

# **Anpassung des Programmpakets EMOS an moderne Softwareanforderungen**

ADEMOS - Phase 1



## Anpassung des Programmpakets EMOS an moderne Softwareanforderungen

ADEMOS – Phase 1

Tatiana Reiche  
Dirk Becker  
Dieter Buhmann  
Thomas Lauke

Juni 2011

### **Anmerkung:**

Die diesem Bericht zugrunde liegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft (BMWi) im Rahmen des Vorhabens ADEMOS: Anpassung des EMOS-Programmpakets an moderne Softwareanforderungen unter dem Förderkennzeichen 02E10367 gefördert.

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

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



# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis.....</b>	<b>2</b>
<b>1 Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2 Modulübergreifende Vereinbarungen .....</b>	<b>4</b>
2.1 Sprachgebrauch .....	4
2.2 Aufgabenbereich.....	4
2.3 Physikalische Größen in Transportmodellen.....	5
2.4 Vereinbarungen bezüglich Maßeinheiten .....	5
<b>3 Bedienungsoberfläche XENIA .....</b>	<b>7</b>
3.1 Allgemeine Angaben zur Bedienungsoberfläche.....	7
3.2 Datenbank .....	9
3.3 Anlegen und Spezifikation eines Rechenlaufs .....	11
3.4 Starten und Archivieren von Rechenläufen.....	14
3.5 Hinzugefügte Dokumente zu einem Rechenlauf .....	15
3.6 Zusammenfassung, Probleme, Ausblick .....	16
<b>4 GeoTREND .....</b>	<b>18</b>
4.1 Problemstellung .....	18
4.2 Zielsetzung und Projektstatus .....	18
<b>5 Fernfeldmodul GeoTREND-SP .....</b>	<b>20</b>
5.1 Einleitung.....	20
5.2 Transportrelevante Effekte.....	22
5.2.1 Advektion.....	22
5.2.2 Diffusion und Dispersion .....	22
5.2.3 Rückhalte-mechanismen.....	24
5.2.3.1 Henry-Isotherme .....	25
5.2.3.2 Langmuir-Isotherme.....	25
5.2.3.3 Freundlich-Isotherme .....	26
5.2.3.4 Retardationsfaktor .....	26

5.2.4	Quellen und Senken .....	27
5.3	Transportgleichung .....	27
5.4	Numerische Modellierung .....	30
5.4.1	Gitterbildung .....	32
5.4.2	Advektionsterm .....	34
	Diskussion .....	34
5.4.3	Dispersionsterm .....	36
5.4.4	Quellterm .....	38
5.4.5	Radioaktiver Zerfall .....	38
	Diskussion .....	38
5.4.6	Zeitintegration .....	41
	Diskussion .....	43
5.4.7	Resultierende Differenzgleichung .....	45
5.4.8	Einarbeiten der Anfangs- und Randbedingungen .....	49
5.4.8.1	Einstromrand und Anfangsbedingung .....	49
	Diskussion .....	53
5.4.8.2	Ausstromrand .....	54
5.4.9	Lösen des Gleichungssystems .....	58
5.4.10	Berechnung der Schadstoffrückhaltung .....	59
5.4.11	Analyse numerischer Probleme .....	62
5.4.11.1	Stabilität .....	62
5.4.11.2	Konsistenz .....	63
5.4.11.3	Numerische Dispersion und Oszillation .....	63
5.5	Ablauf einer Transportrechnung .....	68
5.5.1	Eingangsdaten .....	69
5.5.2	Ortsdiskretisierung .....	72
	Diskussion .....	75
5.5.3	Zeitdiskretisierung .....	76
5.5.3.1	Automatische Steuerung der Zeitschrittlänge .....	77
5.5.3.2	Berücksichtigung kurzlebiger Radionuklide .....	81
5.5.3.3	Diskussion .....	82
5.5.4	Bestimmung der Einstromrate .....	83
5.5.5	Volumenstrom .....	84
	Diskussion .....	85
5.5.6	Kontrolle der Ergebnisse .....	85

5.5.7	Berechnung der Schadstoffströme.....	86
5.5.8	Kontrollgrößen .....	87
5.5.9	Speicherung der Ergebnisse für die Ausgabe .....	88
	Diskussion .....	90
5.5.10	Programmoptimierung .....	91
5.5.11	Negative Ströme .....	92
5.5.12	Stabile Nuklide.....	92
5.5.13	Ausgaben in die Ergebnisdateien .....	93
5.6	Verifizierung.....	96
5.6.1	Vergleich mit analytischer Lösung für Schadstoffquelle als $\delta$ -Impuls .....	97
5.6.1.1	Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses ohne Zerfall und ohne Rückhaltung.....	99
5.6.1.2	Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall (langlebige Radionuklide), ohne Rückhaltung.....	100
5.6.1.3	Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall (kurzlebige Radionuklide), ohne Rückhaltung.....	101
5.6.1.4	Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung nach dem linearen Sorptionsmodell ( $K_d$ -Konzept), ohne Zerfall .....	105
5.6.2	Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung nach Langmuir- und Freundlich-Sorptionskonzepten, ohne Zerfall.....	107
5.6.3	Massenerhaltung beim Zerfall in einer Nuklidkette bei einer $\delta$ -Injektion des Schadstoffes .....	110
5.6.4	Dauergleichgewicht beim Zerfall in einer Nuklidkette bei einer $\delta$ -Injektion des Schadstoffes .....	112
5.6.5	Vergleich mit analytischer Lösung für permanente Schadstoffquelle.....	114
5.6.5.1	Schadstoffausbreitung bei permanenter Quelle ohne Zerfall und ohne Rückhaltung.....	116
5.6.5.2	Schadstoffausbreitung bei permanenter Quelle mit Zerfall ohne Rückhaltung.....	117
5.6.6	Vergleich mit CHET1 bei Simulation eines komplexen Anwendungsfalls .	118
5.7	Geplante Weiterarbeiten .....	121
<b>6</b>	<b>Probabilistische Rechnungen.....</b>	<b>124</b>
6.1	Ablauf einer probabilistischen Rechnung .....	124
6.1.1	Stichprobenziehung .....	125
6.1.2	Wiederholte Ausführung des Rechenmodells .....	125

6.1.3	Kollektive Auswertung .....	126
6.2	Parameterabhängigkeiten .....	126
6.2.1	Statistische Korrelationen .....	127
6.2.2	Strenge Abhängigkeiten.....	128
6.3	Statistikrahmen des Programmpakets EMOS .....	128
6.3.1	Programmablauf .....	129
6.3.2	Behandlung strenger Abhängigkeiten .....	130
6.4	Neukonzeption des Statistikrahmens .....	132
6.4.1	Statistische Variablen .....	132
6.4.2	Stichprobenziehung .....	133
6.4.3	Belegung der Programmparameter .....	133
6.4.4	Zusammenstellung der Ausgabedaten.....	134
6.4.5	Statistische Auswertung.....	134
6.5	RepoTREND-Statistikrahmen .....	134
6.5.1	Vorbereitung und Stichprobenziehung .....	137
6.5.2	Steuerung des Programmablaufs .....	140
6.5.2.1	RunListMaker .....	140
6.5.2.2	JsonModifier .....	141
6.5.2.3	OutCollector.....	143
6.5.3	Auswertung einer Statistik-Rechnung .....	144
<b>7</b>	<b>Ablaufsteuerung .....</b>	<b>145</b>
7.1	Technische Rahmenbedingungen .....	145
7.2	Funktionsweise des Steuerskripts.....	147
<b>8</b>	<b>Anpassung des Rechenmoduls LOPOS .....</b>	<b>151</b>
8.1	Ausgangssituation .....	151
8.2	Erforderliche Anpassungen.....	151
8.3	Umsetzung der Anpassungen.....	153
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>154</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>157</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>160</b>

<b>Anhang A</b>	<b>Symbolverzeichnis .....</b>	<b>161</b>
<b>Anhang B</b>	<b>Formatänderungen bei Ausgabedateien .....</b>	<b>164</b>
B.1	Mehrere Schnittstellen des Grubengebäudes mit dem Deckgebirge .....	164
B.2	Stabile Isotope .....	165
B.3	Beobachtungsstellen und -zeitpunkte in der Vorspanndatei cvs.....	166
<b>Stichwortverzeichnis .....</b>		<b>167</b>

# 1 Einleitung

Das Programmpaket EMOS wurde ab Mitte der 1980er Jahre entwickelt, um es als leistungsfähiges Werkzeug zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle einzusetzen /BUH 99/. Das Programmpaket EMOS besteht aus eigenständigen Rechenmodulen für verschiedene Teilbereiche von Endlagern in unterschiedlichen geologischen Formationen:

- LOPOS: Nahbereichsmodul für ein Endlager im Salinar,
- CLAYPOS: Nahbereichsmodul für ein Endlager im Granit oder Ton,
- CHET1 (CHETLIN), CHET2 (CHETNIS), CHETMAD, TRAPIC: Fernbereichsmodule mit Berücksichtigung unterschiedlicher Transport- und Sorptionseffekte,
- EXCON, EXMAS: Biosphärenmodule für unterschiedliche Fernfeldtypen.

Ursprünglich in der Programmiersprache FORTRAN IV geschrieben, wurde es bis in die Gegenwart unter Verwendung von FORTRAN, zuletzt der Version FORTRAN 77, weiterentwickelt. Die EMOS-Software basiert im Wesentlichen auf Daten- und Programmstrukturen, die zum Teil mehr als 25 Jahre alt sind. Die Neu- und Weiterentwicklung von Modulen im Rahmen von Projektarbeiten haben in den letzten Jahren eine Vielzahl von Insellösungen hervorgebracht, die jeweils für bestimmte Aspekte gut geeignet sind, deren Pflege aber im Hinblick auf zukünftige Anwendungen schwierig und sehr aufwändig ist.

