



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

**LOPOS: Programm
zur Berechnung der
Schadstofffreisetzung
aus netzwerkartigen
Grubengebäuden**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

LOPOS: Programm zur Be- rechnung der Schadstoff- freisetzung aus netzwerk- artigen Grubengebäuden

Brigitte Boese
Dieter Buhmann
Rol-Peter Hirsekorn

April 1999

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrundeliegen-
den Arbeiten wurden mit Mitteln
des Bundesministeriums für Bildung,
Wissenschaft, Forschung und Tech-
nologie (BMBF) unter dem Förder-
kennzeichen 02E 8835-6 gefördert.

Die Arbeiten wurden von der Ge-
sellschaft für Anlagen und Reaktor-
sicherheit (GRS) mbH durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt
dieser Veröffentlichung liegt allein bei
den Autoren.

GRS - 157
ISBN 3-931995-19-4

Deskriptoren:

Emission, Schadstoff, Endlagerung, Endlager, Simulation, Langzeitsicherheit, Computer Code

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Zielsetzung	2
1.3	Vorgehensweise	3
2	Programmstruktur	7
2.1	Zeitliche Diskretisierung	7
2.2	Steuerung der Zeitschrittweiten	8
2.2.1	Ermittlung einer maximalen Zeitschrittweite	9
2.2.2	Ansteuerung eines Zeitpunktes	14
2.3	Aufteilung in Segmente	17
2.3.1	Erstellung einer Eingabedatei mit der Segmentstruktur	22
2.3.2	Ausgangsgrößen eines Segmentmodells	24
2.4	Ablauf einer Freisetzungsberechnung	26
2.4.1	Datenversorgung	28
2.4.2	Schadstoffauswahl	30
2.4.3	Die Zeitschleife des Programms Lopos2	31
2.4.4	Die Segmentschleife	32
2.4.5	Rechnungen außerhalb der Segmentschleife	33
2.5	Datenübergabe an weitere Module	33
2.6	Ergebnisdarstellung	34
3	Die Segmentmodelle	35
3.1	Behandlung der physikalischen und chemischen Effekte	38
3.1.1	Zusammenwirken der Effekte	41
3.1.2	Beschreibung der Laugenbewegung	46
3.1.3	Direkter Weitertransport eingedrungener Lauge	51
3.2	Einzelbeschreibung der Segmentmodelle	55
3.2.1	Modelle teil- und vollversetzter Kammern	59
3.2.2	Modell eines Einlagerungsbohrlochs	63
3.2.3	Modelle versetzter Strecken	66
3.2.4	Modell einer Auflockerungszone	69

3.2.5	Modell einer offenen Strecke	70
3.2.6	Modellierung der Schnittstellen zum Deckgebirge	72
4	Modellannahmen und Effekte im Grubengebäude	77
4.1	Modellierung der Konvergenz von Salzgestein	79
4.2	Auswirkungen der Konvergenz	82
4.3	Permeabilität und Widerstand von versetzten und offenen Strecken	84
4.3.1	Permeabilität von Versatzmaterial	85
4.3.2	Strömungswiderstand von versetzten und offenen Strecken	85
4.4	Laugentransport durch Druckgradienten	87
4.4.1	Berechnung des Laugendruckes	88
4.4.1.1	Randbedingungen für leere oder teilweise gefüllte Segmente	90
4.4.1.2	Anfangsbedingung für den Druck in gefüllten Segmenten	92
4.4.2	Berechnung der Laugenströme und der Laugenvolumina	93
4.5	Mobilisierung der Schadstoffe	94
4.5.1	Berechnung des Behälterausfalls	95
4.5.1.1	Gleichverteilte Lebensdauer der Behälter	97
4.5.1.2	Exponentialverteilte Lebensdauer der Behälter	99
4.5.1.3	Normalverteilte Lebensdauer der Behälter	100
4.5.2	Korrosion der Abfallmatrix	102
4.5.2.1	Instantane Mobilisierung	102
4.5.2.2	Mobilisierung aus der Glasmatrix	102
4.5.2.3	Mobilisierung aus zementierten Abfällen	105
4.5.2.4	Mobilisierung aus LWR-Brennelementen	107
4.6	Schadstofftransport und Bilanzierung	109
4.6.1	Schadstofftransport durch Advektion	113
4.6.2	Schadstofftransport durch Diffusion und Dispersion	119
4.6.3	Austauscheffekte	122
4.6.3.1	Austauschströme durch Dichtegradienten	122
4.6.3.2	Schadstoffströme durch Konvektion	125
4.6.4	Schadstofftransport zwischen offenen Bereichen	130
4.6.5	Schadstoffbilanzierung und radioaktiver Zerfall	133
4.6.5.1	Schadstoffbilanzierung	133
4.6.5.2	Radioaktiver Zerfall	134

4.6.6	Ausfällung bei Erreichen von Löslichkeitsgrenzen	136
4.7	Schadstofftransport mit feinerer Diskretisierung	139
4.7.1	Modellierung des Schadstofftransports im fein diskretisierten Segment	140
4.7.2	Zeitschrittsteuerung bei feinerer Diskretisierung	145
5	Testfälle	149
5.1	Vergleich mit analytischer Lösung. Schadstofftransport in einer horizontalen, versetzten Strecke	149
5.1.1	Analytische Lösung	151
5.1.2	Modellierung des Testfalls mit Lopos2	152
5.1.3	Ergebnisse des Testfalls	153
5.1.4	Zusammenfassung	154
5.2	Radionuklidmobilisierung aus unterschiedlich konditionierten Abfällen .	155
5.2.1	Beschreibung der Testfälle	155
5.2.2	Ergebnisse der Vergleichsrechnungen	156
5.2.2.1	Mobilisierung von zementiertem MAW in Kammern	156
5.2.2.2	Mobilisierung von verglastem HAW in Bohrlöchern	159
5.2.2.3	Mobilisierung von zementiertem MAW in Bohrlöchern	161
5.2.2.4	Mobilisierung aus abgebrannten LWR-Brennelementen in Strecken	163
5.3	Laugen- und Nuklidtransport bei segmentintern diskretisierten langen Strecken	164
5.3.1	Beschreibung der Testfälle	164
5.3.2	Ergebnisse der Testrechnungen, Fall 1	166
5.3.3	Ergebnisse der Testrechnungen, Fall 2	169
5.4	Lösungs- und Schadstofftransport in einem Modellgrubengebäude mit einfacher Ringstruktur	171
5.4.1	Modellierung einer ringförmigen Segmentstruktur	171
5.4.2	Ergebnisse	173
5.4.2.1	Laugen- und Schadstoffströme im Testfall 1	173
5.4.2.2	Laugen- und Schadstoffströme im Testfall 2	175
5.4.3	Zusammenfassung	177
6	Zusammenfassung	179

7	Literaturverzeichnis	181
8	Abbildungsverzeichnis	183
9	Tabellenverzeichnis	187
10	Glossar	189

1 Einleitung

1.1 Problemstellung

Das Ziel der Endlagerung radioaktiver oder chemisch-toxischer Abfälle ist der langfristige Schutz von Mensch und Umwelt vor den Auswirkungen der eingelagerten Schadstoffe. Für die Nachbetriebsphase, also die Zeit nach der Stilllegung eines Endlagers, ist durch eine standortspezifische Sicherheitsanalyse der Nachweis zu erbringen, daß die gesetzlichen Schutzziele eingehalten werden. Wegen der Komplexität des Systems und der großen zu betrachtenden Zeiträume ist der Nachweis nur mit Hilfe von Computersimulationen zu erbringen.

Die Anforderungen an die für eine Langzeitsicherheitsanalyse eingesetzten Computerprogramme sind vielfältig. Die Codes müssen vor allem flexibel bei unterschiedlichen Anwendungen einsetzbar sein. Daneben müssen sie aber auch qualitätsgesichert und leicht bedienbar sein. Das Programmpaket **Emos** [16] erfüllt diese Anforderungen. Es ist modular aufgebaut, enthält in der vorliegenden Version bereits eine Reihe von Rechenprogrammen für unterschiedliche Einsatzzwecke und hat in mehreren Anwendungen bewiesen, daß es flexibel einsetzbar ist (beispielsweise [3], [10], [15]).

Das Modul **Lopos** (**Loop structures in repositories**) ist als Bestandteil von **Emos** für Endlager im Steinsalz entwickelt worden, kann aber auch für andere Wirtsgesteine verwendet werden. Steinsalz enthält wenig Wassereinschlüsse, so daß Endlager in dieser Formation im Normalfall trocken sind. Es ist aber nicht auszuschließen, daß es nach Beendigung der Betriebsphase zu einem Laugenzutritt kommen kann. Andere Wirtsgesteine sind dagegen bereits im Normalfall in geringem Ausmaß wasserführend, so daß die Abfälle in einem Endlager dort stets in Kontakt mit Wässern kommen. Im folgenden wird für jede Art von Wässern der Begriff Lauge verwendet, unabhängig von deren tatsächlicher Beschaffenheit.

Im Nahbereich von Endlagern können ringförmige Verknüpfungen auftreten, so daß Lauge zwischen benachbarten Hohlräumen zirkulieren kann. Werden in einem Störfall Schadstoffe aus den eingelagerten Abfällen mobilisiert, so werden der Schadstofftrans-

port und die Schadstofffreisetzung aus dem Nahbereich von der Laugenzirkulation beeinflusst.

1.2 Zielsetzung

Das Rechenprogramm **Lopos2** wurde als Modul des Programmpakets **Emos** entwickelt. Dadurch ist es in integrierten Sicherheitsanalysen einsetzbar, d.h. nach der Schadstofffreisetzung mit **Lopos** können der Schadstofftransport im Deckgebirge und die Schadstoffbelastung in der Biosphäre mit anderen Modulen von **Emos** berechnet werden. Die definierten Schnittstellen von **Emos** erlauben auch Monte-Carlo-Simulationen, mit denen Unsicherheiten in den Eingangsdaten berücksichtigt werden können. Mit Hilfe von statistischen Verfahren können als Ergebnis der Monte-Carlo-Simulationen die Auswirkungen der Unsicherheiten quantifiziert werden.

Mit **Lopos** wird die Schadstofffreisetzung aus dem Nahbereich eines Endlagers im tiefen geologischen Untergrund unter spezieller Berücksichtigung ringförmiger Verknüpfungen der Teilbereiche des Nahbereichs berechnet, d.h. die Zirkulation von Lauge innerhalb des Nahbereichs wird explizit modelliert.

Das Modul ist sowohl für radioaktive als auch für chemisch-toxische Abfälle einsetzbar. Das Programm ist so gestaltet, daß durch Hinzufügen von Unterprogrammen der Einsatzbereich erweitert werden kann. Dies gilt auch für unterschiedliche Konditionierungsformen der Abfälle.

Um auch komplexe Grubengebäudestrukturen modellieren zu können, verwendet das Programm effektive Lösungsalgorithmen, die eine große Anzahl von Segmenten erlauben. Segmente sind Teilbereiche des Grubengebäudes, für die jeweils der Laugen- und Schadstofftransport unter Berücksichtigung physikalischer und chemischer Effekte berechnet wird.

1.3 Vorgehensweise

Die Schadstofffreisetzung und der Schadstofftransport werden mit einem Finite-Differenzen-Verfahren mit variablen Zeitschrittweiten berechnet. Für einen festen Zeitpunkt werden für jedes Segment und jeden Schadstoff unter Berücksichtigung physikalischer und chemischer Effekte Übergabeparameter berechnet. Mit Hilfe dieser Parameter wird anschließend für alle Segmente gleichzeitig der Laugenstrom zwischen allen Segmenten und daraus der Schadstoffstrom im Segmentsystem und aus dem Nahbereich heraus berechnet.

Zur Steigerung der Effektivität des Programms wird mit einer möglichst großen Zeitschrittweite gerechnet. Sie wird unter Berücksichtigung physikalischer und numerischer Begrenzungen nach jedem Zeitschritt aktualisiert.

Die treibende Kraft für den Laugenstrom innerhalb des Grubengebäudes ist während der Zuflußphase der hydraulische Gradient, während der gefluteten Phase das Auspressen aufgrund der Gebirgskonvergenz. Das bedeutet, daß das Programm in der derzeitigen Version nur für Grubengebäude im Salzgestein eingesetzt werden kann, bei denen eine plastische Verformung auftritt. In anderen Wirtsgesteinen kann eine konstante Durchströmung des Grubengebäudes mit Lauge angenommen werden. Unter Ausnutzung der Flexibilität des Moduls **Lopos** müßte das Programm an diese Anforderungen angepaßt werden.

Die Berechnung der Schadstofffreisetzung erfolgt im Rahmen der Konsequenzanalyse für ein vorgegebenes Szenario. Ein mögliches Szenario für ein Grubengebäude im Steinsalz ist, daß Lauge über den Hauptanhydrit oder andere Wegsamkeiten in den Bereich des Grubengebäudes und von dort zu den Abfällen vordringt. Als Folge der Gebirgskonvergenz kann anschließend kontaminierte Lauge wieder ausgepreßt werden, wobei der Austrittsort nicht notwendigerweise mit dem Laugenzutrittsort identisch sein muß. Darüberhinaus wird die Möglichkeit eines begrenzten Laugenzutritts aus Laugennestern im umgebenden Gebirge in einen beliebigen Abschnitt des Grubengebäudes betrachtet.

Gelangt die in ein Grubengebäude eindringende Lauge an den physikalischen Barrieren, d.h. den Verschlüssen und Dämmen, vorbei bis in die Einlagerungsorte der Abfälle, so

beginnt dort die Korrosion der eingelagerten Behälter sowie die Mobilisierung der Schadstoffe aus den Abfällen. Die Mobilisierung wird mit Hilfe von Quelltermen modelliert, die für jedes Segment einen Eingangsstrom der Schadstoffe liefern. Nach der Mobilisierung werden die Schadstoffe mit der Lauge durch das Grubengebäude transportiert und an einer oder mehreren Stellen in das Deckgebirge freigesetzt. Die Orte der Freisetzung in das Deckgebirge sind abhängig vom gewählten Szenario und werden als Eingabedaten festgelegt. In der vorliegenden Programmversion kann jeweils ein Freisetzungsort ausgewählt werden.

Die Rechnung innerhalb des Programms **Lopos2** umfaßt den Transport der Lauge bis zu den Abfällen, die Mobilisierung der Schadstoffe aus den Abfallgebänden und den gesamten Transport der Schadstoffe durch das Grubengebäude. Der Transport wird unter Berücksichtigung von physikalischen und chemischen Effekten, wie z. B. Advektion, Diffusion und Dispersion sowie Sorption und Ausfällung berechnet (siehe Kapitel 4).

Im Falle radioaktiver Abfälle wird für alle betrachteten Radionuklide jeweils der radioaktive Zerfall und bei den Aktiniden die Entstehung von Tochternukliden berechnet. Wegen der möglicherweise großen Zeitschrittweiten wird der radioaktive Zerfall mit einem analytischen Verfahren berechnet, um die Radionuklidmengen genauer bilanzieren zu können als mit einem zeitdiskreten Verfahren.

Die für den vorgegebenen Austrittsort berechneten zeitabhängigen Freisetzungsraten und Schadstoffkonzentrationen werden als Übergabegrößen an ein Deckgebirgsmodul oder ein Biosphärenmodul in einer Datei abgespeichert. Außerdem werden eine Reihe von Dateien zur Druck- und Plotausgabe erstellt (siehe Kapitel 2.6). Beide Dateiararten enthalten vom Anwender ausgewählte zeitabhängige Größen aus der Freisetzungsberechnung, zum Beispiel Schadstoff- oder Laugenströme. Diese Dateien werden mit Hilfe von Postprozessoren weiterverarbeitet. Zusätzlich werden Fehlermeldungen und einige weitere Endtabellen in einer Datei mit der Erweiterung out gespeichert, die mit Hilfe eines Editors gelesen werden kann.

Wie bereits erwähnt, wird bei einem Endlager im Steinsalz die plastische Verformung des Salzes berücksichtigt. Dieser als Gebirgskonvergenz bezeichnete Prozeß führt nach Beendigung der Einlagerung von Abfällen und nach Verfüllung der verbliebenen Hohlräume

mit Versatz im Laufe der Zeit zu einer Abnahme der Rest-Hohlraumvolumina. Wird durch diesen Prozeß in einem Teilbereich des Grubengebäudes eine vorgegebene minimale Porosität (Endporosität) unterschritten, so wird dieser Teilbereich als undurchlässig für Lauge angesehen. Es erfolgt dann keine Laugenbewegung mehr, so daß auch ein weiterer Schadstofftransport durch diesen Teilbereich ausgeschlossen werden kann. Falls das Grubengebäude an der Schnittstelle zum Deckgebirge die Endporosität erreicht hat, hört die Freisetzung in das Deckgebirge auf, und der **Lopos**-Rechenlauf wird vorzeitig beendet.

Als Eingangsdaten für eine Freisetzungsrechnung werden folgende Angaben benötigt:

- Struktur und Geometrie des betrachteten Grubengebäudes,
- Art und Menge der eingelagerten Abfälle,
- Zwischenlagerzeit einzelner Abfälle,
- Zeitpunkte des Laugenzutritts,
- Angaben zur Dauer der Freisetzungsrechnung,
- element- und nuklid- bzw. schadstoffspezifische Daten,
- allgemeine physikalische und chemische Daten.

Das Rechenprogramm wurde in mehreren Schritten getestet. Zum einen wurden die Ergebnisse mit analytischen Lösungen verglichen, zum anderen wurden die Ergebnisse anderer Rechenprogramme zum Vergleich herangezogen. In allen Fällen waren die Ergebnisse zufriedenstellend. Eine Beschreibung der Tests enthält Kapitel 5.

Für das Modul wurde ein Qualitätsmanagement eingeführt. Das bedeutet, daß Programmänderungen und Programmfreigaben nach einem standardisierten Verfahren vorgenommen werden. Das vorliegende Dokument ist Teil dieses Qualitätsmanagements.

Im folgenden Kapitel 2 wird zunächst die allgemeine Programmstruktur beschrieben, u.a. die Vorgehensweise bei der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung. Anschließend wird in Kapitel 3 beschrieben, wie die Segmente modelliert werden, und es werden alle derzeit vorhandenen Segmentmodelle vorgestellt. In Kapitel 4 werden die Einzeleffekte, die innerhalb der Segmentmodelle verwendet werden, im Detail dargestellt. Dieses Kapitel

enthält die mathematischen Grundlagen der Modellierungen. In Kapitel 5 werden die Testfälle diskutiert, anhand derer das Programm getestet wurde.

2 Programmstruktur

Im folgenden werden zunächst in den Kapiteln 2.1 und 2.2 die zeitliche und in Kapitel 2.3 die räumliche Diskretisierung beschrieben. Danach wird in Kapitel 2.4 der Ablauf einer Rechnung dargestellt. In den abschließenden Kapiteln 2.5 und 2.6 werden die Schnittstellen zu anderen Modulen sowie die Möglichkeiten bei der Ergebnisdarstellung diskutiert.

2.1 Zeitliche Diskretisierung

Der zeitliche Bezugspunkt ($t = 0$) für eine Freisetzungsrechnung mit dem Programm **Lopos2** ist das Ende der Betriebsphase, d.h. der Zeitpunkt, an dem die Einlagerung von Abfällen in das Grubengebäude beendet und das gesamte Grubengebäude verfüllt und verschlossen ist (siehe Abbildung 2.1). Die Einlagerung der Abfälle erfolgt kontinuierlich während der Betriebsphase des Endlagers, d.h. zu Zeitpunkten $t \leq 0$. Jeder Rechenlauf beginnt mit dem Zeitpunkt des Beginns der Betriebsphase des Endlagers, d.h. bei $t = -t_B$. Die Einlagerungszeitpunkte $t_{E,i}$ der einzelnen Abfallgebinde i können als Eingangsdaten festgelegt werden.

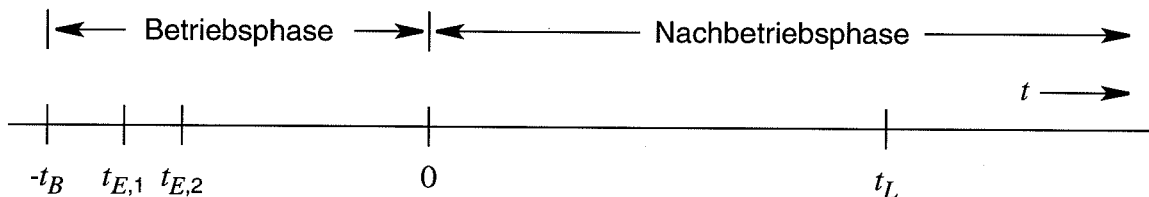


Abb. 2.1: Schematische Darstellung der Zeitachse.

t_B = Betriebsdauer des Endlagers

$t_{E,i}$ = Einlagerungszeitpunkt der Abfallgebinde i ($i = 1, 2, \dots$)

t_L = Zeitpunkt des Laugenzutritts

Außerdem ist es möglich, für radioaktive Abfälle eine Zwischenlagerzeit vor der Einlagerung im Endlager zu berücksichtigen. Für die Dauer dieser Zwischenlagerzeit wird der Zerfall von Radionukliden berechnet. Die weitere Berechnung des radioaktiven Zerfalls

erfolgt in allen Fällen ab dem Beginn der Einlagerung. Ein **Lopos**-Rechenlauf endet im allgemeinen nach einer vorgegebenen Zeitdauer, sofern das Endlager seine Endporosität nicht bereits vorher erreicht hat. Der Begriff der Endporosität wurde im vorhergehenden Kapitel erläutert.

2.2 Steuerung der Zeitschrittweiten

Zur Anpassung an physikalische und numerische Erfordernisse wird die Zeitschrittweite nach jedem Zeitschritt neu bestimmt. Durch eine möglichst große Zeitschrittweite wird eine notwendige Verkürzung der Rechenzeit erreicht, durch eine kleine Schrittweite andererseits eine ausreichende Rechengenauigkeit. Die Verkleinerung der Schrittweite kann stufenweise oder instantan bis auf sehr kleine Werte erfolgen, während die Vergrößerung der Schrittweite nur stufenweise möglich ist.

Die Schrittweite wird global und lokal gesteuert. Lokal bedeutet, daß ein einzelner Effekt in einem Segment eine Anforderung an die Zeitschrittweite definiert. Da viele Effekte und Segmente Einfluß auf die Zeitschrittsteuerung nehmen können, wird nach Durchlauf der Zeitschleife (siehe Kapitel 2.4.3) aus den vorliegenden Einzelmeldungen ein optimierter Wert für die neue Schrittweite ermittelt. Bei einer globalen Steuerung werden gleichartige, zeitabhängige Variablen in allen Segmenten betrachtet und aus deren Zeitverhalten eine neue Zeitschrittweite abgeleitet.

Die Steuerung der Schrittweite erfolgt auf zwei unterschiedliche Weisen:

- über die Vorgabe eines anzusteuernenden Zeitpunktes, der nicht überschritten werden darf, aber eventuell noch weit vom aktuellen Zeitpunkt entfernt ist,
- über die Festlegung der nächsten Schrittweite, die sich aus physikalischen Gründen im aktuellen Zeitschritt ergibt.

Die Zielgröße bei der lokalen Steuerung ist sowohl die Zeitschrittweite als auch der Zeitpunkt. Bei der Vorgabe einer Zeitschrittweite aus einem einzelnen Effekt oder einem individuellen Segment werden im allgemeinen auch relative Änderungen von physikalischen Größen betrachtet, wobei jedoch die betrachtete Größe und auch das verwendete

Kriterium individuell sind. Die Steuerung über Zeitpunkte erlaubt die Berechnung von Größen, die zu vorgegebenen Zeitpunkten vorliegen sollen. Ein Zeitpunkt wird beispielsweise angesteuert, wenn Einlagerungszeitpunkte eines Gebindes berücksichtigt werden müssen oder wenn der Anfangszeitpunkt eines Laugenzutritts eingehalten werden muß.

Die Zielgröße bei der globalen Steuerung ist die Zeitschrittweite, die eine Anpassung an kontinuierlich sich ändernde Vorgänge im Grubengebäude gestattet. Sie wird verwendet, um die relativen Änderungen von physikalischen Größen in einem Zeitintervall aus physikalischen Gründen in bestimmten Grenzen zu halten.

Im folgenden wird zunächst die Ermittlung einer maximalen Zeitschrittweite beschrieben. Hierdurch wird die Zeitschrittweite im Hinblick auf kontinuierlich ablaufende Prozesse gesteuert. Nachfolgend wird die Vorgehensweise bei der Vorgabe anzusteuender Zeitpunkte dargestellt. Hierdurch erfolgt die Steuerung der zeitdiskreten Rechnung im Hinblick auf diskontinuierlich ablaufende Prozesse. Abschließend werden die Anforderungen an den nächsten Zeitpunkt und an die nächste Zeitschrittweite zusammengefaßt und die beiden Kriterien gerechte neue Zeitschrittweite ermittelt.

2.2.1 Ermittlung einer maximalen Zeitschrittweite

Die Steuerung der Zeitschrittweite für kontinuierliche Prozesse basiert auf der relativen Änderung von Strömen in allen Segmenten, wobei untere und obere Grenzwerte nicht unter- oder überschritten werden. Die Untergrenze der Zeitschrittweite Δt_u wird als globale Größe vom Anwender vorgegeben und dient zur Vermeidung unnötig langer Rechenzeiten. Die Obergrenze Δt_o wird aufgrund der individuellen Meldungen einzelner Segmente und Effekte jeweils neu festgelegt. Eine Übersicht über die Schrittweitensteuerung für kontinuierliche Prozesse ist in Abbildung 2.2 dargestellt.

Bei der Ermittlung einer Obergrenze können beliebige Einzelmeldungen berücksichtigt werden. Derzeit werden in allen Segmentmodellen solche Obergrenzen der Zeitschrittweite definiert, die sich aus unterschiedlichen Volumenänderungen ergeben.

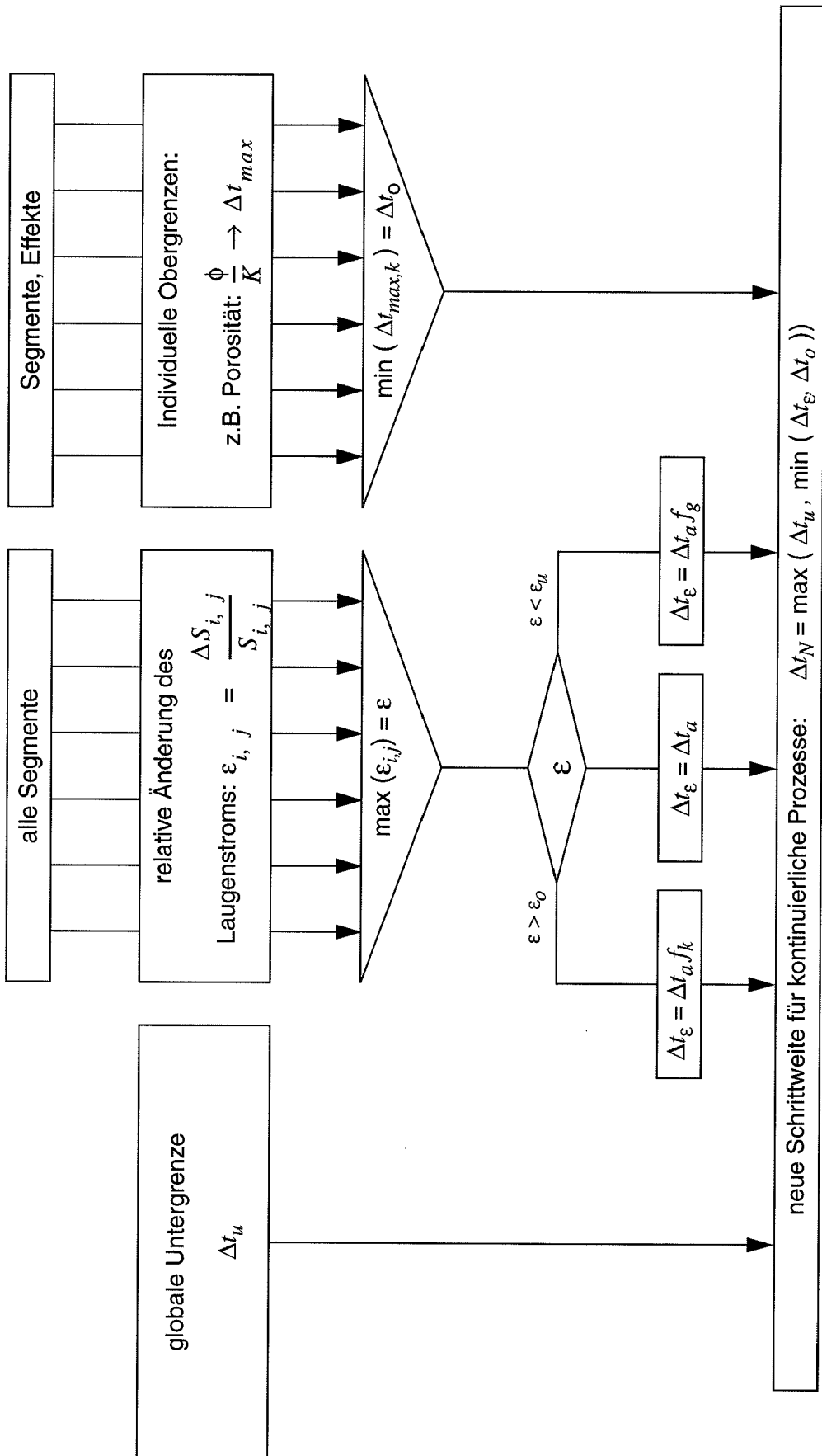


Abb. 2.2: Steuerung der Zeitschrittweite für kontinuierliche Prozesse.

Die erste Anforderung leitet sich aus dem Konvergenzprozeß in der Weise ab, daß die relative Änderung des Porenraumes einen vorgegebenen Wert nicht überschreitet. Als Funktion der Konvergenzrate K und der Porosität ϕ ergibt sich eine maximale Zeitschrittweite zu:

$$\Delta t_{max, 1} = \min_i \left(\gamma_\phi \cdot \frac{\phi(i)}{K(i)} \right). \quad (1)$$

Durch den Parameter $\gamma_\phi \leq 1$ kann die Obergrenze für die relative Änderung des Porenvolumens in einem Zeitschritt durch den Anwender beeinflusst werden.

Bei der Option direkter Weitertransport eingedrungener Lauge (siehe Kapitel 3.1.3) wird in der Zulaufphase die Zeitschrittweite durch

$$\Delta t_{max, 2} = \min_i \left(\gamma_Z \cdot \frac{V_L(i)}{\sum_j S_{j, i}} \right) \quad (2)$$

gesteuert, indem die Änderung des Laugenvolumens im Segment i durch Zu- und Abflüsse $\sum_j S_{j, i}$ zu den Nachbarsegmenten j nicht größer werden darf als ein Bruchteil ($\gamma_Z \leq 1$) des im Segment i vorhandenen Laugenvolumens V_L .

Die maximale Zeitschrittweite für den Schadstofftransport in das Segment i hinein bzw. aus dem Segment i heraus ergibt sich aus dem Courant-Neumann-Kriterium [5] zu

$$\Delta t_{max, 3} = \min_i \left(\gamma_{CN} \cdot \frac{V_P(i)}{\frac{1}{2} \sum_j (|S_{i, j}| + S_{i, j} + 2 \cdot S_{i, j}^A)} \right), \quad (3)$$

wobei V_P das gesamte Poren- bzw. Hohlraumvolumen im Segment i , $S_{i, j}$ der Laugenstrom vom Segment i zu den Nachbarsegmenten j und $S_{i, j}^A$ die konvektiven Austauschströme durch z.B. Diffusion, Dispersion, thermische Konvektion etc. (s. Kapitel 4.6) zwi-

schen dem Segment i und seinen Nachbarn j sind. Durch den Parameter $\gamma_{CN} \leq 1$ kann die Zeitschrittweite durch den Anwender beeinflusst werden. Für einen rein advektiven Transport, d.h. $S_{i,j}^A = 0$, bewirkt die Schrittsteuerung 3, daß die pro Zeitschritt aus dem Segment i hinaus transportierte Laugenmenge nicht größer werden kann als das Porenvolumen im Segment i , d.h.

$$\frac{1}{2} \sum_j (|S_{i,j}| + S_{i,j}^A) \cdot \Delta t \leq V_P. \quad (4)$$

Da der konvektive Strom $S_{i,j}^A$ immer ≥ 0 ist, wird die Bedingung 4 durch das Courant-Neumann-Kriterium in jedem Fall eingehalten.

Bei der Berücksichtigung von relativen Änderungen von Strömen von einem Zeitschritt zum nächsten werden zur Zeit ausschließlich die relativen Änderungen der Laugenströme $S_{i,j}$ von den Segmenten i zu ihren jeweiligen Nachbarsegmenten j verwendet

$$\varepsilon = \max_{i,j} \left| \frac{|S_{i,j}(t - \Delta t_a)| - |S_{i,j}(t)|}{|S_{i,j}(t - \Delta t_a)|} \right|, \quad (5)$$

wobei Δt_a die aktuelle Schrittweite ist. Das Maximum ε der auf diese Weise bestimmten relativen Änderungen wird dann in der folgenden Weise zur Zeitschrittsteuerung verwendet. Liegt das Maximum der relativen Stromänderungen in einer vorgegebenen Bandbreite,

$$\varepsilon_u \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0, \quad (6)$$

so besteht kein diesbezüglicher Bedarf für eine Änderung der Zeitschrittweite. Liegt ε aber außerhalb der Bandbreite, besteht die Notwendigkeit einer Schrittweitenänderung hinsichtlich der relativen Stromänderungen. Die Parameter ε_u und ε_0 werden aus den in der modulspezifischen Eingabedatei vorgegebenen Eingangsparametern ε_m , f_K und f_G ermittelt, wobei die Größen f_K und f_G auch das Maß der Änderung der Zeitschrittweite bestimmen. Für die Begrenzung der Bandbreite gilt:

$$\varepsilon_u = \varepsilon_m f_K^2, \quad (7)$$

$$\varepsilon_o = \varepsilon_m f_G^2. \quad (8)$$

Die Größe ε_m ist ein Referenzwert für die relative Stromänderung, während die Größen f_K und f_G Variationsfaktoren für die untere und obere Grenze der relativen Stromänderung sind.

Aus den betrachteten relativen Stromänderungen ergibt sich folgende Anforderung bezüglich einer Änderung der aktuellen Zeitschrittweite Δt_a :

$$\Delta t_\varepsilon = \begin{cases} \Delta t_a f_G & \text{für } \varepsilon_u > \varepsilon \\ \Delta t_a & \text{für } \varepsilon_u \leq \varepsilon \leq \varepsilon_o \\ \Delta t_a f_K & \text{für } \varepsilon > \varepsilon_o \end{cases} \quad (9)$$

Zur Einhaltung oberer und unterer Grenzwerte wird zunächst die kleinste Obergrenze aus den Einzelmeldungen der Segmente und Effekte ermittelt:

$$\Delta t_o = \min_k (\Delta t_{max, k}) \quad \text{für } k = 1, 2, 3. \quad (10)$$

Hierbei können neben den angegebenen Obergrenzen in den Gleichungen 1 bis 3 für jedes Segment beliebige weitere Anforderungen berücksichtigt werden. Die neue Zeitschrittweite Δt_N im Hinblick auf eine ausreichende Beschreibung kontinuierlich ablaufender Prozesse ergibt sich abschließend zu

$$\Delta t_N = \max[\Delta t_u, \min(\Delta t_\varepsilon, \Delta t_o)]. \quad (11)$$

Die auf diese Weise ermittelte neue Zeitschrittweite wird in **Lopos** immer dann verwendet, wenn keine direkt anzusteuern den Zeitpunkte vorliegen. Falls innerhalb des näch-

sten Zeitintervalls ($t_a, (t_a + \Delta t_N)$) ein oder mehrere anzusteuernde Zeitpunkte vorliegen, so wird der früheste Zeitpunkt angesteuert und die Zeitschrittweite entsprechend angepaßt. Die diesbezügliche Vorgehensweise ist in Abbildung 2.3 dargestellt.

2.2.2 Ansteuerung eines Zeitpunktes

Folgende Effekte können einen anzusteuernenden Zeitpunkt als Anfangszeitpunkt eines neuen Prozesses vorgeben:

- Einlagerung der Gebinde in einem Einlagerungsort,
- Beginn des Behälterausfalls und der Mobilisierung,
- Beginn des unbegrenzten Laugenzuflusses,
- Beginn des Zuflusses aus einem Laugeneinschluß,
- Zeitpunkt des spontanen Laugenzuflusses in ein Segment,
- Zeitpunkt des Vollaufens eines Segments mit Lauge.

Nach Erreichen des anzusteuernenden Zeitpunktes beginnt ein neuer Prozeß, auf den die Schrittweitensteuerung aufgrund von relativen Stromänderungen nicht vorbereitet sein kann. In diesem Fall wird die Schrittweite auf einen vom Anwender vorzugebenen Anfangswert $\Delta t_{u,l}$ reduziert, falls nicht schon die Schrittweite im vorangegangenen Zeitschritt $\Delta t_{N,a}$ ausreichend klein war.

Weitere Effekte können einen anzusteuernenden Zeitpunkt als Endzeitpunkt eines laufenden Prozesses vorgeben:

- Ende des Behälterausfalls und der Mobilisierung,
- Erreichen der vorausberechneten Endporosität von Versatz,
- Erreichen des vorgegebenen Minimalvolumens einer offenen Strecke.

Die Ansteuerung solcher Zeitpunkte ist zum korrekten Abschluß bereits laufender Prozesse notwendig. Da die aktuelle Schrittweitensteuerung den Prozeß über relative Schrittweitenänderungen bereits berücksichtigt und diese Anforderung nach Erreichen des anzusteuernenden Zeitpunktes entfällt, kann im darauffolgenden Zeitschritt die ur-

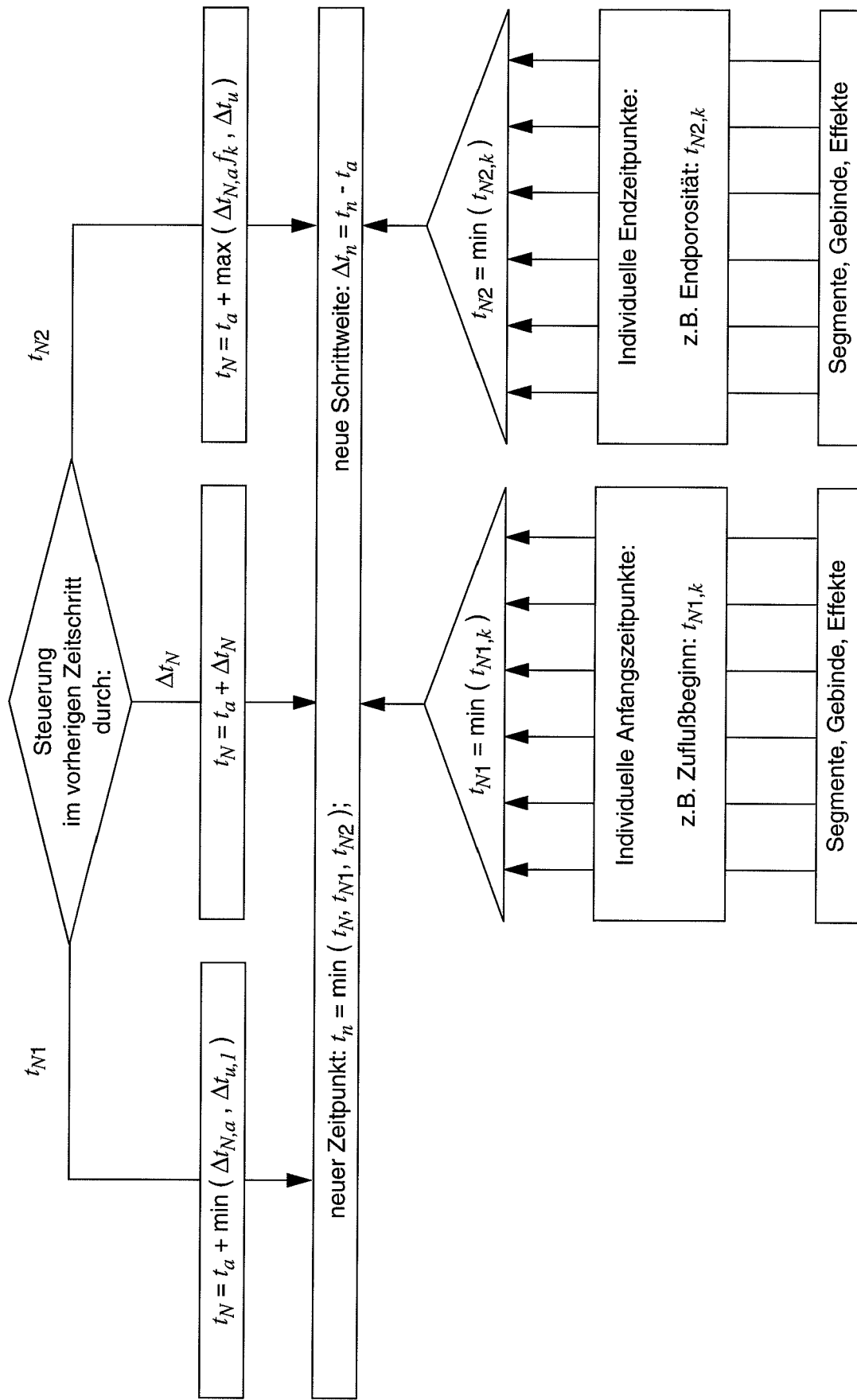


Abb. 2.3: Steuerung der Zeitschrittweite unter Berücksichtigung diskontinuierlicher Prozesse.

sprünglich vorgesehene Zeitschrittweite $\Delta t_{N,a}$ verwendet werden, wobei diese sicherheitshalber um den Faktor f_K reduziert wird. Falls ein Endzeitpunkt gleichzeitig der Anfangszeitpunkt eines neuen Prozesses ist, so wird die Steuerung über die Ansteuerung von Anfangszeitpunkten verwendet.

Innerhalb der Zeitschleife von **Lopos2** können in jedem Segmentmodell mehrere anzusteuernde Zeitpunkte vorgegeben werden, wobei diese immer über dem aktuellen Zeitpunkt t_a liegen müssen. Die Festlegung der Einzelzeitpunkte in einem Segmentmodell orientiert sich an den zu berücksichtigenden Effekten. Der nächste anzusteuernde Zeitpunkt ergibt sich als Minimum aus allen Einzelmeldungen jeweils zu

$$t_N = \min_k(t_{N, k}) \quad (12)$$

Der so ermittelte anzusteuernde Zeitpunkt t_N liegt nach Voraussetzung über dem aktuellen Zeitpunkt t_a und ist insgesamt der kleinste Wert, der sich aus den oben angeführten Effekten ergibt.

Während einer vorgegebenen Anzahl von Zeitschritten zu Beginn einer **Lopos**-Rechnung wird die Zeitschrittweite auf einem konstanten Anfangswert $\Delta t_{u,0}$ gehalten, der vom Anwender vorzugeben ist. Hierdurch wird vermieden, daß in der Anfangsphase Fehler durch die Steuerung mit neu belegten Größen auftreten. Bei Rechnungen, bei denen bestimmte Effekte, wie z. B. Diffusion, nicht betrachtet werden und daher der Zeitschrittsteuermechanismus $\Delta t_{\max,3}$ (Gleichung 3) möglicherweise nicht greift, wächst die Zeitschrittweite eventuell auf sehr große Werte an. Zur Vermeidung von Rechenungenauigkeiten in einem solchen Fall kann die Zeitschrittweite vom Anwender auf einen Maximalwert begrenzt werden. Bei jedem Zeitschritt wird die Information in eine Datei ausgegeben, welcher Effekt für die Zeitschrittsteuerung aktuell verantwortlich war.

2.3 Aufteilung in Segmente

Zur Modellierung der Vorgänge in einem Grubengebäude wird dieses in Teilbereiche zerlegt, die als Segmente bezeichnet werden. Die Segmente repräsentieren einen offenen oder versetzten Hohlraum, der einen Einlagerungsort, eine Verbindungsstrecke, einen Verschuß oder Damm oder den Schacht usw. beschreibt. Am Ende dieses Kapitels 2.3 wird anhand eines einfachen Beispiels die Unterteilung eines Grubengebäudes in Segmente erläutert.

Für die in einem Endlager in einer Salzformation vorkommenden Grubenteile wurden Segmentmodelle entwickelt. Diese sind im Kapitel 3 erläutert. Für andere, bisher nicht berücksichtigte Einlagerungsformationen oder für andere Szenarien können entsprechende Modellierungen vorgenommen werden und gegebenenfalls weitere Segmentmodelle hinzugefügt werden.

Durch Hintereinanderschaltung von Einzelsegmenten kann ein beliebiges Grubengebäude dargestellt werden, wobei von der Mitte eines Segments jeweils in 6 Raumrichtungen ($\pm x$, $\pm y$, $\pm z$) ein anderes Segment abzweigen kann (maximal 6 Segmente, siehe Abbildung 2.4).

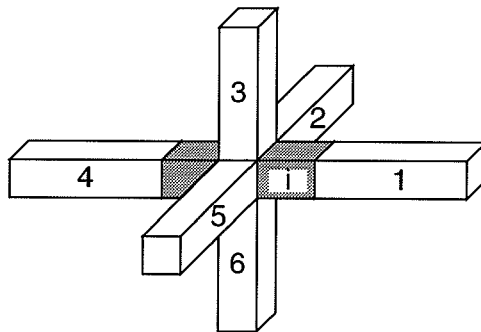


Abb. 2.4: Mögliche Segmentanordnung in einem Grubengebäude, Segment i (schattiert) und seine möglichen Nachbarsegmente $j = 1, \dots, 6$

Die Schnittstelle zum Deckgebirge oder zur Biosphäre ist durch den Laugenaustrittsort gegeben. Dieser Laugenaustrittsort muß nicht identisch sein mit dem Laugenzutrittort.

Welches Segment die Schnittstelle zum Deckgebirge oder zur Biosphäre repräsentiert, wird in der modulspezifischen Eingabedatei angegeben.

Für die Konsequenzanalyse einiger spezieller Szenarien braucht das Grubengebäude nicht in eine Vielzahl von Segmenten zerlegt zu werden. Dies ist z.B. bei einem Grubengebäude ohne besondere Strömungswiderstände der Fall. Hier wird das Grubengebäude als Modellvolumen mit vorgegebenem Schadstoffinventar, also als 'mixing tank model' für das gesamte Hohlraumvolumen behandelt.

Ein segmentiertes Grubengebäude läßt sich in vielen Fällen schematisch in drei Bereiche einteilen, siehe Abbildung 2.5:

- das Mittelfeld mit den Infrastrukturbereichen,
- die Verbindungsstrecken vom Mittelfeld zu den Einlagerungsorten,
- die Einlagerungsorte.

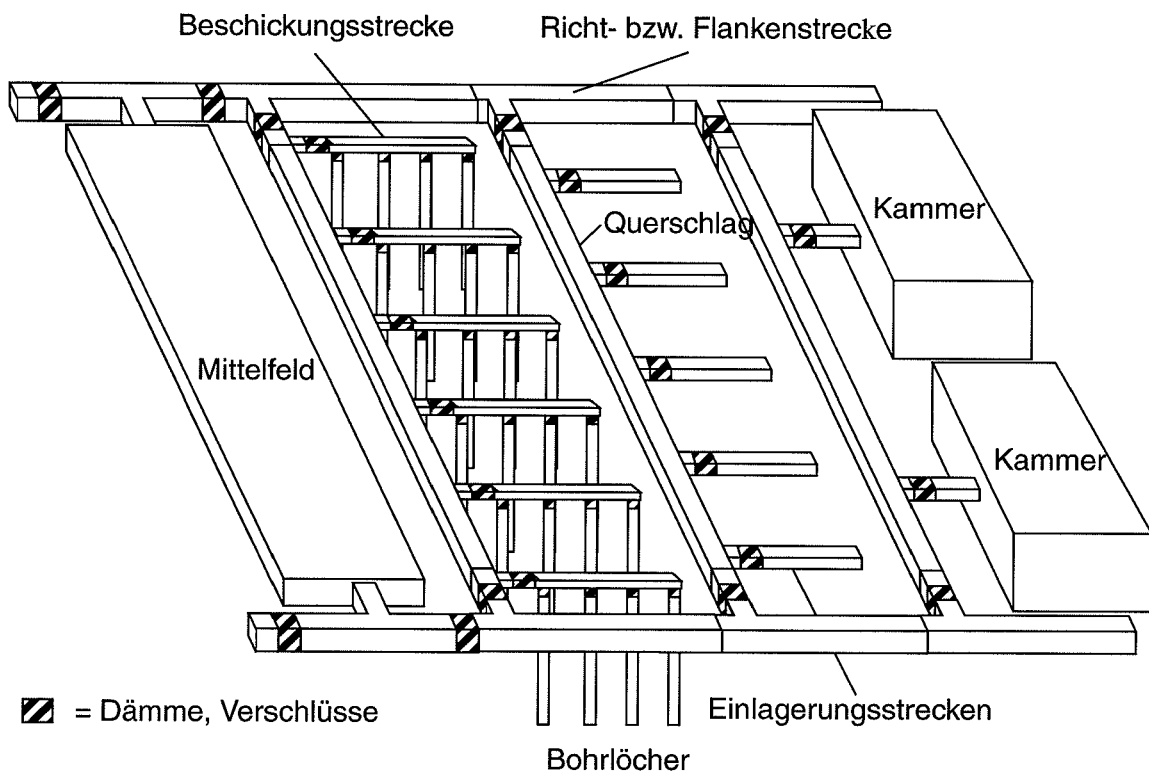


Abb. 2.5: Schematische Darstellung einiger typischer Teilbereiche eines Grubengebäudes.

Das Mittelfeld wird bei einsöhligen Grubengebäuden als ein Segment behandelt, das alle Hohlräume der dort vorhandenen Strecken und Nebenräume umfaßt. Bei mehrsöhligen Grubengebäuden ist es zweckmäßig, das Mittelfeld in Einzelsegmente aufzuteilen. Wenn in diesem Fall der unterstellte unbegrenzte Laugenzutritt in das Mittelfeld erfolgt, so wird ein Segment als Zutrittsort für die Lauge gewählt und die anderen Segmente werden als Verbindungsstrecken modelliert.

Die Verbindungsstrecken sind alle Teile eines Grubengebäudes zwischen dem Mittelfeld und den Einlagerungsorten, also die Richt- bzw. Flankenstrecken und Querschläge sowie die Beschickungsstrecken bei der Einlagerung in Bohrlöchern. Die Einlagerungsorte sind Hohlräume mit chemisch-toxischem oder radioaktivem Abfall, entweder Bohrlöcher, Kammern oder Strecken.

Zur Beschreibung der Vorgänge in einem Segment des Grubengebäudes sind die Segmentmodelle entwickelt worden. In diesen werden alle Vorgänge berücksichtigt, die zur Modellierung des zugehörigen Teilbereiches des Grubengebäudes notwendig sind. So werden z.B. die Konvergenz des Salzgesteins und die damit verbundene Verkleinerung der Hohlräume, der Strömungswiderstand und das Volumen der eingedrungenen Lauge berechnet sowie das Schadstoffinventar bilanziert und Sorption und Ausfällung berücksichtigt. Die Laugenbewegung und der Schadstofftransport durch Advektion und Konvektion werden außerhalb der Segmentmodelle in jedem Zeitschritt berechnet (siehe Kapitel 4.4 und 4.6). Bei mehrsöhligen Grubengebäuden kann für jedes Segment die relative Teufe in Bezug auf ein Referenzniveau berücksichtigt werden.

Ein Grubengebäude kann aus einer Vielzahl gleichartiger Segmente bestehen, so daß es für einen **Logos**-Rechenlauf zweckmäßig ist, einzelne Segmente zu Einheiten zusammenzufassen. Voraussetzung hierfür ist, daß die zusammengefaßten Segmente in allen Parametern wie Temperatur, geometrischen Abmessungen und Schadstoffinventar übereinstimmen. Bei der Anordnung von Bohrlöchern mit gleichem Inhalt in einem Bohrlochfeld ist diese Vorgehensweise sehr effektiv. Es wird nur ein einziges Segment repräsentativ für alle gleichartigen modelliert und die weiteren Segmente über ihre Anzahl berücksichtigt, indem die Ausgangsströme des repräsentativen Segmentmodells mit dieser Anzahl multipliziert werden.

Außerdem kann es in verschiedenen Bereichen eines Grubengebäudes Segmente geben, in denen gleiche oder ähnliche Vorgänge ablaufen. Diese Segmente können, wenn sie sich in einigen wesentlichen Parametern unterscheiden, nicht zusammengefaßt werden, lassen sich aber durch dasselbe Segmentmodell beschreiben.

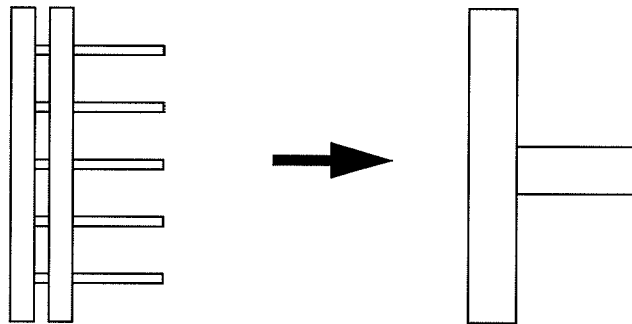


Abb. 2.6: Beispiel für die Zusammenfassung paralleler Strecken zu je einem Modellsegment

Für die Modellierung des Grubengebäudes ist es nützlich, die Unterteilung in Modellsegmente so vorzunehmen, daß abzweigende, gegebenenfalls zusammengefaßte Strecken oder Kammern und Bohrlöcher stets (zumindest näherungsweise) in der Mitte eines Segments ansetzen (siehe Abbildung 2.6). Dies kann gegebenenfalls durch eine weitere Unterteilung eines Segments erreicht werden (siehe beispielsweise die Streckensegmente 2 und 7 in Abbildung 2.7).

Als Folge des Kriechens von Salzgestein in die Hohlräume eines in einer Salzformation liegenden Grubengebäudes wird aus einem vollständig mit Lauge gefüllten Bereich Lauge ausgepreßt. Dieser Laugenstrom wird mit Konvergenzlaugenstrom bezeichnet. Bei Segmenten, die Strecken mit nichtkompaktierbarem Versatz repräsentieren (siehe Kapitel 3), fehlt der Konvergenzlaugenstrom. Der Einfachheit halber werden sie in der folgenden Diskussion wie Segmente mit einem Konvergenzlaugenstrom von Null behandelt.

Der Konvergenzlaugenstrom wird als Laugenquelle modelliert (siehe Kapitel 4.4.1), die in der Mitte eines jeden Segments angesetzt wird. Für die Modellierung des Laugen- und Schadstofftransports in beliebig vernetzten Segmentensystemen werden daher zweck-

mäßigerweise in der Mitte eines jeden Segments Knoten definiert (s. Abbildung 2.7). Die Knoten haben folgende Eigenschaften:

- sie befinden sich an Konvergenzpunkten (1), d.h. in der Mitte von Segmenten, an den Stellen, an denen der Konvergenzlaugenstrom als Quelle eingespeist wird,
- sie befinden sich gegebenenfalls an Verzweigungspunkten (2), d.h. an Stellen, an denen mehrere Segmente aneinander stoßen.

Mit der obigen Annahme, daß Verzweigungen immer in der Mitte eines Modellsegments angesetzt werden können, sind Knoten der Sorte 2 zugleich auch Konvergenzpunkte.

