21/ Neumann, J., Brinkmann, H., Britz, S., Lützenkirchen, J., Bok, F., Stockmann, M., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M.: A comprehensive study of the sorption mechanism and thermodynamics of f-element sorption onto K-feldspar. *Journal of colloid and interface science*, Bd. 591, S. 490–499, DOI 10.1016/j.jcis.2020.11.041, 2021.
- /NOS 96/ Noseck, U.: Auswertung von Sorptionsdaten hinsichtlich nichtlinearer Sorptionsmodelle für die Nuklid Ausbreitung im Deckgebirge, GRS-134. September 1996.
- /NOS 12/ Noseck, U., Brendler, V., Flügge, J., Stockmann, M., Britz, S., Lampe, M., Schikora, J., Schneider, A.: Realistic integration of sorption processes in transport codes for long-term safety assessments. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-297, 2012.
- /NOS 18/ Noseck, U., Brendler, V., Britz, S., Stockmann, M., Fricke, J., Richter, C., Lampe, M., Gehrke, A., Flügge, J.: Smart Kd-Concept for Long-term Safety Assessments - Extension towards more Complex Applications. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-500, 2018.
- /NRC 92/ W. E. Kennedy, Jr., D. L. Streng: Residual Radioactive Contamination From Decommissioning, Technical Basis for Translating Contamination Levels to Annual Total Effective Dose Equivalent Final Report. U.S. Nuclear Regulatory Commission (NRC): Washington, DC, 1992.
- /NUM 25/ numpydoc maintainers: Numpydoc Style guide. Erreichbar unter <https://numpydoc.readthedocs.io/en/latest/format.html>, abgerufen am 20. Oktober 2025.
- /OECD 00/ OECD Publishing: OECD Guidelines for the Testing of Chemicals/Section 1: Physical-Chemical properties, Test No. 106: Adsorption - Desorption using a batch equilibrium method. ISBN 978-92-64-06960-2, 2000.

- /POS 95/ Poschner, J., Schaller, G.: Richtwerte für die spezifische Aktivität von schwach radioaktiv kontaminierten Abfällen, die konventionell entsorgt werden, BfS-ISH-169/95. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), ISBN 0937-4558: Neuherberg, 1995.
- /RÜB 22/ Rübel, A., Gehrke, A. C.: Modellierung des Radionuklidtransports im Tongestein, Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland. Bd. 668, GRS-668, 161 S., ISBN 978-3-949088-59-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Mai 2022.
- /SCH 20/ Schlegel, M., Hummrich, H., Hellman, K., Kurzius, F.: Experimentelle Bestimmung von Kd-Werten für endlagerrelevante Radionuklide und REFE-SOL-Böden, Vorhaben 3616S52530, Auftragnehmer: G.E.O.S. Ingenieurgesellschaft mbH. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS), BfS-RESFOR-163/20: Salzgitter, September 2020.
- /SCH 22/ Schneider, A., Wolf, J., Zhao, H.: Projekt go-CAM, Implementierung strategischer Entwicklungsziele im Küstenzonenmanagement, Teilvorhaben 2: Grundwasserströmung und Schadstofftransport : Schlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS, Bd. 660, GRS-660, 70 S., ISBN 978-3-949088-51-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Januar 2022.
- /SEH 16/ Seher, H., Navarro, M., Artmann, A., Larue, J., Roloff, R., Weiß, D.: Modeling contaminant transport in generic landfills for decommissioning waste from German nuclear power plants. Progress in Nuclear Energy, Bd. 89, S. 46–56, DOI 10.1016/j.pnucene.2016.01.015, 2016.
- /SHE 90/ Sheppard, M., Thibault, D. H.: Default soil solid/liquid partition coefficients, Kds, for four major soil types: a compendium. Health Physics, Nr. 59, S. 471–482, 1990.

- /SHE 07/ Sheppard, M. I., Sheppard, S. C., Grant, C. A.: Solid/liquid partition coefficients to model trace element critical loads for agricultural soils in Canada. Canadian Journal of Soil Science, Nr. 87, S. 189–201, 2007.
- /SSK 98/ Strahlenschutzkommission (SSK) (Hrsg.): Freigabe von Materialien, Gebäuden und Bodenflächen mit geringfügiger Radioaktivität aus anzeige- oder genehmigungspflichtigem Umgang, Empfehlung der Strahlenschutzkommission, Verabschiedet in der 151. Sitzung der SSK am 11./12.02.1998, Veröffentlicht im BAnz Nr. 193 vom 15.10.1998. 55 S., 1998.
- /SSK 06/ Strahlenschutzkommission (SSK): Freigabe von Stoffen zur Beseitigung, Verabschiedet in der 213. Sitzung der SSK am 05./06.12.2006, Veröffentlicht im BAnz Nr. 113a vom 22.06.2007, auch erschienen als Heft 54: Freigabe von Stoffen zur Beseitigung (ISBN: 978-3-87344-135-4). Empfehlung der Strahlenschutzkommission, 1. Dezember 2006.
- /SSV 17/ Verordnung über den Schutz vor Schäden durch ionisierende Strahlen (Strahlenschutzverordnung - StrlSchV) in der Fassung vom 20. Juli 2001 (BGBl. I 2001, Nr. 38, S. 1714; 2002 I S. 1459), zuletzt geändert 27. Januar 2017 (BGBl. I 2017, Nr. 5, S. 114, 1222).
- /SSV 20/ Verordnung zum Schutz vor der schädlichen Wirkung ionisierender Strahlung (Strahlenschutzverordnung - StrlSchV) in der Fassung vom 29. November 2018 (BGBl. I 2018, Nr. 41, S. 2034, 2036), zuletzt geändert 27. März 2020 (BGBl. I 2020, S. 748).
- /SSV 24/ Verordnung zum Schutz vor der schädlichen Wirkung ionisierender Strahlung (Strahlenschutzverordnung - StrlSchV) in der Fassung von 29. November 2018 (BGBl. I S. 2034, 2036; 2021 I S. 5261), zuletzt geändert 10. Januar 2024 (BGBl. 2024 I Nr. 8).
- /STR 13/ Strahlenschutzkommission (SSK): Ermittlung der Strahlenexposition, Empfehlung der Strahlenschutzkommission. Empfehlung der Strahlenschutzkommission, 263. Sitzung, 138 S.: Bonn, 12. September 2013.

- /SZE 10/ Szemerski, B.: Generische Transportmodellierung von Radionukliden aus Halden und untertägigen Lagern unter Anwendung des kd-Konzeptes. Diplomarbeit, Institut für Radioökologie und Strahlenschutz, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover: Hannover, November 2010.
- /TAN 10/ Tan, X., Fang, M., Wang, X.: Sorption speciation of lanthanides/actinides on minerals by TRLFS, EXAFS and DFT studies: a review. *Molecules* (Basel, Switzerland), Bd. 15, Nr. 11, S. 8431–8468, DOI 10.3390/molecules15118431, 2010.
- /THI 04/ Thierfeldt, S., Wörlen, S.: Spezifische Fragestellungen für die Fortentwicklung von Datensätzen für die Freigrenzen, Freigabe von Oberflächenkontaminationen. Fortentwicklung des radiologischen Modells für die Berechnung von Freigabewerten für die Freigabe zur Beseitigung, Ergänzungen und Durchsicht: 17. Dezember 2004, Endbericht zu AP2/AP3 des BMU Vorhabens StSch 4279 - BS-Nr. 0107-01. Brenk Systemplanung (BS), 233 S.: Aachen, 31. Juli 2004.
- /THI 16/ Thielen, H., Sogalla, M., Richter, C., Kümmerle, E., Möllmann-Coers, M.: Verifizierung des Dosismoduls DARTM (Dosis-Atmosphärisches-Radionuklid-Transportmodell), Fachlicher Abschlussbericht zum Vorhaben 3615S62542, Entwurf. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Forschungszentrum Jülich GmbH: Köln, August 2016.
- /VAN 80/ van Genuchten, M. T.: A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*, Bd. 44, Nr. 5, S. 892–898, DOI 10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x, 1980.
- /VAN 09/ van Rossum, G., Drake, F. L.: *Python 3 Reference Manual*. ISBN 1441412697, CreateSpace, 2009.
- /WIN 22/ Winter, R., Valsamidou, A., Class, H., Flemisch, B.: A Study on Darcy versus Forchheimer Models for Flow through Heterogeneous Landfills including Macropores. *Water*, Bd. 14, Nr. 4, S. 546, DOI 10.3390/w14040546, 2022.

- /YU 00/ Yu, C.: Development of Probabilistic RESRAD 6.0 and RESRAD-BUILD 3.0 Computer Codes. Hrsg.: NRC, Argonne National Laboratory (ANL), NURED/CR-6697, ANL/EAD/TM-98, 2000.
- /YU 01/ Yu, C., Zielen, A. J., Cheng, J.-J., Lepoire, E., Gnanapragasam, E., Kamboj, S., Arnish, J., Wallo, A., Williams, W. A., Peterson, H.: User's Manual for RESRAD Version 6. Hrsg.: United States Department of Energy, Environmental Assessment Division, Argonne National Laboratory, ANL-EAD-4: Argonne, Illinois, Juli 2001.
- /YU 07/ Yu, C.: User's manual for RESRAD-OFFSITE, Version 2. Hrsg.: Argonne National Laboratory (ANL), 480 S., Juni 2007.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Einordnung des 10 μSv -Kriteriums (Dosiskriterium) in die Schwankungsbreite der jährlichen natürlichen Dosis in Deutschland /ESK 22/	8
Abb. 3.2	Übersicht über die veränderten Freigabeoptionen und Freigabemodelle der StrlSchV (2018) gegenüber der StrlSchV (2001)	13
Abb. 3.3	Beispiel Datenblatt (Ausschnitt) für die nuklidspezifischen Freigabewerte gemäß StrSchV	21
Abb. 3.4	Überblick Aufbau generischer Szenarien für das Berechnungsinstrument	29
Abb. 3.5	Beispielhafte Ausgabe der Dokumentation für die Funktion <code>calculate</code> im Module <code>options.paths.generic_path</code>	50
Abb. 3.6	Modellgeometrie der Deponie mit Observationspunkten	78
Abb. 3.7	Konzentrationsdurchbruchskurven für die Rechenfälle 1 bis 4 für die drei verschiedenen Codes DuMu ^x , d ^{3f++} und SPRING	82
Abb. 3.8	Konzentrationsdurchbruchskurven für die Rechenfälle 5 bis 7 für die drei verschiedenen Codes DuMu ^x , d ^{3f++} und SPRING	83
Abb. 3.9	Konzentrationsdurchbruchskurven für die Rechenfälle 8 bis 10 für die drei verschiedenen Codes DuMu ^x , d ^{3f++} und SPRING	84
Abb. 3.10	Konzentrationsdurchbruchskurven für die Rechenfälle 11 bis 14 mit ungesättigter Zone für die drei verschiedenen Codes DuMu ^x , d ^{3f++} und SPRING	85
Abb. 3.11	Konzentrationsdurchbruchskurven für die Rechenfälle 15 bis 17 mit ungesättigter Zone für die drei verschiedenen Codes DuMu ^x , d ^{3f++} und SPRING	86
Abb. 3.12	Konzentrationsdurchbruchskurven für die Rechenfälle 18 bis 20 mit ungesättigter Zone für die drei verschiedenen Codes DuMu ^x , d ^{3f++} und SPRING	87
Abb. 3.13	Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 1	90
Abb. 3.14	Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 2	91
Abb. 3.15	Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 3	92

Abb. 3.16	Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 4	93
Abb. 3.17	Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 5	94
Abb. 3.18	Konzentrationsdurchbruchskurven verschiedener Beobachtungspunkte des Deponiemodells für Rechenfall 6	95
Abb. 3.19	Screenshot Jupyter-Book Initialisierung Berechnungsvorgang [1] bis [3]	102
Abb. 3.20	Screenshot Jupyter-Book zur Eingabe individueller Parameterwerte [5]	102
Abb. 3.21	Screenshot Jupyter-Book Start der Berechnung [6] sowie Ausgabe erster Zwischenergebnisse [7]	103
Abb. 3.22	Screenshot Jupyter-Book Berechnung Zwischenergebnisse [8] und mögliche Darstellung der Berechnungsparameter [9]	103
Abb. 3.23	Screenshot Jupyter-Book nuklidspezifische Ausgabe des freigabebestimmenden Szenarios, der damit verbundenen Jahresdosis und den hieraus resultierenden Freigabewerten [10]	104
Abb. 3.24	Screenshot manuelle Anpassung des Verdünnungsfaktors f_d (Ausschnitt).....	105
Abb. 3.25	Screenshot Jupyter-Book, nuklidspezifische Ausgabe des freigabebestimmenden Szenarios, der damit verbundenen Jahresdosis und den hieraus resultierenden Freigabewerten [10] nach Anpassung des Verdünnungsfaktors.....	105

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Aufbau der Parametertabellen	22
Tab. 3.2	Ausgewählte Datenblätter.....	23
Tab. 3.3	Parameter zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund externer Strahlendosis.....	36
Tab. 3.4	Parameter zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund Inhalation.....	37
Tab. 3.5	Parameter zur Berechnung der Jahresdosis aufgrund Direktingestion.....	38
Tab. 3.6	Überblick über die gem. GSG-18 empfohlenen zu berücksichtigenden Punkte bei der spezifischen Szenarienbildung im Vergleich zu dem generischen Ansatz des im Eigenforschungsvorhaben beschriebenen Berechnungsinstrument.....	42
Tab. 3.7	Für die Ausführung des Berechnungsinstruments nötige Python-Module.....	48
Tab. 3.8	Vordefinierte Freigabeoptionen.....	55
Tab. 3.9	Parameter für den Aufruf der Funktion <code>GenericOption.path_variables</code>	59
Tab. 3.10	Parameter für den Aufruf der vordefinierten Freigabeoption in Tab. 3.8	60
Tab. 3.11	Parameter für den Aufruf der Klasse <code>GenericOption</code>	61
Tab. 3.12	Attribute der Klasse <code>GenericOption</code>	61
Tab. 3.13	Funktionen der Klasse <code>GenericOption</code>	62
Tab. 3.14	Parameter für den Aufruf der Funktion <code>create_option</code>	62
Tab. 3.15	Parameter für den Aufruf der Funktion <code>create_scenario</code>	63
Tab. 3.16	Parameter für den Aufruf der Funktion <code>create_path</code>	63
Tab. 3.17	Ausschnitt aus der Berechnung mit Geant4, Dosisleistungen (z. B. mSv/h) pro Bq in Abhängigkeit der Primärenergie	66
Tab. 3.18	Beispielhafte Ergebnisse der Dosisberechnung mit ARTM für die Bodenstrahlung	69
Tab. 3.19	Ergebnisse der Dosisberechnung mit ARTM für die Inhalation	70
Tab. 3.20	Ergebnisse der Dosisberechnung mit ARTM für die Ingestion kontaminierter Lebensmittel.....	71

Tab. 3.21	Van Genuchten-Parameter beider Modelle	75
Tab. 3.22	Hydraulische Parameter des Bodenmodells	76
Tab. 3.23	Transportparameter für die Rechenfälle des Bodenmodells.....	77
Tab. 3.24	Koordinaten der Randknoten für das Deponiemodell	79
Tab. 3.25	Hydraulische Parameter des Deponiemodells	80
Tab. 3.26	Transportparameter für die unterschiedlichen Rechenfälle für das Bodenmodell.....	80
Tab. 3.27	Ausgewählte Szenarien für die fiktive spezifische Freigabeoption „Abfallverbrennung“	98
Tab. 3.28	Verwendete Datenblätter und zugeordnete Expositionspfade	99
Tab. 3.29	Spezifische Annahmen für die einzelnen spezifischen Szenarien	100
Tab. 3.30	Veränderung des Verdünnungsfaktor f_d im „dustbunker“ Szenario infolge veränderter nuklidspezifischer Anteile in der Staubfraktion /THI 04/.....	104
Tab. 3.31	Gegenüberstellung der Ergebnisse der Berechnung der Freigabewerte (FG-Werte) vor und nach Anpassung der Staubfraktionierung.....	106

Abkürzungsverzeichnis

AMAD	Activity Median Aerodynamic Diameter
ARTM	Atmosphärisches Radionuklid-Transport-Modell
AtG	Atomgesetz
AUSBRDOS	Ausbreitungsrechnung und Dosis
AVV	Allgemeine Verwaltungsvorschrift
BASE	Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung
BET	Brunauer-Emmett-Teller
BfS	Bundesamt für Strahlenschutz
BMP	Best Management Practices
BMUKN	Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit
CERN	Conseil européen pour la recherche nucléaire, Europäische Organisation für Kernforschung
CSV	Comma-Separated Values
DARTM	Dosis Atmosphärisches Radionuklid-Transport-Modell
DepV	Deponieverordnung
DGGV	Deutsche Geologische Gesellschaft – Geologische Vereinigung
DK	Deponieklasse
DOE	Department of Energy
EMRAS	Environmental Modeling for Radiation Safety
ESK	Entsorgungskommission
FG	Freigabe
FKZ	Forschungskennzeichen
GEANT	GEometry ANd Tracking
GEMS	Gibbs Energy Minimisation Software
GEN	Generisch
GIS	Geographisches Informationssystem
GM	Geometrisches Mittel

GO-ARTM	Graphische Oberfläche für ARTM
GOK	Geländeoberkante
GRS	Die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
GSD	Geometrische Standardabweichung
GSG	General Safety Guide
GSR	General Safety Requirement
GUI	Graphical User Interface, Grafische Benutzeroberfläche
GW	Grundwasser
GWL	Grundwasserleiter
IAEA	International Atomic Energy Agency, Internationale Atomenergie-Organisation
ICP-MS	Inductively Coupled Plasma - Mass Spectrometry, Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma
ICRP	International Commission on Radiological Protection, Internationale Strahlenschutzkommission
KD	Gleichgewichtsdissoziationskonstante
LWI	Leichtweiß-Institut für Wasserbau
MC	Monte Carlo
MVA	Müllverbrennungsanlage
PDF	Probability Density Function
PHREEQC	PH-REdox-EQuilibrium C
PP	Polypropylen
QS	Qualitätssicherung
REA	Rauchgasentschwefelungsanlage
RESRAD	RESidual RADioactive materials
RIO	Rational Impartial Observer
SHELF	Sheffield Elicitation Framework
SLR	Solid-Liquid-Ratio, Feststoff-Lösungs-Verhältniss
SPEZ	Spezifisch
SPRING	Simulation of Processes in Groundwater

SR	Safety Requirement
SSR	Specific Safety Requirement
SW	Surface Water, Oberflächenwasser
SWEP	Software-Entwicklungs-Projekt
StrlSchV	Strahlenschutzverordnung
TA Luft	Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft
TDR	Time Domain Reflectometry
TEI	Trace Element Indicator (nationaler Indikator für Spurenelemente)
TU	Technische Universität
TüV	Technischer Überwachungsverein
UTF	Unicode Transformation Format)
Var	Variationsbereich
VDI	Verein Deutscher Ingenieure e.V.

A Anhang

A.1 Parameterdatenblätter

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	#Delution factor SR-44 (IAEA 2005)											
2	# Values for realistic scenarios (maxima across the scenarios)											
3	# In the case of landfills (WL), a value of 1 is conservatively assumed for external exposure in SR-44, even though a value of 0.1 would appear more realistic.											
4	# SR-44, even though a value of 0.1 would appear more realistic.											
5	nuclide	parameter	unit	external	inhalation	ingestion						
6	all	fd	dimensionle	1	0,1	0,1						

Abb. A. 1 Screenshot Datenblatt „Delution factor“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# The conversion factor from surface-specific to mass-specific activity is 0.0033 (Bq/g)/(Bq/cm ²), calculated as 0.1 cm ² /g × 0.033.									
2	# from THI 00 (building for demolition									
3	# used instead of the mixing factor (possibly to be combined)									
4	nuclide	parameter	unit	building	default					
5	all	c	(Bq/g)/(Bq/cm ²)	0,0033	1					

Abb. A. 2 Screenshot Datenblatt „Conversion factor“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	# aus StrlSchV [2023], Anlage 4, Tabelle 1										
2	# half-life values, given in column 15 of table 1										
3	# renamed 'm' to 'min' for astropy and removed signs '<', '>' by replacing '< 10' --> '10' (N-13, Rn-220+) and '> 9,2E+16' --> '9,2E+16' (Te-123)										
4	nuclide	parameter	unit	halflife							
5	H-3	t_half	a	12,3							
6	Be-7	t_half	d	53,2							
7	Be-10	t_half	a	1,60E+06							
8	C-11	t_half	min	20,4							
9	C-11 Monoxi	t_half	min	20,4							
10	C-14	t_half	a	5,70E+03							
11	C-14 Monoxi	t_half	a	5,70E+03							

Abb. A. 3 Screenshot Datenblatt „Halflife values“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# For some scenarios, a time period is specified before the scenario begins									
2	# The following values are derived, among others, from the literature sources THI 99, IAEA 05, RP 113, RP 114, and THI 00.									
3	# Ingestion: Direct ingestion – longer time periods are assumed for secondary ingestion.									
4	# SR-44 specifies a minimum duration of 30 days for external, inhalation, and ingestion exposure (considered realistic).									
5	nuclide	parameter	unit	foodstuff	inhalation	external	ingestion	farming		
6	all	t1	a	1	0	0	0	10		

Abb. A. 4 Screenshot Datenblatt „Decay before scenario“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# For some scenarios, a time period is specified indicating how long the scenario lasts.									
2	# The following values are derived, among others, from the literature sources THI 99, IAEA 05, RP 113, RP 114, and THI 00.									
3	nuclide	parameter	unit	default	building	MBA				
4	all	t2	a	1	1	0,25				

Abb. A. 5 Screenshot Datenblatt „Decay during scenario“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# Exposure time estimated from literature									
2	# The initially indicated value represents the maximum annual working time; in most cases, the actual value is lower.									
3	# Individual working times for short-term activities are not listed in the table									
4	nuclide	parameter sy	unit	worker	resident					
5	all	t_e	h/a	1800	8760					
6										
7										

Abb. A. 6 Screenshot Datenblatt „Time_Exposure_default“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# Concentration factor estimated from literature: SR-44									
2	# Dimensionless factor describing the radionuclide-dependent (in the case of metal melting,									
3	# ranging between 1 and 70) concentration in the respirable dust fraction.									
4	nuclide	parameter symbol	unit	inhalation	ingestion					
5	all	fc	dimensionle	4	2					
6										
7										

Abb. A. 7 Screenshot Datenblatt „Concentration_factor“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
4	# Dose conversion coefficient according to THI 04. Dose coefficients from THI 04 for external radiation exposure for various geometries													
5	# Note: There are differences between the final report of June and the final report of December. The latter also contains values for Ba-133, which are missing in the former.													
6	# A: Transport (concrete), B: Landfill entrance area, C: Landfill vehicle cabin with 2 cm shielding, D: Landfill open area, E: Landfill MBA, F: MVA bunker, G: Road construction, H: Metal product use, K: PVC													
7	nuclide	parameter symbol	unit	A	B	C	D	E	F	G	H	K		
8	H-3	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	
9	Be-7	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	2,25E-09	3,39E-09	3,88E-09	1,55E-08	2,64E-09	3,46E-09	2,52E-09	1,07E-09	5,30E-10		
10	C-14	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	
11	O-15	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	4,73E-08	7,14E-08	8,02E-08	3,12E-07	5,55E-08	7,30E-08	5,24E-08	2,24E-08	1,09E-08		
12	F-18	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	4,58E-08	6,91E-08	7,77E-08	3,02E-07	5,37E-08	7,07E-08	5,07E-08	2,17E-08	1,05E-08		
13	Na-22	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	1,14E-07	1,73E-07	1,83E-07	5,98E-07	1,40E-07	1,90E-07	1,27E-07	4,95E-08	2,26E-08		
14	Na-24	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	2,40E-07	3,59E-07	3,86E-07	9,81E-07	3,19E-07	4,52E-07	3,04E-07	8,92E-08	3,77E-08		
15	Si-31	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	4,99E-11	7,59E-11	7,69E-11	2,21E-10	6,28E-11	8,62E-11	5,59E-11	2,04E-11	8,89E-12		
16	P-32	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	
17	P-33	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	
18	S-35	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	
19	Cl-36	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	
20	Cl-38	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	8,69E-08	1,31E-07	1,37E-07	3,54E-07	1,14E-07	1,60E-07	1,05E-07	3,29E-08	1,39E-08		
21	K-40	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	8,90E-09	1,36E-08	1,37E-08	3,79E-08	1,14E-08	1,56E-08	1,01E-08	3,57E-09	1,54E-09		
22	K-42	D_ext	(Sv/h)/(Bq/g)	1,58E-08	2,41E-08	2,43E-08	6,69E-08	2,02E-08	2,79E-08	1,80E-08	6,29E-09	2,71E-09		

Abb. A. 8 Screenshot Datenblatt „Dose_coefficients_external_THI04_mass“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	# Resident and worker correspond to a value >17 years.											
2	# THI 99: Table A3-1 — Age-dependent inhalation factors [Sv/Bq], lung retention classes, [EUR-96].											
3	nuclide	parameter sy	unit	< 1 a	1 - 2 a	2 - 7 a	7 - 12 a	12 - 17 a	> 17 a	Lungenret	resident	worker
4	H-3	D_inh	Sv/Bq	3,4E-10	2,7E-10	1,4E-10	8,2E-11	5,3E-11	4,5E-11	M	4,5E-11	4,5E-11
5	Be-7	D_inh	Sv/Bq	2,5E-10	2,1E-10	1,2E-10	8,3E-11	6,2E-11	5E-11	M	5E-11	5E-11
6	C-14	D_inh	Sv/Bq	8,3E-09	6,6E-09		4E-09	2,8E-09	2,5E-09		2E-09	2E-09
7	O-15	D_inh	Sv/Bq	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	F-18	D_inh	Sv/Bq	4,1E-10	2,9E-10	1,5E-10	9,7E-11	6,9E-11	5,6E-11	M	5,6E-11	5,6E-11
9	Na-22	D_inh	Sv/Bq	9,7E-09	7,3E-09	3,8E-09	2,4E-09	1,5E-09	1,3E-09	F	1,3E-09	1,3E-09
10	Na-24	D_inh	Sv/Bq	2,3E-09	1,8E-09	9,3E-10	5,7E-10	3,4E-10	2,7E-10	F	2,7E-10	2,7E-10
11	Si-31	D_inh	Sv/Bq	6,9E-10	4,4E-10	2E-10	1,3E-10	8,9E-11	7,4E-11	M	7,4E-11	7,4E-11
12	P-32	D_inh	Sv/Bq	2,2E-08	1,5E-08	8E-09	5,3E-09	4E-09	3,4E-09	M	3,4E-09	3,4E-09
13	P-33	D_inh	Sv/Bq	6,1E-09	4,6E-09	2,8E-09	2,1E-09	1,9E-09	1,5E-09	M	1,5E-09	1,5E-09
14	S-35	D_inh	Sv/Bq	5,9E-09	4,5E-09	2,8E-09	2E-09	1,8E-09	1,4E-09	M	1,4E-09	1,4E-09
15	Cl-36	D_inh	Sv/Bq	3,1E-08	2,6E-08	1,5E-08	0,00000001	8,8E-09	7,3E-09	M	7,3E-09	7,3E-09
16	Cl-38	D_inh	Sv/Bq	4,7E-10	3E-10	1,4E-10	8,5E-11	5,4E-11	4,5E-11	M	4,5E-11	4,5E-11
17	Ar-37	D_inh	Sv/Bq	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Abb. A. 9 Screenshot Datenblatt „Dose_coefficients_inhalation_THI99“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	# Dust concentration factor for inhalation								
2	# Various values, taken from IAEA 05 / SR-44								
3	nuclide	parameter	unit	resident	worker				
4	all	C_dust	g/m ³	0,0001	0,0005				
5									
6									
7									

Abb. A. 10 Screenshot Datenblatt „Dust concentration”

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# Breathing rate estimated from literature: THI 04, SR-44									
2	nuclide	parameter	unit	worker	resident	> 17 a	1 - 2 a			
3	all	Br	m ³ /h	1,2	1,2	1,2	0,22			
4										
5										

Abb. A. 11 Screenshot Datenblatt „Breathing rate”

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	# (Unintentionally) ingested amount estimated from literature: SR-44										
2	# May be calculated as the product of the amount per hour (in g/h) and the annual exposure time (in h/a) → see: Ingestion_Soil_Thi99.csv										
3	nuclide	parameter	unit	worker	resident	> 17 a	1 - 2 a				
4	all	M	g/a	10	10	10	25				
5											
6											

Abb. A. 12 Screenshot Datenblatt „Mass_ingestion”

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	# Calculation of the dose per 1 g/Bq using the DARTM program: The maximum values of ground radiation are										
2	# generally dominated by wet deposition of radionuclides and occur immediately adjacent to the chimney for										
3	# the reference individual, a toddler aged 0–1 years. Input values are as described in DARTM, based on GRS-600, ISBN 978-3-947685-86-8										
4	nuclide	parameter	unit	resident							
5	Ag-108m	E_SpezL1	μSv/a	3,85E-01							
6	Ba-133	E_SpezL1	μSv/a	3,33E-04							
7	C-14	E_SpezL1	μSv/a								
8	Cl-36	E_SpezL1	μSv/a								
9	Co-60	E_SpezL1	μSv/a	1,00E-03							
10	Cs-137	E_SpezL1	μSv/a	9,09E-02							
11	H-3	E_SpezL1	μSv/a								
12	I-129	E_SpezL1	μSv/a	6,25E-03							
13	Mn-54	E_SpezL1	μSv/a	5,56E-05							
14	Ni-59	E_SpezL1	μSv/a	1,00E-06							
15	Pu-238	E_SpezL1	μSv/a	1,79E-06							
16	Pu-239	E_SpezL1	μSv/a	1,00E-06							
17	Sr-90	E_SpezL1	μSv/a								
18	Tc-99	E_SpezL1	μSv/a								
19	U-238	E_SpezL1	μSv/a	7,14E-05							
20											

Abb. A. 13 Screenshot Datenblatt „Result_DARTM_SpezL1”

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	# Calculation of the dose per 1 g/Bq using the DARTM program: Example maximum values of near-ground										
2	# concentrations are obtained for the parameter values assumed in GRS Report 506 /GRS 22/ assumed chimney.										
3	# at a distance of approximately 530 m northeast of the Input values are as described in DARTM, based on GRS-600, ISBN 978-3-947685-86-8										
4	nuclide	parameter symbol	unit	resident							
5	Ag-108m	E_SpezL2	µSv/a	3,45E-05							
6	Ba-133	E_SpezL2	µSv/a	9,09E-08							
7	C-14	E_SpezL2	µSv/a	1,08E-03							
8	Cl-36	E_SpezL2	µSv/a	6,67E-07							
9	Co-60	E_SpezL2	µSv/a	2,86E-07							
10	Cs-137	E_SpezL2	µSv/a	3,57E-05							
11	H-3	E_SpezL2	µSv/a	4,76E-05							
12	I-129	E_SpezL2	µSv/a	3,33E-05							
13	Mn-54	E_SpezL2	µSv/a	1,39E-08							
14	Ni-59	E_SpezL2	µSv/a	4,17E-09							
15	Pu-238	E_SpezL2	µSv/a	1,02E-03							
16	Pu-239	E_SpezL2	µSv/a	1,11E-03							
17	Sr-90	E_SpezL2	µSv/a	1,49E-06							
18	Tc-99	E_SpezL2	µSv/a	1,20E-07							
19	U-238	E_SpezL2	µSv/a	7,69E-05							
20											

Abb. A. 14 Screenshot Datenblatt „Result_DARTM_SpezL2“

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	# Calculation of the dose per 1 g/Bq using the DARTM program: The ingestion of contaminated food is dominated by									
2	# wet or dry deposition of radionuclides. The reference individual is, as before, a toddler aged 0–1 years, who is breastfed.									
3	# The parameter values /GRS 22/ correspond to a location approximately 530 m northeast of the assumed chimney. I									
4	# Input values are as described in DARTM, based on GRS-600 (ISBN 978-3-947685-86-8)									
5	nuclide	parameter symbol	unit	resident						
6	Ag-108m	E_SpezL3	µSv/a	3,57E-01						
7	Ba-133	E_SpezL3	µSv/a	7,69E-05						
8	C-14	E_SpezL3	µSv/a	7,69E-04						
9	Cl-36	E_SpezL3	µSv/a	2,08E-01						
10	Co-60	E_SpezL3	µSv/a	1,92E-04						
11	Cs-137	E_SpezL3	µSv/a	3,70E-02						
12	H-3	E_SpezL3	µSv/a	4,17E-02						
13	I-129	E_SpezL3	µSv/a	2,78E-01						
14	Mn-54	E_SpezL3	µSv/a	1,28E-05						
15	Ni-59	E_SpezL3	µSv/a	9,09E-06						
16	Pu-238	E_SpezL3	µSv/a	9,09E-03						
17	Pu-239	E_SpezL3	µSv/a	1,00E-02						
18	Sr-90	E_SpezL3	µSv/a	4,76E-03						
19	Tc-99	E_SpezL3	µSv/a	8,33E-04						
20	U-238	E_SpezL3	µSv/a	9,09E-04						

Abb. A. 15 Screenshot Datenblatt „Result_DARTM_SpezL3“

A.2 Probabilistische Daten und Parameterwerte

Die Radioökologie hat die Aufgabe, die Folgen von Emissionen und Freisetzungen von Radionukliden für Mensch und Umwelt zu analysieren sowie Strahlenexpositionen durch entsprechende Modellierung zu bewerten. Strahlenexpositionen unterliegen dabei zahlreichen Einflüssen und Abhängigkeiten mit hoher Variabilität. Sie stellen daher in der Regel Zufallsgrößen dar, deren tatsächliche Werte durch Modellierungen geschätzt werden müssen.