Die Datenversorgung der EMOS-Module geschieht über eine Reihe von ASCII-Dateien, die weder einheitlich formatiert noch in komfortabler Weise zu warten sind. Dieser Zustand ist auch vom Gesichtspunkt der Qualitätssicherung unbefriedigend, da eine Datenkontrolle nur schwer möglich ist.

Um eine effiziente Weiterentwicklung, Wartung und Anwendung der EMOS-Programme langfristig zu sichern, soll der gesamte Programmcode im Rahmen des Projekts ADEMOS grundlegend überarbeitet werden. Das neu entwickelte Gesamtpaket hat den neuen Namen *RepoTREND* (**T**ransport and **RE**tention of **N**on-dacaying and **D**ecaying contaminants in final **REPO**sitory) bekommen. Für die Module zur Abbildung der Prozesse in einzelnen Endlagerbereichen wurden folgende Bezeichnungen eingeführt:

- *NaTREND* für die Nahbereichsmodule,
- *GeoTREND* für die Geosphärenmodule,
- *BioTREND* für die Biosphärenmodule.

In der in dem vorliegenden Bericht vorgestellten abgeschlossenen ersten Phase des Projekts ADEMOS wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

- Entwicklung einer Bedienungsoberfläche,
  - die vom Anwender und Programmentwickler über Konfigurationsdateien an geänderte Programmversionen sehr flexibel angepasst werden kann und
  - die den Start von Modellrechnungen erlaubt, wobei die Informationen zu den Rechenläufen in einer Datenbank gespeichert werden,
- Anbindung einer Datenbank zur Speicherung von Eingabedaten und Informationen für Rechenläufe,
- Überarbeitung des in FORTRAN umgesetzten Nahfeldmoduls LOPOS, um mit der neuen Bedienungsoberfläche und mit dem neuen Datenaustauschformat JSON kompatibel zu sein,
- Entwicklung eines neuen Fernfeldmoduls *GeoTREND-SP* (transport through fully **Saturated Porous** medium), das in der Programmiersprache C++ geschrieben ist und die bisherigen Fernfeldmodule der CHET-Familie zur Berechnung des Schadstofftransports in porösen voll gesättigten Medien ersetzt. Dabei wurden die neue Bedienungsoberfläche sowie die Anbindung an die Datenbank berücksichtigt.
- Entwicklung von Modulen für die Durchführung von probabilistischen Rechnungen, d.h. Monte-Carlo-Simulationen,
- Einführung von Qualitätssicherungs-Werkzeugen nach aktuellem Stand.

Die Bedienungsoberfläche hat den Namen *XENIA* (fle**X**ible **EN**hanced Interface **App**lication) erhalten und liegt in der Version 1.0 vor. Im Kapitel 3 wird diese Anwendung im Detail beschrieben, inklusive Anmerkungen zur eingesetzten Datenbank.

Auf das modifizierte Modul LOPOS wird im Kapitel 8 eingegangen. In den Kapiteln 4 und 5 ist die Neuentwicklung des Moduls *GeoTREND* und im Kapitel 6 die Neuentwicklungen der Module für probabilistische Rechnungen vorgestellt. Im Kapitel 7 wird die Steuerung des Programmablaufes auf der obersten Ebene beschrieben.

Im vorliegenden Bericht ist der aktuelle Zwischenstand des Projekts dokumentiert. Die neu entwickelten RepoTREND- und die angepassten EMOS-Module ergeben bereits in dieser Projektphase ein voll einsatzfähiges Werkzeug für Langzeitsicherheitsanalysen. Einige Entscheidungen in Bezug auf die fachliche und numerische Modellierung, die bei der Entwicklung neuer Rechenmodule getroffen wurden, sind ausschlaggebend für die in der nächsten Projektphase geplante Weiterentwicklung. Deswegen wurden die Aspekte, die zu diesen Entscheidungen geführt haben und bei der Entwicklung weiterer Module zu berücksichtigen sind, in diesem Bericht ausführlich beschrieben. Am Ende des Projekts werden die gesamten durchgeführten Arbeiten im Abschlussbericht dargestellt werden. Die Ergebnisse der in dem vorliegenden Bericht vorgestellten Arbeitspakete sollen dann im Abschlussbericht in einer verkürzten Form zusammengefasst werden.

## 2 Modulübergreifende Vereinbarungen

Bevor einzelne Module vorgestellt werden, werden in diesem Abschnitt Aspekte erläutert, die modulübergreifend gelten.

### 2.1 Sprachgebrauch

Das Programm RepoTREND wird nach dem objektorientierten Konzept entwickelt. In der Informatik wird unter einem Modul i. A. eine abgeschlossene funktionale Einheit einer Software verstanden, die eine in sich abgeschlossene Aufgabe realisiert. Ein Modul kann z. B. als Funktion aufgerufen werden, führt bestimmte Verarbeitungsschritte durch und liefert als Ergebnis Daten zurück. Ein Modul kann weitere Module aufrufen.

Im vorliegenden Bericht wird die vollständige Realisierung eines bestimmten Modells, das Prozesse in einem der voneinander unabhängigen Teilsysteme – Grubengebäude, Deckgebirge und Biosphäre – simuliert, als *Modul* oder *Rechenmodul* bezeichnet. Im EMOS-Kontext ist ein Rechenmodul ein separates Programm. Im RepoTREND-Kontext wird darunter die entsprechende funktionale Softwareeinheit verstanden. Z. B. fasst ein Fernfeldmodul Operationen und Daten zusammen, die ein Modell des Schadstofftransports durch das Deckgebirge vollständig realisieren.

Bei RepoTREND und EMOS handelt es sich um sicherheitsanalytische Instrumentarien, die in erster Linie zur Ermittlung von radiologisch basierten Sicherheitsindikatoren, z. B. einer potenziellen jährlichen Strahlenexposition entwickelt wurden. Die Radionuklide stehen somit im Vordergrund. Die Rechenmodule sind aber auch für nicht radioaktive Stoffe anwendbar. Deswegen wird der allgemeinere Begriff *Schadstoff* im vorliegenden Bericht ebenfalls verwendet. Unter dem Schadstoff wird ein für die Simulation relevanter Inhaltsstoff des Trägerfluids (Grundwasser) verstanden. Radionuklide sind somit ein Spezialfall der Schadstoffe.

### 2.2 Aufgabenbereich

Das RepoTREND-Instrumentarium wird zur Berechnung der Nuklidausbreitung durch die drei Hauptkomponenten eines Endlagersystems – Grubengebäude, Deckgebirge und Biosphäre – und folglich zur Ermittlung der resultierenden Strahlenexposition entwickelt.

Die im vorliegenden Bericht dargestellten Modellierungen wie zu betrachtende physikalische Effekte, Gleichungen, Anfangs- und Randbedingungen usw. beziehen sich ausschließlich auf diesen Aufgabenstellungsbereich.

### **2.3 Physikalische Größen in Transportmodellen**

Bei der Modellierung der Transport- und Sorptionsprozesse ist zwischen mindestens zwei Betrachtungsebenen zu unterscheiden. Die erste ist die mikroskopische Ebene, in der die einzelnen Poren und Gesteinskörner das Gebiet darstellen. Auf dieser Skala kann man das grundlegende Verhalten zwar oft verstehen, aber nicht für die zu erfassenden geologischen Systeme beschreiben. Die elementaren Gleichungen und Beziehungen sind zwar bekannt, jedoch nicht deren Parametrisierung (z. B. genaue Form der Oberfläche und physikalische Eigenschaften eines Gesteinskorns). Auch die mathematische und numerische Beschreibung ist für große Systeme auf dieser Mikroebene nicht durchführbar. Daher wird eine andere Skala benötigt, auf der die interessierenden Prozesse beschrieben und die zur Quantifizierung erforderliche Parameter und Werte gemessen werden können. Man geht auf die makroskopische Betrachtungsebene über. Es werden nicht mehr einzelne Größen an bestimmten Punkten im Gebiet betrachtet sondern Mittelwerte, die über bestimmte Volumina gebildet worden sind. Bei der Mittelungsprozedur ist die charakteristische Größe ein sogenanntes repräsentatives Elementarvolumen (REV). Die Volumen müssen hinreichend groß sein, um eine unzulässig große Variabilität der definierten Eigenschaften zu vermeiden und eine dem Kontinuum-Konzept zugrundeliegende Mittelung durchführen zu können. Andererseits müssen die Volumen hinreichend klein sein, damit auch nach der Mittelungsprozedur noch Aussagen über die Größen an bestimmten Punkten des Gebietes sinnvoll bleiben. Bei der mathematischen Modellierung der einzelnen Prozesse sind die betrachteten Größen im vorliegenden Bericht immer als gemittelte Größen zu verstehen.

### **2.4 Vereinbarungen bezüglich Maßeinheiten**

Folgende Vereinbarungen bezüglich der Maßeinheiten der Schadstoffkonzentrationen und -ströme wurden getroffen und sind bei der Entwicklung der RepoTREND-Module und bei der Erstellung der relevanten Dokumentation einzuhalten:

- Die Eingangsdaten für Nuklidkonzentrationen können in  $[\text{mol}/\text{m}^3]$ ,  $[\text{Bq}/\text{m}^3]$  und  $[\text{kg}/\text{m}^3]$  vorliegen. Alle aufgezählten Maßeinheiten werden von allen Rechenmodulen akzeptiert. Die Ergebnisse für Schadstoffkonzentrationen und -ströme können ebenfalls in diesen Maßeinheiten je nach Benutzereinstellung ausgegeben werden. Alle Berechnungen werden jedoch ausschließlich in  $[\text{mol}/\text{m}^3]$  durchgeführt. Die Konvertierung der Maßeinheiten erfolgt ggf. beim Einlesen und bei der Ausgabe der Daten. Dementsprechend werden alle mathematischen Modellbeschreibungen für die Maßeinheit  $[\text{mol}/\text{m}^3]$  formuliert.
- Analog sind die Schadstoffströme zu behandeln.
- Bei stabilen Nukliden wird die Maßeinheit der Eingangskonzentrationen stets als  $[\text{mol}/\text{m}^3]$  angenommen (s. Anhang B). Die Ausgabe für stabile Nuklide erfolgt ebenfalls in  $[\text{mol}/\text{m}^3]$ . Die Benutzereinstellungen bezüglich der Maßeinheit sind somit für stabile Isotope irrelevant.
- Für die Umrechnung zwischen  $[\text{mol}]$  und  $[\text{Bq}]$  wird folgende Abhängigkeit verwendet:

$$A(t) = \lambda \cdot N(t) = \lambda \cdot N_A M(t) , \quad (2.1)$$

$t$	Zeit [a],
$A(t)$	Aktivität in [Bq] zu einem Zeitpunkt $t$ ,
$\lambda$	Zerfallskonstante in $[\text{s}^{-1}]$ ,
$N(t)$	Anzahl der Atome zu einem Zeitpunkt $t$ ,
$N_A$	Avogadro-Konstante ( $N_A \approx 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ),
$M(t)$	Stoffmenge in [mol] zu einem Zeitpunkt $t$ .