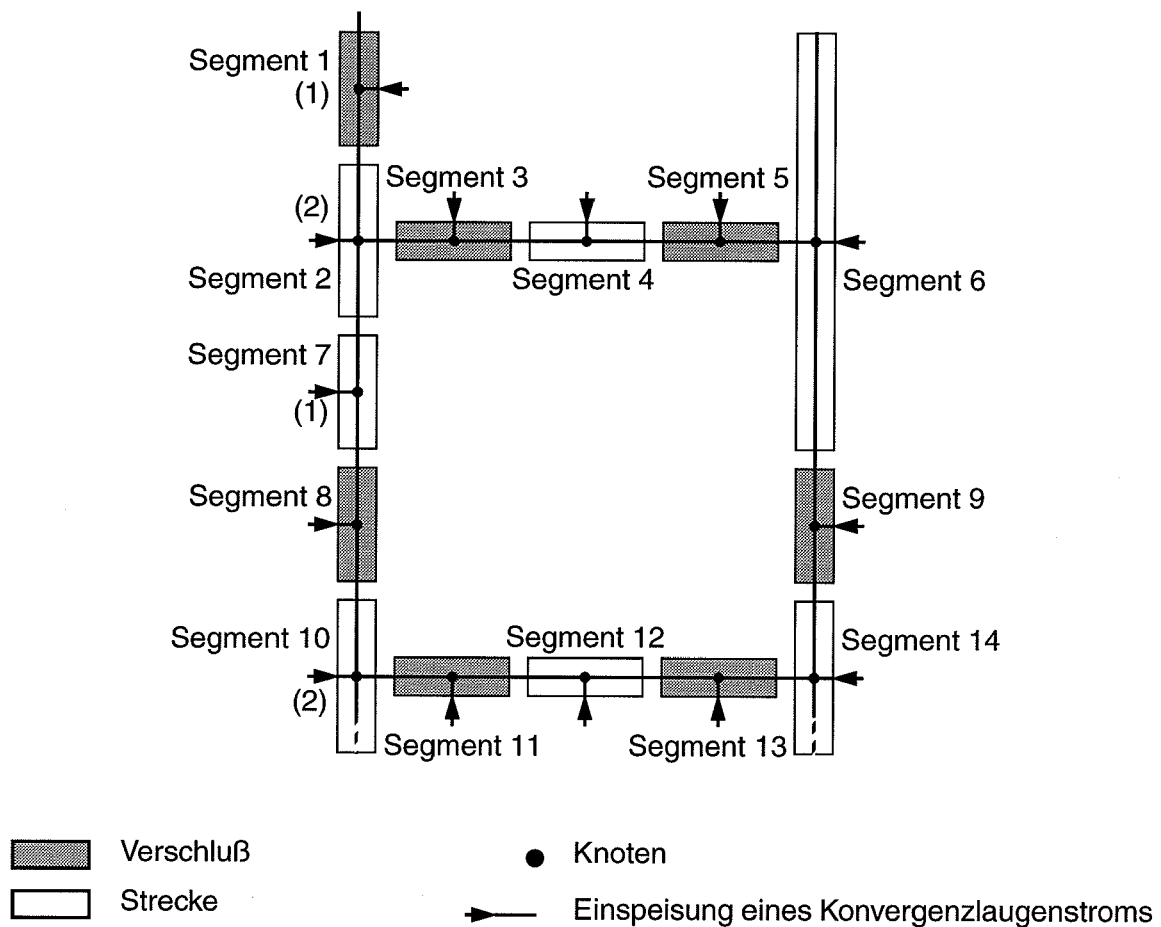


Abb. 2.7: Beispiel für die Aufteilung einer Ringstruktur in Segmente und die Definition von Knoten in einem Segmentsystem
 (1) Konvergenzpunkt mit Einspeisung
 (2) Verzweigungspunkt mit drei Einmündungen

Eine Unterscheidung von Knoten in Konvergenzpunkten und in Verzweigungspunkten ist daher nicht notwendig.

Alle bisher für die Modellierung von Grubengebäuden entwickelten Segmentmodelle werden in Kapitel 3 beschrieben. Es stehen zur Zeit 23 Segmentmodelle zur Verfügung.

Für Einlagerungsorte wurden Modelle von Bohrlöchern, Kammern und Einlagerungsstrecken entwickelt. Weiterhin gibt es Modelle für Verbindungsstrecken, die kompaktierbaren oder nichtkompaktierbaren Versatz enthalten oder nicht versetzt sind. Einige Modelle für spezielle Teile eines Grubengebäudes beschreiben diejenigen Segmente, in denen ein begrenzter oder unbegrenzter Laugenzufluß in das Endlager stattfinden kann. Dies sind die Segmente, welche eine Schnittstelle zum Deckgebirge oder die begrenzten Laugeneinschlüsse repräsentieren. Ein weiteres spezielles Segmentmodell dient der Modellierung von Randbedingungen für Bereiche des Segmentsystems, z.B. der Vorgabe eines konstanten Laugendrucks oder einer bestimmten Schadstoffkonzentration an den Rändern eines Streckensystems.

In einigen Segmentmodellen, z.B. für Verbindungsstrecken, können zusätzliche Hohlräume, sogenannte Zusatzvolumina, berücksichtigt werden, die nicht von Lauge durchströmt werden, aber am Auspressen der Lauge durch Gebirgskonvergenz beteiligt sind. Solche zusätzlichen Hohlräume existieren in Form von verfüllten Nebenräumen oder bei Richtstrecken als Verbindungen zu den Abwetterstrecken. Die Lauge in diesen Nebenräumen kann von Schadstoffen durch Austauscheffekte oder durch Diffusion erreicht werden und ist daher als kontaminiert anzusehen. Die Zusatzvolumina werden aber bei der Berechnung des Strömungswiderstandes für die Lauge nicht berücksichtigt.

2.3.1 Erstellung einer Eingabedatei mit der Segmentstruktur

In einer Eingabedatei wird für alle Knoten des Segmentsystems festgelegt, in welchem Segment der jeweilige Knoten liegt, an welchen Knoten sich das Segmentsystem verzweigt und welches die jeweiligen Nachbarknoten sind. Zur Erläuterung wird im folgenden das Aufstellen dieser Eingabedatei anhand des in Abbildung 2.7 gezeigten Beispiels vorgeführt.

Zunächst erhält jedes Segment einen eindeutigen Namen. Danach wird jedem Segment ein geeignetes Segmentmodell zugewiesen. Die Namen der Segmente und Modelle werden in einer anderen Eingabedatei mit den Segmentdaten aufgeführt. Durch die Reihenfolge in dieser Datei erhält jedes Segment programmintern eine Nummer.

Als nächstes werden entsprechend der Abbildung 2.7 Knoten definiert und in beliebiger Reihenfolge fortlaufend durchnummeriert. Der Einfachheit halber werden die oben erwähnten Segmentnamen so gewählt, daß z.B. das Segment, in dem der Knoten 1 liegt, den Namen SEGMENT1 usw. erhält. Dies ist jedoch in keiner Weise vorgeschrieben und auch nicht immer praktikabel. Es ist darauf zu achten, daß an jedem Verzweigungspunkt und in der Mitte eines jeden Segments ein Knoten eingefügt worden ist.

Bei einem beliebig vernetztes Segmentsystem ist es erforderlich, neben der Information über Nachbarknoten und damit über Nachbarsegmente, die relative Orientierung der Segmente zueinander festzulegen. Diese Information muß so kodiert sein, daß das Programm die Anordnung der Segmente bei der Berechnung der Strömungswiderstände berücksichtigen kann (s. Kapitel 4.3). Daneben werden diese Angaben bei einer graphischen Darstellung des Segmentsystems mit einem Postprozessor verwendet.

Die Angaben in der Eingabedatei mit den Strukturdaten erfolgen in der Reihenfolge:

Knotennummer K, Segment S(K), Orientierung des Segments O(S(K)) sowie für jede Raumrichtung (+x,+y,+z,-x,-y,-z) Nummern der Nachbarknoten. Für das Beispielsystem in Abbildung 2.7 erhält man:

>> Strukturdaten für das Beispiel-Segmentsystem aus Abbildung 2.7 <<

1	SEGMENT1	Y	0	0	0	0	2	0
2	SEGMENT2	Y	3	1	0	0	7	0
3	SEGMENT3	X	4	0	0	2	0	0
4	SEGMENT4	X	5	0	0	3	0	0
5	SEGMENT5	X	6	0	0	4	0	0
6	SEGMENT6	Y	0	0	0	5	9	0
7	SEGMENT7	Y	0	2	0	0	8	0
8	SEGMENT8	Y	0	7	0	0	10	0
9	SEGMENT9	Y	0	6	0	0	14	0

10	SEGMENT10	Y	11	8	0	0	0	0
11	SEGMENT11	X	12	0	0	10	0	0
12	SEGMENT12	X	13	0	0	11	0	0
13	SEGMENT13	X	14	0	0	12	0	0
14	SEGMENT14	Y	0	9	0	13	0	0

Hierbei bedeutet Knotennummer 0, daß in der betreffenden Richtung kein Nachbarknoten und damit kein Nachbarsegment vorhanden ist. Die so angelegte Strukturdatei enthält alle Informationen über die Zuordnung von Knotennummern und Segmentnamen, über die Anzahl und die Nummern der Nachbarknoten und über die relative Orientierung der Segmente. Letztere wird für die Berechnung der Leitwerte $R_{i,j}^{-1}$ (s. Kapitel 4.3) zwischen den Knoten i und j benötigt.

Daneben enthält die Strukturdatei auch die Informationen, die für eine schematische graphische Darstellung des Segmentsystems erforderlich sind. Zur maßstabsgerechten Darstellung werden noch Informationen über die Abmessungen der Segmente benötigt. Diese sind in der Eingabedatei mit den Segmentdaten abgelegt.

2.3.2 Ausgangsgrößen eines Segmentmodells

Für die Berechnung der Laugenbewegung und des Schadstofftransports werden zu jedem Zeitpunkt t vom Segmentmodell die Werte der folgenden Variablen geliefert:

- Zustand des Segments bzgl. Laugenbewegung (Status),
- Höhe $H(t)$,
- Breite $B(t)$,
- Volumen $V(t)$,
- Porosität $\phi(t)$,
- gesamtes Porenvolumen $V_{P,ges}(t)$,
- gesamtes Laugenvolumen $V_{L,ges}(t)$,
- Zusatzvolumen $V_Z(t)$,
- druckunabhängiger Anteil der Konvergenz $\beta(V,\phi,T)$,
- Laugendruck aus dem vorherigen Zeitschritt $p(t-\Delta t)$,

- Strömungswiderstand $R(t)$ bzw. Leitwert $R^{-1}(t)$,
- Diffusionskoeffizient $D(T)$,
- Dichteänderung der Lauge $\Delta\rho(t)$,
- aktuelles gesamtes Aktivitäts- bzw. Schadstoffinventar $A_{ges}(t)$,
- Aktivitäts- bzw. Schadstoffinventar in Lösung $A(t)$,

sowie einige Variablen, die für die Berechnung obiger Größen verwendet werden:

- Konvergenzrate $K(t)$,
- Querschnitt $F(t)$,
- Länge L ,
- Permeabilität $k(t)$,
- Temperatur $T(t)$.

Für die Berechnung der Laugendrücke werden hiervon direkt verwendet:

- druckunabhängiger Anteil der Konvergenz $\beta(V,\phi,T)$,
- Zustand des Segments bzgl. Laugenbewegung (Status),
- Höhe $H(t)$,
- Porosität $\phi(t)$,
- Laugendruck aus dem vorherigen Zeitschritt $p(t-\Delta t)$,
- Strömungswiderstand $R(t)$ bzw. Leitwert $R^{-1}(t)$,
- gesamtes Laugenvolumen $V_{L,ges}(t)$,
- gesamtes Porenvolumen $V_{P,ges}(t)$.

Zur Berechnung von Austauschereffekten durch Dichtegradienten, Diffusion und Dispersion werden verwendet:

- Diffusionskoeffizient $D(T)$,
- Dichteänderung der Lauge $\Delta\rho(t)$,
- Höhe $H(t)$,
- Breite $B(t)$,
- Länge L ,
- Porosität $\phi(t)$,

- Permeabilität $k(t)$.

Für die Berechnung der Schadstoffströme werden neben den Laugenströmen und den Austauschströmen zusätzlich verwendet:

- Aktivitäts- bzw. Schadstoffinventar in Lösung $A(t)$,
- gesamtes Laugenvolumen $V_{L,ges}(t)$.

Die zeitabhängigen Variablen stehen in jedem Knoten des Segmentsystems zur Verfügung. Damit können z.B. Leitwerte $R_{i,j}^{-1}$ (s. Kapitel 4.3.2), Laugenströme $S_{i,j}$ (s. Kapitel 4.4.2) und Aktivitäts- bzw. Schadstoffströme $\dot{A}_{i,j}$ (s. Kapitel 4.6 ff) zwischen den Knoten und somit von einem Segment zu den Nachbarsegmenten berechnet werden. Spezielle Eigenschaften eines Segments, z.B. ob es versetzt ist, ob es konvergieren kann, welchen Teilbereich des Grubengebäudes das Segmentmodell beschreiben soll usw., werden im folgenden Kapitel 3 beschrieben.

2.4 Ablauf einer Freisetzungsberechnung

Eine Freisetzungsberechnung mit dem Programm **Lopos2** umfaßt programmtechnisch einen Eingabeteil und einen Rechenteil. Der Eingabeteil besteht aus dem Programm ILOPOS und hat die Aufgabe, die eingegebenen Daten für die Rechnung aufzubereiten und den Rechenteil CLOPOS mit Daten zu versorgen (s. Kapitel 2.4.1 und 2.4.2). Im Rechenteil werden die Schadstoffströme, die Laugenströme und andere zeitabhängige Größen für alle Bereiche des Grubengebäudes zeitschrittweise berechnet (s. Kapitel 2.4.3).

Wie im vorigen Kapitel dargestellt, wird ein Endlager für eine Freisetzungsberechnung in Segmente aufgeteilt. Die Anzahl und die Anordnung der einzelnen Segmente sind vom angenommenen Szenario und dem betrachteten Grubengebäude abhängig und frei wählbar. Alle Modelle werden bei jedem Zeitschritt einer **Lopos2**-Rechnung in der Reihenfolge abgearbeitet, in der sie in der Datei mit den Segmentdaten abgelegt sind. Dieser Programmteil wird im folgenden als Segmentenschleife bezeichnet.

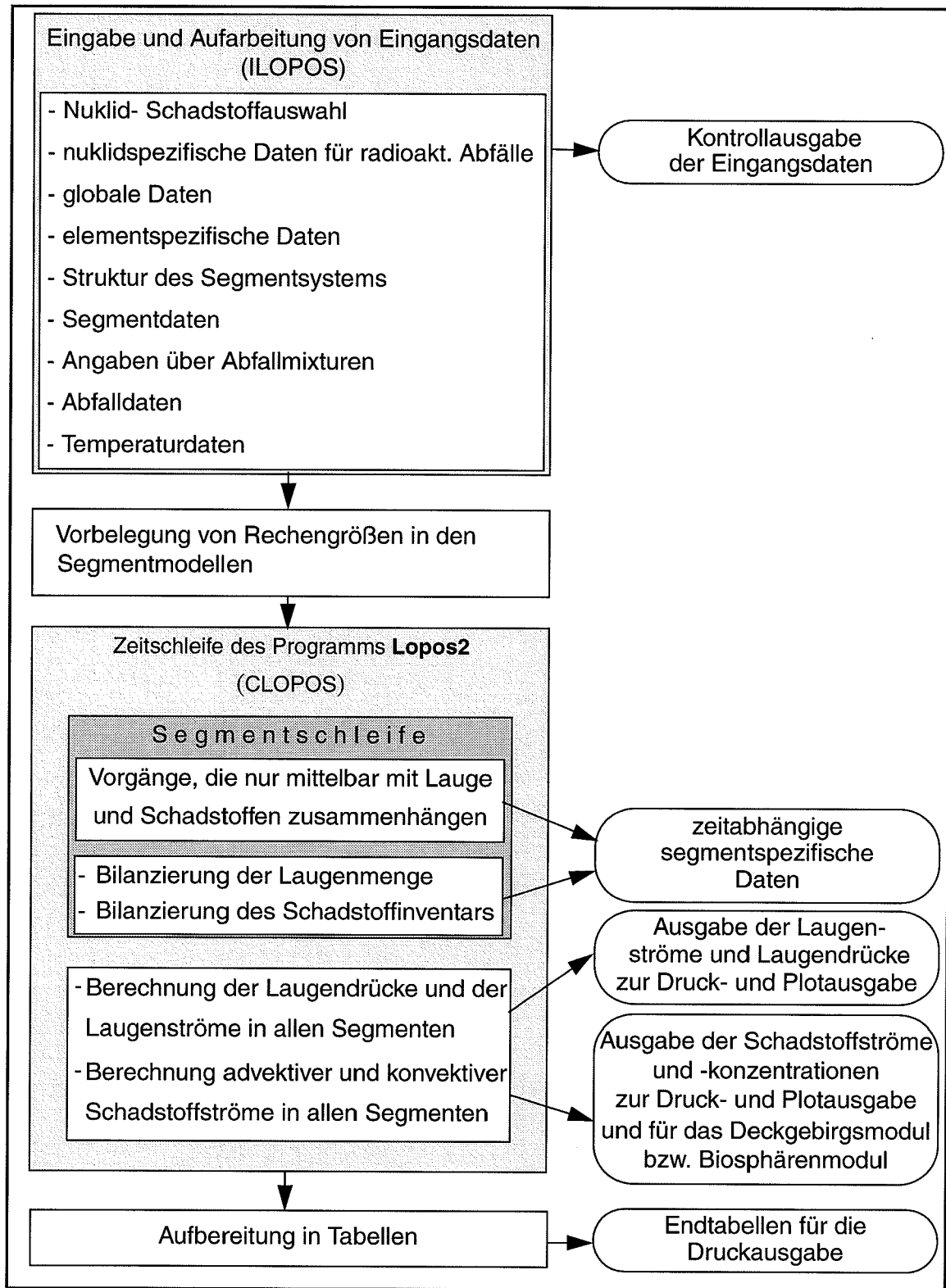


Abb. 2.8: Fließschema einer Freisetzungsberechnung mit dem Eingabeteil ILOPOS und dem Rechenteil CLOPOS. Die Segmentschleife wird innerhalb der Zeitschleife bei jedem Zeitschritt einmal durchlaufen.

Der Ablauf einer Freisetzungsrechnung ist in Abbildung 2.8 schematisch dargestellt. Der obere Teil dieser Abbildung beschreibt die Eingabe und Aufarbeitung der Eingangsdaten im Programmteil ILOPOS. Vor Beginn der Zeitschleife werden einige Eingangsdaten auf lokale Variablen in den Segmentmodellen zugewiesen. Im mittleren Teil der Abbildung ist die Zeitschleife des Programms **Lopos2** dargestellt. In dieser Schleife werden einerseits alle Rechnungen der Segmentschleife durchgeführt und andererseits die Laugendrucke, Laugenströme und die Schadstoffströme für alle Segmente global berechnet. Am Beginn und Ende der Rechnung werden Daten für die Druckausgabe abgespeichert, während des Durchlaufens der Zeitschleife werden wahlweise zeitabhängige Daten in Dateien für die Druckausgabe und die graphische Ausgabe abgespeichert.

2.4.1 Datenversorgung

Alle Eingangsdaten für einen Rechenlauf sind entweder in der Datenbibliothek oder in der modulspezifischen Eingabedatei abgelegt. Die Eingabe und Aufbereitung der Daten für **Lopos2** erfolgt über den Programmteil ILOPOS. Für jede Freisetzungsrechnung werden aus der Datenbibliothek beispielsweise Eingangsdaten für die Segmente des Grubengebäudes, Daten über die Verknüpfung der Segmente zu einem Grubengebäude, Daten über die Art und Anzahl der eingelagerten Abfälle, sowie allgemeine physikalische und chemische Daten benötigt (siehe Tabelle 2.1).

Weitere Eingabegrößen, die für den **Lopos**-Rechenlauf benötigt werden, stehen in der modulspezifischen Eingabedatei zur Verfügung. Diese Datei enthält für eine Freisetzungsrechnung die folgenden Angaben:

- Namen der benötigten Bibliotheksdateien,
- Schadstoffauswahl für die **Lopos**-Rechnung,
- Auswahl eines Segmentes, für das die Schadstofffreisetzung aus dem Endlager berechnet werden soll (= Schnittstelle zur Deckgebirgs- bzw. Biosphärenrechnung),
- Steuerparameter für die Druck- und Plotausgabe,
- Steuerparameter für die Berechnung der Zeitschrittweite,

Tabelle 2.1: Eingabedaten für **Lopos2**

Art der Eingabedatei	Inhalt der Eingabedatei
nuklidspezifische Daten (NUDA-Datei) für radioaktive Abfälle bzw. schadstoffspezifische Daten	für jedes ausgewählte Nuklid: Elementsymbol und Massenzahl, Halbwertszeit, Strahlungsart (α , β , γ), Verknüpfung der Zerfallsreihen, Massenkonzentrationsfaktoren Kurzbezeichnungen der Schadstoffe
globale Daten (GODA-Datei)	Referenz-Konvergenzrate, physikalische Konstanten, Gebirgsdruck und hydrostatischer Druck, Anfangsporositäten, Endporosität, Permeabilitäten, Parameter der Modellansätze
elementspezifische Daten (ELDA-Datei)	für jedes Element: Mobilisierungsdauern, Löslichkeitsgrenzen, Sorptionsdaten
Strukturdaten (SUDA-Datei)	Verknüpfungsplan der Segmente eines Grubengebäudes
Segmentdaten (BADA-Datei)	für jedes Segment: Zuordnung des Segmentmodells, geometrische Abmessungen, Angaben über zusätzliche Hohlräume, Einlagerungszeitpunkte, Angaben zur Temperaturberechnung, Reduktionsfaktoren für die Konvergenz der Hohlräume zur Berücksichtigung der Stützwirkung von Behältern oder Versatz, segmentspezifische Anfangswerte
Angaben zu den Abfallmixturen (AMDA-Datei)	für jede Abfallmischung: Zusammensetzung der Mischung aus Einzel- abfällen
Abfalldaten (ABDA-Datei)	für jeden Gebindetyp: Massen und Volumina der Abfallgebände, abfallspezifische Zwischenlagerzeit, Schadstoff-/Nuklidinventare
Temperaturdaten (TEDA-Datei)	für jede räumliche Stützstelle: Temperaturwerte zu festen Zeitpunkten

- Zeitangaben zum Szenarienablauf:
 - Dauer der Freisetzungsrechnung,
 - Dauer der Betriebsphase des Endlagers,
 - Zeitpunkt des Laugenzutritts in das Endlager,
 - globale Zwischenlagerzeit für alle radioaktiven Abfälle,
- Steuerparameter für die Berechnung des Laugenzuflusses in Segmente.

Alle eingelesenen Daten werden im Programmteil ILOPOS in COMMON-Blöcken gespeichert und stehen damit allen Programmen des Moduls **Lopos** zur Verfügung. Zur Kontrolle der Eingangsdaten werden diese für jeden Rechenlauf in der Problembeschreibungsdatei (Datei mit der Namensweiterung pbd) abgelegt.

2.4.2 Schadstoffauswahl

Für eine Freisetzungsrechnung aus einem Endlager für radioaktive Abfälle benötigt das Programm **Lopos2** aus der Datenbibliothek zwei Dateien mit nuklidspezifischen Daten. Eine Datei enthält die Nuklidinventare und andere Abfalldaten für jeden Abfalltyp, die andere Datei die übrigen nuklidspezifischen Daten, wie Halbwertszeiten, Strahlungsart und Massenkonversionsfaktoren. Aus dieser Datenbasis für eine große Anzahl von Nukliden kann durch Auswahl einzelner Nuklide eine beliebige Teilmenge verwendet werden. Der Zweck der NuklidAuswahl ist vor allem die Reduzierung der Rechenzeit für eine Freisetzungsrechnung, da viele Berechnungen in Nuklidschleifen erfolgen. Außerdem ergibt sich eine bessere Übersichtlichkeit und leichtere Interpretierbarkeit von Ergebnissen durch die Beschränkung auf wesentliche Nuklide.

Die Nuklide werden in der modulspezifischen Eingabedatei durch Angabe ihrer Namen ausgewählt. Im Programmteil ILOPOS werden für die ausgewählten Nuklide die entsprechenden Daten aus der nuklidspezifischen Datenbasis in **Lopos**-spezifische COMMON-Blöcke übernommen. In diesem Programmteil wird also der Nuklidvektor der Datenbasis verkürzt und gleichzeitig der Bezug der einzelnen Nuklide untereinander in den Zerfallsketten neu festgelegt.

Bei einer **Lopos**-Rechnung werden die Inventare der ausgewählten Nuklide entsprechend der Nuklidauswahl aus der Datei mit den Abfalldaten übernommen. Außerdem besteht die Option, die Inventare von nicht ausgewählten, in der Regel kurzlebigen Mutternukliden, zu den Inventaren der ausgewählten Tochternuklide zu addieren.

Für ein Endlager mit chemisch-toxischen Abfällen treten an die Stelle der Nuklide eindeutige Bezeichnungen für die chemisch-toxischen Schadstoffe. Die Datei mit den nuklidspezifischen Daten enthält die Bezeichnungen der zu berücksichtigenden Schadstoffe, die Datei mit den Abfalldaten deren Inventare.

Die elementspezifischen Daten für eine Freisetzungsrechnung stehen in einer anderen Datei der Bibliothek zur Verfügung. Aus dieser Datei werden die Datensätze für solche chemische Elemente übernommen, die entsprechend der Nuklidauswahl notwendig sind.

Bei jeder Datenübernahme aus Dateien wird geprüft, ob die für die Nuklidauswahl benötigten Daten vorhanden sind und ob die Nuklidauswahl mit anderen Angaben verträglich ist.

2.4.3 Die Zeitschleife des Programms Lopos2

Nach der Eingabe und Aufbereitung der Daten sowie der Schadstoffauswahl im Programmteil ILOPOS wird mit der Zeitschleife des Programmteils CLOPOS die eigentliche Freisetzungsrechnung begonnen (siehe Abbildung 2.8). Für jeden Zeitpunkt ab Beginn der Betriebsphase bis zum vorgesehenen Ende der Freisetzungsrechnung werden in variablen Zeitschritten für alle Segmente eines Grubengebäudes die für die Freisetzung relevanten Größen berechnet, z.B. die Änderungen der geometrischen Abmessungen der Segmente und der Porosität des Versatzmaterials durch die Konvergenz, die Strömungswiderstände sowie die Laugen- und Schadstoffströme. Kernstück der Zeitschleife sind die Rechnungen innerhalb der Segmentschleife, also die Berechnung aller Vorgänge in den einzelnen Segmenten des Grubengebäudes. Erreicht das Segment, welches die Schnittstelle zum Deckgebirge beschreibt, seine Endporosität, so wird die Zeitschleife vorzeitig beendet.

Zur numerischen Lösung der Differentialgleichungen, welche die wesentlichen Vorgänge im Grubengebäude beschreiben, werden folgende Diskretisierungen vorgenommen:

- räumliche Diskretisierung in Segmente, in denen einige Parameter als ortsunabhängig angesehen werden können (Kapitel 2.4.1),
- zeitliche Diskretisierung zur Umwandlung der Differentialgleichungen in Differenzgleichungen.

In den folgenden Kapiteln werden zunächst die Rechenschritte beschrieben, die aus der räumlichen Diskretisierung herrühren (Kapitel 2.4.4) und danach die in der Zeitschleife außerhalb der Segmentschleife notwendigen Rechnungen (Kapitel 2.4.5). In Kapitel 2.2 wurde bereits das Verfahren geschildert, das zur Festlegung einer neuen Zeitschrittweite führt.

2.4.4 Die Segmentschleife

In der Segmentschleife werden Segmentmodelle entsprechend der Struktur des Grubengebäudes durchlaufen und die jeweiligen Ausgangsgrößen berechnet. Die Reihenfolge des Durchlaufs durch das Segmentssystem ist in der Datei mit den Segmentdaten festgelegt.

In jedem Segment werden die zeitabhängigen segmentspezifischen Größen wie lokale Konvergenzrate, Hohlraumvolumen, Versatzporosität, Laugenvolumen, gelöstes Schadstoffinventar, Permeabilität und Strömungswiderstand berechnet. Als Ausgangsgrößen werden hiervon beispielsweise Konvergenzrate, Strömungswiderstand, Laugenvolumen und Schadstoffinventar an die Programme zur Berechnung des Laugendruckes und der Laugen- und Schadstoffströme außerhalb der Segmentschleife weitergegeben. Die berechneten Drücke und Ströme sind im nächsten Zeitschritt Eingangsgrößen für die Segmente, in denen hieraus die Konvergenzrate und die Volumen- und Widerstandsänderung, das Laugenvolumen und das Schadstoffinventar neu berechnet werden.

2.4.5 Rechnungen außerhalb der Segmentschleife

Der Laugendruck in allen Segmenten und die Laugen- und Schadstoffströme von den Segmenten zu den jeweiligen Nachbarsegmenten werden global nach der Segmentschleife in allen mit Lauge gefüllten Segmenten gleichzeitig berechnet (siehe Kapitel 4.4 und 4.6). Diese Vorgehensweise ermöglicht die Berechnung der Ströme in einem Netzwerksystem. Außerdem werden numerische Probleme vermieden und Rechenzeit eingespart.

Nach Beendigung der Segmentschleife und nach der Bestimmung der Laugen- und Schadstoffströme werden alle neu berechneten Größen für eine eventuelle Druck- und Plotausgabe sowie zur Übergabe an ein Deckgebirgsmodul oder Biosphärenmodul in Ausgabedateien gespeichert (siehe Abbildung 2.8). Bei Bedarf werden Kontrollrechnungen über das aktuelle Schadstoffinventar in allen Segmenten durchgeführt. Zum Abschluß wird der nächste anzusteuernde Zeitpunkt, bzw. die neue Zeitschrittweite berechnet (siehe Kapitel 2.2).

Die Zeitschrittweiten in **Lopos** orientieren sich an den Erfordernissen einer Freisetzungsberechnung und sind variabel. Dadurch liegen die Freisetzungsraten aus einem Freisetzungsort in das Deckgebirge bzw. die Schadstoffkonzentrationen zu variablen Zeitpunkten vor. Einer anschließenden Deckgebirgs- oder Biosphärenrechnung werden die Freisetzungsraten bzw. Schadstoffkonzentrationen ab Beginn der Freisetzung mit Hilfe von Dateien übergeben.

2.5 Datenübergabe an weitere Module

Als Ergebnis einer Berechnung der Schadstoffmobilisierung aus den Abfällen und der Transportvorgänge im Grubengebäude werden Freisetzungsraten, der aus dem Grubengebäude ausgepreßte Laugenstrom und die Schadstoffkonzentrationen im Segment, das die Schnittstelle zum Deckgebirge oder ggfs. zur Biosphäre beschreibt, ausgegeben. Diese Daten werden gemeinsam mit den dazugehörigen Zeitpunkten in eine Datei mit der Namensweiterung `rsk` geschrieben. Die Werte werden entweder zu jedem berechneten Zeitpunkt ausgegeben oder zu Zeitpunkten, deren Anzahl pro Dekade in der mo-

dulspezifischen Eingabedatei ausgewählt wird. Die Datei rsk dient als Eingabedatei für eine nachfolgende Deckgebirgs- oder Biosphärenrechnung.

2.6 Ergebnisdarstellung

Für die Druckausgabe und für die graphische Ausgabe zeitabhängiger Größen wird eine Gruppe von zusammengehörenden Dateien erstellt, die nach Beendigung des **Lopos**-Rechenlaufes mit Postprozessoren bearbeitet werden können.

Außerdem wird während eines **Lopos**-Rechenlaufes eine Datei mit der Namenserverweiterung out angelegt, in die Steuerparameter der Ergebnisausgabe, Meldungen über die erfolgreiche Übernahme der Eingangsdaten bzw. Fehlermeldungen ausgegeben werden. In diese Datei werden nach Beendigung der Rechnung wahlweise Endergebnisse wie Freisetzungsmengen, Laugenvolumina, charakteristische Zeitpunkte der Freisetzungsberechnung sowie Zeitpunkte des Erreichens von Löslichkeitsgrenzen in einzelnen Teilbereichen des Grubengebäudes und Maximalkonzentrationen ausgegeben.

Zur Kontrolle der Steuermechanismen der zeitabhängigen Rechnung und zur Information des Benutzers, welche Effekte und Segmente des Grubengebäudes die Zeitschritte steuern, wird die Datei mit der Namenserverweiterung rad angelegt.

Eine weitere Datei mit der Namenserverweiterung ret enthält ausgewählte Tabellen mit Endergebnissen der Rechnung. Die Datei ist so angelegt, daß die Werte mit einem Postprozessor in Tabellenform für eine Dokumentation verarbeitet werden können. Daneben wird eine Problembeschreibungsdatei (pbd-Datei) angelegt, die alle Eingangsdaten und Steuerdaten des Rechenlaufs enthält. Diese Datei ermöglicht die Kontrolle der korrekten Datenversorgung des Rechenlaufs.

Die zu erstellenden Dateien und deren Inhalte werden in der modulspezifischen Eingabedatei ausgewählt.

3 Die Segmentmodelle

Zur Modellierung der Vorgänge im Endlager wird das Grubengebäude in geeigneter Weise in einzelne Segmente zerlegt. Die Vorgehensweise bei der Zerlegung in Segmente ist in Kapitel 2 dargestellt.

Zur Beschreibung der Vorgänge in einem einzelnen Segment wurden Segmentmodelle für eine Reihe von Segmenttypen entwickelt. Solche Segmentmodelle können dann für jedes Segment dieses Typs verwendet werden. Somit können Grubengebäude, die zum Beispiel in mehrere hundert Segmente untergliedert wurden, durchaus mit weniger als zehn unterschiedlichen Segmentmodellen beschrieben werden. Unterschiedliche Vorgänge in den Segmenten können dabei durch segmentspezifische Parameterbeschreibungen berücksichtigt werden.

Die Zuordnung der Segmentmodelle zu den Segmenten geschieht durch Angabe des Namens des Segmentmodells in der Datei mit den Segmentdaten. Die zur Zeit verfügbaren Segmentmodelle lassen sich in drei Gruppen einordnen:

1. Segmentmodelle für Einlagerungsorte:

- Modell eines Bohrlochs mit Stopfen für die Einlagerung von hoch- und mittelaktiven Abfällen (HAW und MAW), mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten durch den Stopfen,
- Modell einer versetzten Kammer ohne Verschuß für die Einlagerung von MAW, schwachaktiven Abfällen (LAW) sowie abgebrannten Brennelementen aus Leichtwasserreaktoren (LWR), mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten aus der Kammer,
- Modell einer versetzten Kammer mit kompaktierbarem Verschuß für die Einlagerung von MAW, LAW und LWR, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten durch den Verschuß,
- Modell einer teilversetzten Kammer mit nicht-kompaktierbarem Verschuß für die Einlagerung von MAW, LAW und LWR, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten durch den Verschuß,

- Modell einer teilversetzten Kammer mit einem durch Gasproduktion beschleunigten Auspressen der Lauge, mit nicht-kompaktierbarem Verschuß für die Einlagerung von MAW, LAW und LWR, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten durch den Verschuß.

Im Bohrlochmodell wird der anfangs vorhandene Ringspalt vernachlässigt, da dieser im allgemeinen innerhalb sehr kurzer Zeit infolge der Konvergenz des umgebenden Salzgesteins verschwindet. Im Modell der teilversetzten Kammer werden der offene Hohlraum und der versetzte Bereich getrennt modelliert, da sie sich beim Konvergenzvorgang unterschiedlich verhalten. Einlagerungssegmente sind i.a. mit einem Verschuß versehen. Dieser Verschuß kann aus kompaktierbarem Material, z.B. Salzgrus, oder aus nichtkompaktierbarem Material, z.B. Beton, bestehen. Zur feineren Unterteilung einer Kammer gibt es außerdem ein Kammermodell ohne Verschuß.

2. Segmentmodelle für Verbindungsstrecken:

- ein Modell für ein versetztes Streckenelement mit rechteckigem Querschnitt, mit kompaktierbarem Versatz, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- ein Modell für ein versetztes Streckenelement mit rechteckigem Querschnitt, mit nichtkompaktierbarem Versatz, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- ein Modell für ein versetztes Streckenelement mit rundem Querschnitt, mit kompaktierbarem Versatz (z.B. Rolloch), mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- ein Modell für ein versetztes Streckenelement mit rundem Querschnitt, mit nichtkompaktierbarem Versatz (z.B. Schacht), mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- ein Modell für ein nicht versetztes Streckenelement (offene Strecke) mit Strömungswiderstand nach Hagen-Poiseuille, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion, Austausch durch Dichtegradienten und instantane Durchmischung der Schadstoffe mit denen in offenen Bereichen in Nachbarsegmenten,
- ein Modell für ein nicht versetztes Streckenelement (offene Strecke) mit konstantem Strömungswiderstand, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Di-

- persion, Austausch durch Dichtegradienten und instantane Durchmischung der Schadstoffe mit denen in offenen Bereichen in Nachbarsegmenten,
- ein Modell für ein Streckenelement mit nicht-kompaktierbarem Mineralgemisch-Versatz, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- sowie das Modell der diese Strecke umgebenden Auflockerungszone, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- ein Modell für ein Streckenelement mit nicht kompaktierbarem Kiessand-Versatz, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten.

Den Streckensegmenten, mit Ausnahme der Segmente Mineralgemischstrecke, Kiessandstrecke, Auflockerungszone und Schachtsegment, kann ein beliebig großes Zusatzvolumen beigefügt werden, das Laugenmengen aufnehmen kann, aber nicht zum Strömungswiderstand beiträgt. Jedes Zusatzvolumen, auch das der offenen Strecken, kann Versatzmaterial enthalten (Eingabe einer Versatzporosität < 1).

3. Segmentmodelle für spezielle Teile des Grubengebäudes:

- ein Modell für die Beschreibung des Laugenzutrittsortes bzw. Laugenaustrittsortes mit rechteckigem Querschnitt, versetzt mit nichtkompaktierbarem Material, mit Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten,
- ein Modell für die Beschreibung des Laugenzutrittsortes bzw. Laugenaustrittsortes mit rechteckigem Querschnitt, versetzt mit nichtkompaktierbarem Material, wobei die Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten mit konstantem effektiven Querschnitt und effektiver Länge erfolgt,
- ein Modell für die Beschreibung des Laugenzutrittsortes bzw. Laugenaustrittsortes mit rechteckigem Querschnitt, versetzt mit nichtkompaktierbarem Material, ohne Modellierung der Austauscheffekte,
- ein Modell für die Beschreibung des Laugenzutrittsortes bzw. Laugenaustrittsortes mit rundem Querschnitt, versetzt mit nichtkompaktierbarem Material, mit Modellie-

- ein Modell für die Beschreibung des Laugenzutrittsortes bzw. Laugenaustrittsortes mit rundem Querschnitt, versetzt mit nichtkompaktierbarem Material, wobei die Modellierung der Austauscheffekte Diffusion, Dispersion und Austausch durch Dichtegradienten mit konstantem effektiven Querschnitt und effektiver Länge erfolgt,
- ein Modell für die Beschreibung des Laugenzutrittsortes bzw. Laugenaustrittsortes mit rundem Querschnitt, versetzt mit nichtkompaktierbarem Material, ohne Modellierung der Austauscheffekte,
- ein spezielles Modell zur Simulation fester Druckrandbedingungen und vorgegebener Schadstoffkonzentration auf dem Rand.

Diese Modelle erlauben den Zutritt von Lauge ins Endlager zu vorgegebenen Zeitpunkten. Die entsprechenden Segmente können z.B. Teile eines Abschlußbauwerks oder des Schachts darstellen. Das Modell mit vorgegebenen Randbedingungen kann in Testrechnungen für Beispiele verwendet werden, für die analytische Lösungen existieren.

Im Kapitel 3.2 werden die Segmentmodelle und deren Besonderheiten detailliert beschrieben.

3.1 Behandlung der physikalischen und chemischen Effekte

In **Lopos2** werden die folgenden physikalischen und chemischen Effekte berücksichtigt, die für die Laugenbewegung und den Schadstofftransport in einem Grubengebäude im Salinar verantwortlich sind:

- Konvergenz des Salzgesteins,
 - Volumenverringern aufgefahrener Hohlräume,
 - Kompaktierung von Salzgrusversatz und anderen kompaktierbaren Materialien,
- Laugentransport durch Druckgradienten,
 - Strömung nach Darcy im Versatz,
 - Strömung nach Hagen-Poiseuille im offenen Bereich,
- konvektive Laugenbewegung durch Dichtegradienten,

- Schadstofftransport durch Advektion, Dispersion, Diffusion und Konvektion,
- instantane Durchmischung der Schadstoffe in offenen Bereichen,
- radioaktiver Zerfall und Aufbau von Tochternukliden bei radioaktiven Abfällen,
- Ausfällung der Schadstoffe bei Erreichen von Löslichkeitsgrenzen,
- Sorption der Schadstoffe an Versatzmaterialien oder Korrosionsprodukten.

Ein Segmentmodell enthält im wesentlichen eine Abfolge von Unterprogrammen, in denen die oben aufgelisteten Effekte behandelt werden. Sie sind im folgenden in der Reihenfolge aufgeführt, in der sie in den Segmentmodellen aufgerufen werden. In den einzelnen Unterprogrammen werden die folgenden Größen berechnet:

- Temperatur zur Zeit $t - \Delta t$ im Versatz und, sofern vorhanden, im Verschuß,
- temperaturabhängiger Diffusionskoeffizient,
- Dichteänderung durch z.B. Zementauflösung und Temperaturerhöhung,
- Konvergenzrate,
- Anzahl ausgefallener, korrodierter Behälter in Einlagerungssegmenten und Schadstoffmobilisierung aus der Abfallmatrix,
- Bilanz des Schadstoff- bzw. Nuklidinventars und radioaktiver Zerfall der Nuklide,
- Auswirkung der Konvergenz im Versatz und im Zusatzvolumen,
- Temperatur zur Zeit t im Versatz und, sofern vorhanden, im Verschuß,
- druckunabhängiger Anteil der Konvergenz,
- Zustand eines Segments bezüglich der Laugenbewegung und Bilanz des Laugen-
volumens; die Zuflußzeiten werden abgespeichert,
- Sorption und Ausfällung in Streckensegmenten bzw. in Einlagerungssegmenten,
- Schadstofftransport in den Blöcken eines diskretisierten Streckensegments,
- Permeabilität des Versatzmaterials,
- inverser Strömungswiderstand einer versetzten bzw. einer offenen Strecke,
- Endporositätskontrolle bzw. Kontrolle des Endvolumens einer offenen Strecke.

Die zeitliche Abfolge für die Berechnung der Effekte ist in allen Segmenten gleich. Sie berücksichtigt, daß zur Berechnung einer Größe zur Zeit t sowohl Werte anderer Variablen dieses Segments zur Zeit t als auch Werte derselben Größe aus dem vorangehenden Zeitschritt $t - \Delta t$ benötigt werden.

Laugendrucke, Laugenströme und Schadstoffströme werden für alle Segmente zugleich außerhalb der Segment schleife berechnet. Die Segmentmodelle stellen die hierfür erforderlichen Eingangsgrößen wie den druckunabhängigen Anteil der Konvergenzrate, den Strömungswiderstand, das aktuelle Poren- und Laugenvolumen, das gelöste Schadstoffinventar sowie die für Austausch effekte benötigten Größen Diffusionskoeffizient, Dispersionslänge und Dichteänderung der Lauge bereit.

Eine ausführliche Beschreibung der physikalischen und chemischen Effekte erfolgt in Kapitel 4, wobei auf ihre Modellierung und die dazu erforderlichen Daten und Parameter eingegangen wird.

Neben den genannten Unterprogrammen für physikalische und chemische Effekte gibt es einige Routinen zur Programmsteuerung, die ebenfalls von den Segmentmodellen aufgerufen werden. Diese Programme dienen dazu,

- die Variablen für Inventare in Einlagerungssegmenten vorzubelegen,
- alle Ströme und den inversen Widerstand auf Null zu setzen, wenn die Porosität vom Versatzmaterial oder Verschluß des Segmentes einen Wert kleiner als die Endporosität erreicht hat,
- einen segmentspezifischen Zeitpunkt für die Zeitschrittsteuerung zu setzen,
- einen Wert für die nächste Zeitschrittweite vorzuschlagen und
- einen definierten Programmabbruch beim Auftreten eines Eingabefehlers zu ermöglichen.

Die Anzahl der berücksichtigten Effekte unterscheidet sich in den einzelnen Segmentmodellen. Dies trifft insbesondere auf die Permeabilität und den Strömungswiderstand sowie auf die Austausch effekte zu, die nicht in allen Segmenten gleich behandelt werden. Daher wird bei den Beschreibungen der einzelnen Segmentmodelle im Kapitel 3.2 jeweils ein schematischer Überblick der betrachteten Effekte gegeben.

3.1.1 Zusammenwirken der Effekte

Die innerhalb eines Segmentes ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse beeinflussen sich im allgemeinen gegenseitig. Diese Tatsache spiegelt sich zum Teil darin wider, daß die Ergebnisse, die ein Effektmodell liefert, zugleich Eingangsgrößen für ein anderes Effektmodell sind. Im folgenden wird anhand einiger schematischer Darstellungen dieses Zusammenwirken der Effekte aufgezeigt.

Die Verkleinerung des Volumens der Resthohlräume in einem Endlager im Salinar durch die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins ist einer der wichtigsten zu betrachtenden Effekte. Dieser Vorgang führt einerseits bei der ungestörten Entwicklung des Grubengebäudes innerhalb verhältnismäßig kurzer Zeit zu einem endgültigen Verschließen der Resthohlräume. Andererseits ist die Konvergenz bei einem unterstellten Laugenzutritt ins Endlager der wesentliche Antriebsmechanismus für eine Schadstofffreisetzung durch Auspressen kontaminierter Lauge aus dem Grubengebäude.

In fast allen Segmentmodellen werden die Auswirkungen der Konvergenz auf das Hohlräumvolumen des jeweiligen Segments und auf die Laugenbewegung durch Berechnung einer Konvergenzrate ermittelt. Abbildung 3.1 zeigt schematisch die an dem Konvergenzprozeß beteiligten Effekte und deren Rückwirkung auf die Konvergenzrate.

Die Konvergenzrate ist eine Funktion der im allgemeinen zeitabhängigen Größen Temperatur, Laugendruck und Porosität des versetzten Hohlraumes (siehe Kapitel 4.1). Die Temperatur wird aus den Angaben in der Datei mit den Temperaturdaten bestimmt. Die zeitliche Änderung der Porosität berechnet sich aus der Veränderung des Hohlräumvolumens (siehe Kapitel 4.2).

Der Laugendruck wird zusammen mit den durch die Konvergenz erzwungenen advektiven Laugenströmen außerhalb der Segmentmodelle für alle Segmente zugleich ermittelt (siehe Kapitel 4.4). Die einzelnen Segmentmodelle liefern für diese Berechnung die folgenden Eingangsgrößen:

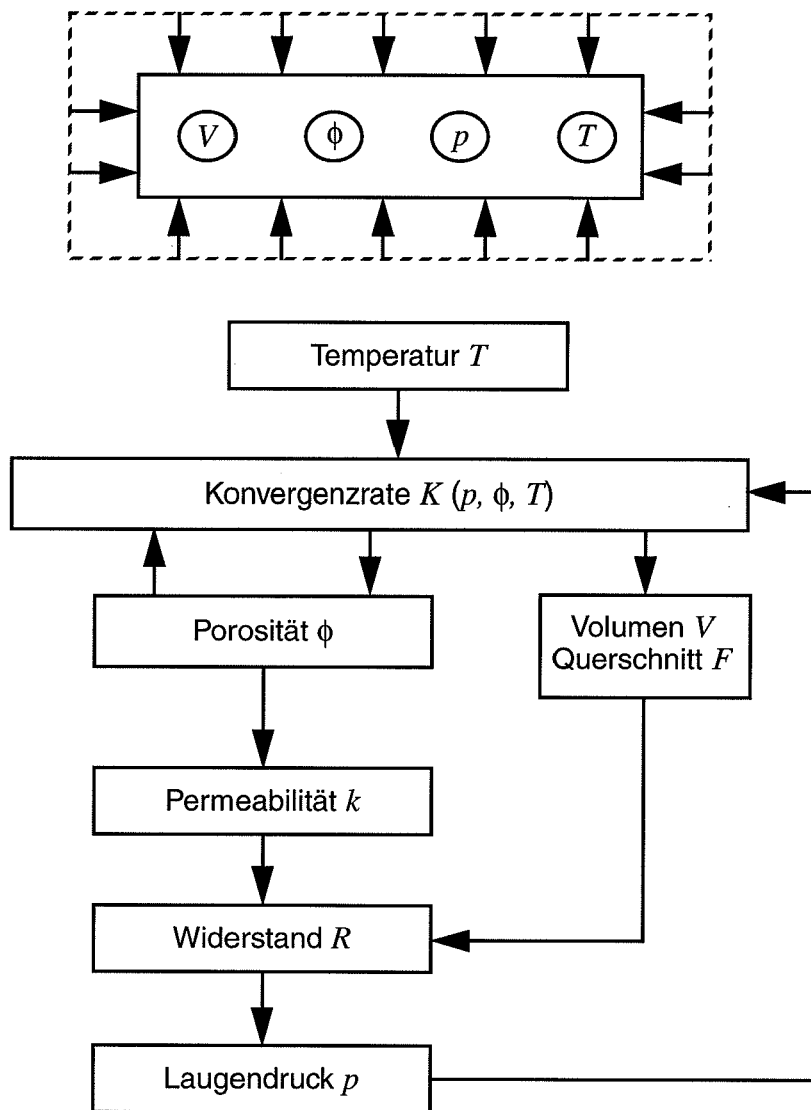


Abb. 3.1: Konvergenz eines versetzten Hohlraumes und das Zusammenwirken der beteiligten Prozesse

- die Information, in welchem aktuellen Zustand sich das Segment in Bezug auf die Laugenbewegung befindet, also in der Zuflußphase, Auspreßphase, o.ä., (siehe Kapitel 4.4),
- den druckunabhängigen Anteil der Konvergenz (siehe Kapitel 4.4.1),
- den Strömungswiderstand in Abhängigkeit von der Permeabilität des Versatzes und, sofern vorhanden, des Verschlusses bzw. den Strömungswiderstand einer offenen Strecke (siehe Kapitel 4.3.2).

Abbildung 3.2 zeigt die Wechselwirkungen der zur Berechnung des Laugendrucks in einem Segment beitragenden Effekte sowie der Eingangsgrößen aus den Nachbarsegmenten. In leeren Segmenten kann der dort herrschende atmosphärische Druck gegenüber dem Gebirgsdruck und dem Laugendruck von einigen MPa in gefüllten Segmenten vernachlässigt werden. Daher wird der Druck p_i in leeren Segmenten i immer auf Null gesetzt.

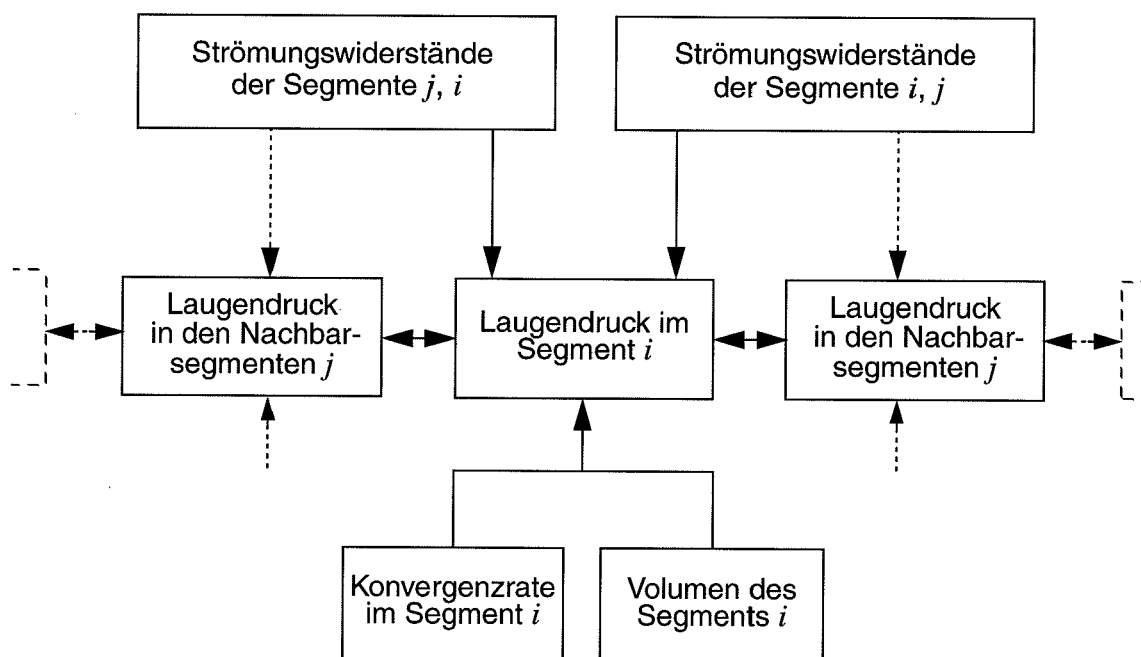


Abb. 3.2: Eingangsgrößen zur Laugendruckberechnung

In teilweise gefluteten Segmenten stellt sich ein Laugendruck entsprechend dem Laugenstand ein, d.h. entsprechend der Höhe der Lauge in den Segmenten. Dieser im Vergleich zu gefluteten Segmenten i.a. zwar geringe Laugendruck ermöglicht einen Laugenstrom in Nachbarsegmente, die weniger Lauge enthalten oder sich in einer größeren Tiefe befinden, siehe die Diskussion in Kapitel 3.1.3. Dieser Laugenstrom zwischen teilgefüllten Segmenten kann im Modul **Lopos** durch Angabe eines globalen Steuerparameters wahlweise mitgerechnet oder vernachlässigt werden.

Für alle gefluteten Segmente werden die Laugendrücke p_i nach den im Kapitel 4.4.1 angegebenen Gleichungen berechnet. Mit den so bestimmten Laugendrücken können die

Ströme in allen Segmenten mit Hilfe der im Kapitel 4.4.2 angegebenen Gleichungen ermittelt werden.

Neben den durch die Konvergenz erzwungenen advektiven Laugenströmen können Laugenbewegungen durch Austauscheffekte auftreten, z.B. aufgrund von Dichtegradierten in der Lauge, die durch Temperatur- oder Konzentrationsunterschiede in den Segmenten verursacht werden (siehe Kapitel 4.6.3).