In der Regel werden bisher bei der Berechnung von Freigabewerten vor allem deterministische Parameterwerte für die Modellierung verwendet. Diese Werte sind festgelegt

und werden in entsprechenden Datenblättern innerhalb des vorliegenden Forschungsvorhabens für die Verwendung im Berechnungsinstrument aufbereitet. Zur zukünftigen Weiterentwicklung der Freigabe werden jedoch auch probabilistische Methoden in Betracht gezogen. Durch die Erweiterung des Forschungsvorhabens im Rahmen von Arbeitspaket 1 wurden neben den deterministischen Parametern daher auch Informationen zu deren Verteilungen und Unsicherheiten recherchiert.

Probabilistische Parameterwerte unterscheiden sich von deterministischen dadurch, dass sie durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben werden. Dies ermöglicht eine realistischere Erfassung von Unsicherheiten und Variationen. Informationen zu den Verteilungsfunktionen einzelner relevanter Parameter könnten zukünftig in das Berechnungsinstrument integriert werden und so die Berechnung von Freigabewerten präzisieren.

In Statistik und Modellierung unterscheiden sich Daten und die daraus abgeleiteten probabilistischen Parameterwerte in ihrer Funktion: Daten liefern die Grundlage zur Parameterschätzung, während Parameter dazu dienen, zukünftige Daten oder Wahrscheinlichkeiten vorherzusagen.

In diesem Kapitel werden bekannte Verteilungsfunktionen relevanter Parameter aus der Literatur recherchiert und – sofern möglich – miteinander verglichen. Ziel ist es, eine fundierte Basis für die Implementierung probabilistischer Methoden in zukünftige Modelle zu schaffen.

A.2.1 Verteilungsfunktionen von Parametern

Eine Möglichkeit, mit unvollständigen oder unsicheren Informationen umzugehen, ist die Anwendung von probabilistischen Ansätzen, die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die gesuchten Parameter verwenden. In der Statistik beschreibt die Verteilungsfunktion eines Parameters, wie wahrscheinlich verschiedene Werte eines Parameters sind. Dies ist besonders relevant in der Bayesschen Statistik, wo Parameter nicht als feste Werte, sondern als Zufallsvariablen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung betrachtet werden. Wenn jedoch keine ausreichenden Daten vorhanden sind, um solche Verteilungen zu bestimmen, sind verschiedene Methoden erforderlich, um die vorhandenen Unsicherheiten zu berücksichtigen. Beispiele für solche Methoden sind 2D-Monte-Carlo, p-Box oder die Angabe von Intervallen /BAR 15/.

Die Notwendigkeit, Unsicherheiten bei der Ermittlung von Strahlenexpositionen zu quantifizieren, folgt aus ICRP 103 /ICRP 07/ und dem dort verwendeten Ansatz der Optimierung. Im Ansatz der ICRP 103 ist eine Optimierung ohne Probabilistik, d. h. die Ermittlung von Wahrscheinlichkeitsdichten (PDF = probability density function) von Expositionen nicht möglich, da bei der Optimierung besonderer Wert auf die Quantile der PDF gelegt wird, die Werte der Strahlenexposition oberhalb von Referenzwerten aufweisen.

Im Folgenden wird zunächst ein radiologisches Modell vorgestellt, welches die Beseitigung auf einer Deponie oder in einer Müllverbrennungsanlage (MVA) von freigegebenen radioaktiven Stoffen mittels Verteilungsfunktionen beschreibt (siehe Kap. A.2.2); weiterhin wird das Programmsystem RESRAD vorgestellt (siehe Kap. A.2.3).

A.2.2 Beispiel: Beseitigung auf einer Deponie /THI 04/

In /THI 04/ wurde ein radiologisches Modell erstellt, welches die Beseitigung auf einer Deponie oder in einer MVA von freigegebenen radioaktiven Stoffen beschreibt und hierbei das (konventionelle) abfallrechtliche Regelwerk sowie die gängige Praxis berücksichtigt. Auf eine konkrete/explicite Darstellung der einzelnen in /THI 04/ betrachteten Parameterwerte wird an dieser Stelle mit Verweis auf die Quelle verzichtet.

In diesem Zusammenhang wird in /THI 04/ ein Satz von Parametern für deterministische und probabilistische Modellierung von Expositionspfaden für unterschiedliche Szenarien beschrieben. Insgesamt führt /THI 04/ 48 Parameter auf (siehe beispielsweise Abb. A. 16). Für die meisten Parameter wird als Verteilungsfunktion eine Normalverteilung angesetzt. Lediglich der Abfluss des Vorfluters wird als Log-Normal-Verteilung angegeben und für die Atemrate sowie die unbeabsichtigte Ingestion wird keine Verteilung zugeordnet.

Daten	Beschreibung
Szenario:	Deponie Szenarien
Parameter:	D.1 Kapazität Deponie
Parameterdefinition:	Gesamte Annahmemenge einer Deponie pro Jahr
Einheit:	Mg/a
deterministisch	40.000
Verteilungstyp:	Normalverteilung
μ / σ / min. / max.	100.000 / 100.000 / 20.000 / 500.000
Begründung für Verteilungstyp und Werte:	s. Hauptteil, Kapazitäten der Anlagen. Der Mittelwert der Kapazität der in Deutschland betriebenen Anlagen liegt um 100.000 Mg. es werden jedoch sehr kleine und sehr große Anlagen betrieben (Min/Max der Verteilungen). Der deterministische Wert ist festgelegt und liegt im unteren Bereich der Verteilung.
Referenzen:	s. Hauptteil, Kapazitäten der Anlagen, sowie Anhang A (Auflistung der Hausmülldeponien in Deutschland)

Abb. A. 16 Beispiel (Screenshot) aus /THI 04/ zum Parameter „Kapazität Deponie“ mit der angenommenen Verteilung sowie der Begründung und entsprechenden Referenzen

Die statistischen Kenngrößen zur Charakterisierung der Verteilung (Erwartungswert, Standardabweichung, Minimum, Maximum) wurden unter Berücksichtigung verfügbarer Daten abgeleitet. Die Grundgesamtheit der betrachteten Größen kann hingegen nicht oder nur mit sehr großem Aufwand erfasst werden, weshalb der Ansatz einer Normalverteilung letztlich nur einer Annahme entspricht.

Wenn die betrachteten Parameter als Mittelwerte aus Stichproben einer unabhängigen, identisch verteilten Zufallsgröße unbekannter Verteilung interpretiert werden, ist die Annahme einer Normalverteilung, gemäß dem zentralen Grenzwertsatz, plausibel und gerechtfertigt. Die dafür erforderlichen Eigenschaften der Verteilung der Grundgesamtheit (endlicher Erwartungswert und endliche Varianz) ist für alle betrachteten Parameter zu erwarten. Parameter, deren Wertebereiche sich über mehrere Größenordnungen erstrecken können, z. B. der Volumenstrom von Vorflutern oder der Ausschöpfungsgrad bei Freigaben aus dem kerntechnischen Bereich, können hingegen mit einer logarithmischen Normalverteilung beschrieben werden.

Für Werte, die aus internationalen Empfehlungen oder nationalen Berechnungsgrundlagen übernommen und als abdeckend betrachtet werden können, z. B. die Atemrate oder die Rate unbeabsichtigter Ingestion, wird in /THI 04/ keine statistische Variation vorgenommen.

A.2.3 Beispiel: Das Programmsystem RESRAD-OFFSITE

Das kommerzielle RESRAD-OFFSITE-Programmsystem, das vom Argonne National Laboratory entwickelt wurde und das vom Department of Energy (DOE) zur Ermittlung der Strahlenexposition und des strahleninduzierten Risikos der Bevölkerung auf und in der Umgebung kontaminierter Flächen genutzt wird, ist eine Erweiterung des ursprünglichen RESRAD (onsite)-Programms, das für die radiologische Beurteilung der Situation von Menschen auf kontaminierten Bodenflächen entwickelt wurde und die Strahlenexposition einer Person durch „RESidual RADioactive materials“ im Boden beschrieb /STR 13/. Das Programm wird in dem „User's manual for RESRAD-OFFSITE Version 2“ /YU 07/ ausführlich beschrieben. RESRAD-OFFSITE berücksichtigt verschiedene Expositionspfade und Szenarien, die auch außerhalb von kontaminierten Gebieten auftreten können.

Eine wichtige Funktion von RESRAD-OFFSITE ist die Möglichkeit eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse durchzuführen, indem die Parameter variiert werden, die die Exposition beeinflussen. Diese Parameter werden in drei Kategorien eingeteilt:

- Physikalische Parameter, die die Eigenschaften der radioaktiven Quelle beschreiben
- Verhaltensparameter, die das Verhalten und die Aktivitäten der Menschen widerspiegeln
- Metabolische Parameter, die die Aufnahme und Ausscheidung der Radionuklide im Körper bestimmen

Mit RESRAD-OFFSITE können probabilistische Berechnungen durchgeführt werden, die sowohl die Sensitivität einzelner Parameter analysieren als auch multivariate Berechnungen ermöglichen, die die Verteilungsfunktionen von Dosen und Risiken darstellen. Im Laufe der Entwicklung des Programmsystems wurde der Schwerpunkt der Modellierung auf probabilistische Verfahren gelegt. Die Verfahren sind bis ins Detail der Modelle, der Parameter und der Parameterfestlegung für aktuelle Berechnungen beschrieben /KAM 24/.

Das Programm RESRAD ist dabei nicht unmittelbar mit dem Ansatz von /THI 04/ vergleichbar. RESRAD verfügt über einen erheblich größeren Umfang an Parameterwerten und hinterlegt diese zu einem wesentlichen Teil sowohl mit Verteilungsfunktionen als auch mit Standardwerten. Aufgrund des umfassenden Berechnungsinstrumentariums, das RESRAD zugrunde liegt, sind einzelne Parameterwerte nur eingeschränkt mit den

Annahmen oder Ergebnissen aus /THI 04/ vergleichbar. Besonders hervorzuheben ist, dass in RESRAD – im Gegensatz zu /THI 04/ – eine deutlich größere Bandbreite an Verteilungsfunktionen implementiert ist. Hierzu zählen unter anderem die Gleichverteilung, die linear-kontinuierliche Verteilung, die begrenzte log-Normalverteilung, die Dreiecksverteilung, die gleichförmige Verteilung sowie die log-Normalverteilung.

Der Umfang der in RESRAD verwendeten und beschriebenen Parameter sowie deren Bewertung, bedarf für eine genauere Analyse einer weitaus umfangreicheren Analyse, als dies im Rahmen der hier vorliegenden Arbeiten möglich war. Sollte aber bei einer zukünftigen Implementierung berücksichtigt werden.

A.3 K_D-Werte (Datenrecherche)

Im Folgenden werden K_D-Werte aus unterschiedlichen Literaturquellen angegeben und diskutiert. Um etwaige Tippfehler zu vermeiden, werden Screenshots der Tabellen aus den jeweiligen Literaturquellen gezeigt. Dieses Kapitel ist eher als Einblick zu verstehen, da es eine große Anzahl von Literaturquellen bzgl. K_D-Werten gibt, diese aber nicht alle in diesem Rahmen ausgewertet werden können bzw. aufgrund ihrer Beschaffungskosten in diesem Forschungsvorhaben nicht erhältlich sind.

A.3.1 Literaturquelle: /THI 04/

/THI 04/ befasst sich mit der Fortentwicklung des radiologischen Modells für die Berechnung von Freigabewerten für die Freigabe zur Beseitigung. In diesem Zusammenhang ist u. a. die Nuklidausbreitung aus einer Deponie über den Grundwasserpfad zu berechnen. Die Migration der Radionuklide im Boden und Grundwasser wird über einen K_D-Ansatz beschrieben.

Für die Ableitung von K_D-Werten führten /THI 04/ eine umfangreiche Literatursichtung durch /BAR 04/. Die in /BAR 04/ abgeleiteten Werte sind in Tab. A. 1 dargestellt und mit jenen von /POS 95/ (siehe auch /SZE 10/) verglichen.

Nach /THI 04/ sind die Unsicherheiten der Abschätzung von K_D-Werten so groß, dass nur die Angabe der Größenordnung sinnvoll ist. Die in /THI 04/ genutzten Daten von /BAR 04/ zu den K_D-Werten für generische Modelle zur Ausbreitung von Radionukliden über den Wasserpfad werden in der Tab. A. 1 zusammengefasst und /POS 95/ (siehe auch /SZE 10/) gegenübergestellt.

Ein Vergleich dieser Werte zeigt folgendes /THI 04/:

- In den Untersuchungen /POS 95/ und /DEC 98/ wurden mit Ausnahme von Th dieselben K_D -Werte verwendet. Diese beruhen u. a. auf einer breit angelegten Literaturstudie gewonnenen Werte in /SHE 90/.
- Die in /THI 04/ angewendeten K_D -Werte für Deponie und Grundwasserleitern liegen im Vergleich zu den Werten gemäß der Untersuchungen /POS 95/ und /DEC 98/ durchweg niedriger oder gleich hoch. Dies bedeutet, dass in den Kompartimenten eine geringere Sorption und somit im Modell eine schnellere Migration unterstellt wird
- Die für die Basisabdichtung angewendeten K_D -Werte sind dagegen mit wenigen Ausnahmen höher als die für alle Kompartimente geltenden K_D -Werte der Untersuchungen /POS 95/ und /DEC 98/. Hierdurch wird der Tatsache Rechnung getragen, dass die Basisabdichtung eine sehr undurchlässige Tonschicht darstellen muss

Es wird vom Autor dieses Kapitels angemerkt, dass weder in /POS 95/, noch /DEC 98/ und /SHE 90/ und /BAR 04/ (übernommen in /THI 04/) die geochemischen Bedingungen für die die K_D -Werte gelten, NICHT bekannt sind/angegeben werden. Es scheint das Missverständnis vorzuliegen, dass K_D -Werte nur boden/- bzw. materialspezifisch sind. Geochemische Parameter wie pH, Ionenstärke und auch deren eventuelle zeitliche Änderungen (z. B. im Deponiesickerwasser) werden in den genannten Literaturquellen nicht diskutiert.

Tab. A. 1 Gegenüberstellung von K_D -Werten (in cm^3/g) für ausgewählte Elemente mit radiologisch relevanten radioaktiven Isotopen für generische Ausbreitungsrechnungen zum Transport von Radionukliden über den Wasserpfad /THI 04/

Element	[POS 95]/[DEC 98]	Werte gemäß [BAR 04] für		
		Boden	Grundwasserleiter	Tondichtung
H	0,01	0	0	0
C	0,01	0	0	0
C1	0,01	0	0	0
I	0,01	0	0	0
Tc	0,01	0	0	0
U	10	1	0,1	10
Np	10	1	0,1	10
Pu	100	10	1	100
Am	100	100	10	1000
Cm	100	100	10	1000
Th	100/1000	100	10	1000
Ra	1 10	10	1	100
Pb	100	100	10	1000
Po	1/10	10	1	100
Pa	10	10	1	100
Ac	10	100	10	1000
Cd	1	10	1	100
Co	10	10	1	100
Cr	10	1	0,1	10
Cs	10	10	1	100
Eu	10	100	10	1000
Mo	1	1	0,1	10
Nb	10	10	1	100
Ni	10	1	0,1	10
Se	1	1	0,1	10
Sm	10	100	10	1000
Sr	1	1	0,1	10
Zr	100	100	10	1000

A.3.2 Literaturquelle: /SZE 10/

/SZE 10/ befasst sich mit der Transportmodellierung von Radionukliden aus Halden und untertägigen Lagern unter Anwendung des K_D -Konzeptes. Die K_D -Werte in /SZE 10/ sind aus /POS 95/ entnommen. In /POS 95/ wird hinsichtlich der gewählten K_D -Werte festgestellt, dass für jene Nuklide, zu denen keine Angaben verfügbar sind, die K_D -Werte geschätzt wurden, wobei von bekannten K_D -Werten auf die K_D -Werte von chemisch ähnlichen Elementen geschlossen wurde. In /POS 95/ wird mit diesen K_D -Werten der Sickerwassertransport aus einer Hausmülldeponie berechnet. Weiterhin wird in /POS 95/ festgestellt, dass es hinsichtlich der K_D -Werte von Radionukliden in Schlacken-deponien keinerlei gesicherten Erkenntnisse gibt.

Für welche geochemischen Bedingungen die in Tab. A. 2 genannten K_D -Werte gelten, wird weder in /SZE 10/ noch in /POS 95/ angegeben.

Tab. A. 2 K_D -Werte nach /POS 95/ in m^3/g

Element	K_D in m^3/g	Element	K_D in m^3/g
H	1E-8	Ba	1E-6
Be	1E-6	La	1E-5
C	1E-8	Cc	1E-5
F	1E-7	Pr	1E-5
Na	1E-6	Nd	1E-5
Mg	1E-6	Pm	1E-5
Al	1E-5	Sm	1E-5
Si	1E-5	Eu	1E-5
P	1E-6	Gd	1E-5
S	1E-6	Tb	1E-5
Cl	1E-8	Dy	1E-5
K	1E-6	Ho	1E-5
Ca	1E-6	Er	1E-5
Sc	1E-6	Tm	1E-5
Ti	1E-5	Yb	1E-5
V	1E-6	Lu	1E-5
Cr	1E-5	Hf	1E-4
Mn	1E-6	Ta	1E-5
Fe	1E-5	W	1E-6
Co	1E-5	Re	1E-7

Element	K _D in m ³ /g	Element	K _D in m ³ /g
Ni	1E-5	Os	1E-5
Cu	1E-6	Ir	1E-5
Zn	1E-6	Pt	1E-5
Ga	1E-5	Au	1E-5
Ge	1E-5	Hg	1E-6
As	1E-6	Tl	1E-5
Se	1E-6	Pb	1E-4
Br	1E-8	Bi	1E-5
Rb	1E-5	Po	1E-6
Sr	1E-4	At	1E-6
Y	1E-5	Fr	1E-5
Zr	1E-4	Ra	1E-6
Nb	1E-5	Ac	1E-5
mo	1E-6	Th	1E-4
Te	1E-8	Pa	1E-5
Ru	1E-6	U	1E-5
Rh	1E-6	Np	1E-5
Pd	1E-6	Pu	1E-4
Ag	1E-6	Am	1E-4
Cd	1E-6	Cm	1E-4
In	1E-5	Bk	1E-4
Sn	1E-5	Cf	1E-4
Sb	1E-6	Es	1E-4
Te	1E-6	Fm	1E-4
I	1E-8	Md	1E-4
Cs	1E-5		

Weiterhin werden in /SZE 10/ Dosisberechnungen mit K_D-Werten für Sand, Lehm, Ton und organische Böden für verschiedene Nuklide durchgeführt. Diese K_D-Werte stammen von /BRE 06/ (Literatur nicht erhältlich, zitiert in /SZE 10/) und die Daten sind in Tab. A. 3 angegeben. Allerdings werden auch hier nicht die geochemischen Bedingungen, für die diese Werte gelten, nicht angegeben.

Tab. A. 3 K_D -Werte nach /BRE 06/ in m^3/g für verschiedene Bodenarten, geometrische Mittel (GM) und Variationsbereiche (Var)

Einige Werte sind nicht angegeben (n.a.).

Element	Sand	Lehm	Ton	Organischer Boden	
U	3,5E-5 3,0E-8...2,0E-2	1,5E-5 1,7E-8...9,0E-3	1,6E-3 4,0E-6...4,9E-1	4,1E-4 2,7E-6...6,0E-2	GM Var
Th	3,2E-3 4,5E-5...2,0E-1	3,3E-3 n.a.	5,8E-3 3,0E-5...9,8E-1	8,9E-2 9,0E-5...8,8E+2	GM Var
Ra	5,0E-4 8,2E-7...3,0E-2	3,6E-2 7,4E-5...1,8E-1	9,1E-3 6,7E-4...1,2E-1	2,4E-3 n.a.	GM Var
Pb	2,7E-4 2,7E-6...2,7E-2	1,6E-2 9,9E-4...2,7E-1	5,5E-4 n.a.	2,2E-2 8,1E-3...6,0E-2	GM Var
Po	1,5E-4 6,0E-6...7,0E-3	4,0E-4 2,4E-5...5,4E-3	3,0E-3 u.a.	7,3E-3 n.a.	GM Var
Pa	5,5E-4 n.a.	1,8E-3 n.a.	2,7E-3 n.a.	6,6E-3 n.a.	GM Var
Ac	4,5E-4 n.a.	1,5E-3 n.a.	2,4E-3 n.a.	5,4E-3 n.a.	GM Var

In /SZE 10/ wird zumindest für U(VI) der K_D -Wert in Abhängigkeit des pH angegeben, entnommen aus /EPA 99/. Allerdings werden auch hier nicht die genauen geochemischen Bedingungen angegeben, die diesen Werten zugrunde liegen (siehe Tab. A. 4).

Tab. A. 4 K_D -Werte von U(VI) in Abhängigkeit vom pH-Wert nach /EPA 99/

K_d -Werte m^3/g	3	4	5	6	7	8	9	10
Min	<1,0E-6	4,0E-7	1,5E-5	1,0E-4	6,3E-5	4,0E-7	<1,0E-6	<1,0E-6
Max	3,2E-5	5,0E-3	1,6E-1	1,0	6,3E-1	2,5E-1	7,9E-3	5,0E-6

A.3.3 Literaturquelle: /LIC 02/

/LIC 02/ führten Untersuchungen zum K_D -Wert von Cadmium in strukturierten Böden durch. Nach Meinung der genannten Autoren sollte bei dem Cadmiumtransport über Makroporen im Boden die kurzfristige Dauer einer Wechselwirkung zwischen dem reaktiven gelösten Stoff in der wässrigen Phase und dem Boden sowie die Ausfällung oder Adsorption von Cadmium auf Partikeln $< 10^{-5}$ m berücksichtigt werden. Für die Vorhersage des Cadmiumtransports in einem strukturierten Boden werden zwei Verteilungs-

koeffizienten vorgeschlagen: der Matrixverteilungskoeffizient K_{dm} , der dem Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten K_d^{eq} entspricht und mit der herkömmlichen Batch-Technik geschätzt wird, und der Makroporenverteilungskoeffizient K_{dM} , der mit einer modifizierten Batch-Technik geschätzt wird. Die entsprechenden Bodenproben wurden in der obersten Schicht von drei unterschiedlich strukturierten Böden in der Donauniederung (Slowakei) entnommen. Der leichte Lehmsandboden wurde in Kalinkovo, der mittelschwere Lehm Boden in Macov und der schwere Lehm Boden in Jurova beprobt. Tab. A. 5 gibt ausgewählte chemische Eigenschaften der obersten Schicht (0,1 bis 0,2 m) der Böden.

Tab. A. 5 Ausgewählte chemische Eigenschaften der in /LIC 02/ untersuchten Böden (0,1 bis 0,2 m GOK)

Site	pH (H ₂ O)	pH (KCl)	CaCO ₃ (%)	C _{ox} (%)	Humus (%)	HA/FA
Kalinkovo	7,8	7,4	27	0,78	1,35	0,62
Macov	8	7,7	26	1,38	2,38	1,58
Jurová	8,6	7,4	16	2,2	3,79	1,77

Der Verteilungskoeffizient K_D wurde mit der herkömmlichen Batch-Technik unter Verwendung von radioaktivem Cadmium Cd-109 geschätzt. Der Verteilungskoeffizient K_D' wurde mit der modifizierten Batch-Technik ermittelt (für Details siehe /LIC 02/).

Weiterhin wurden die Kontaktzeiten zwischen Cd und Boden variiert (von 1 bis 60 min). Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Tab. A. 6 dargestellt.

Tab. A. 6 Einfluss der Kontaktzeit von Cd mit Boden auf die Verteilungskoeffizienten /LIC 02/

Time of Cd-soil contact (min)		1	2	3	5	10	30	60	
Loamy-sand soil Kalinkovo	K_D (cm ³ .g ⁻¹)	114,0	128	159,9	159,9	346,9	498,8	1596	
	K_D (cm ³ .g ⁻¹)	6,27	14,71	9,88	12,23	13,97	19,81	19,85	
Loam soil Macov	K_D (cm ³ .g ⁻¹)	90179	103	92,15	126,3	127,1	137,3	138,9	
	K_D cm ³ .g ⁻¹)	7,01	10,13	10,49	11,13	12,71	17,38	22,49	
Clay soil Jurová	K_D (cm ³ .g ⁻¹)	180,3	215,8	227,2	190,2	296,8	502,3	4838	
	K_D (cm ³ .g ⁻¹)	3,95	4,72	9,24	11,4	11,4	36,77	40,54	

/LIC 02/ stellten im Ergebnis fest, dass der konventionelle Ansatz (nur unter Verwendung des Koeffizienten K_D^{eq}) das Eindringen des in den Makroporen transportierten Teils von Cd im lehmigen Sandboden in Kalinkovo um das 255-fache, im Lehm Boden in Macov

um das 20-fache und im Lehm Boden in Jurová um das 122-fache im Vergleich zu dem in dieser Studie vorgeschlagenen Ansatz unterschätzen würde.

Auch diese Beobachtungen unterstreichen den Fakt, dass K_D -Werte je nach Bestimmungsmethode und Bodenart große Bandbreiten haben.

A.3.4 Literaturquelle: /DUN 12/

Ziel der Untersuchungen von /DUN 12/ war es, mittels experimenteller und modelltheoretischer Untersuchung die Auslaugung von U, Th, Ra und I aus Bauschutt, der beim Rückbau von Kernkraftwerken anfällt und auf Oberflächendeponien dem natürlichen Wettergeschehen ausgesetzt ist, zu bestimmen. Durch Auslaugversuche an Bauschuttproben vorgegebener Zusammensetzung, Kontamination und Korngröße sollte das Auslaugverhalten unter realistischen meteorologischen Bedingungen (Regenmenge und -häufigkeit) ermittelt und mit Ergebnissen von Modellrechnungen verglichen werden. Zusätzlich sollten K_D -Werte der o. g. Nuklide am Bauschutt bestimmt werden und mit Literaturdaten für Baustoffe und Böden verglichen werden.

Für die Bestimmung der K_D -Werte der Radionuklide an Baustoffen (Schwerbeton, Normalbeton, Mörtel) wurden Schüttelversuche und für die Ermittlung der Auslaugbarkeit der kontaminierten Baustoffe großmaßstäbliche Perkulationsversuche durchgeführt.

Für die experimentellen Arbeiten wurden drei Arten von zementhaltigen Baustoffen (Schwerbeton, Normalbeton und Mörtel) hergestellt und mit Uran, Thorium, Iod und Radium kontaminiert. Die Kontamination erfolgte bei einem Teil der Proben oberflächlich und bei einem anderen Teil homogen in der Matrix. Die Baumaterialien wurden nach dem Aushärten zerkleinert. Die Proben wurden hinsichtlich ihrer Rezeptur und der Korngrößen so hergestellt, dass sie für den auf Oberflächendeponien abgelagerten Bauschutt aus dem Rückbau kerntechnischer Anlagen möglichst repräsentativ waren. Die Radionuklidkonzentrationen in der Kontaminationslösung wurden so gewählt, dass Freigrenzen der StrlSchV erreicht aber nicht überschritten wurden. Mit oberflächlich und homogen kontaminierten Proben der drei Materialien wurden mit den Korngrößen < 20 mm und < 45 mm Perkulationsversuche an mittelgroßen Laborlysimetern mit 200 Liter Fassungsvermögen durchgeführt. Die Korngrößen für die Perkulationsversuche wurden so gewählt, dass sie denen auf einer Deponie möglichst nahe kamen, andererseits aber nicht größer waren als diejenigen, die eine belastbare Modellierung der ungesättigten hydraulischen Prozesse noch ermöglichen. Die Berechnung des Bauschutts in den

Fässern erfolgte mit künstlichem Regenwasser. Die Bewässerung wurde so durchgeführt, dass sie das Niederschlagsregime in Norddeutschland simulierte /DUN 12/. In zwei Fässer wurden die bodenhydraulischen Zustandsgrößen Matrixpotenzial und Wassergehalt mittels Tensiometern und TDR-Sonden während der Perkolation gemessen, um ein Verständnis des ungesättigten Wasserflusses in den Versuchssystemen zu gewinnen. Die Konzentrationen der Radionuklide in den Perkolatfraktionen wurden gemessen.

Unabhängig davon wurden mit den drei Baustoffen Schüttelversuche durchgeführt und K_D -Werte unter Gleichgewichtsbedingungen ermittelt. Die experimentell bestimmten K_D -Werte aus Schüttel- und Perkulationsversuchen wurden mit Literaturdaten verglichen. Weitere Experimente wurden durchgeführt, um das Auslaugverhalten von matrixkontaminiertem Schwerbeton unter Gleichgewichtsbedingungen zu ermitteln. Hierzu wurden Batchversuche durchgeführt, bei denen das Feststoff-Lösungsverhältnis variiert wurde und die in die Lösung freigesetzten Hauptelemente und Radionuklide gemessen wurden /DUN 12/.

Diese Batchversuche wurden mit drei unterschiedlichen Feststoff-Lösungsverhältnissen durchgeführt. In den Batchversuchen wurden Probengefäße mit homogen kontaminiertem Schwerbeton mit Regenwasser bei den Feststoff-Lösungsverhältnissen 1:1, 1:10 und 1:20 in einem Überkopfschüttler bis zur Einstellung des Gleichgewichtes zwischen Lösung und Feststoff ausgelaugt /DUN 12/.

Ein ausführlicher Vergleich der aus Batch- und Perkulationsversuchen bestimmten K_D -Werten mit K_D -Werten aus der Literatur für Baustoffe und Böden wurde angestellt /DUN 12/ und wird im Folgenden zusammengefasst wiedergegeben. Die Problematik der Bestimmung belastbarer K_D -Werte für zementhaltige Baustoffe wurde ebenfalls in der genannte Literaturquelle diskutiert. Als Fazit ergab sich, dass die aus Perkulationsversuchen abgeleiteten Verteilungskoeffizienten das Verhalten der Radionuklide auf einer Bauschutthalde am besten beschreiben.

K_D -Werte aus Batchversuchen

Das Sorptionsverhalten der untersuchten Radionuklide ist nicht einheitlich und reicht von Totadsorption bei ^{137}Cs , über teilweiser Adsorption beim ^{90}Sr , zu keinerlei Adsorption bei Iod. Aufgrund der vorliegenden Ergebnisse ist es wahrscheinlich, dass das Sorptionsverhalten der untersuchten Radionuklide nicht nur auf reine Oberflächenaktivitäten zurückzuführen ist, sondern, dass chemische Wechselwirkungen eine erhebliche Rolle spielen. Die

Angabe von zuverlässigen K_D -Werten ist insbesondere für Uran und Thorium problematisch.

Da Radium ein Erdalkalielement ist, tritt analog zum Barium eine Fällung als Sulfat und Hydroxid auf. Es wurde daher auf Batchversuche zur K_D -Bestimmung von Ra verzichtet und K_D -Werte für dieses Element nur aus Perkulationsversuchen abgeleitet.