Folgende Formel wird für die Konvertierung zwischen [mol] und [kg] eingesetzt:

$$M = \frac{m}{A \cdot m_a \cdot N_A} , \quad (2.2)$$

$M$	Stoffmenge in [mol] eines Nuklids,
$m$	Masse in [kg],
$m_a$	atomare Masseneinheit ( $m_a \approx 1,660 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ),
$A$	Massenzahl des Nuklids.

### 3 Bedienungsoberfläche XENIA

Die Bedienungsoberfläche *XENIA* ist ein wesentlicher Bestandteil des Programmpakets RepoTREND und dient dazu, Eingabedaten für Rechenläufe zusammenzustellen, Rechenläufe zu starten und zu verwalten. Sie übernimmt damit auch die Steuerung von Rechenläufen, indem sie eine Scriptdatei automatisch generiert und zur Abarbeitung an einen zu spezifizierenden Rechner weiterleitet.

Die Eingabedaten und Informationen zu den Rechenläufen werden in einer Datenbank gespeichert, wobei jeder Rechenlauf eindeutig einem Projekt oder Unterprojekt zugeordnet ist. Die Verwendung von (Unter-)Projekten wurde als oberste Gliederungsebene der Datenbank zur systematischen Ablage der Rechenläufe eingeführt. Die folgenden Abschnitte vermitteln eine Übersicht über die Arbeit mit XENIA. Eine detaillierte Beschreibung von Vorgehensweisen, Ansichten und Konfigurationen kann der Programm- und Benutzerdokumentation zu XENIA entnommen werden.

#### 3.1 Allgemeine Angaben zur Bedienungsoberfläche

Die mit der Entwicklung von XENIA verfolgte Strategie lässt sich als Übersicht wie folgt charakterisieren:

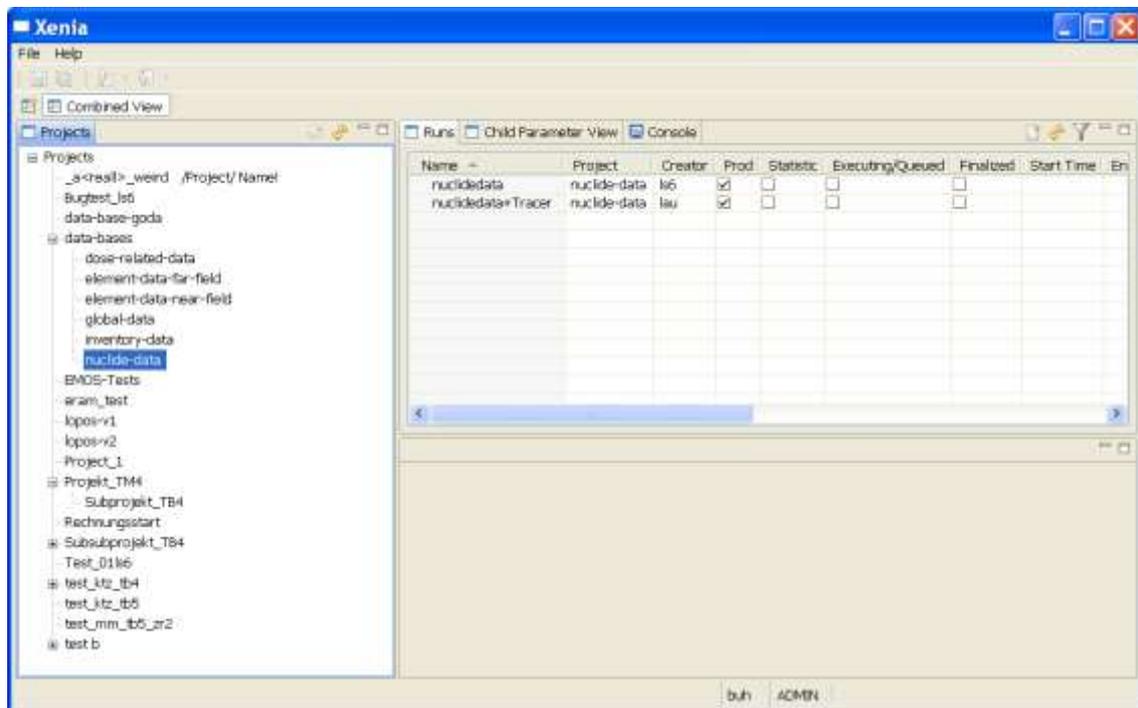
- Für eine Modellrechnung mit dem Programm RepoTREND wird die Verwendung von XENIA für Standardrechnungen empfohlen. Eine Dateneingabe oder Modellrechnung ohne diese Bedienungsoberfläche ist nur mit Spezialkenntnissen möglich und ausschließlich in begründeten Fällen durchzuführen.
- Alle Daten und Informationen zu Rechenläufen werden in der Datenbank abgelegt. Der Zugriff auf diese Daten erfolgt über den Projektordner, in dem der Rechenlauf abgelegt ist. Zu jedem Rechenlauf wird gespeichert, welche Module von RepoTREND in welcher Version und welche Eingabedaten verwendet werden.
- Logisch zusammenhängende Daten werden in sogenannten *Modulen* zusammengefasst. Es gibt zwei Arten von Modulen:
  - Ein *Modul*, das mit einem Rechenmodul, also einem Executable verknüpft ist, fasst die Daten zusammen, die zur Simulation der Prozesse in entsprechendem Teilsystem eines Endlagers benötigt werden.

- Ein sogenanntes *Hilfsmodul* fasst Daten zusammen, auf die normalerweise aus anderen Modulen und beim Ausführen des Rechenlaufs referenziert wird. Es besteht keine Verknüpfung eines Hilfsmoduls mit einem Executable.

Ferner wird zwischen *Standardmodulen* (= freigegebene Module) und *benutzerspezifischen Modulen* (= Module, die noch in der Entwicklung sind) unterschieden. Damit ist es in RepoTREND möglich, zu dokumentieren, dass Anwendungsrechnungen mit qualitätsgesicherten, freigegebenen Modulen durchgeführt wurden.

- Die Eingabemasken von XENIA sind flexibel. Der Aufbau einer Eingabeansicht ist durch eine entsprechende *Konfigurationsdatei (Modulbeschreibung)* festgelegt. Wenn die Struktur einer Ansicht geändert werden muss, so kann der Entwickler die entsprechende Konfigurationsdatei abändern, bzw. durch eine neue Konfigurationsdatei eine neue Eingabeansicht generieren, so dass die Parameterliste durch neue Eingabedaten ergänzt wird oder nicht mehr erforderliche Daten entfernt werden. Über die Konfigurationsdatei kann auch der Datentyp und der Wertebereich einzugebender Daten festgelegt werden. Dadurch ist eine einfache Überprüfung der eingegebenen Daten auf Plausibilität bereits bei der Eingabe möglich.
- Die Eingabemasken zum Starten von Modellrechnungen erlauben eine flexible Auswahl des zu verwendenden Compute-Servers, ggf. der Anzahl von Rechenknoten für parallele Job-Verarbeitung und der Ausgabesteuerung, d. h. der Auswahl von Pfaden für die Ergebnisausgabe.
- Nach Eingabe aller Informationen in die Eingabemasken und Start einer Rechnung führt XENIA folgende Aktionen aus:
  - Erstellung einer JSON-Datei mit den eingegebenen, den Rechenlauf spezifizierenden Daten,
  - Zusammenstellung aller für die Rechnung erforderlichen Dateien,
  - Abarbeitung des Rechenjobs,
  - Verwaltung der Ausgabedateien und
  - Aufräumen temporärer Verzeichnisse.
- Die eingeführte interne Verwaltung von Zugriffsrechten trägt zur Qualitätssicherung bei.

In der Benutzerdokumentation ist im Detail zusammengestellt, wie die Bedienungs-  
 oberfläche aufgebaut ist und in welche Eingabemaske welche Daten einzugeben sind.  
 Abb. 3.1 zeigt das Hauptmenü der Bedienungsoberfläche.



**Abb. 3.1** Hauptmenü der Bedienungsoberfläche XENIA

Das Hauptmenü besteht aus der Menüleiste (*File, Help*), der Übersicht der verfügbaren Projekte in dem linken Teilfenster und den untergeordneten Fenstern auf der rechten Seite, hier mit der Liste der Rechenläufe (*Runs*).

Zur Anpassung der Konfigurationsdateien für Eingabedatenmasken steht ein Editor zur Verfügung, der über das Hauptmenü erreichbar ist (z. B. *File* → *Edit* → *Module Description*). Die Inhalte der Konfigurationsdatei werden dabei im XML-Format gespeichert.

