



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

**Grundlegende
Ausbreitungsrechnungen
mit dem
Transportprogramm
CHETLIN**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

**Grundlegende
Ausbreitungsrechnungen
mit dem
Transportprogramm
CHETLIN**

Ulrich Noseck

August 2000

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen 02 E 8855 gefördert.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt allein bei dem Autor.

**GRS - 156
ISBN 3-931995-18-6**

Deskriptoren:

Ausbreitung, Computer Code, Endlagerung, Langzeitsicherheit, Modell, Nuklidtransport

Vorwort

Die Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern erfordert ein leistungsfähiges und erprobtes Instrumentarium. Dafür werden Rechenprogramme und Daten eingesetzt, mit denen die relevanten physikalischen und chemischen Prozesse bei Freisetzung von Schadstoffen, deren Ausbreitung im Deckgebirge und Exposition in der Biosphäre beschrieben werden. Ziel des Vorhabens "Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern", FKZ 02 E 8855, war die Verfolgung nationaler und internationaler Entwicklungen sowie die Auswertung wissenschaftlicher Ergebnisse. Dabei standen experimentelle und theoretische FuE-Vorhaben im Vordergrund, die wichtige Beiträge zu Modellvorstellungen und Modelldaten für Langzeitsicherheitsanalysen lieferten. Eine weitere relevante Aufgabe stellte die Entwicklung von Instrumentarien für die Langzeitsicherheitsanalyse von Endlagern in Hartgesteinsformationen dar.

Dieses sonderfinanzierte Vorhaben des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie wurde in der Zeit vom 01.04.1996 bis 31.01.2000 durchgeführt. Zu den schwerpunktmäßig während des Projektes bearbeiteten Themen wurden die folgenden sechs wissenschaftlichen Einzelberichte angefertigt.

- | | |
|-----------------|--|
| GRS-Bericht 129 | Erzeugung und Verbleib von Gasen in einem Endlager für radioaktive Abfälle |
| GRS-Bericht 148 | Ableitung von Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen für Salzgrus |
| GRS-Bericht 151 | Permeabilität von aufgelockertem Steinsalz. Ableitung einer Relation zur Modellierung von Auflockerungszonen innerhalb von Langzeitsicherheitsanalysen |
| GRS-Bericht 154 | Spent Fuel Performance Assessment (SPA) for a hypothetical repository in crystalline formations in Germany |
| GRS-Bericht 155 | Zusammenstellung und Auswertung geochemischer Untersuchungen zum Radionuklidverhalten aus ausgewählten Studien über Natürliche Analoga |

GRS-Bericht 156 Grundlegende Ausbreitungsrechnungen mit dem Transportprogramm CHETLIN

In einem zusammenfassenden Abschlußbericht wurden außerdem alle während der Laufzeit des Projekts durchgeführten Arbeiten in Kurzbeiträgen zusammengefaßt:

GRS-Bericht 153 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. Abschlußbericht

Inhaltsverzeichnis

	Vorwort	I
	Inhaltsverzeichnis	III
1	Einleitung	1
2	Daten zum Modell	3
3	Parametervariation	4
3.1	Freisetzungsdauer	5
3.2	Weglänge	6
3.3	Transportzeit	7
3.3.1	Variation des Volumenstroms	7
3.3.2	Variation des Querschnitts	9
3.4	Dispersionslänge	10
3.5	Diffusion	11
3.6	Retardationsfaktor	12
3.7	Freisetzungsdauer und Retardationsfaktor	13
4	Heterogenes Gebiet hinsichtlich der Sorption	17
4.1	Fall 1	17
4.2	Fall 2	19
4.3	Fall 3	20
5	Zusammenfassung	23
6	Literatur	27
	Abbildungsverzeichnis	29
	Anhang - Analytische Lösung für den δ-Impuls	31

1 Einleitung

Mit dem eindimensionalen Transportprogramm CHET1 kann die Ausbreitung von Schadstoffen in gesättigten, porösen Medien in eindimensionaler Näherung berechnet werden. Hierbei wird eine Stromröhre mit einer vorgegebenen Länge und einem variablen Querschnitt betrachtet, die von einem konstanten Volumenstrom durchströmt wird. Diesem Volumenstrom wird der Transport einer Vielzahl von Schadstoffarten überlagert, wobei der Schadstofftransport keine Rückwirkung auf den Fluidtransport hat. Hinsichtlich des Schadstofftransports werden die nachfolgenden Effekte berücksichtigt:

- Advektion,
- Diffusion und Dispersion,
- elementspezifische Rückhaltung,
- zeitabhängiger nuklidspezifischer Eingangsstrom,
- radioaktiver Zerfall unter Berücksichtigung von Radionuklidketten.

Das Programm CHET1 ist die erste Version eines Transportprogramms für das Programmpaket EMOS [1], das zur Untersuchung der Langzeitsicherheit von Endlagern eingesetzt wird. Das Programm CHET1 zeichnet sich durch Modellansätze für die Schadstoffrückhaltung nach dem K_d -Konzept aus [2].

Zur Ermittlung der Auswirkungen allgemeiner Parameter auf die Ausbreitung von Schadstoffen in einem realitätsnahen Deckgebirge wurden Parametervariationsrechnungen für ein vereinfachtes Deckgebirge durchgeführt. Die Kenngrößen des zugrundegelegten Deckgebirges orientieren sich in etwa an den Verhältnissen am Standort Gorleben. Die Struktur des verwendeten Modellgebietes wurde so einfach wie möglich gehalten, um die Wirksamkeit der gewählten Variationsparameter nicht durch Sekundäreffekte in ihrer Interpretation zu erschweren. So wurde ein homogenes Modellgebiet mit einem konstanten Querschnitt betrachtet. Die weiteren Parameter werden in Kapitel 2 beschrieben.

Die variierten Parameter wurden dahingehend ausgesucht, daß mit diesen entweder das betrachtete Modellgebiet, die Fluidbewegung im Modellgebiet oder die einzelnen Schadstofftransporteffekte in ihren wesentlichen Eigenschaften charakterisiert werden können.

Folgende Parameter wurden betrachtet:

- Weglänge
- Fluidtransportzeit
- Freisetzungsdauer
- Dispersionslänge
- Diffusionskoeffizient
- Retardationsfaktor

Die Auswirkung der Parametervariationen wurden im Hinblick auf die Maximalkonzentration am Ende des Ausbreitungsweges untersucht. Bei den angegebenen Konzentrationen handelt es sich immer um diejenige des gelösten Schadstoffanteils. Um die Interpretation der Ergebnisse nicht zu erschweren, wurde ein einzelner und nicht zerfallender Schadstoff betrachtet. Für den Eingangsstrom wurde sowohl ein δ -Impuls als auch ein zeitlich konstanter Eingangsstrom betrachtet. Im Fall des δ -Impulses existieren analytische Lösungen für den Transportvorgang, die im Anhang dargestellt sind.

Im folgenden werden die Ergebnisse dieser Ausbreitungsrechnungen für ein einfaches Modellgebiet dargestellt. Die Daten des betrachteten Referenz-Gebietes sind in Kapitel 2 beschrieben. Die jeweils variierten Parameter und die Variationsbreite der Parameter sind in Kapitel 3 aufgeführt. In Kapitel 4 werden einfache Rechnungen für ein hinsichtlich der Sorption heterogenes Modellgebiet vorgestellt.

2 Daten zum Modell

Als Modellgebiet wurde eine homogene eindimensionale Stromröhre mit den unten genannten Eigenschaften gewählt. Die angegebenen Werte stellen die Referenzwerte, die bei den Rechnungen verwendet wurden, dar.

- Weglänge des Gebiets:	10000 m
- Fluidtransportzeit:	10000 Jahre
- Querschnitt:	10000 m ²
- Porosität:	0.2
- Gesteinsdichte:	2500 kg/m ³
- Dispersionslänge:	100 m
- Diffusionskoeffizient:	10 ⁻⁴ m ² /a
- Retardationsfaktor:	10
- Freigesetzte Schadstoffmenge:	2.0·10 ⁶ kg

Die Freisetzung des Schadstoffes erfolgt am linken Rand des Modellgebietes. Es wurden jeweils zwei Varianten berechnet. Im ersten Fall erfolgt die Freisetzung der angegebenen Schadstoffmenge in einem Jahr, repräsentativ für einen δ -Impuls, im zweiten Fall erfolgt sie in $5 \cdot 10^4$ Jahren entsprechend einer konstanten Einstromquelle (vgl. Kap. 3.7).

Aus den oben angegebenen Daten errechnen sich die folgenden charakteristischen Grundwassergeschwindigkeiten und der Volumenstrom zu:

- Abstandsgeschwindigkeit des Fluids:	1 m/a
- Darcy-Geschwindigkeit:	0.2 m/a
- Volumenstrom:	2000 m ³ /a

3 Parametervariation

Im Rahmen der durchgeführten Ausbreitungsrechnungen wurden die folgenden Parameter über den jeweils angegebenen Bereich variiert.

- Weglänge:	$1 \cdot 10^3 - 1 \cdot 10^5$ m
- Fluidtransportzeit	$1 \cdot 10^3 - 1 \cdot 10^5$ a
- Freisetzungsdauer	$1 \cdot 10^0 - 1 \cdot 10^6$ a
- Dispersionslänge	2.0 - 200.0 m
- Diffusionskoeffizient	$1 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^0$ m ² /a
- Retardationsfaktor	1 - 100

Bei den in Kapitel 3.2 bis 3.6 vorgestellten Parametervariationsrechnungen wurde jeweils nur ein Parameter variiert, für alle anderen Parameter wurden die Referenzwerte eingesetzt. Die Freisetzungsdauer hat dabei einen entscheidenden Einfluß auf den Verlauf der Maximalkonzentration. Abhängig davon, ob man einen δ -Impuls oder eine konstante Einstromquelle vorliegen hat, unterscheiden sich die Abhängigkeiten der Maximalkonzentration von dem jeweils variierten Parameter deutlich voneinander. Aus diesem Grund wurden die Parametervariationsrechnungen zur Freisetzungsdauer zuerst durchgeführt. Alle weiteren Parametervariationen wurden dann jeweils für eine Freisetzungsdauer von einem Jahr, repräsentativ für einen δ -Impuls, und für eine Freisetzungsdauer von $5.0 \cdot 10^4$ Jahren, stellvertretend für eine konstante Quelle, durchgeführt.