Festzuhalten ist nach /DUN 12/, dass die Radionuklide Uran und Thorium zum Teil stark immobilisiert werden und aus einer Bauschutthalde unter den untersuchten Bedingungen wenig ausgewaschen werden. Im Strahlenschutzbeton wurde Thorium komplett sorbiert, Uran zeigte kein klares Sorptionsverhalten, nur kleine Konzentrationsbereiche konnten ausgewertet werden. Im Normalbeton wurde Thorium stark sorbiert, Uran zeigte kein klares Sorptionsverhalten, die Ergebnisse waren nur begrenzt auswertbar. Die Angabe von belastbaren K_D -Werten ist nur für kleine Konzentrationsbereiche möglich. Vom Mörtel wurden Uran und Thorium fast vollständig sorbiert.

Iodid wird von keinem der Baustoffe sorbiert.

K_D -Werte aus Perkulationsversuchen

Die Tab. A. 7 gibt eine Übersicht über die Gehalte der Radionuklide U-238, Th-232, I-127 und Ra-226 in den Betonbruchmaterialien sowie die fließgemittelten Konzentrationen in den Perkolaten. Für letztere wird zwischen den Konzentrationen über den gesamten Verlauf des Experiments und dem ersten ausgetretenen Porenvolumen (ca. den ersten sechs ausgeflossenen Litern gleichgesetzt) unterschieden. Für das U-238 liegen die gemittelten Konzentrationen im ersten Porenvolumen für alle Fässer über den Konzentrationen, die über den gesamten Versuchszeitraum gemittelt wurden. Im Falle des Thoriums²³² ist dies nur für die Fässer 4 und 6 der Fall. Für die übrigen Fässer ist die über den Gesamtzeitraum gemittelte Konzentration höher. Für das I-127 ist die fließgemittelte Konzentration im ersten Porenvolumen in allen Fällen höher, was wie im Fall des Urans mit der Zeit sinkende Konzentrationen anzeigt. Aufgrund der nur selektiv erfolgten Bestimmung der Radiumkonzentrationen werden für das Ra-226 lediglich die mittleren Konzentrationen der vier analysierten Perkolate angegeben /DUN 12/. In Tab. A. 8 sind die aus den in Tab. A. 7 angegebenen Daten berechneten K_D -Werte zusammenfassend dargestellt. Zusätzlich sind die K_D -Werte aus der inversen Modellierung der Perkulationsexperimente angegeben. Grundsätzlich gilt, dass geringere fließgemittelte Konzentrationen in Tab. A. 7 für ein Radionuklid in einem Fass bei Anwendung von Gleichung (3.29) höhere berechnete K_D -Werte zur Folge haben. In Tab. A. 8 wird ersichtlich,

dass für U-238 und Th-232 die K_D -Werte für die Fässer mit matrixgebundener Kontamination grundsätzlich über denen für oberflächliche Kontamination liegen. Dies reflektiert die in beiden Fällen getroffene Annahme, dass der gesamte Vorrat für die Desorption zur Verfügung steht. Es sollte zusätzlich in Erwägung gezogen werden, für die matrixgebundenen Radionuklide nicht den gesamten Vorrat für die Berechnung zu verwenden, sondern lediglich einen oberflächlich an den Materialien für die Desorption verfügbaren Anteil. Die K_D -Werte reduzieren sich dann um denselben Faktor, um den die Gehalte reduziert werden /DUN 12/.

Für das U-238 zeigt sich eine sehr große Variabilität der K_D -Werte. Für die oberflächlich kontaminierten Materialien ist kein eindeutiger Trend zwischen Normal- und Strahlenschutzbeton erkennbar. Für den oberflächlich kontaminierten Strahlenschutzbeton ist auch keine klare Aussage über den Einfluss der Körnung möglich, da die Werte für das Material < 20 mm zwischen den Werten der beiden Fässer mit einer Füllung < 45 mm liegen. Der Wertebereich für die Fässer mit oberflächlicher Kontamination liegt zwischen 17 und 198 L kg⁻¹, wenn die initial höheren Perkolatkonzentrationen für die Berechnungen herangezogen werden und erreichen Werte von 64 bis 862 L kg⁻¹ für die fließgemittelten Konzentrationen über die Gesamtdauer der Experimente /DUN 12/.

Tab. A. 7 Gesamtkonzentration der Radionuklide U-238, Th-232, I-127 und Ra-226 in den Materialien und entsprechende fließgemittelte Konzentration in den Perkolatproben /DUN 12/

	Fass 1	Fass 2	Fass 3	Fass 4	Fass 5	Fass 6	Fass 7	Fass 8
Beton	NB	NB	SSB	SSB	ZM	SSB	SSB	SSB
Kontaminationsmethode	oberfl.	matrixgeb.	oberfl.	matrixgeb.	matrixgeb.	oberfl.	matrixgeb.	oberfl.
Korngröße [mm]	< 20	< 20	< 20	< 20	< 20	< 45	< 45	< 45
Uran²³⁸								
Gesamtkonzentration [mg kg ⁻¹]	8,70·10 ⁻³	1,27·10 ⁻¹	6,50·10 ⁻³	1,26·10 ⁻¹	2,34·10 ⁻¹	6,50·10 ⁻³	1,26·10 ⁻¹	6,50·10 ⁻³
FG Konz. aller Proben [mg L ⁻¹]	1,01·10 ⁻⁵	1,07·10 ⁻⁵	2,89·10 ⁻⁵	1,19·10 ⁻⁵	2,49·10 ⁻⁶	1,02·10 ⁻⁴	6,59·10 ⁻⁶	1,36·10 ⁻⁵
FG Konz. im ersten PV [mg L ⁻¹]	5,77·10 ⁻⁵	1,47·10 ⁻⁴	1,79·10 ⁻⁴	1,49·10 ⁻⁴	7,41·10 ⁻⁶	3,67·10 ⁻⁴	3,14·10 ⁻⁵	3,29·10 ⁻⁵
Thorium²³²								
Gesamtkonzentration [mg kg ⁻¹]	8,40·10 ⁻³	1,23·10 ⁻¹	6,50·10 ⁻³	1,22·10 ⁻¹	1,23·10 ⁻¹	6,50·10 ⁻³	1,22·10 ⁻¹	6,50·10 ⁻³
FG Konz. aller Proben [mg L ⁻¹]	1,76·10 ⁻⁴	5,57·10 ⁻⁵	3,12·10 ⁻⁵	1,74·10 ⁻⁵	3,47·10 ⁻⁵	2,13·10 ⁻⁵	8,49·10 ⁻⁶	8,82·10 ⁻⁶
FG Konz. im ersten PV [mg L ⁻¹]	7,79·10 ⁻⁵	3,95·10 ⁻⁵	1,73·10 ⁻⁵	4,45·10 ⁻⁵	5,00·10 ⁻⁶	3,96·10 ⁻⁵	5,00·10 ⁻⁶	5,00·10 ⁻⁶
Iod¹²⁷								
Gesamtkonzentration [mg kg ⁻¹]	4,60·10 ⁻³	6,70·10 ⁻²	3,40·10 ⁻³	6,70·10 ⁻²	1,23·10 ⁻¹	3,40·10 ⁻³	6,70·10 ⁻²	3,40·10 ⁻³
FG Konz. aller Proben [mg L ⁻¹]	4,06·10 ⁻²	4,83·10 ⁻²	3,06·10 ⁻²	2,41·10 ⁻²	3,08·10 ⁻²	2,66·10 ⁻²	3,57·10 ⁻²	2,86·10 ⁻²
FG Konz. im ersten PV [mg L ⁻¹]	7,02·10 ⁻²	2,18·10 ⁻¹	7,97·10 ⁻²	7,85·10 ⁻²	1,51·10 ⁻¹	1,23·10 ⁻¹	6,59·10 ⁻²	6,05·10 ⁻²
Radium²²⁶								
Gesamtkonzentration [mg kg ⁻¹]	9,90·10 ⁻⁷	1,40·10 ⁻⁵	7,40·10 ⁻⁷	1,40·10 ⁻⁵	2,66·10 ⁻⁵	7,40·10 ⁻⁷	1,40·10 ⁻⁵	67,40·10 ⁻⁷

	Fass 1	Fass 2	Fass 3	Fass 4	Fass 5	Fass 6	Fass 7	Fass 8
FG Konz. aller Proben [mg L ⁻¹]	7,11·10 ⁻¹¹	6,78·10 ⁻¹⁰	1,80·10 ⁻¹⁰	2,30·10 ⁻¹⁰	9,68·10 ⁻¹⁰	7,11·10 ⁻¹¹	2,51·10 ⁻¹⁰	6,01·10 ⁻¹⁰

Tab. A. 8 K_D -Werte der Radionuklide U-238, Th-232 und Ra-226 für die acht Versuchsfässer /DUN 12/

	Fass 1	Fass 2	Fass 3	Fass 4	Fass 5	Fass 6	Fass 7	Fass 8
Beton	NB	NB	SSB	SSB	ZM	SSB	SSB	SSB
Kontaminationsmethode	oberfl.	matrixgeb.	oberfl.	matrixgeb.	matrixgeb.	oberfl.	matrixgeb.	oberfl.
Korngröße [mm]	< 20	< 20	< 20	< 20	< 20	< 45	< 45	< 45
Uran²³⁸								
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) alle Proben	862	11922	225	10597	93857	63,6	19134	477
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) erstes PV	151	863	36,3	845	31582	17,7	4012	198
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) inverse Modellierung	914	14097	235	10540	85807	37,6	16710	509
Thorium²³²								
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) alle Proben	4,7	2208	209	7012	3526	305	14331	737
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) erstes PV	108	3119	376	2737	24500	164	24340	1300
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) inverse Modellierung	48,7	2059	210	7304	2239	253	15153	796
Iod¹²⁷								
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) alle Proben	n.n.	1,39	n.n.	2,78	3,99	n.n.	1,88	n.n.
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) erstes PV	n.n.	0,31	n.n.	0,85	0,82	n.n.	1,02	n.n.
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) inverse Modellierung	n.n.	1,43	n.n.	1,42	2	n.n.	1,79	n.n.
Radium²²⁶								
K_D [L kg ⁻¹] Gl. (3,29) alle Proben	13931	20653	4102	60975	27491	10413	55673	1231

Für das Th-232 ergibt sich insgesamt ein ähnlich heterogenes Bild wie für das Uran. Wiederum sind keine Trends zwischen Korngrößenspektrum und Betonart erkennbar /DUN 12/.

Für das Iod wurden nur für die Fässer mit matrixkontaminiertem Material K_D -Werte berechnet, weil für die Fässer mit oberflächlich kontaminiertem Schutt Wiederfindungsraten weit größer als eins festgestellt wurden. Für die verbleibenden vier Fässer mit matrixkontaminiertem Material sind die K_D -Werte erwartungsgemäß sehr gering, da Iod als Anion keiner Sorption unterliegt und entsprechend schnell mit dem perkolierenden Wasser ausgetragen wird /DUN 12/.

Für das Radium liegen die berechneten K_D -Werte sämtlich über 1.000 L/kg. Auf eine Auswertung mittels inverser Modellierung wurde in diesem Fall von /DUN 12/ verzichtet, da die Datengrundlage zu schwach war /DUN 12/.

A.3.4.1 Vergleichende Diskussion der K_D -Werte aus Batch- und Perkolationsexperimenten mit Literaturwerten

In /DUN 12/ werden Literaturdaten zu K_D -Werten für die Radionuklide Uran, Thorium, Iod und Radium an Baustoffen mit den experimentell ermittelten Werten verglichen, die aus in /GRS-258/ Schüttelversuchen und aus Perkulationsversuchen gewonnen wurden.

In den Schüttelversuchen wurden K_D -Werte für o. g. Nuklide an den drei Baustoffen Schwerbeton (mit Baryt), Normalbeton und Mörtel untersucht. Die gleichen Baustoffe wurden auch in den Perkulationsversuchen eingesetzt und daraus K_D -Werte abgeleitet.

In der Literatur wurden von /DUN 12/ für alle Nuklide K_D -Werte an Baustoffen und Böden gefunden, wenngleich es oft nur wenige Werte waren und deren Belastbarkeit nicht immer gegeben ist.

Die Vergleichbarkeit mit den in /DUN 12/ interessierenden Baustoffen war jedoch begrenzt. Zum einen fanden sich von den Autoren von /DUN 12/ in der Literatur keine Angaben zu dem untersuchten Schwerbeton mit Baryt. Ebenso wenig wurden Angaben zu Mörtel gefunden. Die meisten Literaturangaben liegen zu Normalbeton vor, der auch von /DUN 12/ wurde. Hier gibt es jedoch signifikante Unterschiede in der Zusammensetzung.

Eine vergleichende Übersicht aus /DUN 12/ über die K_D -Werte der vier Radionuklide aus den unterschiedlichen Quellen findet sich in den folgenden Tabellen.

Tab. A. 9 Sorption von U-238 an Baustoffen /DUN 12/

Quelle	Perkulationsversuche					Schüttelversuche							Literatur		
	Fass-Methode					Konzentrationen									
Probenbez.	Schwerbeton	7-H	4-H	8-O	3-O	6-O	-	-	-	-	-	-	-	Baustoffe: Kein	
[U] ₀ [mg/L]		-	-	-	-	-	21,4	16,7	11,9	-	2,4	1,2	-	vergleichbarer Beton mit	
[U] _{eq} [mg/L]		6,6·10 ⁻⁰⁶	1,2·10 ⁻⁰⁵	1,4·10 ⁻⁰⁵	2,9·10 ⁻⁰⁴	1,0·10 ⁻⁰⁴	9,9	8,2	0,06	-	0,001	0,0004	-	Baryt untersucht, Mörtel	
K _D [m ² /kg]		16,71	10,54	0,51	0,235	0,038	0,105	0,102	15,32	-	373,00	231,00	-	nicht untersucht, Werte	
±ΔK _D	-	-	-	-	-	0,037	0,005	7,66	-	22400	173,00	-	schwanken allgemein		
													zw. 0,1 und 10 m ² /kg		
													[ALL 84] [HÖG 85] [ALB		
Probenbez.	Normalbeton	2-H		1-O			-	-	-	-	-	-	-	93], [MOR 87]. Fehler 50	
[U] ₀ [mg/L]		-		-			21,4	16,7	11,9	7,1	2,4	1,2	0,2	2,4·10 ⁻⁰² 2,4·10 ⁻⁰¹	
[U] _{eq} [mg/L]		1,7·10 ⁻⁰⁵		1,01·10 ⁻⁰⁵			13,5	11,59	0,65	3,73	0,007	0,007	4,0·10 ⁻⁰⁴	1,0·10 ⁻⁰⁴ 3,0·10 ⁻⁰⁶	
K _D [m ² /kg]		14,1		0,914			0,056	0,48	1,349	0,087	26,73	13,12	40,7	0,900 3,333	
±ΔK _D	-		-			0,005	0,001	1,165	0,006	7,64	7,5	30,53	0,002 2,003	Böden: An Sandböden	
													ist Sorption		
													vernachlässigbar		
Probenbez.	Mörtel	Fass-Methode					Konzentrationen							[CRA03]. [KAP 01] findet	
		5-H					-	-	-	-	-	-	-	bei Sedimenten 0,17-6,4	
[U] ₀ [mg/L]							21,42	16,662	11,9015	7,141	2,3803	1,19015	1,19015	0,0238	0,0024
[U] _{eq} [mg/L]		2,50·10 ⁻⁰⁵					0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
K _D [m ² /kg]		85,81					-	-	-	-	-	-	-	-	von [GIB 80] bei pH = 6,5
±ΔK _D		-					-	-	-	-	-	-	-	-	ein relativ hoher Wert
															von 35 m ² /kg gefunden

*Ziffer = Fass; H = homogene Kontamination, O = oberflächliche Kontamination

Tab. A. 10 Sorption von Th-232 an Baustoffen /DUN 12/

Quelle		Perkolationsversuche					Schüttelversuche				Literatur
		Fass-Methode					Konzentrationen				
Probenbez.	Schweben	7-H	4-H	8-O	3-O	6-O	-	-	-	-	Baustoffe: Kein vergleichbarer Beton mit Baryt untersucht, Werte schwanken allgemein zw. 1-5 m ² /kg [ALL 84] [HÖG 85] [ALB 93], [MOR 87]. Fehler 50 -100%. [TIT 08] untersuchen CSH-Phasen und beobachten K_D -Werte von 100-1.000 m ² /kg. Mörtel nicht untersucht, Zement K_D =5 m ² /kg, Betonarten ergeben bis 1.000 m ² /kg [WIE 98] Böden: Die Werte schwanken deutlich von 0,001 m ² /kg, Sandböden: [AKÇ 96] bis 500 m ² /kg [EPA 99]. Für Sedimente werden von [KAP 01] K_D -Werte von 0,11 - max. 2,26 m ² /kg beobachtet. [SYE 98] beobachtet eine Korrelation der K_D -Werte mit der Konzentration der Ca und Mg-Ionen.
[Th] ₀ [mg/L]		-	-	-	-	-	11,6	2,3	1,2	0,2	
[Th] _{eq} [mg/L]		8,5·10 ⁻⁰⁶	1,7·10 ⁻⁰⁵	8,8·10 ⁻⁰⁶	3,1·10 ⁻⁰⁵	2,1·10 ⁻⁰⁵	nicht auswertbar, zu geringe Konzentrationen				
K_D [m ² /kg]		15,15	7,3	0,8	0,21	0,25	-				
±Δ K_D		-	-	-	-	-	-				
		Fass-Methode					Konzentrationen				
Probenbez.	Normalbeton	2-H		1-O		-	-	-	-		
[Th] ₀ [mg/L]		-		-		2,3	1,2	-			
[Th] _{eq} [mg/L]		5,57·10 ⁻⁰⁵		1,76·10 ⁻⁰⁴		0,0002	0,003	-			
K_D [m ² /kg]		2,06		0,487		2,76	0,35	-			
±Δ K_D		-		-		-	-	-			
		Fass-Methode					Konzentrationen				
Probenbez.	Mörtel	5-H					-	-	-	-	
[Th] ₀ [mg/L]							11,6	2,3	1,2000	0,2	
[Th] _{eq} [mg/L]		3,47·10 ⁻⁰⁵					0,0100	0,0010	0,0030	0,0009	
K_D [m ² /kg]		2,24					91,49	55,25	0,353	0,122	
±Δ K_D		-					27,84	11,9	0,289	0,069	

*Ziffer = Fass; H = homogene Kontamination, O = oberflächliche Kontamination

Tab. A. 11 Sorption von Iod an Baustoffen /DUN 12/

Quelle		Perkolationsversuche					Schüttelversuche						Literatur
		Fass-Methode					Konzentrationen						
Probenbez.	Schweben	7-H	4-H	8-O	3-O	6-O	-	-	-	-	-	-	Baustoffe: Kein vergleichbarer Beton mit Baryt untersucht, Mörtel nicht untersucht, Werte liegen auch in der Literatur häufig bei 0 m³/kg [AND 83], teilw eise jedoch höher (max. 0,16 m³/kg, [ALL 84], [HÖG 85], [ALB 93]). Böden: Werte liegen auch in der Literatur häufig bei 0 m³/kg [EPA 04], teilw eise jedoch auch höher [ASS 94], [KAP 05].
[I] ₀ [mg/L]		-	-	-	-	-	126,90	12,69	1,27	0,127	0,013	0,001	
[I] _{eq} [mg/L]		0,03569	0,02408	0,2856	0,0306	0,0266	129,60	13,46	1,36	0,132	0,015	0,002	
K _D [m³/kg]		1,79·10 ⁻⁰³	1,42·10 ⁻⁰³	-	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
±ΔK _D		-	-	-	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
		Fass-Methode					Konzentrationen						
Probenbez.	Normalbeton	2-H		1-O		-	-	-	-	-	-		
[I] ₀ [mg/L]		-		-		126,90	12,69	1,269	0,127	0,013	0,001		
[I] _{eq} [mg/L]		4,83·10 ⁻⁰²		0,04057		134,53	13,16	1,321	0,135	0,015	0,003		
K _D [m³/kg]		1,43·10 ⁻⁰³		-		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
±ΔK _D		-		-		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
		Fass-Methode					Konzentrationen						
Probenbez.	Mörtel	5-H					-	-	-	-	-	-	
[I] ₀ [mg/L]							126,90	12,69	1,269	0,127	0,013	0,001	
[I] _{eq} [mg/L]		0,0308					130,20	13,01	1,307	0,116	0,014	0,003	
K _D [m³/kg]		2,000·10 ⁻⁰³					0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
±ΔK _D		-					0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	

*Ziffer = Fass; H = homogene Kontamination, O = oberflächliche Kontamination

Tab. A. 12 Sorption von Radium an Baustoffen /DUN 12/

Quelle		Perkolationsversuche					Literatur
		Fass-Methode					
Probenbez.	Schwefelbeton	7-H	4-H	8-O	3-O	6-O	Baustoffe: Kein vergleichbarer Beton mit Baryt untersucht. Für Baryt als Mineralphase wird mit 2.955 m³/kg ein sehr hoher K_D -Wert angegeben [WAN93]. Mörtel nicht untersucht. Werte für Beton liegen in der Literatur häufig zw. 0,03 und 5,4 m³/kg [HOL].
$[Ra]_0$ [mg/L]		-	-	-	-	-	
$[Ra]_{eq}$ [mg/L]		$2,51 \cdot 10^{-10}$	$2,30 \cdot 10^{-10}$	$6,01 \cdot 10^{-10}$	$1,80 \cdot 10^{-10}$	$7,11 \cdot 10^{-11}$	
K_D [m³/kg]		55,7	61,0	1,23	4,1	10,4	
$\pm \Delta K_D$		-	-	-	-	-	
		Fass-Methode					Böden: Werte liegen für Böden allgemein bei ca. 0,5 m³/kg [KAP 05], in quellfähigen Tonmineralen dagegen meist hoch bis sehr hoch, z. B. 17.000 m³/kg für Bentonit [TAC 01].
Probenbez.	Normalbeton	2-H		1-O			
$[Ra]_0$ [mg/L]		-		-			
$[Ra]_{eq}$ [mg/L]		$6,78 \cdot 10^{-10}$		$7,11 \cdot 10^{-11}$			
K_D [m³/kg]		20,7		13,9			
$\pm \Delta K_D$		-		-			
		Fass-Methode					
Probenbez.	Mörtel	5-H					
$[Ra]_0$ [mg/L]							
$[Ra]_{eq}$ [mg/L]		$9,68 \cdot 10^{-11}$					
K_D [m³/kg]		27,5					
$\pm \Delta K_D$		-					

*Ziffer = Fass; H = homogene Kontamination, O = oberflächliche Kontamination

Die experimentellen Bedingungen bei Perkolations- und Schüttelversuchen waren sehr unterschiedlich. Bei den Schüttelversuchen werden Sorptionsgleichgewichte erreicht, wohingegen in den Perkolationsversuchen durch den schnellen Transport starke Ungleichgewichte auftreten können. In den Schüttelversuchen sind auf der anderen Seite relativ starke Verdünnungen der Lösung unvermeidbar, was die Zusammensetzung der Lösung gegenüber *in situ* Verhältnissen verändert. Dies ist bei den Perkolationsexperimenten nicht der Fall, weswegen häufig angenommen wird, dass die Ergebnisse repräsentativer für die Feldsituation sind. Die experimentellen Bedingungen bei der Ermittlung von K_D -Werten sind bei den Literaturdaten und den Schüttelversuchen vergleichbar. Sie sind jedoch nicht vergleichbar mit den Bedingungen auf Bauschutt-Halden. Die Bedingungen auf Halden werden dagegen in den Perkolationsversuchen nachgebildet. Die aus Perkolationsversuchen gewonnenen K_D -Werte sind also wesentlich repräsentativer als die aus den Schüttelversuchen oder gar aus der Literatur, wo zudem noch andere Baustoffzusammensetzungen untersucht wurden. Die durch inverse Simulation ermittelten K_D -Werte aus den Perkolationsversuchen können die experimentell gemessenen Austragswerte für die Nuklide nach /DUN 12/ insgesamt gut beschreiben. Durch die in Tab. A. 9 bis Tab. A. 12 deutlich werdenden Diskrepanzen zu den Werten aus der Literatur und den Schüttelversuchen geht hervor, dass letztere die experimentellen Daten nicht vorhersagen können /DUN 12/.

A.3.5 Literaturquelle: /KAM 20/

Die RESRAD-Codefamilie (bestehend aus unterschiedlichen Tools wie RESRAD-offsite/-onsite/-build) wurde am Argonne National Laboratory entwickelt, um die potenzielle Strahlenbelastung von Menschen durch radioaktive Stoffe in der Umwelt zu analysieren. Beispielsweise wird RESRAD-Build genutzt, um Dosen durch die Exposition von radioaktiver Strahlung Gebäuden zu berechnen. Die Codes RESRAD-ONSITE und RESRAD-OFFSITE berechnen die Freisetzung von Radionukliden aus einer Quelle oder Primärkontamination und den anschließenden Transport durch Luft, Grundwasser und Oberflächenwasser zu verschiedenen Orten vor Ort oder außerhalb des Standorts. Die Codes verwenden eine Pfadanalyse, um die Strahlenexposition und die damit verbundenen Risiken zu bewerten und um Sanierungskriterien oder zulässige Grenzwerte für Radionuklidkonzentrationen im kontaminierten Ausgangsmedium abzuleiten. Die RESRAD-Codes werden von Aufsichtsbehörden, Risikobewertungsstellen und Universitäten in mehr als 100 Ländern auf der ganzen Welt verwendet /KAM 20/.

Die probabilistische Dosisanalyse wurde für den RESRAD-ONSITE-Code im Jahr 2000 entwickelt und es wurden K_D -Werte für 53 Elemente berücksichtigt. Im Jahr 2003 startete die Internationale Atomenergie-Organisation (IAEA) das Programm Environmental Modeling for Radiation Safety (EMRAS), und eine Arbeitsgruppe im Rahmen dieses Programms arbeitete an der Überarbeitung von K_D -Werten und Transferparametern für eine große Anzahl von Elementen.

Die vorgeschlagenen Verteilungswerte in Tab. A. 13 gelten für allgemeine Bodentypen und wurden durch Überprüfung der neuesten veröffentlichten Zusammenstellung und Analysen, NUREG/CR-5512 Band 3, und unter Verwendung der K_D -CR-Korrelation /YU 00/ ermittelt /KAM 20/.

Hier begegnet der aufmerksame Leser einmal mehr dem im Zusammenhang mit K_D -Werten häufigen Problem, dass keine genaueren Angaben gemacht werden (z. B. „für allgemeine Bodentypen“, keine Angabe zur Geochemie).

Tab. A. 13 K_D -Werte für unterschiedliche Elemente

Element	Source ^a	Exp(μ) ^b	μ^o	σ^d	Element	Source ^a	Exp(μ) ^b	μ^o	σ^d
Ac	1	1,7	7,44	1,1	In	2	158	5,07	3,22
Ag	1	380	5,94	1,95	Ir	2	158	5,07	3,22
Al	3	633	6,45	3,22	K	1	13	2,56	1,39
Am	1	2,6	7,86	1,79	La	2	5	1,61	3,22

Ele- ment	Source ^a	Exp(μ) ^b	μ^o	σ^d
As	1	550	6,31	1,61
At	3	71	4,26	3,22
Au	2	158	5,07	3,22
Ba	2	45	3,8	8,13
Be	1	990	6,9	1,1
Bi	1	480	6,17	1,82
Bk	3	70	4,25	3,22
Br	1	56	4,03	1,1
C	2	21	3,04	1,82
Ca	1	8	2,08	1,1
Cd	1	150	5,01	2,2
Ce	1	1,2	7,09	1,61
Cf	2	158	5,07	3,22
Cl	1	0,3	-1,2	1,1
Cm	1	9,3	9,14	1,39
Co	1	480	6,17	2,77
Cr	1	40	3,69	3
Cs	1	1,2	7,09	1,95
Cu	1	530	6,27	1,1
Dy	3	935	6,84	3,22
Er	3	935	6,84	3,22
Es	3	1380	7,23	3,22
Eu	2	955	6,86	4,01
F	2	5	1,61	3,22
Fe	1	880	6,78	0,69
Fm	3	935	6,84	3,22
Ga	3	745	6,61	3,22
Gd	2	5	1,61	3,22
Ge	3	48	3,87	3,22
H	4	0,06	-2,81	0,5
Hf	1	2,5	7,82	1,1
Hg	2	158	5,07	3,22
Ho	1	930	6,84	1,1
I	1	7	1,95	1,61

Ele- ment	Source ^a	Exp(μ) ^b	μ^o	σ^d
Lu	3	935	6,84	3,22
Md	3	935	6,84	3,22
Mg	1	4	1,39	1,1
Mn	1	1,2	7,09	2,2
Mo	1	38	3,64	1,1
Na	1	3	1,1	1,1
Nb	1	1,5	7,31	1,39
Nd	2	158	5,07	3,22
Ni	1	280	5,63	1,95
Np	1	36	3,58	1,79
Os	2	158	5,07	3,22
P	1	87	4,47	1,61
Pa	1	2	7,6	1,1
Pb	1	2,1	7,65	2,3
Pd	1	180	5,19	0,69
Pm	2	5012	8,52	3,22
Po	1	180	5,19	1,61
Pr	2	158	5,07	3,22
Pt	3	24	3,18	3,22
Pu	1	740	6,61	1,39
Ra	1	2,5	7,82	2,56
Rb	1	210	5,35	1,1
Re	2	44	3,78	3,22
Rh	2	158	5,07	3,22
Ru	1	270	5,6	2,08
S	2	100	4,61	3,22
Sb	1	62	4,13	1,39
Sc	2	158	5,07	3,22
Se	1	200	5,3	1,1
Si	1	130	4,87	1,1
Sm	1	930	6,84	1,1
Sn	1	1,6	7,38	1,79
Sr	1	52	3,95	1,79
Ta	1	780	6,66	1,1

Ele- ment	Source ^a	Exp(μ) ^b	μ^o	σ^d
Tb	2	158	5,07	3,22
Tc	1	0,2	-1,61	2,2
Te	2	550	6,31	3,22
Th	1	1,9	7,55	2,3
Ti	3	1380	7,23	3,22
Tl	2	158	5,07	3,22
Tm	3	935	6,84	3,22

Element	Source ^a	Exp(μ) ^b	μ^o	σ^d
U	1	200	5,3	2,48
V	3	935	6,84	3,22
W	2	158	5,07	3,22
Y	1	47	3,85	1,39
Yb	3	935	6,84	3,22
Zn	1	950	6,86	2,4

a The source of the distribution values is indicated by 1,1,3, or 4:

(1) generic soil values from data collection handbook, (2) using the values from NUREG/CR-5512 Vol. 3, (3) using plant transfer factor and the correlation between K_d and plant transfer factor, (4) using the value from Yu et al. 2000.

b It is the median value.

c The mean of the underlying normal distribution after taking natural logarithm of the K_d values.

d The standard deviation of the underlying normal distribution after taking natural logarithm of the values.

Standard deviation for data obtained from source 3 was set to 3.22 to consider a potential wide range distribution.

A.3.6 Literaturquelle: /YU 01/

In einem weiteren Handbuch von /YU 01/ zu RESRAD Version 6.0 werden ebenfalls K_D -Werte angegeben. Tab. A. 14 zeigt die K_D -Werte für unterschiedliche Bodenarten (aus einer Literaturrecherche von /YU 01/) oder als abgeschätzte Werte nach /SHE 90/. Auch hier begegnet der geneigte Leser dem Problem, dass die geochemischen Bedingungen nicht angegeben sind, für die die K_D -Werte gelten. Immerhin sind unterschiedliche Materialien (Sand, Lehm usw.) genannt, ohne allerdings die genaue Zusammensetzung dieser Materialien zu nennen.