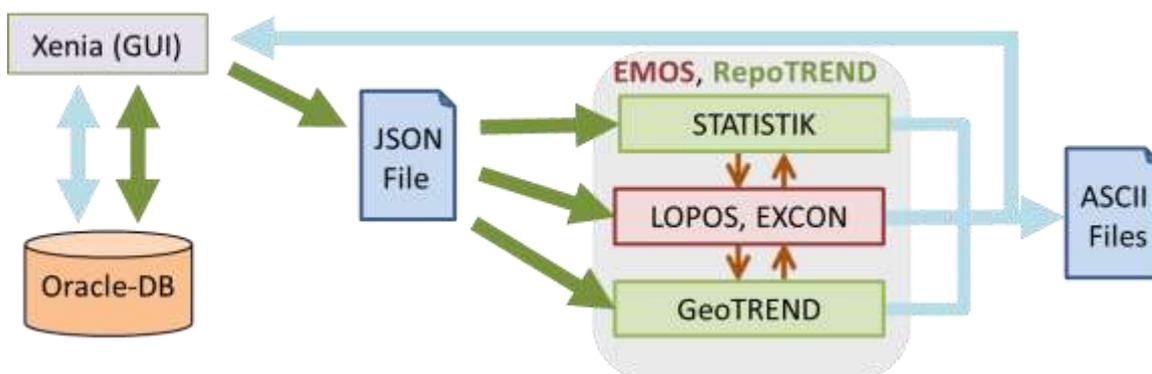
### 3.2 Datenbank

Zur Speicherung aller Daten wird eine relationale Datenbank (Oracle®) auf einem zentralen Server verwendet. XENIA hat lesenden und schreibenden Zugriff auf die Datenbank.

Die Ablage in der Datenbank dient der Qualitätssicherung, d. h. der Nachverfolgbarkeit von Rechenläufen und den damit verknüpften Daten, wie beispielsweise der Angabe des Anwenders, des Status' des Rechenlaufs, usw. Dabei ist XENIA so aufgebaut, dass der Anwender von der im Hintergrund arbeitenden Datenbank nur wenig spürt. D. h. die Handhabung der Datenbank über XENIA ist komfortabel; Such- und Sortierfunktionen werden direkt in den Eingabemasken angeboten.

Die Rechenmodule von RepoTREND greifen bei einer Modellrechnung nicht direkt auf die Datenbank zu, sondern verwenden eine Datei im JSON-Format /WWW JS/, in der alle von den Modulen benötigten Informationen gespeichert sind. Diese Datei wird von XENIA beim Starten eines Rechenlaufs generiert.

Abb. 3.2 zeigt schematisch die Einbindung der Datenbank im Programmsystem, bestehend aus dem Programm RepoTREND und der Bedienungsoberfläche XENIA.



**Abb. 3.2** Schematische Darstellung der Einbindung der Datenbank

Die grünen Pfeile symbolisieren den Datenfluss für Eingabedaten und Daten zum Start eines Rechenlaufs, die blauen Pfeile symbolisieren den Datenfluss nach Abschluss einer Modellrechnung, bzw. zur Rekonstruktion von Ausgabedaten, und die roten Pfeile symbolisieren den Datenfluss zwischen Rechenmodulen. Wegen der oft großen Datenmengen werden die Ausgabedaten eines Rechenlaufs nicht komplett in der Datenbank gespeichert, sondern in separaten ASCII-Dateien abgelegt. Der Pfad zum Ablageort wird vom Benutzer festgelegt und in der Datenbank gespeichert.

Der Datenaustausch zwischen der Datenbank und den Rechenmodulen erfolgt über eine JSON-Datei. JSON ist ein hierarchisches Format /WWW JS/. In Abb. 3.3 ist ein

Beispiel einer einfach aufgebauten Datei angegeben. Es handelt sich um ein Objekt mit dem Namen *nuda* in der Version *01\_02* mit Angaben zu Nukliden. Zu jedem Objekt von *nuclides* können als Eigenschaften der Name, die Halbwertszeit, ggf. die Namen der Zerfallsprodukte und der Strahlungstyp angegeben werden. Über die in Anführungszeichen gesetzten Namen der Objekte und Eigenschaften kann jedes Datum aus der JSON-Datei eindeutig zugeordnet werden.

```
{
  "Modules": [{
    "OBJECTDEF_NAME": "nuda",
    "OBJECTDEF_VERSION": "01_02",
    "nuclides": [{
      "nuclide": "C-14",
      "half life": 5730.0,
      "radiation type": "beta"
    }, {
      "nuclide": "Th-227",
      "decay product": "Ra-223",
      "decay product (index offset)": 1,
      "half life": 0.0513,
      "radiation type": "alpha"
    }
  ]
}]
}
```

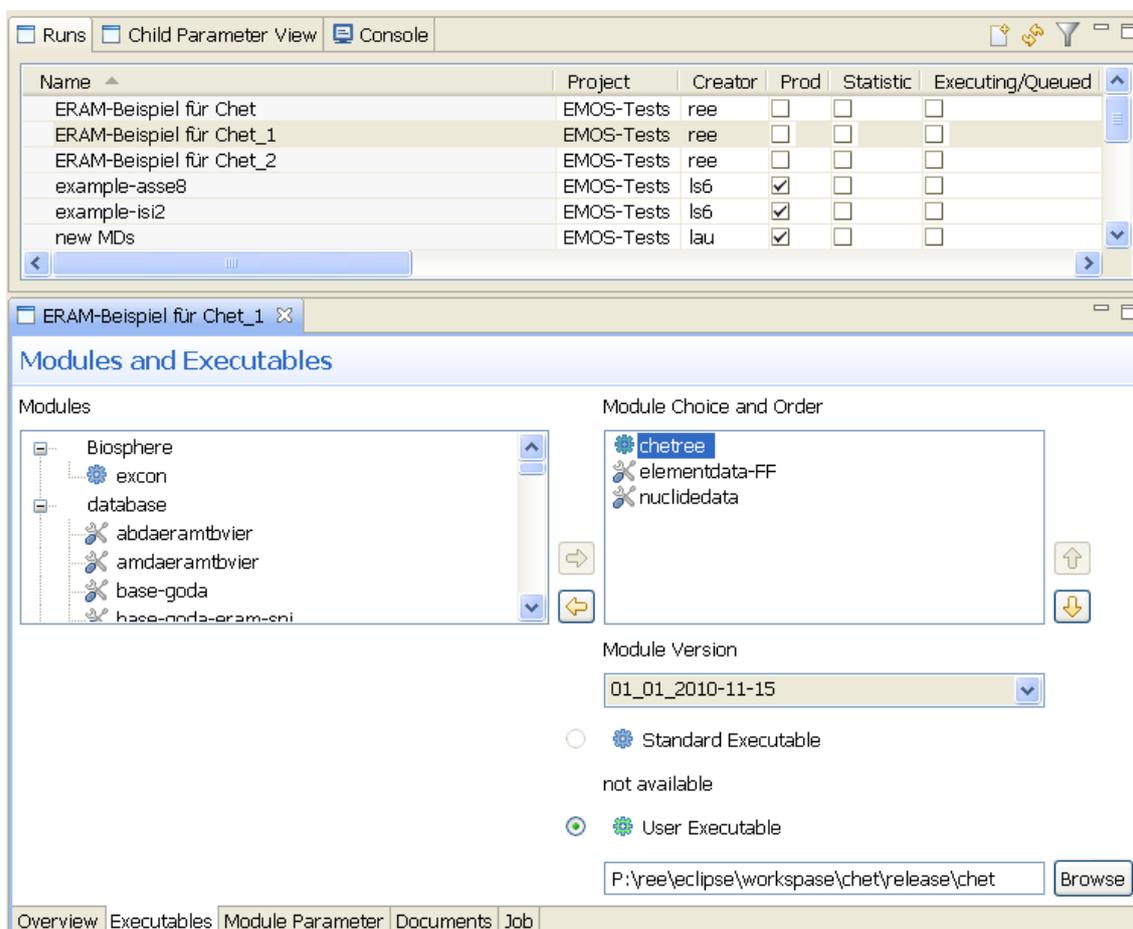
**Abb. 3.3** Beispiel für den Inhalt einer JSON-Datei

### 3.3 Anlegen und Spezifikation eines Rechenlaufs

Zum Anlegen eines Rechenlaufs wird zunächst ein Projekt ausgewählt, zu dem dieser Rechenlauf gehört. Nachdem dem Rechenlauf ein Name zugeordnet wurde, kann er weiter spezifiziert werden.

Zur Spezifikation eines Rechenlaufs gehört die Auswahl der Rechenmodule von Repo-TREND, die über die Auswahl der mit den entsprechenden Executables verknüpften XENIA-Module realisiert ist. In dem in Abb. 3.4 dargestellten Beispiel sind das Modul *chetree* und die Hilfsmodule *elementdata-FF* und *nucliddata* ausgewählt. Die Module werden in der hier angegebenen Reihenfolge während eines Rechenlaufs abgearbeitet. Die Reihenfolge im rechten Menüfenster ist beliebig veränderbar. Wird ein Modul in dem rechten Fenster ausgewählt, so erscheint in dem darunterliegenden Feld die Versions-

nummer des ausgewählten Moduls. Handelt es sich um eine freigegebene Version, so können die Angaben im oberen Bereich verwendet werden (Anklicken von *Standard Executable*). Handelt es sich um eine Arbeitsversion des Programmentwicklers, so werden die Angaben im unteren Bereich des Menüs eingetragen (Anklicken von *User Executable*). Durch diese Unterscheidung kann bei jedem Rechenlauf kenntlich gemacht werden, ob es sich um einen Produktionslauf (Standard-Executable) oder um einen Testlauf handelt (User-Executable). In der Abbildung ist ein Testlauf ausgewählt, der durch Angabe des Pfads eindeutig charakterisiert ist.