Im daran anschließenden Kapitel 3.7 wurden die beiden Parameter Retardationsfaktor und Freisetzungsdauer kombiniert variiert, um zu veranschaulichen, daß allgemein das Verhältnis von Freisetzungsdauer zu Schadstofftransportzeit die entscheidende Größe ist, die bestimmt, ob die Freisetzung einer konstanten Quelle oder einem δ -Impuls entspricht.

Zum besseren Vergleich der Wirksamkeit der einzelnen Parameter ist die Maximalkonzentration in allen Abbildungen, in denen ausschließlich ein Parameter variiert wurde, jeweils über zwei Dekaden skaliert.

3.1 Freisetzungsdauer

Die Freisetzungsdauer hat grundlegende Auswirkung auf die Schadstoffausbreitung, da von ihr abhängt ob eine konstante Quelle oder ein δ -Impuls vorliegt. Bei den Variationsrechnungen wurde jeweils die gleiche Gesamtmenge des Schadstoffs, konstant über den entsprechenden Zeitraum verteilt, zugegeben. Die Freisetzungsrage nimmt also mit steigender Freisetzungsdauer ab.

Abb. 3.1 zeigt den Verlauf der Maximalkonzentration. Für Freisetzungsdauern kleiner $1 \cdot 10^4$ Jahre verläuft die Kurve waagrecht. Das ist der Bereich, in dem die Schadstoffwolke einem δ -Impuls entspricht. Bei höheren Freisetzungsdauern sinkt die Maximalkonzentration langsam ab und erreicht bei einer Freisetzungsdauer größer $5 \cdot 10^4$ Jahre einen zweiten Grenzbereich, der dem einer konstanten Quelle entspricht. In diesem Bereich ist die Maximalkonzentration umgekehrt proportional zur Freisetzungsdauer, was auf die mit steigender Freisetzungsdauer abnehmende Freisetzungsrage zurückzuführen ist.

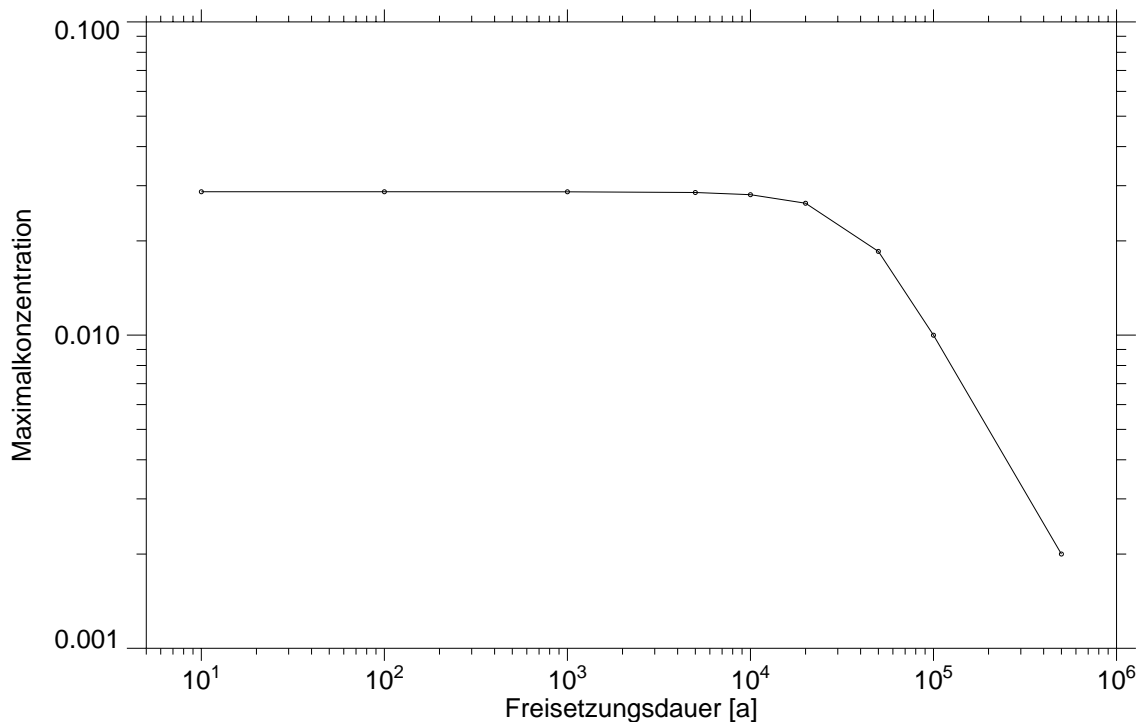


Abb. 3.1: Variation der Freisetzungsdauer.

Bei allen in den folgenden Kapiteln gezeigten Parametervariationsrechnungen wurden diese beiden Grenzfälle betrachtet, wobei jeweils die Freisetzungsdauer von einem Jahr als repräsentativ für einen δ -Impuls, die Freisetzungsdauer von $5 \cdot 10^4$ Jahren als repräsentativ für eine konstante Quelle gewählt wurden.

3.2 Weglänge

Der Grad der dispersiven Verbreiterung einer Schadstoffwolke ist abhängig von der Länge ihres Migrationsweges. Dementsprechend ergibt sich bei einem δ -Impuls eine Abhängigkeit der Maximalkonzentration von der Weglänge.

Bei den in diesem Kapitel gezeigten Rechnungen wurde die Weglänge zwischen $1 \cdot 10^3$ und $1 \cdot 10^5$ m variiert. Die Dispersionslänge wurde so mitvariiert, daß sie immer 1/100 der Gebietslänge betrug. Abb. 3.2 zeigt, daß die Maximalkonzentration bei einer Freisetzungsdauer von einem Jahr mit steigender Gebietslänge abnimmt. Diese Abnahme ist

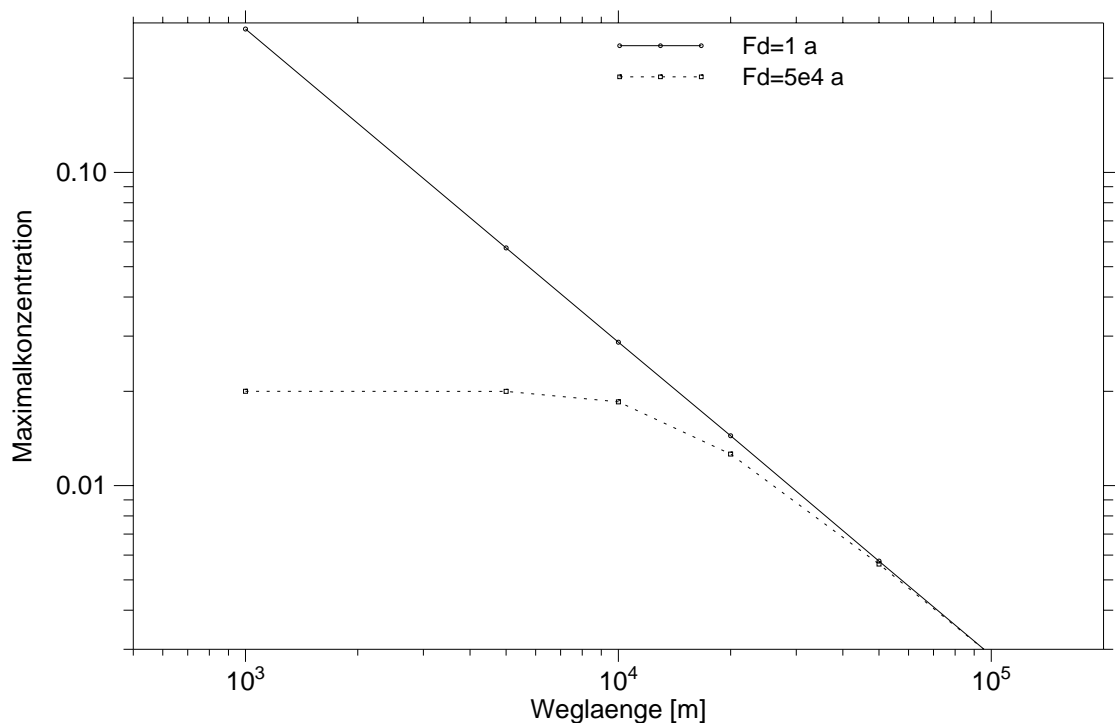


Abb. 3.2: Variation der Gebietslänge für zwei unterschiedliche Freisetzungsdauern. Die Dispersionslänge beträgt jeweils 1/100 der Weglänge.

dadurch zu erklären, daß sich der Konzentrationspuls mit zunehmender Gebietslänge aufgrund der Dispersion aufweitet und das Maximum entsprechend abnimmt. Der Effekt wird zusätzlich dadurch verstärkt, daß die Dispersionslänge im angenommenen Modell immer 1/100 der Länge des Transportweges beträgt und somit bei längerem Gebiet die Dispersion entsprechend größer wird. Unter dieser Annahme ergibt sich aus der analytischen Lösung für einen δ -Impuls, Gleichung (2), eine umgekehrte Proportionalität zwischen Maximalkonzentration und Weglänge, die aus Abb. 3.2 abzulesen ist.