Tab. A. 14 Zusammenfassung der mittleren K_D -Werte (cm^3/g) für unterschiedliche Elemente und Bodenarten /YU 01/

Element	Sand	Loam	Clay	Organic
Ac	450	1,500	2,4000	5,400
Ae	90	120	180	15,000
Bi	1,900	9,600	8,400	112,000
Be	250	800	1,300	3,000
Bi	100	450	600	1,500
Br	15	50	75	180
C	5	20	1	70
Ca	5	30	50	90
Cd	80	40	560	900
Ce	500	1,800	20,000	3,300
Cm	4,000	18,000	6,000	6,000
Co	60	1,300	550	1,000

Element	Sand	Loam	Clay	Organic
Cr	70	30	1,500	270
Cs	280	4,600	1,900	270
Fe	220	800	165	600
Hf	450	1,500	2,400	5,400
Ho	250	800	1,300	3,000
I	1	5	1	25
K	15	55	75	200
Mn	50	750	180	150
Mo	10	125	90	25
Nb	160	550	900	2,000
Ni	400	300	650	1,100
Np	5	25	55	1,200
P	5	25	35	90
Pa	550	1,800	2,70	6,600
Pb	270	16,000	550	22,000
Pd	55	180	250	670
Po	150	400	3,000	7,300
Pu	550	1,200	5,100	1,900
Ra	500	36,000	9,100	2,400
Rb	55	180	270	670
Re	10	40	60	150
Ru	55	1,000	800	6,600
Sb	45	150	250	550
Se	150	500	740	1,800
Si	35	110	180	400
Sm	245	800	1,300	3,000
Sn	130	450	670	1,600
Sr	15	20	110	150
Ta	220	900	1,200	3,300
Tc	0,1	0,100	1	1
Te	125	500	720	1,900
Th	3,200	3,300	5,800	89,000
U	35	15	1,600	410
Y	170	720	1,000	2,600
Zn	200	1,300	2,400	1,600
Zr	600	2,200	3,300	7,300

Values obtained from the literature, all other values are predicted by using concentration ratios Source Shepard and Thibault (1990)

Die folgende Tab. A. 15 zeigt die von RESRAD genutzten K_D -Werte im Vergleich mit anderen Literaturdaten. Werte der IAEA (IAEA 1994) und von /SHE 90/ gelten für „leh-migen Boden“ (was auch immer das genau sein soll, da dies nicht die wissenschaftlich korrekte Benennung ist). Werte von /NRC 92/ gelten für sandigen Boden. Die in Tab. A. 15 genannten K_D -Werte stammen aus unterschiedlichen Literaturquellen (siehe „Sources“ unter der Tabelle).

Tab. A. 15 Vergleich der Default- K_D -Werte in RESRAD mit Literaturangaben /YU 01/

Element	IAEA (1994)	Sheppard and Thibault (1990)	NUREG/CR-5512 Kennedy and Streng (1992)	RESRAD (Version 5.62 and later)
Ac	1,500	1,500	420	20
Ag	120	120	90	0
Al	-	-	-	0
Am	990	9,600	1,900	20
Au	-	-	30	0
Ba	-	-	52	50
Bi	-	450	120	0
C	-	20	6,7	0
Ca	30	30	8,9	50
Cd	40	40	40	0
Ce	8,100	8,100	500	1,000
Cf	-	-	510	-1
Ch	-	-	1,70	0,1
Cm	18,000	18,000	4,000	-1
Co	1,300	1,300	60	1,000
Ce	4,400	4,600	270	1,000
Eu	-	-	240	-1
Fe	810	800	160	1,000
Gd	-	-	240	-1
Ge	-	-	-	0
H	-	20	-	0
I	4,5	5	1	0,1
Ir	-	-	91	0
K	-	55	18	5,5
Mn	720	750	50	200
Na	-	-	76	10
Nb	540	550	160	0
Ni	300	300	400	1,000
Np	25	25	5	-1
Pa	1,800	1,800	510	50
Pb	16,000	16,000	270	100
Pm	-	-	240	-1
Po	400	400	150	10
Pu	1,200	1,200	550	2,000
Ra	36,000	36,000	500	70
Ru	900	1000	55	0
S	150	-	14	0
Sb	-	150	45	0
Sc	490	-	310	0
Se	810	500	-	0
Sm	450	800	240	-1
Sn	20	450	130	0

Element	IAEA (1994)	Sheppard and Thibault (1990)	NUREG/CR-5512 Kennedy and Streng (1992)	RESAD (Version 5.62 and later)
Sr	810	20	15	30
Ta	0,1	900	-	0
Tc	-	0,1	0	0
Te	3,300	500,000	140	0
Th	-	3,300	3,200	60,000
Tl	12,000	-	390	0
U	-	15	15	50
Zn	1,300	1,300	200	0
Zr	2,200	2,200	580	-1

A hyphen indicates no data available

-1 indicates that the code will calculate the default distribution coefficient on the basis of a correlation with the plant root uptake transfer factor

Sources: Baes and Sharp (1983), Nuclear Safety Associates, Inc. (1980), Isherwood (1981), U.S. Nuclear Regulatory Commission (1980), Gee et al. (1980) and Staley et al (1979)

Tab. A. 15 macht einmal mehr die große Bandbreite der K_D -Werte für jeweilige Elemente klar. Daneben sind auch die „Transparenzprobleme“ ersichtlich, da nicht angegeben wird, für welche Materialien und chemischen Bedingungen die K_D -Werte überhaupt gelten. Somit sind die Angaben streng genommen obsolet.

/YU 01/ hat weiterhin eine Zusammenstellung von K_D -Werten für unterschiedliche Elemente in Abhängigkeit der pH-Werte angegeben (allerdings ohne dort die Bodenarten zu benennen...). Tab. A. 16 zeigt diese Daten und macht zumindest den starken Einfluss des pH auf die Adsorption der genannten Elemente deutlich.

Tab. A. 16 K_D -Werte ausgewählter Radionuklide in Abhängigkeit des pH /YU 01/

Element	pH	K_D (cm ³ /g)	Source	Element	pH	K_D (cm ³ /g)	Source
Cesium	3	45	Staley et al. (1979)	Strontium	2	0,1	Staley et al. (1979)
	5	150			3	6	
	8	905			7	500	
	10	650			10	170	
	4-9	1,000 ^a			4-9	27 ^b	
Deuterium	All	0	Baes and Sharp (1983)	Thorium	2	500	Rancon (1973)
					5	3,000	
Lead	2,2	1,850	Gee et al. 1(1980)		7	50,000	Gee et al. 1(1980)
	7,7	10,000			13	50	
	4-9	99 ^c			2,2	1,2	
Plutonium			Baes and Sharp (1983)		7,7	80,000	
	2	150					
			Staley et al. (1979)				

	5	250		4-9	60,000 ^d	Baes and Sharp (1983)
	7	8,500				
	11	1,000	Uranium	2	0	Rancon (1973)
				8	100	
	4-9	1,800 ^c		10	600	
				13	50	
Radium	2	0	U.S. Nuclear Regulatory			
	4	12	Commission (1980)	2,2	1,3	Gee at al. 1(1980)
	6	60		7,7	23,000	
	7	100				
				4-9	45 ^f	Baes and Sharp (1983)
	2,2	13				
	7,7	2,400				

^a Geometric mean (GM) of values ranging from 10 to 52,000, with a geometric standard deviation (GSD) of 6,7

^b GM of values ranging from 0,15 to 3,300, with GSD of 7,4

^c GM of values ranging from 11 to 300,000, with GSD of 10

^d GM of values ranging from 2,000 to 510,000, with GSD of 4,5

^e GM of values ranging from 4,5 to 7,6000, with GSD of 5,5

^f GM of values ranging from 11 to 4,400, with GSD of 3,7

A.3.7 Literaturquelle: /SKB 09/

In /SKB 09/ wird u. a. ein Vergleich von Boden-K_D-Werten mit Literaturdaten und Rechnungen zur Schätzung von K_D-Werten zur Verwendung bei der Risikobewertung durchgeführt. Es werden K_D-Werte für Böden und Sedimente zusammengefasst, die aus den an den Standorten Forsmark und Laxemar-Simpevarp (Schweden) gemessenen Konzentrationen einheimischer stabiler Elemente berechnet wurden. Diese wurden dann mit verschiedenen Literaturquellen von K_D-Werten für Ce, Cl, Co, Cr, Cs, Fe, Ho, I, La, Mn, Mo, Nb, Nd, Ni, Np, Pa, Pb, Pu, Ra, Sb, Se, Sm, Sn, Sr, Tc, Th, Tm, U und Yb verglichen.

Für fast jedes dieser Elemente in Böden wurde in /SKB 09/ eine Regressionsgleichung entwickelt, die eine Schätzung der K_D-Werte für jeden beliebigen Boden bei einer geringen Menge an Informationen über den Boden ermöglicht. Dennoch betrug die mittlere geometrische Standardabweichung (GSD) das 4,3-fache, was einen Vertrauensbereich von etwa 18-fach über und unter dem besten Schätzwert für die K_D-Werte bedeutet. Bei den Sedimenten werden die Werte nach Wassertyp und Sedimenttyp kategorisiert. Der Median der GSD für Sediment-K_D-Werte, wie er an den Standorten Forsmark und Laxemar-Simpevarp gemessen wurde, betrug das 2,5-fache, aber der Median der GSD unter den Literaturwerten lag sogar beim 8,6-fachen. Die K_D-Werte sind also mit erheblichen Unsicherheiten behaftet.

Alle in /SKB 09/ gemessenen K_D-Werte sind in Tab. A. 17 aufgeführt. Mit Ausnahme der Spike-Werte für Cl und I (also künstlich hinzugefügte Elemente) handelt es sich dabei

um K_D -Werte für Elemente, die im Boden bei der Entnahme ursprünglich vorhanden waren (so genannte native Element- K_D -Werte). Die nativen K_D -Werte sind in der Regel höher als die K_D -Werte, die sich aus der Hinzugabe („spiking“) von Elementen ergeben, da die Retentionsprozesse im Boden sehr lange Zeit hatten, um ein (Quasi-)Gleichgewicht zu erreichen. Zugaben (Spikes) von Elementen führen zu niedrigeren K_D -Werten und sind mobiler als die ursprünglich vorhandenen Elemente. Im Zusammenhang mit der Entsorgung nuklearer Abfälle, bei denen sich die Bewertungen über Jahrtausende erstrecken, sind „native“ K_D -Werte jedoch möglicherweise am besten geeignet /SKB 09/.

Für Cl und I sind die „nativen“ K_D -Werte fast alle höher als die entsprechenden K_D -Werte der Spikes, wie auf der Grundlage der Äquilibrierungszeit erwartet (Tab. A. 15). /Sheppard und Evenden 1988/ wiesen darauf hin, dass der K_D -Wert für I über acht Größenordnungen der Bodenkonzentration (bis zu 100 mg/kg) linear ist, aber /Sheppard et al. 1996/ stellten eine Nichtlinearität oberhalb von ~1 mg I kg⁻¹ fest. Die Nichtlinearität würde zu einem niedrigeren K_D -Wert bei höheren Bodenkonzentrationen führen, was mit den in /SKB 09/ gemachten Feststellungen übereinstimmt.

Tab. A. 17 K_D -Werte (L/Kg) für Cl, I und andere Elemente. GM: geometrisches Mittel aus max. 7 Werten /SKB 09/

Analyte symbol	Site A clayey till, fen	Site B peat, fen	Site C sandy till, oak forest	Site D clay gyt- tja, fen	Site E peat, for- mer fen	Site F clay gyt- tja, open fen	Site G clayey till, arable	GM
Cl na- tive	4,4	37	7,1	0,036	41	5,2	12	5,2
I native	90	140	60	3,900	1,600	8,300	210	720
Cl spike	0,017	3,5	0,76	1,1	2	2	0,24	0,65
I spike	0,0041	2,9	0,28	8,8	1,7	2,9	0,69	0,52
Al	4,700	2,600	8,900	7,700	2,800	3,100	11,000	4,300
As	34	340	33	320				
Ba	34	6,3	30	23	15	54	93	27
Be					290	350		320
Ca	460		460	74	65	24	240	130
Cd	73	480	190	150	220	150	1,200	230
Ce	39,000	4,100	1,700	5,900	3,800	4,400	88,000	8,100
Co	5,000	2,800	2,000	990	200	220	14,000	1,500
Cr	140	900	250	430	370	480	270	350
Cs	28,000		21,000	25,000	57,000	31,000	120,000	38,000
Cu	450	560	160	930	2,100	3,200	700	780
Dy	30,000	2,700	1,700	4,800	3,000	6,500	52,000	6,800
Er	21,000	2,400	1,900	3,700	2,400	6,000	34,000	5,600
Eu	5,600		1,200	2,800	2,000	7,100	11,000	3,800
Fe	25,000	12,000	4,900	34,000	13,000	59,000	160,000	25,000
Ga	2,600	1,300	5,900	9,400	7,800	7,800	14,000	5,500
Gd	22,000	1,800	1,200	3,700	2,400	5,100	51,000	5,200
Ge	380		400	600	680	720	450	520
Hf	650		390	340	520	250	360	400
Ho	37,000		1,800	5,200	2,900	6,700	37,000	7,700
K	790	160	1,200	96	280	1,100	1,200	470
La	44,000	2,600	1,800	5,900	4,000	2,700	80,000	7,200

Analyte symbol	Site A clayey till, fen	Site B peat, fen	Site C sandy till, oak forest	Site D clay gyt- tja, fen	Site E peat, for- mer fen	Site F clay gyt- tja, open fen	Site G clayey till, arable	GM
Li	190			370	220	370		280
Lu	14,000		2,000	2,300	1,500	7,000		3,700
Mg	410	650	1,400	46	140	60	1,400	300
Mn	18,000	1,200	3,600	730	230	130	22,000	1,700
Mo	70	1,200	410	1,200	6,800	3,300	240	810
Na	13	82	19	5,2	17	12	37	19
Nb			1,700	12,000	14,000		36,000	10,000
Nd	46,000	2,100	1,500	5,200	3,200	7,300	76,000	7,500
Ni	3,800		530	460	710	450	3,000	980
Pb	6,000	3,100	2,000	11,000	17,000	44,000	25,000	9,600
Pr	43,000	2,300	1,600	5,500	3,400	6,100	80,000	7,600
Rb	11,000	800	15,000	1,100	3,700	21,000	34,000	6,300
Re				12	29	39		24
Sb	290	180	260	1,200	1,300	1,100	440	520
Sc				330		440	14	35
Se	10	11	41	56	130	140	14	35
Sm	49,000	1,700	1,300	5,000	3,000	9,000	63,000	7,100
Sr	340	310	1,3	59	68	30	190	160
Tb	38,000		1,500	4,000	2,900	5,900	45,000	7,500
Th	31,000	34,000	5,500	14,000	9,300	34,000	250,000	25,000
Tl		1,900	3,400	1,500	2,000			2,100
Tm			2,600	4,300	2,500	7,600		3,800
U	610	1,500	1,800	5,700	12,000	44,000	3,300	4,000
V	630	430	1,400	610	670	1,800	1,100	840
W		210						
Y	21,000	1,500	2,000	3,700	2,400	3,500	40,000	5,000
Yb	18,000	3,300	1,900	2,800	1,800	7,400	28,000	5,300
Zn	10	2	19	5,4	-1	30	300	16
Zr	480	750	530	730	530	320	440	520

K_D values could not be computed because soil ore pore water concentrations were below limits, the K_D limit values are shown

Im Ergebnis ihrer Untersuchungen stellen /SKB 09/ fest, dass es möglich ist, K_D -Werte für Böden und Sedimente auszuwählen, die die besten Schätzungen aus den verfügbaren Daten darstellen, und zu zeigen, dass sich diese Werte in statistisch signifikanter Weise unterscheiden würden, wenn sich die Standortbedingungen unterscheiden. Beispielsweise variierten die K_D -Werte für U im Boden deutlich mit dem pH-Wert. Wenn also der pH-Wert des Bodens von Standort zu Standort oder im Laufe der Zeit aufgrund natürlicher Prozesse oder menschlicher Aktivitäten variiert, ist es möglich, überarbeitete beste Schätzwerte für K_D für den veränderten pH-Wert des Bodens zuzuweisen. Es ist jedoch wichtig, die Gesamtvariabilität der K_D -Daten zu berücksichtigen.

Unter den Regressionsgleichungen zur Vorhersage der K_D -Werte für Böden betrug der Median der geometrischen Standardabweichung 4,3, was eine 95-Perzentil-Konfidenzgrenze von 18-fachen Werten über und unter den empfohlenen Werten impliziert. Die Werte des 5. und 95. Perzentils unterscheiden sich um mehr als das 300-Fache voneinander. Dies ist eindeutig eine ausreichend große Abweichung, um einige Elemente aus

einer Kategorie „immobil“, in die Kategorie „mobil“ zu überweisen, oder umgekehrt. In vielerlei Hinsicht kann man über K_D -Werte bestenfalls sagen, dass es extrem mobile Elemente wie Cl von extrem immobilen Elementen wie Pb und Th unterscheiden kann. Dies bedeutet jedoch nicht, dass K_D -Werte als Sorptionsmodell fehlerhaft ist, sondern vielmehr, dass viele bekannte und unbekannte Variablen einen starken Einfluss haben.

A.3.8 Literaturquelle: /SHE 07/

In /SHE 07/ wird festgestellt, dass kanadische Verbraucher eine nachhaltige Landwirtschaft und Produkte fordern, die unter Einhaltung der besten Bewirtschaftungspraktiken (BMP) geliefert werden. Die Anreicherung von Spurenelementen in Böden kann die Produktivität von Pflanzen, die Lebensmittelqualität sowie die Gesundheit von Ökosystemen und Menschen beeinflussen. Die kanadische Futter- und Lebensmittelexportindustrie wurde bereits mit Strafen für hohe Spurenelementgehalte, z. B. Cadmium (Cd) in Hartweizen, belegt. Daher ist es zwingend erforderlich, die Akkumulation und die potenziellen kurz- und langfristigen Auswirkungen von Spurenelementen im Boden abschätzen zu können. Ein nationaler Indikator für Spurenelemente (Trace Element Indicator, TEI), der auf der derzeitigen Belastung landwirtschaftlicher Flächen mit Spurenelementen basiert, ist in Arbeit. Der vorgeschlagene TEI ist ein kritischer Belastungsansatz mit einem einzigen Ausdruck des Risikos der Auswirkung von einzelnen oder mehreren Spurenelementen aus mehreren Quellen (Gülle, Klärschlamm, Abwässer und Düngemittel sowie natürliche Prozesse), die auf stochastische Weise herangezogen werden. Zwei wichtige Anforderungen an die Daten sind die aktuellen Hintergrundwerte von Spurenelementen im Boden und die Auslaugbarkeit dieser Spurenelemente. In /SHE 07/ wurde eine Erhebung der Gesamt- und löslichen Konzentrationen von 54 Elementen in bis zu 112 Böden durchgeführt. Diese repräsentieren wichtige Bodenarten in Kanada. Auf dieser Grundlage wurde eine Datenbank für den Fest-Flüssig-Verteilungskoeffizienten (K_D -Werte) errechnet. Tab. A. 18 zeigt die in /SHE 07/ ermittelten Bodeneigenschaften und K_D -Werte mit statistischen Daten.

Tab. A. 18 Univariate Statistik mit Bodeneigenschaften und K_D -Werten für 54 Elemente und Korrelationskoeffizienten /SHE 07/

	<i>n</i>	Minimum	Maximum	GM	GSD	Median	Correlation of log K_d to log K_d for K	Correlation of log K_d to log K_d for Ce
TOC (%)	106	0.05	10	2.9	2.1	2.6		
sand (%)	107	1.7	97	45	24	43	-0.24	
silt (%)	107	1.8	79	34	15	35	0.18	
Clay (%)	107	1.4	70	20	16	14	0.22	
pH	108	3.5	8.2	6.2	1.1	6.2		0.62
Al	76	2.2E+00	2.2E+06	3.1E+04	12	4.5E+04	0.39	
As	80	3.5E+01	1.6E+04	7.5E+02	4.5	6.6E+02		0.55
Ba	39	1.2E+02	1.2E+04	9.9E+02	3.4	1.3E+03		0.61
Be	3	1.0E+02	1.1E+03	4.0E+02	3.5	5.7E+02		-0.97
Bi	4	8.8E+03	2.1E+05	3.0E+04	3.9	2.1E+04		
Ca	92	9.3E+00	3.5E+03	1.5E+02	2.9	1.3E+02	0.24	
Cd	86	1.8E+01	6.0E+03	1.3E+03	2.7	1.7E+03		0.47
Ce	112	4.4E+02	3.7E+06	4.4E+04	6.4	4.0E+04		1.00
Co	111	2.0E+01	1.7E+05	3.5E+03	6.3	2.9E+03		0.69
Cr	61	3.2E+02	3.8E+04	8.1E+03	2.7	8.6E+03		0.58
Cs	93	1.7E+02	7.6E+05	4.3E+04	5.8	6.0E+04	0.39	
Cu	109	6.4E+01	1.2E+04	1.2E+03	2.7	1.4E+03	0.32	0.39
Dy	97	3.9E+02	5.4E+05	1.9E+04	5.3	1.5E+04		0.95
Er	95	3.3E+02	5.2E+05	1.7E+04	5.0	1.2E+04		0.95
Eu	108	1.8E+02	1.4E+05	7.3E+03	3.8	5.4E+03		0.86
Fe	96	3.6E+02	3.8E+05	2.6E+04	5.0	4.2E+04		0.66
Ga	83	2.1E+02	2.0E+05	1.1E+04	6.4	1.3E+04	0.55	-0.21
Gd	98	3.9E+02	3.4E+05	1.7E+04	5.1	1.4E+04		0.97
Ge	30	9.9E+01	7.8E+03	1.3E+03	2.2	1.2E+03		0.59
Hf	80	2.1E+01	3.3E+05	4.5E+04	4.2	5.2E+04		0.76
Ho	89	4.0E+02	4.7E+05	1.6E+04	5.2	1.2E+04		0.94
In	13	1.8E+02	1.1E+04	2.8E+03	2.9	4.2E+03	0.52	0.92
K	108	3.9E+00	4.3E+04	1.1E+03	5.9	1.2E+03	1.00	
La	112	5.0E+02	1.6E+06	3.0E+04	5.1	2.8E+04		0.97
Li	33	1.1E+02	2.5E+04	1.1E+03	3.4	9.7E+02		0.42
Lu	72	3.0E+02	1.4E+05	1.3E+04	4.6	1.0E+04		0.95
Mg	103	2.2E+01	1.4E+04	4.7E+02	3.8	3.6E+02	0.58	
Mn	108	3.6E+01	3.0E+05	2.3E+03	13	1.3E+03		0.63
Mo	90	1.6E+01	1.6E+03	1.6E+02	2.8	1.6E+02	0.25	
Na	104	5.6E+00	2.5E+03	1.5E+02	3.6	1.8E+02	0.64	
Nb	61	2.7E+01	8.1E+05	6.3E+04	5.3	7.5E+04	0.37	0.61
Nd	111	4.3E+02	1.1E+06	2.9E+04	5.5	2.5E+04		0.98
Ni	106	2.2E+01	9.9E+03	1.6E+03	2.7	1.7E+03	0.34	0.48
Pb	107	2.3E+02	2.6E+05	1.8E+04	4.4	1.8E+04	0.32	0.43
Pr	97	4.8E+02	4.5E+05	2.7E+04	5.1	2.8E+04		0.98
Rb	112	6.1E+01	4.9E+05	6.8E+03	5.5	9.3E+03	0.79	0.19
Re	81	6.0E+00	6.0E+02	5.4E+01	3.4	5.0E+01		
Sb	100	2.8E+01	4.2E+03	7.3E+02	2.3	8.7E+02	0.36	0.23
Se	51	2.0E+01	9.1E+03	2.9E+02	4.3	2.7E+02		0.60
Sm	110	4.2E+02	4.5E+05	2.4E+04	5.2	1.8E+04		0.96
Sn	26	2.1E+02	6.8E+03	1.5E+03	2.6	1.7E+03	0.58	0.74
Sr	102	3.4E+01	1.8E+04	6.5E+02	2.8	6.0E+02	0.64	-0.23
Tb	92	3.6E+02	4.3E+05	1.6E+04	5.5	1.1E+04		0.96
Te	7	7.5E+02	1.7E+03	1.1E+03	1.3	1.1E+03		
Th	106	4.3E+02	5.8E+05	3.1E+04	5.0	3.3E+04		0.71
Tl	95	1.4E+02	7.4E+04	8.7E+03	4.5	1.1E+04	0.58	-0.23
Tm	63	3.5E+02	3.7E+05	1.2E+04	5.4	1.0E+04		0.94
U	112	8.8E+00	2.2E+04	9.6E+02	6.4	1.3E+03	0.26	-0.48
V	107	3.8E+02	1.2E+05	6.3E+03	2.5	6.4E+03	0.44	0.28
W	19	2.2E+02	1.3E+05	5.9E+03	3.9	6.0E+03		0.47
Y	70	3.6E+02	7.6E+05	1.7E+04	6.5	9.7E+03		0.96
Yb	107	2.8E+02	3.6E+05	2.0E+04	4.9	1.7E+04		0.94
Zn	108	1.0E+01	1.8E+04	2.7E+02	5.9	1.5E+02	-0.22	0.69
Zr	110	1.3E+01	1.3E+06	2.0E+04	8.1	3.5E+04	0.58	0.25

Die Autoren der Studie /SHE 07/ stellten fest, dass die Bandbreite der Bodeneigenschaften beträchtlich ist. Die meisten Daten (K_D -Werte, Metallkonzentrationen im Boden) entsprachen annähernd einer Lognormalverteilung. Abgesehen von dieser empirischen Unterstützung für die Lognormalverteilung bietet der „Zentrale Grenzwertsatz“ eine a priori Grundlage für die Annahme einer Lognormalverteilung für Verhältnisdaten wie den K_D -Wert.

/SHE 07/ verglichen die ermittelten K_D -Werte mit Literaturangaben in /BAE 83/, /SHE 90/ und /IAEA 94/. Insgesamt waren die in der Studie von /SHE 11/ ermittelten K_D -Werte für die betrachteten Böden 5,6-mal höher als die Werte in den o. g. betrachteten Literaturquellen (von 160-mal höher für Fe bis 9-mal niedriger für Zn). Höhere Werte wurden in dieser Studie erwartet, da in dieser Studie ursprünglich im Boden vorhandene Elemente gemessen wurden, während in den genannten Literaturquellen tendenziell Daten verwendet wurden, bei denen stabile oder radioaktive Tracer in einer kurzfristigen Batch-Sorptionsmethode hinzugefügt wurden. Eine Unterschätzung der Sorption, die bei kurzfristigen Batch-Sorptionsmethoden auftreten kann, würde zu K_D -Werten führen, die implizieren, dass die Spurenelemente besser auswaschbar sind als sie es tatsächlich sind.

Nach /SHE 07/ wurde in deren Studie eine wesentlich realistischere Methode angewandt (Details siehe dort), die für die ursprünglich im Boden vorhandenen Spurenelemente und die Feuchtigkeitsbedingungen im Feld geeignet ist.

Als Fazit lässt sich auch hier feststellen, dass K_D -Werte für die jeweiligen Elemente enorme Bandbreiten haben können und aufgrund der Vielzahl der Einflussfaktoren standortspezifisch bestimmt werden sollten, um aussagekräftigere Werte zu erhalten.

A.4 Das K_D -Konzept

Im Folgenden werden das K_D -Konzept beschrieben und bestimmende Einflussfaktoren auf K_D -Werte identifiziert (siehe Kap. A.4.1). Konzeptionelle Schwierigkeiten im Zusammenhang mit dem K_D -Konzept werden in Kap. A.4.2 beleuchtet. Aussagen zur Datenverfügbarkeit und eine Zusammenfassung finden sich in A.4.3 und A.4.4. Die im Rahmen dieses Forschungsvorhabens recherchierten K_D -Werte finden sich in Anhang A.3.

A.4.1 Das K_D -Konzept und bestimmende Einflussfaktoren

Das K_D -Konzept beschreibt das Verhältnis von gelöster Konzentration und Feststoff gebundener Stoffmenge durch einen linearen Zusammenhang, also dass identische, voneinander unabhängige Sorptionsplätze und eine unbegrenzte Sorptionskapazität des Sediments angenommen werden /NOS 96/.

Der K_D -Wert ist somit ein Verteilungskoeffizient mit der Einheit m^3/g und beschreibt element- und systemabhängig die Sorptivmobilität relativ zu der Strömungsgeschwindigkeit

unter den Annahmen, dass zwischen den Phasen stets ein chemisches Gleichgewicht herrscht und Sorptionsvorgänge reversibel sind /SZE 10/.

$$K_D = \frac{\text{Aktivitätskonzentration im Feststoff}}{\text{Aktivitätskonzentration in Lösung}}$$

Da das System permanent gestört wird, kann realistisch betrachtet der Gleichgewichtszustand nie erreicht werden. Tochternuklide werden stetig nachgebildet und viele Parameter verändern sich im Laufe der Zeit und somit auch der Gleichgewichtszustand. Sorptionsprozesse sind nur dann reversibel, wenn ein sorbiertes Molekül unverändert bleibt. Dies ist der Fall bei schwachen Bindungen durch van-der-Waals- oder Dipolwechselwirkungen. Bei einer solchen Physiosorption sind Moleküle relativ schwach mit kleinen Bindungsenergien gebunden. Sind die Bindungen hingegen chemischer Natur, d. h. kovalent oder ionisch, so können irreversible Molekülveränderungen auftreten. Die Bindungen der Chemisorption sind stabiler und zeichnen sich durch längere Reaktionszeiten aus. Beide Prozesse treten gemeinsam auf, welcher den dominanten Part übernimmt, hängt von Reaktionsbedingungen in der Umgebung und den Reaktionspartnern ab /SZE 10/.

Bestimmende Einflussfaktoren

Redoxverhalten

Ein K_D -Wert ist keine nuklidspezifische Konstante, sondern ist von dem chemischen Milieu, den thermodynamischen Randbedingungen und den das System charakterisierenden Größen abhängig.

Die Löslichkeit vieler Elemente ist abhängig von der Oxidationsstufe, so ist z. B. U^{4+} schwer löslich und U^{6+} gut löslich. Die in Böden ablaufenden Redoxreaktionen sind abhängig von den Verfügbarkeiten der typisch enthaltenden Oxidationsmittel O_2 , NO_3^- , Mn^{4+} , Fe^{3+} , SO_4^{2-} und Reduktionsmitteln H_2S , NH_4^+ , Fe^{2+} , Mn^{2+} und FeS_2 . Das Sorptionsvermögen eines Bodens und der damit verbundene Nuklidtransport wird von solchen Reaktionen beeinflusst, z. B. bewirkt eine Reduktion von Fe^{3+} zu Fe^{2+} bei sinkendem pH-Wert eine Verringerung des Sorptionsvermögens und Abgabe der an Fe^{3+} -Hydroxiden adsorbierten Nuklide an das Wasser. Der Transport von Nukliden wie Ra^{2+} , welches nur zweiwertig vorkommt, kann indirekt durch chemische Reaktion mit Molekülen und deren Redoxverhalten beeinflusst werden. Das Redoxpotential im Grundwasser wird durch

Infiltration beeinflusst und führt zu Veränderungen der Nuklidtransportgeschwindigkeiten /SZE 10/.

pH-Wert

Ob eine Auflösung oder Ausfällung vorliegt, ist häufig vom pH-Wert abhängig. Insbesondere für Metalle, welche einen erheblichen Anteil eines Abfallinventars ausmachen können, gilt diese Abhängigkeit. Während im basischen Bereich eine Ausfällung stattfindet, werden im sauren Milieu die in metallischer Form vorliegenden Nuklide als freie Kationen mobilisiert. Für den K_D -Wert bedeutet dies für einige Elemente eine starke Kopplung an den pH-Wert. Im Gegensatz dazu finden sich Ionen wie Na^+ und Cl^- , deren Löslichkeiten nahezu unabhängig vom pH-Wert sind /SZE 10/.

Sorptionskonkurrenz

Das Rückhaltevermögen eines Bodens bezüglich Radionukliden ist durch seine spezifischen Oberflächensorptionsplätze pro Volumenelement limitiert. Bei mehreren gelösten Stoffen im Sickerwasser tritt eine Sorptivkonkurrenz um die freien Plätze auf. Ist ein gering adsorbierbares Molekül in hinreichend hoher Konzentration vorhanden, kann es so viele Plätze belegen, dass andere Sorptive kaum eine Transportverzögerung im durchströmten Medium erfahren. Somit kann der K_D -Wert eines bestimmten Nuklides und damit auch die zugehörige effektive Transportgeschwindigkeit in Anwesenheit anderer gelöster Nuklide variieren. Besondere Konkurrenz herrscht bei sich chemisch ähnlich verhaltenden Elementen und vergleichbaren Ionengrößen. Beispielsweise beeinflusst die Anwesenheit von Mg oder Ca die Sorption von Sr /SZE 10/.

Sättigungsgrad

Die Höhe der Wassersättigung des Bodens nimmt Einfluss auf die Transportgeschwindigkeit von Radionukliden, indem in heterogenen, ungesättigten Böden Teile hydrologisch unwirksam werden. Bei einem heterogenen Bodentyp mit erhöhtem Tonanteil findet die Wasserleitung dann durch die feinen Poren statt und größere laufen trocken. Dies bewirkt durch das Sorptionsvermögen im Ton einen Anstieg des K_D -Wertes, während im umgekehrten Fall in einem Boden mit geringem Tonanteil ein Abfall des K_D -Wertes zu erwarten ist /SZE 10/.