**Abb. 3.4** Ansicht zur Auswahl von Rechenmodulen

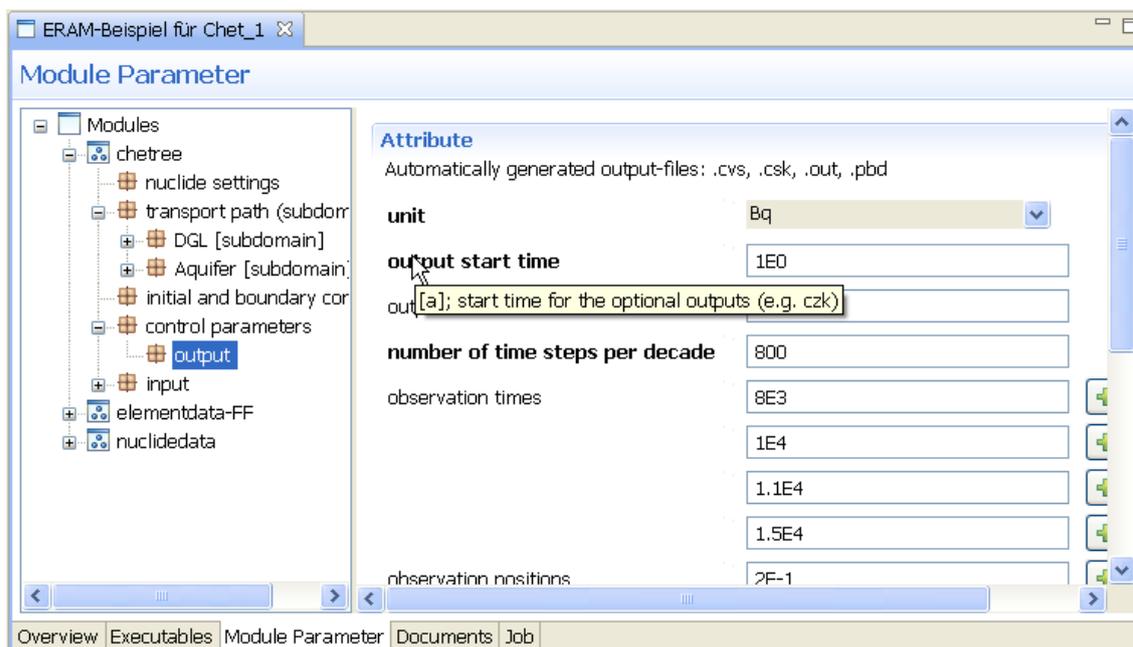
Ein gewähltes Modul inklusive der zugehörigen Versionsnummer definiert eindeutig die Masken für die Eingabe der von diesem Modul benötigten Daten.

Die Dateneingabe geschieht in der Ansicht *Module Parameter*. Fehlende oder fehlerhafte Daten werden in den Eingabemasken entsprechend gekennzeichnet. Erst nach-

dem alle erforderlichen Daten korrekt eingegeben wurden, lässt sich ein Rechenlauf starten.

Um die Dateneingabe zu vereinfachen, können Daten von vorhandenen Rechenläufen übernommen werden. In der aktuellen Version von XENIA ist dies nur für komplette Module möglich.

Während der Eingabe werden die eingegebenen Daten geprüft, d. h. es erfolgt eine Kontrolle auf Datentypen (z. B. Integer, Real, Character, usw.) und Wertebereiche (z. B.  $>0$ ). In der Konfigurationsdatei kann zu jedem Eingabefeld ein Kommentar eingefügt werden, der als Tooltip zu dem entsprechenden Feld angezeigt wird und dem Anwender Hilfestellungen für die Eingabe gibt. Durch diese Hilfsmittel wird ein wesentlicher Beitrag zur Qualitätssicherung bei der Eingabe der Daten ermöglicht. In Abb. 3.5 ist ein Beispiel für eine solche Eingabemaske mit einem Tooltip zu der Eingabezeile *output start time* dargestellt.



**Abb. 3.5** Ansicht für Dateneingabe

Solange ein Rechenlauf noch nicht gestartet worden ist, können die Daten beliebig verändert werden. Nach Start und Speicherung des Rechenlaufs wird der Rechenlauf als *Read Only* markiert, d. h. dass Daten nicht mehr geändert werden können. Ist dies doch erforderlich, so muss der Rechenlauf neu unter neuem Namen abgelegt werden (dupli-

zieren). Ein Administrator kann allerdings den Status *Read Only* auflösen, diese Option sollte jedoch nur in besonderen Fällen in Anspruch genommen werden.

### 3.4 Starten und Archivieren von Rechenläufen

Die Informationen, die zum Starten eines Rechenlaufs erforderlich sind, werden in einer eigenen Eingabemaske *Job Parameter and Execution* (s. Abb. 3.6) bereitgestellt. Neben Angaben zu dem Compute-Server, d. h. dem Rechner, auf dem Rechnungen durchgeführt werden sollen, sind Angaben zu den Pfaden für die Ablage der Ausgabedaten und weitere Angaben erforderlich.

The screenshot shows a window titled "ERAM-Beispiel für Chet\_1" containing a dialog box "Job Parameter and Execution". The dialog is organized into two main sections: "Job Parameter" and "Job Execution".

**Job Parameter section:**

- Target Host: a401-lkbs.grs.de
- Local Output Directory: P:\a401\projekte\ademos\xenia\tests\testfaelle\_chet\20101122\_eram\_test (with a "Browse..." button)
- Working Directory: work
- Queue: short
- Processor #: 1
- Remote User: ree
- Additional Files Filter: (empty)

**Job Execution section:**

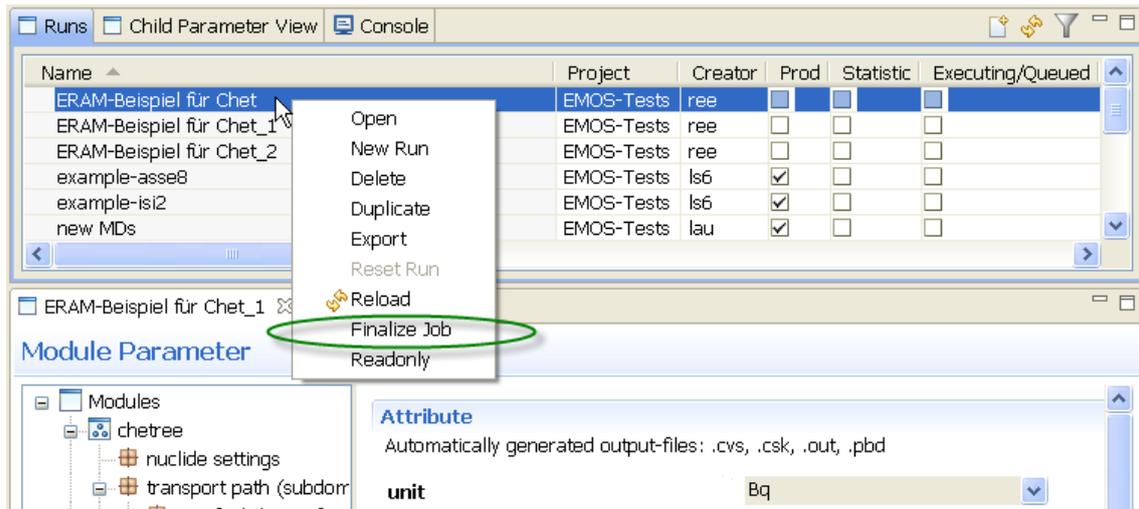
- Transfer job and schedule execution: (checkbox)
- Submit: (button)

At the bottom of the dialog, there are several tabs: Overview, Executables, Module Parameter, Documents, and Job.

**Abb. 3.6** Ansicht für Eingaben zum Starten von Rechenläufen

Nach Beendigung eines Rechenlaufs stehen die berechneten Ergebnisse im Arbeitsverzeichnis, das unter *Working Directory* angegeben wurde. Im letzten Schritt, dem Archivieren (über den Menüeintrag *Finalize Job* auszulösen wie in Abb. 3.7 gezeigt), werden

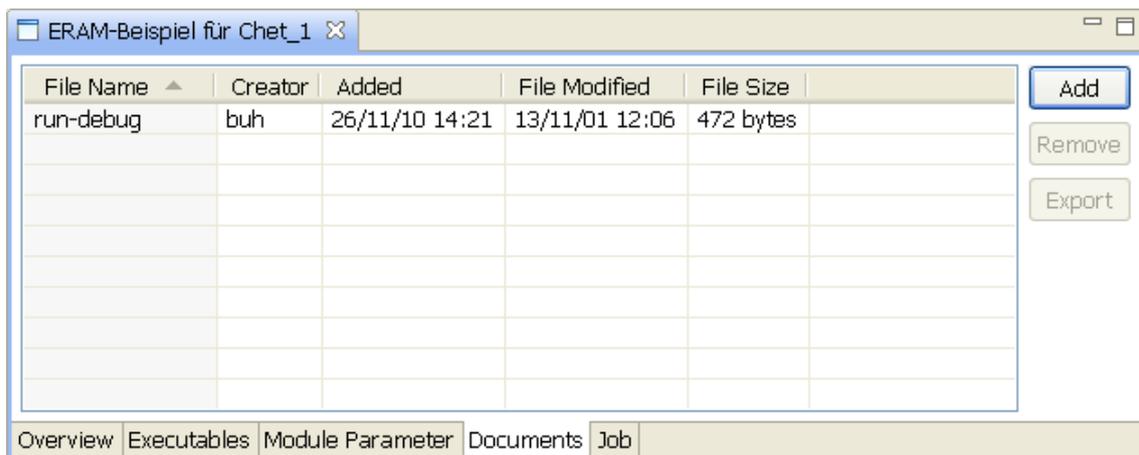
- die Ergebnisdateien in das unter *Local Output Directory* angegebene Verzeichnis verschoben,
- der Rechenlauf als *finalized* gekennzeichnet,
- ggf. Dateien, die dem unter *Additional Files Filter* angegebenen Filter entsprechen, als in der Datenbank anzulegende Dokumente dem Rechenlauf angefügt und
- weitere Kennzeichnungen gesetzt.