Die Schadstoffe können sowohl mit den erzwungenen Laugenströmen als auch mit der durch die Austauscheffekte hervorgerufenen Laugenbewegung sowie durch Diffusion und Dispersion in der Lauge transportiert werden (siehe Kapitel 4.6.2). In Abbildung 3.3 sind die Effekte schematisch dargestellt, die zu den Schadstoffströmen beitragen. Die Berechnung des Schadstofftransports erfolgt wie die der Laugenströme außerhalb der

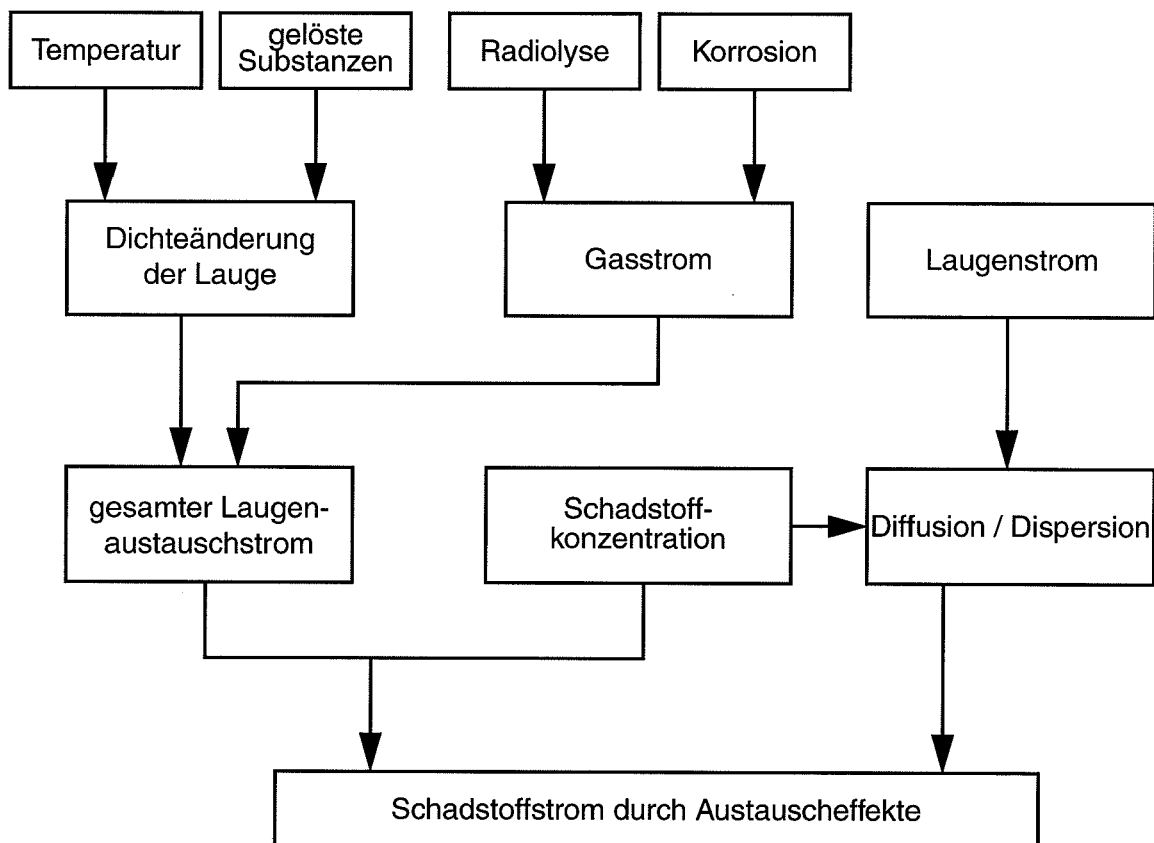


Abb. 3.3: Berechnung des Schadstoffstroms, der durch konvektiven Laugenaustausch sowie Diffusion und Dispersion bewirkt wird.

Segmentschleife. Bei der Berechnung eines resultierenden Schadstoffstromes von einem Segment zu seinen Nachbarn wird folgendermaßen vorgegangen:

Die in die Berechnung der Laugenbewegung durch Austauscheffekte eingehenden Größen temperaturabhängiger Diffusionskoeffizient, Permeabilität bzw. Porosität, Dichteänderung der Lauge durch Temperatur und Konzentration einer in der Lauge gelösten Substanz werden in allen Segmenten in der Segmentschleife berechnet (siehe Kapitel 4.2, 4.3 und 4.6.3). Unter der in der Lauge gelösten Substanz wird eine die Dichte stark beeinflussende gelöste Substanz verstanden, die z.B. bei Korrosion zementierter Abfälle entsteht. Die Dichteänderung durch die gelösten Schadstoffe wird nicht betrachtet. Außerhalb der Segmentschleife wird anschließend wie im Kapitel 4.6 angegeben der konvektive (Austausch-) Schadstoffstrom berechnet und zu dem diffusiven/dispersiven Schadstoffstrom und dem advektiven Schadstoffstrom addiert, der sich aus dem erzwungenen Laugenstrom ergibt. Letzterer liefert im allgemeinen den größeren Beitrag.

Die Bilanz der Schadstoffe ergibt sich zu jedem Zeitpunkt aus dem aktuellen Schadstoffinventar und dem Netto-Schadstoffstrom im Segment, der sich aus der Summe aller Schadstoffströme in die Nachbarsegmente bzw. aus den Nachbarsegmenten ergibt (siehe Kapitel 4.6.5).

In allen Segmentmodellen, die mit kontaminierter Lauge in Berührung kommen, werden die chemische Sorption und die Ausfällung von Schadstoffen aufgrund einer begrenzten Löslichkeit berechnet (siehe Kapitel 4.6.6). Durch die Berücksichtigung dieser Effekte werden die Schadstoffströme in einigen Segmenten beeinflusst. In der Gleichung für den Schadstofftransport ist dann nur die Konzentration des zum Transport beitragenden, gelösten Inventars einzusetzen.

In jedem Segment wird über das Courant-Neumann-Kriterium (s. Kapitel 2.2) die Zeitschrittweite gesteuert. Hierdurch wird gewährleistet, daß der im Zeitschritt transportierte Schadstoff mit dem im Segment vorhandenen Schadstoffinventar bzw. mit der Schadstoffkonzentration verträglich ist. Daneben wird sichergestellt, daß die pro Zeitschritt transportierte Laugenmenge nicht das verfügbare Hohlraumvolumen bzw. das vorhandene Laugenvolumen übersteigt.

In Abbildung 3.4 ist der Ablaufplan eines Segmentmodells dargestellt. In der Spalte "Modellsteuerung" wird abgefragt, ob das Segment schon "existiert" oder ob im Segment die Endporosität bzw. das Endvolumen bereits erreicht wurde. Durch die Abfrage "existent" wird berücksichtigt, daß während der Betriebsphase eine schrittweise Beladung des Endlagers erfolgt und Segmente erst dann zu betrachten sind, wenn sie einer zeitlichen Entwicklung unterworfen werden. Dies ist im allgemeinen mit der Einlagerung von Abfällen und der Verfüllung gegeben. Programmtechnisch wird ab diesem Zeitpunkt das Segment zugeschaltet. Durch die Abfragen "Endporosität" oder "Endvolumen" wird berücksichtigt, daß die zeitliche Entwicklung eines Segments endet, wenn die geringen Porositäten und Permeabilitäten eine weitere Konvergenz und eine weitere Laugenbewegung unterbinden oder wenn das Volumen eines Segments so weit reduziert worden ist, daß angenommen werden kann, daß es nicht mehr durchströmt wird. In diesen Fällen wird das Segmentmodell nicht mehr durchlaufen. Der Begriff spontaner Laugenzutritt wird im Kapitel 3.1.2 erläutert.

In der nächsten Spalte sind die Effektprogramme zusammengefaßt, die zur Berechnung der Konvergenz und deren Auswirkung sowie des Strömungswiderstands beitragen. Die dritte Spalte gibt die Programme an, die konvektive Laugen- und Schadstoffbewegungen antreiben. Die folgende Spalte gibt die Programme an, die allgemein zur Bilanzierung des Matrixmaterials der Abfälle, der Lauge und des Schadstoffinventars im Segment dienen. Die verbindenden Pfeile geben die oben beschriebene Reihenfolge wieder, in der die Effektprogramme in einem Segmentmodell durchgerechnet werden.

3.1.2 Beschreibung der Laugenbewegung

Bei der Modellierung der Vorgänge in einem Segment lassen sich drei Phasen unterscheiden, die jedes Segment nacheinander durchlaufen kann:

- die Trockenphase,
- die Zuflußphase,
- die Durchströmungs- bzw. Auspreßphase.

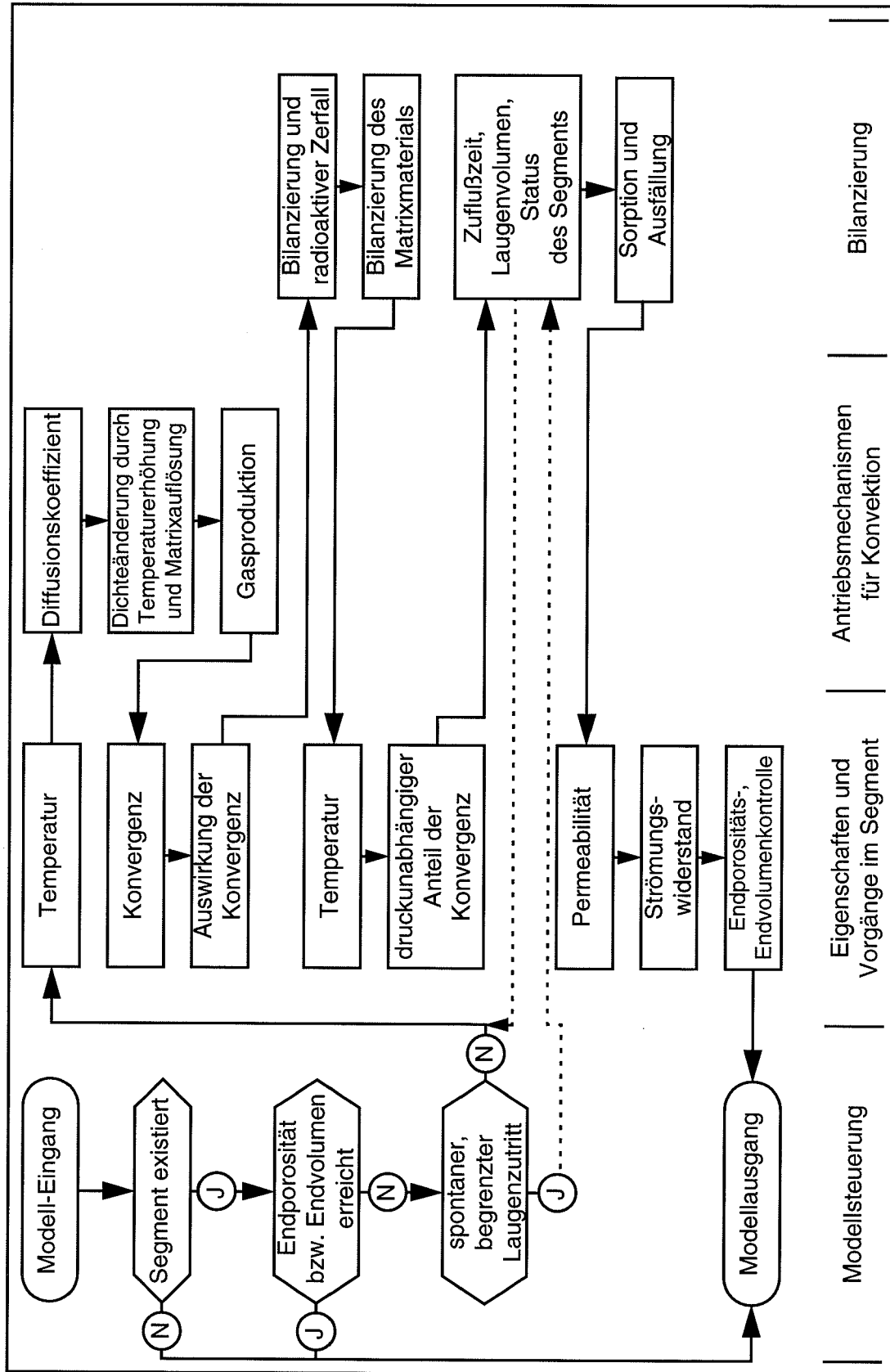


Abb. 3.4: Ablaufplan eines Segmentmodells

Die Trockenphase kennzeichnet den Zeitbereich zwischen Verfüllen und Verschließen des Teilbereichs und dem Zeitpunkt des ersten Laugenzutritts in das Segment. In diesem Zeitbereich braucht nur eine geringe Anzahl von Effekten betrachtet zu werden. Dies sind insbesondere die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins und die damit verbundene Volumen-, Porositäts- und Permeabilitätsänderung (siehe Kapitel 4.2 und 4.3).

In der Zuflußphase wird das Segment mit Lauge aufgefüllt. Der Laugenzutritt erfolgt im allgemeinen von einem Nachbarsegment her. Da diese Lauge kontaminiert sein kann, wird in der Zuflußphase erstmals der Schadstofftransport, gegebenenfalls der radioaktive Zerfall sowie Sorption und Ausfällung von Schadstoffen berechnet.

In der Durchströmungs- und der Auspreßphase sind das Segment und auch mindestens ein benachbartes Segment vollständig mit Lauge gefüllt. Zwischen diesen Segmenten kann ein konvektiver Laugenaustausch stattfinden, sofern eine treibende Kraft, wie ein Dichtegradient, vorhanden ist.

Ist auch der Einlagerungsort vollständig mit Lauge gefüllt, kann kontaminierte Lauge ausgepreßt werden. Der Austritt von Lauge ins Deckgebirge beginnt, wenn entweder das gesamte Endlager geflutet ist oder wenn der Strömungswiderstand der Segmente mit fortschreitender Konvergenz so groß geworden ist, daß sich die Strömungsrichtung der Lauge am Austrittsort ins Deckgebirge umdreht.

Die Freisetzung von Schadstoffen aus dem Grubengebäude beginnt, wenn kontaminierte Lauge ins Deckgebirge austritt. Dieser Zeitpunkt ist nicht notwendigerweise identisch mit dem Zeitpunkt des Vollaufens des Grubengebäudes als Ganzes. Einerseits kann je nach dem Verhältnis der Widerstände der Dämme und Verschlüsse schon vorher nichtkontaminierte Lauge aus dem Endlager ausgepreßt werden. Andererseits kann kontaminierte Lauge aus dem Endlager herausgepreßt werden, während sich zugleich noch Bereiche des Endlagers in der Zuflußphase befinden. Hierbei können bereits mobilisierte Schadstoffe auch in tieferliegende Bereiche des Endlagers oder in einen anderen Flügel des Grubengebäudes transportiert werden.

Das Auspressen der kontaminierten Lauge stellt in vielen Fällen den Haupttransportmechanismus für die Schadstoffe aus dem Endlager dar. Weitere Effekte, die eine Schad-

stofffreisetzung bewirken, sind die oben erwähnten Austauschvorgänge durch Temperaturgradienten und Konzentrationsdifferenzen von in der Lauge gelösten Stoffen sowie speziell durch Diffusion der Schadstoffe.

Im Gegensatz zu dem kontinuierlichen Laugenzutritt von einem Nachbarsegment her, kann in jedes Segment eine in den Segmentdaten vorwählbare Laugenmenge zu einem ebenfalls vorwählbaren Zeitpunkt spontan zutreten (s. Tabellen mit den lokalen Eingangsdaten, Kapitel 3.2). Die Herkunft dieser Lauge wird im allgemeinen nicht näher spezifiziert. Das auf diese Weise zutretende Laugenvolumen wird automatisch auf das zur Verfügung stehende Porenvolumen begrenzt, d.h. ist das Laugenvolumen größer als das Porenvolumen, so wird die überschüssige Laugenmenge ignoriert. Der Effekt des spontanen Laugenzutritts ist für spezielle Modellierungen erforderlich, bei denen ein Segment zu einem bestimmten Zeitpunkt vollständig mit Lauge gefüllt sein soll.

Zunächst bestimmt sich der Laugendruck in einem auf diese Weise gefüllten Segment aus der Höhe des Laugenstandes im Segment. Besteht jedoch eine Verbindung der Laugensäule über Nachbarsegmente zu einem Wasserleiter im Deckgebirge oder ist das gesamte Endlager geflutet, so entspricht der Laugendruck im spontan vollständig gefüllten Segment dem hydrostatischen Druck entsprechend der Teufe. Programmtechnisch wird der unterschiedliche Laugendruck in spontan gefluteten Segmenten wie folgt gesteuert:

- wird der Eingangsparameter für das spontan zufließende Laugenvolumen kleiner als das Porenvolumen gesetzt, so entspricht der Anfangswert für den Laugendruck dem Laugenstand im Segment,
- wird der Eingangsparameter für das spontan zufließende Laugenvolumen größer oder gleich dem Porenvolumen, aber kleiner als 10^6 m^3 gesetzt, so wird das Laugenvolumen auf das Porenvolumen begrenzt, und der Anfangswert für den Laugendruck entspricht dem Laugenstand im gefluteten Segment,
- wird der Eingangsparameter für das spontan zufließende Laugenvolumen größer oder gleich 10^6 m^3 gesetzt, so wird das Laugenvolumen ebenfalls auf das Porenvolumen begrenzt aber der Anfangswert für den Laugendruck ist gleich dem hydrostatischen Druck in der entsprechenden Teufe.

Als weitere mögliche Laugenquelle wird der Zutritt einer begrenzten Laugenmenge aus einer Laugentasche im Endlagerbereich modelliert. Zur Beschreibung eines solchen Laugeneinschlusses wird ein spezielles Segmentmodell verwendet. Bei einem Laugenzutritt aus einem begrenzten Laugeneinschluß kann das Segmentsystem zusätzlich von den Einlagerungsorten her mit Lauge gefüllt werden. Die Mobilisierung von Schadstoffen und der Transport von kontaminierter Lauge kann in diesem Fall schon einsetzen, bevor Lauge aus dem Deckgebirge in das Grubengebäude eindringt. Eine Freisetzung von Schadstoffen aus dem Endlager ist im allgemeinen aber nur möglich, wenn die Lauge aus dem begrenzten Laugeneinschluß mit der Lauge aus dem Deckgebirge im Endlager zusammentrifft.

Begrenzte Laugenzutritte aus Laugentaschen oder unbegrenzte Laugenzutritte über Wegsamkeiten aus dem Deckgebirge können an mehreren Stellen zu unterschiedlichen Zeitpunkten stattfinden. Im letzteren Fall kann ein Schadstoffstrom aus dem Endlager ins Deckgebirge ebenfalls an mehreren Stellen auftreten. Der Schadstofftransport durch das Deckgebirge wird dann mit dem Modul für den Transport im Deckgebirge gegebenenfalls für mehrere Quellen gerechnet.

Entscheidend für eine mögliche Freisetzung von Schadstoffen aus dem Endlager ist einerseits die Zeit, welche die eindringende Lauge benötigt, um die eingelagerten Abfälle zu erreichen, denn mit fortschreitender Konvergenz wird der eindringenden Lauge ein größerer Widerstand entgegengesetzt und eventuell ein Erreichen der Abfälle verhindert. Andererseits wird die Menge der freigesetzten Schadstoffe durch die Zeitspanne bestimmt, welche die einmal eingedrungene Lauge zur Verfügung hat, die Abfallbehälter zu korrodieren und Schadstoffe zu mobilisieren, bevor sie wieder ausgepreßt wird. Daher ist eine möglichst genaue Beschreibung des Laugenzutritts wichtig für die Bewertung der Langzeitsicherheit eines Endlagers.

Im folgenden Kapitel 3.1.3 wird die Modellierung eines direkten Weitertransports eingedrungener Lauge diskutiert. Ein direkter Weitertransport bedeutet, daß entgegen der oben dargestellten Modellierung Lauge von einem Segment x in ein benachbartes Segment eindringen kann, bevor das Segment x komplett mit Lauge gefüllt ist.

3.1.3 Direkter Weitertransport eingedrungener Lauge

In der Modellierung des Laugenzutritts zu Beginn dieses Kapitels wurde unterstellt, daß die Lauge in ein Segment eines Grubengebäudes erst dann eindringt, wenn ein benachbartes Segment mit Lauge aufgefüllt ist. Diese Modellvorstellung ist gerechtfertigt, wenn ein Segment mit einem weniger durchlässigen Verschuß versehen ist, und erst ein deutlicher Anstieg des Laugendrucks im Nachbarsegment einen Weitertransport der Lauge in das betrachtete Segment erlaubt.

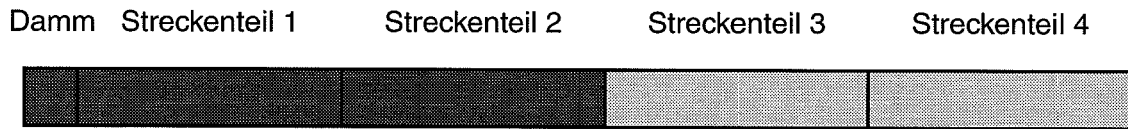
In vielen Fällen ist es jedoch notwendig, zur genügend genauen Beschreibung des Schadstofftransports einen Teilbereich, z.B. eine versetzte Strecke, in eine größere Anzahl Segmente zu unterteilen. In einem solchen Fall sind normalerweise diese Teilsegmente nicht jeweils mit einem Verschuß versehen, und ein direkter Weitertransport eingedrungener Lauge in das nachfolgende Segment ist möglich, ohne daß zuvor das betrachtete Segment vollständig aufgefüllt wird.

In der folgenden Abbildung 3.5 sind diese unterschiedlichen Modellvorstellungen anhand eines einfachen Segmentsystems mit jeweils vier Segmenten veranschaulicht. Es wird angenommen, daß die Lauge nur über einen Ort in das Grubengebäude eintritt, in der Abbildung von der linken Seite her.

In allen Segmenten wird der atmosphärische Druck vernachlässigt. In leeren Segmenten wird folglich ein Druck von 0 MPa herrschen, in teilweise gefüllten Segmenten berechnet sich der Laugendruck aus dem Laugenstand im Segment (siehe Kapitel 4.4.1.1). In einer Strecke mit einer durchschnittlichen Höhe von 6 m steigt der Laugendruck z.B. während des Vollaufens auf etwa 0,07 MPa an.

Falls die in der Abbildung rechts anschließenden Nachbarsegmente, beispielsweise wegen Dämmen oder Verschlüssen bei diesen geringen Druckgradienten für Lauge nahezu undurchlässig sind, kann die Lauge erst dann weitertransportiert werden, wenn der Druck im Segment deutlich angestiegen ist, d.h. wenn das Segment und alle vorhergehenden Segmente bis hin zum Laugenzutrittsort vollständig mit Lauge gefüllt sind. Diese Modellierung des Laugenzutritts wird im folgenden mit Variante 1 bezeichnet. Sie entspricht der Modellierung zu Beginn dieses Kapitels.

Variante 1: Weitertransport eingedrungener Lauge in den nachfolgenden Streckenteil jeweils erst nach vollständiger Flutung des vorhergehenden Teils:



Variante 2: Sofortiger Weitertransport eingedrungener Lauge in den nachfolgenden Streckenteil entsprechend dem hydrostatischen Druckgradienten:

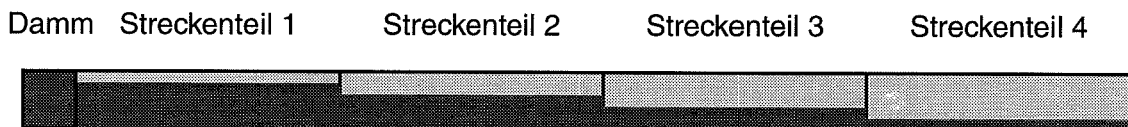


Abb. 3.5: Schematische Darstellung des Laugenzuflusses entsprechend den Modellvarianten 1 und 2. Der Zufluß erfolgt von links über den Damm.

Andererseits kann bei Segmenten, die über keinen nennenswerten Strömungswiderstand, beispielsweise wegen eines fehlenden Verschlusses verfügen, die Lauge auch bei sehr geringen Druckgradienten sofort weitertransportiert werden. Diese Behandlung des Laugentransports wird im folgenden mit Variante 2, sofortiger Weitertransport von Lauge, bezeichnet.

In den beiden folgenden Abbildungen 3.6 und 3.7 werden die Entwicklungen der Laugendrucke bei beiden Varianten dargestellt und miteinander verglichen. Die Laugendrucke eignen sich gut, um die Unterschiede der beiden Varianten aufzuzeigen.

Allgemein gilt, daß nach dem Auffüllen eines Endlagerbereichs mit Lauge der Laugendruck deutlich ansteigt. Dies ist in den Sprüngen der Druckverläufe bei beiden Varianten zu erkennen. Der Laugendruck ergibt sich über die Strömungswiderstände, aus dem hydrostatischen Außendruck und der hydrodynamischen Druckerhöhung infolge des Auspressens aufgrund der Konvergenz. Im folgenden werden die Druckverläufe bei beiden Varianten im Detail beschrieben.

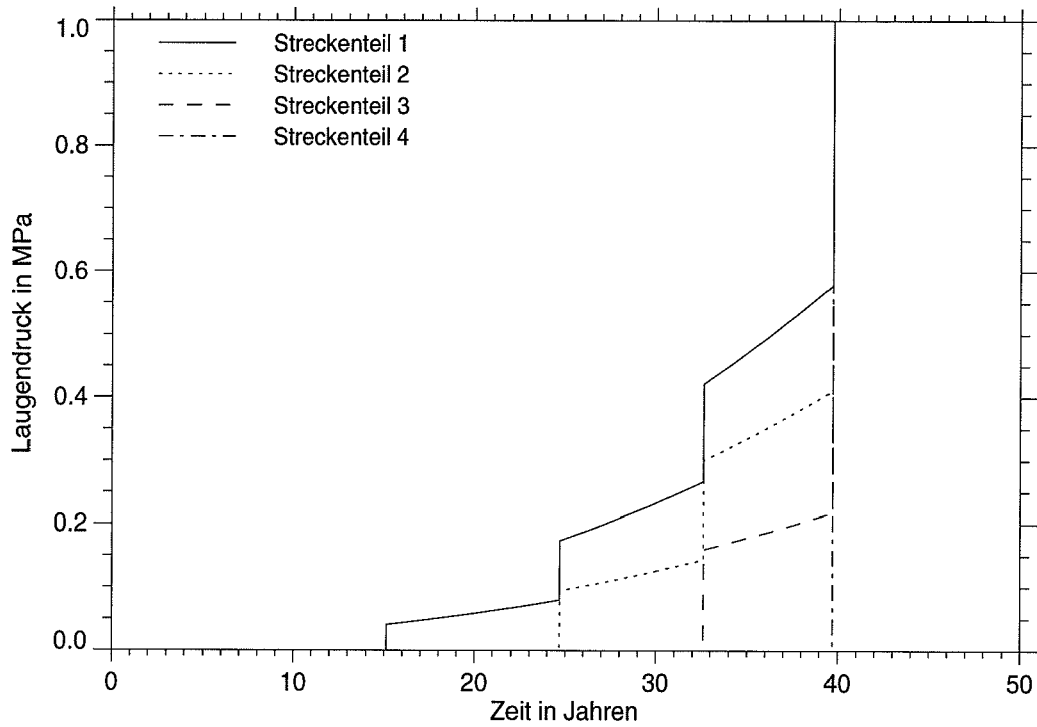


Abb. 3.6: Zeitliche Entwicklung des Laugendruckes in einer unterteilten Strecke, Variante 1 (blockweiser Weitertransport)

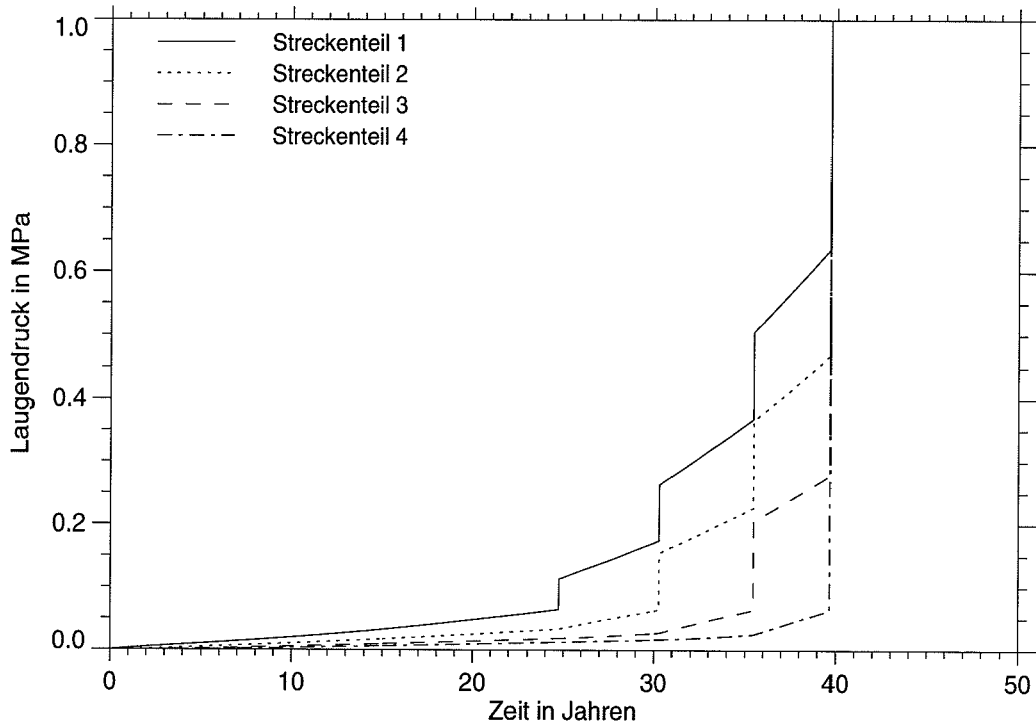


Abb. 3.7: Zeitliche Entwicklung des Laugendruckes in einer unterteilten Strecke, Variante 2 (sofortiger kontinuierlicher Weitertransport)

In Variante 1 wird der Laugendruck in allen Segmenten vernachlässigt, solange sie noch nicht vollständig mit Lauge gefüllt sind. Nach ca. 15 Jahren ist das erste Segment geflutet, und der Laugendruck steigt sprunghaft auf einen Wert von 0,04 MPa, der sich entsprechend den Strömungswiderständen des Damms und des Segments bei anstehendem hydrostatischen Außendruck von 10 MPa einstellt. Der sprunghafte Anstieg beruht auf der Modellierung der Lauge als inkompressible Flüssigkeit. Nach ca. 25 Jahren ist auch das zweite Segment geflutet, der Laugendruck steigt hier sprunghaft auf 0,09 MPa an und als Konsequenz des Druckanstieg im zweiten Segment erhöht sich auch der Druck im ersten Segment weiter auf 0,17 MPa. Der zusätzliche Druckanstieg zwischen den Stufen wird durch die kontinuierliche Erhöhung der Strömungswiderstände aufgrund der Kompaktion des Versatzmaterials verursacht. Nach ca. 33 Jahren und nach ca. 40 Jahren werden die übrigen Segmente geflutet, und der Laugendruck im Segmentensystem steigt auf 10,19 MPa, d.h. über den hydrostatischen Außendruck. Der Außendruck wird überschritten, da die Lauge durch den Konvergenzprozeß gegen die Strömungswiderstände ausgepreßt wird.

In Variante 2 steigt der Laugendruck unmittelbar nach Laugenzutritt durch den Damm an. Während des Zulaufs steigt der Laugendruck in allen Segmenten kontinuierlich auf den hydrostatischen Wert von 0,064 MPa, jedoch wegen des jeweils geringeren Laugenstands in den hinteren Segmenten zeitlich versetzt. Der weitere Verlauf des Laugendrucks ist ähnlich dem bei Variante 1. Die sprunghafte Druckerhöhung tritt stets zu etwas späteren Zeiten auf als in Variante 1 (25 Jahre, 30 Jahre bzw. 35 Jahre), da wegen des sofortigen Weitertransports der eingedrungenen Lauge die Segmente jeweils etwas später volllaufen, wegen der bereits frühzeitig eingedrungenen Lauge jedoch in kürzeren Zeitabständen. Außerdem steigt der Druck auf jeweils höhere Werte an, da die Kompaktion des Versatzes bereits weiter fortgeschritten ist. Das Fluten des gesamten Segmentensystems erfolgt fast zur gleichen Zeit (ca. 40 Jahre). Dies zeigt, daß der frühzeitige, zunächst nur geringe Druckanstieg in den unvollständig gefluteten Segmenten sich kaum auf den Konvergenzprozeß und die damit zu erwartende langsamere Abnahme der Volumina auswirkt. Der Effekt wird durch die länger andauernde Konvergenz bei jeweils niedrigerem Druck kompensiert.

Der sofortige Weitertransport von Lauge kann letztendlich dazu führen, daß eingedrungene Lauge die Einlagerungsorte früher als bei blockweisem Weitertransport erreicht.

Dies würde dazu führen, daß die Mobilisierung von Schadstoffen früher einsetzt. Das Auspressen und der Transport kontaminierter Lauge sind jedoch von den unterschiedlichen Modellierungen kaum beeinflußt, wie die obige Diskussion zeigt.

3.2 Einzelbeschreibung der Segmentmodelle

Im folgenden werden alle Modelle beschrieben, die für die verschiedenen Segmente eines Grubengebäudes derzeit eingesetzt werden. Sie berücksichtigen die physikalischen und chemischen Eigenschaften einer Kammer, eines Bohrlochs, einer Strecke, eines Rollochs, Gesenks oder des Schachts. Für Einlagerungsorte sind derzeit Modelle von Kammern oder Bohrlöchern verfügbar. Es wird angenommen, daß die Freisetzung der Schadstoffe aus den Abfällen in die Einlagerungsorte entweder instantan nach Laugenzutritt oder entsprechend der Mobilisierung aus einer Glasmatrix, einer Zementmatrix oder aus LWR-Brennelementen erfolgt (s. Kapitel 4.5). Die Strecken können unverfüllt oder versetzt sein. Das Versatzmaterial kann wie z.B. Salzgrus kompaktierbar oder wie z.B. Kiessand nicht kompaktierbar sein. Rollöcher, Gesenke und der Schacht werden wie vertikale, versetzte Strecken modelliert.

Im folgenden werden für jedes Segmentmodell diejenigen Eingangsdaten beschrieben, die physikalische Parameter und Anfangswerte der Variablen sind. Weitere Eingangsdaten, die als Steuerparameter u.a. zur Auswahl des Temperaturverlaufs oder der Löslichkeitsgrenzen und Sorptionsdaten dienen, werden in einer programmtechnischen Beschreibung erläutert, die nicht Bestandteil dieses Berichtes ist.

Bei der Bezeichnung der Segmentmodelle gelten die folgenden Konventionen:

- die ersten beiden Buchstaben charakterisieren den Segmenttyp
 - AZ: AuflockerungsZone
 - DV: Strecke mit Mineralgemisch- (DYWIDAG™ -) Versatz
 - EB: EinlagerungsBohrloch
 - EK: EinlagerungsKammer
 - IQ: Infinite Quelle bzw. Senke für Lauge und Schadstoffe
 - KS: Strecke mit speziellem (Kiessand-) Versatz

- OS: Offene Strecke ohne Versatz
 - TK: Teilversetzte Kammer
 - VS: Strecke mit Salzgrus-Versatz
- der 3. Buchstabe beschreibt die Geometrie des Segments:
- Q: Quaderförmig
 - R: zylindrisch Rund
- der 4. Buchstabe steht für das Verhalten des Segments bei Konvergenz:
- N: Volumen und Versatzporosität werden vom Konvergenzprozeß Nicht verändert
 - K: die Konvergenz des Salzgesteins reduziert Volumen und Versatzporosität
 - G: Gasproduktion beschleunigt das Auspressen von Lauge
 - V: auch der Verschuß des Segments wird kompaktiert
- Die Ziffer an der 5. Position unterscheidet Modellvarianten.

In der folgenden Tabelle werden alle in den Segmentmodellen verwendeten globalen Daten sowie die allen Segmentmodellen gemeinsamen lokalen Variablen zusammengestellt. Bei der Beschreibung der einzelnen Segmentmodelle wird dann auf diese Tabelle Bezug genommen, die noch fehlenden Variablen werden jeweils gesondert beschrieben.

Tabelle 3.1: Globale Eingangsdaten der Segmentmodelle.

Name	Bedeutung
g	Erdbeschleunigung
ρ_L	mittlere Dichte der Lauge
T_G	Gebirgstemperatur in der Referenztiefe
∇T	geothermischer Gradient
P_{hyd}	hydrostatischer Druck in der Referenztiefe
K_{ref}	globale Referenzkonvergenzrate
ϕ_{ref}	Referenzporosität
f_K	Reduktionsfaktor für Konvergenz einer Kammer
f_V	Reduktionsfaktor für Kompaktion des Verschlusses
k_A	Permeabilität der Auflockerungszone
k_D, k_K	Permeabilität des nichtkompaktierbaren Versatzes; Permeabilität des Ausgangssegments
k_V	Permeabilität des nichtkompaktierbaren Verschlusses
$V_{L,min}$	minimaler Laugenstand für den Weitertransport zugeflossener Lauge
ϕ_A	Porosität der Auflockerungszone
ϕ_S	Anfangsporosität von Salzgrusversatz
ϕ_D, ϕ_K, ϕ_V	Porosität im nichtkompaktierbaren Versatz, der Kammer oder Verschluß

Tabelle 3.2: Lokale Eingangsdaten der Segmentmodelle.

Name	Bedeutung
H_K, H_S	Höhe der Kammer oder Strecke einschließlich Versatz (Anfangswert)
B_K, B_S	Breite der Kammer oder Strecke einschließlich Versatz (Anfangswert)
R_S, R_B	Radius der Strecke oder des Bohrlochs (Anfangswert)
L_K, L_S, L_B	Länge der Kammer, der Strecke oder des Bohrlochs
H_V	Höhe des Kammerverschlusses
B_V	Breite des Kammerverschlusses
R_S, R_V	Anfangswert vom Radius der Strecke oder des Bohrlochstopfens
L_V	Länge des Kammerverschlusses oder Bohrlochstopfens
V_s	Volumen des versetzten Bereichs ohne Abfall (Anfangswert)
V_a	Volumen des Abfalls
V_h	Volumen des Hohlraums im Abfalls
V_{sL}	Laugenmenge eines spontanen Zuflusses
V_Z	Anfangswert des nicht durchströmten Zusatzvolumens
m_{sorb}	Masse des sorbierenden Materials
t_B	mittlere Lebensdauer der Abfallbehälter
Δt_B	Streubreite der Lebensdauer der Behälter
$1/t_M$	Mobilisierungsrate für elementunabhängige Mobilisierung
Δz	Tiefenabstand des Segmentmittelpunktes vom Referenzniveau
K_{lok}	lokaler Variationsfaktor der Konvergenzrate

3.2.1 Modelle teil- und vollversetzter Kammern

Für die Einlagerungskammern und sonstigen Kammern werden die Modelle EKQV2 und EKQK2 für eine vollversetzte Kammer mit bzw. ohne Verschuß sowie die Modelle TKQK2 und TKQG1 für eine teilversetzte Kammer verwendet. Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß in den Modellen der teilversetzten Kammer ein offenes Volumen und dessen zeitliche Entwicklung modelliert werden, während dieses in den Modellen für vollversetzte Kammern fehlt. Außerdem unterscheiden sich die Modelle in der Beschickung mit Anfangswerten. Die Besonderheit des Modells TKQG1 besteht darin, daß die Lauge beschleunigt ausgepreßt wird, bis ein vorgegebener Anteil der Lauge freigesetzt worden ist (z.B. 1/10 des Gesamtvolumens). Erreicht wird dies durch eine zeitlich begrenzte Erhöhung der Referenzkonvergenzrate um einen vorgegebenen Faktor.

Eine schematische Darstellung des Modellsegments TKQK2 gibt die Abbildung 3.8. Neben dem aufgefahrenen Volumen V_K werden Angaben über das vorhandene Versatzvolumen V_s benötigt. Falls es sich um einen Einlagerungsort handelt, wird zusätzlich das Volumen der Abfälle V_a berücksichtigt. Das offene Volumen V_{offen} in diesen Bereichen er-

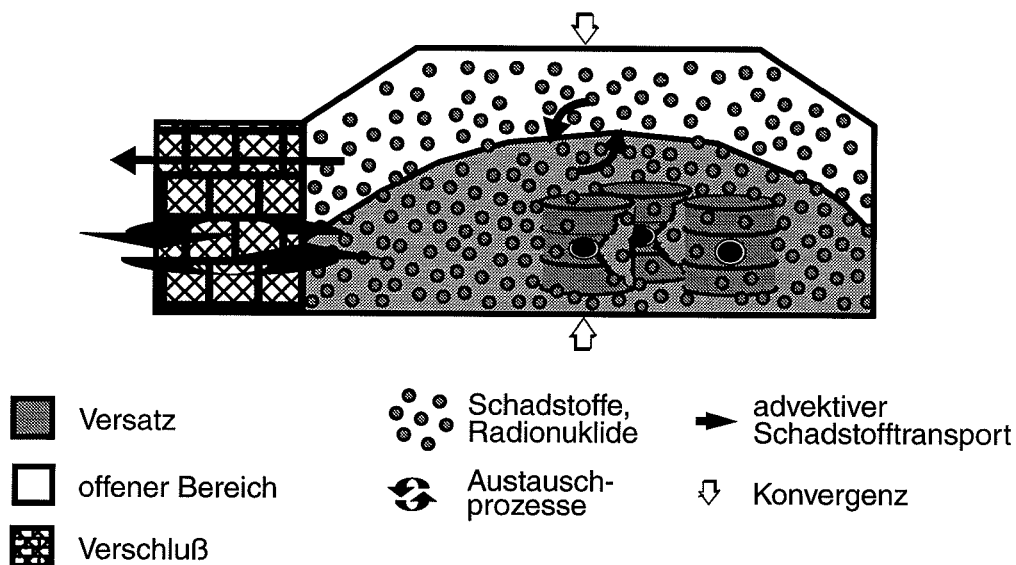


Abb. 3.8: Modell einer teilversetzten Kammer mit eingelagertem Abfall: Schadstofffreisetzung durch Advektion, Diffusion, Dispersion und Konvektion aufgrund eines Dichtegradienten über den Verschuß, homogene Schadstoffverteilung innerhalb der Kammer

gibt sich aus der Subtraktion des Versatzvolumens und des Abfallvolumens vom Gesamtvolumen

$$V_{\text{offen}} = V_K - V_s - V_a. \quad (13)$$

Der gesamte Hohlraum V_p errechnet sich unter Berücksichtigung der Porosität ϕ_s des Versatzmaterials, des offenen Hohlraumes und eines eventuell im Abfall vorhandenen Hohlraums V_h zu

$$V_p = \phi_s \cdot V_s + V_{\text{offen}} + V_h. \quad (14)$$

Durch die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins wird sich der Hohlraum der Kammer mit der Zeit verringern. Der Konvergenzprozeß wird wie im Kapitel 4.1 angegeben modelliert, wobei zunächst der offene Hohlraum reduziert wird. Nach Verschwinden des offenen Hohlraums wird auch der versetzte Bereich in der Kammer kompaktiert. Die Stützwirkung des Versatzes wird dann mit Hilfe einer mittleren Porosität modelliert, die als

$$\bar{\phi}_K = \frac{V_p}{V_K} \quad (15)$$

definiert ist.

Um den physikalischen Effekt der Diffusion von Schadstoffen aus der Kammer heraus und gegebenenfalls in die Kammer hinein zu beschreiben, wird die Kammer mit einem Verschuß modelliert. Dem Verschuß kommt nicht nur die Bedeutung einer Barriere zu, sondern er beschreibt auch die wirksame Länge des Gradienten für den diffusiven Transport von Schadstoffen. In der Kammer wird eine homogene Verteilung der Schadstoffe angenommen.

Die erforderlichen Eingangsdaten des Kammermodells sind in den Tabellen 3.1 und 3.3 zusammengefaßt. Die Anfangswerte der Porosität des Kammerversatzes und des Verschußmaterials, die Permeabilität des nicht kompaktierbaren Verschlusses und der Reduktionsfaktor für die Konvergenz sind globale Daten. Die Permeabilität des verfüllten Be-

reichs errechnet sich aus dessen mittlerer Porosität mit Hilfe der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung (s. Kapitel 4.3.1). Die globalen Parameter g , ρ_L , T_G , ∇T , K_{ref} , p_{hyd} und ϕ_{ref} werden im Segmentmodell nur zur Vorbelegung der Variablen benötigt. Verwendet werden sie in den im Kapitel 4 beschriebenen Effektmodellen.

Tabelle 3.3: Lokale Eingangsdaten für das Segmentmodell TKQK2

Modell TKQK2	Teilversetzte Einlagerungskammer mit Verschuß
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	Kammer reduziert, Verschuß keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient über Verschuß
Mobilisierung	instantan oder kontinuierlich aus Zementmatrix
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_K, B_K, L_K, H_V, B_V, L_V, V_s, V_a, V_h, V_{sL}, m_{sorb}, t_B, \Delta t_B, 1/t_M, \Delta z, K_{lok}$	

Tabelle 3.4: Lokale Eingangsdaten für das Segmentmodell TKQG1

Modell TKQG1	Teilversetzte Einlagerungskammer mit Verschuß
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	Kammer beschleunigt, Verschuß keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient über Verschuß
Mobilisierung	instantan oder kontinuierlich aus Zementmatrix
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_K, B_K, L_K, H_V, B_V, L_V, V_s, V_a, V_h, V_{sL}, m_{sorb}, t_B, \Delta t_B, 1/t_M, \Delta z, K_{lok}$ sowie:	
f_{gb}	Erhöhungsfaktor für die Konvergenzrate
f_{VG}	beschleunigt auszupressender Anteil am Laugenvolumen

Die Mobilisierung aus der Abfallmatrix kann über einen Schalter gesteuert werden. Sie erfolgt entweder über einen zu vernachlässigenden Zeitraum, wobei dies in den numerischen Berechnungen durch eine instantane Mobilisierung bei Laugenzutritt verwirklicht

wird, oder entsprechend der Modellierung von Behälterausfall und Korrosion der Abfallmatrix, wie sie im Kapitel 4.5 beschrieben wird.

Die Eingangsdaten für das Modell TKQG1 unterscheiden sich nur in den Größen f_{gb} , dem Vergrößerungsfaktor für die Konvergenzrate, und f_{VG} , dem beschleunigt auszupressenden Anteil am Laugenvolumen, von den Eingangsdaten für das Modell TKQK2. Die erforderlichen Daten sind in den Tabellen 3.1 und 3.4 enthalten.

In den einfacheren Modellen EKQV2 und EKQK2 einer vollversetzten Kammer mit oder ohne Verschuß fehlt die Berechnung des offenen Volumens. Das Versatzvolumen ergibt sich aus der Differenz von Kammervolumen und Volumen des eingelagerten Abfalls. Die Anfangswerte der Porosität von Versatz und Verschußmaterial sind globale Eingangsparameter. Die Permeabilität von Versatz und Verschuß berechnen sich aus der jeweiligen (mittleren) Porosität. Das Modell einer Kammer ohne Verschuß dient i. a. der feineren Diskretisierung einer Kammer, um, falls erforderlich, ein Konzentrationsgefälle auch innerhalb einer Einlagerungskammer genügend genau beschreiben zu können.

Die erforderlichen Eingangsdaten sind in den Tabellen 3.1, 3.5 und 3.6 enthalten. Die globalen Parameter g , ρ_L , T_G , ∇T , K_{ref} , p_{hyd} und ϕ_{ref} werden nur zur Vorbelegung der Variablen benötigt. Verwendet werden sie in den im Kapitel 4 beschriebenen Effektmolelln. Der Reduktionsfaktor für die Konvergenz einer Kammer und die Kompaktion des Kammerverschlusses werden ebenfalls als globale Daten eingegeben.

Tabelle 3.5: Eingangsdaten für das Segmentmodell EKQV2

Modell EKQV2	Einlagerungskammer mit Verschuß
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	Kammer reduziert, Verschuß
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient (über Verschuß)
Mobilisierung	instantan oder kontinuierlich aus Zementmatrix
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2):	
$H_K, B_K, L_K, H_V, B_V, L_V, V_a, V_h, V_{sL}, m_{sorb}, t_B, \Delta t_B, 1/t_M, \Delta z, K_{lok}$	

Tabelle 3.6: Eingangsdaten für das Segmentmodell EKQK2

Modell EKQK2	Einlagerungskammer ohne Verschuß
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	Kammer reduziert
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Mobilisierung	instantan oder kontinuierlich aus Zementmatrix
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2):	
$H_K, B_K, L_K, V_a, V_h, V_{sL}, m_{sorb}, t_B, \Delta t_B, 1/t_M, \Delta z, K_{lok}$	

3.2.2 Modell eines Einlagerungsbohrlochs

Bei einer Einlagerung in Bohrlochern werden für verglasten hochaktiven Abfall (HAW) und für LWR-Brennelemente Kokillen verwendet, für mittelaktiven Abfall (MAW) Fässer. Alle Bohrlocher werden mit oder ohne Versatzmaterial mit Fässern oder Kokillen gefüllt und mit Stopfen verschlossen. Die Stopfen werden als homogene Gebilde angenommen, die aus einem kompaktierbaren Material bestehen, das sich wie Salzgrus verhält und bereits vorkompaktiert ist. Wegen der Konvergenz des umgebenden Salzgesteins nehmen der Querschnitt, die Porosität und die Permeabilität des Stopfens mit der Zeit ab.

Im vorliegenden Bohrlochmodell wird der nach der Einlagerung der Abfälle verbleibende Ringspalt zwischen den Abfallgebinden und der Bohrlochwand vernachlässigt. Wegen der Wärmeentwicklung in den Gebinden schließt sich der Ringspalt in relativ kurzer Zeit durch die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins. Bei eingelagerten hochradioaktiven Abfällen geschieht dies in weniger als einem Jahr, bei MAW innerhalb einiger Jahre. Im allgemeinen ist somit der Ringspalt vor dem ersten Laugenzutritt geschlossen, so daß die Vernachlässigung des Ringspaltess gerechtfertigt ist.

Der Anfangswert des geometrischen Volumens eines Bohrlochs bestimmt sich ohne Ringspalt ausschließlich aus dem äußeren Volumen der eingelagerten Gebinde. Mit fortschreitender Korrosion der Behälter nach einem Laugenzutritt werden durch den Druck des aufgelaufenen Salzgesteins die Hohlräume in den Behältern zusammengedrückt, so daß auch das Bohrlochvolumen mit der Zeit abnimmt.

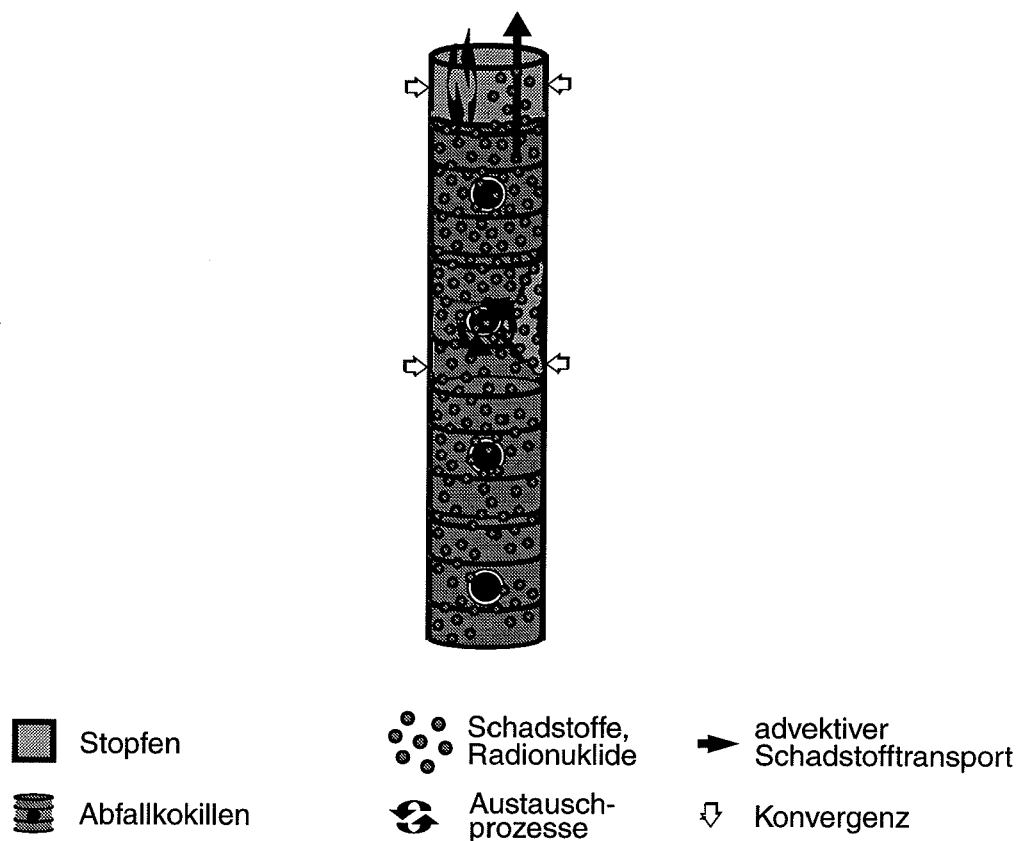


Abb. 3.9: Modell eines Bohrlochs mit eingelagertem Abfall:
Schadstofffreisetzung durch Advektion, Diffusion und Dispersion über den Bohrlochstopfen, homogene Schadstoffverteilung innerhalb des Bohrlochs

Laugung tritt entweder über den Stopfen aus einem darüberliegenden Segment oder aus einem angrenzenden Laugennest im Gebirge in das Bohrloch ein. Der Laugentransport aus dem Bohrloch heraus erfolgt durch den Stopfen hindurch und wird hauptsächlich durch den Auspreßvorgang infolge der Gebirgskonvergenz und zu einem geringeren Anteil durch Austauschvorgänge verursacht.

Wie bei den Kammern mit Verschluss werden Austauscheffekte nur über den Verschluss betrachtet. Analytische und numerische Stabilitätsuntersuchungen [6] haben gezeigt, daß ein eventuell vorhandener vertikaler Dichtegradient nicht stark genug ist, die Schwelle für das Einsetzen einer Konvektionsströmung zu überwinden. Daher kann hier die

Berechnung der Austauschströme aufgrund von Dichtegradienten entfallen. In einem Bohrlochstopfen werden somit von den Austauscheffekten zur Zeit nur die Diffusion und Dispersion der Schadstoffe berücksichtigt.

Das Hohlraumvolumen des Bohrloches ergibt sich aus dem Hohlraumvolumen in den Abfallgebänden. Die Verkleinerung der Hohlräume $V_{P,B}$ in den Abfallgebänden wird, wie im Kapitel 4.2 beschrieben, mit Hilfe einer Konvergenzrate berechnet. Die Stützwirkung der eingelagerten Gebinde wird im Konvergenzansatz durch eine fiktive Porosität ϕ_B beschrieben, die sich wie folgt ergibt

$$\phi_B = V_{P, B} / V_B, \quad (16)$$

wobei V_B das gesamte Bohrlochvolumen ist. Mit Hilfe der so bestimmten Porosität und einem zusätzlichen, geeignet zu wählenden Konvergenz-Reduktionsfaktor wird die Stützwirkung des Abfalls und der Behälter im Konvergenzansatz berücksichtigt.

Der Strömungswiderstand des Bohrloches setzt sich aus dem des Stopfens und dem der Abfallsäule zusammen, wobei die Permeabilitäten in beiden Teilen jeweils aus der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für Salzgrus abgeleitet werden.

Tabelle 3.7: Eingangsdaten für das Segmentmodell EBRV2

Modell EBRV2	Einlagerungsbohrloch mit Stopfen
Querschnitt	rund
Konvergenz	Bohrloch reduziert, Stopfen
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion (nur über Stopfen)
Mobilisierung	instantan oder kontinuierlich aus Glasmatrix, Zementmatrix oder LWR-Brennelementen
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $R_B, L_B, R_V, L_V, V_a, V_h, V_{sL}, m_{sorb}, t_B, \Delta t_B, 1/t_M, \Delta z, K_{lok}$ sowie:	
f_t	Reduktionsfaktor für Konvergenz (trockenes Bohrloch)
f_n	Reduktionsfaktor für Konvergenz (laugegefülltes Bohrloch)

Die erforderlichen Eingangsdaten des Bohrlochmodells sind in den Tabellen 3.1 und 3.7 enthalten. Der Zeitverlauf der Temperatur $T(t)$ im Bohrloch wird aus den Werten in der Datei mit den Temperaturdaten ermittelt. Die globalen Parameter $g, \rho_L, T_G, \nabla T, K_{ref}, p_{hyd}$ und ϕ_{ref} werden nur zur Vorbelegung der Variablen benötigt. Verwendet werden sie in den im Kapitel 4 beschriebenen Effektmodellen.