Kiesfraktion

Die Kornverteilung eines porösen Mediums übt Einfluss auf die mittlere Fließgeschwindigkeit aus. Größere Partikel müssen umflossen werden und dadurch wird der Wassertransport lokal verzögert. Weiterhin verfügt Kies über eine geringe Oberfläche pro Volumenelement und über ein geringes Sorptionsvermögen. Nach /DIN 87/ zählen Partikel ab 2,0 mm Korngröße zum Kies und gehören zum Skelettanteil eines Bodens. Zwischen den Skelettteilen werden Hohlräume mit feineren Partikeln wie Sand aufgefüllt. Der Skelettanteil beeinflusst die Transportgeschwindigkeit insbesondere durch die resultierende Inhomogenität, die sich im ungesättigten Boden besonders auswirkt /SZE 10/.

Oberflächenladung

Die spezifische Oberflächenladung pro Volumenelement ist ausschlaggebend für das Vermögen, Ionen aus der aquatischen Phase anzulagern. Dabei sind Parameter wie z. B. der pH-Wert maßgeblich in welchem Umfang dies geschieht. Somit ist die Oberflächenladung eine dynamische Größe, die auch durch die Sorption von Molekülen verändert wird. In Tonmineralien führt eine hohe Oberflächenladung zu repulsiven Kräften zwischen einzelnen Partikeln und kann die Barrierewirkung beeinträchtigen /SZE 10/.

Ionenstärke

Gelöste Ionen interagieren auf Grund ihrer Ladung miteinander. Kationen und Anionen erfahren attraktive Kräfte und die Gesamtwirkung aller Ionen lässt sich durch die Ionenstärke ausdrücken. Um die einzelnen Ionen bilden sich Ionenatmosphären, die mit steigender Ionenstärke größere Ladungen beinhalten. Hierdurch wird die Anziehungskraft durch Abschirmung verringert.

Bei Anwendung des K_D -Konzeptes bedeutet dies, bei hohen Ionenstärken, eine tendenzielle Überschätzung des Sorptionsvermögens, vor allem kann der Salzgehalt im Wasser bei untertägigen Lagern durch Umlösung bedeutende Veränderungen bewirken /SZE 10/.

Kolloide

Kolloide sind Partikel mit einem Durchmesser von 1 nm bis 1 μ m. Dabei handelt es sich um Moleküle, organische Bestandteile wie Mikroorganismen oder mineralische Partikel. Diese können mit dem Wasser durch entsprechend große Poren wandern. Radionuklide

erfahren ggf. einen beschleunigten Transport, wenn sie an Kolloide gebunden sind, und als Folge kann die tatsächliche Mobilität, abhängig von den Eigenschaften der verfügbaren Kolloide, höher sein als (ohne Berücksichtigung der Kolloide) eingeschätzt. Die Geschwindigkeit der Kolloide kann dabei höher als die mittlere Fließgeschwindigkeit des Wassers sein, da Kolloide wegen ihrer Größe durch größere Poren wandern. Bei Laborexperimenten wird die flüssige Phase oft abfiltriert und damit auch die Kolloidpartikel, sodass der K_D -Wert überschätzt wird. Für eine deutliche Veränderung der Transportbedingung von Radionukliden müssen Kolloide in ausreichender Anzahl verfügbar und so beschaffen sein, dass Radionuklide zur Sorption an deren Oberflächen neigen /SZE 10/.

Mikroorganismen und organische Bestandteile

Im Boden leben verschiedene Mikroorganismen, die im permanenten Stoffaustausch mit der Umgebung stehen. Solche Organismen bilden Mineralbestandteile mit ihrem Stoffwechsel um und sind in organischen Bestandteilen einer Deponie enthalten. Zu den Organismen zählen Bakterien, die zu Gasbildung und Wärmeproduktion beitragen können. Beispielsweise wird bei Beregnung einer Deponie ein Teil der Population ausgewaschen und in den Boden transportiert. Die Oberfläche der Bakterien bietet zusätzliche Sorptionsplätze für Kationen, da sie, abhängig vom pH-Wert, negativ geladen sein kann. Eine Ansiedlung der Mikroorganismen an Mineraloberflächen führt zu Mineralumbildung und Sorptivkonkurrenz. Direkt und indirekt wird dadurch der Transport von Radionukliden beeinflusst /SZE 10/.

A.4.2 Konzeptionelle Schwierigkeiten beim K_D -Konzept

Verschiedene, empirische Konzepte zu Sorptionsisothermen wurden entwickelt, um die Sorptionseigenschaften eines Bodens elementspezifisch vergleichen zu können /ATK 06/. /GIL 74/ gliederte diese Konzepte in vier Hauptisothermen (siehe Abb. A. 17).

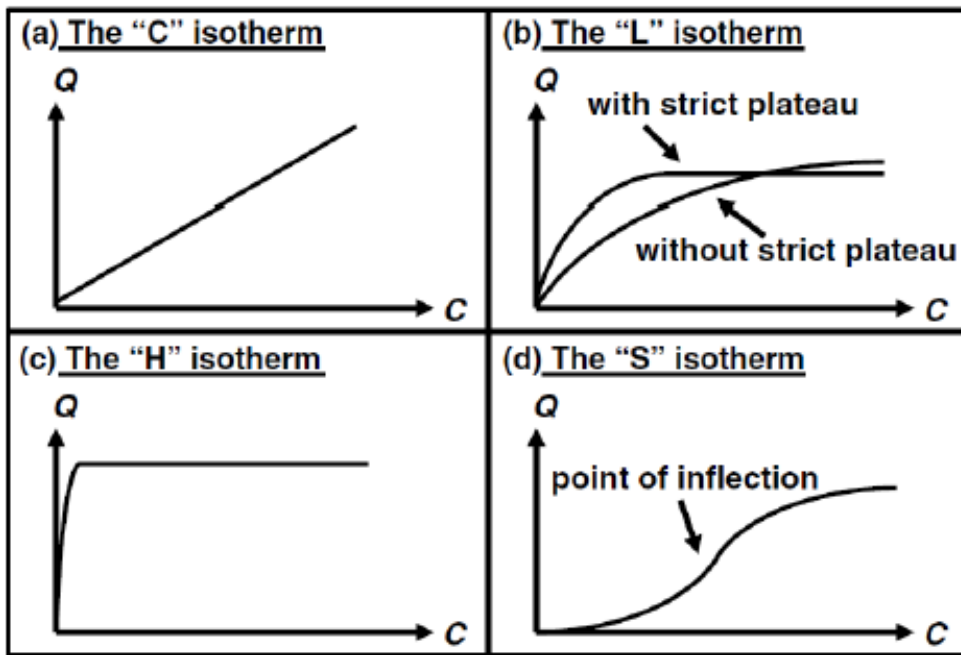


Abb. A. 17 Gliederung der Hauptisothermen (aus /GIL 74/)

Die gängigsten Isothermenmodelle sind die lineare Isotherme (= K_D -Wert-Konzept), und nicht-lineare Modelle wie die Freundlich-Isotherme, Langmuir-Isotherme und das BET-Model /ATK 06/.

Diese Modelle sind kinetisch oder thermodynamisch abgeleitet und geben keinen direkten Aufschluss über zugrundeliegende Prozesse oder Einflussgrößen. So wird z. B. nicht zwischen Adsorptions- und Desorptionsisothermen unterschieden, die i. d. R. nicht identisch verlaufen (Hysterese-Effekt; /LIM 07/). Die Bestimmung eines entsprechenden K_D -Wertes erfolgt standardisiert aus Messwerten mittels Regressionsanalytik /OECD 00/.

Als Isothermen zur Beschreibung der nichtlinearen Sorption dienen die Langmuir- und die Freundlich-Isotherme. Der Isotherme von Langmuir liegt die Modellvorstellung zugrunde, dass auf der Oberfläche des Sorbens eine definierte Zahl von identischen, voneinander unabhängigen Sorptionsplätzen existieren. Die Freundlich-Isotherme wurde zunächst empirisch gefunden. Unter der Annahme einer logarithmischen Abnahme der Adsorptionswärme von der Oberflächenbelegung lässt sie sich theoretisch ableiten. Sie verläuft bei hohen Konzentrationen nicht gegen einen Grenzwert, d. h. die Anzahl der Sorptionsplätze ist unbegrenzt, wie auch beim K_D -Ansatz /NOS 96/.

Die beiden Isothermen sind die am häufigsten zur Beschreibung der nichtlinearen Sorption verwendeten Modelle.

Langmuir-Isotherme

Der Adsorptionsisotherme von Langmuir liegt die Modellvorstellung zugrunde, dass auf der Oberfläche des Sorbens eine definierte Zahl von identischen, voneinander unabhängigen Sorptionsplätzen existieren /NOS 96/.

Die Langmuir-Isotherme nimmt zwischen c_{Ad} und c den funktionellen Zusammenhang an /NOS 96/:

$$c_{Ad} = \frac{K_L c}{1 + \frac{K_L}{\kappa} c}$$

Mit

c_{Ad} Konzentration des Radionuklids an der Matrix [mol/g]

c Konzentration des Radionuklids in der mobilen Phase [mol/l]

K_L Langmuir-Sorptionskonstante [m³/kg]

κ Sorptionskapazität an der Matrix [mol/g]

Sie verläuft bei hohen Konzentrationen asymptotisch gegen den Grenzwert κ , der die maximal vorhandene Anzahl von Sorptionsplätzen pro Masse Feststoff angibt. Für kleine Konzentrationen verläuft die Langmuir-Isotherme linear und entspricht dem K_D -Konzept mit dem Verteilungskoeffizienten K_L /NOS 96/.

Freundlich-Isotherme

Die Freundlich-Isotherme wurde zunächst empirisch gefunden. Unter der Annahme einer logarithmischen Abnahme der Adsorptionswärme von der Oberflächenbelegung lässt sie sich theoretisch ableiten. Sie verläuft bei hohen Konzentrationen nicht gegen einen Grenzwert, d. h. die Anzahl der Sorptionsplätze ist nicht begrenzt. Die Freundlich-Isotherme lautet /NOS 96/:

$$c_{Ad} = k_1 c^{k_2}$$

mit den Freundlich-Konstanten k_1 und k_2 .

Grundsätzlich existieren Effekte, die die Sorption hemmen oder beschleunigen, sodass lineare Isothermen verformt werden. Beispielsweise sinkt die Sorptionsfähigkeit, wenn ein Großteil der Sorptionsplätze belegt ist, andererseits kann eine geringe Konzentration des Sorbenten zur Hemmung des Sorptionsprozesses führen /LIM 07/. Weitere Ursachen, die zur Verminderung der Sorption führen, sind Liganden in der Bodenlösung, die die Ionen binden, Konkurrenz-Ionen, die die Sorptionsplätze streitig machen und ein nicht homogenes Fließverhalten, das dazu führt, dass die Ionen nicht mit der gesamten reaktiven Oberfläche in Kontakt treten. Letzteres ist unweigerlich mit der Porenverteilung und dem Feuchtegehalt im Boden verknüpft. So füllen sich bei trockenen Bedingungen zunächst die feinen Poren mit Wasser, während der wesentliche Transport bei gesättigten Verhältnissen über die Grobporen stattfindet /SCH 20/.

Smart-K_D-Ansatz

Seit dem Jahr 2008 wurde in einer Reihe von Vorhaben das Ziel verfolgt, räumlich und zeitlich variierende geochemische Bedingungen rechenkosteneffizient in Transportmodelle der Langzeitsicherheitsanalyse einzubinden. Hierzu wurde das Smart-K_D-Konzept entwickelt. Der Ansatz nutzt vorkalkulierte, multidimensionale K_D-Matrizen (K_D-Werte in Abhängigkeit von, z. B. pH, Ionenstärke, Karbonatkonzentration, Elementkonzentration etc.) und ist somit in der Lage für jeden Schritt in Zeit und Raum in einem Transportmodell variierende geochemische Bedingungen über den K_D abzubilden.

Mittels mechanistischer Modellansätze kann auf molekularer Ebene die Rückhaltung von Schadstoffen an Feststoffoberflächen modelliert werden. In diese Modelle fließen alle relevanten geochemischen Randbedingungen ein und sie sind in der Lage u. a. Oberflächenkomplexierung, Lösungsspeziation, Ausfällungsreaktionen, kinetisch beeinflusste Reaktionen, Ionenaustausch, Lösungsgleichgewichte etc. zu betrachten. Als hierfür üblich genutzte Programme sind PHREEQC und GEMS zu nennen. Beide Codes basieren auf unterschiedlichen theoretischen Lösungsansätzen. Während PHREEQC auf dem Massenwirkungsgesetz beruht und auf der chemischen Gleichgewichtsannahme basiert, ist GEMS ein Gibbs-Energie-Minimierer.

A.4.3 Datenverfügbarkeit

Hinsichtlich Literaturquellen mit K_D-Werten liegen aufgrund der jahrzehntelangen Forschung diesbezüglich eine große Menge an Daten vor. Allerdings konnten aufgrund der begrenzten Ressourcen in diesen Eigenforschungsvorhaben nicht alle Literaturquellen

gesichtet werden. Andererseits ist festzustellen, dass kaum Literaturdaten (von K_D -Werten) im Zusammenhang mit der Freigabe von radioaktiven Stoffen existieren. Der Hauptgrund dafür ist, dass das Freigabekonzept nur in Deutschland existiert (mit den dazugehörigen Modellen und Expositionspfaden) und entsprechend wenig daran geforscht wird. Das K_D -Konzept kommt bei der Berechnung der Strahlenexposition auf Basis von radiologischen Szenarien, die den Grundwasserpfad betreffen, zur Anwendung (siehe z. B. /THI 04/). Ein in /THI 04/ betrachtetes Szenario ist das „Privatbrunnenszenario“, bei dem Sickerwasser eines Deponiekörpers in einen Grundwasserleiter gelangt und zu einem nahegelegenen Brunnen transportiert wird. Für diese Betrachtungen wurden sehr konservative K_D -Werte angesetzt (mit ungenauen Substratbeschreibungen wie „sandiger Boden“ und ohne Angaben hinsichtlich der betreffenden Geochemie), die jedoch beispielsweise auch die Zusammensetzung des Deponiekörpers außer Acht lassen.

Die Literaturrecherche in diesem Eigenforschungsvorhaben (siehe Anhang A.3) hat gezeigt, dass für die jeweiligen Elemente enorme Bandbreiten vorliegen. Weiterhin wurden in den betrachteten Literaturquellen oftmals nur unzureichende Informationen genannt, für welche chemischen Bedingungen die K_D -Werte galten. Häufig wird lediglich die Bodenart genannt. Falls chemische Bedingungen genannt werden, wird andererseits die Bodenart nicht genannt. Sehr selten finden sich K_D -Werte für „anthropogene“ Materialien oder heterogene Substrate wie Bauschutt, Beton etc., die jedoch im Rahmen von Modellrechnungen für die Freigabe und andere Prozesse eine Rolle spielen könnten.

Es ist festzustellen, dass K_D -Werte stark abhängig von Substrat und Chemismus sind und somit ebenfalls stark von der Lokation abhängen. Um möglichst genaue (realistischere) Daten zu erhalten, sollten streng genommen Proben von der betreffenden Lokation genommen werden (bspw. vom Deponieuntergrund). Literaturwerte von willkürlich gewählten Böden aus den USA, ohne dass geochemische Bedingungen und die genaue Bodenzusammensetzung bekannt ist, sind für die Modellrechnungen zur Freigabe (zur Beseitigung) – wie in /THI 04/ durchgeführt – fern der realen Bedingungen vor Ort.

A.4.4 K_D -Werte: Zusammenfassung

Das K_D -Konzept bietet einen Rechenansatz, bei dem das gesamte chemische Verhalten auf einen einzigen Verteilungskoeffizienten zurückgeführt wird.

K_D -Werte sind mit einer hohen Variabilität verknüpft, sodass für jeden Wert ein Gültigkeitsbereich angegeben werden muss. Des Weiteren sind solche Werte nicht über

größere Zeiträume konstant, da sich das chemische Milieu von bspw. Deponien mit dem langfristigen Auswaschen und durch Erosionsprozesse verändert /SZE 10/.

Bei K_D -Werten, die auf experimentellem Wege ermittelt worden sind, besteht grundsätzlich das Problem der Übertragbarkeit auf reale Bedingungen. Laborexperimente können nur begrenzt reale Bedingungen nachstellen und In-situ-Proben geben lediglich lokal stark eingegrenzte Informationen wieder /SZE 10/.

Das K_D -Konzept bietet folglich die Möglichkeit eine Stoffausbreitung in porösen Medien zu nähern. Eine Modellierung ist allerdings mit großen Unsicherheiten hinsichtlich des K_D -Wertes behaftet, da Sorptionsprozesse von einer Fülle von Faktoren abhängen. Da gerade der K_D -Wert maßgeblich für die Transportgeschwindigkeit und Löslichkeit ist, sind dazu vergleichbar kleine Variabilität in Parametern wie Dichte oder Nutzporosität bei der konservativen Berechnung zu vernachlässigen. Ein hoher Grad an Konservativität beschreibt zwar eine Deponie oder ein Lager nur stark vereinfacht, neigt aber nicht zu einer Unterschätzung der Dosis.

Konservative Ansätze unter Nutzung des K_D -Konzepts befriedigen zwar die wenigsten Realitätsansprüche, dienen aber zu einer Abschätzung der höchstmöglichen Dosis einer Referenzperson /SZE 10/.

Schließlich ist festzustellen, dass K_D -Werte für „anthropogene“ Substrate in der Literatur selten vorkommen (insbesondere Daten, die für die Freigabe zur Beseitigung auf Deponien sind, sind selten zu finden, aus Gründen, die an anderer Stelle in diesem Bericht genannt sind).

A.5 K_D -Werte GRS-Labor

Wie bereits in den vorherigen Abschnitten erläutert, sind K_D -Werte für eine spezifische Element-Feststoff Kombination in Abhängigkeit von geochemischen Randbedingungen (z. B. pH, Ionenstärke, Lösungszusammensetzung etc.) meistens durch eine hohe Variabilität gekennzeichnet. Das heißt, K_D -Werte sind element- sowie Feststoffabhängig und variieren entsprechend des geochemischen Milieus. Dementsprechend muss bei Verwendung von K_D -Werten deren Gültigkeitsbereich beachtet werden. Sofern für definierte Umweltsysteme und für bestimmte Elemente (bzw. Nuklide) solche K_D -Werte nicht vorliegen, werden teilweise K_D -Werte von anderen Element-Feststoff Systemen abgeleitet und für Transportrechnungen verwendet. Um möglichst realitätsnähere K_D -Werte für

definierte Element-Feststoff Systeme im Grundwassersystem im Untergrund einer Deponie in Transportrechnungen berücksichtigen zu können, wurden im Rahmen dieses Forschungsvorhabens Sorptionsversuche durchgeführt. Dabei sollte die Variabilität des K_D -Wertes unter naturnahen Bedingungen für ausgewählte Systeme dargestellt werden.

Hierzu wurde in den Experimenten das Sorptionsverhalten von Eu(III), U(VI) und Cs(I) untersucht. Die gezielt getroffene Elementauswahl umfasst unterschiedlich geladene Nuklide (ein bis sechswertig), die jeweils eine stark variierende Lösungsschemie aufweisen, was ein unterschiedliches Sorptionsverhalten erwarten lässt. Europium liegt in den Versuchen ausschließlich dreiwertig vor und dient hierbei als ein chemisches Analogon für trivalente Lanthanoide und Actinoide wie z. B. Am, Cm und Nd /GEC 13/, /LEE 06/, /TAN 10/, /LES 24/, /NEU 21/, die sicherheitsrelevant sind. Ebenfalls sicherheitsrelevant, U(VI), welches in Konzentrationen unterhalb der Freigrenze angewendet wurde und ein redox-sensitives Nuklid mit komplexer Lösungsschemie darstellt /BAJ 22/. Das einwertige Kation Cs(I) wurde aufgrund seiner Eigenschaft, stark mit Schichtsilikaten zu interagieren (Kationenaustausch), ausgewählt, welches allerdings aufgrund seiner Ladung eine geringere Tendenz zur Ad-/Absorption aufweist /BRA 00/. Für die Sorptionsversuche wurden, in Anlehnung an im Untergrund einer Deponie, potenzielle vorkommende anorganische Feststoffe, wie die folgenden Materialien exemplarisch ausgewählt:

- Kies
- Mittel- bis Grobsand (im Folgenden als „LWI-Sand“ bezeichnet)
- Mix aus Hohlziegelstein und Tonziegel (im Folgenden als „Ziegel“ bezeichnet)
- Mischsediment

Die Auswahl des Kieles sowie Mittel- bis Grobsande in unterschiedlicher mineralogischer Zusammensetzung stellen hierbei mögliche Bestandteile eines Grundwasserleiters dar. Wobei der Mittel- bis Grobsand genau aus diesem Grund für Strömungssimulationsexperimente vom Leichtweiß-Institut für Wasserbau (LWI) der Technischen Universität Braunschweig genutzt wird:

- Der Kies wurde als kommerzielles Produkt mit der Bezeichnung „FLAIRSTONE Bunt/Rheinkies 2-8 mm“ von der HORNBACH Baumarkt AG erworben, gefördert und abgebaut von der Weco GmbH & Co KG aus deutschen Flussvorkommen. Der erworbene Kies wurde mit Leitungswasser gespült bis keine Trübungen mehr sichtbar waren, bei 50 °C getrocknet und auf den Korngrößenbereich von

1-5 mm gesiebt (entgegen der Produktbezeichnung „2-8 mm“ waren auch kleinere Partikel enthalten).

- Der Mittel- bis Grobsand mit einem Korngrößenbereich von 0.4 - 1.4 mm wurde vom Leichtweiß-Institut für Wasserbau (LWI) der Technischen Universität Braunschweig bereitgestellt und im Folgenden als „LWI-Sand“ bezeichnet. Der Grobsand wurde mit Reinstwasser gewaschen und bei 50 °C getrocknet.

Der Hohlziegelstein und der Tonziegel wurden ausgewählt, da davon ausgegangen werden kann, dass im Untergrund einer Deponie nicht ausschließlich natürliche Substrate anstehen, sondern ggf. Bauschutt den Transport von Nukliden beeinflusst. Diese Entscheidung basiert auf persönlichen Erfahrungen und Erfahrungsberichten aus Tiefenbohrungen in urbanen Gebieten. Der Mix aus Ziegelstein und Tonziegel, beide aus den 1950er Jahren stammend, wird im Folgenden als „Ziegel“ bezeichnet. Für den Mix wurde ein Hohlziegelstein und ein Tonziegel zermahlen, auf 200-800 µm gesiebt und zu gleichen Anteilen miteinander homogen vermengt.

Das „Mischsediment“ stellt hier eine möglichst naturnahe Zusammensetzung eines Aquifers der Norddeutschen Tiefebene dar und bezeichnet eine künstlich vermengte Sedimentzusammensetzung. Es repräsentiert eine in Anlehnung an /GRI 82/ und /NOS 12/ in der Norddeutschen Tiefebene vorkommende, vereinfachte Sedimentzusammensetzung. Das „Mischsediment“ wurde bestehend aus den Einzelkomponenten 80 Gew.-% Quarz (150 - 850 µm, „G20EAS-Extra“ der Quarzsand GmbH & Co. KG), 10 Gew.-% K-Feldspat (5 - 435 µm, „Norflot Kali 600“ der Sibelco Deutschland GmbH) und 10 Gew.-% Muskovit (13 - 435 µm, „mica WG“ der Normag GmbH) homogen vermengt. Detaillierte Charakterisierungen der Einzelkomponenten sind in /BRI 18/ verfügbar.

Es war nicht Ziel dieses Eigenforschungsvorhabens umfassende Feststoffcharakterisierungen durchzuführen, um z. B. die exakte Mineralzusammensetzung, spezifische Oberfläche, Oberflächenladungsverhalten, Kationenaustauschkapazität etc. zu bestimmen. Es konnten aufgrund der zeitlichen Rahmenbedingungen ebenfalls keine Redoxbedingungen in den Versuchen angewendet werden, obgleich davon auszugehen ist, dass diese unterhalb von Deponien anzutreffen sind und für zukünftige Laborversuche zu empfehlen sind. Weiterhin wurde der Einfluss von organischen Stoffen (e.g. Huminsäuren) bzw. Mikroorganismen nicht mit einbezogen.

A.5.1 Versuchsdurchführung

Die Experimente wurden unter atmosphärischen Laborbedingungen bei 25 °C durchgeführt. Für die Batchversuche wurden 50 ml PP-Zentrifugenröhrchen der Greiner Bio-One GmbH verwendet. Aus bisherigen Erfahrungen konnte an diesen Gefäßen kein signifikanter Einfluss durch Wandsorption festgestellt werden (/FRI 23/, /NOS 12/). In jedes Röhrchen wurde eine dem Feststoff-Lösungs-Verhältnisses (solid-liquid-ratio, SLR) entsprechende Menge Feststoff eingewogen. Die Festlegung der verschiedenen SLR basierte auf Expertenwissen, um einen größtmöglichen Erkenntnisgewinn zu erzielen. Im Rahmen des Projekts wurden aufgrund von zeitlichen Rahmenbedingungen keine Vorversuche durchgeführt. Als Hintergrundelektrolyt wurde eine 10 mM NaCl Lösung verwendet. Die Lösung wurde mittels HCl auf pH 3.0 justiert und die gewünschte initiale Element-Konzentration (Anfangskonzentration, c_0) von Eu(III), Cs(I) oder U(VI) eingestellt. Die Anfangskonzentrationen wurden im Spurenkonzentrationsbereich in Kombination mit dem SLR und den geochemischen Randbedingungen so gewählt, um eine größtmögliche Bandbreite an hohen und geringen Sorptionswerten zu erfassen. Für Eu(III) und Cs(I) wurden zuvor Stammlösungen aus EuCl_3 und CsCl Salz angesetzt, die dem Hintergrundelektrolyten zugefügt wurde. Für U(VI) erfolgte die Zugabe zur Hintergrundlösung direkt aus einem kommerziell erworbenen Uran-Lösungs-Standard. Anschließend wurden jeweils 40 ml der entsprechenden Lösung den PP-Zentrifugenröhrchen mit bereits enthaltenem Feststoff hinzugefügt. Diese Batchproben wurden einzeln in mehreren manuellen (ca. 0.5 pH) Schritten auf die angestrebten pH-Werte mittels NaOH-Zugabe hochtitriert. Dieses Vorgehen diente der Vorbeugung potenzieller Ausfällungsprozesse. Da Desorptionsprozesse oftmals kinetisch langsamer ablaufen als Sorptionsprozesse, wurde keine Korrektur durch Zugabe von HCl durchgeführt, sollte der gewünschte pH-Wert zuvor überschritten worden sein.

Für Batchproben bei pH 8.5 war die Methode abweichend. In diesem Fall wurde die Hintergrundlösung mittels NaOH auf pH 8.5 eingestellt und es wurden, direkt anschließend, für den atmosphärischen Gleichgewichtszustand die erforderliche Mengen NaHCO_3 und Na_2CO_3 Salze zugegeben. Diese Lösung wurde den Batchproben hinzugegeben. Die Einstellung der Elementkonzentration erfolgte erst im Nachhinein durch direkte Zugabe aus entsprechenden Eu(III), Cs(I) oder U(VI) Stammlösungen zu den einzelnen Batchproben. Bei pH-Veränderungen durch die saure Stammlösungszugabe wurden diese mit NaOH ausgeglichen.

Die Äquilibrationszeit/Sorptionszeit der Batchproben betrug 24 h. Während dieser Zeit wurden die Proben im Überkopfschüttler bei 1.5 Umdrehungen pro Minute bewegt. Nach

Ablauf der Äquilibrationszeit wurde aus dem Überstand der Batchproben Lösung entnommen und durch 0.2 µm Cellulose-Acetat-Spritzenfilter filtriert. Aus bisherigen Erfahrungen konnte an diesen Filtern kein signifikanter Einfluss durch Sorption am Filtermaterial festgestellt werden. Die Lösungen wurden mit 2 % HNO₃ angesäuert und mittels ICP-MS analysiert. Sämtliche pH-Messungen erfolgten mittels Aquatroden (LL-Aquatrode plus with Pt1000, 6.0257.600, Metrohm AG).

A.5.2 KD-Werte Laborversuche GRS

In Tab. A. 19 sind die Ergebnisse der Batchsorptionsversuche von Eu(III), U(VI) und Cs(I) an ausgewählten Festphasen dieses Forschungsvorhabens aufgelistet.