**Abb. 3.7** Rechenlauf archivieren

### 3.5 Hinzugefügte Dokumente zu einem Rechenlauf

Der Anwender kann zu jedem Rechenlauf beliebige Dokumente hinzufügen und später wieder entfernen. Für die Dokumentenverwaltung steht die in Abb. 3.8 dargestellte Ansicht *Documents* zur Verfügung. Dokumente können jederzeit exportiert werden. Als Beispiele für solche zusätzlichen Dateien seien Excel-Spreadsheets genannt, mit deren Hilfe Rechengrößen für den Rechenfall abgeleitet wurden.



**Abb. 3.8** Eingabeoberfläche zum Hinzufügen von Dokumenten

### 3.6 Zusammenfassung, Probleme, Ausblick

Die Bedienungsoberfläche XENIA liegt in der ersten Version für Anwendungsrechnungen mit RepoTREND vor. Der Schwerpunkt für diese Version lag auf der Entwicklung der Datenbankschnittstelle und der Struktur sowie einer ersten Realisierung der flexiblen Eingabeoberfläche. Weiterhin wurde die Verwaltung von Rechenläufen (Starten von Rechenläufen, Ablage der Ergebnisdateien, usw.) in die Oberfläche integriert.

Die erste Version von XENIA wurde für Testrechnungen im Rahmen des hier dokumentierten Vorhabens eingesetzt. Dabei hat sich die prinzipielle Einsatzfähigkeit gezeigt, jedoch ist der Verbesserungsbedarf der derzeitigen Version deutlich geworden. Die erforderlichen Verbesserungen betreffen hauptsächlich:

- die Flexibilität bei der Eingabe von Daten und
- die Verringerung des Bearbeitungsaufwands bei Änderung der Eingabemasken. Falls z. B. der Name eines Parameters oder seine Position in der Parameterliste geändert werden muss, so müssen zurzeit sämtliche Eingabedaten für das Modul neu eingegeben werden.

Um den Arbeitsaufwand und die Fehleranfälligkeit beim Spezifizieren und Verwalten der Rechenläufe zu reduzieren, sind folgende Verbesserungen und Erweiterungen nach derzeitigem Kenntnisstand geplant:

- umfangreiche Kopierfunktionen für eingegebene Daten, u. a. zum Kopieren von Datenblöcken unterhalb des Modul-Levels, z. B. von einzelnen *Objekten*,
- kontextsensitive Abhängigkeiten der Parameter (z. B. Auswahl aus der an einer zentralen Stelle bereits definierten Nuklidliste statt manueller fehleranfälliger Eingabe der Nuklide und ihrer Parameter),
- Verbesserung der Pflege von Modulbeschreibungen,
- übersichtliche Verwaltung von Benutzerrechten, Datenbanken, zugelassenen Compute-Server usw. über eine grafische Oberfläche (zurzeit über mehrere Konfigurationsdateien),
- Import von bereits existierenden Rechenläufen,

- Möglichkeit, beliebigen Parametern eine optionale statistische Spezifikation hinzuzufügen (zurzeit nur über manuell konfigurierte Statistik-Attribute möglich),
- Automatische Zuordnung von Executables zu Modulversion+Compute-Rechner,
- zusätzliche Filter- und Sortiermöglichkeiten (z. B. nach Datum, verwendeten Modulversionen, Ersteller usw.).

Die mit der Entwicklung der Bedienungsoberfläche verfolgte Strategie hat sich bewährt. Die Verwendung der Datenbank für die Verwaltung der Eingabedaten und der Rechenläufe führt zu einer besseren Qualitätskontrolle als bei der bisherigen Vorgehensweise, die auf schriftlichen Richtlinien für die Vorgehensweise und manuellen Datensicherungen basierte.

Mit der Entwicklung weiterer Module von RepoTREND sollten auch die genannten Maßnahmen zur Verbesserung der Bedienungsoberfläche umgesetzt werden, wodurch eine Vergrößerung der Einsatzbereiche von XENIA und eine Verringerung des Arbeitsaufwands erzielt wird.

## 4 GeoTREND

### 4.1 Problemstellung

Die Modellierung des Schadstofftransports durch das Deckgebirge ist ein wesentlicher Bestandteil der Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager in tiefen geologischen Formationen. Das EMOS-Programmpaket enthält eine Reihe von im Laufe der Jahre entwickelten Rechenmodulen (Fernfeldmodulen), die unterschiedliche Transportmodelle zur Simulation der eindimensionalen Schadstoffausbreitung durch die Geosphäre abbilden:

- CHET1 (auch unter CHETLIN bekannt) simuliert die Ausbreitung der Schadstoffe durch poröse Medien, wobei ein lineares Sorptionskonzept ( $K_d$ -Konzept) zur Beschreibung der Schadstoffrückhaltung eingesetzt wird /KUE 96/.
- CHET2 (auch als CHETNIS bezeichnet) ist eine Erweiterung des Programms CHET1 um nichtlineare Sorptionskonzepte /LUE 96/.
- CHETMAD bildet ein Modell der Ausbreitung von Schadstoffen durch ein geklüftetporöses System ab, d. h. durch Medien, die einen Poren-, Kluft- oder Kakiritgrundwasserleiter darstellen /LUE 01/.
- TRAPIC realisiert die Modellierung des kolloidbeeinflussten Schadstofftransports in porösen Medien /LUE 99/.

Die Programme wurden in FORTRAN umgesetzt. Die in den Rechenmodulen realisierten Fachkonzepte sind sorgfältig durchdacht und detailliert ausgearbeitet. Die zugrunde liegenden Programmiertechniken werden jedoch aus heutiger Sicht als veraltet angesehen. In diesem Kontext sind insbesondere schlechte Wartbarkeit, zeitaufwendige Weiterentwicklung und eingeschränkte Wiederverwendbarkeit des Codes zu hervorzuheben.

### 4.2 Zielsetzung und Projektstatus

Im Rahmen des Projekts ADEMOS erfolgt die Umstellung der Fernfeldmodule auf die modernen Programmierkonzepte entsprechend den aktuellen Software-Entwicklungstechnologien, um langfristig eine effiziente Weiter- sowie Neuentwicklung zu gewährleisten.

GeoTREND ist das neue Fernfeldmodulpaket, das die gesamte Familie von Modellen des Schadstofftransports durch das Deckgebirge enthalten soll. In der ersten Projektphase wurde GeoTREND-SP umgesetzt, in dem die in CHET1 und in CHET2 realisierten fachlichen Konzepte abgebildet worden sind. Die Integration weiterer Fernfeldmodule in das GeoTREND ist für die zweite Projektphase geplant.

Das Programm wurde komplett neu aufgebaut. Das Softwaredesign basiert auf dem objektorientierten Programmierparadigma. Als Programmiersprache wurde C++ gewählt. Die Rechenalgorithmen wurden gründlich überarbeitet:

- In die zugrunde liegenden fachlichen Konzepte flossen neu erworbene Erkenntnisse ein. Somit entspricht das abgebildete Transportmodell dem aktuellen Stand der Wissenschaft.
- Neue Anforderungen, die eine wesentlich flexiblere und detailliertere Transportmodellierung ermöglichen, wurden umgesetzt.
- Die numerischen Algorithmen wurden teilweise umgestellt. So wurden für die Zeitintegration das Crank-Nicolson- und das implizite Euler-Differenzenschema statt des expliziten Euler-Verfahrens umgesetzt. Die impliziten Ansätze erlauben Simulationen mit wesentlich größeren Zeitschritten. Folglich kann die Gesamtrechenzeit erheblich reduziert werden, was speziell bei probabilistischen Analysen, die typischerweise mehrere tausend oder zehntausend Rechenläufe erfordern, von großer Bedeutung ist. Die impliziten Methoden erfordern die Lösung eines Gleichungssystems in jedem Simulationsschritt. Diese Aktion beansprucht sehr viel Speicher. Die Rechnerhardware, für die die EMOS-Programmstrukturen ursprünglich entwickelt worden sind, konnte diesen Speicherbedarf bei weitem nicht abdecken. Erst die Leistungsfähigkeit heutiger Rechner ermöglicht daher den Einsatz hinsichtlich der Rechenzeit effizienterer numerischer Verfahren.

Mit der Umsetzung von GeoTREND-SP wurde die Grundlage für die Entwicklung weiterer Bestandteile von RepoTREND angelegt. Durch das sorgfältig ausgearbeitete OO-Design ist eine Wiederverwendbarkeit vieler vorhandener Bausteine gewährleistet. Die Software-Architektur legt eine Basisprogrammstruktur und Programmierrichtlinien für die Umsetzung weiterer RepoTREND-Bestandteile fest. Dadurch kann die Weiterentwicklung effizienter erfolgen.

## 5 Fernfeldmodul GeoTREND-SP

Im vorliegenden Kapitel wird das Fernfeldmodul GeoTREND-SP beschrieben. Nach der Einleitung werden die beim Schadstofftransport wirksamen Effekte erläutert und die eindimensionale Transportgleichung aufgestellt. Anschließend wird die numerische Umsetzung vorgestellt. Danach wird über die Arbeiten zur Verifizierung des Rechenmoduls berichtet.

### 5.1 Einleitung

GeoTREND-SP ist ein neu entwickeltes Fernfeldmodul, in dem die in CHET1 und CHET2 umgesetzten fachlichen Konzepte für die Simulation eines eindimensionalen Schadstofftransports durch das poröse, fluidgesättigte geologische Medium realisiert worden sind.