Bei konstanter Quelle hat die Gebietslänge keinen Einfluß auf die Maximalkonzentration sondern ausschließlich auf die Form des Profils der Konzentrationsfront.

3.3 Transportzeit

Die Variation der Transportzeit kann auf zwei verschiedene Weisen durchgeführt werden. Zum einen kann der Volumenstrom bei konstantem Querschnitt des Modellgebiets variiert werden, zum anderen kann der Volumenstrom konstant gehalten und der Querschnitt variiert werden. Beide Fälle werden hier behandelt.

3.3.1 Variation des Volumenstroms

In Abb. 3.3 sind die Kurvenverläufe bei zwei unterschiedlichen Freisetzungsdauern für den ersten Fall dargestellt. Für einen δ -Impuls ist die Maximalkonzentration unabhängig von der Fluidtransportzeit. Es findet ausschließlich eine Verzögerung des Transports statt, die Ortsabhängigkeiten der Konzentration sind am gleichen Beobachtungsort identisch für alle Fluid-Transportzeiten.

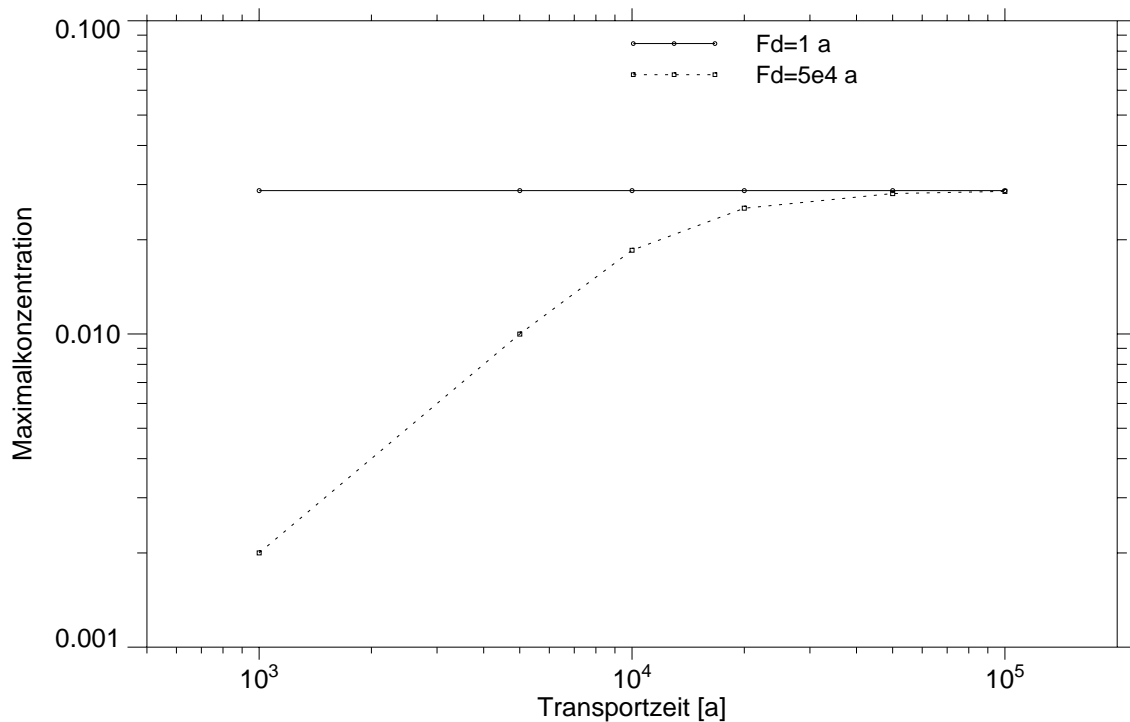


Abb. 3.3: Variation der Fluid-Transportzeit durch Veränderung des Volumenstroms bei konstantem Querschnitt.

Bei einer Freisetzungsdauer von $5 \cdot 10^4$ Jahren steigt die Maximalkonzentration mit zunehmender Fluidtransportzeit zuerst proportional zu dieser an. Dies ist der Bereich, in dem die Freisetzung einer konstanten Quelle entspricht. Der mit abnehmender Fluidtransportzeit ansteigende Volumenstrom bewirkt in diesem Bereich bei konstanter Einstromrate einen Verdünnungseffekt, was die Erklärung für den Anstieg der Maximalkonzentration ist. Mit weiter ansteigender Fluidtransportzeit verläuft die Kurve über einen Übergangsbereich in die Waagerechte und verhält sich dann wie die eines δ -Impulses. Das ist etwa dann der Fall, wenn die Fluidtransportzeit gleich der Freisetzungsdauer ist. In diesem Fall ist die Schadstofftransportzeit zehnmal größer als die Freisetzungsdauer aufgrund des Retardationsfaktors von 10. Dieser Effekt wird ausführlich in Kapitel 3.7 diskutiert.

3.3.2 Variation des Querschnitts

In Abb. 3.4 ist der oben genannte 2. Fall - Veränderung der Fluidtransportzeit durch Variation des Querschnitts der Strömungsröhre - dargestellt. Das Verhalten unterscheidet sich charakteristisch vom 1. Fall. Die Maximalkonzentration nimmt bei einem δ -Impuls mit steigender Transportzeit ab. Dieser Effekt ist auf die zunehmende Verdünnung mit Erhöhung des Querschnitts und damit des Fluidvolumens zurückzuführen. Aus Gleichung (2) im Anhang ist ersichtlich, daß die Maximalkonzentration umgekehrt proportional zur Querschnittsfläche ist. Die Variation des Querschnitts der Strömungsröhre wirkt sich also in gleicher Weise auf die Maximalkonzentration aus wie die Variation der Weglänge.

Bei hoher Freisetzungsdauer von $5 \cdot 10^4$ Jahren, tritt bei Fluidtransportzeiten $< 10^4$ Jahre, bei denen die Freisetzung als konstante Quelle beschrieben werden kann, keine Abhängigkeit von der Fluidtransportzeit auf.

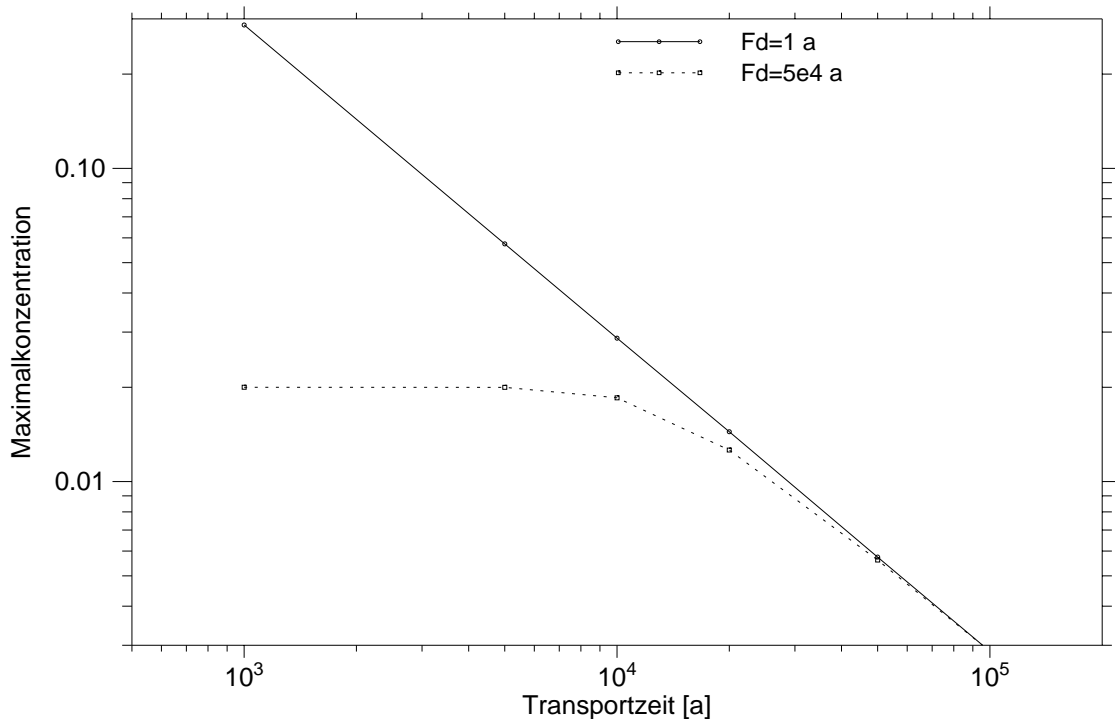


Abb. 3.4: Variation der Fluid-Transportzeit durch Veränderung des Querschnitts bei konstantem Volumenstrom.

3.4 Dispersionslänge

Eine Variation der Dispersionslänge bewirkt bei einem δ -Impuls eine Zu- bzw. Abnahme der dispersiven Verbreiterung der Schadstoffwolke. Aus Abb. 3.5 ist zu erkennen, daß die Maximalkonzentration mit abnehmender Dispersionslänge bei einer Freisetzungsdauer von 1 Jahr zunimmt. Der analytischen Lösung, Gleichung (2), kann man entnehmen, daß dieser Anstieg der Maximalkonzentration umgekehrt proportional zur Wurzel der Dispersionslänge ist.

Für eine konstante Quelle hat die Dispersionslänge keinen Einfluß auf die Maximalkonzentration. Eine ansteigende Dispersionslänge bewirkt lediglich eine Abflachung des Profils der Konzentrationsfront.