3.2.3 Modelle versetzter Strecken

Die Einlagerungsorte werden zur Behinderung eines eventuellen Laugenzutritts und der anschließenden Freisetzung von Schadstoffen durch geeignete Verfüllmaßnahmen in benachbarten Strecken eingekapselt. Als Verfüllmaterial werden kompaktierbarer Versatz, z.B. Salzgrus, oder nicht kompaktierbarer Versatz, z.B. Kiessand, verwendet. Eine schematische Darstellung der Modellsegmente mit kompaktierbarem bzw. nicht kompaktierbarem Versatz geben die Abbildungen 3.10 und 3.11.

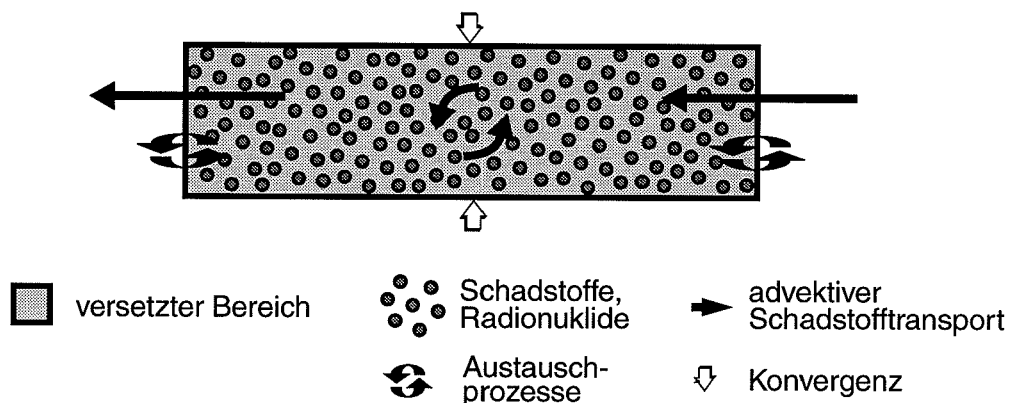


Abb. 3.10: Modell eines Streckensegments mit kompaktierbarem Versatz: Schadstofftransport durch Advektion, Diffusion, Dispersion und Konvektion aufgrund eines Dichtegradients, homogene Schadstoffverteilung innerhalb des Streckensegments

Neben vier allgemein verwendbaren Modellen für versetzte Strecken gibt es die Spezialmodelle DVQN1 für eine Mineralgemisch-Strecke und KSQN1 für eine mit Kiessand versetzte Strecke. Die beiden letzteren Modelle unterscheiden sich nur in der Versorgung mit Eingangsdaten vom Modell VSQN1.

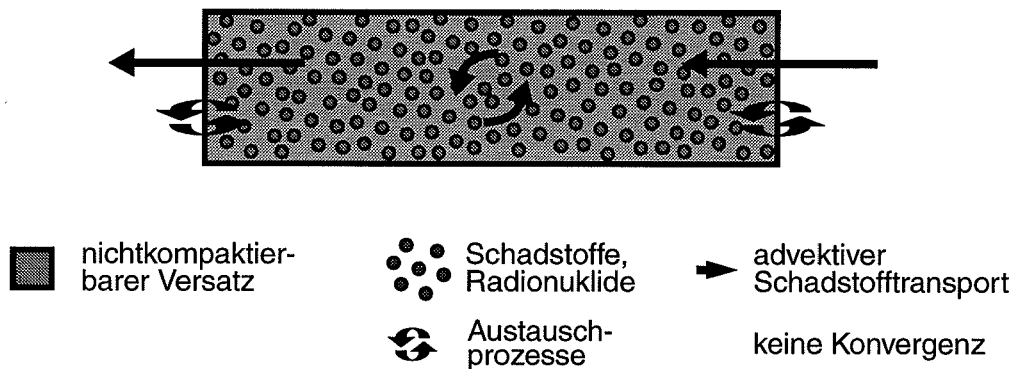


Abb. 3.11: Modell eines Streckensegments mit nichtkompaktierbarem Versatz (z.B. Mineralgemisch oder Kiessand): Schadstofftransport durch Advektion, Diffusion, Dispersion und Konvektion aufgrund eines Dichtegradienten, homogene Schadstoffverteilung innerhalb des Streckensegments

Die erforderlichen Eingangsdaten der Modelle VSQK1, VSRK1, VSQN1 und VSRN1 sowie der Spezialmodelle DVQN1 und KSN1 sind in den Tabellen 3.1 und 3.8 bis 3.11 enthalten. Die Anfangswerte der Porosität und der Permeabilität sind i.a. globale Daten. Ausnahmen bilden die konstanten Versatzporositäten in den Modellen VSQN1 und VSRN1, die als lokale Größen eingegeben werden. Die globalen Parameter g , ρ_L , T_G , ∇T und p_{hyd} werden in den Effektmodellen verwendet und werden in Kapitel 4 beschrieben.

Tabelle 3.8: Eingangsdaten für die Segmentmodelle VSQK1 und VSRK1

Modelle VSQK1, VSRK1	Streckensegment mit kompaktierbarem Versatz
Querschnitt	rechteckig bzw. rund
Konvergenz	versetzter Hohlraum
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2):	
$H_S, (R_S), B_S, L_S, V_Z, V_{sL}, m_{sorb}, \Delta z, K_{lok}$	

Tabelle 3.9: Eingangsdaten für die Segmentmodelle VSQN1 und VSRN1

Modelle VSQN1, VSRN1	Streckensegment mit nichtkompaktierbarem Versatz
Querschnitt	rechteckig bzw. rund
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_S, (R_S), B_S, L_S, V_Z, V_{sL}, m_{sorb}, \Delta z, \phi_S$	

Tabelle 3.10: Eingangsdaten für das Segmentmodell DVQN1

Modell DVQN1	Strecke mit Mineralgemisch-Versatz
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_D (=H_S), B_D (=B_S), L_D (=L_S), V_{sL}, m_{sorb}, \Delta z$	

Tabelle 3.11: Eingangsdaten für das Segmentmodell KSQN1

Modell KSQN1	Streckensegment mit Kiessandversatz
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_S, B_S, L_S, V_{sL}, m_{sorb}, \Delta z$	

Bei den Modellen mit nichtkompaktierbarem Versatz wird unterstellt, daß die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins soweit verhindert wird, daß mit einem zeitlich konstanten Streckenquerschnitt, konstanter Porosität und Permeabilität gerechnet werden kann. Wegen des sehr hohen Strömungswiderstandes einer Mineralgemisch-Strecke kann eine diese Strecke umgebende Auflockerungszone nicht vernachlässigt werden. Die Modellierung der Auflockerungszone wird im folgenden Kapitel 3.2.4 beschrieben.

3.2.4 Modell einer Auflockerungszone

Für eine Auflockerungszone wird das Segmentmodell AZQN1 verwendet. Die Auflockerungszone ist durch eine geringe Porosität, aber gegenüber Steinsalz erhöhte Permeabilität gekennzeichnet und kann in Streckenbereichen mit einem Verfüllmaterial ähnlich geringer Permeabilität nicht vernachlässigt werden. Zur Abschätzung der Transportvorgänge in einer Mineralgemisch-Strecke mit Auflockerungszone wurden zweidimensionale Vergleichsrechnungen mit einem Finite-Elemente-Programm durchgeführt [8]. Die Rechenergebnisse zeigen, daß bei geringer Querdiffusion nur wenig Schadstoffe von der Auflockerungszone in die Mineralgemisch-Strecke hinein transportiert werden, während der Transport durch die Auflockerungszone unter Umgehung des Mineralgemisch-Versatzes sehr schnell erfolgt. Da die Größe der Querdiffusion schwer abschätzbar ist, wird sie in konservativer Weise vernachlässigt, d.h. es wird eine vermehrte, beschleunigte Freisetzung von Schadstoffen durch die Auflockerungszone unterstellt.

Das Segment für eine Auflockerungszone ist parallel zu der zugehörigen Mineralgemisch-Strecke angeordnet. Zur Berechnung des Querschnitts F_A der Auflockerungszone wird angenommen, daß sie folgendermaßen mit Höhe H_D und Breite B_D der Mineralgemisch-Strecke zusammenhängt:

$$F_A = 1,23 \cdot (H_D^2 + B_D^2) - H_D \cdot B_D, \quad (17)$$

d.h. der Querschnitt der Auflockerungszone ist stets größer als der Querschnitt der Mineralgemisch-Strecke.

Die erforderlichen Eingangsdaten des Modells AZQN1 sind in den Tabellen 3.1 und 3.12 enthalten. Die Porosität und die Permeabilität in der Auflockerungszone sind globale Daten. Die ebenfalls globalen Parameter g , ρ_L , T_G , ∇T und p_{hyd} werden in den Effektmodellen verwendet und werden in Kapitel 4 beschrieben.

Tabelle 3.12: Eingangsdaten für das Segmentmodell AZQN1

Modell AZQN1	Auflockerungszone einer Mineralgemisch-Strecke
Querschnitt	rechteckig, Daten aus denen der Mineralgemisch-Strecke
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_D (=H_S)$, $B_D (=B_S)$, $L_D (=L_S)$, V_{sL} , m_{sorb} , Δz	

3.2.5 Modell einer offenen Strecke

Für nicht verfüllte Strecken und Kammern werden die Modelle OSQK2 und OSQK3 verwendet. Eine schematische Darstellung dieser Modellsegmente gibt die Abbildung 3.12. In beiden Modellen werden eine schnelle Durchmischung der Schadstoffe zwischen offenen Bereichen benachbarter Strecken und zusätzlich Diffusion berücksichtigt.

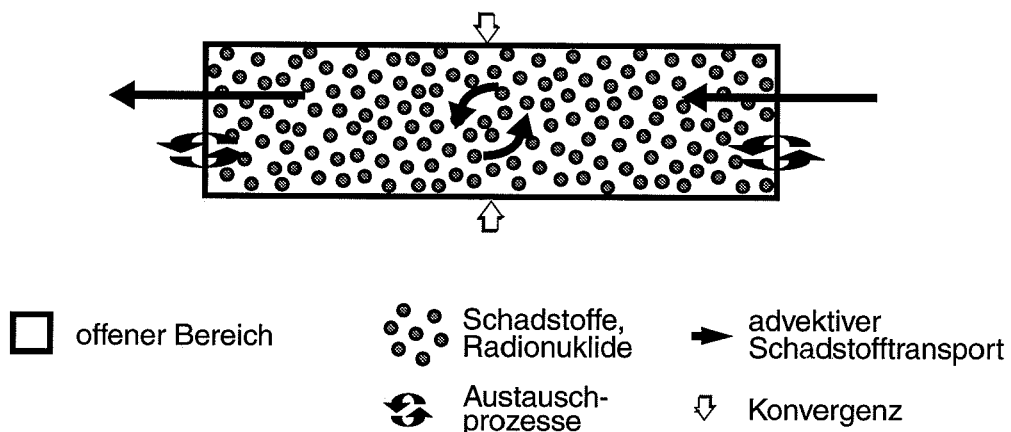


Abb. 3.12: Modell eines offenen, konvergierenden Streckensegments: Schadstofftransport durch Advektion, Diffusion, Dispersion sowie instantane Durchmischung innerhalb des Streckensegments und gegebenenfalls mit offenen Bereichen in den Nachbarsegmenten

Die Modelle unterscheiden sich in der Berechnung des Strömungswiderstandes. Die Laugenströmung in der offenen Strecke von OSQK2 wird nach Hagen-Poiseuille berech-

net. Für den Volumenstrom S einer zähen inkompressiblen Flüssigkeit zwischen zwei parallelen Platten im Abstand H erhält man für den stationären Fall entsprechend [9]

$$S = \frac{\Delta p}{12 \cdot \mu \cdot L} \cdot B \cdot H^3, \quad (18)$$

bzw. ausgedrückt durch die Querschnittsfläche F und das Verhältnis von Breite zu Höhe folgt

$$S = \frac{1}{12} \cdot \frac{\Delta p}{\mu \cdot L} \cdot F^2 \cdot \frac{H}{B}, \quad (19)$$

wobei μ die dynamische Zähigkeit und $\Delta p/L$ der Druckgradient sind.

Definiert man analog zum Darcy-Gesetz [1] einen Leitwert bzw. inversen Strömungswiderstand durch

$$S = R^{-1} \cdot \Delta p, \quad (20)$$

so erhält man für R^{-1}

$$R^{-1} = \frac{1}{12} \cdot \frac{F^2}{\mu \cdot L} \cdot \frac{H}{B}. \quad (21)$$

Durch Konvergenz ändern sich die Abmessungen der Strecke und damit der Strömungswiderstand mit der Zeit.

Im Segmentmodell OSQK3 wird mit einem zeitlich konstanten Strömungswiderstand gerechnet, der nach Gleichung 21 berechnet wird, wobei jedoch Höhe und Breite und damit der Querschnitt der Strecke durch die Anfangswerte festgelegt sind.

Die Eingangsdaten beider Modelle sind in den Tabellen 3.1 und 3.13 enthalten. In beiden Fällen ist die Angabe eines Zusatzvolumens erlaubt. Hierbei handelt es sich um ein nicht

durchströmtes Volumen, z.B. in Nischen oder Blindstrecken, das evtl. versetzt sein kann. Die Porosität dieses Versatzmaterials wird mit ϕ_Z bezeichnet. Der Anfangswert wird segmentspezifisch vorgegeben. Die globalen Parameter $g, \rho_L, T_G, \nabla T, p_{hyd}, K_{ref}$ und ϕ_{ref} werden in den Effekmodellen verwendet und werden in Kapitel 4 beschrieben.

Tabelle 3.13: Eingangsdaten für die Segmentmodelle OSQK2 und OSQK3

Modelle OSQK2-3	Offene Strecke mit Zusatzvolumen
Querschnitt	rechteckig
Konvergenz	offener Hohlraum
Austauscheffekte	(Diffusion, Dispersion), instantane Durchmischung
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_S, B_S, L_S, V_Z, V_{sl}, m_{sorb}, \Delta z, K_{lok}, \phi_Z$	

3.2.6 Modellierung der Schnittstellen zum Deckgebirge

Als Schnittstellen zum Deckgebirge werden Segmente verwendet, die durch die Modelle IQQN1-3 sowie IQRN1-3 beschrieben werden. Die Modelle unterscheiden sich jeweils in der Behandlung des Schadstofftransports durch Diffusion, Dispersion und konvektiven Laugenaustausch aus dem Grubengebäude hinaus. Sie ermöglichen es, zu vorgegebenen Zeitpunkten einen unbegrenzten Laugenzutritt in das Endlager zu modellieren. Zu Beginn eines Laugenzutritts bestimmt sich die Zustromrate jeweils aus dem konstanten Strömungswiderstand dieser nicht konvergierenden Segmente. Bei weiter fortgeschrittener Flutung des Grubengebäudes ergibt sich die Zustromrate aus den jeweiligen Strömungswiderständen der gefluteten Segmente und dem vorherrschenden Druckgradienten.

Sind alle Hohlräume der Grube mit Lauge gefüllt, so kommt der Einstrom zum Erliegen. Im allgemeinen bewirkt die Verkleinerung laugegefüllter Hohlräume durch die Konvergenz des Salzgesteins und die damit verbundene Zunahme der Strömungswiderstände schon vorher eine Umkehr des Laugenstroms an der Schnittstelle zum Deckgebirge. Ist

die ausgepreßte Lauge kontaminiert, so beginnt gleichzeitig die Schadstofffreisetzung aus dem Endlager.

Programmtechnisch werden die Eigenschaften des Segments, sowohl Laugenzutrittsort als auch Laugen- und Schadstoffaustrittsort zu sein, durch einen segmentspezifisch vorgegebenen Zeitpunkt des Laugenzutritts realisiert, ab dem das Segment in den Zustand "Zufluß" gesetzt wird und der Laugendruck im Segment konstant auf dem hydrostatischen Außendruck p_{hyd} gehalten wird. Solange der Laugendruck in den Nachbarsegmenten kleiner als p_{hyd} ist, z.B. das Endlager noch nicht geflutet ist, wirkt das Segment als Laugenquelle. Übersteigt der Laugendruck in den Nachbarsegmenten den hydrostatischen Außendruck, so wirkt das Segment als Laugensenke. Zugleich wird die Schadstoffkonzentration im Segment immer auf dem Wert $c_i = 0$ gehalten. Dadurch wirkt das Segment als Senke für aus den Nachbarsegmenten kommende Schadstoffströme.

Der Schadstofftransport durch Diffusion, Dispersion und durch konvektive Laugenströme wird u.a. wesentlich durch die Größe des Gradienten der Schadstoffkonzentration bestimmt. Der Gradient der Schadstoffkonzentration wird in den Modellen IQQN1 und IQRN1 aus dem Quotienten der Konzentrationsdifferenz $c_i - c_j$ im Ausgangssegment i und im Nachbarsegment j und dem Abstand zwischen den Segmentmittelpunkten bestimmt. Die Modelle IQQN2 und IQRN2 bieten dem Anwender die Möglichkeit, den Gradienten durch Vorgabe einer effektiven Länge L_{eff} als segmentspezifischen Eingangsparameter zu beeinflussen. Desweiteren geht in die Berechnung des Schadstofftransports der Querschnitt des Ausgangssegments ein. Auch dieser kann in den Segmentmodellen IQQN2 und IQRN2 durch Vorgabe eines konstanten, effektiven Querschnitts F_{eff} vom Anwender als segmentspezifisches Datum vorgegeben werden.

In den Segmentmodellen IQQN3 und IQRN3 werden Diffusion, Dispersion und der konvektive Schadstofftransport aus dem Segmentssystem hinaus unterdrückt. Die Freisetzung erfolgt hier rein advektiv.

Die erforderlichen Eingangsdaten der Modelle IQQN1-3 und IQRN1-3 für die Schnittstellen zum Deckgebirge sind in den Tabellen 3.1 und 3.14 bis 3.16 enthalten. Die Anfangswerte der Porositäten sind lokale, segmentspezifische Daten, die der Permeabilitäten

globale Daten. Die ebenfalls globalen Parameter g , ρ_L , T_G und ∇T werden in den Effektmodellen verwendet und in Kapitel 4 beschrieben.

Wegen seiner Eigenschaft, als Laugen- und Schadstoffsenke zu fungieren, sollte das Segment nicht wie in Abbildung 3.13a skizziert zwischen anderen Segmenten angeordnet werden, sondern stets als Randsegment wie in Abbildung 3.13b auftreten. Die Anordnung (a) kann zu unerwünschten Ergebnissen führen, da ein Laugen- und Schadstofftransport von Segment 1 nach 2 bzw. von 2 nach 1 durch die Laugen- und Schadstoffsenke 3 unterbrochen ist. In Anordnung (b) kann ein Transport von 1 nach 2 bzw. von 2 nach 1 durch das Segment 4 hindurch erfolgen.

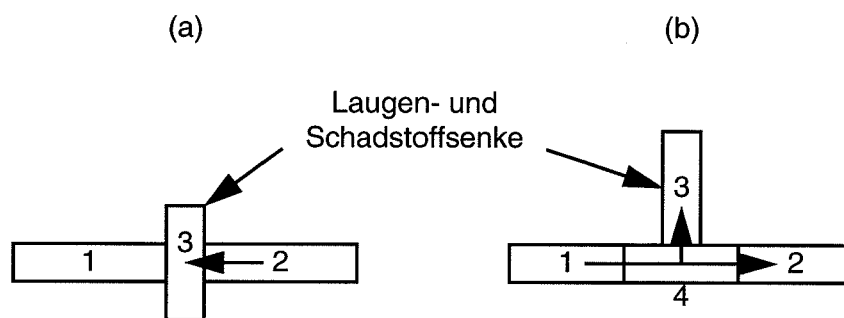


Abb. 3.13: Anordnung des Segments (3) für einen Laugen- bzw. Austrittsort

Tabelle 3.14: Eingangsdaten für die Segmentmodelle IQQN1 und IQRN1

Modelle IQQN1 (IQRN1)	Unbegrenzter Laugen- und Austritt
Querschnitt	rechteckig bzw. rund
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_S, R_S, B_S, L_S, \Delta z, \phi_S$	

Tabelle 3.15: Eingangsdaten für die Segmentmodelle IQQN2 und IQRN2

Modelle IQQN2 (IQRN2)	Unbegrenzter Laugenzu- und Austritt
Querschnitt	rechteckig bzw. rund
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	Diffusion, Dispersion, Dichtegradient, mit effektiver Länge und effektivem Querschnitt
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_S, R_S, B_S, L_S, \Delta z, \phi_S$ sowie:	
L_{eff}	effektive Länge für Austauscheffekte
F_{eff}	effektiver Querschnitt für Austauscheffekte

Tabelle 3.16: Eingangsdaten für die Segmentmodelle IQQN3 und IQRN3

Modelle IQQN3 (IQRN3)	Unbegrenzter Laugenzu- und Austritt
Querschnitt	rechteckig bzw. rund
Konvergenz	keine
Austauscheffekte	keine
Verwendete lokale Eingangsdaten (siehe Tabelle 3.2): $H_S, R_S, B_S, L_S, \Delta z$	

4 Modellannahmen und Effekte im Grubengebäude

Im folgenden werden die im Grubengebäude berücksichtigten Effekte und Modellannahmen zur Laugenbewegung, zur Mobilisierung und zum Transport der Schadstoffe im Grubengebäude beschrieben. Da sich die Teilbereiche eines Grubengebäudes in unterschiedlicher Teufe befinden können, wird in den Modellen die Teufenlage der Segmente explizit berücksichtigt. Hierzu werden die teufenabhängigen Parameter Gebirgstemperatur, Gebirgsdruck, hydrostatischer Laugendruck, Dichte der Lauge, Referenzkonvergenzrate usw. auf ein Referenzniveau bezogen. Die lokalen Werte der Parameter werden in den Segmenten unter Verwendung des jeweiligen Abstands Δz vom Referenzniveau berechnet. Z. B. ergibt sich die lokale Gebirgstemperatur aus der Gebirgstemperatur in der Referenztiefe, dem geothermischen Gradienten und dem Abstand Δz , die Änderung des Gebirgsdrucks mit der Teufe aus der Erdbeschleunigung, der mittleren Dichte des Salzgesteins und dem Abstand Δz , die Änderung des hydrostatischen Drucks aus der Erdbeschleunigung, der mittleren Dichte der Lauge und dem Abstand Δz .

Im Fall der Einlagerung von wärmeproduzierendem Abfall erhöht sich die Temperatur in der Umgebung des Einlagerungsortes. Diese Temperaturerhöhung wird mit einem speziellen Temperaturprogramm außerhalb des Programms **Lopos2** für verschiedene Orte des Grubengebäudes zu bestimmten Zeitpunkten berechnet (siehe beispielsweise [2]). Die sich ergebenden Werte werden tabellarisch in einer Datei abgelegt. Aus diesen Tabellen werden in **Lopos2** die erforderlichen Temperaturdaten zu beliebigen Zeitpunkten durch lineare Interpolation ermittelt und zu der lokalen Gebirgstemperatur addiert.

Die Modellierung des in einem Endlager im Salz wichtigen Effektes der Konvergenz wird im Kapitel 4.1 eingehender erläutert. Neben der Konvergenz der offenen Hohlräume werden dabei die Konvergenzreduktion durch den Laugendruck und, sofern vorhanden, durch den Versatz berücksichtigt. Die Temperaturerhöhung durch wärmeproduzierenden Abfall wird durch einen Arrheniusterm im Konvergenzansatz berücksichtigt.

Es wird angenommen, daß die Freisetzung von Schadstoffen aus dem Grubengebäude nur über den Wasserpfad, jedoch nicht über die Gasphase möglich ist. Folglich beginnt die Schadstoffmobilisierung mit dem Laugenzutritt in den Einlagerungsbereich. Die Mobilisierung des Schadstoffinventars erfolgt je nach Einlagerungskonzept instantan oder

nach Korrosion der Behälter durch Auslaugung aus der Glasmatrix, der Zementmatrix oder den abgebrannten LWR-Brennelementen. Es wird eine homogene Verteilung des Abfalls im Einlagerungsbereich und daraus resultierend im allgemeinen eine räumlich konstante Konzentration der Schadstoffe in den Einlagerungskammern und Bohrlöchern angenommen. Falls ein Einlagerungssegment zu groß ist oder die Schadstoffkonzentrationen räumlich variieren, kann das Segment ggfs. feiner unterteilt werden.

Die Laugenbewegung selbst ist durch die vorhandenen Druckverhältnisse und Strömungswiderstände gegeben. Nach dem Auffüllen eines Bereichs mit Lauge bzw. einer instantanen Flutung von Teilen des Grubengebäudes beginnt der Aufbau des Laugendrucks. Dieser wird über die Strömungswiderstände aus dem hydrostatischen Außen- und dem hydrodynamischen Druckerhöhung infolge des Auspressens aufgrund der Konvergenz bestimmt. Falls erforderlich, kann wahlweise der direkte Weitertransport von in ein Segment eingedrungener Lauge in nachfolgende Segmente berechnet werden, auch wenn das Segment selbst noch nicht vollständig mit Lauge gefüllt ist. Konsequenzen dieser Modellvariante werden in Kapitel 3.1.3 diskutiert.

Bei sehr geringen Druckdifferenzen und hohen Strömungswiderständen treten sehr kleine Laugenströme auf. Um zu verhindern, daß sich numerisch bedingte Schwankungen in diesem Fall auf den Schadstofftransport durchprägen, werden Laugenströme, die absolut kleiner als ein vom Anwender in der modulspezifischen Eingabedatei vorgegebener Wert sind, auf Null gesetzt.

Die in der Lauge gelösten Schadstoffe werden im Grubengebäude entweder advektiv mit dem Laugenstrom oder über Austauscheffekte transportiert. Als Austauscheffekte werden Diffusion, Dispersion, thermische Konvektion und Konvektion durch einen anderweitig verursachten Dichtegradienten berücksichtigt (siehe Kapitel 4.6.2 und 4.6.3).

In den offenen Bereichen kann schon der geothermische Gradient eine Konvektionsbewegung verursachen, die zu einer schnellen Durchmischung der Lauge und damit zu einem Konzentrationsausgleich führt. Daher wird für ein offenes, laugegefülltes Segment eine unverzügliche Durchmischung unterstellt. Falls in der Modellierung des Grubengebäudes mehrere offene Segmente aneinanderstoßen, so wird die unverzügliche Durch-

mischung über die Segmentgrenzen hinweg durch entsprechende Austauschereffekte gewährleistet. Hierauf wird in Kapitel 4.6.4 ausführlicher eingegangen.

Letztlich erfolgt der Schadstofftransport durch eine additive Überlagerung des advektiven und konvektiven Transports, der Diffusion und der Dispersion sowie der Durchmischung in offenen Bereichen.

4.1 Modellierung der Konvergenz von Salzgestein

Im folgenden wird die Modellierung der Konvergenz des ein Endlager umgebenden Salzgesteins dargestellt, die ein wesentlicher Antriebsmechanismus für die Freisetzung aus dem Grubengebäude ist. Die Konvergenz wird vom plastischen Verhalten des Salzgesteins verursacht, wodurch das Salz unter Gebirgsdruck in Hohlräume eindringt.

Für die mathematische Beschreibung der Konvergenz wird angenommen, daß die Verkleinerung des Volumens eines Hohlraums $dV(t)/dt$ zu jeder Zeit proportional dem zu diesem Zeitpunkt vorliegenden Volumen des Hohlraums $V(t)$ ist,

$$\frac{d}{dt}V(t) = -K \cdot V(t). \quad (22)$$

Die Konvergenzrate K hängt im allgemeinen vom Laugendruck, von der Porosität des Versatzmaterials und von der Temperatur des umgebenden Gebirges ab. Näherungsweise wird für die Konvergenzrate daher ein Produktansatz verwendet, bei dem die einzelnen Faktoren jeweils nur vom Laugendruck p , von der Porosität ϕ bzw. von der Temperatur T abhängen,

$$K = K_{\text{ref}} \cdot f_p(p) \cdot f_\phi(\phi) \cdot f_T(T). \quad (23)$$

Die Referenzkonvergenzrate K_{ref} gibt die Konvergenzrate für einen offenen, nicht mit Lauge gefüllten Hohlraum bei Gebirgstemperatur wieder, der sich in der Referenztiefe befindet. Die Funktion f_p beschreibt die Abhängigkeit der Konvergenzrate vom Laugendruck im Porenraum und hat die Form

$$f_p(p(z, t)) = \left(\frac{p_G(z) - p(z, t)}{p_G(z_r)} \right)^m \quad (24)$$

Die Konvergenzrate ist demnach abhängig von der Differenz zwischen Gebirgsdruck $p_G(z)$ und dem Laugendruck $p(z, t)$ in der Teufe z , in der sich das jeweilige Segment befindet. Im Nenner wurde der Gebirgsdruck $p_G(z_r)$ in der Referenztiefe z_r , d.h. der Referenz-Gebirgsdruck, anstelle des Gebirgsdrucks $p_G(z)$ eingeführt. Die Teufenabhängigkeit der Konvergenzrate über den Gebirgsdruck ist damit in die Funktion f_p hineingenommen. Hierdurch ist es möglich, die Referenzkonvergenzrate K_{ref} auf die Referenztiefe z_r zu beziehen und so für das gesamte Endlager einheitlich festzulegen. Der Exponent m folgt aus dem Stoffgesetz zur Beschreibung des sekundären Kriechens von Steinsalz [7].

Der lokale Gebirgsdruck $p_G(z)$ läßt sich aus dem Referenz-Gebirgsdruck $p_G(z_r)$ nach

$$p_G(z) = p_G(z_r) - \Delta z \cdot g \rho_S$$

bestimmen, wobei ρ_S die mittlere Dichte des Salzgesteins, g die Erdbeschleunigung und $\Delta z = z - z_r$ der Abstand des Segments vom Referenzniveau sind. Die Berechnung des Laugendrucks $p(z, t)$ unter Berücksichtigung der Teufenlage ist im Kapitel 4.4.1 dargestellt.

In einem versetzten Hohlraum wird die Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Porosität des Versatzmaterials berücksichtigt, da der Konvergenz für kleiner werdende Porosität ein wachsender Widerstand entgegengesetzt wird. Für die Abhängigkeit $f_\phi(\phi)$ der Konvergenzrate von der Porosität wurde in [13] der folgende Ansatz abgeleitet,

$$f_\phi(\phi) = \phi \cdot \left(1 - \frac{\phi}{\phi_r} \right) \cdot \left[\left(1 - \frac{\phi}{\phi_r} \right)^2 + \left[\phi \cdot \left(1 - \frac{\phi}{\phi_r} \right) \right]^{1/m} \right]^{-m} \quad (25)$$

für $\phi < \phi_r$. Im Grenzfall $\phi \rightarrow \phi_r$ strebt diese Funktion gegen 1.

Die Herleitung dieser Beziehung verwendet ebenfalls das Stoffgesetz für sekundäres Kriechen, daher ist der Exponent m identisch mit dem in Gleichung 24. Die Größe ϕ_r wird

mit Referenzporosität bezeichnet. Sie kennzeichnet die Porosität, bei der eine Stützwirkung des Versatzes einsetzt. Daher gilt neben der Beziehung 25

$$f_{\phi}(\phi) = 1. \quad (26)$$

für $\phi \geq \phi_r$. Für einen nichtversetzten Hohlraum gilt stets $f_{\phi}(\phi) \equiv 1$.

Die Referenzporosität ist eine globale Größe und hat im gesamten Grubengebäude den gleichen Wert.

Die Funktion $f_T(T)$ in Gleichung 23 trägt der Tatsache Rechnung, daß mit höherer Temperatur die Kriechgeschwindigkeit des Salzes wächst, was zu einer schnelleren Verkleinerung der Hohlräume führt [4]. Die Abhängigkeit von der Temperaturerhöhung durch eingelagerten wärmeproduzierenden Abfall und mit wachsender Teufe wird wie folgt berücksichtigt,

$$f_T(T) = \frac{1}{1+a} \exp\left(-\frac{Q_1}{R}\left(\frac{1}{T(z)} - \frac{1}{T_G(z_r)}\right)\right) \left\{ 1 + a \exp\left(-\frac{\Delta Q}{R}\left(\frac{1}{T(z)} - \frac{1}{T_G(z)}\right)\right) \right\}, \quad (27)$$

wobei

Q_1, Q_2	die Aktivierungsenergien der Kriechprozesse,
$\Delta Q = Q_2 - Q_1$	die Differenz der Aktivierungsenergien,
z_r	die Referenztiefe,
$T_G(z_r)$	die Gebirgstemperatur in der Referenztiefe,
$\Delta z = z - z_r$	der Abstand zur Referenztiefe,
$T_G(z) = T_G - \Delta z \cdot \nabla T$	die lokale Gebirgstemperatur in der Teufe z ,
∇T	der geothermische Temperaturgradient,
$T(z) = \Delta T + T_G(z)$	die lokale Temperatur in der Teufe z und
ΔT	die Temperaturerhöhung über die lokale Gebirgstemperatur sind.

Der Parameter $a \neq 0$ ermöglicht es, in bestimmten Temperaturbereichen unterschiedliches Kriechverhalten von Steinsalz mit den Aktivierungsenergien Q_1 bzw. Q_2 zu berücksichtigen.

Die Größen p , ϕ und T sind zeitlich veränderliche Größen, die Konvergenzrate K ist somit implizit zeitabhängig.

4.2 Auswirkungen der Konvergenz

Die Konvergenz des Salzgesteines führt zu einer Reduktion der Hohlraumvolumina mit der im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Rate. Zur Berechnung des Volumens eines beliebigen Hohlraumes als Funktion der Zeit wird die Differentialgleichung 22 in eine Differenzgleichung umgeschrieben:

$$V(t + \Delta t) = V(t)(1 - K(t)\Delta t). \quad (28)$$

Diese Beziehung beschreibt, wie das Volumen zur Zeit $t + \Delta t$ aus der Kenntnis des Volumens und der Konvergenzrate zur Zeit t berechnet werden kann. Die Gleichung gilt für nicht zu große Zeitschritte Δt , genauer falls $K \cdot \Delta t \ll 1$ ist. Rechnungen an konkreten Beispielen haben gezeigt, daß dies in genügend guter Näherung stets erfüllt ist.

Die Gleichung 28 kann in der angegebenen Form direkt für die Berechnung des gesamten Volumens eines Hohlraumes verwendet werden. Bei einem versetzten Hohlraum wird zusätzlich das Porenvolumen benötigt als der Anteil des gesamten Volumens, der Lauge aufnehmen kann. Bei der Volumenänderung eines versetzten Hohlraums kann sich nur das Volumen der Poren, nicht aber das des Feststoffes ändern, daher gilt:

$$V_P(t + \Delta t) - V_P(t) = V(t + \Delta t) - V(t), \quad (29)$$

d.h. die Änderung des Porenvolumens ist gleich der Änderung des gesamten Volumens. Hieraus ergibt sich mit Gleichung 28

$$V_P(t + \Delta t) = V_P(t) - V(t)K(t)\Delta t. \quad (30)$$

Als weitere geometrische Größe wird die Porosität, z.B. für die Bestimmung der Konvergenzrate, benötigt (siehe Gleichung 23 bzw. 25). Die aktuelle Porosität erhält man unmittelbar mit der Definition der Porosität ϕ als Verhältnis von Porenvolumen zu Gesamtvolumen:

$$\phi(t + \Delta t) = \frac{V_P(t + \Delta t)}{V(t + \Delta t)}. \quad (31)$$

Zur Berechnung der Strömungswiderstände offener Strecken und der Laugenbewegungen durch Austauscheffekte (siehe Kapitel 4.3.2 und 4.6.3) werden die Höhe und Breite eines Segmentes als Funktionen der Zeit benötigt. Man erhält diese Werte aus der Kenntnis des Volumens unter der Annahme, daß die Höhe H und die Breite B eines Segmentes in einem Zeitschritt um denselben Betrag abnehmen,

$$H(t + \Delta t) - H(t) = B(t + \Delta t) - B(t). \quad (32)$$

Weiterhin wird angenommen, daß sich die Länge eines Segmentes gegenüber der Höhe und Breite in der Zeit relativ wenig ändert, so daß sie als zeitlich konstant behandelt werden kann. Dies bedeutet, daß der Querschnitt F eines Segmentes unmittelbar aus dem Volumen berechnet werden kann,

$$F(t + \Delta t) = \frac{V(t + \Delta t)}{L}. \quad (33)$$

Wird in der Gleichung 32 $B(t+\Delta t)$ durch den Querschnitt $F(t+\Delta t)$ und die Höhe $H(t+\Delta t)$ ausgedrückt und nach $H(t+\Delta t)$ aufgelöst, so ergibt sich

$$H(t + \Delta t) = \frac{1}{2}[H(t) - B(t)] + \left[\frac{1}{4}[H(t) - B(t)]^2 + F(t + \Delta t) \right]^{1/2}. \quad (34)$$

Ganz analog zur Herleitung von Gleichung 34 für die Höhe kann man eine Beziehung für die Breite eines Segmentes ermitteln. Es ergibt sich

$$B(t + \Delta t) = \frac{1}{2}[B(t) - H(t)] + \left[\frac{1}{4}[H(t) - B(t)]^2 + F(t + \Delta t) \right]^{1/2}. \quad (35)$$

Für Segmente mit zylindrischer Geometrie ist die für die Volumenverkleinerung relevante Größe der Radius

$$R(t + \Delta t) = \sqrt{\frac{F(t + \Delta t)}{\pi}}. \quad (36)$$

Hierbei wird wieder angenommen, daß sich nur die Querschnittsfläche F ändert, die Länge L jedoch konstant bleibt. Den Querschnitt F erhält man aus Gleichung 33.

Die Gleichungen 28, 30, 31 und 33 bis 36 enthalten alle Informationen über die von der Konvergenz beeinflussten, zeitlich veränderlichen geometrischen Größen, die entweder von den Segmentmodellen oder für Austauscheffekte benötigt werden.

4.3 Permeabilität und Widerstand von versetzten und offenen Strecken

Alle verfüllten Teilbereiche des Grubengebäudes werden in der Modellierung des Laugentransportes als poröses Medium betrachtet. Um die Laugenströme berechnen zu können, müssen die Strömungswiderstände der Segmente bekannt sein. Die Widerstände konvergierender Strecken sind wegen der Querschnittsänderung und der Porositätsänderung zeitlich veränderlich. Der Strömungswiderstand ergibt sich aus den geometrischen Abmessungen und der Permeabilität eines Segmentes. Im Fall eines mit Salzgrus versetzten Segments berechnet sich die Permeabilität aus der Porosität des Versatzes nach der im folgenden Kapitel angegebenen Beziehung.

Die mit nichtkompaktierbarem Versatz verfüllten Strecken ändern den Querschnitt nicht. Ihnen wird eine zeitlich konstante Permeabilität als Eingangsgröße vorgegeben.

4.3.1 Permeabilität von Versatzmaterial

Die Permeabilität ist als Maß für die Durchlässigkeit des porösen Materials gegen Laugenströme nur von den Eigenschaften des porösen Materials selbst und nicht von Laugeneigenschaften abhängig. Die für poröse Medien relevante geometrische Größe ist die Porosität ϕ , die definiert ist als das Verhältnis des totalen Porenvolumens zum Gesamtvolumen. Zwischen der totalen und der effektiven Porosität wird an dieser Stelle nicht unterschieden.

Es gibt eine Reihe von Experimenten, die den Zusammenhang von Permeabilität und Porosität für Salzgrus-Proben untersucht haben; in [11] wurden diese Messungen ausgewertet. Die Ergebnisse legen es nahe, folgenden Ansatz für die Permeabilität k als Funktion der Porosität ϕ zu wählen,

$$k = f_{per} \cdot c \cdot \phi^q. \quad (37)$$

Hierbei sind c und q Konstanten, die aus Experimenten bestimmt werden.

Es muß angenommen werden, daß in der Zuflußphase eines Segmentes Umlösungsvorgänge und Setzungserscheinungen im Versatzmaterial stattfinden, welche dann zu einer höheren Permeabilität führen. Der Faktor f_{per} trägt dieser Eigenschaft Rechnung, indem er in der Phase, in der Lauge in ein Segment eindringt, einen Wert größer als 1 erhalten kann.

4.3.2 Strömungswiderstand von versetzten und offenen Strecken

Die Strömungswiderstände R von versetzten Strecken, Bohrlöchern und Kammern lassen sich als Funktion der Permeabilität k wie folgt darstellen,

$$R = \frac{\mu \cdot L}{F \cdot k}, \quad (38)$$

wobei μ die dynamische Viskosität, L die Länge und F den Querschnitt des versetzten Hohlräume bedeuten. Der Strömungswiderstand ist also sowohl von geometrischen Größen (L, F, k), als auch von dynamischen Eigenschaften der Lauge (μ) abhängig.

Für eine offene Strecke wird der Strömungswiderstand wie im Kapitel 3.2.5 angegeben aus der Strömung nach Hagen-Poiseuille berechnet,

$$R = \frac{12}{H^2} \cdot \frac{\mu \cdot L}{F}. \quad (39)$$

Einem Laugenstrom, der von einem Segment i zu einem Nachbarsegment j strömt, wird ein Strömungswiderstand $R_{i,j}$ entgegengesetzt. Dieser Strömungswiderstand wird in unterschiedlich zueinander orientierten Segmenten wie folgt berechnet.

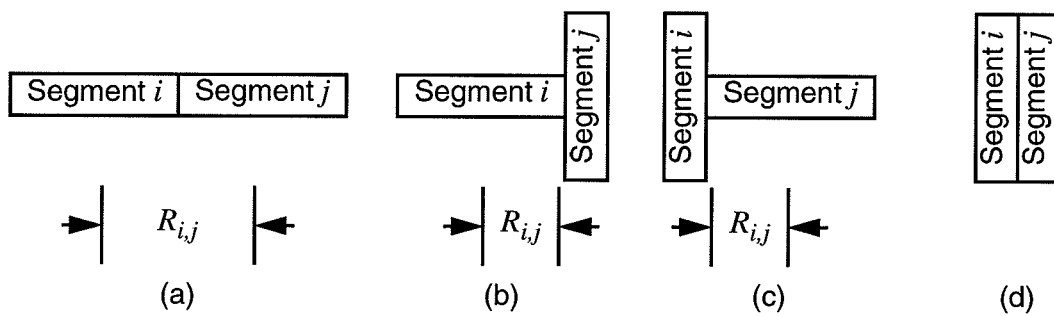


Abb. 4.1: Strömungswiderstand von Segmenten bei unterschiedlicher Anordnung

- Segmente i und j sind in Reihe (Abbildung 4.1a):

$$R_{i,j} = \frac{1}{2}(R_i + R_j). \quad (40)$$

- Segment i mündet senkrecht in Segment j (Abbildung 4.1b):

$$R_{i,j} = \frac{1}{2}R_i, \quad (41)$$

d.h. vom Segment j wird im allgemeinen nur ein kurzes Stück durchströmt, dessen Strömungswiderstand vernachlässigt wird.

- Segment j mündet senkrecht in Segment i (Abbildung 4.1c):

$$R_{i,j} = \frac{1}{2}R_j, \quad (42)$$

d.h. vom Segment i wird im allgemeinen nur ein kurzes Stück durchströmt, dessen Strömungswiderstand vernachlässigt wird.

- Segmente i und j sind parallel (Abbildung 4.1d):

Entsprechend der Vernachlässigung der Strömungswiderstände senkrecht zur Strecke ergäbe sich in diesem Fall ein Strömungswiderstand $R_{i,j} = 0$, daher muß eine solche Anordnung von zwei Segmenten ausgeschlossen werden. Zwei parallele Segmente werden durch ein Segment mit doppeltem Querschnitt beschrieben.

4.4 Laugentransport durch Druckgradienten

Zunächst wird vorausgesetzt, daß alle Teile eines Segmentsystems mit Lauge gefüllt sind. Laugenströme in leere oder teilweise gefüllte Segmente werden im Kapitel 4.4.1.1 diskutiert.

In den mit Lauge gefüllten Segmenten gilt die folgende Strombilanzgleichung

$$\sum_{j \neq i} S_{i,j} = Q_i, \quad (43)$$

wobei der Index i ein Segment bezeichnet und j die zu i benachbarten Segmente beschreibt. Die Größe $S_{i,j}$ gibt den Laugenstrom vom Segment i zum Segment j an, während der Quellterm Q_i den Konvergenzlaugenstrom beschreibt. Dieser Konvergenzlaugenstrom entsteht als Folge des Konvergenzprozesses durch die Verkleinerung des

Hohlraumvolumens des Segments i . Im Fall eines nicht konvergierenden Streckensegments ist $Q_i = 0$ und die Summe über alle Ströme verschwindet, d.h. es strömt genau so viel Lauge in das (laugegefüllte) Segment wie auch wieder hinausströmt.

4.4.1 Berechnung des Laugendrucks

Für die Laugenströme $S_{i,j}$ in porösen Medien gilt das Darcy-Gesetz [1]

$$S_{i,j} = R_{i,j}^{-1} \cdot (p_i - p_j), \quad (44)$$

wobei $R_{i,j}$ der Strömungswiderstand des Darcy-Mediums zwischen den Mittelpunkten der Segmente i und j ist. Für offene Strecken errechnen sich die Laugenströme analog zu Gleichung 44, wobei der Strömungswiderstand sich nach Hagen-Poiseuille entsprechend Gleichung 21 ergibt.

Befinden sich die Segmente i und j in unterschiedlichen Teufen, so ist die wirksame, die Strömung antreibende Druckdifferenz um das Gewicht der Laugensäule zu vermindern oder zu erhöhen, d.h.

$$S_{i,j} = R_{i,j}^{-1} \cdot (p_i - p_j + \Delta_{i,j} \cdot g \rho_L), \quad (45)$$

wobei

$$\Delta_{i,j} = z_i - z_j \quad (46)$$

und z_i die Teufe, in der sich der Mittelpunkt des Segments i befindet, z_j entsprechend die des Segments j .

Der Konvergenzlaugenstrom berechnet sich aus der Volumenverkleinerung pro Zeiteinheit dt wie folgt

$$Q_i = -\frac{dV_i}{dt} = K(p_i(t), \phi_i(t), T_i(t)) \cdot V_i(t). \quad (47)$$

Hierbei ist K die Konvergenzrate und V_i beschreibt das Volumen des Segments i . Alle diese Größen sind im allgemeinen Funktionen der Zeit t . Das Vorzeichen in Gleichung 47 wurde so festgelegt, daß eine Volumenverkleinerung zu einem positiven Quellterm führt, der eine Vergrößerung des Laugenausstroms beschreibt.

Für die Konvergenzrate K gilt die im Kapitel 4.1 angegebene Gleichung 23 für ein Segment i ,

$$K(p_i, \phi_i, T_i) = K_i = K_{ref} \cdot f_p(p_i) \cdot f_\phi(\phi_i) \cdot f_T(T_i). \quad (48)$$

Definiert man die Größe β_i als

$$\beta_i = \beta(V_i, \phi_i, T_i) = K_{ref} \cdot f_\phi(\phi_i) \cdot f_T(T_i) \cdot V_i, \quad (49)$$

so läßt sich die Gleichung 47 als

$$Q_i = \beta_i \cdot f_p(p_i) \quad (50)$$

schreiben.

Mit Hilfe der Beziehungen 45 und 50 wird die Strombilanzgleichung 43 umgeformt zu

$$\sum_{\substack{j \\ j \neq i}} R_{i,j}^{-1} \cdot (p_i - p_j + \Delta_{i,j} \cdot g\rho_L) = \beta_i \cdot f_p(p_i). \quad (51)$$

Da $f_p(p_i)$ keine lineare Funktion von p_i ist, stellt die Beziehung 51 für alle i ein nichtlineares Gleichungssystem dar. Die Lösungen des Gleichungssystems geben die Laugendrucke in allen Segmenten, jeweils zu einem Zeitpunkt t und jeweils unter der Vorausset-

zung, daß die Segmente vollständig mit Lauge gefüllt sind. Unvollständig gefüllte Segmente werden, wie im folgenden Kapitel beschrieben wird, in den Randbedingungen für das Gleichungssystem berücksichtigt.

4.4.1.1 Randbedingungen für leere oder teilweise gefüllte Segmente

Das im vorangehenden Kapitel hergeleitete Gleichungssystem 51 für den Laugendruck geht von der Strombilanzgleichung 43 aus und gilt daher nur für vollständig gefüllte Segmente. Leere oder teilweise gefüllte Segmente gehen in Form von Randbedingungen in das Gleichungssystem ein. Da sich diese Randbedingungen durch weiteres Fluten von Segmenten im Laufe der Zeit von Segment zu Segment verschieben, ändert sich auch das Gleichungssystem mit der Zeit. Nach jedem Zeitschritt muß daher eventuell das Gleichungssystem um weitere Segmente und damit um weitere Gleichungen erweitert werden.

Andererseits erreichen im Laufe der Zeit einige Segmente durch den Konvergenzprozeß die Endporosität, d.h. eine Porosität vergleichbar mit der von Steinsalz. In diesem Fall werden sie für Lauge undurchlässig, und ihr Strömungswiderstand geht gegen unendlich. Diese Segmente kommen dann nicht mehr im Gleichungssystem vor, und die Anzahl der Gleichungen im System 51 wird kleiner.

Im folgenden werden die Randbedingungen für den Laugendruck in leeren und unvollständig gefüllten Segmenten definiert. In allen Segmenten wird der atmosphärische Druck vernachlässigt. In leeren Segmenten wird folglich ein Druck von 0 MPa herrschen, in teilweise gefüllten Segmenten berechnet sich der Laugendruck aus der Höhe h_i der Lauge im Segment i ,

$$p_i = g \cdot \rho_L \cdot h_i \quad (52)$$

Hierbei sind

- p_i der Laugendruck im Segment i ,
- g die Erdbeschleunigung,

ρ_L die Dichte der Lauge und

h_i die Höhe des aktuellen Laugenstands im Segment i .

Der während der Zuflußphase auftretende hydrostatische Druck in teilweise gefluteten horizontalen Strecken ist in vielen Fällen vernachlässigbar klein gegenüber dem anstehenden hydrostatischen Laugendruck in gefluteten Segmenten. Etwas anders liegen die Verhältnisse während des Zuflusses in die vertikalen Verbindungen. Dort steigt der Laugendruck bei z.B. 40 m Laugenstand und einer Laugendichte von 1200 kg/m^3 auf ca. 0,5 MPa an. Dieser Druckanstieg würde die Konvergenz der Segmente bei einem Gebirgsdruck von 18 MPa um etwa 10%, bei einem Gebirgsdruck von 11 MPa um etwa 17% behindern. In vertikal angeordneten Segmenten sollte daher der Druckanstieg berechnet und auch der sofortige Weitertransport der Lauge zugelassen werden (siehe Kapitel 3.1.3).

In dem Gleichungssystem 51 erscheint der Laugendruck in benachbarten unvollständig gefüllten Segmenten als Randbedingung

$$p_j = 0 \quad (53)$$

für alle Segmente j , die keine Lauge enthalten, oder entsprechend Gleichung 52 für teilweise gefüllte Segmente. Ist das betrachtete Segment i horizontal angeordnet, so kann die Höhe des Laugenstands h_i durch das zugeflossene Laugenvolumen V_i^L , das Porenvolumen V_i^P und die Höhe H_i des Segments ausgedrückt werden,

$$h_i = \frac{V_i^L}{V_i^P} \cdot H_i. \quad (54)$$

Bei vertikal angeordneten Segmenten tritt anstelle der Segmenthöhe H_i die Segmentlänge L_i .

Die Berücksichtigung des Gewichts der Laugensäule in gefluteten Segmenten und die Auswirkung auf den Laugenzufluß bei teilweise gefluteten Segmenten läßt sich mit der

folgenden verallgemeinerten Definition der Größe $\Delta_{i,j}$ (Gleichung 46) erfassen. Sofern die Segmente i und j im Gleichungssystem zur Druckberechnung vorkommen, sei

$$\begin{aligned} \Delta_{i,j} &= 0 && \text{falls } z_i - z_j \leq 0 \text{ und das Segment } i \text{ leer} \\ &&& \text{oder nur teilweise gefüllt ist,} \\ \Delta_{i,j} &= 0 && \text{falls } z_i - z_j \geq 0 \text{ und das Segment } j \text{ leer} \\ &&& \text{oder nur teilweise gefüllt ist,} \\ \Delta_{i,j} &= z_i - z_j && \text{sonst.} \end{aligned} \quad (55)$$

4.4.1.2 Anfangsbedingung für den Druck in gefüllten Segmenten

Im folgenden werden die Anfangsbedingungen für den Laugendruck direkt nach dem Vollaufen eines Segments formuliert. Nach dem Vollaufen eines Segments i steigt der Druck von $p_i = g \cdot \rho_L \cdot H_i$ auf einen höheren Wert. In dem Moment, in dem das Segment aufgefüllt ist, gilt zunächst die Beziehung

$$\sum_{\substack{i \\ i \neq j}} S_{i,j} = 0, \quad (56)$$

wobei j über alle Nachbarsegmente von i läuft, d.h. der Konvergenzlaugenstrom Q_i ist Null zur Zeit des Vollaufens des Segments i . Aus dieser Gleichung läßt sich ein Anfangswert (Startwert für eine iterative Lösung des Gleichungssystems 51) ermitteln, indem man die Gleichung mit Hilfe der Beziehung 45 umformt und nach dem Druck p_i im Segment i auflöst. Man erhält die Anfangswertgleichung

$$p_i = \frac{\sum_{j \neq i} R_{i,j}^{-1} \cdot (p_j - \Delta_{i,j} \cdot g \rho_L)}{\sum_{j \neq i} R_{i,j}^{-1}}. \quad (57)$$

Werden zu genau der gleichen Zeit mehrere benachbarte Segmente geflutet, so gilt die obige Gleichung für eines der Segmente i nur näherungsweise. Für die exakte Bestimmung der Anfangsbedingungen muß für die gerade gefluteten Segmente das Gleichungssystem 56 gelöst werden.

4.4.2 Berechnung der Laugenströme und der Laugenvolumina

Bei bekannten Laugendrücken, die entweder nach den Beziehungen 52 oder 53 für nicht vollständig geflutete Segmente bzw. durch Lösen des Gleichungssystems 51 berechnet wurden, ergeben sich die Laugenströme $S_{i,j}$ aus dem Darcy-Gesetz 45 bzw. nach Hagen-Poiseuille entsprechend Gleichung 19, d.h. der Laugenstrom vom Segment i zum Segment j ist gegeben durch

$$S_{i,j} = R_{i,j}^{-1} \cdot (p_i - p_j + \Delta_{i,j} \cdot g\rho_L). \quad (58)$$

Der Strom $S_{i,j}$ ist positiv, wenn p_i größer als $p_j - \Delta_{i,j}g\rho_L$ ist, oder anders ausgedrückt: ist $S_{i,j} > 0$, so fließt Lauge vom Segment i zum Segment j .

Betrachtet man ein Segment i mit den Nachbarsegmenten j , so führen alle Laugenströme $S_{j,i} > 0$, zu einer Vergrößerung des Laugenvolumens in i , während alle Laugenströme $S_{i,j} > 0$ das Laugenvolumen verkleinern. Da

$$S_{i,j} = -S_{j,i} \quad (59)$$

ist, erhält man die gesamte Änderung des Laugenvolumens durch den Netto-Laugenstrom S_i^N , der wie folgt definiert ist

$$S_i^N = -\sum_j S_{i,j}. \quad (60)$$

Das Laugenvolumen $V_i^L(t + \Delta t)$ in einem Segment i ergibt sich aus dem Volumen $V_i^L(t)$ somit nach der folgenden Bilanzgleichung

$$V_i^L(t + \Delta t) = V_i^L(t) + S_i^N \cdot \Delta t. \quad (61)$$

4.5 Mobilisierung der Schadstoffe

Das in einem Abfallgebilde enthaltene Schadstoffinventar kann freigesetzt werden, wenn Lauge in einen Einlagerungsort gelangt. Dieser Übergang von Schadstoffen aus Abfallgebilden in die umgebende Lauge wird als Mobilisierung bezeichnet und mit Hilfe eines Mobilisierungsmodells beschrieben.