Folgende Effekte werden bei der Modellaufstellung betrachtet:

- advektiver Transport,
- diffusiver Transport,
- dispersiver Transport,
- elementspezifische Schadstoffrückhaltung unter Verwendung von Henry-, Langmuir- und Freundlich-Isothermen,
- zeitabhängiger Eingangsstrom der Schadstoffe,
- radioaktiver Zerfall unter Berücksichtigung von Radionuklidketten.

Die Modellierung des Schadstofftransports beruht auf einer eindimensionalen Transportgleichung für die Schadstoffkonzentrationen. Das hier entwickelte Modell basiert auf der in /KIN 92/ vorgestellten Modellierung und wird dahingehend auf die Radionuklide spezialisiert, dass der radioaktive Zerfall als eine Reaktion erster Ordnung in der Transportgleichung berücksichtigt werden kann.

Die Lösung der Transportgleichung erfolgt nach der Methode der Finiten Differenzen. Bei der Aufstellung der numerischen Verfahren wurden die Stabilität und Effizienz der Algorithmen als ein wesentliches Ziel angesehen. Die Zeitintegration und die Ortsdiskretisierung werden aufgrund der Benutzerangaben vorgenommen.

Als Schadstoffeingangsströme werden die von einem Nah- oder einem Fernfeldmodul berechneten Freisetzungsraten verwendet. Die Simulationsergebnisse werden zur Weiterverarbeitung in einer Reihe von Ausgabedateien gespeichert. Der Austausch der Ergebnisse zwischen den Modulen erfolgt zurzeit mittels Dateien. GeoTREND-SP ist aber so konzipiert, dass auch ein direkter interner Datenaustausch zwischen den Modulen ohne Dateizugriffe später möglich sein wird, wodurch eine bessere Performance erzielt werden kann.

Bei der Entwicklung von GeoTREND-SP wurden sowohl fachliche Konzepte als auch Konzepte für die numerische Umsetzung gründlich überarbeitet und erweitert. Zu den wichtigsten Änderungen gegenüber den CHET-Programmen zählen:

- Durch die ergänzte Randbedingung am Einstromrand können auch die Zuflüsse konstanter positiver Konzentrationen beschrieben werden. Dadurch ist es möglich, z. B. eine vorhandene Grundkontamination abzubilden oder auch die Sättigung des Grundwassers mit stabilen Nukliden, die das Sorptionsverhalten der Radionuklide desselben Elements beeinflussen, zu berücksichtigen. Die in CHET abgebildeten Randbedingungen setzen voraus, dass die Konzentration am Einstromrand null ist.
- Es ist möglich, mehrere Quellen innerhalb eines Transportwegs zu definieren. In CHET kann nur eine Quelle modelliert werden.
- Die Berechnung eines rein diffusiven Transports ist möglich. Die CHET-Rechenmodule sind für den diffusiven Fall nicht ausgelegt.
- Stabile Nuklide können als solche gekennzeichnet werden und werden entsprechend behandelt. In CHET wurden stabile Isotope näherungsweise als Radionuklide mit sehr hohen Halbwertszeiten modelliert.
- Die Interpolation der Ergebnisse für die Datenausgabe wurde abgeschafft. Damit wurde eine höhere Genauigkeit der ausgegebenen Daten und eine deutliche Reduzierung der Gesamtrechenzeit erreicht.
- Statt eines expliziten Differenzenschemas wurden implizite Verfahren für die Zeitintegration realisiert. Dadurch konnte u. a. eine effiziente automatische Steuerung der Zeitschrittlänge während der Gesamtsimulation konzipiert und integriert werden. Die Verwendung dieser Zeitschrittlängensteuerung senkt die Gesamtrechenzeit erheblich.

## 5.2 Transportrelevante Effekte

Im Folgenden werden die für den Transport der Schadstoffe durch ein poröses, fluidgesättigtes Medium wirksamen Effekte erläutert.

### 5.2.1 Advektion

Die Bewegung von Inhaltsstoffen mit der mittleren Geschwindigkeit des Trägerfluids wird *Advektion* genannt. Unter mittlerer Geschwindigkeit ist hier die Mittelung über die lokalen Geschwindigkeiten in Transportrichtung im flüssigkeitsgefüllten Porenvolumen zu verstehen. Sie wird Abstandsgeschwindigkeit genannt.

Im makroskopischen Maßstab kann der Transportweg als eine Röhre beschrieben werden, deren eindimensionales Geschwindigkeitsfeld durch den Volumenstrom  $\dot{V}$  gegeben ist. Die Abstandsgeschwindigkeit ist mit dem Volumenstrom über folgende Gleichung verknüpft:

$$u = \frac{\dot{V}}{n \cdot A} , \quad (5.1)$$

- $u$  Abstandsgeschwindigkeit des Fluids,
- $\dot{V}$  Volumenstrom,
- $n$  Porosität,
- $A$  Querschnittsfläche des Aquifers.

In die Berechnung der Abstandsgeschwindigkeit geht die Porosität  $n$  ein, die als Anteil des mobilen Porenwassers am Gesamtvolumen definiert ist. Der Anteil der in natürlichen Aquiferen vorhandenen sogenannten *dead-end-Poren* wird vernachlässigt, da angenommen wird, dass er besonders in Porenleitern gering ist /KIN 92/. Ein Unterschied zwischen Porosität und effektiver Porosität wird also nicht gemacht. Auch der Effekt der Matrixdiffusion bleibt damit unberücksichtigt.

### 5.2.2 Diffusion und Dispersion

Mit dem Begriff der *molekularen Diffusion* wird der durch die Brownsche Molekularbewegung hervorgerufene Ausgleich von Konzentrationsunterschieden bezeichnet. Die

molekulare Diffusion wird durch das Ficksche Gesetz beschrieben, das besagt, dass der diffusive Massenfluss proportional zum Gradienten der Konzentration ist. Die Proportionalitätskonstante ist die molekulare Diffusionskonstante  $D_m$ .

Innerhalb eines Porenraums, d.h. im mikroskopischen Bereich, existieren nur zwei grundlegende Transportmechanismen: die advektive Bewegung mit der lokalen Geschwindigkeit des Fluids sowie die molekulare Diffusion. Bei makroskopischer Betrachtung des porösen Mediums ergibt sich durch die Mittelung ein zusätzlicher Transporteffekt, die *hydraulische Dispersion* /KIN 92/.

Im physikalischen Sinn beschreibt die hydraulische Dispersion die Tatsache, dass die einzelnen Nuklide nicht mit der mittleren Geschwindigkeit des Fluids transportiert werden, sondern den aktuellen Wegen des Fluids (um Körner herum oder durch andere Inhomogenitäten beeinflusst) folgen. Die hydraulische Dispersion berücksichtigt somit Inhomogenitäten des Strömungsfeldes, die nicht in der Grundwasserbewegung explizit dargestellt werden. Solche zusätzlichen Inhomogenitäten entstehen z. B. durch horizontale Schichtungen des porösen Materials oder Linsen von undurchlässigem Material.

Die hydraulische Dispersion wird im Allgemeinen durch einen Ansatz beschrieben, der dem Fickschen Ansatz für die Diffusion analog ist. Statt der molekularen Diffusionskonstanten erscheint dann der *Dispersionskoeffizient*, der im dreidimensionalen Fall ein Tensor zweiter Stufe ist. Im eindimensionalen Fall kann der Dispersionskoeffizient  $D_h$  nach einem Ansatz von Scheidegger durch das Produkt aus longitudinaler Dispersionslänge  $\alpha$  und Abstandsgeschwindigkeit des Fluids dargestellt werden:

$$D_h = \alpha u \quad , \quad (5.2)$$

$D_h$     hydraulische Dispersion,

$\alpha$      Dispersionslänge.

Die Gültigkeit dieses Ansatzes wird durch zahlreiche Säulenversuche als praktikabel bestätigt /KIN 92/.

Die Bestimmung der Dispersionslänge stellt in großräumigen geologischen Systemen ein noch nicht gelöstes Problem dar /MAR 86/. Eine Ursache hierfür liegt in der in Expe-

perimenten beobachteten Abhängigkeit der Dispersionslänge von der zurückgelegten Strecke.

Im Folgenden wird *Dispersion*  $D$  als Oberbegriff für hydraulische Dispersion und Diffusion verwendet. Damit gilt

$$D = D_m + D_h = D_m + \alpha u \quad . \quad (5.3)$$

### 5.2.3 Rückhaltemechanismen

Bringt man eine unbelastete Festkörperoberfläche in Kontakt mit schadstoffhaltigem Fluid, so wird die Schadstoffkonzentration in der Lösung abnehmen, weil ein Teil der Schadstoffe an der Festkörperoberfläche angelagert wird.

Dieser Anlagerungsprozess von Teilchen an die Oberfläche bezeichnet man als *Adsorption*. Als Maß für die adsorbierte Stoffmenge dient die Oberflächenkonzentration, die als Masse der adsorbierten Teilchen pro Masse des adsorbierenden Feststoffes angegeben wird. Das Gleichgewicht zwischen gelöster und sorbierter Konzentration, welches sich unter isothermen Bedingungen einstellt, wird mit Hilfe einer Adsorptionsisotherme beschrieben:

$$c_{ad} = f(c) \quad (5.4)$$

In GeoTREND-SP wird zur Beschreibung der Rückhaltemechanismen angenommen, dass sich das Adsorptionsgleichgewicht sehr schnell einstellt. D. h. die adsorbierte Konzentration  $c_{ad}$  lässt sich in Abhängigkeit von der gelösten Konzentration  $c$  mit Hilfe der Adsorptionsisotherme gemäß (5.4) berechnen.

Die in GeoTREND-SP implementierten Sorptionsansätze beschränken sich auf die drei am häufigsten verwendeten Adsorptionsisothermen:

- Henry-Isotherme,
- Langmuir-Isotherme,
- Freundlich-Isotherme.