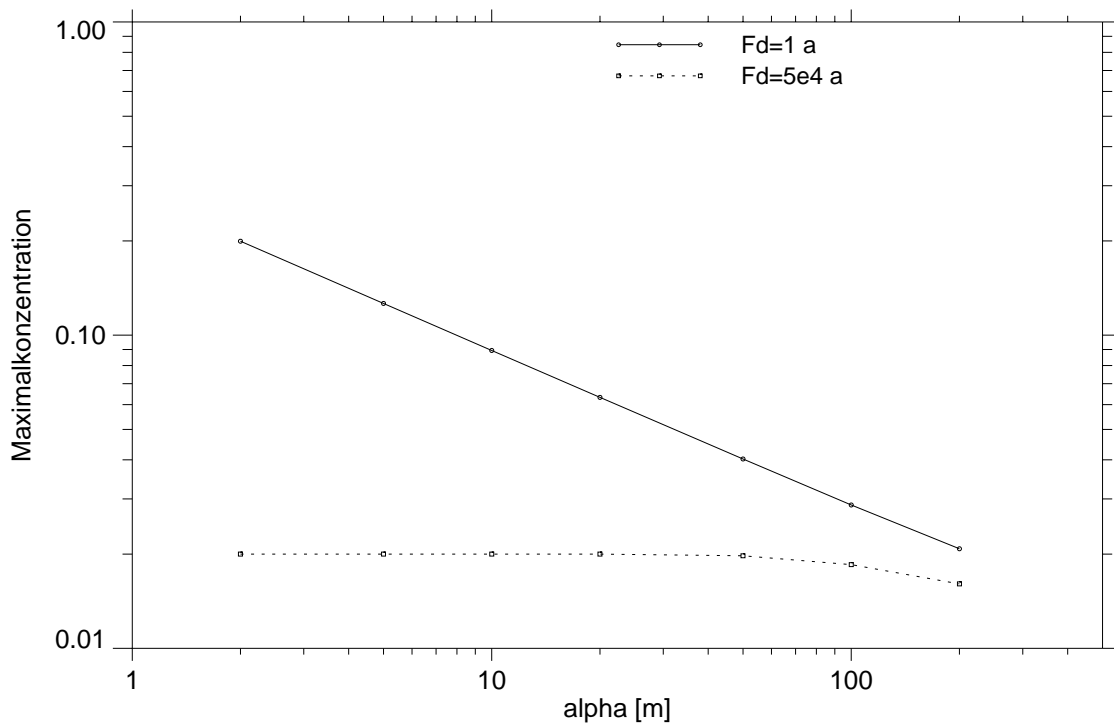


Abb. 3.5: Variation der Dispersionslänge bei zwei verschiedenen Freisetzungsdauern.

3.5 Diffusion

Die Diffusion hat unter den hier vorliegenden Randbedingungen keinen Einfluß auf die Maximalkonzentration. Das ist aus Gleichung (1) ersichtlich. Die Dispersion D setzt sich zusammen aus hydraulischer Dispersion und Diffusion, wobei für die hydraulische Dispersion in CHET1 nach einem Ansatz von Scheidegger das Produkt aus Dispersionslänge α und Abstandsgeschwindigkeit u verwendet wird. D_m ist der molekulare Diffusionskoeffizient.

$$D = \alpha u + D_m \quad (1)$$

Die Dispersionslänge α ist im Referenzfall gleich 100 m, die Abstandsgeschwindigkeit u beträgt 1 m/a, das Produkt aus beiden also 100 m²/a. Selbst bei einem Diffusionskoeffizienten von 1 m²/a beträgt der Anteil der Diffusion nur 1/100 an der Dispersion. Entsprechend ergibt sich für die Maximalkonzentration, die umgekehrt proportional zur Wurzel der Dispersion ist, bei den hier gewählten Diffusionskoeffizienten keine Abhängigkeit von der Diffusion.

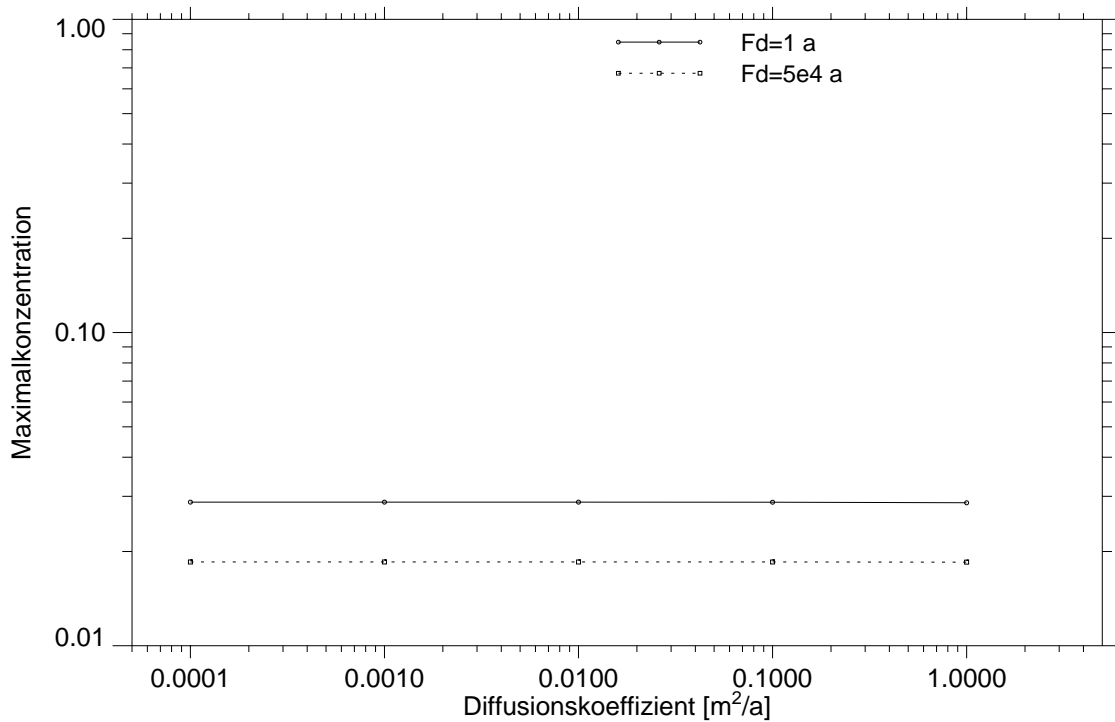


Abb. 3.6: Variation des Diffusionskoeffizienten D_m für zwei verschiedene Freisetzungsdauern.

Abb. 3.7 zeigt den zunehmenden Einfluß der Diffusion mit abnehmender Dispersionslänge. Man erkennt, daß ein Diffusionskoeffizient von $1.0 \text{ m}^2/\text{a}$ erst bei Dispersionslängen kleiner 10 m einen merkbaren Einfluß auf die Maximalkonzentration hat.

Wenn man davon ausgeht, daß die Dispersionslänge 1/100 der Gebietslänge beträgt und die Diffusionskoeffizienten üblicherweise im Bereich von $1 \cdot 10^{-5}$ bis $1 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2/\text{a}$ liegen, wird deutlich, daß die Diffusion unter den hier gewählten Bedingungen kein relevanter Effekt bei der Schadstoffausbreitung ist.

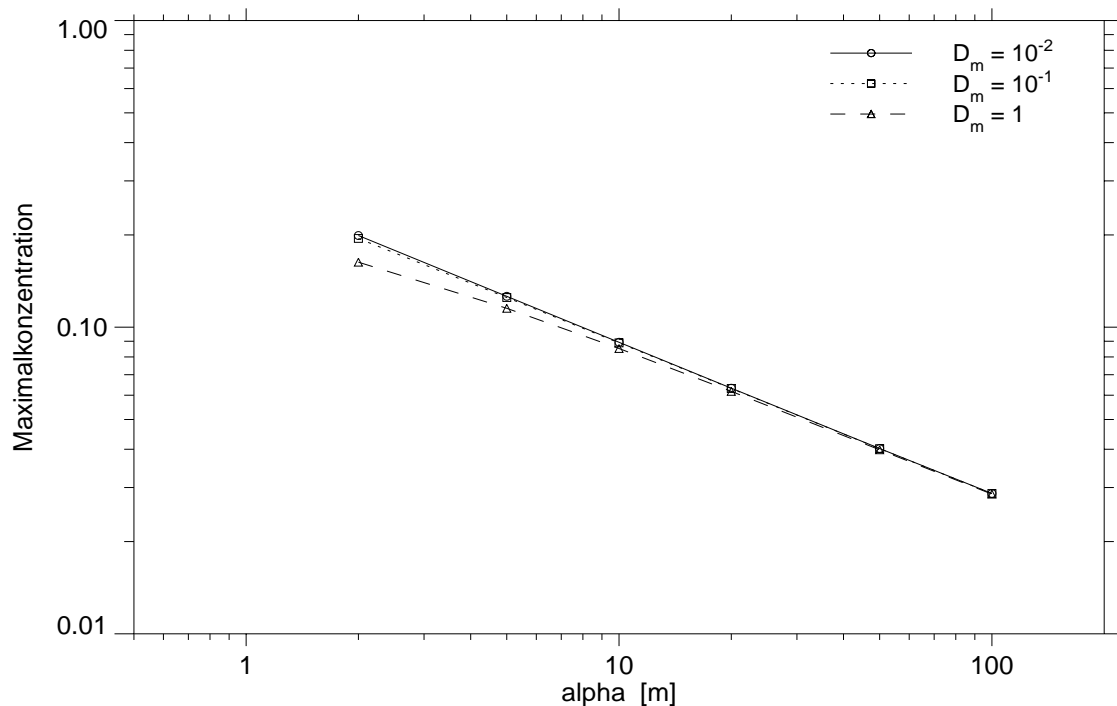


Abb. 3.7: Variation der Dispersionslänge bei drei verschiedenen Diffusionskoeffizienten D_m (in m^2/a). Der Kurvenverlauf $D_m = 10^{-2}$ ist identisch zu dem von $D_m = 10^{-4}$.