Die Mobilisierung beginnt mit dem Zutritt der Lauge in den Einlagerungsort, wobei zunächst die Behälter der Abfallgebilde das Eindringen der Lauge zur Abfallmatrix behindern. Sind die Behälter mechanisch oder durch Laugeneinwirkung ausgefallen, so beginnt der Übergang der Schadstoffe aus der Abfallmatrix in die Lauge.

In einem Einlagerungsort sind im allgemeinen eine Vielzahl gleichartiger Abfallgebilde vorhanden. In einer deterministischen Analyse kann daher bei einer ausreichend großen Anzahl von Behältern in guter Näherung der Ausfall der Gesamtheit der Behälter aus einer Verteilungsfunktion für die Behälterlebensdauer ermittelt werden. Der Ausfall eines einzelnen Behälters ist ein Zufallsereignis, das im Rahmen einer probabilistischen Berechnung behandelt werden kann.

Wegen der größeren Zahl gleichartiger Abfallgebilde kann auch die heterogene Verteilung des Schadstoffinventars in einem einzelnen Abfallgebilde vernachlässigt werden. Hierbei wird unterstellt, daß die Heterogenität keine systematische Ursache hat und somit bei der Beschreibung der Gesamtheit der Abfallgebilde entfällt.

Es wird angenommen, daß die in der Matrix verteilten Schadstoffe bei der Mobilisierung zunächst vollständig in die Lauge übergehen. Eine möglicherweise anschließende Ausfällung oder Sorption an den Korrosionsprodukten und am Versatzmaterial im Einlagerungsort oder den anschließenden Strecken wird in den Segmentmodellen behandelt (siehe Kapitel 4.6.6).

Die im folgenden beschriebenen Modelle für die Mobilisierung der Schadstoffe sind für radioaktive Abfälle entwickelt worden. Außer dem Modell für instantane Mobilisierung, das für beliebige Abfallarten anwendbar ist, können die Mobilisierungsansätze zunächst nur für radioaktive Abfälle verwendet werden. Zur Auslaugung chemisch-toxischer Abfälle liegt in der vorliegenden Version des Programms **Lopos2** kein Detailmodell vor..

Die Schadstoffmobilisierung kann zur Zeit für folgende Abfallarten berechnet werden:

- unverfestigte Abfälle,
- verglaste hochradioaktive Abfälle,
- zementierte Abfälle bei unbegrenzten Laugenmengen,
- abgebrannte LWR-Brennelemente.

Für andere Abfallarten können diese Mobilisierungsmodelle durch geeignete Parameterbestückung ebenfalls verwendet werden. Falls dies nicht möglich ist, können entsprechende Mobilisierungsansätze eingefügt werden.

Nicht oder unzureichend verfestigte Abfälle sind beispielsweise flüssige Abfälle, die mit Verfüllmaterial in situ verfestigt worden sind, sowie chemisch-toxische Abfälle. Aufgrund der unzureichenden Konditionierung kann beim Auflösungsprozeß der Abfallmatrix nicht von einer Barrierenwirkung ausgegangen werden. Abfälle dieser Art werden als instantan mobilisiert betrachtet.

4.5.1 Berechnung des Behälterausfalls

Endlagerbehälter erfüllen in Bezug auf ihre Barrierenfunktion unterschiedliche Anforderungen. Einfache Metallfässer oder Kokillen dienen hauptsächlich dem Transport der Abfälle zum Einlagerungsort und können im Endlager nur in sehr geringem Maße eine im Störfall zutretende Lauge vom Abfall fernhalten, da sie durch mechanische Einwirkungen und durch Korrosion leicht beschädigt werden können. Größere Behälter, wie die zur direkten Endlagerung entwickelten Pollux-Behälter, sind dagegen so ausgelegt, daß sie dem Gebirgsdruck standhalten und einer angreifenden Lauge über mehrere Jahrhunderte widerstehen können.

Um die Vielzahl der Behältertypen berücksichtigen zu können, wurde ein Rechenprogramm entwickelt, das den Behälterausfall wahlweise durch eines von drei verschiedenen Gesetzen beschreibt. Für die Lebensdauer der Behälter kann eine Gleichverteilung, eine Exponentialverteilung oder eine Normalverteilung verwendet werden.

Bei der Modellierung des Behälterausfalls wird für jeden zu betrachtenden Zeitpunkt die relative Anzahl der zu diesem Zeitpunkt ausgefallenen Behälter

$$n_B(\tau) = \frac{N_B(\tau)}{N_B(0)} = F(\tau) \quad (62)$$

aus einer Verteilungsfunktion der Behälterlebensdauer berechnet. Desweiteren wird der relative Zuwachs an ausgefallenen Behältern pro Zeiteinheit

$$\dot{n}_B(\tau) = \frac{\dot{N}_B(\tau)}{N_B(0)} = f(\tau) \quad (63)$$

aus der Verteilungsdichte der Behälterlebensdauer ermittelt, wobei diese Größe im folgenden als Behälterausfallrate bezeichnet wird. Die relativen Werte beziehen sich jeweils auf die Gesamtzahl der Gebinde $N_B(0)$ im betrachteten Einlagerungsort. Zur Vereinfachung wird im folgenden der Zusatz "relativ" immer weggelassen, da alle angegebenen Größen relative Größen sind.

Der Bezugspunkt für die Zeit τ ist bei der Berechnung des Behälterausfalls immer der Zeitpunkt t_L des Laugenzutritts in den Einlagerungsort. Die Zeit τ ergibt sich aus der während der übrigen Rechnung verwendeten Zeit t , die sich auf das Ende der Betriebsphase bezieht, durch

$$\tau = t - t_L. \quad (64)$$

Da der Behälterausfall nur für Zeiten nach dem Laugenzutritt berechnet wird, sind negative Werte von τ nicht möglich.

4.5.1.1 Gleichverteilte Lebensdauer der Behälter

Für einfache Behältertypen wird angenommen, daß sie nur eine eingeschränkte Barrierenwirkung für angreifende Lauge haben. Sie können bereits durch mechanische Einwirkungen ausfallen und werden durch Korrosion in kurzer Zeit zerstört. Für diese Behälter wird ein einfaches Behälterausfallgesetz verwendet, bei dem die Lebensdauer der Behälter gleichverteilt ist. Dies ist das einfachste Modell des Behälterausfalls und auf viele Behältertypen anwendbar.

Der Anteil ausgefallener Behälter $n_B(\tau)$ steigt linear von Null zu Beginn des Behälterausfalls auf Eins bei der maximalen Behälterlebensdauer τ_B an (siehe Abbildung 4.2). Die maximale Lebensdauer ist bei Gleichverteilung doppelt so groß wie die mittlere Lebensdauer der Behälter τ_{Bm} . Für Zeiten, die größer als die maximale Lebensdauer sind, ist die Ausfallrate $\dot{n}_B(\tau) = 0$. Die Behälterausfallrate und der Anteil der ausgefallenen Behälter ergeben sich demnach zu

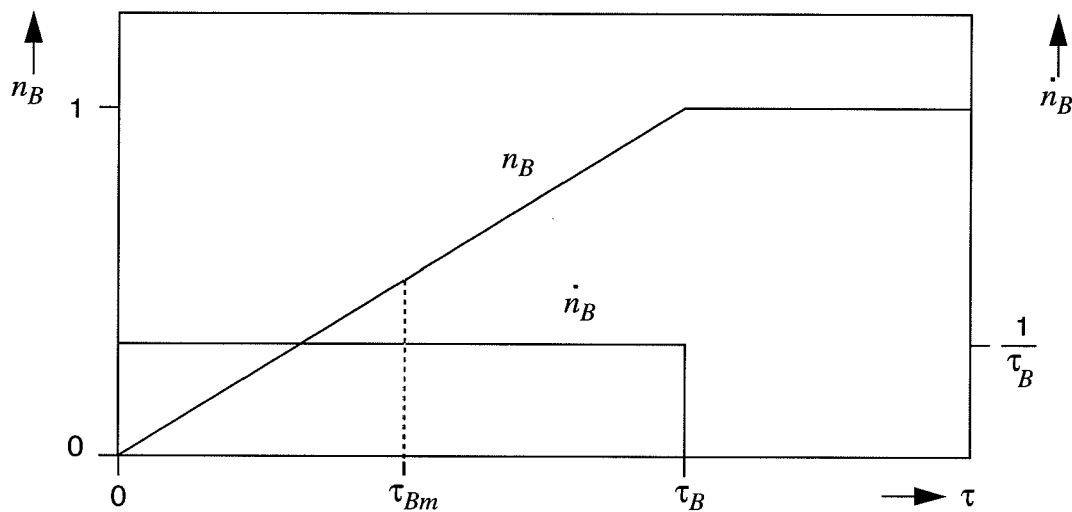


Abb. 4.2: Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate \dot{n}_B bei gleichverteilter Lebensdauer der Behälter.

τ_B : maximale Behälterlebensdauer

τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer

$$\dot{n}_B(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_B} & \text{für } 0 \leq \tau < \tau_B \\ 0 & \text{für } \tau \geq \tau_B \end{cases} \quad (65)$$

$$n_B(\tau) = \begin{cases} \frac{\tau}{\tau_B} & \text{für } 0 \leq \tau < \tau_B \\ 1 & \text{für } \tau \geq \tau_B \end{cases} \quad (66)$$

Da die Behälter durch mechanische Einwirkungen, wie zum Beispiel den Gebirgsdruck, bereits vor dem Laugenzutritt beschädigt werden können, wird der Behälterausfall durch das folgende Verfahren modifiziert:

In den Eingabedaten wird eine maximale Behälterlebensdauer $\tau_{B,i}$ vorgegeben. Dieser Wert ist dann gültig, wenn der Laugenkontakt bei $\tau = 0$ einsetzt. Tritt die Lauge zu einem späteren Zeitpunkt zu, so wird die Behälterlebensdauer auf diesen Zeitpunkt bezogen. Wegen der mechanischen Einwirkungen vor dem Laugenzutritt wird angenommen, daß sich die vorgegebene maximale Behälterlebensdauer $\tau_{B,i}$ verkleinert, so daß sich folgende reduzierte Behälterlebensdauer ergibt:

$$\tau_B = \max\left(\frac{1}{10}\tau_{B,i}, \tau_{B,i} - (t_L - t_E)\right). \quad (67)$$

Hierbei bezeichnet t_L den Zeitpunkt des Laugenzutritts und t_E den Einlagerungszeitpunkt. Die Behälterlebensdauer bei einem späten Laugenzutritt kann auf einen minimalen Wert von 10% des Anfangswertes reduziert werden, wobei der Wert von 10% hierbei willkürlich angenommen wurde. In Abbildung 4.3 ist dargestellt, wie sich die maximale Behälterlebensdauer τ_B als Funktion des Zeitpunktes des Laugenzutritts t_L , bezogen auf den Einlagerungszeitpunkt ($t_E < 0$), verändert.

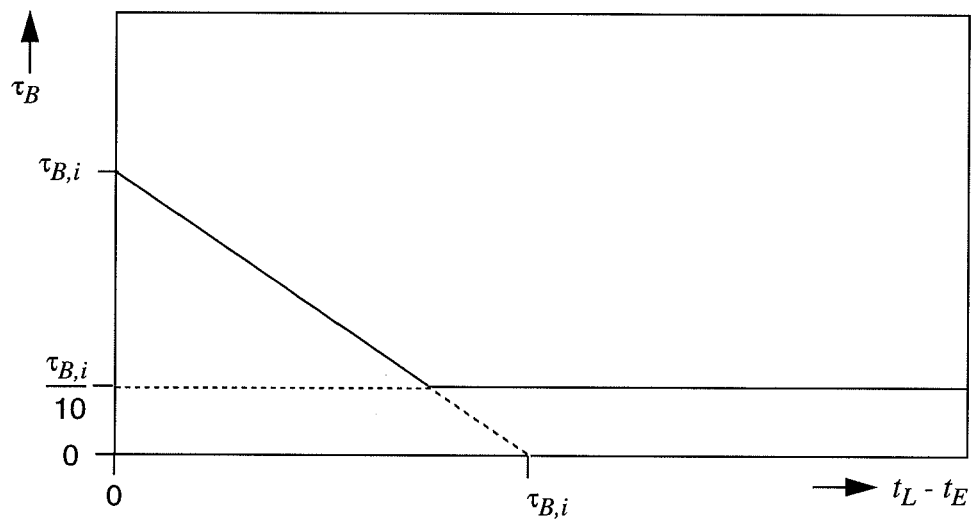


Abb. 4.3: Abnahme der maximalen Behälterlebensdauer τ_B mit zunehmendem Zeitpunkt des Laugenzutritts.

4.5.1.2 Exponentialverteilte Lebensdauer der Behälter

Halten die Behälter dem Gebirgsdruck stand, so wird die Lebensdauer nicht durch die mechanische Belastung zwischen dem Einlagerungszeitpunkt und dem Laugenzutrittszeitpunkt beeinflusst. Durch die Auftragung einer korrosionshemmenden Schicht kann auch das zukünftige Ausfallverhalten unabhängig von der erreichten Lebensdauer und damit vom Korrosionsfortschritt der Schutzschicht sein.

Für diese Behältertypen, deren zukünftiges Ausfallverhalten unabhängig von der gesamten Vorgeschichte und der bereits erreichten Lebensdauer ist, werden exponentialverteilte Lebensdauern angenommen. In diesem Fall ergeben sich mit der mittleren Lebensdauer τ_{Bm} die Behälterausfallrate und der Anteil der ausgefallenen Behälter zu

$$\dot{n}_B(\tau) = \frac{1}{\tau_{Bm}} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_{Bm}}\right), \quad (68)$$

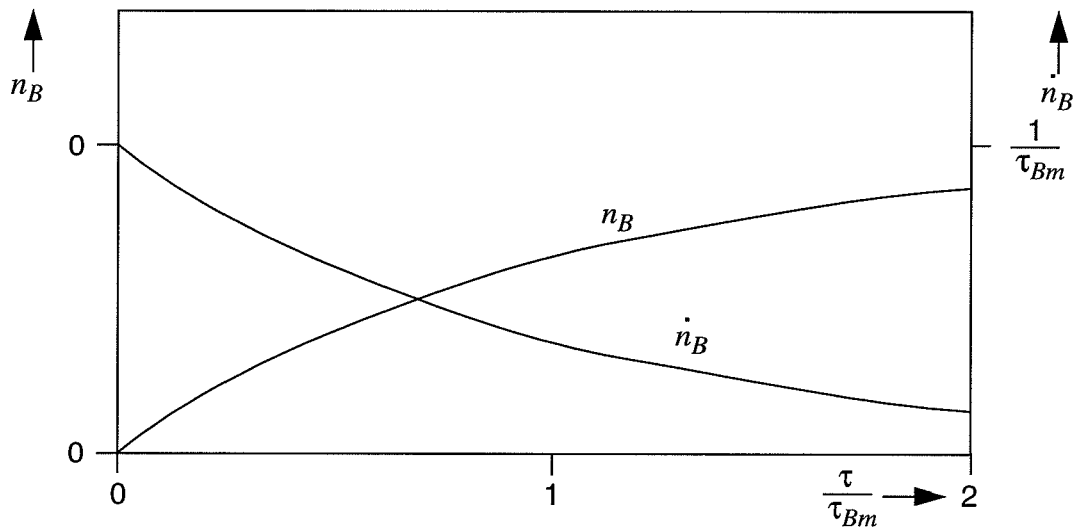


Abb. 4.4: Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate \dot{n}_B bei exponentialverteilter Lebensdauer der Behälter.
 τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer

$$n_B(\tau) = 1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_{Bm}}\right). \quad (69)$$

Abbildung 4.4 zeigt den graphischen Verlauf dieser Funktionen.

4.5.1.3 Normalverteilte Lebensdauer der Behälter

Bei den bisher betrachteten Verteilungsfunktionen ist die Behälterausfallrate entweder konstant oder hat ein frühzeitiges Maximum. Existiert jedoch ein bevorzugter Ausfallzeitpunkt für spätere Zeitpunkte und somit ein Maximum der Behälterausfallrate für größere Zeiten, so kann die im folgenden beschriebene Normalverteilung der Behälterlebensdauer verwendet werden. Diese Funktion enthält außerdem die Möglichkeit, daß zum Zeitpunkt des Laugenzutritts bereits ein Teil der vorhandenen Behälter ausgefallen ist.

Die Normalverteilung ist durch die mittlere Lebensdauer $\tau_{B,m}$ der Behälter und die Standardabweichung σ der Verteilung charakterisiert. Die Behälterausfallrate ergibt sich zu

$$\dot{n}_B(\tau) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\tau - \tau_{Bm})^2}{2\sigma^2}\right). \quad (70)$$

Der Anteil ausgefallener Behälter zum Zeitpunkt τ wird durch Integration dieser Gleichung von $-\infty$ bis τ berechnet, wobei mit $\text{erf}(x)$ die Fehlerfunktion bezeichnet wird,

$$n_B(\tau) = \frac{1}{2} \left(1 + \text{erf}\left(\frac{\tau - \tau_{Bm}}{\sigma \sqrt{2}}\right) \right). \quad (71)$$

In Abbildung 4.5 ist der Verlauf der Behälterausfallrate und des Anteils ausgefallener Behälter graphisch dargestellt. Vergleicht man die Abbildungen 4.4 und 4.5 miteinander, so zeigt sich, daß bei normalverteilter Lebensdauer die Behälter anfangs langsamer ausfallen als bei exponentialverteilter Lebensdauer. Bei Zeiten $\tau > \tau_{Bm}$ geht der Anteil der ausgefallenen Behälter aber schneller gegen Eins.

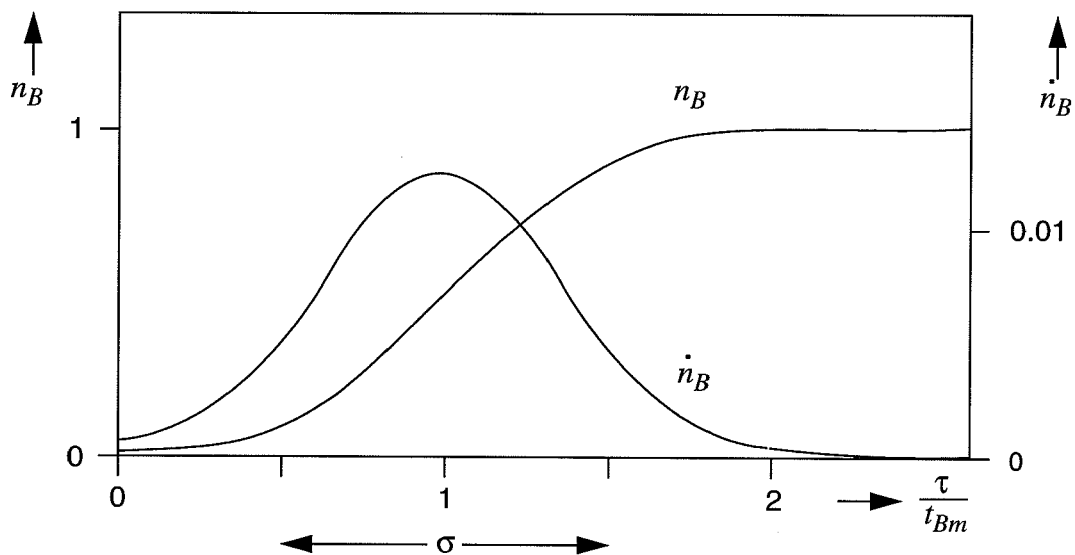


Abb. 4.5: Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate \dot{n}_B bei normalverteilter Lebensdauer der Behälter.

τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer

σ : Standardabweichung der Lebensdauer. Hier $\sigma = 2/5 \tau_{Bm}$

4.5.2 Korrosion der Abfallmatrix

Zur Beschreibung der Schadstofffreisetzung durch die Korrosion bzw. Auslaugung der Abfallmatrix ist es nützlich, die folgende Größe $A_{0,v}(t)$ wie folgt zu definieren:

Sofern es sich um radioaktive Abfälle handelt, ist $A_{0,v}(t)$ das eingelagerte Inventar des Nuklids v in einem Segment, das ab dem Zeitpunkt der Einlagerung bis zum Zeitpunkt t ausschließlich dem radioaktiven Zerfall unterliegt, nicht jedoch die Abnahme des Inventars durch die Mobilisierung enthält. Bei sonstigen Abfällen ist $A_{0,v}(t)$ das Anfangsinventar des Schadstoffs v vor Beginn der Mobilisierung.

4.5.2.1 Instantane Mobilisierung

Bei der instantanen Mobilisierung ist zum Zeitpunkt t_L des ersten Laugenzutritts in das Einlagerungssegment das mobilisierte Inventar $A_v(t)$ gleich dem oben definierten Inventar $A_{0,v}(t)$,

$$A_v(t) = A_{0,v}(t). \quad (72)$$

d.h. das gesamte bei Laugenzutritt noch vorhandene Inventar geht instantan in Lösung. Wie bereits erwähnt, werden Sorption und Ausfällung anschließend im Segmentmodell (s. Kapitel 4.6.6) behandelt. Die Schadstoffkonzentration im Einlagerungssegment ergibt sich als Quotient aus dem gelösten Inventar und dem Laugenvolumen.

4.5.2.2 Mobilisierung aus der Glasmatrix

Hochradioaktiver Abfall aus der Wiederaufarbeitung abgebrannter Brennelemente wird in Kokillen in einer Glasmatrix fixiert und in Bohrlöchern gelagert.

Der Mobilisierungsansatz für verglasten Abfall beruht auf den Ergebnissen der Experimente, die an C31-3EC-Borosilikatglas in begrenzten Laugenmengen bei realistischen Temperaturen und Drücken durchgeführt wurden [12]. Dieser Ansatz beschreibt eine in-

kongruente Glasauflösung, bei der während der Auflösung der Glasmatrix durch Fällung neue Feststoffe entstehen. Der Ansatz berücksichtigt die Temperaturabhängigkeit des Auflösungsprozesses.

Die Umsetzung der Glasmatrix wird als proportional zur Oberfläche des Glases angenommen. Für die oberflächenbezogene Reaktionsrate $j(t)$ gilt:

$$j(t) = j_r \exp\left(-\frac{Q_G}{R}\left(\frac{1}{T(t)} - \frac{1}{T_r}\right)\right), \quad (73)$$

mit

- j_r oberflächenbezogene Reaktionsrate bei der Referenztemperatur,
- Q_G Aktivierungsenergie,
- R allgemeine Gaskonstante,
- $T(t)$ Temperatur zum aktuellen Zeitpunkt t ,
- T_r Referenztemperatur.

Die Vorgehensweise bei der Bereitstellung der Temperaturverläufe $T(t)$ und deren Verwendung in den Segmentmodellen wurde am Anfang von Kapitel 4 erläutert.

Die Mobilisierung von Radionukliden aus der Glasmatrix beginnt zu dem Zeitpunkt, an dem Lauge an das Glas herankommt, d.h. nachdem die ersten Behälter durch Laugeneinwirkung ausgefallen sind. Der Anteil der ausgefallenen Behälter wird je nach Behältertyp mit dem in Kapitel 4.5.1 beschriebenen Ansatz berechnet.

Ist $n_B(t - t_L)$ der Anteil der zur Zeit t ausgefallenen Behälter und $m_G(0)$ die Anfangs-Glasmasse eines Gebindes, so ergibt sich die Mobilisierungsrate für ein Abfallgebände,

$$\dot{m}_{eff}(t) = \frac{n_B(t - t_L) O_{eff} j(t)}{m_G(0)}. \quad (74)$$

Hierbei ist O_{eff} die effektive Oberfläche der Glasmatrix eines Gebindes, an der die Lauge korrosiv angreifen kann. Sie schließt die Oberflächen in Rissen innerhalb des Glases ein und wird als zeitlich konstant angenommen.

In Abbildung 4.6 ist der qualitative Verlauf der Mobilisierungsrate bezogen auf ein Einzelgebäude als Funktion von $\tau = t - t_L$ dargestellt. Für den Behälterausfall wird eine gleichverteilte Lebensdauer mit einem Maximalwert von $\tau_B = 10$ a berücksichtigt. Nach dem Laugenzutritt bei $\tau = 0$ a ist der Kurvenverlauf bis $\tau = t_L + \tau_B$ durch die Überlagerung der konstanten Behälterausfallrate mit der Reaktionsrate $j(t)$ gekennzeichnet, wobei die Änderung des Anteils ausgefallener Behälter die Änderung der Reaktionsrate überwiegt. Danach ist der Verlauf allein durch die Temperaturentwicklung bestimmt, wie durch Vergleich mit dem ebenfalls eingezeichneten Temperaturverlauf zu sehen ist.

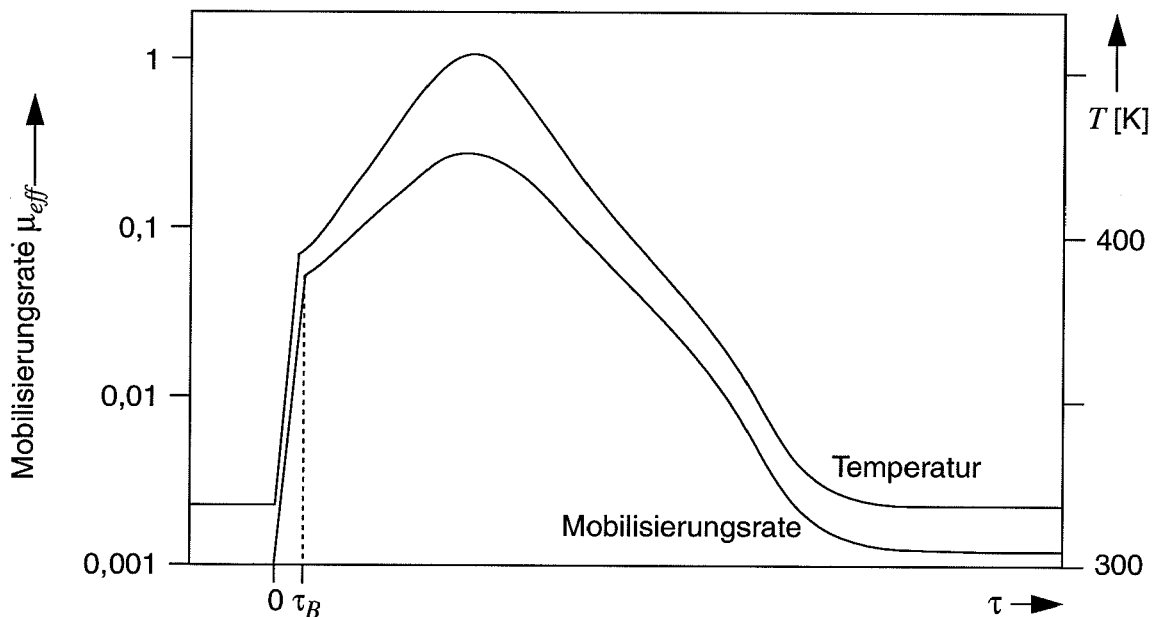


Abb. 4.6: Temperaturverlauf und Mobilisierungsrate für verglaste Abfälle.

Das mobilisierte Inventar des v -ten Nuklids in einem Einlagerungssegment ergibt sich durch Zeitintegration aus der effektiven Mobilisierungsrate $\dot{\mu}_{eff}$ und dem gesamten eingelagerten Inventar $A_{0,v}$ des v -ten Nuklids in der Glasmatrix zu

$$A_v(t + \Delta t) = A_v(t) + \dot{\mu}_{eff}(t) \cdot A_{0,v}(t) \cdot \Delta t. \quad (75)$$

Die Mobilisierung aus verglasten Abfällen ist abgeschlossen, wenn die Glasmasse vollständig korrodiert ist.

Sorption und Ausfällung werden im Segmentmodell wie im Kapitel 4.6.6 beschrieben behandelt. Die Radionuklidkonzentration im Einlagerungssegment ergibt sich als Quotient aus dem gelösten Inventar und dem Laugenvolumen.

4.5.2.3 Mobilisierung aus zementierten Abfällen

Schwach- und mittelaktive Abfälle werden im allgemeinen mit Zement verfestigt. Die Abfälle können sowohl homogen als auch heterogen im Gebinde verteilt vorliegen. Bei der homogenen Zementierung werden flüssige Abfälle direkt mit dem Zementansatz verrührt und in Fässer abgefüllt. Bei heterogener Zementierung werden kontaminierte Metallteile in ein Faß gefüllt und anschließend mit Zement übergossen. Unter vereinfachenden Annahmen können mit den im folgenden beschriebenen linearen Ansätzen beide Arten behandelt werden.

Die in einen Einlagerungsort zutretende Lauge kann nach dem Behälterausfall die Abfallmatrix, also den Zement und eventuell die Metallteile des Abfalls korrodieren. Das einfachste Modell einer Mobilisierung aus zementierten Abfällen besteht aus der Annahme einer zeitlich konstanten Umsetzung des Matrixmaterials, ohne weitere Spezifikation des zugrundeliegenden Umsetzungsprozesses. Die Umsetzung der Matrix wird durch eine konstante Rate charakterisiert. Sie führt zu einer Umsetzungsdauer τ_M , nach welcher die Umsetzung der Matrix beendet ist,

$$\tau_M = \frac{1}{\dot{\mu}}. \quad (76)$$

Durch Verwendung unterschiedlicher Werte für die Umsetzungsdauer τ_M können verschiedene Abfallarten charakterisiert werden.

Falls Erkenntnisse über elementspezifische Vorgänge bei der Umsetzung des Matrixmaterials vorliegen, können die Umsetzungsraten auch elementspezifisch betrachtet wer-

den. Aus den elementspezifisch vorgegebenen Umsetzungsraten $\dot{\mu}_e$ ergeben sich dann für die einzelnen chemischen Elemente die Umsetzungsdauern

$$\tau_{M, e} = \frac{1}{\dot{\mu}_e}. \quad (77)$$

Die Umsetzung der Zementmatrix nach Gleichung 76 oder 77 kann erst nach dem Ausfall der umgebenden Behälter beginnen. Der Behälterausfall wird dabei je nach Gebindeart mit einer der in Kapitel 4.5.1 beschriebenen Gesetzmäßigkeiten berücksichtigt. Ist $n_B(t - t_L)$ der Anteil der zum aktuellen Zeitpunkt t ausgefallenen Behälter, so ergibt sich die Mobilisierungsrate $\dot{\mu}_{eff}$ als Überlagerung des Anteils ausgefallener Behälter mit der Umsetzungsrate:

$$\dot{\mu}_{eff}(t) = n_B(t - t_L) \dot{\mu}(t - t_L). \quad (78)$$

In Abbildung 4.7 ist der Verlauf der Mobilisierungsrate bei Annahme einer gleichverteilten Lebensdauer der Behälter als Funktion von $\tau = t - t_L$ dargestellt.

Das mobilisierte Inventar des ν -ten Nuklids in einem Einlagerungssegment ergibt sich durch Zeitintegration aus der effektiven, ggfs. elementspezifischen Mobilisierungsrate

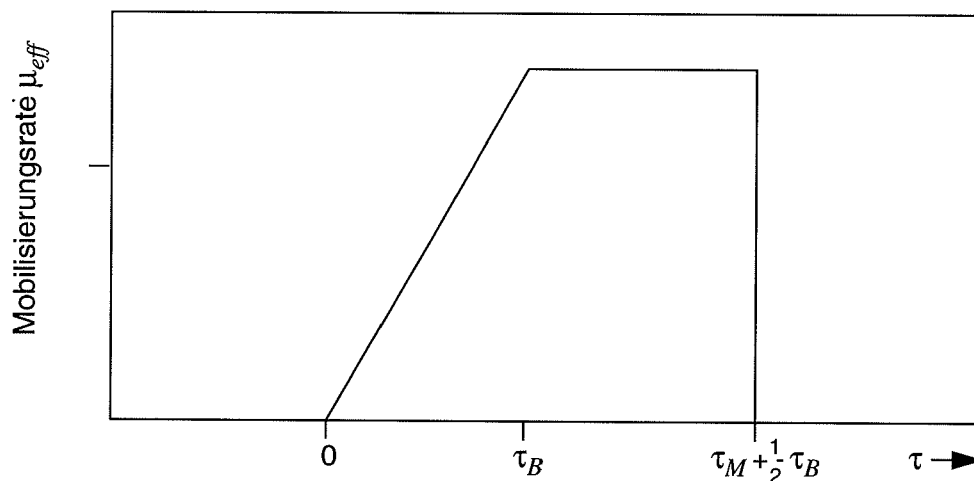


Abb. 4.7: Qualitativer Verlauf der Mobilisierungsrate zementierter Abfälle bei einer gleichverteilten Lebensdauer der Behälter unter der Voraussetzung $\tau_M > \tau_B$.

$\dot{\mu}_{eff}$ und dem gesamten eingelagerten Inventar $A_{0,v}$ des v-ten Nuklids in der Zementmatrix zu

$$A_v(t + \Delta t) = A_v(t) + \dot{\mu}_{eff}(t) \cdot A_{0,v}(t) \cdot \Delta t. \quad (79)$$

Die Mobilisierung aller Radionuklide ist beendet, sobald die gesamte Zementmasse korrodiert ist. Im letzten Zeitschritt wird dabei die Mobilisierung so begrenzt, daß genau das noch vorhandene Inventar mobilisiert wird.

Sorption und Ausfällung werden im Segmentmodell wie im Kapitel 4.6.6 beschrieben behandelt. Die Radionuklidkonzentration im Einlagerungssegment ergibt sich als Quotient aus dem gelösten Inventar und dem Laugenvolumen.

4.5.2.4 Mobilisierung aus LWR-Brennelementen

Abgebrannte Brennelemente aus Leichtwasser-Reaktoren werden in dickwandigen Metallbehältern endgelagert. Je nach Entsorgungskonzept werden dabei eine feste Anzahl von Brennelementen und das Brennelementgerüst in je einen Pollux-Behälter eingesetzt. Die Pollux-Behälter bestehen aus einer Trockenlagerbüchse, Graugußkörpern und einer Zwischenschicht aus korrosionshemmendem Hastelloy und sind für die Streckenlagerung vorgesehen. Für die Einlagerung in Bohrlöchern sind Pollux-Kokillen vorgesehen, die die gleichen Abmessungen wie die HAW-Kokillen haben.

Die Pollux-Behälter haben wegen der korrosionshemmenden Hastelloyschicht eine lange Lebensdauer. Für sie wird im allgemeinen eine exponentialverteilte Lebensdauer mit Mittelwerten von einigen hundert Jahren angenommen. Die Pollux-Kokille hat kleinere Abmessungen und weniger dicke Wandungen aus Metall, so daß sie entweder mit einer gleichverteilten oder einer exponentialverteilten Lebensdauer mit deutlich kleineren Mittelwerten beschrieben wird.

Zur Berechnung des Nuklidstroms aus einem Abfallgebäude werden die LWR-Brennelemente in drei Bereiche aufgeteilt:

- Bereich 1: Metallteile,
- Bereich 2: Gasraum in den Brennstäben,
- Bereich 3: Brennstoffpellets.

Als Metallteile werden die Hülsen und Strukturteile eines Brennelementes bezeichnet. Die Strukturteile sind nur bei einer Lagerung in Pollux-Behältern in den Gebinden enthalten. Der Gasraum ist hauptsächlich dann zu berücksichtigen, wenn die Brennstäbe nicht zerschnitten werden, wie es bei der Einlagerung in Pollux-Behältern der Fall ist.

Das Gesamtinventar eines LWR-Brennelementes wird über relative elementspezifische Anteile auf die drei Bereiche eines Brennelementes verteilt. Die elementspezifischen Mobilisierungsraten werden für alle drei Bereiche in folgender Form beschrieben:

$$\dot{\mu}_{eff, x, v}(\tau) = n_B(\tau) a_{x, e(v)} r_{M, x} \quad (80)$$

wobei x über die Bereiche 1 bis 3 läuft und $r_{M,x}$ die Mobilisierungsraten im x -ten Bereich, $n_B(\tau)$ der Anteil ausgefallener Behälter und $a_{x,e(v)}$ der relative Inventaranteil des Elementes $e(v)$ im Bereich x sind. Die Raten $r_{M,x}$ werden alle als konstant angenommen.

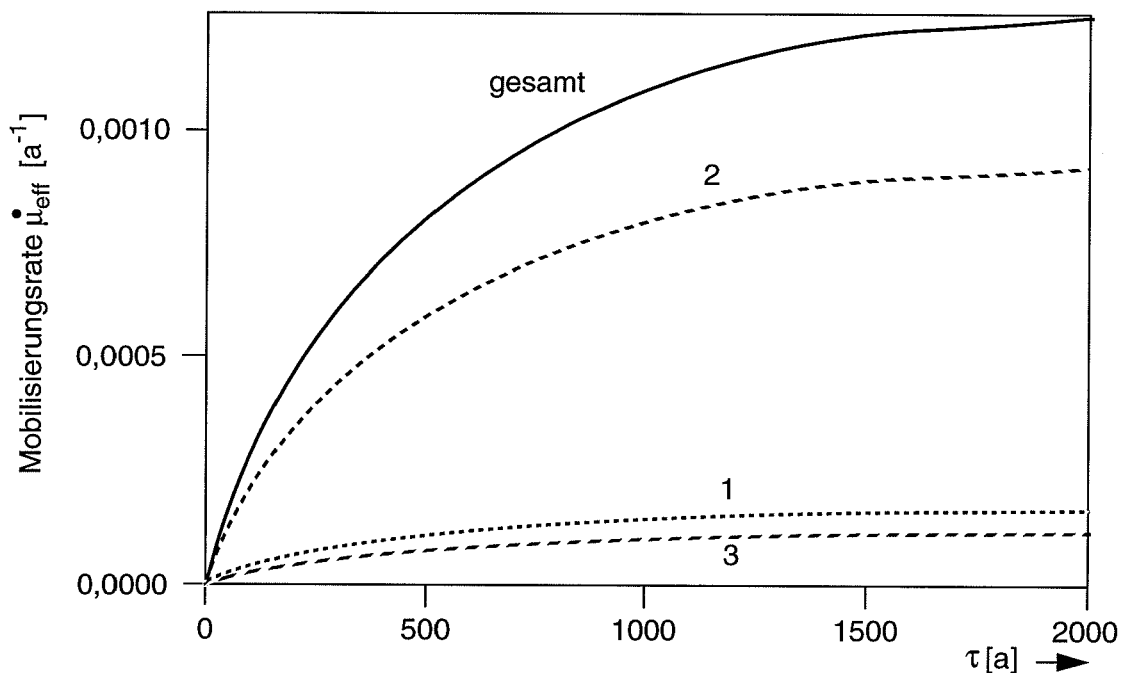


Abb. 4.8: Mobilisierungsraten in den 3 Bereichen eines LWR-Brennelementes.

In Abbildung 4.8 ist der Verlauf der Mobilisierungsrate bei exponentialverteilter Lebensdauer der Behälter dargestellt. Die mittlere Lebensdauer der Behälter ist mit 500 a, die Raten $r_{M,x}$ in den drei Bereichen sind mit Werten von 0,02, 0,1 und 0,0016 a⁻¹ angenommen worden. Für jeden Bereich des LWR-Brennelementes und für die Gesamtmobilisierung ergibt sich eine Exponentialkurve, die aus dem Verlauf des Behälterausfalls resultiert.

Das mobilisierte Inventar des v-ten Nuklids in einem Einlagerungssegment ergibt sich durch Zeitintegration aus den effektiven elementspezifischen Mobilisierungsraten $\dot{\mu}_{eff, x, v}$ und dem gesamten eingelagerten Inventar $A_{0,v}$ des v-ten Nuklids zu

$$A_v(t + \Delta t) = A_v(t) + \sum_x \dot{\mu}_{eff, x, v} A_{0, v}(t) \Delta t. \quad (81)$$

Die Summe erstreckt sich über alle drei Bereiche x der LWR-Brennelemente. Die Mobilisierung ist beendet, wenn das aktuelle Inventar aller Nuklide im Gebinde auf Null abgefallen ist. Im letzten Zeitschritt wird dabei der Aktivitätsstrom so begrenzt, daß genau das noch vorhandene Inventar mobilisiert wird.

Sorption und Ausfällung werden im Segmentmodell wie im Kapitel 4.6.6 beschrieben behandelt. Die Radionuklidkonzentration in der Lauge des Einlagerungssegments ergibt sich als Quotient aus dem gelösten Inventar und dem Laugenvolumen.

4.6 Schadstofftransport und Bilanzierung

Im folgenden wird der Schadstofftransport von einem Segment i zu einem Segment j berechnet. Durch Bilanzierung der Schadstoffströme werden anschließend die Schadstoffinventare in den Segmenten bestimmt.

Als Transportmechanismen kommen die Advektion (Kapitel 4.6.1), d.h. der Schadstofftransport mit der strömenden Lauge, die Diffusion und die Dispersion aufgrund des Gradienten in der Schadstoffkonzentration (Kapitel 4.6.2) und eventuell auftretende Konvektionsströmungen in Frage. Eine Konvektionsströmung kann z.B. durch einen Dichtegra-

dienten aufgrund unterschiedlicher Temperaturen in benachbarten Bereichen oder durch unterschiedliche Konzentrationen eines in der Lauge gelösten Stoffes, z.B. bei Zementauflösung, hervorgerufen werden (Kapitel 4.6.3). In diesem Fall wird die zugehörige Konvektionsgeschwindigkeit mit \underline{v}^p bezeichnet. Daneben wird die instantane Durchmischung zwischen den offenen Bereichen benachbarter Segmente durch eine zusätzliche Konvektionsströmung mit der Geschwindigkeit \underline{v}^m simuliert (s. Kapitel 4.6.4).

Die Transportgleichung für Schadstoffe in kontaminierter Lauge durch ein poröses Material lautet in integraler Form

$$\int_V dv \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t}(\phi \cdot c) - \nabla \cdot (\mathbf{D}_h \cdot \nabla c - (\underline{u} + \underline{v}) \cdot c) \right] = 0, \quad (82)$$

wobei gilt:

- dv Volumenelement,
- ϕ Porosität des Versatzmaterials,
- c Schadstoffkonzentration in der Lauge,
- \mathbf{D}_h Tensor der hydrodynamischen Dispersion,
- \underline{u} Darcy-Geschwindigkeit,
- \underline{v} Geschwindigkeit einer Konvektionsströmung (\underline{v}^p und/oder \underline{v}^m),
- V Volumen des Segments.

Es wird für die folgende Ableitung vorausgesetzt, daß während eines Zeitschritts Δt die Porosität ϕ des Versatzmaterials und das Volumen V des betrachteten Segments konstant sind. Außerdem werden zunächst Retardation und Ausfällung sowie der radioaktive Zerfall der Nuklide nicht betrachtet. Innerhalb eines Zeitschritts kann die Zeitableitung näherungsweise durch

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \cdot c) \Rightarrow \phi \cdot \frac{(c(t + \Delta t) - c(t))}{\Delta t} \quad (83)$$

ersetzt werden, außerdem ist

$$c(t) \Rightarrow A(t) / (\phi \cdot V), \quad (84)$$

wobei $A(t)$ das Schadstoffinventar zur Zeit t im Porenvolumen $V_P = \phi \cdot V$ ist.

Gleichung 82 ergibt hiermit

$$A(t + \Delta t) = A(t) + \int_V dv \{ \nabla \cdot (\mathbf{D}_h \cdot \nabla c) - \nabla \cdot [(\underline{u} + \underline{v}) c] \} \cdot \Delta t. \quad (85)$$

Umgeformt mit dem Gaußschen Satz folgt

$$A(t + \Delta t) = A(t) + \int_{\Omega} d\omega \cdot \left\{ (\mathbf{D}_h \cdot \nabla c) \Big|_{\Omega} - ((\underline{u} + \underline{v}) c) \Big|_{\Omega} \right\} \Delta t, \quad (86)$$

wobei Ω die begrenzende Oberfläche von V ist. Die Bezeichnung $\Big|_{\Omega}$ bedeutet, daß die Werte der Variablen an der Oberfläche Ω zu nehmen sind.

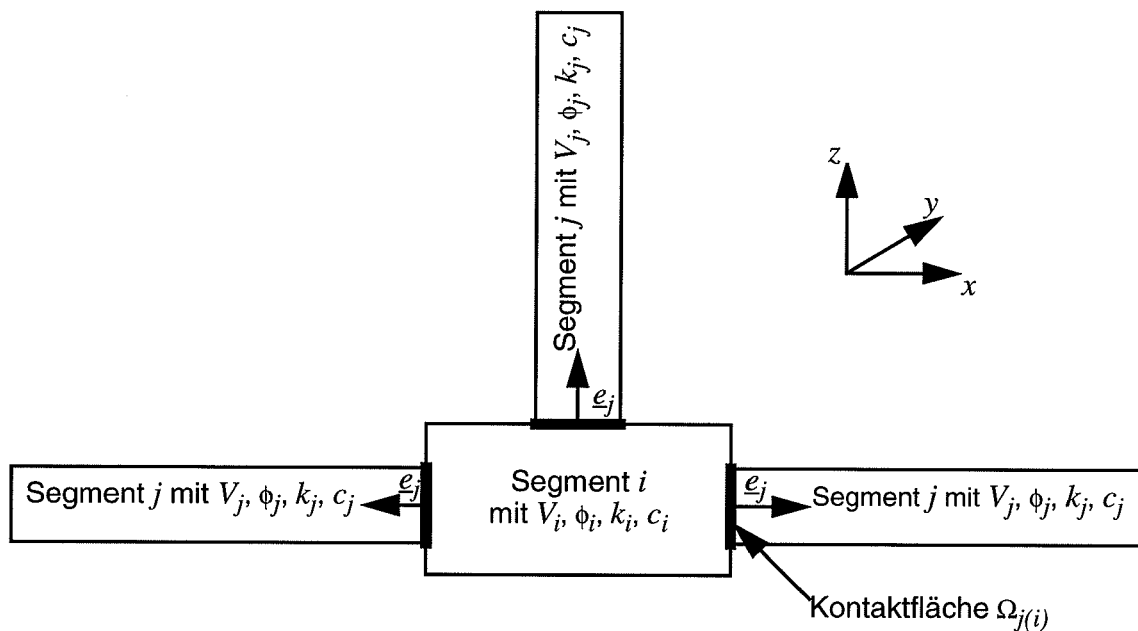


Abb. 4.9: Schematische Darstellung eines Segments i und seiner Nachbarsegmente $j(i)$ und der Kontaktflächen Ω_j mit den Flächennormalen \underline{e}_j

Zerlegen der Oberfläche in Teile (s. Abbildung 4.9)

$$\oint_{\Omega} d\omega = \sum_{j(i)} \int_{\Omega_j} d\omega_j \cdot \underline{e}_j, \quad (87)$$

wobei \underline{e}_j die Flächennormale von Ω_j ist, liefert für Segment i

$$A_i(t + \Delta t) = A_i(t) + \sum_{j(i)} \int_{\Omega_j} d\omega_j \left\{ \left(\sum_k (D_h)_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) \Big|_{\Omega_j} - ((u_j + v_j) \cdot c) \Big|_{\Omega_j} \right\} \Delta t. \quad (88)$$

Hierbei sind u_j und v_j die Komponenten von \underline{u} bzw. \underline{v} in Richtung \underline{e}_j ,

$$u_j = \underline{u} \cdot \underline{e}_j, \quad (89)$$

$$v_j = \underline{v} \cdot \underline{e}_j \quad (90)$$

und

$$\frac{\partial c}{\partial x_k} = \nabla c \cdot \underline{e}_k \quad (91)$$

ist die Komponente des Gradienten von c in Richtung \underline{e}_k , bzw.

$$\sum_k (D_h)_{jk} \cdot \frac{\partial c}{\partial x_k} = \underline{e}_j \cdot \underline{D}_h \cdot \nabla c. \quad (92)$$

Definiert man einen Schadstoffstrom von i nach j durch Advektion

$$\dot{A}_{i,j}^a = \int_{\Omega_j} d\omega_j \cdot (u_j \cdot c) \Big|_{\Omega_j}, \quad (93)$$

einen diffusiven/dispersiven Schadstoffstrom zwischen i und j

$$\dot{A}_{i,j}^D = - \int_{\Omega_j} d\omega_j \cdot \left(\sum_k (D_h)_{jk} \cdot \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) \Big|_{\Omega_j} \quad (94)$$

und einen konvektiven Schadstoffstrom, hervorgerufen durch einen Dichtegradienten der Lauge,

$$\dot{A}_{i,j}^p = \int_{\Omega_j} d\omega_j \cdot (v_j \cdot c) \Big|_{\Omega_j}, \quad (95)$$

so ist das Schadstoffinventar $A_i(t+\Delta t)$ im Segment i zum Zeitpunkt $t+\Delta t$ gegeben durch

$$A_i(t + \Delta t) = A_i(t) - \sum_{j(i)} (\dot{A}_{i,j}^a + \dot{A}_{i,j}^D + \dot{A}_{i,j}^p) \cdot \Delta t. \quad (96)$$

4.6.1 Schadstofftransport durch Advektion

Für eine ausschließlich durch einen Druckgradienten ∇p angetriebene Strömung in einem porösen Medium ist die Darcy-Geschwindigkeit \underline{u} bestimmt durch das Darcy-Gesetz [1]

$$\underline{u} = -\frac{k}{\mu} \cdot \nabla p, \quad (97)$$

wobei k die Permeabilität des porösen Materials und μ die dynamische Zähigkeit der Lauge sind. Die Gleichung 93 wird hiermit zu

$$\dot{A}_{i,j}^a = - \int_{\Omega_j} d\omega_j \cdot \left(\frac{k}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_j} \cdot c \right) \Big|_{\Omega_j} . \quad (98)$$

Im folgenden wird am Beispiel der rechten Grenzfläche des Segments i (s. Abbildung 4.9) die Integration über die Oberfläche Ω_j durchgeführt, d.h. $x_j = x$, $d\omega = dy \, dz$. Im allgemeinen werden die Permeabilitäten und die Querschnittsflächen der Segmente i und j verschieden sein. Diese Werte verändern sich an den Grenzflächen sprunghaft. Da der Massenstrom durch die Grenzfläche jedoch erhalten bleibt, ändert sich auch der Druckgradient ∇p an der Grenzfläche Ω_j sprunghaft, während der Druck p stetig verläuft (siehe Abbildung 4.10).

Im Rahmen der Finite-Differenzen-Methode ist die Schadstoffkonzentration c im Segment i gleich einer mittleren Konzentration c_i und die im Nachbarsegment j gleich einer mittleren Konzentration c_j . Die Integration über die Grenzfläche kann wie folgt durchgeführt werden:

Aus der Kontinuität des Massenstroms folgt

$$\int_{F_i} \left(\frac{k_i}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_i \cdot dy \cdot dz \right) = \int_{F_j} \left(\frac{k_j}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_j \cdot dy \cdot dz \right), \quad (99)$$

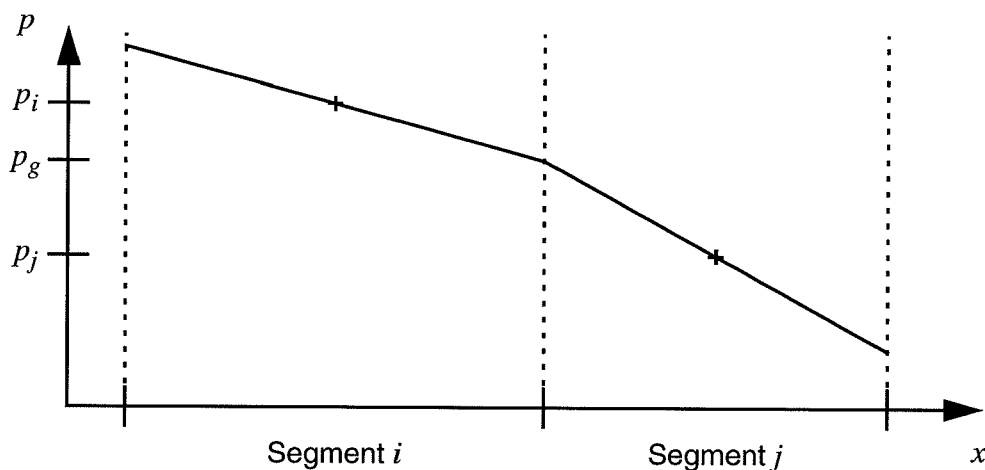


Abb. 4.10: Schematische Darstellung des Druckverlaufs in den Segmenten i und j bei unterschiedlichen Querschnitten und/oder Permeabilitäten

wobei F_i die Querschnittsfläche des Segments i , $\partial p/\partial x|_i$ der Druckgradient im Segment i (links der Grenzfläche Ω_j), F_j die Querschnittsfläche des Segments j und $\partial p/\partial x|_j$ der Druckgradient im Segment j (rechts der Grenzfläche Ω_j) sind. Sowohl k als auch $\partial p/\partial x$ sind jeweils über den Segmentquerschnitt konstant, so daß

$$\frac{k_i \cdot F_i}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_i = \frac{k_j \cdot F_j}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_j \quad (100)$$

folgt.

Nach Definition haben die Segmente über ihre Länge einen konstanten Querschnitt und eine konstante Permeabilität, so daß die Taylorentwicklung des Drucks p_g an der Grenzfläche um den Druck p_i in der Mitte des Segments i in erster Ordnung durch

$$p_g - p_i = \frac{L_i}{2} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_i \quad (101)$$

gegeben ist, wobei L_i die Segmentlänge und $\partial p/\partial x|_i$ der im Segment i konstante Druckgradient sind. Entsprechend gilt im Segment j

$$p_j - p_g = \frac{L_j}{2} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_j, \quad (102)$$

wobei L_j die Länge des Segment j ist und der Gradient von p an der Grenzfläche $\partial p/\partial x|_g$ durch den konstanten Gradienten $\partial p/\partial x|_j$ im Segment j ersetzt wurde.

Addiert man diese beiden Gleichungen und ersetzt $\partial p/\partial x|_j$ mit Hilfe der Beziehung 100 so folgt

$$\frac{k_i \cdot F_i}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_i = \frac{(p_j - p_i)}{\frac{\mu \cdot L_i}{2 \cdot k_i \cdot F_i} + \frac{\mu \cdot L_j}{2 \cdot k_j \cdot F_j}} \quad (103)$$

Mit Gleichung 38 gilt

$$\frac{k_i \cdot F_i}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_i = \frac{(p_j - p_i)}{\frac{1}{2} \cdot R_i + \frac{1}{2} \cdot R_j} \quad (104)$$

wobei R_i und R_j die Strömungswiderstände der Segmente i bzw. j sind.