Tab. A. 19 Ergebnisse (K_D-Werte [l/kg]) der Batchsorptionsversuche von Eu(III), U(VI) und Cs(I) an ausgewählten Festphasen

Feststoff	Labor-Nr.	NaCl [mmol/l]	SLR [g/L]	Element	Initialkonzentration c ₀ [µmol/L]	pH	K _d [l/kg]
Mischsediment	42392	10	5	Eu	1	4.64	17
	42393	10	5	Eu	1	4.68	20
	42394	10	5	Eu	1	5.94	4'613
	42395	10	5	Eu	1	6.07	56'244
	42396	10	5	Eu	1	6.71	186'166
	42397	10	5	Eu	1	6.72	168'902
	42450	10	5	Eu	1	8.51	479
	42451	10	5	Eu	1	8.48	466
	42398	10	5	Eu	0.1	4.85	74
	42399	10	5	Eu	0.1	4.64	76
	42400	10	5	Eu	0.1	6.44	43'692
	42401	10	5	Eu	0.1	6.41	38'572
	42402	10	5	Eu	0.1	6.93	20'927
	42403	10	5	Eu	0.1	6.85	39'475
	42452	10	5	Eu	0.1	8.45	14'094
	42453	10	5	Eu	0.1	8.47	16'900
	42404	10	5	Eu	0.01	4.67	69
	42405	10	5	Eu	0.01	4.70	74
	42406	10	5	Eu	0.01	6.21	14'804
	42407	10	5	Eu	0.01	6.40	11'555
	42408	10	5	Eu	0.01	7.08	13'231

Feststoff	Labor-Nr.	NaCl [mmol/l]	SLR [g/L]	Element	Initialkonzentration c0 [μmol/L]	pH	Kd [l/kg]
	42409	10	5	Eu	0.01	6.88	21'127
	42454	10	5	Eu	0.01	8.45	5'457
	42455	10	5	Eu	0.01	8.47	9'372
Kies	42410	10	500	Eu	1	8.59	16'401
	42411	10	500	Eu	1	8.66	21'976
	42412	10	500	Eu	1	8.85	35'729
	42413	10	500	Eu	1	8.79	19'207
	42456	10	500	Eu	1	8.48	4'320
	42457	10	500	Eu	1	8.45	7'490
	42414	10	500	Eu	0.01	8.58	1'761
	42415	10	500	Eu	0.01	8.57	1'762
	42416	10	500	Eu	0.01	8.58	1'758
	42417	10	500	Eu	0.01	8.55	1'761
	42458	10	500	Eu	0.01	8.42	1'122
	42459	10	500	Eu	0.01	8.40	1'124
LWI-Sand	42617	10	120	Eu	1	5.82	646
	42618	10	120	Eu	1	5.74	745
	42619	10	120	Eu	1	6.16	371
	42620	10	120	Eu	1	6.18	346
	42621	10	120	Eu	1	8.43	103
	42622	10	120	Eu	1	8.46	103
	42623	10	120	Eu	0.01	5.54	100
	42624	10	120	Eu	0.01	5.70	41
	42625	10	120	Eu	0.01	6.37	125
	42626	10	120	Eu	0.01	6.41	92
	42627	10	120	Eu	0.01	8.44	140
	42628	10	120	Eu	0.01	8.37	159
Ziegel	42418	10	5	Eu	1	6.12	1'724
	42419	10	5	Eu	1	5.84	627
	42420	10	5	Eu	1	6.65	10'914
	42421	10	5	Eu	1	6.57	12'761
	42460	10	5	Eu	1	8.52	677
	42461	10	5	Eu	1	8.48	712
	42422	10	5	Eu	0.01	6.06	1'116
	42423	10	5	Eu	0.01	6.01	1'330

Feststoff	Labor-Nr.	NaCl [mmol/l]	SLR [g/L]	Element	Initialkonzentration c0 [µmol/L]	pH	Kd [l/kg]
	42424	10	5	Eu	0.01	6.63	1'725
	42425	10	5	Eu	0.01	6.68	1'925
	42462	10	5	Eu	0.01	8.46	2'859
	42463	10	5	Eu	0.01	8.51	2'605
Mischsediment	42518	10	5	U	1	4.63	20
	42519	10	5	U	1	4.55	12
	42520	10	5	U	1	5.73	194
	42521	10	5	U	1	5.45	396
	42522	10	5	U	1	6.14	597
	42523	10	5	U	1	6.86	676
	42577	10	5	U	1	8.30	18
	42578	10	5	U	1	8.27	32
	42527	10	5	U	0.1	4.79	57
	42528	10	5	U	0.1	4.65	53
	42529	10	5	U	0.1	6.43	514
	42530	10	5	U	0.1	6.29	464
	42531	10	5	U	0.1	6.69	540
	42532	10	5	U	0.1	6.87	428
	42579	10	5	U	0.1	8.46	17
	42580	10	5	U	0.1	8.35	16
	42534	10	5	U	0.01	4.72	33
	42535	10	5	U	0.01	4.82	43
	42536	10	5	U	0.01	6.70	383
	42537	10	5	U	0.01	6.35	308
	42538	10	5	U	0.01	6.77	475
	42539	10	5	U	0.01	6.44	414
	42581	10	5	U	0.01	8.34	16
	42582	10	5	U	0.01	8.39	16
Kies	42524	10	500	U	1	8.02	2
	42525	10	500	U	1	8.11	3
	42540	10	500	U	0.01	8.09	3
	42541	10	500	U	0.01	8.31	3
LWI-Sand	42543	10	120	U	1	5.18	13
	42544	10	120	U	1	5.25	26
	42545	10	120	U	1	6.10	76

Feststoff	Labor-Nr.	NaCl [mmol/l]	SLR [g/L]	Element	Initialkonzentration c0 [μmol/L]	pH	Kd [l/kg]
	42546	10	120	U	1	5.68	69
	42583	10	120	U	1	8.27	1
	42584	10	120	U	1	8.33	1
	42547	10	120	U	0.01	6.14	78
	42548	10	120	U	0.01	6.23	113
	42549	10	120	U	0.01	6.15	81
	42550	10	120	U	0.01	6.16	93
	42585	10	120	U	0.01	8.36	1
	42586	10	120	U	0.01	8.32	0.4
Ziegel	42551	10	5	U	1	5.26	125
	42552	10	5	U	1	5.42	194
	42553	10	5	U	1	6.09	1'196
	42554	10	5	U	1	6.28	845
	42587	10	5	U	1	8.29	33
	42588	10	5	U	1	8.37	29
	42555	10	5	U	0.01	6.00	302
	42556	10	5	U	0.01	5.76	220
	42557	10	5	U	0.01	6.49	683
	42558	10	5	U	0.01	6.41	553
	42589	10	5	U	0.01	8.32	35
	42590	10	5	U	0.01	8.35	44
Mischsediment	42475	10	5	Cs	1	4.58	25
	42476	10	5	Cs	1	4.71	23
	42477	10	5	Cs	1	6.17	31
	42478	10	5	Cs	1	6.46	13
	42479	10	5	Cs	1	6.99	31
	42480	10	5	Cs	1	7.04	31
	42597	10	5	Cs	1	8.62	8
	42598	10	5	Cs	1	8.70	3
	42484	10	5	Cs	0.1	4.89	9
	42485	10	5	Cs	0.1	5.00	9
	42486	10	5	Cs	0.1	6.68	16
	42487	10	5	Cs	0.1	6.76	16
	42488	10	5	Cs	0.1	6.95	16
	42489	10	5	Cs	0.1	7.27	16

Feststoff	Labor-Nr.	NaCl [mmol/l]	SLR [g/L]	Element	Initialkonzentration c0 [μmol/L]	pH	Kd [l/kg]
	42599	10	5	Cs	0.1	8.68	13
	42600	10	5	Cs	0.1	8.69	6
	42491	10	5	Cs	0.01	4.77	33
	42492	10	5	Cs	0.01	4.84	60
	42493	10	5	Cs	0.01	6.50	51
	42494	10	5	Cs	0.01	6.56	55
	42495	10	5	Cs	0.01	7.71	41
	42496	10	5	Cs	0.01	7.13	55
	42601	10	5	Cs	0.01	8.69	53
	42602	10	5	Cs	0.01	8.70	68
Kies	42481	10	500	Cs	1	8.66	38
	42482	10	500	Cs	1	8.60	30
	42497	10	500	Cs	0.01	8.63	82
	42498	10	500	Cs	0.01	8.58	93
LWI-Sand	42500	10	120	Cs	1	6.01	2
	42501	10	120	Cs	1	5.55	2
	42502	10	120	Cs	1	6.49	2
	42503	10	120	Cs	1	6.48	2
	42603	10	120	Cs	1	8.65	2
	42604	10	120	Cs	1	8.59	2
	42504	10	120	Cs	0.01	5.66	7
	42505	10	120	Cs	0.01	5.74	9
	42506	10	120	Cs	0.01	7.33	8
	42507	10	120	Cs	0.01	6.42	9
	42605	10	120	Cs	0.01	8.67	11
	42606	10	120	Cs	0.01	8.67	11
Ziegel	42508	10	5	Cs	1	6.00	9
	42509	10	5	Cs	1	5.74	4
	42510	10	5	Cs	1	6.65	6
	42511	10	5	Cs	1	6.66	3
	42607	10	5	Cs	1	8.59	8
	42608	10	5	Cs	1	8.62	11
	42512	10	5	Cs	0.01	6.85	4
	42513	10	5	Cs	0.01	5.94	3
	42514	10	5	Cs	0.01	6.65	4

Feststoff	Labor-Nr.	NaCl [mmol/l]	SLR [g/L]	Element	Initialkonzentration c_0 [$\mu\text{mol/L}$]	pH	Kd [l/kg]
	42515	10	5	Cs	0.01	6.41	9
	42609	10	5	Cs	0.01	8.59	13
	42610	10	5	Cs	0.01	8.65	18

A.5.3 Ergebnisse

Die Ergebnisse aus den Batchsorptionsversuchen sind in Abb. A. 18 (und Tab. A. 19) in Form von K_D -Werten als Funktion des pH-Werts für die verschiedenen Feststoffe bei unterschiedlichen Initialkonzentrationen (c_0) von Eu(III), U(VI), Cs(I) dargestellt. Der in den Experimenten untersuchte pH-Wert-Bereich von 5.5 bis 8.5 soll eine möglichst realistische Bandbreite abdecken, der unterhalb einer Deponie in einem oberflächennahem Grundwasserleiter auftreten könnte. Zum Beispiel könnten Betonabfälle auf der Deponie den pH-Wert im Nahbereich der Deponie erhöhen. Dieses wurde in den Experimenten näherungsweise mit Werten bis zu pH 8.5 abgebildet. Die angewandte 10 mM NaCl Lösung stellt hierbei den geringen Salzgehalt des Süßwassers dar.

Der **Einfluss des pH-Werts**, der Initialkonzentrationen von Eu(III), U(VI), Cs(I) und des Feststoffs auf den K_D -Wert ist in Abb. A. 18 dargestellt. Für Eu(III) und U(VI) wurde unabhängig des Feststoffs zwischen pH 4.5 bis pH 7 eine steigende Sorption festgestellt. Bei pH 8.5 wurden geringere K_D -Werte gemessen, welche durch die Lösungsspeziation von Eu(III) und U(VI) zu erklären sind. Für Eu(III) und U(VI) dominieren bei hohen pH Werten (wie pH 8.5) Carbonatspezies wie z. B. EuCO_3^+ , $\text{Eu}(\text{CO}_3)_2^-$, $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$, $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ in Lösung, die eine verminderte Sorptionsaffinität gegenüber den Feststoffen aufweisen. Ähnliche Trends konnten für diese Elemente bereits in /NOS 18/ beobachtet werden. Für Cs wurde dieses Verhalten nicht beobachtet. Dies liegt neben Element-Feststoff spezifischen Sorptionsmechanismen u.a. an der einfach positiven Ladung bei Cs(I) über den betrachteten pH-Bereich. Ein vergleichbar ausgeglichenes Sorptionsverhalten von Cs Verhalten konnte auch in /NOS 12/, /NOS 18/ und /BRA 00/ beobachtet werden.

Die pH-Werte aller Batchproben mit Kies sind ungeachtet des initial eingestellten pH-Werts auf ca. pH 8.5 hochgedriftet. Durch einen Säuretest wurde offenkundig, dass im Kies Carbonatphasen (z. B. Calcit) vorhanden waren, die den pH-Wert bestimmten.

Im Gesamtbild ist festzuhalten, dass wie erwartet und in A.5 bereits andiskutiert die Sorption in Abhängigkeit des pH wie folgt beschrieben werden kann $\text{Eu(III)} > \text{U(VI)} > \text{Cs(I)}$. Der

Einfluss von variierenden Initialkonzentrationen (c_0) unter identischen geochemischen Randbedingungen sollte keinen signifikanten Effekt haben und zu demselben K_D -Wert führen, sofern man sich im Bereich der linearen Konzentrationsabhängigkeit befindet und damit von einer Untersättigung der an der Feststoffoberfläche vorhandenen Sorptionsplätze auszugehen ist. Bei vergleichbaren pH und gleichem Feststoff ist insbesondere bei Eu(III) und Cs(I) eine deutliche Schwankungsbreite der K_D -Werte über eine Größenordnung beobachtet worden, wobei kein einheitlicher Trend als Funktion der Initialkonzentration aufzeigt werden konnte (Abb. A. 18, Tab. A. 19). Diese potentielle Abhängigkeit sollte mittels Sorptionsisothermen weiter untersucht und ggf. untermauert oder widerlegt werden. Es ist zu vermuten, dass die insbesondere beim Mischsediment hohen K_D -Wert Unterschiede bei Eu(III) zwischen pH 6 und 7 im Zusammenhang mit dem gewählten SLR stehen und die Ausgangskonzentrationen in den Experimenten fast vollständig sorbiert wurde. Hier sollte in zukünftigen Experimenten ein geringeres SLR getestet werden. Bei Cs wurden für den LWI-Sand (und Kies) über den untersuchten pH Bereich systematisch höhere K_D -Werte bei geringerer Ausgangskonzentration (c_0) beobachtet (Abb. A. 18, Tab. A. 19). Um detaillierte Rückschlüsse aus diesen Beobachtungen zu ziehen, wären ebenfalls Sorptionsisothermen notwendig.

Beim Ziegel wurden für Cs keine signifikanten Unterschiede oder Trends festgestellt. Die Experimente mit Uran ergaben die geringsten K_D -Wert-Schwankungen in Abhängigkeit der Ausgangskonzentration (c_0).

Der Einfluss der Initialkonzentration, c_0 , war bei Eu(III) am ausgeprägtesten, gefolgt von Cs(I) und U(VI), d.h. $\text{Eu(III)} > \text{Cs(I)} > \text{U(VI)}$.

Bezüglich des **Einflusses des Feststoffes** konnte für Eu eine zu erwartende Feststoffabhängigkeiten beobachtet werden. Das Mischsediment mit Quarz, K-Feldspat und Muskovit erreichte hier die höchsten K_D -Werte, gefolgt vom Ziegel und zuletzt LWI-Sand. Der Kies zeigte ähnlich hohe K_D -Werte wie das Mischsediment und der Ziegel, was auf den durch den Säuretest vermuteten Gehalt an z.B. Calcit zurückzuführen sein könnte. Um diese Vermutung zu untermauern sind detailliert Feststoffcharakterisierungen sowie weitere Sorptionsexperimente notwendig. Für U(VI) und Cs(I) waren die Trends nicht eindeutig, wobei auch bei diesen Elementen das Mischsediment häufig die höheren K_D -Werte aufwies. Um belastbare Aussagen bzgl. der Feststoffabhängigkeit jenseits von generellen Trends machen zu können, sind detaillierte Feststoffanalysen notwendig.

Die hier in den Experimenten erhobenen K_D -Werte können zukünftig für vergleichbare Element-Feststoff Systeme im Grundwassersystem im Untergrund einer Deponie in

Transportrechnungen Verwendung finden. Für belastbare Aussagen bzgl. des Anwendungsbereiches der erhobenen K_D -Werte wie auch K_D -Werten aus der Literatur machen zu können, werden weitere konzeptionelle wie auch experimentelle Herangehensweisen als sinnvoll erachtet.

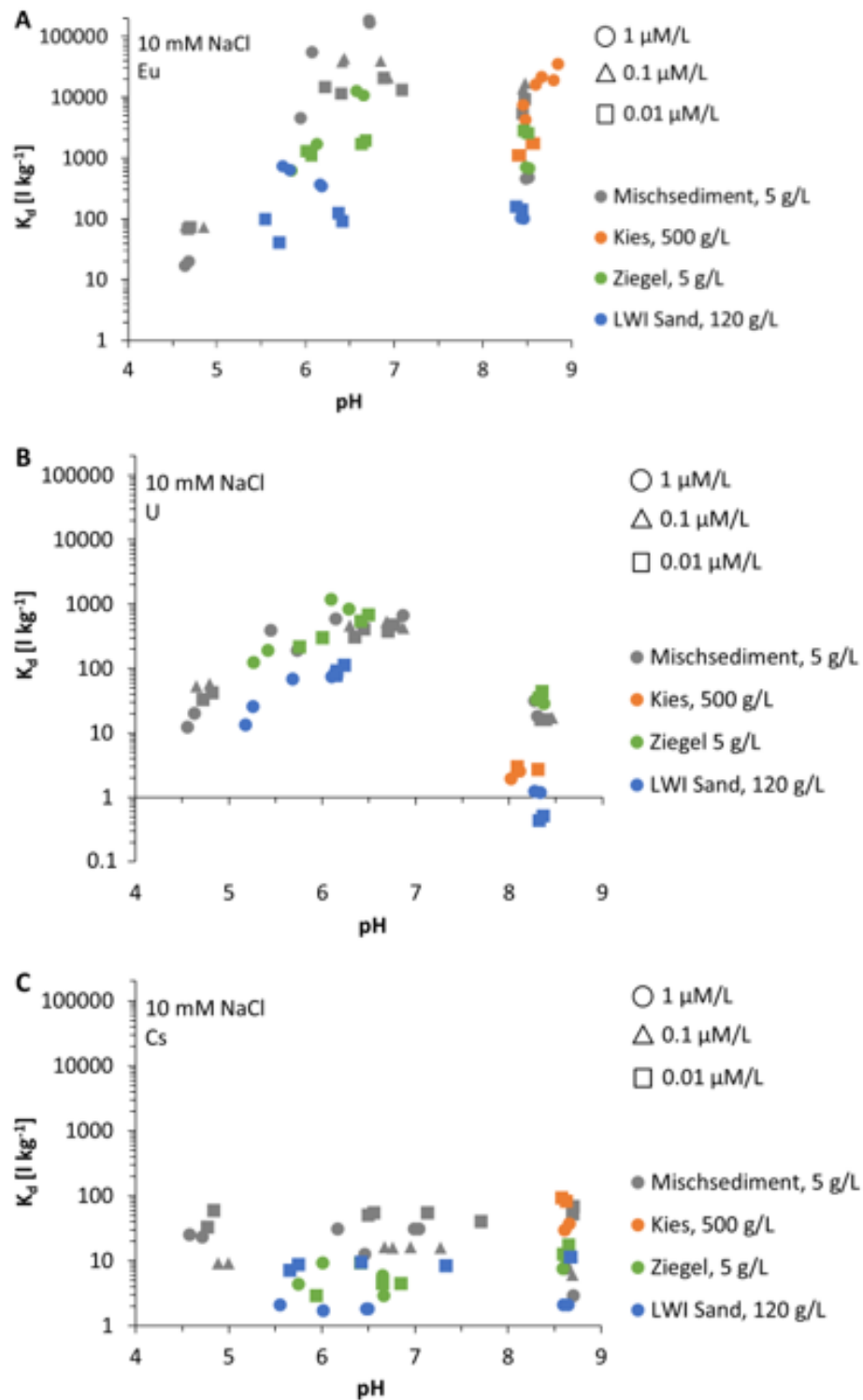


Abb. A. 18 Ergebnisse der Batchsorptionsversuche von A) Eu, B) U und C) Cs an ausgewählten Festphasen

Unterschiedliche Symbolformen indizieren unterschiedliche Initialkonzentrationen (c_0), unterschiedliche Farben repräsentieren den jeweiligen Feststoff unabhängig der Form.

A.6 Implizites Expertenwissen am Beispiel von Sorptionsparametern - Methodischer Ansatz zur Bestimmung von Verteilungen ungewisser Parameter aus implizitem Expertenwissen am Beispiel von Sorptionsparametern

Vorbemerkung zur Sprachverwendung im Rahmen der Anwendung der Methodik.

Die geschlechtliche Zuordnung von Personen spielt im Zusammenhang mit der hier dargestellten Untersuchung keine Rolle. Geschlechterdifferenzierende Formulierungen werden deshalb nicht verwendet. Sammelbezeichnungen im Plural („Mitarbeiter“, „Experten“) sind generell generisch zu verstehen und schließen alle Geschlechter gleichermaßen ein, auch wenn sie sich aus grammatischen Maskulina ableiten. Besonders vor dem Hintergrund der hier angestrebten Anonymisierung wird aber auch ein generischer Singular benötigt, der aufgrund der Strukturen der deutschen Sprache nicht ohne grammatisches Geschlecht auskommt. Es wird ausdrücklich betont, dass Formulierungen wie „die Person“, „der Experte“, „ein Protokollant“ usw. einschließlich der sich darauf beziehenden Pronomina keine geschlechtliche Festlegung beinhalten. Die zur Anonymisierung verwendeten Pseudonyme wurden nach dem Zufallsprinzip verteilt und stehen in keiner Beziehung zum natürlichen Geschlecht der jeweiligen Person, dies gilt auch für Bezugnahmen auf diese Pseudonyme mittels Pronomina.

A.6.1 Einleitung

In die Berechnung der Strahlenexpositionen bei der Freigabe radioaktiver Stoffe fließen zahlreiche Parameter ein, die nicht mit 100 %iger Zuverlässigkeit bestimmbar sind, Variationen unterliegen können oder aus anderen Gründen mit Ungewissheiten behaftet sind. Um diesem Umstand gerecht zu werden, können probabilistische Berechnungen durchgeführt werden. Dazu wird mittels eines vorgegebenen mathematischen Verfahrens eine größere Stichprobe von Datensätzen aus dem gesamten Parameterraum gezogen – nach dem Zufallsprinzip oder einem anderen Verfahren – und das Modell nacheinander mit allen diesen Datensätzen durchgerechnet. Aus der Verteilung der Einzelergebnisse können dann Schlussfolgerungen über die Freigabegrenzen bzw. deren Einhaltung abgeleitet werden.

Weiterhin ist es möglich, die Empfindlichkeit eines Modells gegenüber den einzelnen Parametern zu beurteilen (Sensitivitätsanalyse). Die probabilistische Analyse spielt eine zentrale Rolle bei der Bewertung und Kommunikation von Ungewissheiten zwischen den verschiedenen Stakeholdern und wird auch in anderen Bereichen zur Berechnung von Strahlenexpositionen gefordert, z. B. in der „Berechnungsgrundlage zur Dosisabschätzung“ des Bundesamtes für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung aus dem Jahr 2022.

Generell werden zwei Arten von Ungewissheiten unterschieden: Aleatorische Ungewissheiten basieren auf Zufallseinflüssen, die im betrachteten Maßstab nicht auflösbar sind. Ein Parameter, der einer aleatorischen Ungewissheit unterliegt, kann also bei unterschiedlichen Realisationen, die mit demselben Modell unter denselben Bedingungen darzustellen sind, tatsächlich verschiedene Werte haben. Eine solche Ungewissheit ist, wenigstens im Prinzip, objektiv zu quantifizieren. Andererseits ist es möglich, dass zwar ein bestimmter fester Wert gilt, dieser jedoch nicht genau bekannt ist. Solche Ungewissheiten werden als epistemisch bezeichnet. Sie können nur durch subjektive Wahrscheinlichkeiten quantifiziert werden, also durch Wahrscheinlichkeiten ausgedrückte persönliche Einschätzungen von Experten (bayesscher Wahrscheinlichkeitsbegriff). In der Praxis enthalten viele Ungewissheiten aleatorische und epistemische Bestandteile.

Um sinnvolle Ergebnisse aus einer probabilistischen Analyse zu erhalten, müssen der Stichprobenziehung begründete Verteilungen für die Modellparameter zugrunde gelegt werden. Das betrifft gleichermaßen aleatorische und epistemische Ungewissheiten. Bei den ersteren soll die Verteilung so gut wie mögliche die tatsächlichen Verhältnisse abbilden. Bei epistemischen Ungewissheiten sollte die Verteilung einen sinnvollen Kompromiss der subjektiven Wahrscheinlichkeitseinschätzungen mehrerer Experten darstellen.

Statistische Verteilungen werden in Form von Verteilungsdichtefunktionen (probability density function, pdf) quantifiziert. Allgemein ist die Verteilungsdichte eine multidimensionale skalare Funktion auf dem gesamten Parameterraum, deren Integral über einen bestimmten Teilbereich die Wahrscheinlichkeit angibt, dass die Werte der Parameter in diesem Bereich liegen. Somit ist das Integral der pdf über den gesamten möglichen Wertebereich immer gleich eins. Obwohl die Parameter bei realen Modellen häufig miteinander verknüpft sind, geht man bei probabilistischen Analysen, auch aus Gründen der mathematischen Eindeutigkeit, meist von unabhängigen, eindimensionalen Verteilungen aus und berücksichtigt Kopplungen ggf. in anderer Weise.

Der Fall, dass für einen Parameter eine gesicherte Datenbasis vorliegt, aus der sich eine Verteilungsfunktion ableiten lässt, die genau die zu modellierende Situation repräsentiert, kommt jedoch selten vor. Meist reicht die verfügbare Datenlage dafür nicht aus. Um trotzdem probabilistische Analysen durchführen und daraus gut begründete statistische Aussagen ableiten zu können, muss auf implizites, erfahrungsbasiertes Expertenwissen zurückgegriffen werden. Solches Wissen ist durchaus valide, liegt aber generell nicht in einer konkret fassbaren Form vor. Um es zu quantifizieren, sind gezielte Expertenbefragungen notwendig. Ein befragter Experte wird dabei versuchen, seine persönliche

Erfahrung auf die angenommenen Verhältnisse im zu modellierenden System zu übertragen und eine Schätzung abzugeben. Solche Schätzungen hängen nicht nur stark von der Erfahrung des Experten ab, sondern werden auch durch psychologische Faktoren maßgeblich beeinflusst, welche es zu erkennen und zu minimieren oder kompensieren gilt. Derartige Phänomene sind etwa Ankerbildung (Beeinflussbarkeit durch die Fragestellung), Verfügbarkeit (Überschätzung geringer Wahrscheinlichkeiten von zeitnah beobachteten Ereignissen/Werten) und Übervertrauen in die eigene Expertise.

Zur Quantifizierung unsicheren Expertenwissens existieren wissenschaftlich fundierte Ansätze. Hier sind insbesondere Arbeiten der Universität Sheffield zu nennen /OHA 06/, /GOS 18/. Ein solches Vorgehen wird im Rahmen des hier beschriebenen Arbeitspakets am Beispiel von bestimmten Sorptionsparametern (K_D -Werte) getestet und demonstriert. Das Beispiel wurde gewählt, weil für diese K_D -Werte keine konkrete Datenbasis vorliegt und K_D -Werte generell über mehrere Größenordnungen streuen können, sodass hier mit durchaus unterschiedlichen Einschätzungen verschiedener Experten zu rechnen war. Weiterhin ist geplant, diese K_D -Werte im Rahmen einer Laboruntersuchung zu bestimmen, sodass später ein Vergleich der ermittelten Verteilung mit den tatsächlichen Messdaten möglich wird.

Das Vorgehen orientiert sich an der SHELF-Methode der Universität Sheffield /GOS 18/. SHELF ist ein Paket von Anleitungen zur systematischen Durchführung von Expertenbefragungen, welches auch eine Software für die Auswertung beinhaltet. Eine allen Ansprüchen genügende Durchführung des SHELF-Prozesses ist jedoch zeit- und kostenintensiv, da hierzu Fachexperten eingebunden werden müssen, deren nicht unerheblicher Arbeitsaufwand zu finanzieren ist. Im Rahmen der hier vorgestellten Demonstrationsübung war dies nicht möglich. Stattdessen wurde auf die im Fachbereich Endlagerung der GRS vorhandene Expertise zum Sorptionsverhalten von Radionukliden an verschiedenen Bodentypen zurückgegriffen.

Es wurden insgesamt fünf Experten identifiziert, von denen unabhängige, qualifizierte Aussagen über diesen Parameter zu erwarten waren. Die Experten erhielten einen speziell gestalteten Fragebogen, wobei Einschätzungen zum K_D -Wert unter vier verschiedenen Sätzen von Randbedingungen (Bodentyp, pH-Wert, Element) abzugeben waren. Darüber hinaus wurde der Fragebogen zwei weiteren Experten vorgelegt, die an der messtechnischen Bestimmung der gesuchten Werte im Labor arbeiten und die Randbedingungen definiert haben. Nach Auswertung der Antworten wurden die Experten im Rahmen eines Online-Workshops zusammengebracht, dessen Ziel es war, einen Konsens über die anzunehmenden Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen zu erreichen.

Aus Zeit- und Budgetgründen wurde bewusst darauf verzichtet, die Experten zu einer tiefergehenden Einarbeitung in die spezielle Thematik aufzufordern, was für eine qualifizierte Bewertung eigentlich erforderlich wäre. Den Experten konnte nur wenig Zeit zur konkreten Vorbereitung eingeräumt werden, wodurch es letztlich zu inhomogenen Bewertungen kam. Auch konnte beim Workshop nur eine der vier Situationen behandelt werden.

Das primäre Ziel der hier dargestellten Untersuchung war, die praktische Anwendung der SHELF-Methodik zur Expertenbefragung an einem realen Beispiel zu testen und daraus zu lernen, wie solche Befragungen sinnvoll durchzuführen sind. Aufgrund des begrenzten verfügbaren Budgets konnte das Verfahren nur einmalig durchgeführt werden, eine Revision einmal getroffener Vorgehensentscheidungen oder eine Wiederholung einzelner Schritte war nicht möglich. Insofern kann nicht der Anspruch erhoben werden, dass die ermittelte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion das im Expertenkreis vorhandene Wissen tatsächlich in optimaler Weise repräsentiert.

A.6.2 Die SHELF-Methodik

Die SHELF-Methodik ist ausführlich beschrieben in den zum Paket gehörigen Unterlagen (Download unter <https://shelf.sites.sheffield.ac.uk/download-shelf>). Im Folgenden werden nur einige wesentliche Elemente kurz dargestellt, die bei der vorliegenden Untersuchung zum Einsatz kamen. Aufgrund des begrenzten Budgets kann diese den Ansprüchen an einen SHELF-Prozess nur in Teilen genügen.

Der Prozess beginnt mit der Festlegung des Befragungsgegenstands (Quantity of Interest, QoI). Anschließend ist das Befragungsteam zusammenzustellen, welches aus mehreren Personen mit jeweils spezieller Qualifikation und Aufgabe bestehen sollte. Im nächsten Schritt sind geeignete Experten zu identifizieren und einzuladen.

Zum SHELF-Prozess gehört prinzipiell eine gründliche Vorbereitung der Experten, wobei ihnen auch eine Sammlung von relevanten Unterlagen (Evidence Dossier) zur Verfügung gestellt werden sollte. Weiterhin sollten die Experten eine spezielle Schulung erhalten, wie probabilistische Aussagen zu treffen sind (Expert Briefing).

Die eigentliche Befragung findet in zwei Schritten statt: individuelle Befragung und Gruppenbefragung. Es werden mehrere Befragungsmethoden empfohlen, die für unterschiedliche Befragungsgegenstände unterschiedlich geeignet sind. Generell sollen die

Experten zunächst ihre persönlichen Plausibilitätsgrenzen festlegen. Anschließend können etwa bestimmte weitere persönliche Quantile definiert werden (Median, Quartile, Terzile) oder eine Anzahl von Spielmünzen (Probs) auf vorab festgelegte Intervalle verteilt werden (Roulette-Methode). Eine Variation der Quantil-Methode besteht darin, die Experten um eine persönliche Einschätzung der Wahrscheinlichkeit zu bitten, dass der fragliche Parameter unterhalb oder oberhalb eines vorgegebenen Wertes liegt.

Nachdem jeder Experte sich zunächst individuell und unbeeinflusst eine Meinung gebildet hat, werden alle Experten im Rahmen eines Gruppengesprächs (SHELF-Workshop) zusammengebracht, bei dem sie Argumente austauschen und ihre Sichtweisen einander annähern können. Es ist nicht das Ziel dieses Workshops, am Ende Einigkeit zu erreichen, sondern den besten Kompromiss zwischen den Meinungen zu finden. Dabei hilft die Vorstellung einer virtuellen sachverständigen Person (Rational Impartial Observer, RIO), die das Gespräch unparteiisch verfolgt und am Ende die Verteilung festlegt. Die Experten sollen sich nicht über die Verteilung einig werden, sondern darüber, welche Verteilung der RIO aufgrund der Diskussion festlegen würde. Der SHELF-Workshop erfordert eine sorgfältige Moderation durch eine erfahrene Person, um eine zielgerichtete und ausgewogene Diskussion sicherzustellen.

Zur Ermittlung einer Verteilungsdichte auf Basis einiger weniger persönlicher Wahrscheinlichkeitswerte mehrerer Experten stellt das SHELF-Paket eine Software zur Verfügung, welche verschiedene Verteilungstypen vorschlägt und jeweils so parametrisiert, dass sie die Gesamtsituation optimal wiedergeben.

A.6.3 Einschränkungen

Ziel der hier beschriebenen Übung war, die Methodik anhand eines Beispiels praktisch zu testen. Aufgrund der Begrenztheit der Mittel sowie der zur Verfügung stehenden Zeit mussten einige Einschränkungen gegenüber einem korrekten SHELF-Prozess hingenommen werden:

Expertenauswahl: Es konnte nur auf Experten aus der GRS zurückgegriffen werden, wobei ausschließlich der Fachbereich Endlagerung berücksichtigt wurde. Die ursprünglich vorgesehene Einbeziehung eines externen Experten erwies sich aus Termingründen als nicht möglich.

Vorbereitung: Den Experten konnte nur sehr wenig Zeit zur Vorbereitung eingeräumt werden. Um einem inhomogenen Vorbereitungsstand entgegenzuwirken, wurden die Experten sogar explizit aufgefordert, auf eine tiefergehende Vorbereitung zu verzichten und die Fragen weitgehend spontan zu beantworten. Dementsprechend wurde keine Quellensammlung (Evidence Dossier) zusammengestellt.

Moderator: Als Befragungsleiter und Moderator des SHELF-Workshops fungierte der Initiator und Leiter des Arbeitspakets. Hierbei sollten vor allem Erfahrungen gesammelt werden. Auf solche Erfahrungen konnte die Person ebenso wenig zurückgreifen wie auf ein spezielles Training als Befragungsleiter.

Workshop: Der Expertenworkshop konnte nur in Form eines 90-minütigen Online-Gesprächs durchgeführt werden.

A.6.4 Aufgabenstellung

Zunächst wurde der Befragungsgegenstand grob festgelegt: Es sollte das Sorptionsverhalten bestimmten Element an mehr oder weniger genau definierten Bodenmaterialien bei bestimmten pH-Bedingungen unter Zugrundelegung des K_D -Konzepts eingeschätzt werden. Anhand dieser stark vereinfachten Aufgabenstellung wurden mögliche Experten um eine Selbsteinschätzung gebeten.

In der Folge wurde die Aufgabenstellung präzisiert, wobei auf sinnvolle Festlegung der geochemischen Bedingungen sowie gute Bestimmbarkeit der K_D -Werte im geowissenschaftlichen Labor der GRS Wert gelegt wurde. Die labortechnische Bestimmung der K_D -Werte ist ebenfalls Teil des Gesamtprojekts und war zugleich als Test der Ergebnisse der Expertenbefragung vorgesehen.

Für die Expertenbefragung wurden die vier Randbedingungs-Situationen nach Tab. A. 20 ausgewählt. Da K_D -Werte in der Literatur teilweise unterschiedlich definiert sind und in unterschiedlichen Einheiten gemessen werden, wurde vorgegeben, dass die Werte in der Einheit l/kg zu bestimmen sind.