3.6 Retardationsfaktor

Der Retardationsfaktor stellt den reziproken Wert des mobilen Schadstoffanteils dar. Er hat sowohl Einfluß auf die Schadstofftransportzeit als auch auf die Maximalkonzentration. Im Falle des δ -Impulses steigt die Maximalkonzentration am Ende des Transportweges mit abnehmendem Retardationsfaktor an (Abb. 3.8). Das ist durch den entsprechend er-

höhten Anteil des Schadstoffs in der mobilen Phase zu erklären. Aus Gleichung (2) ist ersichtlich, daß die Maximalkonzentration am Beobachtungsort $x=ut$ umgekehrt proportional zum Retardationsfaktor ist.

Bei einer konstanten Quelle ist die Maximalkonzentration unabhängig vom Retardationsfaktor. Es wird ausschließlich die Ankunftszeit der Konzentrationsfront entsprechend dem Retardationsfaktor verändert.

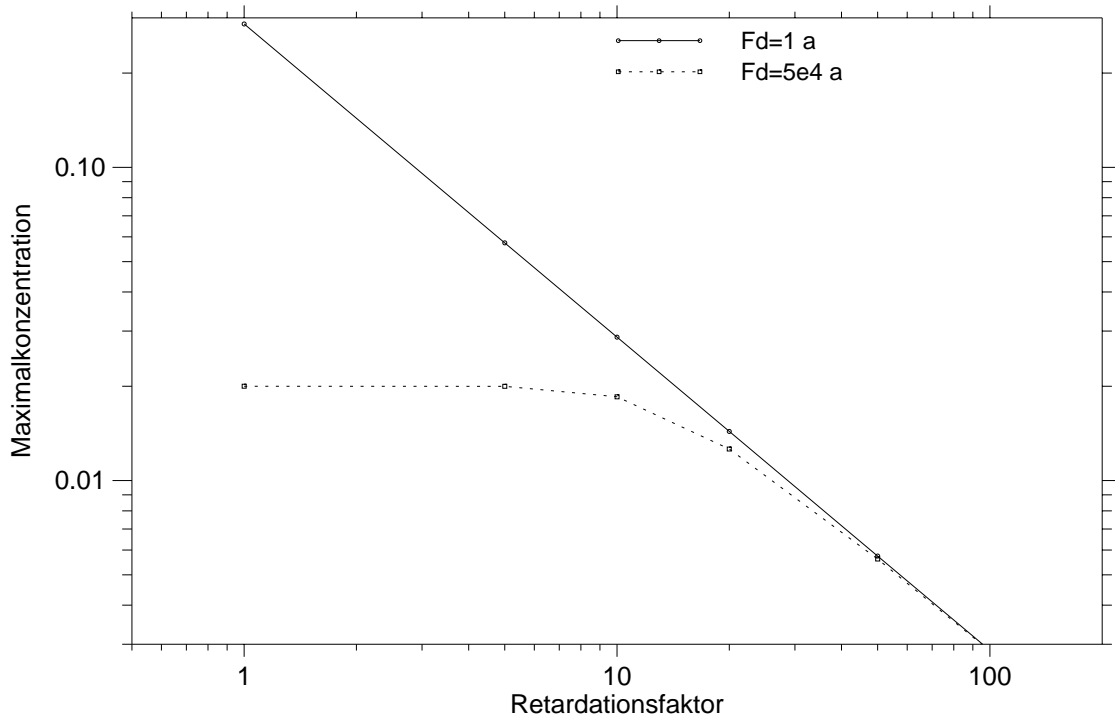


Abb. 3.8: Variation des Retardationsfaktors.

3.7 Freisetzungsdauer und Retardationsfaktor

Die Variationsrechnungen, bei denen Freisetzungsdauer und Retardationsfaktor kombiniert variiert wurden, sollen zusätzliche Informationen zur Charakterisierung der Schadstoffausbreitung hinsichtlich eines δ -Impulses bzw. einer konstanten Quelle liefern. Die entscheidende Größe, die bestimmt, ob ein δ -Impuls oder eine konstante Quelle vorliegt, ist das Verhältnis von Freisetzungsdauer zu Schadstofftransportzeit.

In Abb. 3.9 ist der Zusammenhang zwischen Maximalkonzentration am Entnahmepunkt und Freisetzungsdauer für drei unterschiedliche Schadstofftransportzeiten (Retardationsfaktoren) dargestellt. Bei der Variation der Freisetzungsdauer wurde, wie in Kapitel 3.6 beschrieben, jeweils die gleiche Gesamtmenge des Schadstoffes, konstant über den entsprechenden Zeitraum verteilt, zugegeben.

Bei einem Retardationsfaktor R_f von 1 entspricht die Transportzeit des Schadstoffes der des Fluids von 10^4 Jahren. Bei einem R_f -Wert von 100 beträgt die Schadstofftransportzeit entsprechend 10^6 Jahre. Aus Abb. 3.9 geht hervor, daß in dem Bereich, in dem die Freisetzungsdauer gegenüber der Transportzeit des Schadstoffs mehr als einen Faktor 10 kleiner ist, der Transport des Schadstoffs als δ -Impuls beschrieben werden kann.

Wenn die Freisetzungsdauer größer als 0.5 bis 0.8 der Schadstofftransportzeit ist, kann die Schadstofffreisetzung als konstante Quelle beschrieben werden. In diesem Fall nimmt die Maximalkonzentration mit steigender Freisetzungsdauer ab.

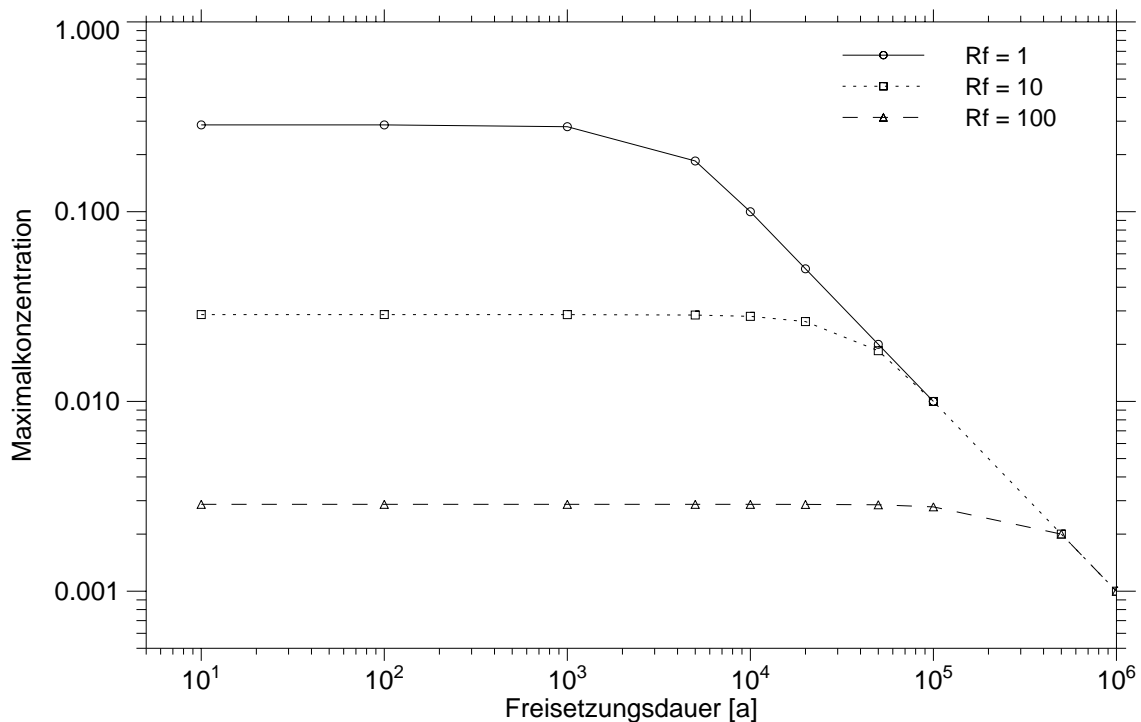


Abb. 3.9: Variation der Freisetzungsdauer bei drei verschiedenen Retardationsfaktoren.

In Abb. 3.10 sind die Ortsabhängigkeiten der Konzentration dargestellt. Für eine Schadstoffinjektion, die einem δ -Impuls entspricht, erhält man als Ortsabhängigkeit der Konzentration eine Gaußkurve. Die Lage ihres Maximums bewegt sich mit der Schadstoffgeschwindigkeit durch das Ausbreitungsgebiet. Die Dispersion bewirkt eine Verbreiterung und Abflachung der Gaußkurve. Die Gaußkurven haben am gleichen Beobachtungsort eine identische Form. Sie unterscheiden sich ausschließlich in der Höhe, was der Effekt des unterschiedlichen mobilen Anteils aufgrund der verschiedenen Retardationsfaktoren ist.

Bei konstanter Quelle stellt sich ein Konzentrationsplateau über einen Teil des Transportweges ein. Die Dispersion bewirkt ausschließlich eine Abflachung des Profils der Konzentrationsfront.