Verwendet man die Definition 40 des Strömungswiderstandes $R_{i,j}$ zwischen den Segmenten i und j , so erhält man schließlich

$$\frac{k_i \cdot F_i}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_i = R_{i,j}^{-1} \cdot (p_j - p_i). \quad (105)$$

Diese Beziehung gilt auch für senkrecht zueinander stehende Segmente, wobei je nach Anordnung entweder $L_i = 0$ und damit $R_i = 0$ oder $L_j = 0$ und damit $R_j = 0$ ist. Mit diesem Zwischenergebnis läßt sich 98 integrieren. Der advektive Laugenstrom vom Segment i zum Nachbarsegment j transportiert kontaminierte Lauge mit der Schadstoffkonzentration c_i aus dem Segment i in das Segment j , während ein advektiver Laugenstrom von j nach i kontaminierte Lauge mit der Schadstoffkonzentration c_j transportiert. Daher wird im folgenden zunächst zwischen Laugenströmen von i nach j und von j nach i unterschieden. Strömt kontaminierte Lauge aus dem Segment i heraus, so ist $p_i > p_j$ und die Lauge ist mit Schadstoffen der Konzentration c_i kontaminiert. In diesem Fall wird die Integration infinitesimal parallel zur Grenzfläche Ω_j im Segment i durchgeführt, und man erhält

$$\dot{A}_{i,j}^{a(out)} = - \int_{F_i} d\omega_j \cdot c_i \cdot \frac{k_i}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_j} \Big|_i = c_i \cdot R_{i,j}^{-1} \cdot (p_i - p_j). \quad (106)$$

Strömt kontaminierte Lauge in das Segment i hinein, so ist $p_i < p_j$ und die Lauge ist mit Schadstoffen der Konzentration c_j kontaminiert. In diesem Fall wird die Integration infinitesimal parallel zur Grenzfläche Ω_j im Segment j durchgeführt, und man erhält

$$\dot{A}_{i,j}^{a(in)} = \int_{F_j} d\omega_j \cdot c_j \cdot \frac{k_j}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_j} \Big|_j = c_j \cdot R_{i,j}^{-1} \cdot (p_j - p_i). \quad (107)$$

Nach Gleichung 45 ist der Laugenstrom

$$S_{i,j} = R_{i,j}^{-1} \cdot (p_i - p_j).$$

Um eine allgemein verwendbare Beziehung abzuleiten, werden zunächst folgende Bezeichnungen gewählt:

- strömt Lauge von Nachbarsegmenten j in das Segment i hinein, so ist jeweils der Strom $S_{j,i} > 0$ und wird im folgenden mit $S_{j,i}^{(>)}$ bezeichnet, entsprechend Gleichung 59 ist dann $S_{i,j} < 0$ und wird mit $S_{i,j}^{(<)}$ bezeichnet,
- strömt Lauge aus dem Segment i hinaus in Nachbarsegmente j , so ist jeweils der Strom $S_{i,j} > 0$ bzw. $S_{j,i} < 0$. Dieser Strom wird mit $S_{i,j}^{(>)}$ bzw. mit $S_{j,i}^{(<)}$ bezeichnet.

Der durch eine advective Laugenbewegung hervorgerufene Schadstoffstrom $\dot{A}_i^{a(in)}$ in das Segment i hinein ist somit gegeben durch

$$\dot{A}_i^{a(in)} = \sum_j c_j \cdot S_{j,i}^{(>)} > 0, \quad (108)$$

wobei die Summation über alle Nachbarsegmente j von i läuft. Die Größe c_j gibt die jeweilige Schadstoffkonzentration in den Segmenten j an.

Der Schadstoffstrom aus dem Segment i heraus ist

$$\dot{A}_i^{a(out)} = \sum_j c_i \cdot S_{i,j}^{(>)} > 0, \quad (109)$$

wobei c_i die Schadstoffkonzentration im Segment i ist.

Mit den folgenden Identitäten

$$S_{j,i}^{(>)} = \frac{1}{2} \cdot (|S_{j,i}| + S_{j,i}) = \frac{1}{2} \cdot (|S_{i,j}| - S_{i,j}) \quad (110)$$

und

$$S_{i,j}^{(>)} = \frac{1}{2} \cdot (|S_{i,j}| + S_{i,j}) \quad (111)$$

erhält man für den gesamten Schadstoff-Eingangsstrom (Gleichung 108)

$$\dot{A}_i^{a \text{ (in)}} = \sum_j \frac{c_j}{2} \cdot (|S_{i,j}| - S_{i,j}) \quad (112)$$

und für den Schadstoff-Ausgangsstrom (Gleichung 109)

$$\dot{A}_i^{a \text{ (out)}} = \sum_j \frac{c_i}{2} \cdot (|S_{i,j}| + S_{i,j}). \quad (113)$$

Damit läßt sich der Schadstoff-Übergangstrom $\dot{A}_{i,j}^a$ von i nach j bestimmen zu

$$\dot{A}_{i,j}^a = \frac{1}{2} \cdot (c_i - c_j) \cdot |S_{i,j}| + \frac{1}{2} \cdot (c_i + c_j) \cdot S_{i,j}. \quad (114)$$

Außerdem läßt sich ein Netto-Schadstoffstrom $\dot{A}_i^{a N}$ definieren als

$$\dot{A}_i^{a N} = -\sum_j \dot{A}_{i,j}^a = -\frac{1}{2} \cdot \sum_j [(c_i - c_j) \cdot |S_{i,j}| + (c_i + c_j) \cdot S_{i,j}]. \quad (115)$$

Das Minuszeichen sorgt dafür, daß ein positiver Netto-Schadstoffstrom zu einer Vergrößerung des Inventars im Segment i führt. Der Vergleich mit den Beziehungen 112 und 113 zeigt, daß gilt

$$\dot{A}_i^a N = \dot{A}_i^a (\text{in}) - \dot{A}_i^a (\text{out}) \quad (116)$$

4.6.2 Schadstofftransport durch Diffusion und Dispersion

Neben dem advektiven Transport von Schadstoffen mit dem Laugenstrom findet ein diffusiver und dispersiver Schadstofftransport aufgrund eines Gradienten in der Schadstoffkonzentration statt. Dieser Transport wird durch die Gleichung 94 beschrieben. Der Tensor \mathbf{D}_h der hydrodynamischen Dispersion setzt sich i.a. aus den Anteilen molekulare Diffusion \mathbf{D}_m und longitudinale und transversale Dispersion \mathbf{D} zusammen. In isotropen Medien gilt [1]

$$(\mathbf{D}_h)_{ik} = \phi D_m \cdot \delta_{ik} + (\alpha_L - \alpha_T) |u_j| \cdot \delta_{ik} \delta_{ij} + \alpha_T |u_j| \cdot \delta_{ik}, \quad (117)$$

wobei α_L die longitudinale und α_T die transversale Dispersion beschreiben und der Strom \underline{u} in Richtung \underline{e}_j geht. In einer eindimensionalen Modellierung des Schadstofftransports fällt die transversale Dispersion weg, stattdessen wird eine Durchmischung der Schadstoffe im Segment unterstellt. Außerdem hat der Gradient der Konzentration c nur eine Komponente in Richtung \underline{e}_j . Die Gleichung 117 nimmt damit die Form

$$(\mathbf{D}_h)_{ij} = \phi \cdot D_m \cdot \delta_{ij} + \alpha_L \cdot |u_j| \cdot \delta_{ij} \quad (118)$$

an. Der diffusive/dispersiver Anteil des Schadstoffstroms (94) ist damit

$$\dot{A}_{i,j}^D = - \int_{\Omega_j} d\omega_j \cdot \left((\phi \cdot D_m + \alpha_L \cdot |u_j|) \cdot \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) \Big|_{\Omega_j} \quad (119)$$

Im folgenden wird wieder am Beispiel der rechten Grenzfläche des Segments i (entsprechend Abbildung 4.9) die Integration über die Oberfläche Ω_j durchgeführt, d.h. $x_j = x$, $d\omega = dy dz$. Im allgemeinen werden die Porositäten und die Querschnittsflächen der Segmente i und j verschieden sein. Die Diffusionskoeffizienten und die Dispersionslängen können i.a. in den Segmenten ebenfalls unterschiedlich sein. Im Rahmen der Ortsdiskretisierung durch finite Differenzen verändern sich diese Werte an den Grenzflächen sprunghaft. Da der Massenstrom durch die Grenzfläche jedoch erhalten bleibt, ändert sich auch der Konzentrationsgradient ∇c an der Grenzfläche Ω_j sprunghaft, während die Konzentration c stetig ist.

Analog zur Advektion wird die Integration über die Grenzfläche wie folgt durchgeführt:

Aus der Kontinuität des Massenstroms folgt

$$\int_{F_i} (\phi_i D_m^i + \alpha_L^i |u_x|) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_i dy dz = \int_{F_j} (\phi_j D_m^j + \alpha_L^j |u_x|) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j dy dz, \quad (120)$$

wobei F_i die Querschnittsfläche des Segments i , D_m^i der Diffusionskoeffizient, α_L^i die Dispersionslänge und $\partial c/\partial x|_i$ der Konzentrationsgradient im Segment i (links der Grenzfläche Ω_j) und F_j die Querschnittsfläche des Segments j , D_m^j der Diffusionskoeffizient, α_L^j die Dispersionslänge und $\partial c/\partial x|_j$ der Konzentrationsgradient im Segment j (rechts der Grenzfläche Ω_j) sind. Sowohl ϕ und u_x als auch $\partial c/\partial x$ sind jeweils über den Segmentquerschnitt konstant, für u_x wird das Ergebnis von Kapitel 4.6.1 verwendet, so daß

$$\left(F_i \phi_i D_m^i + \alpha_L^i |S_{i,j}| \right) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_i = \left(F_j \phi_j D_m^j + \alpha_L^j |S_{i,j}| \right) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j \quad (121)$$

folgt. Weiteres Vorgehen entsprechend Kapitel 4.6.1 liefert

$$\left. \left(F_i \phi_i D_m^i + \alpha_L^i |S_{i,j}| \right) \frac{\partial c}{\partial x} \right|_i = \frac{-(c_i - c_j)}{\frac{L_i}{2(F_i \phi_i D_m^i + \alpha_L^i |S_{i,j}|)} + \frac{L_j}{2(F_j \phi_j D_m^j + \alpha_L^j |S_{i,j}|)}}. \quad (122)$$

Mit diesem Zwischenergebnis liefert 119 für den diffusiven/dispersiven Anteil des Schadstoffstroms zwischen den Segmenten i und j

$$\dot{A}_{i,j}^D = X_{i,j} \cdot (c_i - c_j), \quad (123)$$

wobei die Konzentrationen c_i und c_j jeweils die Werte in der Mitte der Segmente i und j sind und $X_{i,j}$ als

$$X_{i,j} = \left(\frac{L_i}{2(F_i \phi_i D_m^i + \alpha_L^i |S_{i,j}|)} + \frac{L_j}{2(F_j \phi_j D_m^j + \alpha_L^j |S_{i,j}|)} \right)^{-1} \quad (124)$$

definiert ist. Diese Beziehungen gelten auch für senkrecht zueinander stehende Segmente, wobei je nach Anordnung (analog zum Vorgehen bei der Berechnung des Strömungswiderstandes $R_{i,j}$ in Kapitel 4.3.2) entweder $L_i = 0$ oder $L_j = 0$ ist.

Die Beziehung 123 zeigt, daß bei einer niedrigeren Schadstoffkonzentration im Nachbarsegment, d.h. $c_i - c_j > 0$, der Schadstoffstrom von i nach j positiv ist.

Analog zur Gleichung 115 läßt sich ein Netto-Schadstoffstrom definieren als

$$\dot{A}_i^{DN} = -\sum_j \dot{A}_{i,j}^D = -\sum_j [X_{i,j} \cdot (c_i - c_j)]. \quad (125)$$

Das Minuszeichen sorgt dafür, daß ein positiver Netto-Schadstoffstrom zu einer Vergrößerung des Inventars im Segment i führt.

4.6.3 Austauscheffekte

Im folgenden wird die Modellierung von Austauschströmen beschrieben, welche durch die Grenzfläche zwischen je zwei benachbarten Segmenten treten. Die Austauschströme werden durch Dichtegradienten hervorgerufen, die von Temperaturunterschieden in den beiden Segmenten oder von Konzentrationsunterschieden eines gelösten Stoffes verursacht werden.

4.6.3.1 Austauschströme durch Dichtegradienten

Die in einem isotropen, porösen Medium durch einen Dichtegradienten angetriebene Konvektionsströmung v^p ergibt sich aus

$$\nabla \cdot (\rho \cdot v^p) = 0 \quad (126)$$

und der Darcy-Gleichung [1]

$$v^p = -\frac{k}{\mu} \cdot (\nabla p - \rho \cdot g), \quad (127)$$

wobei ρ die Dichte der Lauge und g die Erdbeschleunigung sind. Unter der Voraussetzung eines konstanten Druckgradienten folgt für eine horizontale Strecke (orientiert in x -Richtung, Erdbeschleunigung in z -Richtung) aus 127

$$v_x^p = -\frac{k}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = \text{konstant}, \quad (128)$$

$$v_y^p = 0, \quad (129)$$

$$v_z^p = -\frac{k}{\mu} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial z} + g \cdot \rho \right). \quad (130)$$

Aus der Gleichung 126 folgt bei Anwendung der Boussinesq-Approximation, der Beziehung 128 und dem Verschwinden von v_z^p auf dem Rand der Strecke (bei $-H/2$ und $+H/2$, s. Abbildung 4.11)

$$v_z^p \equiv 0 \text{ bzw. } \frac{\partial p}{\partial z} = -g \cdot \rho. \quad (131)$$

Differenzieren der Gleichungen 128 nach z und 131 nach x liefert

$$\frac{\partial v_x^p}{\partial z} = -\frac{k}{\mu} \cdot \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial z} = \frac{k}{\mu} \cdot g \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x}. \quad (132)$$

Integration dieser Gleichung mit der Randbedingung $v_x^p(z=0) = 0$ (der advective Laugenstrom ist als u_x bereits berücksichtigt) ergibt

$$v_x^p(z) = g \cdot \frac{k}{\mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \cdot z. \quad (133)$$

Die Funktion $v_x^p(z)$ und die Geschwindigkeitsvektoren $v^p(z)$ sind in der Abbildung 4.11 skizziert. Das Verschwinden der Strömung auf dem Rand kann mit der Darcy-Gleichung nicht beschrieben werden. Im Rahmen der verwendeten Näherungen ergibt sich daher eine lineare Funktion von z , deren Maximalwert auf dem Rand erreicht wird. Die Strömung geht in der oberen Hälfte der Strecke in Richtung des Dichtegradienten (nach links), während sie in der unteren Hälfte (spiegelbildlich) entgegengesetzt verläuft.

Im folgenden wird eine Strecke betrachtet, die sich aus mehreren Segmenten mit eventuell unterschiedlichen Querschnitten und/oder unterschiedlichen Permeabilitäten zusammensetzt. Im Rahmen der Ortsdiskretisierung verändern sich diese Werte an den Grenzflächen sprunghaft. Da der Massenstrom durch die Grenzfläche jedoch erhalten bleibt, ändert sich auch der Dichtegradient $\nabla \rho$ an der Grenzfläche Ω_j sprunghaft, während die Dichte ρ stetig verläuft.

Stetigkeit des Massenstroms bedeutet folglich

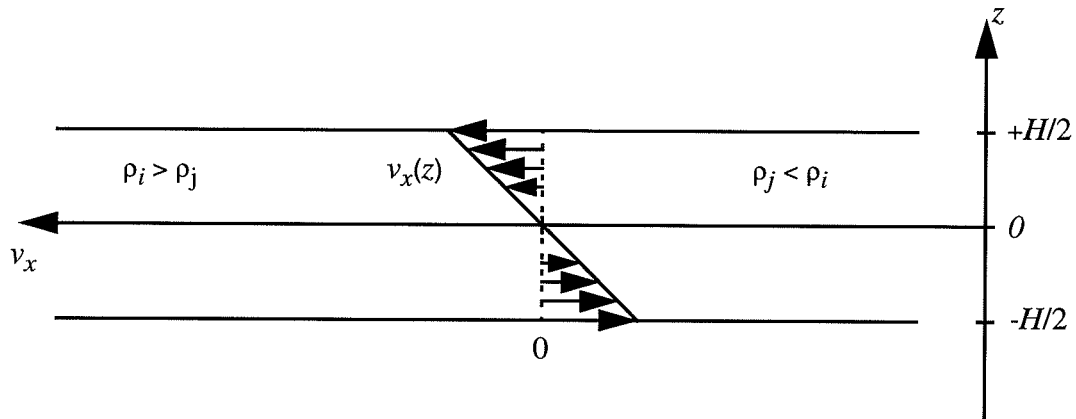


Abb. 4.11: Schematische Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes $v_x(z)$ in einer homogen versetzten Strecke bei Vernachlässigung von Randeffekten

$$\int_{(F_i/2)} \frac{g \cdot k_i}{\mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_i \cdot z \cdot dy \, dz = \int_{(F_j/2)} \frac{g \cdot k_j}{\mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_j \cdot z \cdot dy \, dz, \quad (134)$$

wobei $\partial \rho / \partial x|_i$ der Dichtegradient im Segment i und $\partial \rho / \partial x|_j$ der Dichtegradient im Segment j sind, die Integration nur über die obere oder die untere Hälfte der Grenzfläche Ω_j durchgeführt wird und das Integral über die gesamte Grenzfläche Ω_j verschwindet.

Ausführen der Intergration ergibt

$$\frac{1}{8} \cdot H_i \cdot F_i \cdot \frac{g \cdot k_i}{\mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_i = \frac{1}{8} \cdot H_j \cdot F_j \cdot \frac{g \cdot k_j}{\mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_j. \quad (135)$$

Weiteres Vorgehen entsprechend Kapitel 4.6.1, Gleichungen 101 bis 103 liefert

$$\frac{1}{8} H_i \cdot F_i \cdot \frac{g \cdot k_i}{\mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_i = \frac{g (\rho_j - \rho_i)}{8 \left(\frac{\mu \cdot L_i}{2 k_i \cdot H_i \cdot F_i} + \frac{\mu \cdot L_j}{2 k_j \cdot H_j \cdot F_j} \right)}. \quad (136)$$

Mit diesem Zwischenergebnis läßt sich das Geschwindigkeitsfeld \underline{v}^{ρ} im Segment i schreiben als

$$v_{x,i}^{\rho}(z) = \frac{g}{F_i \cdot H_i} \cdot \frac{(\rho_j - \rho_i)}{\frac{R_i}{2H_i} + \frac{R_j}{2H_j}} \cdot z, \quad v_{y,i}^{\rho} \equiv 0, \quad v_{z,i}^{\rho} \equiv 0, \quad (137)$$

wobei die Gleichung 38 für die Strömungswiderstände R_i bzw. R_j verwendet wurde.

Wenn die Dichteänderung in einem Segment durch eine Temperaturänderung ΔT und durch eine Konzentrationsänderung eines gelösten Stoffes ΔC (z.B. durch Zementauflösung) hervorgerufen wird, gilt

$$\Delta \rho = \rho - \rho_0 = \rho_0 \cdot (\beta \cdot \Delta T + \alpha \cdot \Delta C). \quad (138)$$

Für $\rho_i - \rho_j$ ergibt sich hieraus

$$\rho_i - \rho_j = \rho_0 \cdot [(\beta \cdot (T_i - T_j) + \alpha \cdot (C_i - C_j))]. \quad (139)$$

4.6.3.2 Schadstoffströme durch Konvektion

Betrachtet werden ein beliebiges Segment i und dessen Nachbarsegment j , die in x -Richtung aneinandergereiht sind. Die Konvektionsgeschwindigkeiten $v_{x,i}(z)$ im Segment i und $v_{x,j}(z)$ im Segment j werden wie im Kapitel 4.6.3.1 angegeben berechnet.

Da die Schadstoffkonzentration an der Grenzfläche zwischen den Segmenten i und j stetig sein muß, gilt für den Schadstofftransport durch die Grenzfläche entsprechend Gleichung 95

$$\dot{A}_{i,j}^p = B_i \int_{-H_i/2}^{H_i/2} v_{x,i}^p(z) c_i(x_g, z) dz = B_j \int_{-H_j/2}^{H_j/2} v_{x,j}^p(z) c_j(x_g, z) dz, \quad (140)$$

wobei x_g die x-Koordinate der Grenzfläche zwischen i und j ist und das Geschwindigkeitsfeld wie in der Abbildung 4.11 dargestellt parallel zur x-Achse gerichtet sei.

Die Konzentration $c(x,z)$ erhält man aus der stationären Lösung der Transportgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi c) = \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla c - v c) = 0, \quad (141)$$

in der der advective Transport hier nicht betrachtet wird, da er bereits in dem Term $\dot{A}_{i,j}^a$ (Kapitel 4.6.1) berücksichtigt ist. Unter den Voraussetzungen

- konstanter Porosität in den Segmenten,
- konstanter hydrodynamischer Dispersion D_h ,
- Vernachlässigung der transversalen Dispersion,
- einer voll ausgebildeten Strömung und
- eines konstanten Konzentrationsgradienten in den Segmenten

ergibt sich die Lösung wie folgt:

Aus Kapitel 4.6.3.1 folgt

$$v_x = v_x(z) = C_v z, \quad v_y \equiv 0, \quad v_z \equiv 0.$$

Mit den Voraussetzungen $\frac{\partial c}{\partial x} = \text{const}$ und $\alpha_T = 0$ folgt

$$\nabla \cdot D_h \cdot \nabla c = \phi D_m \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = \nabla \cdot v c = v_x(z) \cdot \frac{\partial c}{\partial x}. \quad (142)$$

Die Lösung mit der Randbedingung

$$\left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{\pm \frac{H}{2}} = 0 \quad (143)$$

lautet

$$c(x, z) = c_0 + \frac{\partial c}{\partial x} \cdot x + \frac{C_v}{6\phi D_m} \frac{\partial c}{\partial x} \cdot \left(z^3 - \frac{3}{4} H^2 \cdot z \right). \quad (144)$$

Einsetzen in 142 liefert mit der Abkürzung

$$\Theta_{i, j} = \frac{g(\rho_i - \rho_j)}{\frac{R_i}{2H_i} + \frac{R_j}{2H_j}} \quad (145)$$

im Segment i an der Grenzfläche zu j

$$\dot{A}_{i, j}^p = B_i \int_{-H_i/2}^{H_i/2} \frac{\Theta_{i, j}}{F_i H_i} \cdot z \cdot \frac{1}{6\phi_i D_m^i} \frac{\Theta_{i, j}}{F_i H_i} \left(z^3 - \frac{3}{4} H_i^2 \cdot z \right) \cdot \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_i dz, \quad (146)$$

wobei die ersten beiden Terme in 144 fortgelassen wurden, da sie bei der Integration verschwinden.

Entsprechend gilt im Segment j

$$\dot{A}_{i, j}^p = B_j \int_{-H_j/2}^{H_j/2} \frac{\Theta_{i, j}}{F_j H_j} \cdot z \cdot \frac{1}{6\phi_j D_m^j} \frac{\Theta_{i, j}}{F_j H_j} \left(z^3 - \frac{3}{4} H_j^2 \cdot z \right) \cdot \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_j dz \quad (147)$$

Ausführen der Integration liefert

$$\dot{A}_{i,j}^p = \frac{1}{120} \cdot \frac{(\Theta_{i,j})^2}{F_i \phi_i D_m^i} \cdot H_i^2 \cdot \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_i \quad (148)$$

und

$$\dot{A}_{i,j}^p = \frac{1}{120} \cdot \frac{(\Theta_{i,j})^2}{F_j \phi_j D_m^j} \cdot H_j^2 \cdot \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_j \quad (149)$$

Aus der Gleichheit der Ausdrücke 148 und 149 folgt

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_j = \frac{H_i^2}{H_j^2} \cdot \frac{F_j \phi_j D_m^j}{F_i \phi_i D_m^i} \cdot \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_i \quad (150)$$

Weiteres Vorgehen entsprechend Kapitel 4.6.1 liefert

$$c_j - c_i = \frac{L_i \partial c}{2 \partial x} \Big|_i + \frac{L_j \partial c}{2 \partial x} \Big|_j \quad (151)$$

bzw. mit 150

$$c_j - c_i = \frac{H_i^2}{F_i \phi_i D_m^i} \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_i \cdot \left[\frac{L_i}{2H_i^2} + \frac{L_j}{2H_j^2} \cdot \frac{F_i \phi_i D_m^i}{F_j \phi_j D_m^j} \right] \quad (152)$$

Mit Hilfe dieses Zwischenergebnisses wird in Gleichung 148 die Ableitung $\frac{\partial c}{\partial x}$ eliminiert, und man erhält mit der Abkürzung

$$Y_{i,j} = \left(\frac{L_i}{2 \frac{H_i^2}{F_i \phi_i D_m^i}} + \frac{L_j}{2 \frac{H_j^2}{F_j \phi_j D_m^j}} \right)^{-1} \quad (153)$$

schließlich

$$\dot{A}_{i,j}^p = \frac{1}{120} (\Theta_{i,j})^2 \cdot Y_{i,j} \cdot (c_i - c_j). \quad (154)$$

Der Schadstoffstrom $\dot{A}_{i,j}^p$ ist positiv, wenn die Konzentration c_i im Segment i größer ist als die Konzentration c_j im Segment j , d.h. Gleichung 154 beschreibt in diesem Fall den Schadstoff-Ausgangsstrom. Der Schadstoffstrom $\dot{A}_{i,j}^p$ ist negativ, wenn die Konzentration c_i im Segment i kleiner ist als die Konzentration c_j im Segment j , d.h. Gleichung 154 beschreibt in dem Fall den Schadstoff-Eingangsstrom. Analog zum Kapitel 4.6.1 lassen sich also ein Schadstoff-Eingangs-, ein Schadstoff-Ausgangs- und ein Netto-Schadstoffstrom wie folgt definieren:

Den Schadstoff-Eingangsstrom in ein Segment i erhält man, wenn man alle positiven Schadstoffströme $\dot{A}_{j,i}^p$ addiert, d.h.

$$\dot{A}_i^{p \text{ (in)}} = \frac{1}{2} \cdot \sum_j (|\dot{A}_{i,j}^p| - \dot{A}_{i,j}^p), \quad (155)$$

während der Schadstoff-Ausgangsstrom gleich der Summe über alle positiven Schadstoffströme $\dot{A}_{i,j}^p$ ist, d.h.

$$\dot{A}_i^{p \text{ (out)}} = \frac{1}{2} \cdot \sum_j (|\dot{A}_{i,j}^p| + \dot{A}_{i,j}^p), \quad (156)$$

und der Netto-Schadstoffstrom ist

$$\dot{A}_i^{\rho N} = -\sum_j \dot{A}_{i,j}^{\rho} = \dot{A}_i^{\rho (in)} - \dot{A}_i^{\rho (out)}. \quad (157)$$

Das Minuszeichen sorgt dafür, daß eine höhere Schadstoffkonzentration in den Nachbarsegmenten zu einer Vergrößerung des Inventars im Segment i führt, bzw. eine niedrigere zu einer Verkleinerung führt.

4.6.4 Schadstofftransport zwischen offenen Bereichen

In einer mit Lauge gefüllten offenen Strecke wird eine unverzügliche Durchmischung unterstellt. Wird eine solche Strecke in mehrere Segmente unterteilt, so muß ein zusätzlicher Austauschmechanismus eingeführt werden, der einen schnellen Konzentrationsausgleich zwischen benachbarten offenen Bereichen bewirkt.

Der Austauschmechanismus wird durch einen Laugenaustauschstrom in der Form

$$S^m = \frac{1}{2} \cdot u' \cdot F \quad (158)$$

modelliert, wobei F die Querschnittsfläche der betrachteten Strecke ist und u' die Abstandsgeschwindigkeit der Konvektionsströmung beschreibt, die eine instantane Durchmischung bewirken soll. Im allgemeinen kann mit einem Wert von $u' = 0,1$ m/a gearbeitet werden.

Im Fall zweier benachbarter Segmente mit unterschiedlichem Querschnitt folgt aus der Kontinuitätsbedingung für den Konvektionsstrom, daß für die Querschnittsfläche F das mit der jeweiligen Segmentlänge gewichtete harmonische Mittel zu verwenden ist, d.h.

$$\overline{F}_{i,j} = (L_i + L_j) \cdot \left(\frac{L_i}{F_i} + \frac{L_j}{F_j} \right)^{-1}. \quad (159)$$

Für den Austauschstrom zwischen den Segmenten i und j erhält man somit

$$S_{i,j}^m = \frac{1}{2} \cdot u' \cdot \overline{F_{i,j}}. \quad (160)$$

Zur Berechnung des hierdurch bewirkten Schadstofftransports werden zunächst die Differentialgleichungen für die Schadstoffkonzentrationen in zwei benachbarten Segmenten i und j berechnet, wobei vorausgesetzt wird, daß während eines Zeitintervalls Δt keine Schadstoffe aus anderen Segmenten nachgeliefert werden und die Laugenvolumina V_i^L und V_j^L in Δt konstant bleiben, d.h.

$$\frac{dc_i}{dt} = -\frac{S_{i,j}^m}{V_i^L} \cdot (c_i - c_j), \quad (161)$$

$$\frac{dc_j}{dt} = \frac{S_{i,j}^m}{V_j^L} \cdot (c_i - c_j). \quad (162)$$

Die Lösungen dieses Differentialgleichungssystems mit konstanten Koeffizienten lauten

$$c_i(t) = C_1 + C_2 \cdot e^{-\lambda \cdot t}, \quad (163)$$

$$c_j(t) = C_1 - C_2 \cdot \frac{V_i^L}{V_j^L} \cdot e^{-\lambda \cdot t}, \quad (164)$$

wobei C_1 und C_2 Integrationskonstanten sind und

$$\lambda = \frac{S_{i,j}^m}{V_i^L} + \frac{S_{i,j}^m}{V_j^L} \quad (165)$$

ist.

Der Schadstoffstrom von i nach j ergibt sich aus

$$\dot{A}_{i,j}^m = S_{i,j}^m \cdot (c_i - c_j). \quad (166)$$

Für eine zeitdiskrete Rechnung läßt sich hieraus ein mittlerer Schadstoffstrom,

$$\overline{\dot{A}_{i,j}^m} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_t^{t+\Delta t} \dot{A}_{i,j}^m dt, \quad (167)$$

der über den Zeitschritt Δt wirkt, bestimmen zu

$$\dot{A}_{i,j}^M = \overline{\dot{A}_{i,j}^m} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \frac{S_{i,j}^m}{\lambda} \cdot (1 - e^{-\lambda \cdot \Delta t}) \cdot (c_i - c_j), \quad (168)$$

wobei die Schadstoffkonzentrationen c_i und c_j im vorherigen Zeitschritt berechnet wurden.

Dieser Schadstoffstrom trägt in offenen Strecken neben dem durch Advektion und dem durch Diffusion zum Schadstofftransport bei.

Analog zur Gleichung 115 läßt sich ein Netto-Schadstoffstrom definieren als

$$\dot{A}_i^{MN} = -\sum_j \dot{A}_{i,j}^M = -\sum_j \frac{1}{\Delta t} \cdot \frac{S_{i,j}^m}{\lambda} (1 - e^{-\lambda \Delta t}) (c_i - c_j). \quad (169)$$

Das Minuszeichen sorgt dafür, daß ein positiver Netto-Schadstoffstrom zu einer Vergrößerung des Inventars im Segment i führt.

4.6.5 Schadstoffbilanzierung und radioaktiver Zerfall

Der gesamte Schadstoffstrom setzt sich aus dem advektiven, dem diffusiven/dispersiven und dem konvektiven Anteil zusammen. Für den Schadstoff-Übergangstrom vom Segment i zum Segment j erhält man somit

$$\dot{A}_{i,j} = \dot{A}_{i,j}^a + \dot{A}_{i,j}^D + \dot{A}_{i,j}^M + \dot{A}_{i,j}^p, \quad (170)$$

wobei die einzelnen Terme durch die Gleichungen 114, 123, 168 und 154 gegeben sind. Der gesamte Netto-Schadstoffstrom ist durch

$$\dot{A}_i^N = \dot{A}_i^{a N} + \dot{A}_i^{D N} + \dot{A}_i^{M N} + \dot{A}_i^{p N} \quad (171)$$

gegeben, wobei die einzelnen Terme aus den Gleichungen 115, 125, 169 und 157 folgen.

4.6.5.1 Schadstoffbilanzierung

Das Schadstoffinventar $A_i(t+\Delta t)$ im Segment i zur Zeit $t+\Delta t$ ergibt sich aus dem Inventar $A_i(t)$ mit Hilfe der folgenden Bilanzgleichung

$$A_i(t + \Delta t) = A_i(t) + (\dot{A}_i^{(in)} - \dot{A}_i^{(out)}) \Delta t = A_i(t) + \dot{A}_i^N \Delta t. \quad (172)$$

Diese Bilanzgleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung des Schadstoffinventars im Segment i und ähnelt der Gleichung 61 für die zeitliche Entwicklung der Laugenvolumina (Kapitel 4.4.2).

4.6.5.2 Radioaktiver Zerfall

Sofern radioaktive Abfälle eingelagert werden, wird die zur Bilanzierung des Schadstoffinventars unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Schadstoffströme und des radioaktiven Zerfalls benötigte Gleichung näherungsweise in zwei Schritten gelöst:

1. Innerhalb des Zeitintervalls Δt wird der radioaktive Zerfall der Nuklide eines Segmentes für das am Anfang des Zeitschrittes vorhandene Inventar berechnet.
2. Über das gleiche Zeitintervall wird anschließend eine Bilanz des Inventars zur Berücksichtigung der Ein- und Ausgangsströme aufgestellt.

Der radioaktive Zerfall wird im Gegensatz zu anderen Effekten mit einem analytischen Verfahren und nicht mit einem über den Zeitschritt linearen Ansatz berechnet, um auch für große Zeitschritte eine angemessene Genauigkeit zu erhalten.

Voraussetzung des im folgenden beschriebenen Verfahrens ist, daß nur solche Zerfälle auftreten, bei denen zu jedem Mutternuklid höchstens eine Tochter existiert, umgekehrt aber zu einem Tochternuklid mehrere Mutternuklide existieren können. Man erhält unter diesen Annahmen eine Baumstruktur des Zerfalles, die in Abbildung 4.12 dargestellt ist.

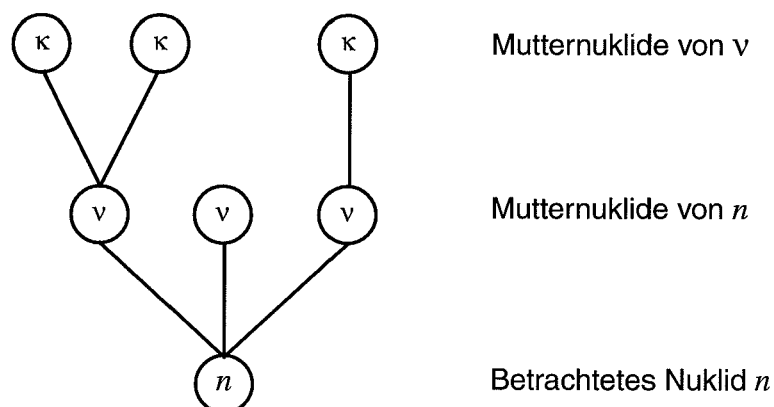


Abb. 4.12: Schematische Darstellung der berücksichtigten Baumstruktur von Zerfallsketten

Die Differentialgleichung für die Aktivität des n -ten Nuklids hat entsprechend der Abbildung 4.12 zwei Anteile:

$$\frac{dA_n}{dt} = \lambda_n \left(\sum_v A_v - A_n \right). \quad (173)$$

Die zeitliche Änderung der Aktivität durch den radioaktiven Zerfall dA_n/dt ist also proportional zur Aktivität A_n des Nuklids selbst und zur Summe der Aktivitäten der Mutternuklide $\sum_v A_v$. Die Zerfallsrate λ_n ist hierbei die Proportionalitätskonstante.

Mit dem Ansatz

$$A_n(t) = f_n(t) e^{-\lambda_n t}, \quad (174)$$

mit

$$A_n(0) = A_{n,0} = f_n(0), \quad (175)$$

erhält man die Lösung der Differentialgleichung 173 in der Form

$$A_n(t) = A_{n,0} e^{-\lambda_n t} + \lambda_n e^{-\lambda_n t} \sum_v \int_0^t A_v(t') e^{\lambda_n t'} dt'. \quad (176)$$

Für ein bekanntes Anfangsinventar $A_{n,0}$ läßt sich aus Gleichung 176 zu beliebigen Zeiten das Inventar des n -ten Nuklids bestimmen.

Ist v das Anfangsnuklid der Zerfallskette, so steht in Gleichung 176 nur das erste Glied, das die Aktivität $A_v(t)$ beschreibt. Durch sukzessives Einsetzen in Gleichung 176 können dann die Aktivitäten der Tochternuklide n berechnet werden.

Die Gleichung 176 kann also rekursiv gelöst werden und läßt sich ausgeschrieben darstellen als:

$$\begin{aligned}
A_n(t) = & A_{n,0} \cdot e^{-\lambda_n \cdot t} + \\
& \sum_v A_v(t) - A_{v,0} \cdot e^{-\lambda_n \cdot t} \cdot \frac{\lambda_n}{\lambda_n - \lambda_v} + \\
& \sum_v \sum_\kappa A_\kappa(t) - A_{\kappa,0} \cdot e^{-\lambda_n \cdot t} \cdot \frac{\lambda_n}{\lambda_n - \lambda_\kappa} \cdot \frac{\lambda_v}{\lambda_v - \lambda_n} + \dots + \\
& \sum_v \sum_\kappa \sum_\sigma \dots \sum_{anf} A_{anf}(t) - A_{anf,0} \frac{\lambda_n}{\lambda_n - \lambda_{anf}} \frac{\lambda_v}{\lambda_v - \lambda_n} \frac{\lambda_\kappa}{\lambda_\kappa - \lambda_n} \dots \frac{\lambda_{anf-1}}{\lambda_{anf-1} - \lambda_n}
\end{aligned}
\tag{177}$$

In dieser Gleichung wurden die folgenden Größen verwendet:

- $\lambda_n, \lambda_v, \lambda_\kappa, \dots$: Zerfallsrate für das n, v, κ, \dots -te Nuklid,
- $A_{n,0}, A_{v,0}, \dots$: Anfangsaktivität des n, v, \dots -ten Nuklids,
- $A_{anf}(t)$: Aktivität des ersten Nuklids in der Zerfallsreihe,
- $A_{anf,0}$: Anfangsaktivität des ersten Nuklids in der Zerfallsreihe.

Die Bilanzierung des Aktivitätsinventars in einem Segment unter Berücksichtigung der Eingangs- und Ausgangs-Aktivitätsströme erfolgt jeweils am Ende eines Zeitschrittes Δt , nachdem der radioaktive Zerfall über diesen Zeitschritt berechnet wurde.

4.6.6 Ausfällung bei Erreichen von Löslichkeitsgrenzen

Für den in Kapitel 4.6.5 berechneten Schadstoffstrom sind nur die in der Lauge gelösten Schadstoffe relevant. Werden Löslichkeitsgrenzen überschritten, so fällt ein Teil der Schadstoffe aus und trägt nicht zum Schadstofftransport bei. Der Wert der Löslichkeitsgrenze hängt zum einen von der chemischen Form des betreffenden Elements und zum anderen von den chemischen und physikalischen Randbedingungen in dem betrachteten Segment ab.

Im Fall radioaktiver Abfälle wird vorausgesetzt, daß sich alle Isotope eines Elementes chemisch ähnlich verhalten, so daß die ausgefällten Radionuklide dasselbe Isotopenver-

hältnis haben wie die gelösten. Der Anteil $a_{L,n}$ der für den Transport zur Verfügung stehenden, gelösten Nuklide ist dann:

$$a_{L, n} = \frac{V_L L_{e(n)}}{I_{e(n)}}. \quad (178)$$

Dabei ist V_L das Laugenvolumen, $L_{e(n)}$ die Löslichkeitsgrenze des Elementes e zum Nuklid n und $I_{e(n)}$ die Stoffmenge aller Isotope des Elementes $e(n)$.

Wenn in einem Segment die Löslichkeitsgrenzen überschritten werden, sind in allen Gleichungen des Kapitels 4.6 ff, in denen Schadstoff- bzw. Nuklidkonzentrationen vorkommen, die mit den Anteilfaktoren aus Gleichung 178 berechneten Konzentrationen gelöster Schadstoffe bzw. Nuklide zu verwenden.

Ausfällung durch das Erreichen von Löslichkeitsgrenzen wird in allen Segmenten berücksichtigt, solange der Schadstofftransport nicht mit interner feinerer Diskretisierung gerechnet wird (siehe Kapitel 4.7). Wenn in den Segmenten, in denen mit feinerer Diskretisierung gerechnet wird, die über alle Blöcke des Segments gemittelte Schadstoffkonzentration die Löslichkeitsgrenze überschreitet, wird zur Kontrolle der Zeitpunkt des Erreichens von Löslichkeitsgrenzen ausgegeben. Ausfällung wird hierbei jedoch nicht berücksichtigt.

Neben der Ausfällung von Schadstoffen durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenzen kann der Schadstofftransport durch Sorption herabgesetzt werden. Dieser Effekt beschreibt die Adsorption der Schadstoffe an den Oberflächen der angrenzenden Festkörper, dem sogenannten Sorbens. Quantitativ wird die Sorption durch den Verteilungskoeffizienten K_d beschrieben, der das Verhältnis der Konzentration des Schadstoffs am Sorbens c_{Ad} zur Konzentration des Schadstoffs in der Lösung c_L angibt,

$$K_d = \frac{c_{Ad}}{c_L}. \quad (179)$$

Nach dem K_d -Konzept wird angenommen, daß der Sorptionsvorgang reversibel ist und daß der Verteilungskoeffizient unabhängig von der Menge des betrachteten Schadstoffs und damit für ein bestimmtes System konstant ist. Das System ist dabei durch den betrachteten Schadstoff, die Zusammensetzung der Lauge, die Beschaffenheit des Sorbens und die Temperatur charakterisiert.

Solange keine Ausfällung stattfindet, ist der Anteil des Schadstoffinventars, der unter Berücksichtigung der Sorption gelöst vorliegt,

$$a_L = R_f^{-1} = \frac{1}{1 + \frac{m_S}{V_L} K_d}, \quad (180)$$

wobei R_f der Retardationsfaktor ist. Die Masse des Sorbens ist in dieser Gleichung mit m_S bezeichnet. Bei der Ermittlung der Masse werden alle relevanten Materialien in dem betrachteten Segment berücksichtigt, also Versatzmaterial, Gestein der Auflockerungszone, Korrosionsprodukte von Zement, usw. Dabei wird angenommen, daß alle diese Materialien dieselben Sorptionseigenschaften haben, bzw. es wird für alle Materialien ein gemeinsamer, konservativ zu wählender K_d -Wert vorgegeben.

Da in einem Segment im allgemeinen Ausfällung und Sorption gleichzeitig stattfinden können, muß der gelöste Anteil durch Kombination der Gleichungen 178 und 180 berechnet werden. Die Löslichkeitsgrenze $L_{e(n)}$ aus Gleichung 178 wird hierzu um den Anteil, der durch Sorption maximal am Transport gehindert werden kann, erhöht

$$L'_{e(n)} = L_{e(n)} \left(1 + \frac{K_d m_S}{V_L} \right). \quad (181)$$

Wird in dem betrachteten Segment diese Löslichkeitsgrenze überschritten, so fällt der überschüssige Anteil der Schadstoffe aus. Der modifizierten Anteilfaktor ergibt sich dann zu

$$a'_{L, n} = \frac{V_L L'_{e(n)}}{I_{e(n)}}. \quad (182)$$

Mit dem nach Berücksichtigung der Löslichkeitsgrenzen in Lösung verbliebenen Inventar wird dann nach Gleichung 182 der Anteil berechnet, der nach Berücksichtigung der Sorption in der Lösung verbleibt.

Wenn in einem Segment Sorption der Schadstoffe stattfindet, sind in allen Gleichungen des Kapitels 4.6 ff, in denen Schadstoffkonzentrationen vorkommen, die mit den Anteil-faktoren aus Gleichung 180 bzw. bei Sorption und Ausfällung aus Gleichung 182 berechneten Konzentrationen gelöster Schadstoffe zu verwenden.

4.7 Schadstofftransport mit feinerer Diskretisierung

In einigen Fällen ist es erforderlich, eine Strecke für die genügend genaue Berechnung des Schadstofftransports feiner zu diskretisieren. Dabei ist es jedoch nicht immer erforderlich, auch den Laugentransport mit feinerer Diskretisierung zu berechnen. Insbesondere, wenn eine Strecke homogen versetzt ist und nicht konvergiert, erübrigt sich die Berechnung der Druckverteilung entlang der Strecke. Wird eine solche Strecke aber in einzelne Segmente unterteilt, so müssen für alle diese Segmente alle Variablen, insbesondere die Laugendrucke und die Laugenströme zwischen diesen Segmenten berechnet werden.

Eine alternative Vorgehensweise bietet die segmentinterne Diskretisierung, bei der der Schadstofftransport innerhalb des Segments mit feinerer Diskretisierung gerechnet wird, während der Laugendruck und der Laugenstrom nur für das ganze Segment berechnet werden. Diese Vorgehensweise führt zu kürzeren Rechenzeiten bei der Programmausführung.

4.7.1 Modellierung des Schadstofftransports im fein diskretisierten Segment

Im folgenden wird die Modellierung des Schadstofftransports innerhalb eines Segments dargestellt, wobei für den Transport zwischen Segmenten weiterhin die im Kapitel 4.6 beschriebene Modellierung verwendet wird. Bei dem Transport innerhalb eines Segments wird im folgenden nur Sorption an Versatzmaterial berücksichtigt, nicht die Ausfällung durch Erreichen von Löslichkeitsgrenzen. Der Retardationsfaktor berechnet sich wie im Kapitel 4.6.6 zu

$$R_f = 1 + \frac{m_{S,i}}{V_i \cdot \phi_i} \cdot K_d \quad (183)$$

wobei $m_{s,i}$ die Masse des sorbierenden Versatzmaterials, $V_i \cdot \phi_i$ das gesamte mit Lösung gefüllte Porenvolumen des Segments i sind und K_d der K_d -Wert des jeweiligen Schadstoffs beschreibt.

Das Segment i werde im folgenden in $2k+1$ gleiche Teile (Blöcke) unterteilt, blockspezifische Größen werden mit Kleinbuchstaben bezeichnet. Die Numerierung der Blöcke geht von $-k$ bis $+k$, wobei k für das Segment i mit $k(i)$ bezeichnet wird und κ der Laufindex für die Blöcke des Segments i ist.

Das Volumen v_κ der Blöcke κ folgt aus dem Segmentvolumen V_i ,

$$V_i = \sum_{\kappa=-k(i)}^{k(i)} v_\kappa = (2k(i) + 1) \cdot v_\kappa, \quad (184)$$

die Blocklänge l_κ ergibt sich aus der Segmentlänge L_i zu

$$l_\kappa = L_i / (2k(i) + 1), \quad (185)$$

der Blockquerschnitt f_κ ist gleich dem Segmentquerschnitt F_i ,

$$f_{\kappa} = F_i, \quad (186)$$

und die Porosität des Versatzmaterials ϕ_{κ} ist für alle Blöcke gleich der Porosität ϕ_i im Segment

$$\phi_{\kappa} = \phi_i. \quad (187)$$

Innerhalb eines Segments werden jeweils nur die in Lösung befindlichen Schadstoffe transportiert, nicht die am Versatzmaterial sorbierten.

Hiermit gilt der folgende Zusammenhang zwischen der Schadstoffkonzentration c_i im mit Lauge gefüllten Segment i und den Schadstoffkonzentrationen in den einzelnen Blöcken c_{κ} ,

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{A_i / R_f}{V_i \cdot \phi_i} = \sum_{\kappa = -k(i)}^{k(i)} \frac{a_{\kappa} / R_f}{V_i \cdot \phi_i} = \sum_{\kappa = -k(i)}^{k(i)} \frac{c_{\kappa} \cdot v_{\kappa} \cdot \phi_{\kappa}}{V_i \cdot \phi_i} \\ &= \frac{1}{2k(i) + 1} \cdot \sum_{\kappa = -k(i)}^{k(i)} c_{\kappa}, \end{aligned} \quad (188)$$

wobei c_i die Konzentration des gelösten Inventars, A_i das gesamte Schadstoffinventar im Segment i , a_{κ} das gesamte Schadstoffinventar im Block κ sind und die Konzentration des gelösten Schadstoffinventars c_{κ} im Block κ sich aus a_{κ} nach

$$c_{\kappa} = \frac{a_{\kappa} / R_f}{v_{\kappa} \cdot \phi_{\kappa}} \quad (189)$$

berechnet. Damit ist die Konzentration des gelösten Inventars im Segment gleich der über alle Blöcke gemittelten Konzentration des gelösten Blockinventars c_{κ} .

Im folgenden wird der konvektive Austausch aufgrund von Dichtegradienten nicht betrachtet. Nach Definition der Segmentstruktur (s. Abbildung 2.5, Kapitel 2) gibt es Verbindungen zu Nachbarsegmenten nur an den Stirnseiten und in der Mitte des Segments,

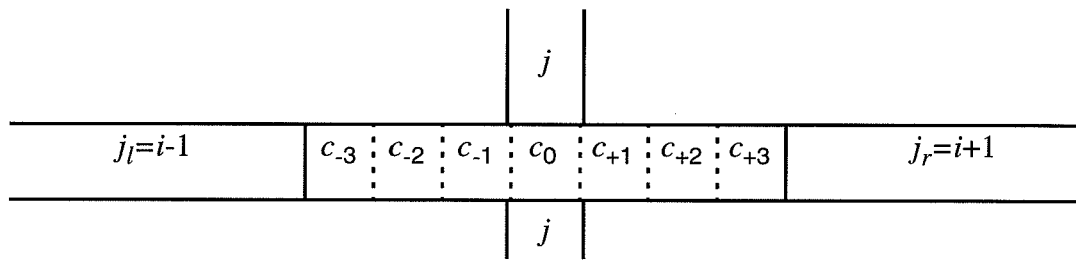


Abb. 4.13: Skizze einer unterteilten Strecke i und der Nachbarsegmente j_l, j_r, j

d.h. Schadstoffe aus Nachbarsegmenten können nur in die Randblöcke $\kappa = \pm k(i)$ oder in den mittleren Block $\kappa = 0$ eintreten. Aus der Transportgleichung folgt für das gesamte Schadstoffinventar a_κ in den Blöcken $\kappa = -k(i)+1, \dots, -1, +1, \dots, +k(i)-1$

$$a_\kappa(t + \Delta t) = a_\kappa(t) - \sum_{\lambda = \pm 1} \left\{ \dot{a}_{\kappa, \kappa+\lambda}^a + \dot{a}_{\kappa, \kappa+\lambda}^D \right\} \cdot \Delta t, \quad (190)$$

da diese Blöcke jeweils nur genau zwei Nachbarblöcke besitzen (s. Abbildung 4.13). Hierbei beschreibt

$$\dot{a}_{\kappa, \kappa \pm 1}^a = \frac{1}{2}(c_\kappa - c_{\kappa \pm 1}) \cdot |s_{\kappa, \kappa \pm 1}| + \frac{1}{2}(c_\kappa + c_{\kappa \pm 1}) \cdot s_{\kappa, \kappa \pm 1} \quad (191)$$

den advektiven Schadstoffstrom für $\kappa \neq 0, \neq \pm k$, wobei $s_{\kappa, \kappa \pm 1}$ der Laugenstrom vom Block κ zum Block $\kappa \pm 1$ ist.

Die Laugenströme $s_{\kappa, \kappa \pm 1}$ berechnen sich wie folgt:

Am linken Rand des Segments i bei $-k(i)$ ist

$$s_{-k(i), j_l} = S_{i, j_l},$$

wobei im obigen Beispiel j_l das Segment links von i bezeichnet. Erfolgt der Laugenstrom vom Segment j_l zum Segment i , so ist S_{i, j_l} negativ und damit auch $s_{-k(i), j_l}$.

Am rechten Rand des Segments i bei $+k(i)$ ist

$$s_{k(i), j_r} = S_{i, j_r},$$

wobei im obigen Beispiel j_r das Segment rechts von i bezeichnet. Erfolgt der Laugenstrom vom Segment i zum Segment j_r , so ist S_{i, j_r} positiv und damit auch $s_{k(i), j_r}$.

In einem konvergierenden Segment i ändert sich der Laugenstrom von Block zu Block. Der gesamte Konvergenzlaugenstrom eines Segments ist gegeben durch den Nettostrom

$$S_i^K = \sum_j S_{i, j}. \quad (192)$$

Da unter den anfangs diskutierten Voraussetzungen alle die Konvergenzrate bestimmenden Größen (p, ϕ, T) für alle Blöcke gleich sind, entfällt auf jeden Block κ der gleiche Anteil

$$s_i^K = \frac{1}{2k(i) + 1} \cdot S_i^K. \quad (193)$$

Hieraus ergibt sich für den Laugenstrom zwischen den Blöcken κ und $\kappa+1$

$$s_{\kappa, \kappa+1} = -S_{i, j_l} + (k(i) + \kappa + 1) \cdot s_{\kappa}^K \quad (194)$$

für $\kappa = -k(i), \dots, -1$ und

$$s_{\kappa, \kappa+1} = S_{i, j_r} - (k(i) - \kappa) \cdot s_{\kappa}^K \quad (195)$$

für $\kappa = 0, \dots, +k(i)-1$.

Aus 194 folgt für

$$s_{\kappa, \kappa - 1} = -s_{\kappa - 1, \kappa} = S_{i, j_l} - (k(i) + \kappa) \cdot s_{\kappa}^K \quad (196)$$

für $\kappa = -k(i)+1, \dots, 0$ und aus 195 folgt für

$$s_{\kappa, \kappa - 1} = -s_{\kappa - 1, \kappa} = -S_{i, j_r} + (k(i) - \kappa + 1) \cdot s_{\kappa}^K \quad (197)$$

für $\kappa = 1, \dots, k(i)$.

Entsprechend gilt für den diffusiven/dispersiven Anteil des Schadstoffstroms

$$\dot{a}_{\kappa, \kappa \pm 1}^D = x_{\kappa, \kappa \pm 1} \cdot (c_{\kappa} - c_{\kappa \pm 1}) \quad (198)$$

für $\kappa \neq 0, \neq \pm k(i)$.

Da nach Voraussetzung die Längen l_{κ} und Querschnittsflächen f_{κ} der Blöcke gleich sind und die Porositäten des Versatzes, die Diffusionskonstante und die Dispersionslänge für das ganze Segment gelten, vereinfacht sich der der Gleichung 124 entsprechende Ausdruck für x zu

$$x_{\kappa, \kappa \pm 1} = (f_{\kappa} \cdot \phi_{\kappa} \cdot D_m^i + \alpha_i^L \cdot |s_{\kappa, \kappa \pm 1}|) / l_{\kappa} \quad (199)$$

An den Rändern ($\kappa = -k(i)$ bzw. $\kappa = +k(i)$) gilt für das gesamte Schadstoffinventar

$$\begin{aligned} a_{-k(i)}(t + \Delta t) &= a_{-k(i)}(t) - (\dot{a}_{-k(i), -k(i)+1}^a + \dot{a}_{-k(i), -k(i)+1}^D) \cdot \Delta t \\ &\quad - \left(\dot{a}_{-k(i), j_l}^a + \dot{a}_{-k(i), j_l}^D \right) \cdot \Delta t, \end{aligned} \quad (200)$$

wobei im obigen Beispiel der Index j_l das Segment links von Segment i bezeichnet, sowie

$$\begin{aligned}
a_{k(i)}(t + \Delta t) &= a_{k(i)}(t) - (\dot{a}_{k(i), k(i)-1}^a + \dot{a}_{k(i), k(i)-1}^D) \cdot \Delta t \\
&\quad - \left(\dot{a}_{k(i), j_r}^a + \dot{a}_{k(i), j_r}^D \right) \cdot \Delta t,
\end{aligned} \tag{201}$$

wobei im obigen Beispiel der Index j_r das Segment rechts von Segment i bezeichnet.

Für den mittleren Block $\kappa = 0$ gilt für das gesamte Schadstoffinventar

$$\begin{aligned}
a_0(t + \Delta t) &= a_0(t) - \sum_{\lambda = \pm 1} \left\{ \dot{a}_{0,\lambda}^a + \dot{a}_{0,\lambda}^D \right\} \cdot \Delta t \\
&\quad - \sum_j (\dot{a}_{0,j}^a + \dot{a}_{0,j}^D) \cdot \Delta t,
\end{aligned} \tag{202}$$

wobei j über alle Nachbarsegmente senkrecht zu Segment i läuft.