Tab. A. 20 Randbedingungen für die für die zu bestimmenden K_D -Werte

Material	Element	pH	Ionenstärke/ Lösung	Sonstiges
Fein-/Mittelkies (nicht näher charakterisiert)	Eu	5.5	10 mM NaCl	erdatmo- sphärische Bedingun- gen, 25° C
Gemischtes fein- bis grobsandiges Sediment, artifiziell zusammengesetzt aus folgenden Einzelkomponenten: 80 % Quarz, 10 % K-Feldspat, 10 % Muskovit	Eu	5.5		
	U(VI)	5.5		
	U(VI)	8.5		

A.6.5 Befragungsteam

Das Befragungsteam wurde für die Übung auf drei Personen reduziert: Befragungsleiter, Fachberater und Protokollant. Der Befragungsleiter bereitete die Befragung vor, koordinierte und leitete sie und führte die anschließende Auswertung durch. Als Fachberater fungierte die federführende Person des Laborteams, welches die Messungen plant und durchführt. Eine weitere Person des Laborteams wurde als fachlicher Beobachter und Protokollant eingebunden.

A.6.6 Selbsteinschätzung und Auswahl der Experten

Da Sorption bei der Ausbreitung von Schadstoffen in der Geosphäre eine wichtige Rolle spielt, existiert im Fachbereich Endlagerung der GRS einige Expertise auf diesem Gebiet, jedoch verfügen die verschiedenen Mitarbeiter über sehr unterschiedliche Ausbildungen und Erfahrungen. Als erster Schritt wurde deshalb ein Fragebogen zur Selbsteinschätzung erarbeitet. Dieser wurde an einen Kreis von Personen verteilt, die aufgrund ihrer Ausbildung und ihres Tätigkeitsbereichs für potenziell geeignet gehalten wurden, als Experten an der Befragung teilzunehmen¹. Dieser Personenkreis wurde mit 17 Personen (ca. ein Drittel der Mitarbeiter des Fachbereichs) relativ groß angesetzt, um einerseits die vorhandene Expertise möglichst vollständig zu erfassen und andererseits den Umgang mit Selbsteinschätzungen auf einer möglichst breiten Basis zu üben. Deshalb wurden die Adressaten aufgefordert, den Fragebogen auch dann zu beantworten, wenn sie sich selbst nicht als hinreichend qualifiziert ansahen oder an der eigentlichen Expertenbefragung nicht teilnehmen wollten. Hierfür war eine Ausstiegsoption vorgesehen.

¹ Die unmittelbar an den geplanten Laboruntersuchungen beteiligten Mitarbeiter wurden dabei nicht berücksichtigt. Ihnen wurde der Expertenfragebogen ebenfalls zur Beantwortung vorgelegt, jedoch nicht in die Auswertung einbezogen.

Weiterhin sollte der Fragebogen schnell bearbeitbar sein (ca. 5 Minuten) und Fragen von eher objektivem sowie eher subjektivem Charakter aufweisen, um nicht nur Rückschlüsse auf die Fachkompetenz nach eigener Einschätzung, sondern auch auf die persönliche Auslegung dieser Einschätzung zu erlauben.

Der Fragebogen ist im Anhang wiedergegeben. Er besteht aus zehn kurzen Fragen, von denen die ersten beiden zur Identifikation der Person und zur Feststellung ihrer Ausbildung dienen. Die Fragen 3 bis 9 sind durch Eintragung eines Zahlenwerts von 0 bis 10 zu beantworten; darunter haben insbesondere die Fragen 6 bis 8 eher objektiven Charakter, wobei allerdings die Auslegung von Indefinita wie „intensiv“ oder „sehr viel“ bewusst den Beantwortern überlassen wurde.

Es ist festzuhalten, dass den Personen, denen der Fragebogen vorgelegt wurde, über die darin enthaltene Erläuterung hinaus keine weiteren Informationen zum Befragungsgegenstand gegeben wurden

Der Fragebogen wurde per E-Mail fachbereichsintern an 17 Personen verteilt, wobei um zügige Bearbeitung gebeten wurde. Acht antworteten innerhalb einiger Tage, an die übrigen wurde nach ca. einer Woche eine Erinnerungsmail geschickt. Daraufhin gingen sieben weitere Antworten ein, davon eine nach telefonischer Rückfrage, was genau erwartet werde. Eine Person teilte telefonisch mit, dass sie sich nicht berufen fühle und keinen Sinn darin sehe, den Fragebogen auszufüllen. Eine Person reagierte überhaupt nicht.

Zur Auswertung wurden die Antworten anonymisiert, den potenziellen Experten wurden Pseudonyme zugewiesen. In Abb. A. 19 sind die Antworten dargestellt, wobei die persönlichen Daten ausgeblendet wurden.

Pseudonym	Birte	Charly	Doris	Erwin	Frauke	Gunther	Hilde	Igor	Julia	Konrad	Lise	Manni	Nora	Ortolf	Petra	Quintus	Rita
Mein GRS-Kürzel:																	
Meine Ausbildung (Fach/Fächer, Abschluss):																	
Ich kenne mich mit Sorptionschemie aus:	3	2	4	2	2	8	4	7	10		8	5	2		5	8	1
Ich verstehe das K_d -Konzept:	7	2	6	0	8	8	7	10	10		10	5	2		8	7	1
Ich verstehe, wie K_d -Werte von physikalischen, chemischen und geochemischen Bedingungen abhängen:	5	2	9	0	4	8	6	7	10		8	5	2		6	6	1
Ich habe mich in mehreren Projekten intensiv mit Sorptionsparametern beschäftigt:	3	0	1	0	7	5	0	10	10		8	2	1		8	2	0
Ich habe sehr viel Fachliteratur zum Thema Sorption gelesen:	1	0	2	0	6	5	1	8	10		8	0	0		3	3	0
Ich habe mich auf nationaler und internationaler Ebene zum Thema Sorption intensiv mit Fachleuten ausgetauscht:	0	0	1	0	2	6	0	9	7		7	0	0		5	1	0
Ich traue mir eine fachlich fundierte und zuverlässige Aussage über K_d -Werte unter den oben genannten Bedingungen zu:	1	0	2	0	5	6	1	7	10		8	5	0		5	3	0
Bereitschaft zur Teilnahme	ja	ja	ja	nein	ja	ja	ja	ja	ja	nein	ja	ja	nein		nein	ja	nein
Antwort (grün = kurzfristig, gelb = nach Erinnerung, rot = keine Antwort)	grün	grün	grün	grün	grün	grün	grün	grün	grün	rot. Abs.	grün	grün	rot. Reakt.		rot. Rückf.	grün	grün

Abb. A. 19 Anonymisierte Antworten auf den Selbsteinschätzungs-Fragebogen

Die grün hinterlegten Einschätzungen sind eher subjektiver, die rot hinterlegten eher objektiver Natur, die gelb hinterlegte Gesamteinschätzung soll die Antworten hinsichtlich der Befragung aggregieren.

Die Antworten zeigen einige Auffälligkeiten. So bewertet etwa *Doris* ihr Verständnis des K_D -Konzepts mit 6, aber ihr Verständnis, wie die K_D -Werte von verschiedenen Bedingungen abhängen, mit 9. Dabei stellt sich die Frage, wie jemand, der das – relativ einfache – Konzept im Ganzen nur mittelmäßig gut versteht, ein sehr gutes Verständnis von den Details haben kann. *Erwin* behauptet, immerhin ein Grundverständnis von Sorptionschemie zu haben (Bewertung 2), aber das K_D -Konzept überhaupt nicht zu verstehen (Bewertung 0). Da das K_D -Konzept die einfachste Beschreibung der Sorption darstellt, ist dies schwer nachvollziehbar. Ein ähnliches Missverhältnis, allerdings auf höherem Niveau, liegt bei *Quintus* vor.

Einige Antworten lassen deutlich erkennen, dass sich die jeweiligen Mitarbeiter nicht als qualifiziert sehen. Das gilt insbesondere für die vier Personen, die Frage 9 mit 0 beantwortet haben, obwohl eine davon (*Charly*) die Teilnahme an der Befragung nicht abgelehnt hat. Ansonsten scheinen niedrige Selbsteinstufungen bei Frage 9 nicht unbedingt auf unzureichende Qualifikation, sondern eher auf Zurückhaltung hinzuweisen. So würden die Verständnis-Einstufungen (grüne Felder) von *Birte*, *Doris*, *Hilde* und *Quintus* durchaus höhere Qualifikationswerte erwarten lassen als angegeben.

Möglicherweise ist die Einstufungs-Skala von 0 bis 10 auch unterschiedlich verstanden worden. *Julia* etwa hat fast ausschließlich den Maximalwert 10 vergeben. Das bedeutet sicher nicht, dass sie ihre eigene Expertise als nicht mehr steigerungsfähig ansieht, sondern dass sie schlicht alle Fragen (bis auf eine) mit einem eindeutigen „Ja“ beantwortet hat. Andere mögen das eher quantitativ interpretiert und sich deshalb sehr viel zurückhaltender eingestuft haben.

Insgesamt sieben Personen haben sich bei Frage 9 mindestens mit 5 eingestuft, eine davon (*Petra*) stand für die Befragung jedoch nicht zur Verfügung. Die verbleibenden sechs – *Frauke*, *Gunther*, *Igor*, *Julia*, *Lise* und *Manni* – wurden für die eigentliche Expertenbefragung ausgewählt. Eine davon (*Frauke*) zog sich jedoch nach Vorlage des Befragungsbogens zurück und gab an, sich wohl doch falsch eingeschätzt zu haben. Somit standen fünf Experten für die Befragung zur Verfügung.

A.6.7 Individuelle Expertenbefragung

Für die individuelle Befragung wurde ein weiterer Fragebogen erarbeitet (siehe Anhang A.6.14). Dabei wurde versucht, den SHELF-Empfehlungen soweit wie möglich gerecht zu werden. Als Anhaltspunkt für den Zeitaufwand zur Bearbeitung des Fragebogens

wurden zwei Stunden empfohlen, davon für die Vorbereitung nicht mehr als ca. 60 Minuten. Im Interesse einer homogenen Qualität der Antworten wurden die Experten explizit aufgefordert, auf eine gezielte Einarbeitung zu verzichten und ihre Aussagen aufgrund ihres vorhandenen Wissenshintergrundes zu treffen, der lediglich kurz „reaktiviert“ werden sollte. Dies entspricht sicherlich nicht den Anforderungen an eine zuverlässige und belastbare Expertenbefragung, war jedoch im Rahmen der kleinen Übung nicht anders umsetzbar.

Entsprechend der SHELF-Methodik wurden die Experten zunächst um die Festlegung ihrer persönlichen Plausibilitätsgrenzen L (lower) und U (upper) gebeten. Diese Grenzen sollen dasjenige Intervall definieren, in dem der fragliche Wert nach der persönlichen Einschätzung des Experten mit an Sicherheit grenzender Wahrscheinlichkeit liegt, oder umgekehrt ausgedrückt: Es soll dem Experten extrem unwahrscheinlich oder sogar unglaublich erscheinen, dass der Wert bei einer Messung unterhalb von L oder oberhalb von U gefunden wird.

Im nächsten Schritt war der persönliche Median M festzulegen, also derjenige Wert des Parameters, der das mögliche Werteintervall in zwei Hälften teilt, die dem Experten gleich wahrscheinlich erscheinen. Eine solche Einteilung wird häufig als nicht einfach empfunden. Die SHELF-Anleitung empfiehlt deshalb zur Überprüfung ein Gedankenexperiment, bei dem der Experte einen (virtuellen) Geldbetrag gewinnt, wenn er korrekt tippt, ob der tatsächliche Wert unterhalb oder oberhalb von M liegt; falls er dabei aber eine Präferenz für ein Teilintervall empfindet, soll er M modifizieren. In dieser Form scheint das Gedankenspiel allerdings nicht optimal, da der Experte dabei die Möglichkeit hätte, seine Gewinnchancen zulasten wissenschaftlicher Ehrlichkeit zu erhöhen. Deshalb wurde den Experten ein gedankliches Wettspiel mit einer zweiten Person nahegelegt, bei dem jeder ein Teilintervall erhält und derjenige gewinnt, in dessen Teilintervall der Wert tatsächlich liegt. Der Experte bestimmt den Teilungspunkt, die zweite Person darf sich ein Teilintervall aussuchen, wobei vorausgesetzt wird, dass sie dabei auf denselben Wissensstand zurückgreift, den der Experte besitzt. Bei diesem Spiel liegt der hinsichtlich der erwarteten Gewinnchance optimale Teilungspunkt genau beim persönlichen Median.

Für den nächsten Schritt sieht die SHELF-Methodik verschiedene Möglichkeiten vor. Bei der sogenannten Roulette-Methode verteilt der Experte eine Anzahl von virtuellen Spielmünzen auf mehrere Teilintervalle der QoI entsprechend seinen persönlichen Wahrscheinlichkeiten. Dieses Verfahren scheint jedoch für Kd-Werte ungeeignet, da sich die Ungewissheitsbereiche über mehrere Größenordnungen erstrecken und somit ein

geeignetes Intervallraster kaum festzulegen wäre. Außerdem würde ein vom Befragungsteam vorgegebenes Raster unvermeidbar dessen Vorstellungen vom wahrscheinlichsten Wertebereich widerspiegeln und damit eine Beeinflussung der Experten bedeuten (Ankerbildung, engl.: anchoring). Aus diesem Grund wurde die Quartil-Methode gewählt. Dabei sollen die Experten die Bereiche unterhalb und oberhalb ihres persönlichen Medians jeweils noch einmal in der Mitte – bezogen auf die Wahrscheinlichkeit – teilen, sodass vier Bereiche entstehen, die bezüglich des gesuchten Wertes als gleich wahrscheinlich angesehen werden. Die persönlichen Werte für das untere und das obere Quartil werden als Q_1 und Q_3 bezeichnet. Zur Überprüfung ihrer Bewertung wurde den Experten eine erweiterte Version des obigen gedanklichen Wettspiels empfohlen, bei der es der Experte mit drei Gegenspielern zu tun hat. Aus den vier Teilintervallen dürfen sich diese nacheinander eins aussuchen, der Experte selbst bekommt das übrig gebliebene. Derjenige, in dessen Teilintervall der Wert nach genauer Bestimmung tatsächlich liegt, gewinnt.

Die Experten wurden aufgefordert, ihre persönlichen Plausibilitätsgrenzen, Mediane und Quantilwerte zunächst provisorisch zu notieren, und nach Überlegung ggf. anzupassen. Im letzten Schritt waren die Werte in die vorgegebenen Tabellen einzutragen. Aus informativen Gründen wurde auch um Angaben zum Zeitbedarf für die einzelnen Schritte gebeten, weiterhin stand ein Freitextfeld zur Einschätzung des „persönlichen Gefühls“ und allgemeine Kommentare zur Verfügung.

Die ausgefüllten Fragebögen wurden – zum Teil nach Erinnerung – innerhalb von ca. drei Wochen zurückgeschickt. Die Antworten sind in Tab. A. 21 zusammengestellt.

Tab. A. 21 Antworten der Experten

<i>Gunther</i>	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	30	250	400	500	1000
Eu, Mischsediment, pH 5,5	300	2500	4000	5000	10000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	100	1000	1400	1800	4000
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	200	1500	2400	3000	6000
<i>Igor²</i>	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	0,1	10	100	500	1000
Eu, Mischsediment, pH 5,5	0,1	10	100	500	1000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.	k. A.

² Der Experte Igor erklärte, zur Situation „U(VI), Mischsediment, pH 5,5“ keine Angaben machen zu können

U(VI), Mischsediment, pH 8,5	0,1	1	20	50	100
<i>Julia</i>	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	0,1	8	10	30	100
Eu, Mischsediment, pH 5,5	0,1	80	100	300	1000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	0,01	0,05	0,1	5	100
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	1	20	100	300	10000
<i>Lise</i>	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	0,1	10	100	500	10 000
Eu, Mischsediment, pH 5,5	10	800	1 500	3 000	100 000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	1	50	150	300	10 000
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	0,1	5	20	100	1 000
<i>Manni</i> ³	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	0,001	0,0067	0,01	0,02	1
Eu, Mischsediment, pH 5,5	1	8	10	20	1000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	1	8	10	20	1000
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	10	80	100	200	10000

Um einen Vergleich zu erhalten, wurden die beiden Hauptbeteiligten des Laborteams, welches die Randbedingungen definiert hat und die messtechnische Bestimmung der K_D -Werte durchführen wird, ebenfalls gebeten, den Fragebogen auszufüllen – selbstverständlich vor Durchführung der Messungen und ohne Absprache untereinander. Diese Antworten wurden den Experten nicht bekannt gemacht und nicht in die Hauptauswertung einbezogen, jedoch mit denselben Methoden separat ausgewertet. Diese Antworten sind in Tab. A. 22 zusammengestellt.

Tab. A. 22 Antworten der Laborteam-Mitarbeiter

Laborteam Mitarbeiter A	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	1	50	100	1000	3000
Eu, Mischsediment, pH 5,5	10	100	500	2000	3000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	100	800	1000	2000	3000
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	100	1500	2000	3000	10000
Laborteam Mitarbeiter B	<i>L</i>	<i>Q₁</i>	<i>M</i>	<i>Q₃</i>	<i>U</i>
Eu, Kies, pH 5,5	50	1800	3000	20000	100000
Eu, Mischsediment, pH 5,5	500	3000	4000	7000	20000
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	5	250	400	700	2000
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	1	6	10	20	100

³ In der Original-Antwort des Experten *Manni* sind die Kehrwerte der hier genannten Zahlenwerte angegeben; dementsprechend sind auch *L* und *U* sowie *Q₁* und *Q₃* vertauscht. Dies beruhte auf einem Missverständnis und wurde hier korrigiert.

A.6.8 Experten-Workshop

Der SHELF-Prozess sieht einen Workshop vor, bei dem die Experten Argumente austauschen und, soweit möglich, ihre Meinungen einander annähern sollen. Dies konnte nur in Form eines 90-minütigen Online-Gesprächs realisiert werden, an dem neben den fünf Experten und dem Befragungsleiter die beiden Hauptbeteiligten des Laborteams als Fachberater und Protokollant teilnahmen.

Bei dem Gespräch wurden sowohl allgemein-methodische als auch fachliche Aspekte angesprochen diskutiert.

- Allgemein:
 - War die Aufgabenstellung hinreichend eindeutig?
 - War die Befragungsmethode verständlich und geeignet?
 - Sind eventuell Missverständnisse deutlich geworden?
 - Wie sind die teilweise inkonsistenten Plausibilitätsintervalle zu bewerten?
 - Zu unklare Definition?
 - Zu eng gewählte persönliche Grenzen?
- Fachlich:
 - Argumente für oder gegen die einzelnen Einschätzungen
 - Welche Bewertungen erscheinen überraschend? Warum?
 - Wie würde der RIO die Grenzen und Wahrscheinlichkeiten festlegen?

Ziel der fachlichen Diskussion war, zumindest über den letzten Punkt Einigkeit zu erzielen, also über die Einschätzung, zu welchem Ergebnis der RIO nach als fachkundiger aber neutraler Beobachter der Diskussion kommen würde.

Bei dem Workshop entwickelte sich eine lebhafte Diskussion, insbesondere auch wegen der stark voneinander abweichenden Einschätzungen. Aufgrund des begrenzten Zeitrahmens konnte allerdings nur die erste Randbedingungs-Situation (Eu, Kies, pH = 5,5) behandelt werden.

Um einer gedanklichen Fixierung der einzelnen Experten auf die von ihnen ursprünglich gegebenen Antworten entgegenzuwirken, wurde für die Gruppenbefragung ein anderer Ansatz gewählt als für die Einzelbefragung. Anstatt die in den Fragebögen festgelegten persönlichen Quartilwerte aufgrund der Diskussion zu modifizieren, wurde die Gruppe der Experten aufgefordert, gemeinsam einzuschätzen, welche Wahrscheinlichkeiten der RIO dafür bestimmten, auf Basis der Diskussion festgelegten Intervallen für den Kd-Wert zuweisen würde. Die Fragestellung wurde folgendermaßen formuliert:

Welche Plausibilitätsgrenzen L und U für die Kd-Werte würde der RIO ansetzen?

Wie würde der RIO die Wahrscheinlichkeiten P_x , P_y , P_z ansetzen, dass der gesuchte Kd-Wert unter x , y , z liegt?

Die Intervallgrenzen für die Situation (Eu, Kies, pH = 5,5) wurden auf $x = 10$, $y = 100$, $z = 1000$ (Einheit l/kg) festgelegt. Die Experten einigten sich schließlich auf die in Tab. A. 23 angegebenen Wahrscheinlichkeiten.

Tab. A. 23 RIO-Plausibilitätsgrenzen und -Wahrscheinlichkeiten

	L	U	$P_x (x=10)$	$P_y (y=100)$	$P_z (z=1000)$
Eu, Kies, pH 5,5	0,001	10000	0,3	0,5	0,9

A.6.9 Auswertung der Ergebnisse

Die Ergebnisse wurden mittels der im SHELF-Paket integrierten Software ausgewertet. Zunächst werden die Ergebnisse der Einzelbefragung vergleichend grafisch dargestellt (siehe Abb. A. 20). Da sich die für möglich gehaltenen K_D -Werte jeweils über mehrere (bis zu sieben) Größenordnungen erstrecken, ist es sinnvoll, stattdessen die (dekadischen) Logarithmen zu betrachten.

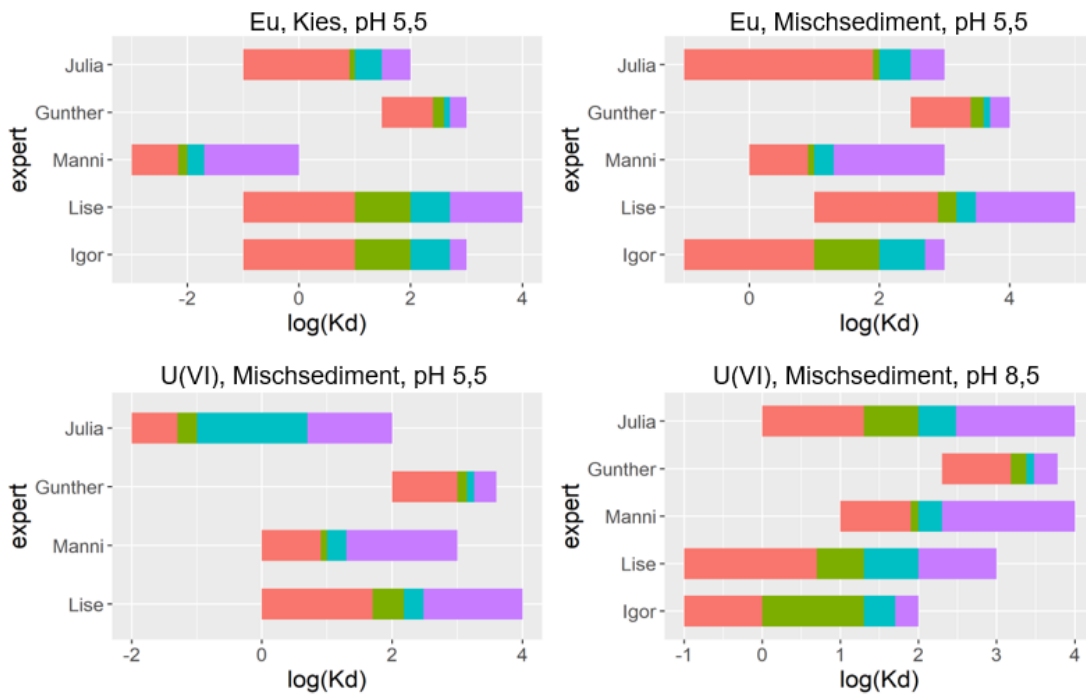


Abb. A. 20 Ergebnisse der Einzelbefragung

Dargestellt sind auf logarithmischer Skala die jeweils angegebenen Plausibilitätsintervalle, eingeteilt in vier Teilbereiche gleicher subjektiver Wahrscheinlichkeit.

Es fällt auf, dass die Plausibilitätsintervalle der fünf Experten teilweise stark voneinander abweichen und in einigen Fällen nicht einmal überlappen. Die auffälligste Diskrepanz liegt bei der Situation „Eu, Mischsediment, pH 5,5“ zwischen den Experten *Gunther* und *Manni* vor: Zwischen dem größten von *Manni* für gerade noch vorstellbar gehaltenen Wert und dem kleinsten Wert, den *Gunther* noch eben für denkbar erachtet, liegen einhalb Größenordnungen.

In Abb. A. 21 sind die Antworten der beiden Mitarbeiter des Laborteams dargestellt. Selbst hier gibt es deutliche Unterschiede in den Erwartungen, die so weit gehen, dass in einem Fall die Plausibilitätsintervalle nicht überlappen.

Die großen Diskrepanzen deuten darauf hin, dass die Vorgaben von den Experten in unterschiedlicher Weise verstanden oder interpretiert wurden. Allerdings werden selbst innerhalb des Laborteams, das die Vorgaben gemeinsam festgelegt hat, große Unterschiede in den Ergebniserwartungen deutlich.

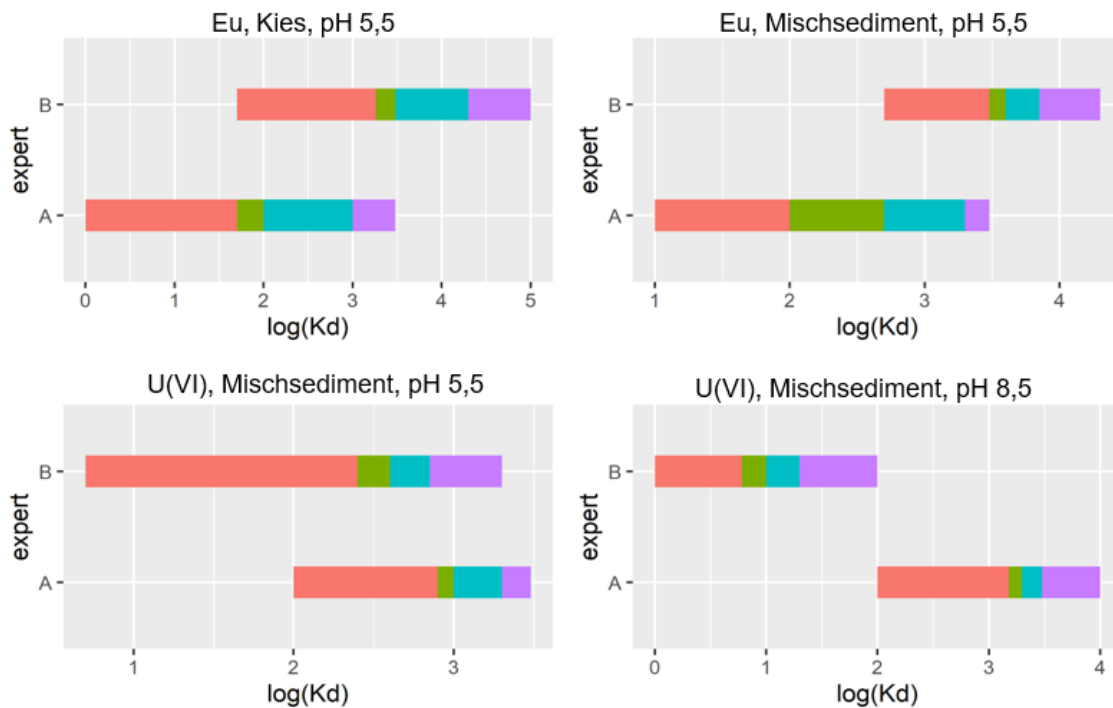


Abb. A. 21 Antworten der Labormitarbeiter

Solche Verständnisunterschiede können nur in einer gemeinsamen Diskussion ausgeräumt werden. Deshalb erscheint es nicht sinnvoll, die Ergebnisse der Einzelbefragungen mit formalen Methoden zusammenzuführen und daraus eine Verteilungsfunktion zu bestimmen. Stattdessen wird als Grundlage für deren Festlegung ausschließlich das Ergebnis der Gruppenbefragung verwendet. Dies ist allerdings nur für die Randbedingungs-Situation „Eu, Kies, pH 5,5“ möglich, weil nur diese in der Gruppendiskussion behandelt werden konnte.

Die unmittelbare Umsetzung der Werte nach Tab. A. 23 ergibt die in Abb. A. 22 dargestellte Histogrammverteilung.

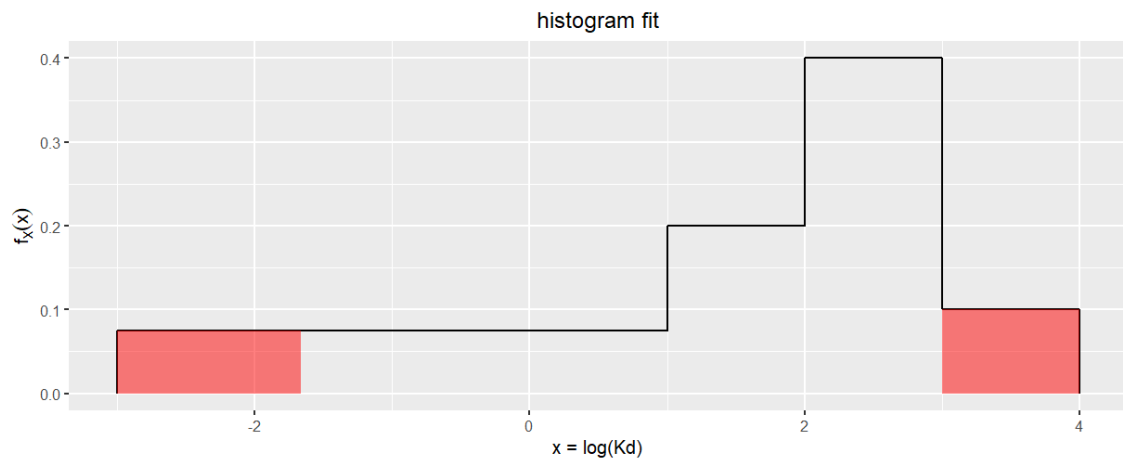


Abb. A. 22 Histogrammverteilung, abgeleitet aus den Werten nach Tab. A. 23

Die roten Bereiche zeigen die 10 %- und 90 %-Quantile an

Die Verteilung ist deutlich linksschief, weil die untere Plausibilitätsgrenze um vier Größenordnungen unter dem ersten Quartil liegt, die obere jedoch nur um eine Größenordnung über dem dritten Quartil.

Das SHELF-Paket beinhaltet ein Software-Werkzeug, mittels dessen die bestangepasste Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion bestimmt werden kann, wobei der Anwender die Möglichkeit hat, den Verteilungstyp vorzugeben oder den bestgeeigneten Verteilungstyp vom Programm bestimmen zu lassen. Letzteres ergibt eine gespiegelte Log-Normalverteilung (siehe Abb. A. 23):

$$f_X(x) = \frac{1}{(4-x)} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (\ln(4-x) - \mu)^2\right), \quad \text{für } x < 4$$

$$f_X(x) = 0 \text{ sonst}$$

$$\text{mit } \mu = 0.735, \sigma^2 = 0.389$$

Diese Verteilung gibt die ausgeprägte Linksschiefe am besten in stetiger Form wieder. Sie entspricht einer Log-Normalverteilung der Größe $(4 - x) = (4 - \log(K_d))$ und könnte bei einer probabilistischen Analyse als solche in die Stichprobenziehung einfließen, woraus die zu verwendenden Kd-Werte dann durch eine einfache Umformung zu berechnen wären.

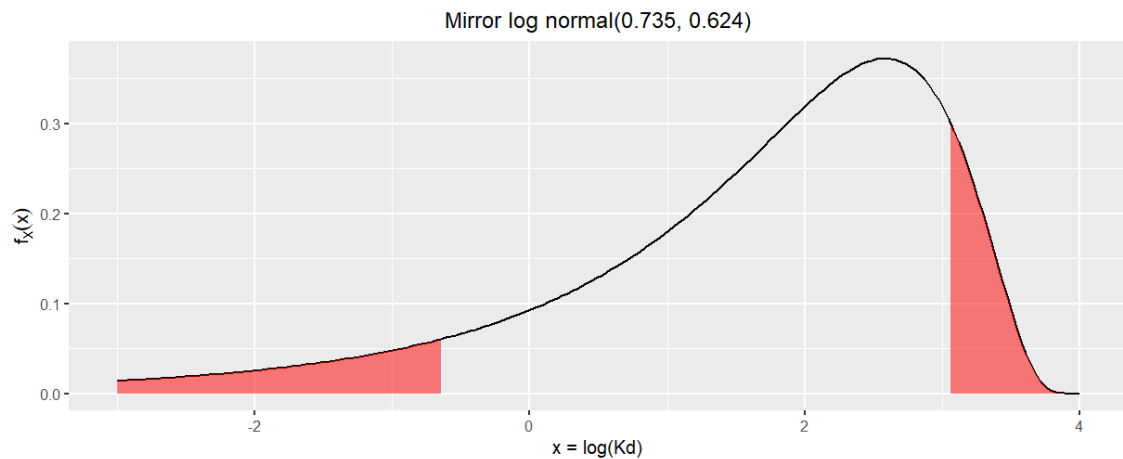


Abb. A. 23 Best-Fit-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, abgeleitet aus den Werten nach Tab. A. 23

Die roten Bereiche zeigen die 10 %- und 90 %-Quantile an.