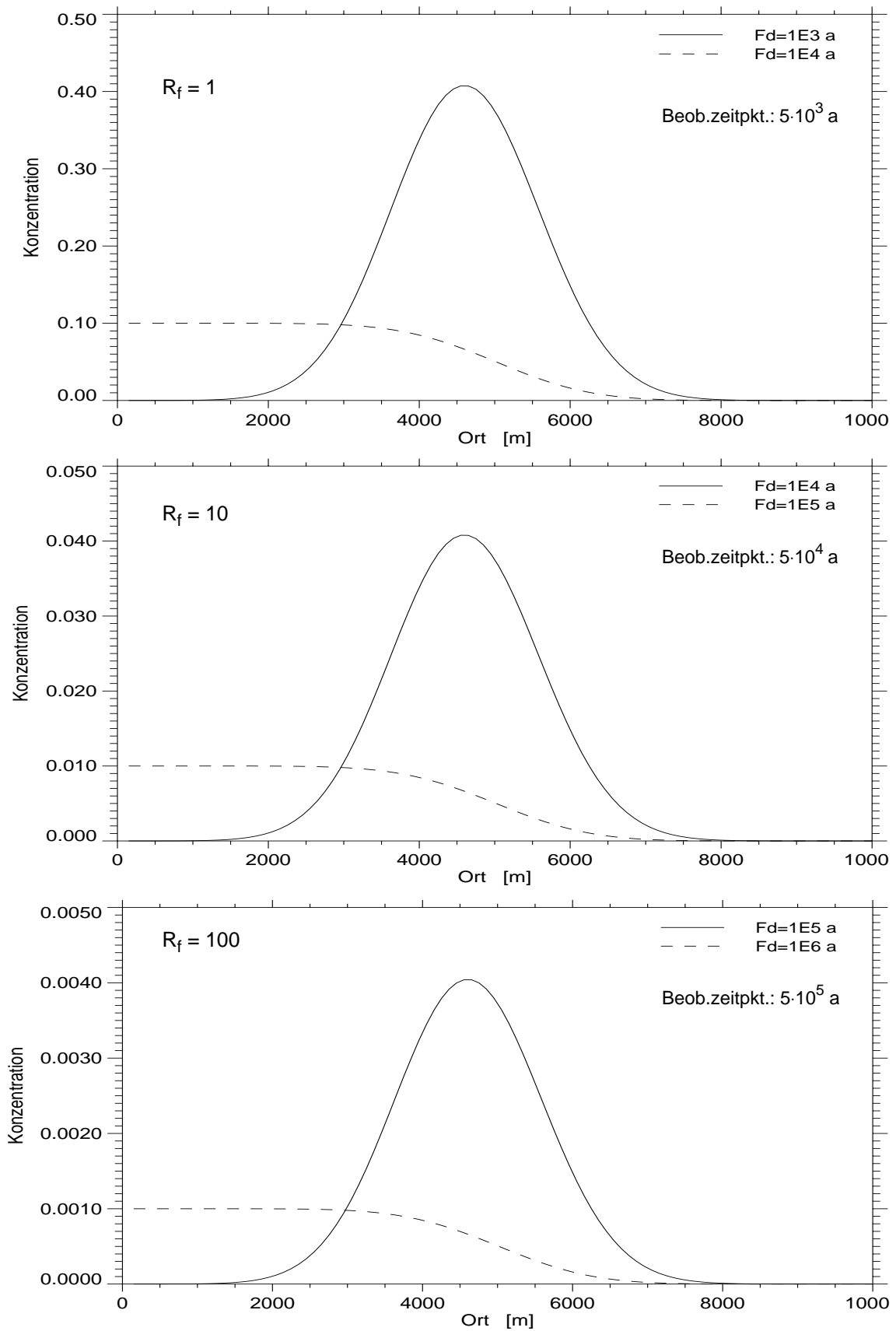


Abb. 3.10: Konzentrations- /Ortsverteilungen bei drei verschiedenen R_f -Werten.

4 Heterogenes Gebiet hinsichtlich der Sorption

Ziel dieser Rechnungen ist es, festzustellen, welche Auswirkungen ein Ausbreitungsweg, der in Gebiete mit unterschiedlichen Sorptionseigenschaften aufgeteilt ist, auf den Schadstofftransport hat. Dazu wurden drei unterschiedliche Fälle untersucht.

4.1 Fall 1

In diesem Fall sollte überprüft werden, ob ein Unterschied in der Maximalkonzentration am Ende des Transportwegs auftritt, abhängig davon in welcher Reihenfolge ein Gebiet mit starker Sorption und ein Gebiet ohne Sorption angeordnet sind. Für diese Rechnungen wurde das Modellgebiet in drei gleichgroße Abschnitte, Teilgebiet 1 bis 3 unterteilt, wobei die Retardationsfaktoren im hinteren Teilgebiet, in dem der Beobachtungsort liegt, jeweils identisch sind. Die verwendeten Retardationsfaktoren sind in den Abbildungen mit angegeben. Dieser Fall wird im folgenden Fall 1 genannt. Er untergliedert sich in Fall 1a und 1b. Bei beiden beträgt der R_f -Wert in Teilgebiet 3 gleich 10. In den ersten beiden Teilgebieten sind die Retardationsfaktoren in Fall 1b gegenüber 1a vertauscht.

In Abb. 4.1 sind die ortsabhängigen Konzentrationen für Fall 1a und 1b aufgetragen. Zu beachten ist, daß der Maßstab der Ordinate in Abb. 4.1a und 4.1b nicht übereinstimmt. Im ersten Teilgebiet beträgt der R_f -Wert im Fall 1a gleich 1, dort wird der Schadstoff also nicht retardiert, und im Fall 1b ist $R_f = 10$. Entsprechend ist die Maximalkonzentration am gleichen Ort im Fall 1b jeweils um das zehnfache erniedrigt. Im zweiten Teilgebiet sind die R_f -Werte für Fall 1a gleich 10 und für Fall 1b gleich 1. In Fall 1a durchläuft der Schadstoff also ein Teilgebiet mit höherer Sorption, das Konzentrationsmaximum nimmt mit zunehmender Beobachtungszeit entsprechend stark ab. In Fall 1b findet der Übergang von einem Teilgebiet mit hoher Sorption in ein Teilgebiet ohne Rückhaltung statt. Das bedeutet, daß der Ausstrom aus Teilgebiet 1 quasi als konstante Quelle wirkt. Die in Teilgebiet 2 eingedrungene Schadstoffmenge wird dort sehr schnell transportiert, es bildet sich ein über den Ort nahezu konstantes Konzentrationsniveau aus. Im dritten Teilgebiet beträgt der R_f -Wert in beiden Fällen 10.

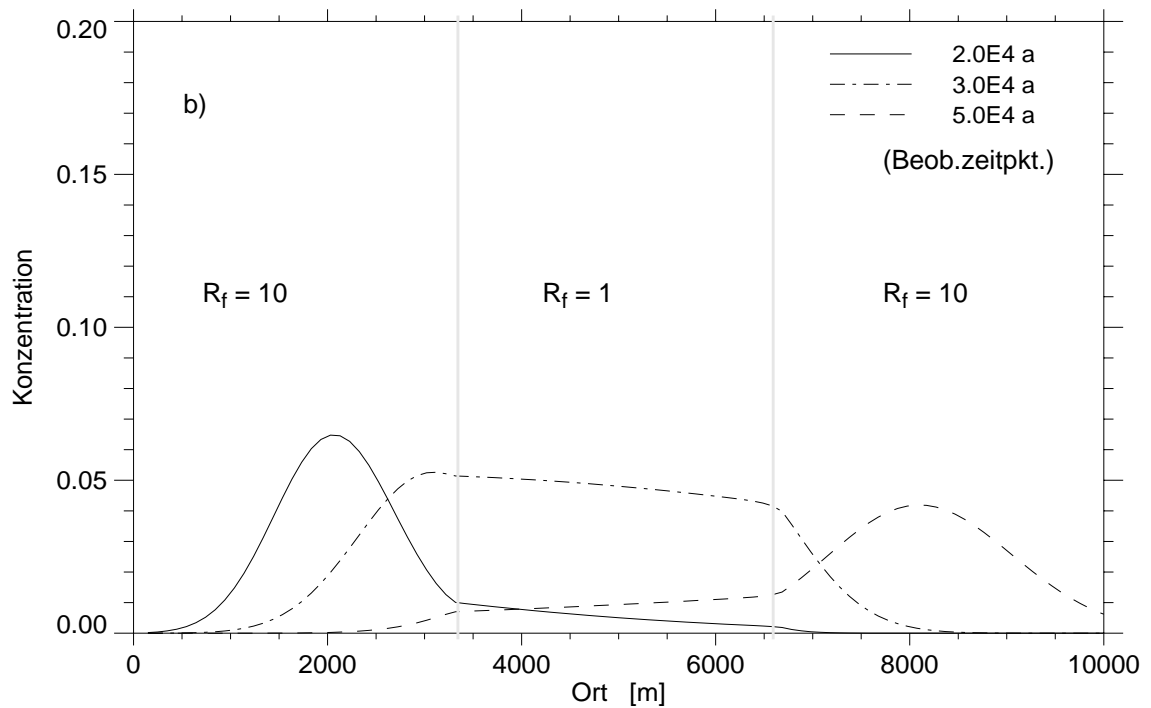
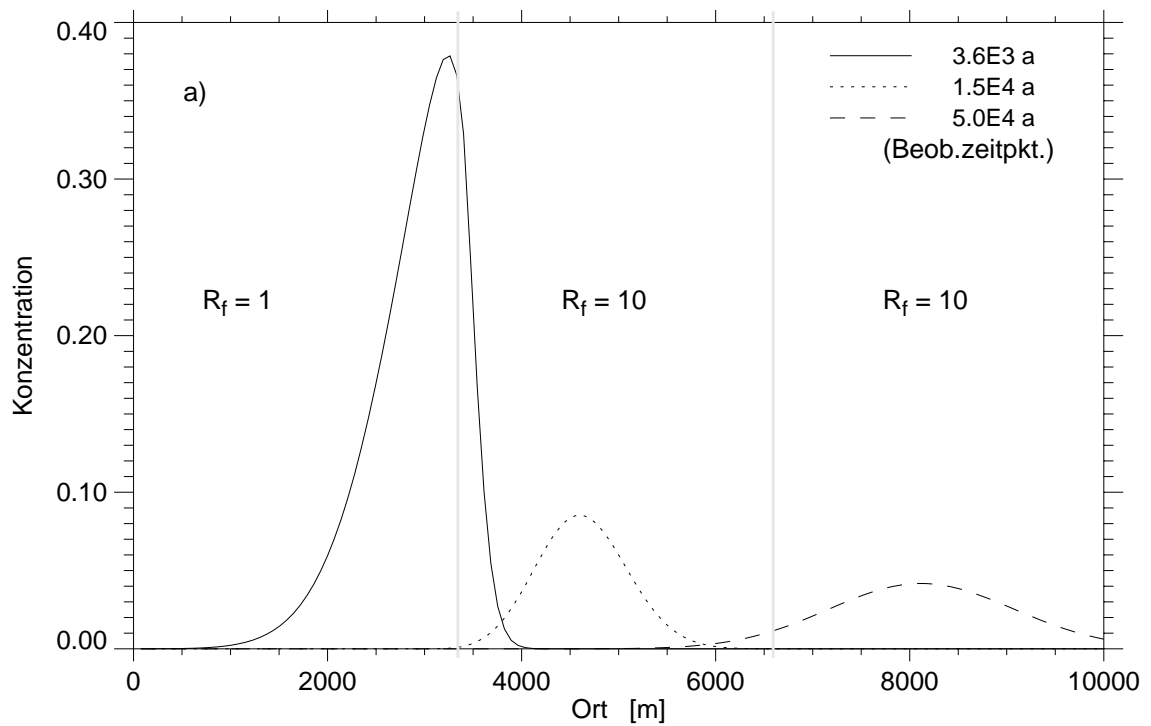