Die Schadstoffströme $\dot{a}_{-k(i), j_l}^a$, $\dot{a}_{-k(i), j_l}^D$ und $\dot{a}_{k(i), j_r}^a$, $\dot{a}_{k(i), j_r}^D$ ergeben sich aus den Gleichungen 114 und 123, wobei die Konzentration c_i durch die Konzentrationen in den entsprechenden Randblöcken des Segments i zu ersetzen sind. Für $\dot{a}_{0,j}^a$ und $\dot{a}_{0,j}^D$ gilt entsprechend, daß c_i durch die Konzentration im mittleren Block des Segments i zu ersetzen ist. Die Konzentrationen in den Randblöcken und im mittleren Block werden im Segment aus den Inventaren in den entsprechenden Blöcken analog zu Gleichung 189 berechnet, der Schadstofftransport zu den Nachbarsegmenten wird wie zuvor außerhalb der Segmente berechnet.

4.7.2 Zeitschrittsteuerung bei feinerer Diskretisierung

Im gesamten Segmentsystem wird mit einer Zeitschrittweite gerechnet, die jeweils den numerischen Anforderungen der Segmentmodelle und der Effektmodelle angepaßt wird. Den Zeitschritt begrenzende Effekte wie Konvergenz, Laugenzutritt und relative Stromänderungen sind im Kapitel 2.2 erläutert. Im folgenden wird die Zeitschrittsteuerung dargestellt, wie sie sich für den Schadstofftransport bei segmentinterner Diskretisierung er-

gibt. Für nicht unterteilte Segmente ergibt sich der maximale Zeitschritt (ohne konvektiven Transport durch Dichtegradienten) aus dem Courant-Neumann-Kriterium (siehe Kapitel 2.2) zu

$$\Delta t_{max} = \min_i \left(\frac{\gamma_{CN} \cdot F_i \cdot \phi_i \cdot L_i}{\frac{1}{2} \cdot \sum_j (|S_{i,j}| + S_{i,j} + 2X_{i,j})} \right), \quad (203)$$

wobei γ_{CN} ein Variationsfaktor, $S_{i,j}$ der Laugenstrom zwischen dem Segment i und dem jeweiligen Nachbarsegment j ist und die Diffusionskonstante und die Dispersionslänge entsprechend 124 enthält.

Für ein in Blöcke unterteiltes Segment ist es im allgemeinen erforderlich, den Transport innerhalb des Segments mit einer feineren Zeitschrittweite δt zu rechnen. Der Maximalwert von δt ergibt sich analog Gleichung 203 zu

$$\delta t_{max} = \min_{\kappa} \left(\frac{\gamma_{CN} \cdot f_{\kappa} \cdot \phi_{\kappa} \cdot l_{\kappa}}{\frac{1}{2} \cdot \sum_{\lambda = \pm 1} (|s_{\kappa, \kappa + \lambda}| + s_{\kappa, \kappa + \lambda} + 2 \cdot x_{\kappa, \kappa + \lambda})} \right). \quad (204)$$

Diese Schrittweite läßt sich wie folgt durch die Schnittweite Δt_{max} abschätzen:

Die Größe

$$s_{\kappa}^{out} = \frac{1}{2} \cdot \sum_{\lambda = \pm 1} (|s_{\kappa, \kappa + \lambda}| + s_{\kappa, \kappa + \lambda})$$

beschreibt den gesamten Laugenausgangsstrom aus dem Block κ . Er unterscheidet sich von dem, der in den Block hineingeht gerade durch den Konvergenzstrom s_{κ}^K des Blocks κ . Damit ist s_{κ}^{out} aber stets kleiner oder höchstens gleich dem Ausgangsstrom aus dem ganzen Segment, d.h.

$$s_{\kappa}^{\text{out}} \leq \frac{1}{2} \cdot \sum_j (|S_{i,j}| + S_{i,j}). \quad (205)$$

Für einen durch Advektion dominierten Schadstofftransport reicht es daher, für

$$\delta t_{\text{max}} = \Delta t_{\text{max}} / (2k(i) + 1) \quad (206)$$

zu setzen. Für einen durch Diffusion und Dispersion dominierten Schadstofftransport müßte

$$\delta t_{\text{max}} = \Delta t_{\text{max}} / (2k(i) + 1)^2 \quad (207)$$

genommen werden (vgl. 124 und 199). Da jedoch zugleich unter der Voraussetzung $\partial c / \partial x = \text{const.}$

$$|c_{\kappa} - c_{\kappa + \lambda}| \approx \frac{|c_i - c_j|}{2k(i) + 1} \text{ mit } \lambda = \pm 1$$

ist, reicht es in den meisten Fällen aus, die segmentinterne Schrittweite nach 206 zu bestimmen. Gegebenenfalls muß durch den Parameter γ_{CN} in 203 die Schrittweite verkleinert werden.

Der Schadstofftransport durch die Grenzfläche zweier Segmente muß in dem Fall, daß innerhalb eines der Segmente mit der kleineren Schrittweite δt gerechnet wird, wie folgt modifiziert werden:

Anstelle der Konzentrationen c_i und/oder c_j in den Gleichungen 114, 123, 154 und 168 bzw. 115, 125, 157 und 169 treten über den Zeitschritt Δt gemittelte Konzentrationen $c_{k(i)}$ und $c_{-k(i)}$ in den Randblöcken und evtl. c_0 im mittleren Block, wobei

$$\bar{c}_{\pm k(i)} = \frac{\sum_{\text{Zeitschritte } \delta t} (c_{\pm k(i)} \cdot \delta t)}{\Delta t} \quad (208)$$

und

$$\bar{c}_0 = \frac{\sum \text{Zeitschritte } \delta t (c_0 \cdot \delta t)}{\Delta t} \quad (209)$$

gilt.

Der Schadstofftransport zwischen einzelnen Segmenten wird jeweils mit der Schrittweite Δt gerechnet, wie sie sich aus der im Kapitel 2.2 beschriebenen Zeitschrittsteuerung ergibt. Die Zeitschrittweite δt wird nur für segmentinterne Berechnungen berücksichtigt.

5 Testfälle

In den folgenden Kapiteln werden die Testfälle beschrieben, mit denen das Programm **Lopos2** verifiziert wurde. Der erste Testfall befaßt sich mit dem Vergleich der mit **Lopos2** erzielten Ergebnisse eines einfachen Transportvorgangs und der zugehörigen analytischen Lösung. Die Beschreibung dieses Testfalls erfolgt in Kapitel 5.1.

Die zweite Testfallgruppe befaßt sich mit der Mobilisierung der Radionuklide aus unterschiedlich konditionierten Abfällen. Hierbei erfolgt der Vergleich der Ergebnisse mit denjenigen, die mit dem Programm **Repos6** [16] erzielt wurden. Die Testfälle werden im Kapitel 5.2.1 beschrieben, die Diskussion der Ergebnisse erfolgt im Kapitel 5.2.2.

Die dritte Testfallgruppe befaßt sich mit der segmentinternen Diskretisierung zur genaueren Berechnung des Nuklidtransports durch lange versetzte Strecken. Die Ergebnisse werden mit denen verglichen, die man bei einer expliziten Diskretisierung, d.h. Unterteilung der Strecke in einzelne Segmente, erhält. Die Testfälle werden im Kapitel 5.3.1 beschrieben, der Vergleich der Ergebnisse erfolgt im Kapitel 5.3.2.

Die vierte Testfallgruppe befaßt sich mit der Modellierung von netzartig verknüpften Grubengebäudestrukturen. Die Modellannahmen werden im Kapitel 5.4.1 beschrieben und die Ergebnisse in Kapitel 5.4.2 diskutiert.

5.1 Vergleich mit analytischer Lösung. Schadstofftransport in einer horizontalen, versetzten Strecke

Zur Verifizierung des Programms **Lopos2** wird zunächst ein Testfall herangezogen, der einen Vergleich mit einer analytischen Lösung erlaubt. Dazu wird eine Rechnung zum eindimensionalen Schadstofftransport unter Berücksichtigung verschiedener Transportmechanismen durchgeführt. Die mit **Lopos2** errechneten Konzentrationsverteilungen werden den analytischen Lösungen gegenübergestellt.

Es wird der eindimensionale Schadstofftransport durch eine mit Lauge gefüllte, horizontal angeordnete, versetzte Strecke mit einer zeitlich konstanten Permeabilität von

$k = 10^{-12} \text{ m}^2$ und einer zeitlich konstanten Porosität von $\phi = 0,3$ untersucht. Für die Höhe und die Breite der Strecke wird jeweils ein Wert von $B = H = 4 \text{ m}$ angenommen. Die Länge der Strecke beträgt $L = 500 \text{ m}$.

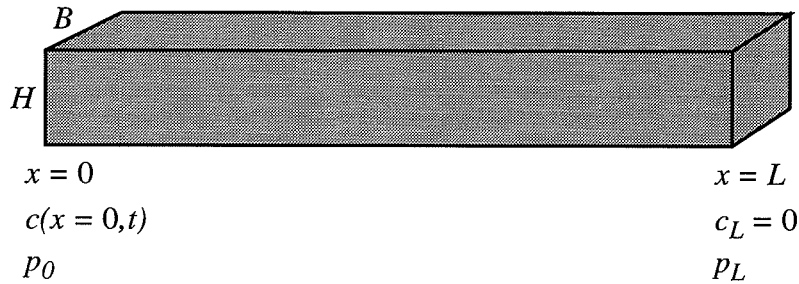


Abb. 5.1: Skizze der horizontalen Strecke mit Angabe der Randbedingungen.

Anfangs befindet sich kein Schadstoff in der Strecke. Er wird vielmehr über den linken Rand bei $x = 0$ eingebracht, indem dort eine Schadstoffkonzentration $c(x = 0, t)$ aufgebracht wird. Auf dem rechten Rand bei $x = L$ betrage die Schadstoffkonzentration für alle Zeiten $c_L = 0$. Als Transportmechanismen werden Advektion, Dispersion und Diffusion unter Berücksichtigung des Schadstoffabbaus aufgrund von Zerfall in der Strecke betrachtet. Auch auf dem linken Rand wird der Abbau der Schadstoffkonzentration aufgrund des Schadstoffzerfalls berücksichtigt.

Für die Advektion, d.h. für die Strömung der Lauge infolge eines erzwungenen Druckgradienten, wird auf dem rechten Rand für alle Zeiten der Laugendruck $p_L = 0 \text{ MPa}$ angenommen. Am linken Rand wird die Druckbedingung $p_0 = 1,902587 \cdot 10^{-3} \text{ MPa}$ vorgegeben, so daß sich eine Laugenströmung mit einer konstanten Abstandsgeschwindigkeit von $u = 0,2 \text{ m/a}$ von links nach rechts einstellt. Für die Diffusion wird ein Diffusionskoeffizient $d = 3,1536 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2/\text{a}$ und für die Dispersion eine Dispersionslänge von $\beta = 10 \text{ m}$ zugrundegelegt. Beim Zerfall des Schadstoffs wird von einer Zerfallskonstanten $\lambda = 6,9316 \cdot 10^{-4} \text{ a}^{-1}$, entsprechend einer Halbwertszeit von eintausend Jahren, ausgegangen. Die anfängliche Konzentration betrage c_0 , so daß sich als Konzentrationsrandbedingung

$$c(x = 0, t) = c_0 e^{-\lambda t} \quad (210)$$

ergibt.

5.1.1 Analytische Lösung

Die Transportgleichung für den Schadstoff in der Strecke lautet:

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - u \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda c = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (211)$$

mit der Abkürzung

$$D = d + \beta |u|$$

und den Bedeutungen:

$c(x,t)$ Schadstoffkonzentration am Ort x und zur Zeit t in der Lauge,

d Diffusionskoeffizient,

β Dispersionslänge,

u Abstandsgeschwindigkeit und

λ Zerfallskonstante des Schadstoffs.

Die analytische Lösung unter den Randbedingungen

$$\begin{aligned} c(x = 0, t) &= c_0 e^{-\lambda t} \\ c(x = L, t) &= 0 \end{aligned} \quad (212)$$

und der Anfangsbedingung

$$c(x, t = 0) = 0 \quad (213)$$

ist gegeben durch

$$c(x, t) = c_0 e^{\frac{u}{2D}x} \left[e^{vt} \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\kappa}{k(v + \lambda - \kappa)} e^{-\kappa t} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) \right) \right. \quad (214)$$

$$\left. + e^{-\lambda t} \frac{\sinh\left(\sqrt{\frac{-(v + \lambda)}{D}}(L - x)\right)}{\sinh\left(\sqrt{\frac{-(v + \lambda)}{D}}L\right)} \right]$$

mit

$$D = d + \beta|u|$$

$$\kappa = \frac{Dk^2\pi^2}{L^2}$$

$$v = -\lambda - \frac{u^2}{4D}$$

5.1.2 Modellierung des Testfalls mit Lopos2

Für die numerischen Berechnungen mit **Lopos2** werden die Modellannahmen für die Laugenströmung und den Schadstofftransport durch eine versetzte Strecke unterstellt, wie sie in Kapitel 4 beschrieben sind. Für die versetzte Strecke wird das Segmentmodell KSQN1 eingesetzt. In der Rechnung werden der jeweilige Laugendruck und die Schadstoffkonzentration an den Rändern vorgegeben. Hierzu wird das spezielle Segmentmodell RSQN1 verwendet. Die Strecke wird in 100 äquidistante Teile der Länge $\Delta x = 5$ m aufgeteilt.

5.1.3 Ergebnisse des Testfalls

Die mit **Lopos2** numerisch berechneten Konzentrationsverteilungen werden zu ausgewählten Zeitpunkten mit der jeweiligen analytischen Lösung verglichen. Die gewählten Zeitpunkte sind 1000 Jahre, 2000 Jahre, 3000 Jahre und 4000 Jahre.

Die berechneten Konzentrationsverteilungen sind für die gewählte örtliche Diskretisierung in Abbildung 5.2 der analytischen Lösung gegenübergestellt. Die Ergebnisse von **Lopos2** stimmen sehr gut mit der analytischen Lösung überein. Die geringen Abweichungen sind durch die numerische Dispersion aus der Zeit- und Ortsdiskretisierung verursacht. Die numerische Dispersion läßt sich mit Hilfe der Peclet-Zahl Pe

$$Pe = \frac{u \Delta x}{D} \quad (215)$$

beschreiben. Bei einer Peclet-Zahl gleich zwei ist die Größe der numerischen Dispersion gleich der physikalischen. Für Peclet-Zahlen kleiner als zwei ist die numerische Disper-

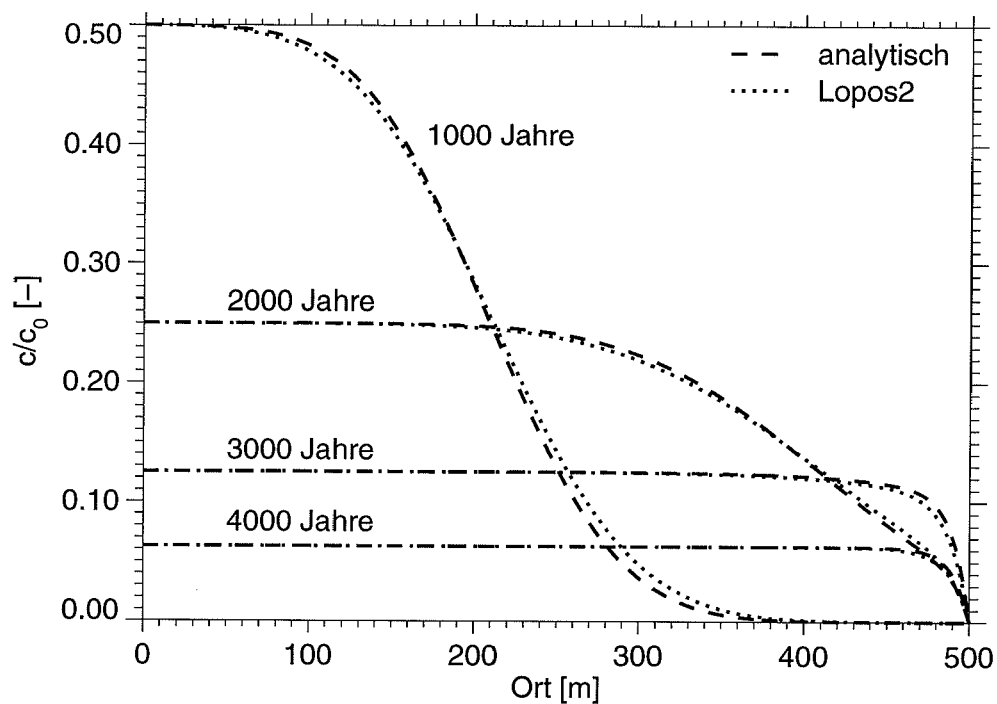


Abb. 5.2: Konzentrationsverteilungen über die Strecke

sion kleiner als die physikalische. Durch eine geeignete Wahl der Zeitschrittweite oder mittels einer feineren örtlichen Diskretisierung kann die numerische Dispersion verringert werden. Bei der gewählten örtlichen Diskretisierung ergibt sich eine Peclet-Zahl von 0,5, so daß die physikalische Dispersion größer als die numerische Dispersion ist und die Diskretisierung als ausreichend angesehen werden kann.

5.1.4 Zusammenfassung

Der mit **Lopos2** berechnete Schadstofftransport durch eine versetzte Strecke unter Berücksichtigung von Advektion, Dispersion und Diffusion sowie des Schadstoffzerfalls wurde mit der analytischen Lösung verglichen. Dabei wurden die Konzentrationsverteilungen entlang der Strecke zu verschiedenen Zeitpunkten gegenübergestellt. Die Ergebnisse stimmen sehr gut überein, so daß der mit **Lopos2** berechnete Schadstofftransport durch die versetzte Strecke anhand der analytischen Lösung verifiziert werden konnte.

5.2 Radionuklidmobilisierung aus unterschiedlich konditionierten Abfällen

5.2.1 Beschreibung der Testfälle

Im folgenden werden die Behälterkorrosion und die Radionuklidmobilisierung in den Einlagerungssegmenten mit Hilfe der Programme BEHAU2 und UNIMOB1 des Programms **Lopos2** berechnet und mit Ergebnissen verglichen, die mit den Mobilisierungsmodellen MOBZ6 und MOBG5 des Programms **Repos6** bestimmt wurden. Berechnet wird jeweils das aktuell mobilisierte Inventar und der Radionuklidstrom aus den Einlagerungsbereichen

- MAW-Kammer,
- HAW-Bohrloch,
- MAW-Bohrloch,
- LWR-Einlagerungsstrecke.

Diese Einlagerungsbereiche befinden sich in einem vereinfachten Grubengebäude bestehend aus einer Kammer, einem Bohrloch bzw. einer Strecke, einer mit Salzgrus versetzten Strecke und einem Damm, über den die Freisetzung aus den Endlager erfolgt (siehe Abbildungen 5.3 und 5.4). Zur Vereinfachung wird angenommen, daß das Grubengebäude instantan mit Lauge gefüllt ist, so daß die Behälterkorrosion und die Radionuklidfreisetzung unmittelbar beginnen können.

Für die Einlagerungskammer und die Einlagerungsstrecke werden das Segmentmodell EKQV2 (**Lopos2**) bzw. die Segmentmodelle KAMAW1 und ESALG1 (**Repos6**), für die Bohrlöcher die Segmentmodelle EBQV2 (**Lopos2**) bzw. BOALG1 (**Repos6**) verwendet.

Im Programm **Lopos2** werden die versetzte Strecke und der Damm als zwei Segmente modelliert. Die verwendeten Segmentmodelle sind VSQK1 und IQQN1. Im Programm **Repos6** sind die versetzte Strecke und der Damm ein Segment, für das das Modell SGMIF2 des Mittelfeldes zur Anwendung kommt.

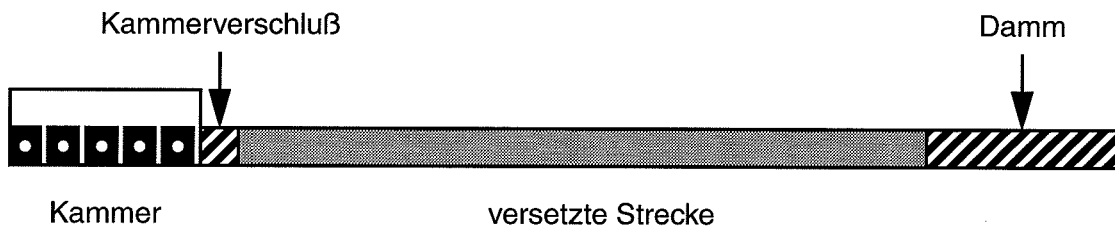


Abb. 5.3: Einfaches Grubengebäude: Kammer-Strecke-Damm

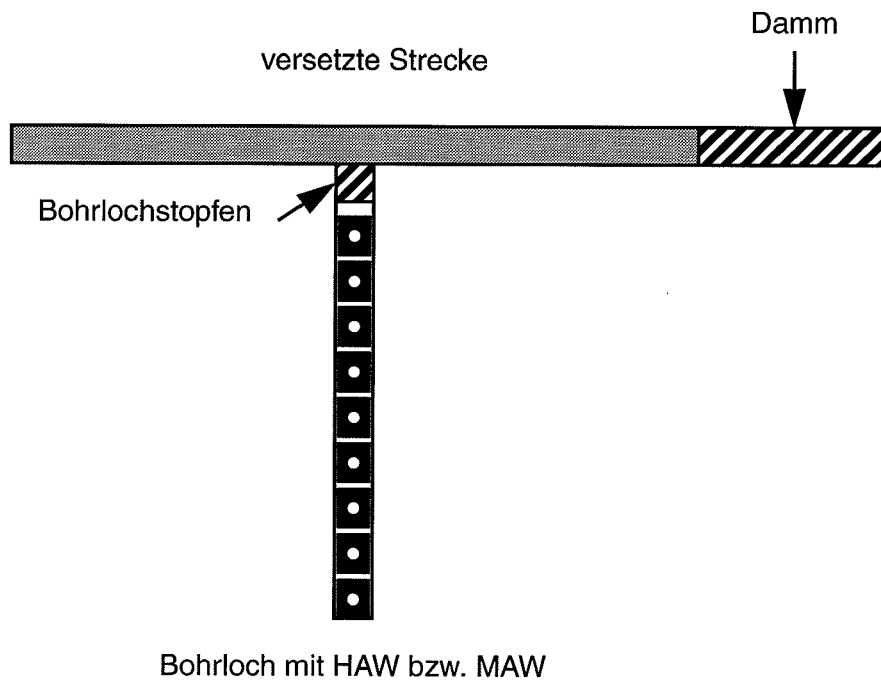


Abb. 5.4: Einfaches Grubengebäude: Bohrloch-Strecke-Damm

5.2.2 Ergebnisse der Vergleichsrechnungen

5.2.2.1 Mobilisierung von zementiertem MAW in Kammern

Abbildung 5.5 zeigt am Beispiel von J-129 das mobilisierte Inventar und die Radionuklidfreisetzung aus der MAW-Kammer, berechnet mit **Lopos2**. Im Vergleich hierzu zeigt Abbildung 5.6 die entsprechenden Ergebnisse von **Repos6**. In beiden Fällen wird eine Re-

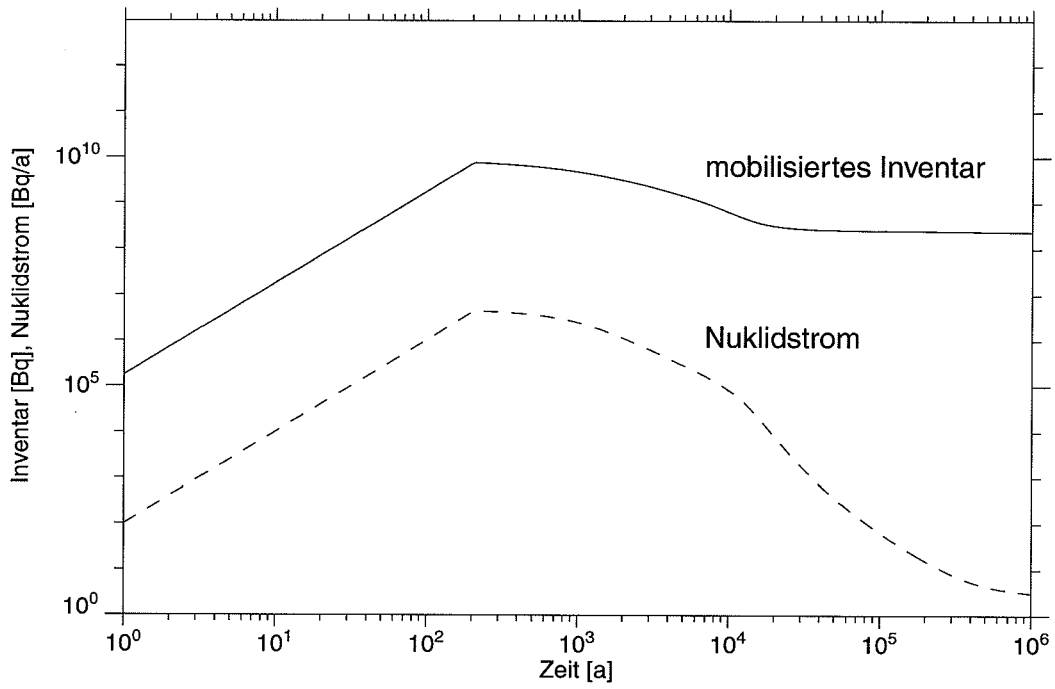


Abb. 5.5: Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Kammer, **Lopos2**)

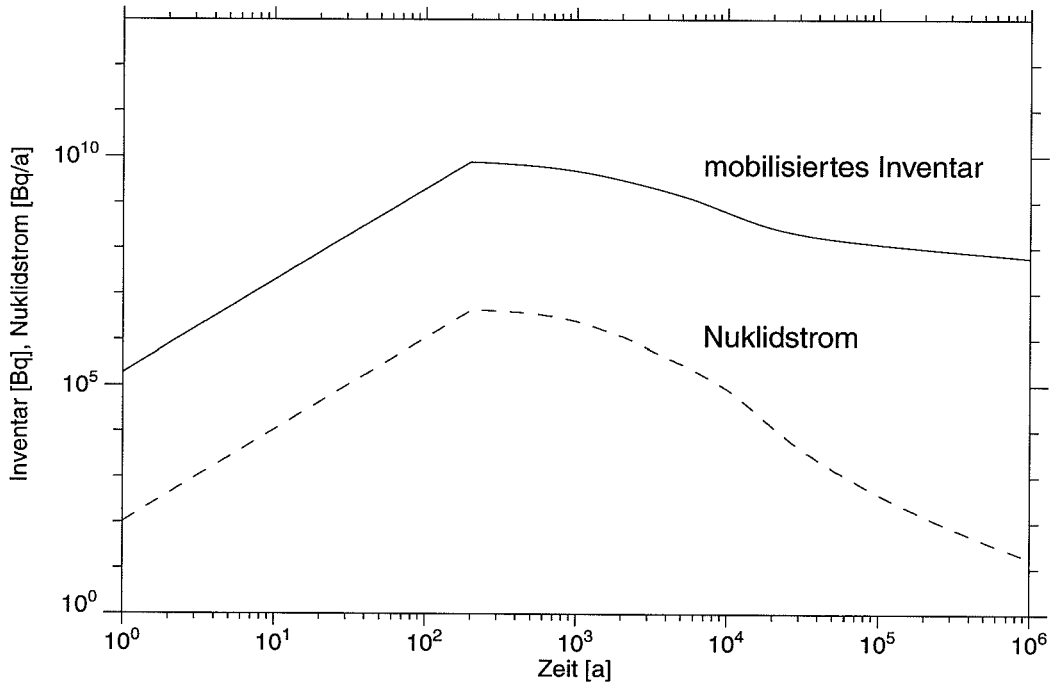


Abb. 5.6: Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Kammer, **Repos6**)

ferenzkonvergenzrate von $0,01 \text{ a}^{-1}$ angenommen, Über die ersten 10^4 Jahre stimmen die Zeitverläufe überein. Danach gibt es zunehmende, geringe Abweichungen, die durch den unterschiedlichen Verlauf der Laugenfreisetzung bestimmt sind (siehe als Beispiel Abbildung 5.7). Dieser Effekt beruht auf der unterschiedlichen Modellierung des Strömungswiderstandes der Kammer. In **Repos6** wird dieser Strömungswiderstand des Kammerinhalts, d.h. der eingelagerten Abfälle, gegenüber dem des Verschlusses vernachlässigt. In **Lopos2** wird in jedem Fall der Strömungswiderstand der eingelagerten Abfälle, die wie poröses Material mit einer mittleren Porosität von Hohlraumvolumen dividiert durch Gesamtvolumen modelliert werden, und gegebenenfalls des Kammerversatzes berücksichtigt. Für große Zeiten zeigt sich eine Abweichung wegen der fortgeschrittenen Kompaktion der Abfälle und des Versatzes in den Einlagerungssegmenten.

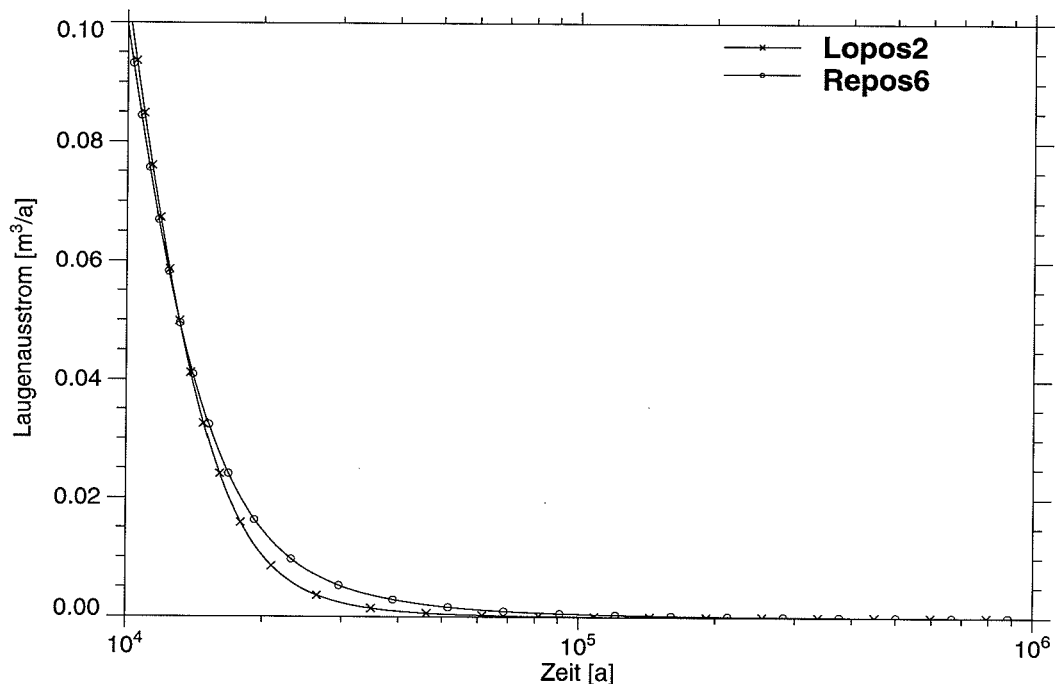


Abb. 5.7: Zeitverlauf der Laugenfreisetzung aus der MAW-Kammer

Die Unterschiede in der Modellierung der Diffusion ergeben bei dem vorliegenden einfachen Grubengebäudemodell mit einer langen, nicht weiter diskretisierten versetzten Strecke ebenfalls Unterschiede in der Schadstofffreisetzung. Bei **Lopos** wird der Gradient der Schadstoffkonzentration über den Abstand der Segmentmittelpunkte berechnet. In der **Repos**-Modellierung fällt die Konzentration nur über den Verschluss der Einlage-

rungsstrecke auf die mittlere Konzentration in der versetzten Strecke ab, bei der groben Diskretisierung ist der Gradient größer als im **Lopos**-Fall.

5.2.2.2 Mobilisierung von verglastem HAW in Bohrlöchern

Für ein Einlagerungsbohrloch mit HAW sind die Ergebnisse ähnlich wie für MAW. Die Abbildungen 5.8 und 5.9 zeigen die entsprechenden Ergebnisse anhand von CS-135. Auch hier gibt es Abweichungen für Zeiten größer als $3 \cdot 10^3$ Jahre. Die Begründung ist ähnlich wie im Fall der Kammer. Ein deutlicher Unterschied in der Freisetzung beruht darauf, daß im Fall **Repos6** der Stopfen des Bohrlochs nach ca. 14 000 Jahren die Endporosität erreicht, während im Fall **Lopos2** erst nach 580 000 Jahren der Abfall im Bohrloch Endporosität erreicht. Dieser Unterschied beruht auf der Modellierung der Konvergenz im Bohrlochstopfen. In **Lopos2** wird im Stopfen der gleiche Druck angenommen wie im Bohrloch, während in **Repos6** der Druck im Stopfen als Mittelwert zwischen Druck im Bohrloch und Druck in der Strecke angesetzt wird. Aufgrund des somit geringeren Drucks im Stopfen kompaktiert dieser schneller.

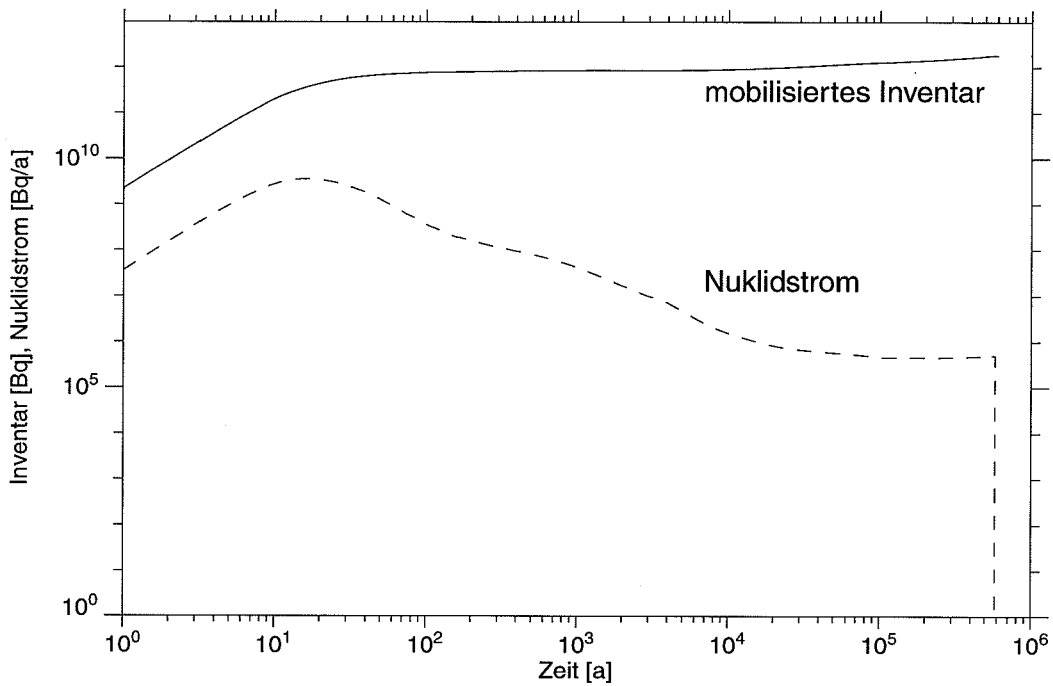


Abb. 5.8: Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (HAW-Bohrloch, **Lopos2**)

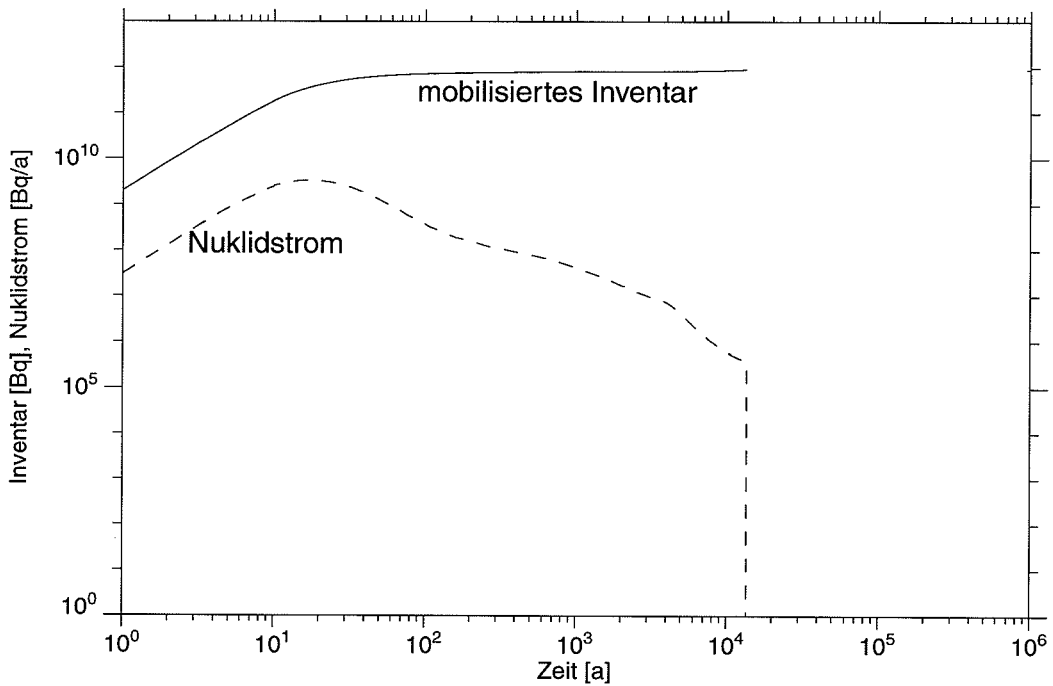


Abb. 5.9: Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (HAW-Bohrloch, **Repos6**)

5.2.2.3 Mobilisierung von zementiertem MAW in Bohrlöchern

Die Abbildungen 5.10 und 5.11 zeigen die Ergebnisse für ein MAW-Bohrloch am Beispiel des Nuklids CS-135. Die Abweichungen für Zeiten größer als 10^4 Jahren beruhen auf den bereits genannten unterschiedlichen Modellierungen.

In jedem der betrachteten Fälle stimmen die Zeitverläufe für Behälterausfall und Mobilisierung überein, Unterschiede treten allein aufgrund der abweichenden Modellierung der Laugenbewegung auf.

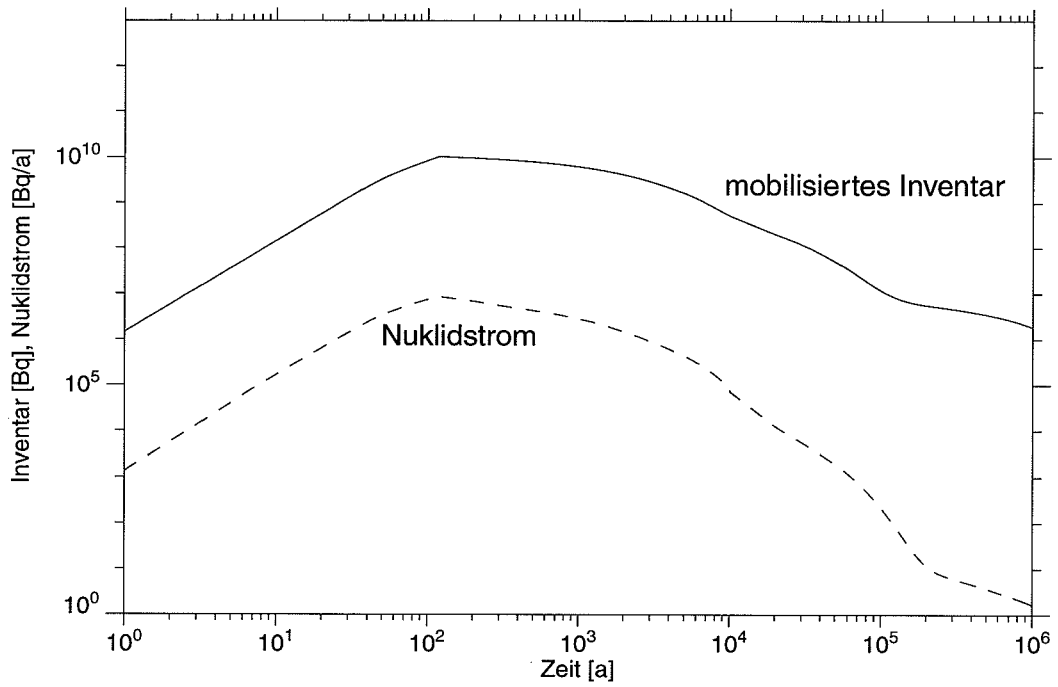


Abb. 5.10: Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Bohrloch, **Lopos2**)

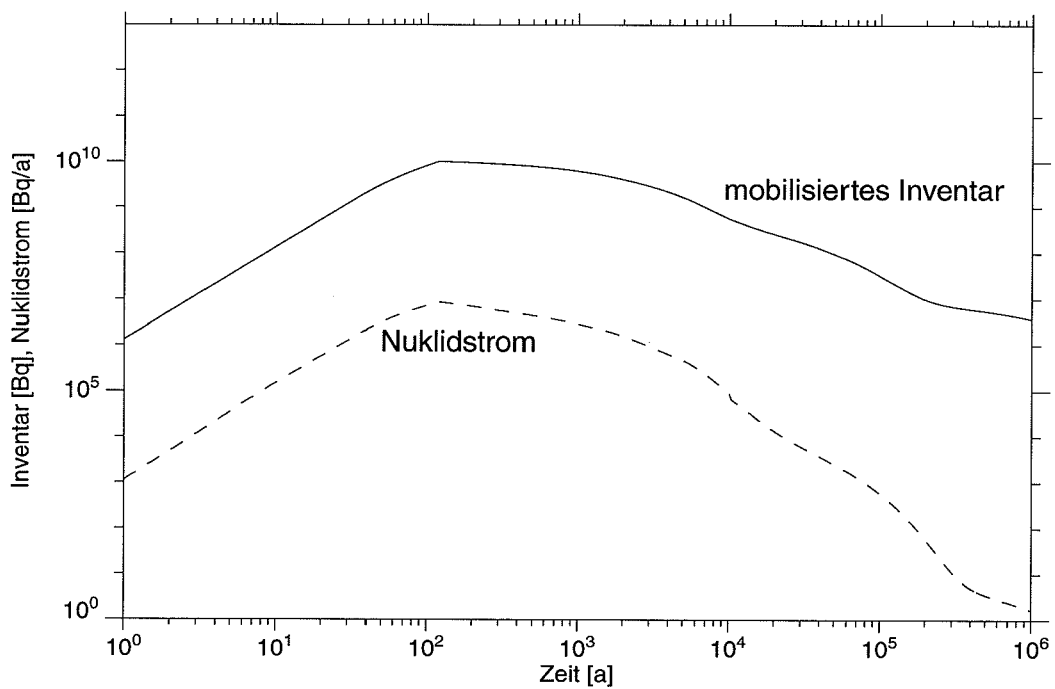


Abb. 5.11: Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Bohrloch, **Repos6**)

5.2.2.4 Mobilisierung aus abgebrannten LWR-Brennelementen in Strecken

Für den Fall der Mobilisierung aus abgebrannten LWR-Brennelementen wird zum besseren Vergleich der Ergebnisse von **Lopos** und **Repos** die Konvergenzrate in der Kammer und den Strecken auf Null gesetzt. Außerdem wird die Diffusionskonstante auf Null gesetzt. In diesem Fall gibt es keine Freisetzung aus dem Einlagerungssegment, und die Ergebnisse zeigen für das Einlagerungssegment nur das jeweils mobilisierte Inventar. Wie bereits bei den vorangehenden Vergleichsfällen würde die Berücksichtigung der Konvergenz und der Diffusion wegen der unterschiedlichen Modellierung der Strömungswiderstände bzw. des Konzentrationsgradienten Unterschiede in der Schadstofffreisetzung und damit auch Unterschiede im jeweils aktuell im Einlagerungsbereich vorhandenen Inventar ergeben.

Abbildung 5.12 zeigt das aktuell mobilisierte Inventar in der Einlagerungsstrecke. In den ersten ca. 1000 Jahren wird der Zeitverlauf durch den Behälterausfall und die Mobilisierung aus den unterschiedlichen Bereichen des Abfalls bestimmt. Kohlenstoff C-14 ist nur

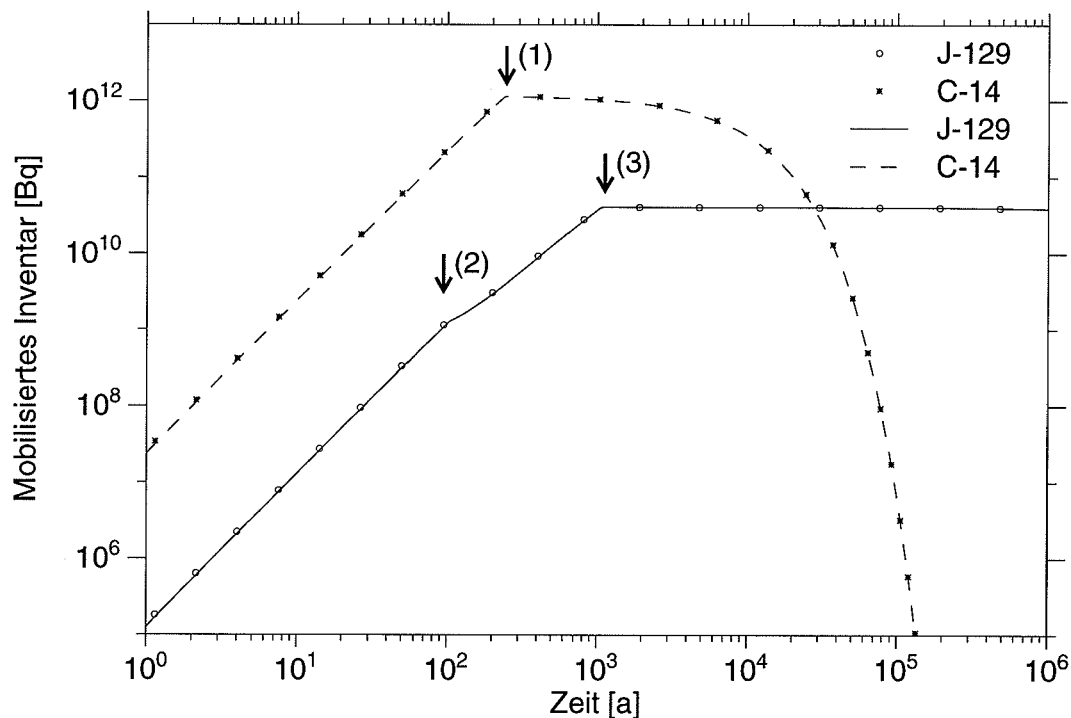


Abb. 5.12: Mobilisiertes Inventar von C-14 und J-129 in der Einlagerungsstrecke
Symbole: Ergebnisse von **Lopos**, Linien: Ergebnisse von **Repos**

in den Metallteilen vorhanden. Die Anteilfaktoren für C-14 sind 1 für Bereich 1 (Metallteile) und 0 für die anderen Bereiche, die Anteilfaktoren für Jod J-129 sind 0 für den Bereich 1 und 0,015 für den Bereich 2 (Gasraum) bzw. 0,985 für den Bereich 3 (Brennstoffmatrix). Die schnelle Mobilisierung aus dem Gasraum ist bereits nach 100 Jahren (2), die aus den Metallteilen nach ca. 250 Jahren (1) abgeschlossen, während die langsamere Mobilisierung aus der Brennstoffmatrix ca. 1070 Jahre (3) andauert. Danach wird das aktuell vorhandene Inventar wegen fehlender Freisetzung ausschließlich durch den radioaktiven Zerfall bestimmt, wodurch sich bei J-129 kaum eine Veränderung zeigt, während das Inventar von C-14 deutlich abnimmt.

Unterschiede in den Ergebnissen von **Lopos2** und **Repos6** sind im vorliegenden Fall, d.h. ohne Konvergenz und ohne Diffusion, nicht vorhanden.

5.3 Laugen- und Nuklidtransport bei segmentintern diskretisierten langen Strecken

Zur genauen Beschreibung des Schadstofftransports durch lange versetzte Strecken ist es erforderlich, diese in genügend kurze Teilstücke, Blöcke genannt, zu unterteilen. Die Modellierung des Schadstofftransports durch eine solche unterteilte Strecke ist im Kapitel 4.7 beschrieben. Im folgenden wird der Schadstofftransport anhand eines einfachen Beispiels untersucht.

5.3.1 Beschreibung der Testfälle

Die im folgenden aufgeführten einfachen Grubengebäudestrukturen werden zum Test der räumlichen Diskretisierung verwendet. Die nachfolgend beschriebenen Tests untersuchen den Radionuklidtransport aus einer Einlagerungskammer mit MAW-Abfällen durch eine versetzte Strecke in ein Ausgangssegment. Das Ausgangssegment stellt z.B. die Verbindung des Streckensystems zum Deckgebirge dar und legt die Randbedingungen für das Segmentssystem fest, wie anstehender hydrostatischer Laugendruck und Radionuklidkonzentration außerhalb des Segmentensystems. Die versetzte Strecke mit einem Querschnitt von 36 m^2 und einer Länge von 500 m wird zum einen so geteilt, daß die

Laugenbewegung die Strecke als ein Segment erfährt, während der Nuklidtransport in der Strecke diskret in mehreren Blöcken gerechnet wird. Dieser Fall wird im folgenden "Test der segmentinternen Diskretisierung" oder kurz "Testfall" genannt. Zum anderen wird die Strecke in entsprechend viele getrennte Segmente unterteilt. Dieser Fall wird im folgenden "Vergleichsfall mit expliziter Diskretisierung" oder kurz "Vergleichsfall" genannt.

Als erster Test wird die interne Diskretisierung so weit verfeinert, bis sich die Schadstofffreisetzung aus dem Grubengebäude mit zunehmender Verfeinerung nur noch wenig ändert. In weiteren Testfällen wird die interne Diskretisierung mit einer entsprechenden expliziten Diskretisierung verglichen. Hierbei wird der Radionuklidtransport durch die versetzte Strecke mit Konvergenz und Kompaktion des Versatzes zum anderen ohne Konvergenz gerechnet. Der Antrieb für den advektiven Schadstofftransport ist in jedem Fall die Konvergenz der Einlagerungskammer. Außerdem werden in jedem Segment der diffusive und der dispersive Schadstofftransport berücksichtigt. Weitere konvektive Transportmechanismen z.B. aufgrund von Dichtegradienten werden nicht betrachtet.

Im Einzelnen ergeben sich folgende Test- und Vergleichsfälle:

Fall 1: Kammer, unterteilte versetzte Strecke, Ausgangssegment, Anordnung wie in Abbildung 5.13, ohne Konvergenz.

Interne Diskretisierung der Strecke CD in 1, 9, 17, 25, 33, 41 und 49 Blöcke.

Fall 2a: Kammer, unterteilte versetzte Strecke (25 Blöcke) bzw. 25 Streckensegmente, Ausgangssegment, Anordnung wie in Abbildung 5.13 bzw. 5.14, ohne Konvergenz.

Fall 2b: Kammer, unterteilte versetzte Strecke (25 Blöcke) bzw. 25 Streckensegmente, Ausgangssegment, Anordnung wie in Abbildung 5.13 bzw. 5.14, mit Konvergenz.

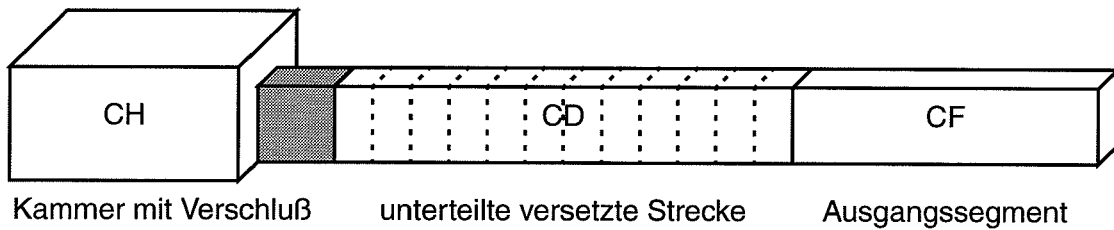


Abb. 5.13: Anordnung der Segmente für die Testfälle 1, 2a und 2b

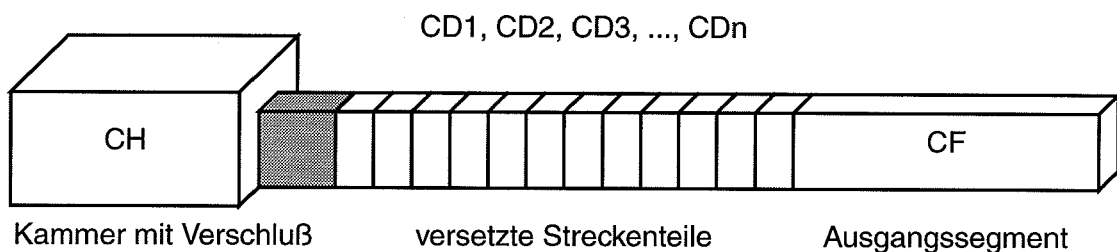


Abb. 5.14: Anordnung der Segmente für die Vergleichsfälle 2a und 2b

5.3.2 Ergebnisse der Testrechnungen, Fall 1

Im Testfall 1 wird die Verzögerung des Schadstofftransports für das Radionuklid J-129 in einer versetzten Strecke untersucht. Es zeigt sich, daß eine genügend genaue räumliche Diskretisierung dieser Strecke erforderlich ist, um den Schadstofftransport realitätsnah zu beschreiben. Abbildung 5.15 zeigt den Schadstoffstrom aus dem Grubengebäude, d.h. aus dem Ausgangssegment CF, für Diskretisierungen der Strecke CD in 1, 9, 17, 25, 33, 41 und 49 Blöcke. Bei einer Diskretisierung größer als 25 Blöcke ändert sich der Anstieg der Schadstofffreisetzung nur noch wenig. Nach Überschreiten des Maximalwertes des Schadstoffstroms ist ein Unterschied in den Ergebnissen nur gegenüber der nicht unterteilten Strecke (Unterteilung 1) festzustellen. Der Schadstoffstrom liegt wegen der anfänglich größeren Freisetzung dann unter dem der unterteilten Strecke.

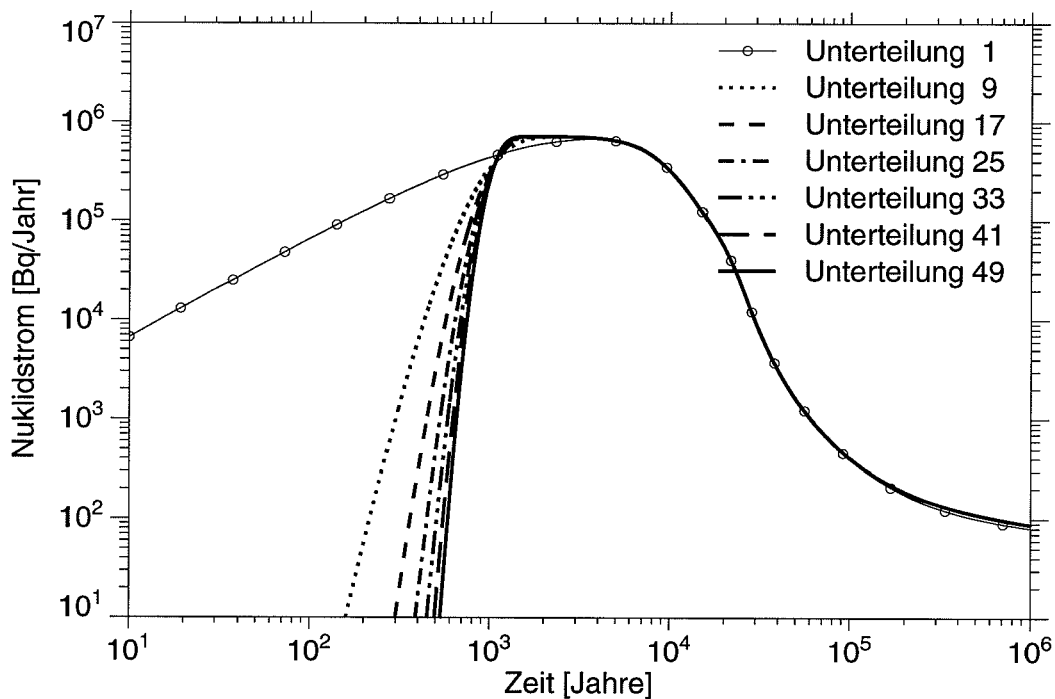


Abb. 5.15: Nuklidstrom von J-129 aus einem Grubengebäude mit einer in 1, 9, 17, 25, 33, 41 bzw. 49 Blöcke unterteilten versetzten Strecke

Abbildung 5.16 zeigt die zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentration von J-129 entlang der in 25 Blöcke unterteilten Strecke für die Zeitpunkte 100, 300, 500, 700, 900, 1100, 1300, 1500 und 1700 Jahre. Nach ca. 1700 Jahren ist die Konzentrationsfront durch die Strecke hindurchgewandert und in jedem Block der Strecke ist die Konzentration gleich. Die starke Aufweitung der Konzentrationsfront wird durch den diffusiven und den dispersiven Transport hervorgerufen. Die numerische Dispersion läßt sich abschätzen, wenn man das Ergebnis mit dem der Unterteilung in 49 Blöcke vergleicht (s. Abbildung 5.17). Im letzteren Fall ist die numerische Dispersion gering.