A.6.10 Vergleich mit Laborergebnissen

Nach Abschluss der Expertenbefragung und deren Auswertung wurden K_D -Werte im Labor messtechnisch ermittelt. Die Untersuchungen und ihre Ergebnisse sind in Anhang A.5 im Detail beschrieben. Die den Expertenschätzungen zugrunde gelegten Vorgaben konnten dabei nur näherungsweise eingehalten werden. Es wurden jeweils mehrere Proben untersucht, wobei auch Randbedingungen variiert wurden, die nicht vorab festgelegt worden waren, etwa die Konzentration der Lösung. Den vorgegebenen pH-Wert von 5,5 einzustellen, erwies sich als schwierig, da die verwendeten Bodensimulate regelmäßig zu einer pH-Verschiebung hin zu höheren Werten führten. Da der K_D -Wert empfindlich vom pH-Wert abhängt, kann sich eine kleine Abweichung bereits deutlich auf das Messergebnis auswirken.

Jede Randbedingungs-Situation wurde durch mehrere Proben mit unterschiedlichen Konzentrationen des Testelements realisiert. Die jeweils ermittelten Messwerte sind in Tab. A. 24 zusammengestellt. Es wird deutlich, dass selbst bei eigentlich gleichen Randbedingungen teilweise erhebliche Schwankungen auftreten, die allerdings in der logarithmischen Darstellung weniger deutlich zutage treten.

Tab. A. 24 Experimentell bestimmte Werte für verschiedene Laborproben

Randbedingungen	Proben-Nr.	Konz. [µM/l]	pH	Kd [l/kg]	log(Kd)
Eu, LWI-Sand (anstelle von Kies pH 5.5), pH 5,5	42617	1,0	5,82	646	2,81
	42618	1,0	5,74	745	2,87
	42623	0,01	5,54	100	2,00
	42624	0,01	5,70	41	1,61
Eu, Mischsediment, pH 5,5	42394	1,0	5,94	4613	3,66
	42395	1,0	6,07	56244	4,75
	42400	0,1	6,44	43692	4,64
	42401	0,1	6,41	38572	4,59
	42406	0,01	6,21	14804	4,17
	42407	0,01	6,40	11555	4,06
U(VI), Mischsediment, pH 5,5	42520	1,0	5,73	194	2,29
	42521	1,0	5,45	396	2,60
	42529	0,1	6,43	514	2,71
	42530	0,1	6,29	464	2,67
	42536	0,01	6,70	383	2,58
	42537	0,01	6,35	308	2,49
U(VI), Mischsediment, pH 8,5	42577	1,0	8,30	18	1,26
	42578	1,0	8,27	32	1,51
	42579	0,1	8,46	17	1,24
	42580	0,1	8,35	16	1,21
	42581	0,01	8,34	16	1,21
	42582	0,01	8,39	16	1,21

Die Laborergebnisse wurden mit der aus der Expertenbefragung abgeleiteten Verteilung verglichen. Abb. A. 24 zeigt die oben ermittelte Best-Fit-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zusammen mit den vier Messwerten für die betrachtete Randbedingungssituation. In Anbetracht der erheblichen Unterschiede zwischen den ursprünglichen Erwartungen der Experten passen die Messergebnisse überraschend gut zu der aus der Gruppenbefragung abgeleiteten Verteilung und gruppieren sich um deren Maximum herum. Allerdings erstreckt sich diese Verteilung über mehr als sieben Größenordnungen.

Zu den übrigen Randbedingungs-Situationen wurden keine Verteilungen bestimmt, somit ist auch eine Einordnung der Messwerte in dieser Form nicht möglich. In Abb. A. 25 sind die Einzeleinschätzungen – einschließlich derjenigen der Labormitarbeiter – noch einmal wiedergegeben, wobei jeweils die Bandbreiten der im Labor ermittelten Messwerte mit dargestellt sind (grüne Rechtecke). Bei der Situation „Eu, Mischsediment, pH 5,5“ liegen die Erwartungen aller Experten deutlich unterhalb der tatsächlich gemessenen Werte. Bei vier von sieben Einschätzungen liegen alle Messwerte oberhalb der oberen Plausibilitätsgrenze, lediglich bei *Lise* liegen alle Werte noch unterhalb dieser Grenze. Der Hauptgrund für die scheinbaren Fehleinschätzungen dürfte allerdings darin lie-

gen, dass der vorgegebene pH-Wert bei diesen Messungen nicht eingehalten werden konnte und der tatsächliche pH-Wert jeweils deutlich höher lag, was dann auch zu stärkerer Sorption führt. Bei den Messungen mit Uran fügen sich dagegen die gefundenen K_D -Werte in die meisten Schätzungen mehr oder weniger gut ein, wobei allerdings auch hier jeweils mindestens ein Experte/Labormitarbeiter deutlich zu hoch oder zu niedrig geschätzt hat. Die Ergebnisse lassen vermuten, dass eine Gruppenbefragung in diesen Fällen zu einer vernünftigen Verteilungsfunktion geführt hätte.

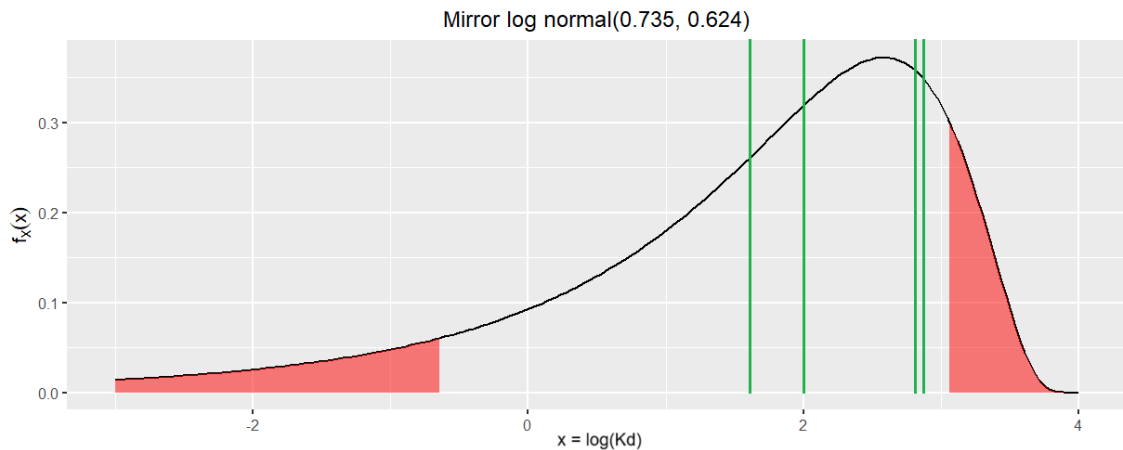


Abb. A. 24 Best-Fit-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, abgeleitet aus den Werten nach Tab. A. 24

Die experimentell ermittelten Messwerte für verschiedene Laborproben sind als grüne Linien mit eingetragen.



Abb. A. 25 Einzeleinschätzungen der Experten sowie der Labormitarbeiter im Vergleich mit den Bandbreiten der experimentell ermittelten Werte (grüne Rechtecke)

A.6.11 Fazit

Die Untersuchung wurde als Übung zur Vorgehensweise bei der Bestimmung von Wahrscheinlichkeitsdichten für unzureichend bekannte Parameter hinsichtlich einer probabilistischen Analyse durchgeführt. Die Übung hat gezeigt, dass die SHELF-Methodik im Prinzip einen praktikablen und sinnvollen Ansatz darstellt. Zumindest für den einen Fall, der vollständig bearbeitet werden konnte, ergab sich eine Verteilung, die mit den später im Labor ermittelten Messwerten gut zusammenpasst. Dies sollte allerdings nicht in der Weise missverstanden werden, dass es Ziel der Methodik sei, unabhängig gewonnene Messwerte durch die Verteilung möglichst genau wiederzugeben. Vielmehr soll die Methodik das Expertenteam zu einer gemeinsamen Einschätzung bringen sowie diese erfassen und quantifizieren.

Die unabhängigen Einzeleinschätzungen der Experten liegen zum Teil deutlich auseinander. Dennoch wurde in der Gruppenbefragung, bei der jeder Experte seine persönliche Einschätzung mit Argumenten unterlegen, aber auch revidieren konnte, bezüglich des behandelten Falles soweit Einigkeit erzielt, dass die aus der gemeinsamen RIO-Bewertung abgeleitete Verteilung sinnvoll erscheint. Dies zeigt, dass die Gruppenbefragung ein wichtiges Element des Bewertungsprozesses ist. Rein formal ließe sich eine Verteilung auch allein aus den Einzelbefragungsergebnissen ableiten. Dazu könnte man zum Beispiel jedem Experten ein „Stimmgewicht“ zuordnen – ohne Vorliegen eindeutiger Gründe sollte man nicht vom Gleichgewicht unter allen Experten abweichen – und deren persönliche (ggf. interpolierte) Wahrscheinlichkeiten jeweils bis zu bestimmten Ankerwerten aufsummieren. Aus den so ermittelten Gesamtwahrscheinlichkeiten der Ankerwerte ließe sich dann eine stetige Verteilungsdichtefunktion bestimmen. Diese wäre aber nur ein rein rechnerischer Kompromiss zwischen den unabhängig erfolgten Einschätzungen ohne inhaltlichen Mehrwert gegenüber diesen. Ein solches Vorgehen könnte sich ggf. bei Vorliegen einer sehr großen Anzahl von Expertenmeinungen anbieten, wenn zum einen eine Gruppenbefragung organisatorisch und praktisch nur schwer durchführbar wäre und zum anderen von einer solchen auch kaum eine signifikante Abweichung vom herrschenden „Meinungsdurchschnitt“ zu erwarten wäre.

A.6.12 Erfahrungen aus der Studie

Eine Expertenbefragung nach der SHELF-Methode wurde im Rahmen der hier beschriebenen Untersuchung erstmalig für Sorptionsparameter im Zusammenhang mit der Freisetzung radioaktiver Stoffe durchgeführt, wobei – entsprechend dem begrenzten Budget

– der demonstrative Charakter im Vordergrund stand. Dabei sind einige Schwierigkeiten deutlich geworden, denen bei einer zukünftigen Anwendung der Methodik Aufmerksamkeit gewidmet werden sollte. Auf diese Punkte wird im Folgenden eingegangen.

Festlegung des Befragungsgegenstands

Für die Übung wurden nur interne Experten herangezogen. Dazu wurden einem Kreis von möglichen Kandidaten zehn Fragen zur Selbsteinschätzung vorgelegt, wofür der Befragungsgegenstand selbst zunächst nur grob umrissen worden war. Es hat sich herausgestellt, dass dies bei mehreren Kandidaten nach eigenem Bekunden sowohl zu Unsicherheiten bei der Selbsteinschätzung als auch zu Fehleinschätzungen der eigenen Expertise geführt hat. Ein Kandidat, der sich vergleichsweise hoch eingeschätzt hatte, zog nach Vorliegen der genauen Fragestellung seine Bereitschaft zur Teilnahme zurück. Daraus ist zu folgern, dass bereits für die Vorauswahl aus einem möglichen Expertenkreis der Befragungsgegenstand so exakt wie möglich festgelegt werden sollte. Dabei ist darauf zu achten, dass keine „Selbstverständlichkeiten“ unterstellt werden. Alle relevanten Randbedingungen sollten erfasst werden, wobei mögliche Schwankungsbreiten quantitativ oder qualitativ zu beschreiben sind.

Fragen zur Selbsteinschätzung

Die Selbsteinschätzung ist sicherlich ein sinnvolles Instrument zur Unterstützung der Vorauswahl möglicher Experten. Die Fragen wurden jedoch offensichtlich unterschiedlich interpretiert; insbesondere die Bewertungsskala von 0 bis 10 wurde vermutlich nicht einheitlich gedeutet, sodass dadurch eine quantitative Vergleichbarkeit vorgespiegelt wird, die tatsächlich nicht gegeben ist. Diese einfache Selbstbewertungsskala war gewählt worden, um den Bearbeitungsaufwand für die Kandidaten zu minimieren und diese nicht bereits im Vorfeld von der Bereitschaft zur Teilnahme abzuschrecken, jedoch lassen die Antworten vermuten, dass das obere Ende dieser Skala unterschiedlich gedeutet wurde. Einige sehr zurückhaltende Selbsteinschätzungen mutmaßlich fachlich versierter Personen lassen sich möglicherweise dadurch erklären, dass diese ihre eigene Expertise mit einem hypothetischen Maximum an möglichem Fachwissen verglichen haben.

Es war durchaus beabsichtigt, subjektive Aspekte in die Selbsteinschätzung einfließen zu lassen, jedoch sollten die Fragen noch eindeutiger formuliert werden. Ob eine subjektive, jedoch quantitative Selbstbewertungsskala überhaupt sinnvoll ist, kann nach der einmaligen Übung nicht abschließend beantwortet werden, wenn sie jedoch zum Einsatz kommt, sollte die Bedeutung ihrer Endpunkte klar und eindeutig festgelegt werden.

Um besser vergleichbare Selbsteinschätzungen zu erhalten, sollte bei künftigen Untersuchungen mehr Augenmerk auf objektivere Indikatoren wie Anzahl und Umfang der bearbeiteten einschlägigen Projekte, Zahl der gelesenen einschlägigen Veröffentlichungen, Zahl eigener Veröffentlichungen zum Thema etc. gelegt werden.

Vorbereitung der Experten

Die SHELF-Methodik sieht eine gründliche Vorbereitung der Experten vor, denen auch eine umfangreiche Quellensammlung (Evidence Dossier) zur Verfügung gestellt werden soll. Dies war im Rahmen der Übung schon aus Zeit- und Budgetgründen nicht möglich. Deshalb wurden die Experten explizit aufgefordert, auf die Vorbereitung nur sehr wenig Zeit – maximal ca. zwei Stunden – zu verwenden und lediglich ihr bereits vorhandenes Wissen zu reaktivieren. Da die Experten sehr unterschiedliche Erfahrungen hatten, dürfte die unzureichende Vorbereitung einer der Gründe für die stark differierenden Expertenbewertungen sein. Um konsistentere und zuverlässigere Einzelbewertungen zu erhalten, wäre es wichtig, den Experten tatsächlich deutlich mehr Zeit zur Vorbereitung einzuräumen.

Einzelbefragung

Die Quartil-Methode ist für Kd-Werte, die in der Realität über viele Größenordnungen streuen, sicherlich der richtige Ansatz für die Einzelbefragung, da er keine vom Befragungsteam vorab und weitgehend willkürlich festgelegten Ankerwerte vorgibt. Diese Methode wird von den meisten Experten jedoch generell als schwierig empfunden, was auch bei der hier beschriebenen Übung der Fall war. Es ist festzustellen, dass die Experten insbesondere mit der Festlegung ihrer persönlichen Plausibilitätsgrenzen Schwierigkeiten hatten. Entsprechend der Empfehlung nach SHELF war in der Anleitung ausdrücklich gefordert, die Plausibilitätsgrenzen so zu wählen, dass eventuell später ermittelte Messwerte, die außerhalb des Plausibilitätsbereichs liegen, eher als Messfehler denn als eigener Einschätzungsfehler zu deuten wären. Dementsprechend hätten vier der fünf Experten sowie beide Labormitarbeiter jeweils mindestens einen, zum Teil sogar alle Labormesswerte anzweifeln müssen (was in keinem Fall geschehen ist). Lediglich bei *Lise* lagen sämtliche gemessenen Werte innerhalb der jeweiligen Plausibilitätsgrenzen (siehe Abb. A. 25). An den zu eng gewählten Grenzen zeigt sich aber auch das Phänomen des Übervertrauens (over-confidence) in die eigene Expertise: Wer sich einmal eine Meinung zu einer Situation gebildet hat, glaubt auch daran und hält sehr große Abweichungen davon für sehr unwahrscheinlich. Die Bedeutung der Plausibilitäts-

grenzen sollte deshalb in der Befragungsanleitung noch klarer dargestellt werden, ein expliziter Hinweis auf die Gefahr von Übervertrauen wäre eventuell sinnvoll.

Die SHELF-Anleitung empfiehlt, den Experten als Hilfestellung bei der Festlegung ihrer Quartilwerte gedankliche Wettspiele vorzuschlagen, welche für diese Übung leicht modifiziert wurden (siehe Kap. A.6.7). Diese wurden von den meisten Experten allerdings nur bedingt oder gar nicht als hilfreich empfunden.

Gruppenbefragung

Die Gruppenbefragung im Rahmen eines Experten-Workshops erwies sich als sehr wertvolles und vielleicht wichtigstes Element des SHELF-Prozesses. Allerdings war die dafür zur Verfügung stehende Zeit von 90 Minuten deutlich zu kurz. Es konnte lediglich eine von vier Randbedingungs-Situationen behandelt werden, und auch dabei konnten nicht alle Argumente ausdiskutiert werden. Für eine Befragung wie sie hier beschrieben ist würde ein mindestens vier- bis sechstündiger Workshop angemessen erscheinen.

Für die Auswertung der Gruppenbefragung wurde einer SHELF-Empfehlung entsprechend nicht erneut die Quartil-Methode angewandt, sondern die Wahrscheinlichkeits-Methode: Es waren nicht die K_D -Werte festzulegen, die bestimmten Wahrscheinlichkeiten entsprechen, sondern umgekehrt die Wahrscheinlichkeiten, die vorgegebenen K_D -Werten entsprechen. Da diese auf Basis der gemeinschaftlichen Diskussion festgelegt wurden, war die Gefahr einer Beeinflussung durch Ankerbildung dabei eher gering. Obwohl der Methodenwechsel von den Experten eher nicht begrüßt wurde, scheint er aus Sicht des Befragungsleiters nach wie vor sinnvoll, weil er eine Entkopplung von bereits erfolgten gedanklichen Festlegungen bewirkt.

Gesamteindruck

Die SHELF-Methodik erscheint als geeignetes Instrument zur Ermittlung von begründeten Verteilungsdichtefunktionen für epistemisch ungewisse Parameter durch Expertenbefragung. Im konkreten Fall – der Einschätzung von unbekannten Sorptionsparametern nach dem K_D -Konzept – ergab sich eine sehr große Ungewissheit über bis zu sieben Größenordnungen, was vermutlich deutlich mehr ist, als bei einer spontanen *ad-hoc*-Festlegung, etwa in Form einer logarithmischen Gleichverteilung, angenommen worden wäre. Dies zeigt, dass solche Untersuchungen sinnvoll und wichtig für probabilistische Analysen sind. Allerdings hat die Übung bestätigt, dass der Aufwand für derartige Be-

fragungen erheblich ist, so dass bereits der einfache Testfall im Rahmen des verfügbaren Budgets nur in deutlich vereinfachter Form behandelt werden konnte.

A.6.13 Referenzen

- /OHA 06/ O'Hagan, A., Buck, C. E., Daneshkhah, A., Eiser, J. R., Garthwaite, P. H., Jenkinson, D. J., Oakley J. E., Rakow, T.: Uncertain Judgements: Eliciting Experts' Probabilities. Wiley 2006, ISBN: 978-0-470-02999-2.
- /GOS 18/ Gosling, John Paul. (2018). SHELF: The Sheffield elicitation framework. 10.1007/978-3-319-65052-4_4, 2018.

A.6.14 Fragebögen

Fragebogen zur Expertenbefragung K_d -Werte – Teil 1

Im Rahmen des Projekts „Entwicklung und Anwendung von Berechnungsinstrumenten für die spezifische Freigabe“ ist beabsichtigt, K_d -Werte für mehrere Elemente in verschiedenen Bodentypen und unter verschiedenen pH-Bedingungen im Labor zu bestimmen. Davon unabhängig sollen solche Werte (für ein synthetisches sandiges Material) als implizites Expertenwissen in Form von Wahrscheinlichkeitsverteilungen ermittelt werden.

Dieser erste Teil des Fragebogens wird zunächst einer größeren Zahl von möglichen Experten vorgelegt. Er soll dazu dienen, deren Expertise hinsichtlich des Untersuchungsgegenstandes einzuschätzen. Das primäre Ziel liegt dabei nicht darin, die (vermeintlich) „besten“ Experten zu finden, sondern die „Expertenqualität“ so objektiv wie möglich zu bewerten. Für die eigentliche Befragungsrunde wird dann eine Auswahl getroffen, die sich an methodischen Aspekten orientiert.

Es ist daher wichtig, dass jeder die folgenden 10 Fragen so korrekt und objektiv wie möglich beantwortet. Auf der Skala von 0 bis 10 sollen nur ganze Zahlen verwendet werden (0 = trifft überhaupt nicht zu, 10 = trifft voll und ganz zu). Die Antworten werden nur einem kleinen Kreis von Projektbearbeitern zugänglich gemacht und anonymisiert veröffentlicht.

1. Mein GRS-Kürzel:
XXX
2. Meine Ausbildung (Fach/Fächer, Abschluss):
(Text)
3. Ich kenne mich mit Sorptionschemie aus:
0 - 10
4. Ich verstehe das K_d -Konzept:
0 - 10
5. Ich verstehe, wie K_d -Werte von physikalischen, chemischen und geochemischen Bedingungen abhängen:
0 - 10
6. Ich habe mich in mehreren Projekten intensiv mit Sorptionsparametern beschäftigt:
0 - 10
7. Ich habe sehr viel Fachliteratur zum Thema Sorption gelesen:
0 - 10
8. Ich habe mich auf nationaler und internationaler Ebene zum Thema Sorption intensiv mit Fachleuten ausgetauscht:
0 - 10
9. Ich traue mir eine fachlich fundierte und zuverlässige Aussage über K_d -Werte unter den oben genannten Bedingungen zu:
0 - 10
10. Ich würde an einer Expertenbefragung teilnehmen
☒ Mit dem größten Vergnügen! ☐ Lieber lasse ich mich lebendig von Sandflöhen fressen.

Fragebogen zur Expertenbefragung K_d -Werte – Teil 2

Dieser zweite Teil des Fragebogens hat zum Ziel, die jeweiligen Kenntnisstände entsprechend der jeweiligen Selbsteinschätzung möglichst korrekt zu erfassen. Er folgt einem Ansatz der SHELF-Methodik. Es ist wichtig, die Anleitungstexte sorgfältig zu lesen und entsprechend vorzugehen. Die Bearbeitung sollte ausgeruht und zusammenhängend erfolgen, Unterbrechungen sind möglichst zu vermeiden. Der Zeitbedarf für die einzelnen Schritte soll dokumentiert werden, insgesamt sollte die Bearbeitung nicht länger als ca. **2 Stunden** dauern (dies ist ein Anhaltspunkt und kein Zeitlimit).

Begriffe wie *Wahrscheinlichkeit*, *Grenzen* etc. werden im Folgenden mit Possessivpronomina („dein“) verbunden. Das soll betonen, dass hier nicht objektive Daten im statistisch-strengen Sinn gemeint sind, sondern deine *ganz persönliche Einschätzung*. Denke dabei nicht: *was könnten andere sagen?*, oder: *könnte ich mich mit dieser Meinung unter anderen Experten blamieren?*, sondern antworte genau deinem eigenen, individuellen Wissen entsprechend. Stell dir vor, die Werte würden dringend benötigt und du seist die einzige verfügbare Person, die dazu überhaupt irgendetwas sagen kann. Die Antworten werden anonymisiert.

Schritt 1: Vorbereitung

Gesucht sind vier K_d -Werte (in **Liter pro Kilogramm** – bitte die Einheit beachten!), die in der folgenden Tabelle charakterisiert sind. Unter diesen Bedingungen werden die Werte später im Labor messtechnisch bestimmt:

Element	Material	pH	Ionenstärke / Lösung	Randbedingungen, sonstiges
Eu	Fein-/Mittelkies (nicht näher charakterisiert)	5.5	10 mM NaCl	erdatmosphärische Bedingungen, 25° C
Eu	Gemischtes fein- bis grobsandiges Sediment, artifiziell zusammengesetzt aus folgenden Einzelkomponenten: 80 % Quarz, 10 % K-Feldspat, 10 % Muskovit	5.5		
U(VI)	Gemischtes fein- bis grobsandiges Sediment, artifiziell zusammengesetzt aus folgenden Einzelkomponenten: 80 % Quarz, 10 % K-Feldspat, 10 % Muskovit	5.5		
U(VI)	Gemischtes fein- bis grobsandiges Sediment, artifiziell zusammengesetzt aus folgenden Einzelkomponenten: 80 % Quarz, 10 % K-Feldspat, 10 % Muskovit	8.5		

Nimm dir bitte etwas Zeit – nicht weniger als 15 Minuten, möglichst nicht mehr als 60 Minuten – zum Nachdenken über die gesuchten K_d -Werte. Was weißt du *persönlich* darüber, was weißt du nicht? Welche relevanten Nebenbedingungen sind bekannt, welche nicht? Welche der gegebenen Informationen sind aus deiner Sicht von größerer oder geringerer Bedeutung? Welche sind überhaupt geeignet, deine persönliche Vorstellung von den K_d -Werten zu beeinflussen? Denke an die Ungewissheiten. Hast du alle möglichen und dir bekannten Einflüsse bedacht? In welchem Wertebereich werden die Werte deiner Ansicht nach *wahrscheinlich* liegen, in welchem *praktisch sicher*?

Zum „Antriggern“ des eigenen Denkens und zur (Wieder)beschaffung nicht oder nicht mehr präsenter Hintergrundinformationen können schnell auffindbare Quellen (Berichte, allgemeine Internetseiten, ...) zu Hilfe genommen werden, es soll aber weder Literaturstudium noch Datenrecherche betrieben werden. Der Schritt dient nicht zum *Aneignen* von Wissen, sondern zum *Vergegenwärtigen* von bereits vorhandenem Wissen.

Am Ende der Vorbereitung solltest du ein Bild von der Quantifizierung der K_d -Werte im Kopf haben.

Führe die folgenden Schritte bitte nacheinander für jeden der gesuchten K_d -Werte aus. Bearbeite die Antworten nicht parallel für verschiedene K_d -Werte. Notiere deine Antworten zunächst auf einem Blatt Papier, mehrfaches Ändern und Anpassen ist legitim! Erst, wenn du dir sicher bist, übertrage deine Antworten in die Tabelle am Ende des Fragebogens.

Schritt 2: Plausibilitätsgrenzen

Lege bitte zunächst deine untere Plausibilitätsgrenze L fest. Das ist der Wert, ab dem es dir extrem unwahrscheinlich erscheint, dass der gesuchte K_d -Wert noch kleiner ist. Notiere den Wert zunächst provisorisch.

Lege dann deine obere Plausibilitätsgrenze U fest. Das ist der Wert, ab dem es dir extrem unwahrscheinlich erscheint, dass der gesuchte K_d -Wert noch größer ist. Notiere auch diesen Wert provisorisch.

Stell dir jetzt vor, zu einem zukünftigen Zeitpunkt würde dir jemand berichten, der gesuchte Wert sei genau bestimmt worden, und betrage X . X liegt außerhalb deines Plausibilitätsintervalls. Was wäre deine Reaktion?

- Dann habe ich mich anscheinend geirrt.
- Das kann nicht stimmen.

Wenn du dich hier für a entschieden hast, hast du deine Plausibilitätsgrenzen zu eng gewählt. Passe in diesem Fall bitte die untere oder die obere oder beide Grenzen noch einmal an.

Schritt 3: Median

Lege jetzt deinen Median M fest: deine Wahrscheinlichkeiten dafür, dass der gesuchte K_d -Wert kleiner oder größer als M ist, sollen gleich sein. Denke darüber sorgfältig nach und lege den Median nicht einfach in die Mitte zwischen L und U . Notiere den Wert zunächst provisorisch.



Stell dir jetzt in Gedanken das folgende Wettspiel vor:

Auf einem Zettel steht der Satz: *Der K_d -Wert ist als* .

Zuerst trägst du in die zweite Lücke deinen Medianwert ein. Ein hypothetischer Gegenspieler, der über genau dasselbe Wissen verfügt und genauso denkt wie du, schreibt anschließend das Wort „kleiner“ oder „größer“ in die erste Lücke. Der Zettel wird versiegelt, bis der K_d -Wert tatsächlich genau bestimmt worden ist. Wenn sich dann herausstellt, dass der Satz auf dem Zettel wahr ist, gewinnt dein Gegner die Wette und erhält von dir einen Geldbetrag, im gegenteiligen Fall gewinnst du und bekommst das Geld von ihm. Sollte der tatsächliche Wert exakt deinem Median entsprechen, endet die Wette unentschieden.

Würdest du für diese Wette deinen Medianwert wie notiert beibehalten oder doch lieber nach oben oder unten korrigieren? Passe ihn gegebenenfalls an.

Schritt 4: Quartile

Lege nun bitte deine Quartile Q_1 und Q_3 fest. Teile dazu die möglichen Wertebereiche unterhalb und oberhalb deines Medians noch einmal in jeweils zwei Teile gleicher Wahrscheinlichkeit: deine Wahrscheinlichkeiten dafür, dass der gesuchte Wert unterhalb von Q_1 , zwischen Q_1 und M , zwischen M und Q_3 oder oberhalb von Q_3 liegt, sollen gleich sein. Denke darüber sorgfältig nach. Dein Q_1 sollte in der Regel dichter an M als an L liegen, Q_3 dichter an M als an U . Ist das nicht der Fall, denke bitte noch einmal nach. Je dichter du deine Quartile bei deinem Median positionierst, desto mehr Sicherheit bezüglich des K_d -Wertes dokumentierst du damit. Notiere deine Quartile zunächst provisorisch.



Stell dir jetzt in Gedanken das folgende Wettspiel vor:

Du wettest mit drei hypothetischen Gegenspielern um den richtigen Wert. Alle verfügen über genau dasselbe Wissen und denken genauso wie du. Der gesamte Wertebereich wird mit deinen Werten für Q_1 , M und Q_3 in vier Teilbereiche unterteilt (deine Plausibilitätsgrenzen L und U werden dabei nicht berücksichtigt). Deine Gegenspieler dürfen sich nacheinander jeweils einen der vier Bereiche aussuchen, du bekommst den übrig gebliebenen. Wenn später der K_d -Wert genau bestimmt worden ist, gewinnt derjenige, in dessen Teilbereich dieser Wert liegt, einen Geldbetrag, der von den anderen zu zahlen ist.

Würdest du für diese Wette deine Quartilwerte wie notiert beibehalten, oder doch lieber noch einmal korrigieren? Passe sie gegebenenfalls an.

Schritt 5: Ausfüllen der Tabelle

Überprüfe nun noch einmal, ob alle deine Werte tatsächlich dein Wissen und Verständnis zu den fraglichen K_d -Werten widerspiegeln. Wenn du dir über deine Plausibilitätsgrenzen, Mediane und Quartile sicher bist, übertrage die Werte bitte in die folgende Tabelle.

	L	Q_1	M	Q_3	U
Eu, Kies, pH 5,5					
Eu, Mischsediment, pH 5,5					
U(VI), Mischsediment, pH 5,5					
U(VI), Mischsediment, pH 8,5					

Zeitbedarf

Trage in die folgende Tabelle bitte ein, wieviel Zeit (in Minuten) du für die verschiedenen Schritte benötigst. Dies dient zur allgemeinen Bewertung der Methodik.

	Schritt 1	Schritt 2	Schritt 3	Schritt 4	Schritt 5
Eu, Kies, pH 5,5					
Eu, Mischsediment, pH 5,5					
U(VI), Mischsediment, pH 5,5					
U(VI), Mischsediment, pH 8,5					

Bemerkungen und Rückmeldungen

Hier kannst du alles aufschreiben, was dir zu dieser Befragung einfällt. Hast du die Aufgabenstellung verstanden und erscheint sie dir hinreichend klar? Hast du generell „ein gutes Gefühl“ bei deinen Antworten? Ist dir die Beantwortung leicht- oder schwergefallen? Erscheinen dir die gedanklichen „Wettspiele“ für die Beantwortung hilfreich? Hast du deine Antworten daraufhin verändert? Erscheint dir die Befragungsmethodik generell sinnvoll? Jedes Feedback ist willkommen:

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-911727-36-5