Abb. 4.1: Konzentrations-Ortsverteilungen für ein heterogenes Modellgebiet mit drei hinsichtlich der Sorption verschiedenen Teilgebieten. In a) und b) sind die Sorptionseigenschaften der Teilgebiete 1 und 2 vertauscht

In Fall 1a bedeutet das, daß keine Änderung der Sorptionseigenschaften auftreten. In Fall 1b wird die schnell durch Teilgebiet 2 transportierte Schadstoffmenge sehr stark abgebremst. Man erhält als Ortsabhängigkeit der Konzentration eine Gaußkurve, die vollständig identisch mit der in Fall 1a zum gleichen Beobachtungszeitpunkt von $5 \cdot 10^4$ Jahren erhaltenen ist.

Wenn man gleich lange Teilgebiete vorliegen hat, macht es also keinen Unterschied für die Zeitabhängigkeit der Konzentration am Beobachtungsort, ob zuerst ein Gebiet niedriger und anschließend ein Gebiet hoher Sorption durchlaufen wird oder umgekehrt. Voraussetzung ist, daß die Retardationsfaktoren im Gebiet des Beobachtungsortes identisch sind.

4.2 Fall 2

Mit einer weiteren Rechnung wurde überprüft, ob man durch eine geeignete Mittelung über die Retardationsfaktoren, ein aus zwei Teilgebieten mit unterschiedlichen Sorptionseigenschaften bestehenden Ausbreitungsweg durch einen Ausbreitungsweg mit einheitlichen Sorptionseigenschaften beschreiben kann. Dieser Fall wird im folgenden Fall 2 genannt. Die Ergebnisse werden mit denen aus Fall 1 verglichen.

Hier werden die in Fall 1, Abb. 4.1, angegebenen Teilgebiete 1 und 2 zu einem Gebiet mit gleicher Gesamtgebietslänge zusammengefaßt. Als Retardationsfaktor wird für dieses Gebiet ein arithmetischer Mittelwert von 5.5 angenommen. Das Teilgebiet am Ende des Transportweges ist wiederum identisch mit dem hintersten Teilgebiet in Fall 1. Die Ortsverteilungen der Konzentration in den beiden Teilgebieten sind in Abb. 4.2 dargestellt. An der Unstetigkeit der mittleren Kurve ist der Übergang in das Teilgebiet mit stärkerer Sorption erkennbar. Ein direkter Vergleich der Ortsverteilungen im hintersten Teilgebiet der hier betrachteten Fälle 1 und 2 ist in Abb. 4.3 dargestellt. Man erkennt, daß die Kurven nicht übereinstimmen. Das Maximum der Kurve von Fall 2 ist um den Faktor 1.3 höher als das Maximum der Kurve für Fall 1 bei gleichzeitig schmalere Kurvenform. Man erhält also nicht die gleichen Ergebnisse, wenn man Gebiete mit unterschiedlichen Retardationsfaktoren zu einem Gebiet zusammenfaßt und für dieses Gebiet einen über die Teilgebiete gemittelten arithmetischen Mittelwert als Retardationsfaktor verwendet.

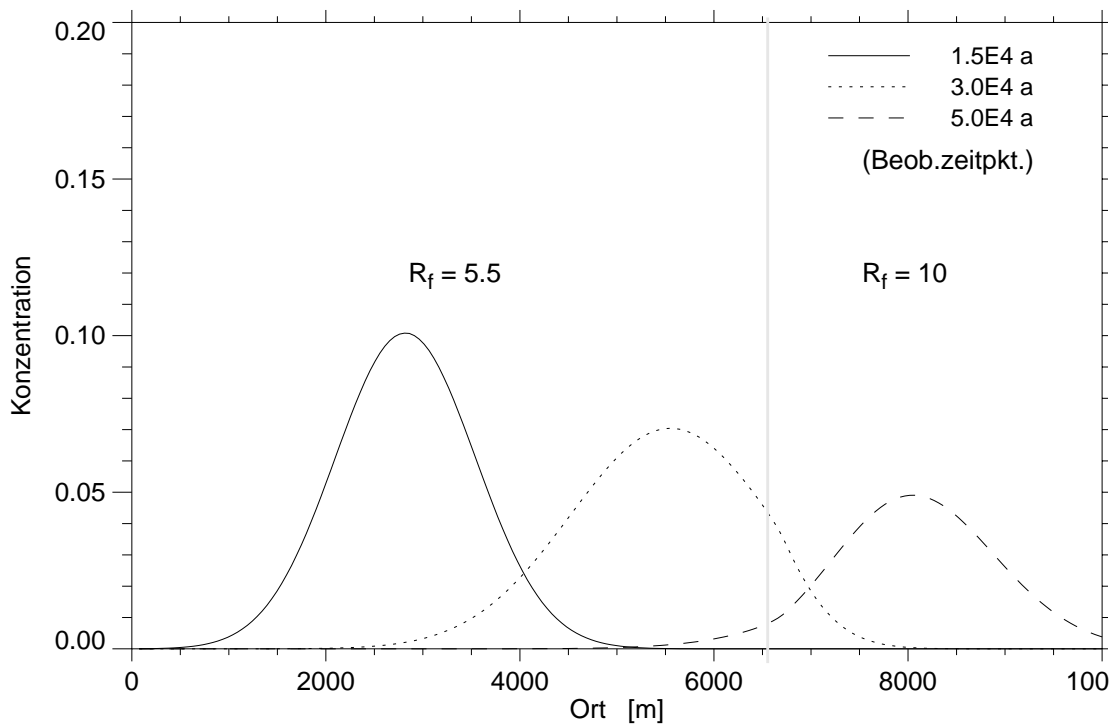


Abb. 4.2: Konzentrations-Ortsverteilungen für ein heterogenes Modellgebiet mit zwei hinsichtlich der Sorption verschiedenen Teilgebieten.

4.3 Fall 3

In einer weiteren Rechnung (Fall 3) wurde überprüft, ob man gleiche Ergebnisse erhält, wenn man die Länge eines Teilgebiets um einen bestimmten Faktor verkleinert und gleichzeitig den Retardationsfaktor um den gleichen Faktor vergrößert. Dazu wurde die Gebietseinteilung gegenüber Fall 1b modifiziert. Die Teilgebiete 1 und 3 sind identisch, die Länge von Teilgebiet 2 wird um einen Faktor 10 verkürzt, der Retardationsfaktor dieses Teilgebiets um den Faktor 10 erhöht. Für diesen Fall wurde keine Auftragung der Ortsverläufe in allen drei Teilgebieten dargestellt. Die Ortsabhängigkeit der Konzentration zum Beobachtungszeitpunkt $5 \cdot 10^4$ Jahre wurde entsprechend um $9/10$ der Teilgebietslänge 2 räumlich transformiert und ebenfalls in Abb. 4.3 dargestellt.

Auch diese Kurve stimmt nicht mit der für Fall 1 überein. Die Kurve verläuft geringfügig flacher als die des Referenzfalles 1 und hat eine etwas breitere Kurvenform.