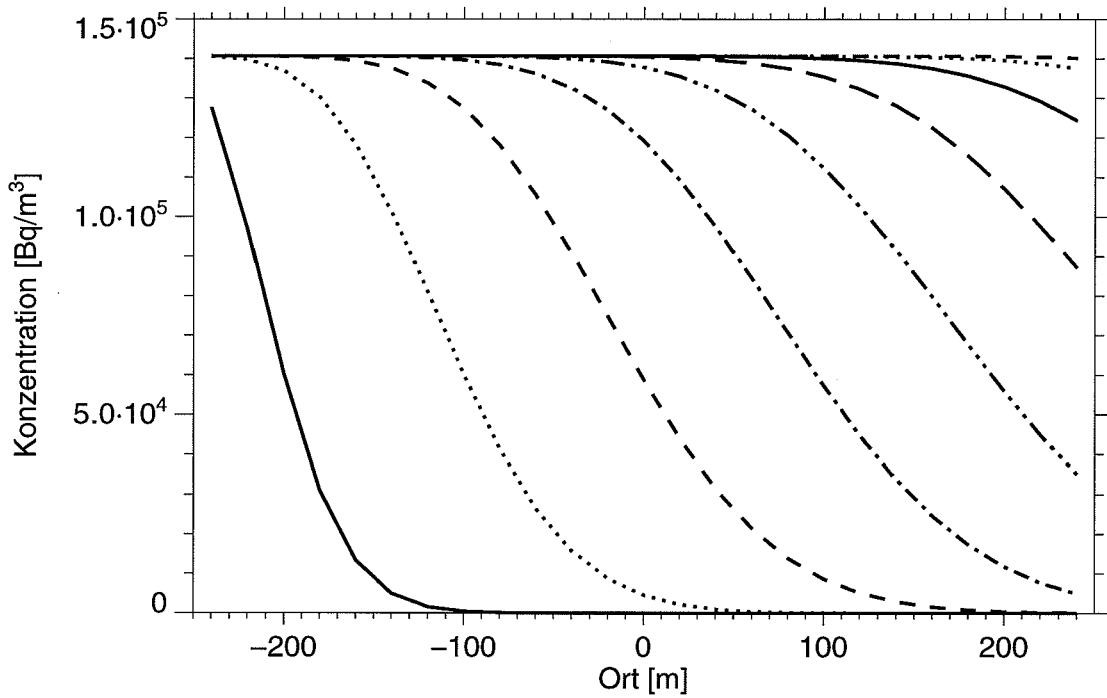


Abb. 5.16: Zeitliche Entwicklung der Konzentrationsfront von J-129 entlang der Strecke CD bei einer Unterteilung in 25 Blöcke

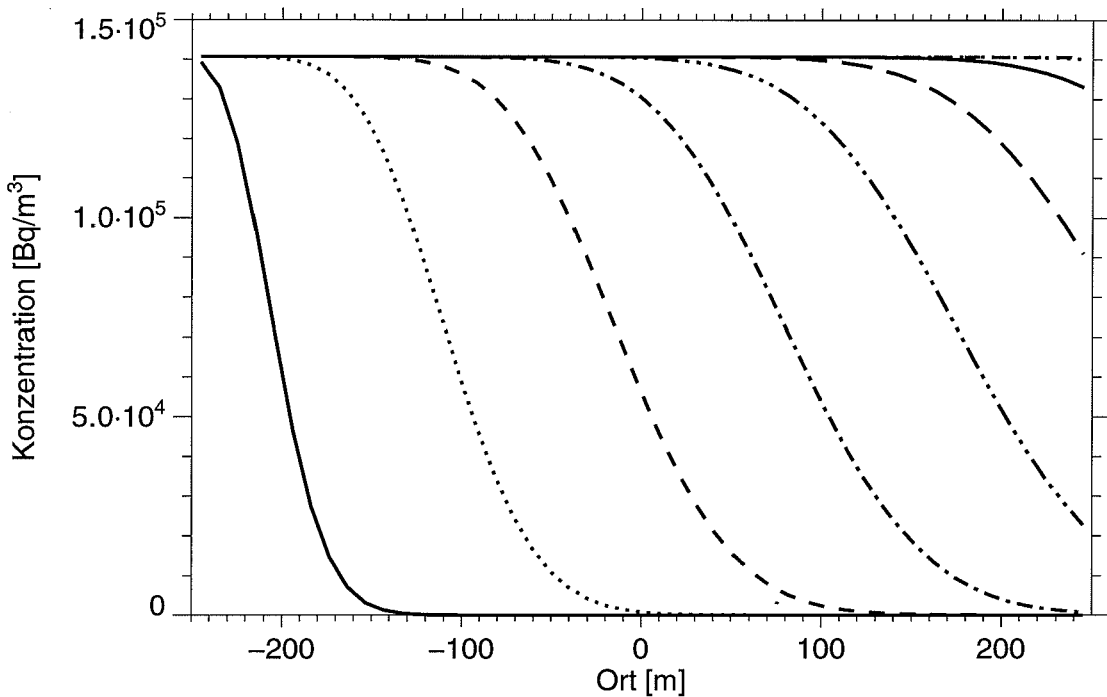


Abb. 5.17: Zeitliche Entwicklung der Konzentrationsfront von J-129 entlang der Strecke CD bei einer Unterteilung in 49 Blöcke

5.3.3 Ergebnisse der Testrechnungen, Fall 2

Im Testfall 2 wird der Schadstofftransport für das Radionuklid J-129 entlang der versetzten, in 25 Blöcke unterteilten Strecke verglichen mit dem Ergebnis für die durch 25 einzelne Segmente beschriebenen Strecke. Es zeigt sich, daß bei fehlender Konvergenz der Strecke die Ergebnisse genau übereinstimmen (Abbildung 5.18). Bei vorhandener Konvergenz in der Strecke weichen die Ergebnisse für große Zeiten voneinander ab (Abbildung 5.19). Der Grund hierfür liegt in der nichtlinearen Abhängigkeit der Konvergenzrate vom Laugendruck. Während bei der in Blöcke unterteilten Strecke ein und derselbe mittlere Druck in allen Blöcken angesetzt wird und damit der Querschnitt, die Permeabilität und der Strömungswiderstand in allen Blöcken gleich ist, ändern sich diese Größen in den einzelnen Segmenten der Strecke unterschiedlich. Aus einem anfangs linearen Druckabfall entwickelt sich daher mit der Zeit ein nichtlinearen Druckabfall entlang der Strecke, der entsprechend auf die Konvergenzrate zurückwirkt.

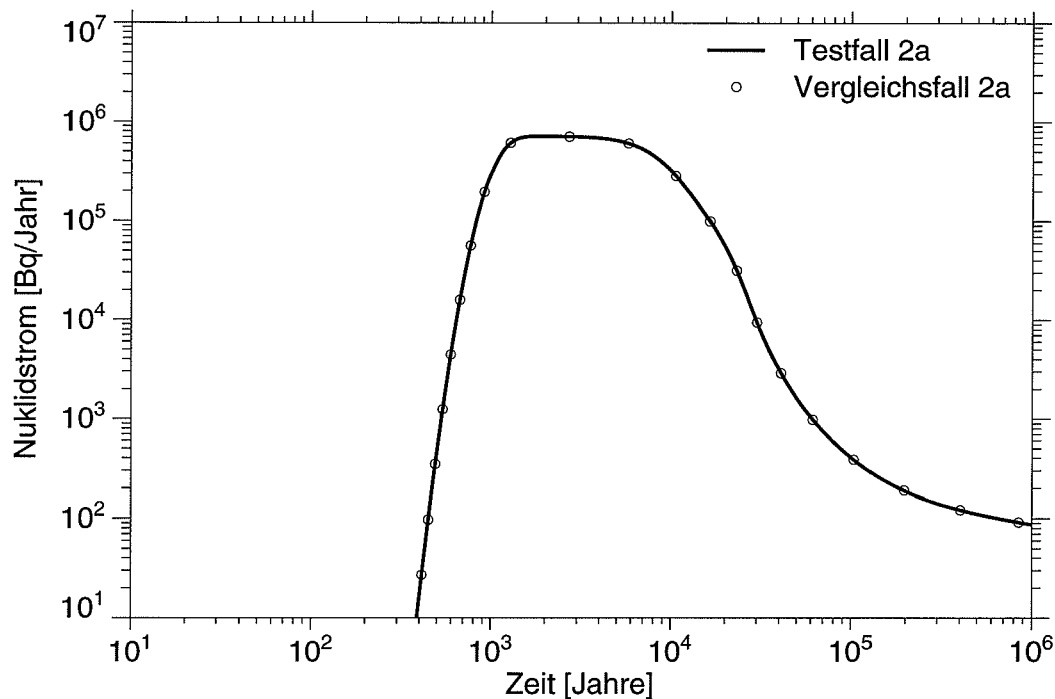


Abb. 5.18: Fall 2a: J-129-Nuklidstrom, keine Konvergenz in der unterteilten Strecke

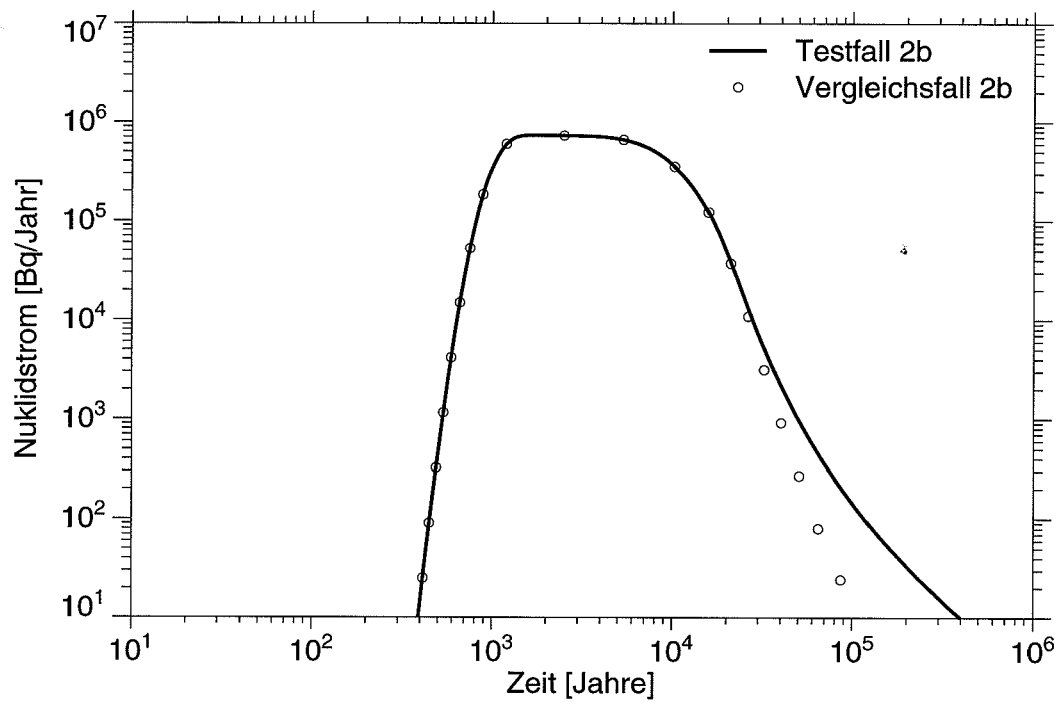


Abb. 5.19: Fall 2b: J-129-Nuklidstrom, mit Konvergenz in der unterteilten Strecke

5.4 Lösungs- und Schadstofftransport in einem Modellgrubengebäude mit einfacher Ringstruktur

5.4.1 Modellierung einer ringförmigen Segmentstruktur

Im folgenden wird das Programm **Lopos2** an einer einfachen Ringstruktur getestet. Hierzu wird das im Kapitel 2.3 in der Abbildung 2.7 angegebene Beispiel verwendet. Als Quelle für die Schadstoffe wird im Testfall 1 am Segment 14 eine Kammer angehängt (s. Abbildung 5.20), die mit dem Segmentmodell TKQK2 (s. Kapitel 3.2.1) beschrieben wird. Im Testfall 2 befindet sich diese Kammer am Segment 10. Im Testfall 1 sind die Wege für die Schadstoffe über die beiden Zweige des Rings gleich lang, im Testfall 2 sind sie unterschiedlich lang. Wegen des größeren Streckenstücks 6 steht für die Schadstoffe auf dem Weg rechts herum in beiden Fällen ein größeres Verdünnungspotential zur Verfügung.

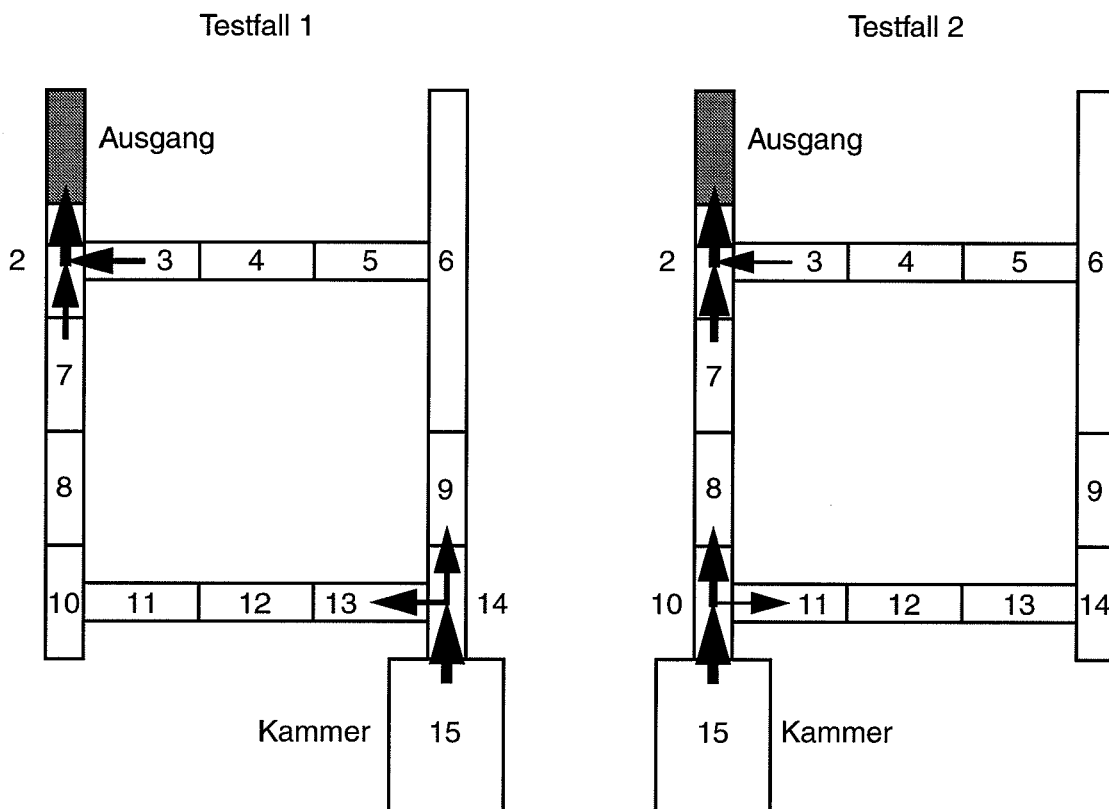


Abb. 5.20: Beispiel für ein ringförmiges Modellgrubengebäude

Testfall 1: Kammer (15) rechts

Testfall 2: Kammer (15) links

➔ : Laugenstrom

Als Schadstoff wird ein nicht radioaktives, d.h. nicht zerfallendes Element verwendet. Das gesamte eingelagerte Inventar beträgt 10^6 kg. Es wird unterstellt, daß dieses Inventar bei Lösungszutritt instantant mobilisiert wird. Das Volumen der versetzten Kammer beträgt $20\,000\text{ m}^3$, das Versatzmaterial einschließlich der Schadstoffe hat eine Porosität von 40%. Das gesamte Grubengebäude sei von Anfang an mit Lösung gefüllt, so daß die Lösungsfreisetzung aus dem Grubengebäude und die Schadstofffreisetzung aus der Einlagerungskammer sofort beginnen können.

Die Streckensegmente 2 bis 5 und 7 bis 14 haben alle die gleiche Abmessung (Höhe 6 m, Breite 6 m, Länge 50 m) und die gleiche Anfangsporosität des Versatzmaterials von 30%. Diese Segmente sind zur genaueren Beschreibung des Schadstofftransports intern in je 5 Blöcke unterteilt (vgl. interne Diskretisierung, Kapitel 4.7). Das Segment 6 ist dreimal so lang und daher intern in 15 Blöcke unterteilt. Alle Streckenstücke werden mit dem Modell VSQK1 (s. Kapitel 3.2.3) beschrieben. Die Strukturdaten im Kapitel 2.3.1 werden entsprechend der Position der Kammer angepaßt.

Im Testfall 1 wird Zeile 14 in

14 SEGMENT14	Y	0	9	0	13	15	0
--------------	---	---	---	---	----	----	---

geändert und die Zeile 15

15 KAMMER-R	Y	0	14	0	0	0	0
-------------	---	---	----	---	---	---	---

angefügt. Im Testfall 2 wird die Zeile 10 in

10 SEGMENT10	Y	11	8	0	0	15	0
--------------	---	----	---	---	---	----	---

geändert und die Zeile 15 nimmt die Form

15 KAMMER-L	Y	0	10	0	0	0	0
-------------	---	---	----	---	---	---	---

an.

Die Freisetzung der Schadstoffe aus dem Modellgrubengebäude erfolgt in beiden Testfällen aus dem Segment 1, das durch das Modell IQQN2 (s. Kapitel 3.2.6) beschrieben und mit Ausgang bezeichnet wird.

5.4.2 Ergebnisse

Für die vorgestellten Testfälle werden in den folgenden Kapiteln jeweils die Laugenströme an ausgewählten Stellen des Modellgrubengebäudes untersucht. Jeweils anschließend werden die Schadstoffströme an den entsprechenden Segmentausgängen dargestellt und diskutiert. Zur einfacheren Interpretation werden in den folgenden Berechnungen die Diffusionskonstante auf Null gesetzt und die Konvergenz in den Strecken unterdrückt. Die Anfangskonvergenzrate in der Kammer beträgt 1%/Jahr. Die numerische Dispersion läßt sich auch bei feiner Diskretisierung nicht vollständig vermeiden, daher wird auch die physikalische Dispersion nicht vernachlässigt.

5.4.2.1 Laugen- und Schadstoffströme im Testfall 1

Abbildung 5.21 zeigt die Laugenströme aus der Einlagerungskammer und aus dem benachbarten Streckenstück (Segment 14) sowie die in das Segment 2 über die zwei Wege hineinfließenden Ströme und den Laugenstrom aus dem Grubengebäude. Wie zu

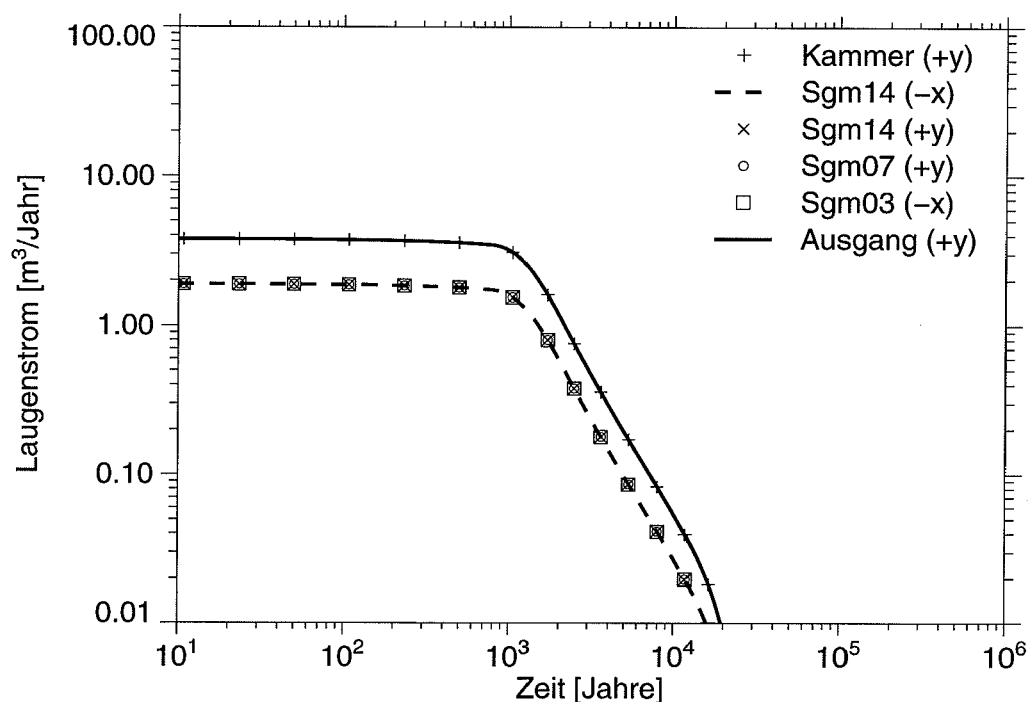


Abb. 5.21: Laugenströme im Testfall 1

erwarten, sind die Laugenströme über die beiden im Fall 1 gleichwertigen Wege identisch und genau gleich der Hälfte des aus der Kammer ausgepreßten Stroms. Der Laugenstrom am Ausgang ist gleich der Summe der beiden in das Segment 2 eintretenden Ströme. Er ist wegen fehlender Konvergenz in den Strecken genau gleich dem Strom aus der Kammer. Die Streckenkonvergenz würde dazu führen, daß zusätzlich Lauge aus jedem Streckenstück ausgepreßt würde.

Abbildung 5.22 zeigt den Schadstoffstrom an den entsprechenden Stellen des Segment-systems. Vergleicht man zunächst den Schadstoffstrom aus der Kammer mit denen aus dem Segment 14, so zeigt sich eine Verzögerung des Schadstofftransports im Streckenstück 14. Der Schadstoffstrom in -x-Richtung tritt aus der Mitte des Segments 14 aus und erscheint damit früher als der in +y-Richtung. Der etwas abgeflachte Anstieg des Stroms beruht auf der physikalischen und der numerischen Dispersion, da diese Effekte nicht unterdrückt werden können. Nach Erreichen des Maximums, d.h. nachdem die Schadstofffront durch das Segment hindurch ist, stimmen beide Schadstoffströme überein.

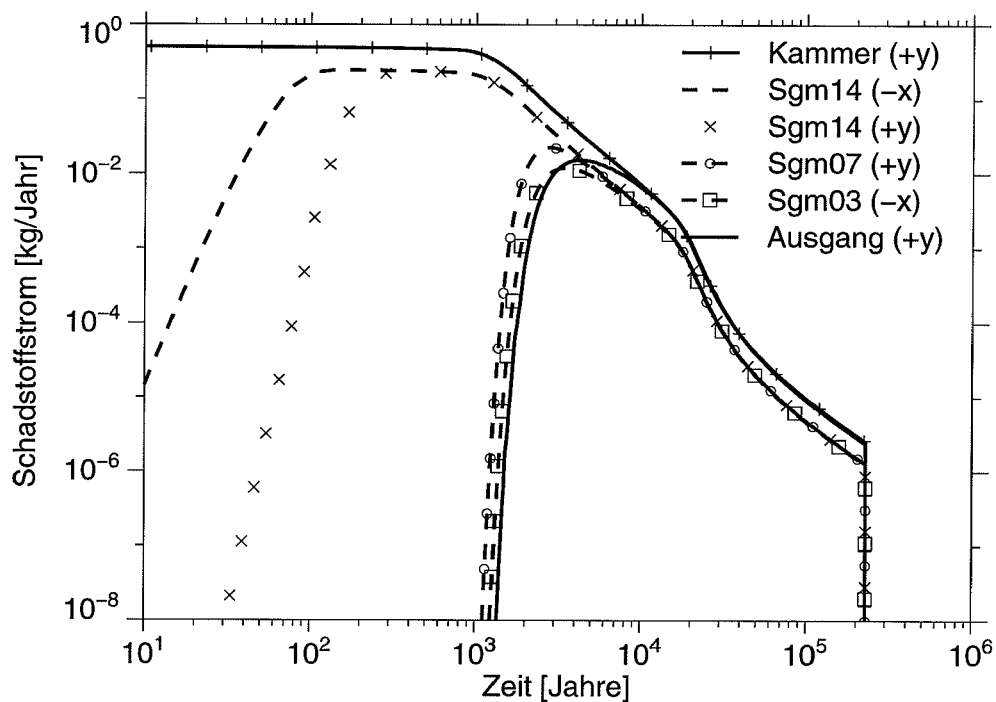


Abb. 5.22: Schadstoffströme im Testfall 1

Wegen des größeren Volumens des Segments 6 auf dem Weg rechts herum im Vergleich zu dem der beiden Segmente 2 und 7 auf dem anderen Weg wird die Schadstoffkonzentration hier herabgesetzt. Dadurch ist der Schadstoffstrom über den Weg rechts herum gegenüber dem links herum zu noch größeren Zeiten hin verschoben und das Maximum etwas geringer. Für große Zeiten stimmen beide Schadstoffströme wieder überein und sind genau die Hälfte des Stroms aus der Kammer. Der Schadstoffstrom am Ausgang zeigt eine Verzögerung von mehr als 1000 Jahren, ist aber für große Zeiten gleich dem aus der Kammer. Die gesamte Freisetzung bricht ab, wenn wegen Erreichens der Endporosität in der Kammer die Konvergenz zum Stillstand kommt und damit der Laugenstrom versiegt.

5.4.2.2 Laugen- und Schadstoffströme im Testfall 2

Abbildung 5.23 zeigt die Laugenströme aus der Einlagerungskammer und aus dem benachbarten Streckenstück (Segment 10) sowie die in das Segment 2 über die zwei Wege hineinfließenden Ströme und den Laugenstrom aus dem Grubengebäude. Die

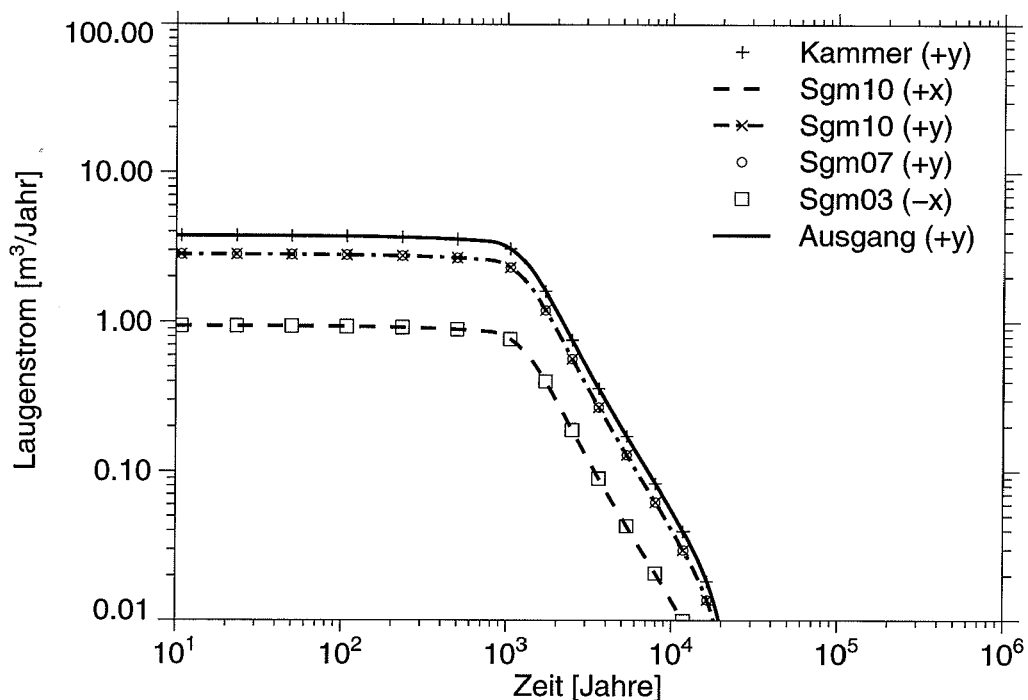


Abb. 5.23: Laugenströme im Testfall 2

Laugenströme teilen sich entsprechend dem Verhältnis 3:9 der Widerstände der beiden Wege auf. Der Laugenstrom am Ausgang ist wieder gleich der Summe der beiden in das Segment 2 eintretenden Ströme. Er ist wegen fehlender Konvergenz in den Strecken genau gleich dem Strom aus der Kammer.

Abbildung 5.24 zeigt den Schadstoffstrom an den entsprechenden Stellen des Segment-systems. Vergleicht man zunächst den Schadstoffstrom aus der Kammer mit denen aus dem Segment 10, so zeigt sich eine Verzögerung des Schadstofftransports im Streckenstück 10. Analog zum Fall 1 tritt der Schadstoffstrom in +x-Richtung aus der Mitte des Segments 10 aus und erscheint damit früher als der in +y-Richtung. Nach Erreichen des Maximums, d.h. nachdem die Schadstofffront durch das Segment hindurch ist, ist das Verhältnis der Schadstoffströme wie das der Laugenströme 3:9. Der Schadstoffstrom rechts herum erreicht jedoch nicht das Segment 2, d.h. die Kurve Sgm03 (-x) fehlt in der Abbildung 5.24, da die Menge der ausgepressten kontaminierten Lauge (maximal 1/3 von 8 000 m³ Porenvolumen der Kammer), die diesen Weg nimmt, nicht ausreicht, alle Segmente zu durchdringen (Porenvolumen der Segmente auf dem Weg rechts herum: 5 940 m³) und keine Diffusion berücksichtigt wurde.

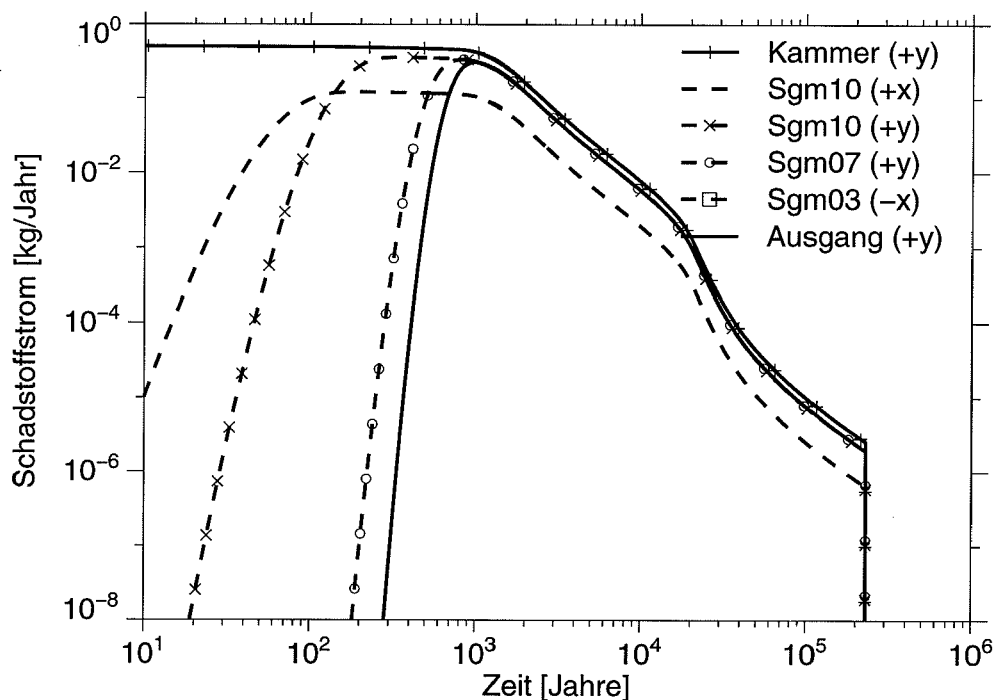


Abb. 5.24: Schadstoffströme im Testfall 2

Für große Zeiten stimmen der Schadstoffstrom aus dem Segment 10 in +y-Richtung und der am Ausgang daher überein und sind kleiner als der Schadstoffstrom aus der Kammer. Die gesamte Freisetzung bricht ab, wenn wegen Erreichens der Endporosität in der Kammer die Konvergenz zum Stillstand kommt und damit der Laugenstrom versiegt.

5.4.3 Zusammenfassung

In den beiden diskutierten Testfällen wird der Laugenstrom aus einer Kammer entsprechend den Strömungswiderständen im richtigen Verhältnis auf die beiden möglichen Transportwege verteilt. Auch die Schadstoffströme zeigen die richtige Aufteilung auf die beiden Wege. An den jeweiligen Verzweigungspunkten treten die Schadstoffströme entsprechend unterschiedlich verzögert aus. Dies läßt sich durch die unterschiedlich langen Transportwege bis zu den Verzweigungspunkten erklären. Anhand der beiden einfachen Testfälle ist damit gezeigt, daß mit dem Programm **Lopos2** vernetzte Grubengebäudestrukturen richtig behandelt werden können.

6 Zusammenfassung

Das Modul **Lopos** ermöglicht die Berechnung der Freisetzung von Schadstoffen aus Grubengebäuden, deren Teilbereiche netzartig miteinander verbunden sind. Es ist in die modulare Struktur des Programmpakets **Emos** eingebunden, so daß es in Verbindung mit allen anderen Modulen für integrierte Langzeitsicherheitsanalysen eingesetzt werden kann. Insbesondere sind auch Monte-Carlo-Simulationen zur Berücksichtigung von Unsicherheiten in den Eingangsdaten möglich. Alle Prä- und Postprozessoren des Programmpakets **Emos** sind anwendbar, so daß die Bedienung des Programms **Lopos2** menügesteuert erfolgt und eine umfangreiche grafische und tabellarische Ergebnisausgabe sichergestellt ist.

Die Modellannahmen und die physikalischen Grundlagen der Modellierung sind in dem vorliegenden Bericht beschrieben. Durch Vergleich mit analytischen Lösungen, durch Vergleich mit anderen Rechenprogrammen und durch Anwendung des Programms auf einfache Grubengebäudestrukturen wurde der entwickelte Programmcode getestet und verifiziert.

Es wurden eine Reihe von Segmentmodellen für die Teilbereiche von Grubengebäuden sowie eine Reihe von Mobilisierungsansätzen zur Beschreibung der Schadstofffreisetzung aus Abfällen entwickelt, so daß das Programm in der vorliegenden Version bereits umfassend für Langzeitsicherheitsanalysen einsetzbar ist. Das Programm ist so flexibel gestaltet, daß konkrete Anwendungsfälle, die mit der jetzigen Version nicht abgedeckt werden, durch einfaches Einfügen weiterer Modelle behandelt werden können.

Eine ausführliche Bedienungsanleitung und eine programmtechnische Beschreibung von **Lopos2** liegen für die Anwender als interne Berichte vor.

7 Literaturverzeichnis

- [1] J. Bear: Hydraulics of Groundwater, McGraw-Hill Book Company (1979).
- [2] E. Biurrun: Temperaturfeldberechnungen für die Langzeitsicherheitsanalyse, DEAB T23. Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern für Abfallstoffe mbH (DBE), Peine 1989.
- [3] D. Buhmann, A. Nies, R. Storck: Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagerkonzepten für wärmeerzeugende radioaktive Abfälle. GSF-Bericht 27/91. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1991.
- [4] N. Diekmann, U. Hunsche, D. Meister: Zeitschrift der deutschen geologischen Gesellschaft 137, S. 29 (1986).
- [5] J.J. Fried: Groundwater Pollution. Developments in Water Science 4, Elsevier Science Publishers, Amsterdam 1975.
- [6] S. Hossain, P. Weber: Prediction of thermally induced flow in the sealing of boreholes containing high level nuclear waste. TU Berlin, interner Bericht, 1984.
- [7] U. Hunsche, O. Schulze: Das Kriechverhalten von Steinsalz. Kali und Steinsalz, 11(8/9), 238-255 (1994).
- [8] T. Kühle: interne Mitteilung, GRS, 1995.
- [9] L.D. Landau, E.M. Lifschitz: Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI: Hydrodynamik, §17, S.61, Akademie-Verlag, Berlin 1974.
- [10] J. Marivoet, G. Volckaert, D. Buhmann, R. Storck, T. Vieno and H. Nordman: Performance Assessment of the Geological Disposal of Spent Fuel. Fourth European Conference on Management and Disposal of Radioactive Waste, Luxembourg, 25.-29. March 1996. EUR 17543 EN, p. 647-662 (1997).

- [11] I. Müller-Lyda, H. Birthler, E. Fein: Ableitung von Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen für Salzgrus. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-148, Braunschweig 1999.
- [12] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 10, Berlin 1985.
- [13] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 15, Berlin 1985.
- [14] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 16, Berlin 1985.
- [15] R. Storck, J. Aschenbach, R.P. Hirsekorn, A. Nies, N. Stelle: Performance Assessment of Geological Isolation Systems for Radioactive Waste (PAGIS): Disposal in Salt Formations. EUR 11 778 EN, GSF-Bericht 23/88. Commission of the European Communities, Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München, Brussels-Luxembourg 1988.
- [16] R. Storck, D. Buhmann, R.-P. Hirsekorn, T. Kühle, L. Lührmann: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-122, Braunschweig 1996.
- D. Buhmann: Das Programmpaket EMOS. Ein Instrumentarium zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-159, Braunschweig 1999.

8 Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Schematische Darstellung der Zeitachse.	7
Abb. 2.2	Steuerung der Zeitschrittweite für kontinuierliche Prozesse.....	10
Abb. 2.3	Steuerung der Zeitschrittweite unter Berücksichtigung diskontinuierlicher Prozesse.....	15
Abb. 2.4	Mögliche Segmentanordnung in einem Grubengebäude, Segment <i>i</i> (schattiert) und seine möglichen Nachbarsegmente $j = 1, \dots, 6$	17
Abb. 2.5	Schematische Darstellung einiger typischer Teilbereiche eines Grubengebäudes.....	18
Abb. 2.6	Beispiel für die Zusammenfassung paralleler Strecken zu je einem Modellsegment	20
Abb. 2.7	Beispiel für die Aufteilung einer Ringstruktur in Segmente und die Definition von Knoten in einem Segmentsystem	21
Abb. 2.8	Fließschema einer Freisetzungsberechnung mit dem Eingabeteil ILOPOS und dem Rechenteil CLOPOS.	27
Abb. 3.1	Konvergenz eines versetzten Hohlraumes und das Zusammen- wirken der beteiligten Prozesse.....	42
Abb. 3.2	Eingangsgrößen zur Laugendruckberechnung	43
Abb. 3.3	Berechnung des Schadstoffstroms, der durch konvektiven Laugen- austausch sowie Diffusion und Dispersion bewirkt wird.	44
Abb. 3.4	Ablaufplan eines Segmentmodells	47
Abb. 3.5	Schematische Darstellung des Laugenzuflusses entsprechend den Modellvarianten 1 und 2. Der Zufluß erfolgt von links über den Damm.	52
Abb. 3.6	Zeitliche Entwicklung des Laugendrucks in einer unterteilten Strecke, Variante 1 (blockweiser Weitertransport).....	53
Abb. 3.7	Zeitliche Entwicklung des Laugendrucks in einer unterteilten Strecke, Variante 2 (sofortiger kontinuierlicher Weitertransport)	53
Abb. 3.8	Modell einer teilversetzten Kammer mit eingelagertem Abfall: Schadstofffreisetzung durch Advektion, Diffusion, Dispersion und Konvektion aufgrund eines Dichtegradienten über den Verschuß, homogene Schadstoffverteilung innerhalb der Kammer	59

Abb. 3.9	Modell eines Bohrlochs mit eingelagertem Abfall: Schadstofffreisetzung durch Advektion, Diffusion und Dispersion über den Bohrlochstopfen, homogene Schadstoffverteilung inner- halb des Bohrlochs.....	64
Abb. 3.10	Modell eines Streckensegments mit kompaktierbarem Versatz: Schadstofftransport durch Advektion, Diffusion, Dispersion und Konvektion aufgrund eines Dichtegradienten, homogene Schad- stoffverteilung innerhalb des Streckensegments.....	66
Abb. 3.11	Modell eines Streckensegments mit nichtkompaktierbarem Versatz (z.B. Mineralgemisch oder Kiessand): Schadstofftransport durch Advektion, Diffusion, Dispersion und Konvektion aufgrund eines Dichtegradienten, homogene Schad- stoffverteilung innerhalb des Streckensegments.....	67
Abb. 3.12	Modell eines offenen, konvergierenden Streckensegments: Schadstofftransport durch Advektion, Diffusion, Dispersion sowie instantane Durchmischung innerhalb des Streckensegments und gegebenenfalls mit offenen Bereichen in den Nachbarsegmenten	70
Abb. 3.13	Anordnung des Segments (3) für <u>einen</u> Laugenzu- bzw. Austrittsort ...	74
Abb. 4.1	Strömungswiderstand von Segmenten bei unterschiedlicher Anordnung	86
Abb. 4.2	Anteil ausgefallener Behälter und Behälterausfallrate bei gleich- verteilter Lebensdauer der Behälter.	97
Abb. 4.3	Abnahme der maximalen Behälterlebensdauer τ_B mit zunehmen- dem Zeitpunkt des Laugenzutritts.	99
Abb. 4.4	Anteil ausgefallener Behälter und Behälterausfallrate bei exponentialverteilter Lebensdauer der Behälter.	100
Abb. 4.5	Anteil ausgefallener Behälter und Behälterausfallrate bei normalverteilter Lebensdauer der Behälter.	101
Abb. 4.6	Temperaturverlauf und Mobilisierungsrate für verglaste Abfälle.....	104
Abb. 4.7	Qualitativer Verlauf der Mobilisierungsrate zementierter Abfälle bei einer gleichverteilten Lebensdauer der Behälter unter der Voraussetzung $\tau_M > \tau_B$	106
Abb. 4.8	Mobilisierungsraten in den 3 Bereichen eines LWR-Brennelementes	108

Abb. 4.9	Schematische Darstellung eines Segments i und seiner Nachbarsegmente $j(i)$ und der Kontaktflächen Ω_j mit den Flächennormalen e_j	111
Abb. 4.10	Schematische Darstellung des Druckverlaufs in den Segmenten i und j bei unterschiedlichen Querschnitten und/oder Permeabilitäten	114
Abb. 4.11	Schematische Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes $v(z)$ in einer homogen versetzten Strecke bei Vernachlässigung von Randeffekten.....	124
Abb. 4.12	Schematische Darstellung der berücksichtigten Baumstruktur von Zerfallsketten	134
Abb. 4.13	Skizze einer unterteilten Strecke i und der Nachbarsegmente jl, jr, j	142
Abb. 5.1	Skizze der horizontalen Strecke mit Angabe der Randbedingungen .	150
Abb. 5.2	Konzentrationsverteilungen über die Strecke	153
Abb. 5.3	Einfaches Grubengebäude: Kammer-Strecke-Damm	156
Abb. 5.4	Einfaches Grubengebäude: Bohrloch-Strecke-Damm	156
Abb. 5.5	Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Kammer, Lopos2).....	157
Abb. 5.6	Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Kammer, Repos6)	157
Abb. 5.7	Zeitverlauf der Laugenfreisetzung aus der MAW-Kammer.....	158
Abb. 5.8	Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (HAW-Bohrloch, Lopos2)	160
Abb. 5.9	Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (HAW-Bohrloch, Repos6)	160
Abb. 5.10	Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Bohrloch, Lopos2).....	162
Abb. 5.11	Mobilisiertes Inventar und Freisetzung (MAW-Bohrloch, Repos6).....	162
Abb. 5.12	Mobilisiertes Inventar von C-14 und J-129 in der Einlagerungsstrecke. Symbole: Ergebnisse von Lopos , Linien: Ergebnisse von Repos	163
Abb. 5.13	Anordnung der Segmente für die Testfälle 1, 2a und 2b	166
Abb. 5.14	Anordnung der Segmente für die Vergleichsfälle 2a und 2b	166
Abb. 5.15	Nuklidstrom von J-129 aus einem Grubengebäude mit einer in 1, 9, 17, 25, 33, 41 bzw. 49 Blöcke unterteilten versetzten Strecke	167
Abb. 5.16	Zeitliche Entwicklung der Konzentrationsfront von J-129 entlang der Strecke CD bei einer Unterteilung in 25 Blöcke	168
Abb. 5.17	Zeitliche Entwicklung der Konzentrationsfront von J-129 entlang der Strecke CD bei einer Unterteilung in 49 Blöcke	168

Abb. 5.18	Fall 2a: J-129-Nuklidstrom, keine Konvergenz in der unterteilten Strecke	169
Abb. 5.19	Fall 2b: J-129-Nuklidstrom, mit Konvergenz in der unterteilten Strecke	170
Abb. 5.20	Beispiel für ein ringförmiges Modellgrubengebäude Testfall 1: Kammer (15) rechts; Testfall 2: Kammer (15) links	171
Abb. 5.21	Laugenströme im Testfall 1.....	173
Abb. 5.22	Schadstoffströme im Testfall 1.....	174
Abb. 5.23	Laugenströme im Testfall 2.....	175
Abb. 5.24	Schadstoffströme im Testfall 2.....	176

9 Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1	Eingabedaten für Lopos2	29
Tabelle 3.1	Globale Eingangsdaten der Segmentmodelle	57
Tabelle 3.2	Lokale Eingangsdaten der Segmentmodelle.....	58
Tabelle 3.3	Lokale Eingangsdaten für das Segmentmodell TKQK2	61
Tabelle 3.4	Lokale Eingangsdaten für das Segmentmodell TKQG1	61
Tabelle 3.5	Eingangsdaten für das Segmentmodell EKQV2.....	62
Tabelle 3.6	Eingangsdaten für das Segmentmodell EKQK2.....	63
Tabelle 3.7	Eingangsdaten für das Segmentmodell EBRV2	65
Tabelle 3.8	Eingangsdaten für die Segmentmodelle VSQK1 und VSRK1	67
Tabelle 3.9	Eingangsdaten für die Segmentmodelle VSQN1 und VSRN1	68
Tabelle 3.10	Eingangsdaten für das Segmentmodell DVQN1	68
Tabelle 3.11	Eingangsdaten für das Segmentmodell KSQN1	68
Tabelle 3.12	Eingangsdaten für das Segmentmodell AZQN1.....	70
Tabelle 3.13	Eingangsdaten für die Segmentmodelle OSQK2 und OSQK3.....	72
Tabelle 3.14	Eingangsdaten für die Segmentmodelle IQQN1 und IQRN1	74
Tabelle 3.15	Eingangsdaten für die Segmentmodelle IQQN2 und IQRN2	75
Tabelle 3.16	Eingangsdaten für die Segmentmodelle IQQN3 und IQRN3	75

10 Glossar

ABFALLGEBINDE: Behälter mit schadstoffhaltigem Abfall.

ABFALLMATRIX: Teil des Abfallgebundes, in dem das Schadstoffinventar eingebettet ist.
Die Matrix kann sowohl homogen als auch heterogen sein.

AKTIVITÄTSINVENTAR: bei radioaktiven Abfällen: In einem Abfallgebunde oder Segment enthaltenes Inventar an Radionukliden.

- **hypothetisches Aktivitätsinventar:** nur dem radioaktiven Zerfall unterliegendes Inventar eines Abfallgebundes ohne Abnahme durch Mobilisierungsvorgänge.

AUSPRESSPHASE: siehe unter → LAUGENBEWEGUNG.

AUSTAUSCHEFFEKTE: Im Grubengebäude modellierte Effekte, die zu einem nicht advektiven Schadstofftransport führen können, d.h. von Gastransport, Temperaturgradienten, Dichtegradienten oder Diffusion angetrieben werden.

BEHÄLTERAUSFALL: Ausfall eines Behälters mit schadstoffhaltigem Abfall. Der Ausfall wird durch die relative Anzahl ausgefallener Behälter und die relative Ausfallrate beschrieben.

BEHÄLTERLEBENSDAUER: Unter der Behälterlebensdauer wird die Zeitdauer verstanden, nach der ein Behälter ausgefallen ist und der Lauge kein Hindernis mehr in Richtung zur Abfallmatrix bietet.

BETRIEBSPHASE: Dauer der Einlagerung von Abfällen in einem Endlager.
Ende der Betriebsphase = Zeitpunkt, an dem die letzten Hohlräume des ehemaligen Endlagers versetzt oder abgeworfen worden sind.

DATENBASIS: Datei in der Datenbibliothek, die für eine große Anzahl von Schadstoffen schadstoffspezifische Daten, wie beispielsweise Halbwertszeiten und Zerfallsart enthält.

DATENBIBLIOTHEK: Gesamtheit der Dateien mit den Eingangsgrößen für einen **Lopos**-Rechenlauf.

DURCHSTRÖMUNGSPHASE: siehe unter → LAUGENBEWEGUNG.

EFFEKTE: Im Modul **Lopos** verwendeter Begriff für die Gesamtheit der physikalischen und chemischen Vorgänge, die im Grubengebäude ablaufen und die Schadstofffreisetzung beeinflussen.

EINLAGERUNGSZEITPUNKT: Zeitpunkt der Einlagerung des Abfalls in einem Einlagerungsort, bzw. Zeitpunkt, an dem ein Feld oder ein Teil des Feldes abgeworfen wird. Der Bezugspunkt ist das Ende der Betriebsphase, der Einlagerungszeitpunkt also immer negativ oder Null.

ENDPOROSITÄT: Zustand eines Segmentes, bei dem der Versatz oder der Verschluß durch Gebirgskonvergenz so weit kompaktiert ist, daß er nur noch tote Poren enthält und für Lauge als undurchlässig angesehen werden kann.

FREISETZUNGSRECHNUNG: Berechnung der Nuklidfreisetzung aus einem Grubengebäude in das Deckgebirge mit Hilfe des Moduls **Lopos**.

GRUBENGEBÄUDE: Bergmännischer Begriff für ein System untertägiger, begehrbarer Hohlräume. Hier verwendet für den Nahbereich des Endlagers im tiefen Untergrund.

HAW: Hochaktiver Abfall, meist in verglasteter Form.

KONVERGENZ: Durch den Gebirgsdruck verursachte Verformung des Gebirges und Eindringen in einen Hohlraum. Als Folge der Konvergenz können in einem Grubengebäude vorhandene Resthohlräume geschlossen werden.

LAUGENBEWEGUNG: Bei der Laugenbewegung in den Segmenten eines Grubengebäudes werden folgende Zustände unterschieden:

- **Zuflußphase:** Lauge strömt in ein leeres oder teilweise gefülltes Segment.
- **Durchströmungsphase:** Lauge strömt durch ein vollständig gefülltes Segment in ein angrenzendes Segment weiter.
- **Auspreßphase:** Lauge wird infolge der Gebirgskonvergenz aus einem Segment in angrenzende Segmente ausgepreßt. Im allgemeinen dreht sich dabei die Strömungsrichtung in Bezug auf die Durchströmungsphase um.

LAUGENNEST: Laugeneinschluß im Gebirge (Salzstock) mit einem begrenzten Volumen.

LAUGENZUTRITT: Bei Annahme eines Störfallszenarios kann Lauge in ein Endlager gelangen. Dies kann auf folgende Weise modelliert werden:
kontinuierlicher Laugenzutritt aus dem Deckgebirge oder einem Laugennest,
spontaner Laugenzutritt: es wird angenommen, daß ein Segment spontan mit Lauge gefüllt ist.

LAW: Schwachaktiver Abfall.

MAW: Mittelaktiver Abfall.

MODUL: Teil des Programmpakets **Emos**, z.B. **Lopos** für Freisetzungsrechnungen aus netzartigen Grubengebäudestrukturen.

MODULSPEZIFISCHE EINGABEDATEI: Datei mit den für einen Rechenlauf des Programms **Lopos2** notwendigen Steuerdaten.

MONTE-CARLO-RAHMEN: Teil des Programmpakets **Emos**. Bei probabilistischen Rechnungen wird das Monte-Carlo-Verfahren angewandt und **Emos** für eine vorgegebene Stichprobenzahl durchlaufen. Der Monte-Carlo-Rahmen übernimmt die Zuweisung der aktuellen Werte an die unabhängigen und abhängigen Variablen.

POLLUX-BEHÄLTER: Für die Einlagerung von Abfällen in Strecken vorgesehener Behältertyp, der gleichzeitig Transport- und Abschirmbehälter ist. Hauptsächlich für die Aufnahme von LWR-Brennelementen vorgesehen.

PORENVOLUMEN: siehe unter → RESTHOHLRAUM.

POROSITÄT: Definiert als Verhältnis von Porenvolumen zu Gesamtvolumen.

RESTHOHLRAUM: Nach dem Verfüllen eines Einlagerungsortes oder einer Strecke verbleibender Hohlraum im Versatz und/oder im eingelagerten Abfall.

SCHADSTOFFAUSWAHL: Im Programmpaket **Emos** vorhandene Möglichkeit, für ausgewählte Schadstoffe Daten aus der → Datenbasis zu übernehmen, um eine Rechnung auf spezielle Schadstoffe zu begrenzen.

SEGMENT: Teil eines Grubengebäudes für die Modellierung innerhalb des Moduls **Lopos**. Ein Segment besteht im allgemeinen aus einem (versetzten) Hohlraum und einem Verschuß.

- **Tiefenabhängigkeit:** Bei mehrsöhligen Grubengebäuden Berücksichtigung der Tiefe der einzelnen Sohlen.

SEGMENTSCHLEIFE: Rechenschleife zur Berechnung aller Ausgangsgrößen in den Segmenten und Abfallgebänden, die bei jedem Zeitschritt innerhalb der Zeitschleife von **Lopos** einmal durchlaufen wird.

SEGMENTSTRUKTUR: Verknüpfung der Segmente eines Endlagers, festgelegt in der Datei mit den Strukturdaten.

SORPTION: In dem vorliegenden Text für Adsorption verwendet. Die Modellierung erfolgt über das K_d -Konzept.

STÜTZWIRKUNG: Alle Effekte, die der Konvergenz des Gebirges und damit der Verkleinerung von Resthohlräumen in einem Endlager einen Widerstand entgegensetzen, z.B. durch die eingelagerten Behälter oder durch eingedrungene Lauge.

VERSATZ: Füllmaterial in einem Bergwerk zum Verschließen aufgefahrener Hohlräume. In einem Bergwerk in Steinsalz dient hauptsächlich Salzgrus als Versatzmaterial.

ZEITSCHRITTSTEUERUNG: Mechanismus zur Variation der Zeitschrittweite, um durch kleine Zeitschrittweiten eine ausreichende Rechengenauigkeit und durch möglichst große Zeitschrittweiten eine kurze Rechenzeit zu erreichen.

ZUFLUSSPHASE: siehe unter → LAUGENBEWEGUNG.

**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