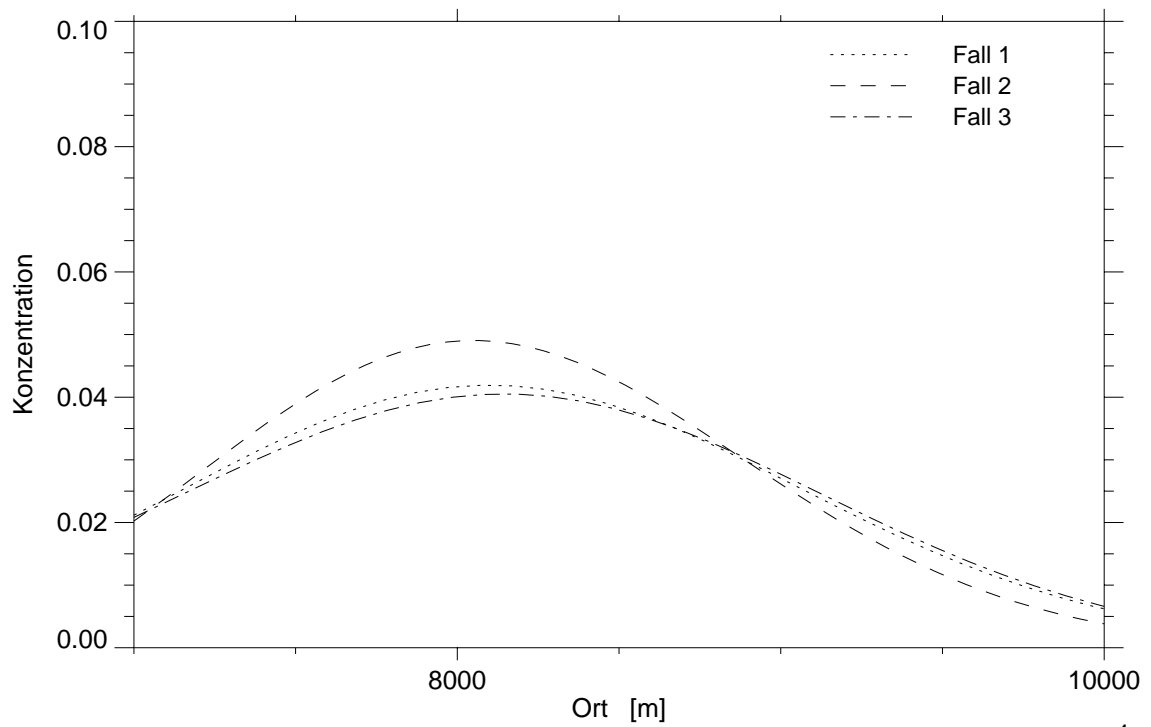


Abb. 4.3: Konzentrations-Ortsverteilungen bei einer Beobachtungszeit von $5 \cdot 10^4$ Jahren. Fall 1: s. Abb. 4.1b. Fall 2: s. Abb.4.2. Fall 3: $R_f = 10$, Länge eines Teilgebiets um den Faktor 10 reduziert.

5 Zusammenfassung

Aus den Ergebnissen der durchgeführten Ausbreitungsrechnungen kann der Einfluß der einzelnen Parameter auf die Maximalkonzentration, die am Beobachtungsort auftritt wie folgt zusammengefaßt werden:

1) Freisetzungsdauer

Das Verhältnis von Freisetzungsdauer zu Schadstofftransportzeit bestimmt das Transportverhalten der Schadstoffwolke entscheidend.

- Wenn die Freisetzungsdauer gegenüber der Schadstofftransportzeit um einen Faktor 10 kleiner ist, kann der Transport des Schadstoffs als δ -Impuls beschrieben werden.
- Wenn die Freisetzungsdauer ca. 0.5 bis 0.8 der Schadstofftransportzeit entspricht kann die Freisetzung als konstante Quelle beschrieben werden.

Bei allen anderen Parametervariationsrechnungen wurde jeweils der Verlauf der Maximalkonzentration für die beiden Grenzfälle, für einen δ -Impuls und für eine konstante Quelle, untersucht.

2) Weglänge

- δ -Impuls: Die Maximalkonzentration verhält sich umgekehrt proportional zur Gebietslänge. Diese Abhängigkeit ergibt sich daraus, daß die Dispersionslänge α mit der Gebietslänge variiert wird und jeweils 1/100 der Gebietslänge beträgt. Bei konstanter Dispersionslänge träte nur eine Abhängigkeit von der Wurzel der Gebietslänge auf.
- konstante Quelle: Die Maximalkonzentration ist unabhängig von der Gebietslänge.

3) Fluid-Transportzeit

- 1) Variation des Volumenstroms:
- δ -Impuls: Die Maximalkonzentration ist unabhängig von der Fluid-Transportzeit.

- konstante Quelle: Die Maximalkonzentration steigt proportional zu der Transportzeit an. Dieser Effekt tritt aufgrund der abnehmenden Verdünnung hervorgerufen durch den verringerten Volumenstrom auf.
- 2) Variation des Querschnitts:
- δ -Impuls: Die Maximalkonzentration nimmt mit steigender Fluidtransportzeit ab.
- konstante Quelle: Die Maximalkonzentration ist unabhängig von der Fluidtransportzeit.

4) Dispersion

- δ -Impuls: Die Maximalkonzentration verhält sich umgekehrt proportional zur Wurzel der Dispersionslänge.
- konstante Quelle: Die Dispersion hat keinen Einfluß auf die Maximalkonzentration.

5) Diffusion

- δ -Impuls und konstante Quelle: Die Diffusion hat keinen Einfluß auf die Maximalkonzentration, wenn man zugrundelegt, daß die Diffusionskoeffizienten üblicherweise im Bereich 10^{-5} bis 10^{-2} m^2/a liegen und die Dispersionslänge etwa 1/100 der Gebietslänge beträgt, was bei dem hier verwendeten Referenzmodellgebiet 100m entspricht.

6) Retardationsfaktor

- δ -Impuls: Die Maximalkonzentration verhält sich umgekehrt proportional zum Retardationsfaktor.
- konstante Quelle: Der Retardationsfaktor hat keinen Einfluß auf die Maximalkonzentration.

Für ein hinsichtlich der Sorption heterogenes Modellgebiet wurden drei unterschiedliche Fälle untersucht aus denen sich folgende Konsequenzen ableiten lassen.

- Wenn man entlang eines Ausbreitungsweges gleichlange Gebiete mit jeweils unterschiedlichen Sorptionseigenschaften vorliegen hat, erhält man bei Verwendung des K_d -Konzepts identische zeitabhängige Konzentrationsverläufe am Ende des Transportwegs unabhängig von der Reihenfolge, in der die Gebiete angeordnet sind. Voraussetzung ist allerdings, daß die Gebiete am Ende des Ausbreitungsweges identische Sorptionseigenschaften haben.
- Der Ausbreitungsweg eines Schadstoffs durch zwei Teilgebiete mit unterschiedlichen Retardationsfaktoren läßt sich nicht durch einen Ausbreitungsweg mit einem Gebiet gleicher Gesamtlänge und einem über Teilgebiet 1 und 2 arithmetisch gemittelten Retardationsfaktor beschreiben. Die zeitabhängigen Konzentrationen am Beobachtungsort unterscheiden sich voneinander.
- Wenn man die Länge eines Teilgebiets um einen bestimmten Faktor verkürzt und gleichzeitig den Retardationsfaktor um diesen Faktor erhöht, erhält man unterschiedliche Konzentrationsverläufe am Ende des Transportwegs.

6 Literatur

- [1] Storck, R.; Buhmann, D.; Hirsekorn, R.-P.; Nies, A.; Rausch, H. : EMOS: Programmpaket zur Langzeitsicherheitsanalyse für radioaktive Abfälle, Version 4. GSF-Bericht 32/90. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Neuherberg 1990.

- [2] Kühle, T.; Zude, F.; Lührmann, L.: Das eindimensionale Transportprogramm CHET1 unter Berücksichtigung der Sorption nach dem K_d -Konzept. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-124, Braunschweig 1996.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Variation der Freisetzungsdauer.....	5
Abb. 3.2	Variation der Gebietslänge für zwei unterschiedliche Freisetzungsdauern. Die Dispersionslänge beträgt jeweils 1/100 der Weglänge	6
Abb. 3.3	Variation der Fluid-Transportzeit durch Veränderung des Volumenstroms bei konstantem Querschnitt	8
Abb. 3.4	Variation der Fluid-Transportzeit durch Veränderung des Querschnitts bei konstantem Volumenstrom	9
Abb. 3.5	Variation der Dispersionslänge bei verschiedenen Freisetzungsdauern.....	10
Abb. 3.6	Variation des Diffusionskoeffizienten D_m für verschiedene Freisetzungsdauern.....	11
Abb. 3.7	Variation der Dispersionslänge bei drei verschiedenen Diffusionskoeffizienten D_m (in m^2/a).....	12
Abb. 3.8	Variation des Retardationsfaktors.....	13
Abb. 3.9	Variation der Freisetzungsdauer bei verschiedenen R_f -Werten	14
Abb. 3.10	Konzentrations- /Ortsverteilungen bei drei verschiedenen R_f -Werten	16
Abb. 4.1	Konzentrations-Ortsverteilungen für ein heterogenes Modellgebiet mit drei hinsichtlich der Sorption verschiedenen Teilgebieten	18
Abb. 4.2	Konzentrations-Ortsverteilungen für ein heterogenes Modellgebiet mit zwei hinsichtlich der Sorption verschiedenen Teilgebieten.....	20
Abb. 4.3	Konzentrations-Ortsverteilungen bei Beobachtungszeit $5 \cdot 10^4$ Jahre ..	21

Anhang - Analytische Lösung für den δ -Impuls

Unter der Annahme einer unendlich geringen Konzentration im Unendlichen und bei Betrachtung des gesamten Ortsraumes lautet die analytische Lösung der eindimensionalen Transportgleichung, wenn zur Zeit $t=0$ bei $x=0$ eine Schadstoffmasse ΔM in den Aquifer gegeben wird:

$$c(x, t) = \frac{M}{2 \sqrt{(\pi \alpha u' + D_m / R) t'}} \exp\left(-\frac{(x - u' t')^2}{4(\alpha u' t' + D_m / R) t'}\right) \quad (1)$$

Bei Vernachlässigung der Diffusion erhält man für die maximale Konzentration bei $x=ut$

$$c_{max} = \frac{M}{2 \sqrt{\pi \alpha u' t'}} \quad (2)$$

mit

$$M = \frac{\Delta M}{nAR} \quad (3)$$

$u' = u/R$ (Schadstoffgeschwindigkeit)

$t' = tR$ (Schadstofftransportzeit)

$u =$ Fluidgeschwindigkeit

$t =$ Fluidtransportzeit

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

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

Forschungsinstitute
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