### 5.2.3.1 Henry-Isotherme

Die *Henry-Isotherme* beschreibt das Verhältnis von im Fluid gelöster Konzentration und an der Matrix sorbierter Stoffmenge durch einen linearen Zusammenhang. Dies basiert auf der Annahme, dass bei geringen Elementkonzentrationen und Vorliegen eines Gleichgewichts das Verhältnis zwischen der Masse des am Gestein adsorbierten Elements und der in Lösung vorliegenden Elementkonzentration konstant, d. h. unabhängig von der Konzentration ist. Dieses Verhältnis wird als Verteilungskoeffizient oder  $K_d$ -Wert bezeichnet:

$$K_d = \frac{c_{ad}}{c} , \quad (5.5)$$

- $K_d$  Verteilungskoeffizient ( $K_d$ -Wert) der Henry-Isotherme,
- $c_{ad}$  Konzentration des am Gestein adsorbierten Schadstoffs,
- $c$  Konzentration des Schadstoffs in Lösung.

### 5.2.3.2 Langmuir-Isotherme

Die *Langmuir-Isotherme* beschreibt das Verhältnis von im Fluid gelöster Konzentration und an der Matrix sorbierter Stoffmenge durch den Zusammenhang

$$c_{ad} = \frac{K_L c}{1 + \frac{K_L}{\kappa} c} , \quad (5.6)$$

- $K_L$  Bindungsaffinität,
- $\kappa$  Beladungskapazität.

Der Adsorptionsisotherme von Langmuir liegt die Modellvorstellung zugrunde, dass auf der Oberfläche des Sorbens eine definierte Zahl von identischen, voneinander unabhängigen Plätzen vorhanden ist. Die Langmuir-Isotherme verläuft bei hohen Konzentrationen asymptotisch gegen den Grenzwert  $\kappa$ , der die maximal vorhandene Anzahl von Sorptionsplätzen pro Masse Feststoff angibt. Für kleine Konzentrationen entspricht die Langmuir-Isotherme einer Henry-Isotherme mit dem Verteilungskoeffizient  $K_L$ .

### 5.2.3.3 Freundlich-Isotherme

Die *Freundlich-Isotherme* beschreibt das Verhältnis von im Fluid gelöster Konzentration und an der Matrix sorbierter Stoffmenge durch einen exponentiellen Zusammenhang:

$$c_{ad} = k_1 \left( \frac{c}{[c]} \right)^p, \quad (5.7)$$

$k_1$  Stoffkonstante,

$p$  Exponent,

$[c]$  bezeichnet die Maßeinheit von  $c$ , so dass die Basis zum Exponent  $k_2$  in Gleichung (5.7) dimensionslos ist.

Die Isotherme von Freundlich wurde zunächst empirisch gefunden. Unter Annahme einer logarithmischen Abnahme der Adsorptionswärme mit der Belegung der Sorptionsplätze lässt sie sich theoretisch ableiten. Sie verläuft bei hohen Konzentrationen nicht gegen einen Grenzwert, was bedeutet, dass eine unbegrenzte Anzahl von Sorptionsplätzen auf der Festkörperoberfläche angenommen wird. Der Exponent  $p$  ist in den meisten Fällen kleiner oder gleich eins. Er stellt ein Maß für die Nichtlinearität der Isotherme dar. Für  $p = 1$  geht die Isotherme in eine Gerade (Henry-Isotherme) über, deren Steigung durch den Parameter  $k_1$  bestimmt wird.

### 5.2.3.4 Retardationsfaktor

Der mobile Anteil  $a$  eines Schadstoffs steht mit der Adsorptionsisotherme in folgender Beziehung:

$$a = \frac{m_L}{m_L + m_{ad}} = \frac{nc}{nc + (1 - n)\rho f(c)}, \quad (5.8)$$

$a$  mobiler Anteil des Schadstoffs,

$\rho$  Gesteinsdichte,

$m_L$  gelöste Schadstoffmasse,

$m_{ad}$  sorbierte Schadstoffmasse.

Der mobile Anteil entspricht genau dem reziproken *Retardationsfaktor*  $R$ , der die Verzögerung eines Radionuklids gegenüber dem Fluid beschreibt /KIN 92/:

$$R = \frac{u}{u_N} = 1 + \frac{1-n}{n} \rho \frac{f(c)}{c}, \quad (5.9)$$

$u_N$  Abstandsgeschwindigkeit des Nuklids.

#### 5.2.4 Quellen und Senken

Als Quellen bzw. Senken werden alle Effekte außer den Transportmechanismen selbst und dem Rückhaltemechanismus bezeichnet, welche die Schadstoffkonzentration an einer beliebigen Stelle des Transportwegs verändern. Im Rahmen der Aufgabenstellung kommen hier in Betracht nur

- Schadstoffeintrag in den Transportweg,
- radioaktiver Zerfall für Radionuklide.

Ein Schadstoffeintrag in den Transportweg, z. B. ein Zustrom von Radionukliden aus einem Endlager, wird an einer beliebigen Stelle zugelassen. In der Transportgleichung wird der relevante Block durch einen volumenbezogenen Quellterm  $\sigma$  realisiert.

Der radioaktive Zerfall des betrachteten Radionuklids wird als Senke, der Aufbau aus zerfallenden Müttern als Quelle modelliert. Dabei wird angenommen, dass ein Radionuklid zwar mehrere Mütter, aber nur eine Tochter haben kann. Alle relevanten Zerfallsreaktionen lassen sich so wenigstens in guter Näherung beschreiben.

#### 5.3 Transportgleichung

Zur allgemeinen Herleitung der Transportgleichung siehe /KIN 92/, /BEA 79/, /BEA 87/. Für GeoTREND-SP wurde die in /KIN 92/ beschriebene Formulierung der eindimensionalen Transportgleichung zugrunde gelegt. In diesem Ansatz wird zusätzlich der radioaktive Zerfall einschließlich Zerfallsketten berücksichtigt, der Term, der Zu- und Abflüsse senkrecht zum Transportweg beschreibt, dagegen weggelassen. Die eindimensionale Transportgleichung lautet dann:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(nAc_k) + \frac{\partial}{\partial t}((1-n)\rho Ac_{ad,k}) = \\
& - \frac{\partial}{\partial x}(nAuc_k) + \frac{\partial}{\partial x} \left( nA(D_m + \alpha u) \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) \\
& - \lambda_k A(nc_k + (1-n)\rho c_{ad,k}) + A \sum_{k'} \lambda_{k'} (nc_{k'} + (1-n)\rho c_{ad,k'}) \\
& + \sigma_k A ,
\end{aligned} \tag{5.10}$$

$k$  Nuklidindex,

$k'$  Index für die Mütter des Radionuklids  $k$ .

Unter Verwendung elementsspezifischer Gleichgewichtssorption lässt sich die adsorbierte Konzentration  $c_{ad,k}$  entsprechend Gleichung (5.4) mit Hilfe der Isotherme schreiben:

$$c_{ad,k} = \frac{c_k}{c_{e(k)}} f(c_{e(k)}) , \tag{5.11}$$

$c_{e(k)}$  gelöste Gesamtkonzentration des Elements, dem das  $k$ -te Nuklid angehört.

Der elementsspezifische Retardationsfaktor  $R_k$  für das  $k$ -te Nuklid wird entsprechend Gleichung (5.9) definiert durch

$$R_k = 1 + \frac{1-n}{n} \rho \frac{f(c_{e(k)})}{c_{e(k)}} . \tag{5.12}$$

Unter Verwendung des Retardationsfaktors  $R_k$  kann die Transportgleichung (5.10) geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(nAR_k c_k) = - \frac{\partial}{\partial x}(nAuc_k) + \frac{\partial}{\partial x} \left( nAD \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) \\
& - \lambda_k nAR_k c_k + nA \sum_{k'} \lambda_{k'} R_{k'} c_{k'} + \sigma_k A ,
\end{aligned} \tag{5.13}$$

$t$  Zeit [a],

$x$  Ortskoordinate [m],

$c_k(x, t)$  Konzentration des Nuklids  $k$  in Lösung [mol/m<sup>3</sup>],

$n(x)$	Porosität [-],
$A(x)$	Querschnittsfläche des Aquifers senkrecht zum Transportweg [ $\text{m}^2$ ],
$R_k(x, t)$	elementspezifischer Retardationsfaktor des Nuklids $k$ [-],
$u(x)$	Abstandsgeschwindigkeit des Fluids [ $\text{m/a}$ ],
$D(x)$	Dispersionskonstante nach (5.3) [ $\text{m}^2/\text{a}$ ],
$\lambda_k$	Zerfallskonstante des Radionuklids $k$ [ $\text{a}^{-1}$ ],
$\sigma_k(x, t)$	volumenbezogener Quellterm des Nuklids $k$ [ $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{a}^{-1}$ ],
$k$	Nuklidindex,
$k'$	Index für die Mütter des Radionuklids $k$ .

Die Transportgleichung (5.13) ist für konzentrationsunabhängige Retardationsfaktoren  $R_k$  ( $K_d$ -Konzept) formal eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung vom parabolisch-hyperbolischen Typ mit den unabhängigen Variablen  $x$  und  $t$ . Eine detaillierte Klassifizierung /KIN 92/, /LAP 82/ ordnet der rein dispersiven Transportgleichung parabolischen Charakter, der rein advektiven Transportgleichung dagegen hyperbolischen Charakter zu. Der Charakter einer partiellen Differentialgleichung hat Einfluss auf die Form und Methode der Lösung.

Zur Lösung der Transportgleichung werden drei Gruppen von Daten benötigt:

- die Anfangsbedingungen,
- die Randbedingungen,
- die Werte für die in der Gleichung vorkommenden Parameter.

Die Anfangsbedingungen werden durch eine Verteilung der Schadstoffkonzentration im gesamten Aquifer zu dem Startpunkt der Simulation vorgegeben. Im Allgemeinen beginnt die Simulation mit dem Anfangszeitpunkt des Schadstoffeintrags. Somit kann angenommen werden, dass die Schadstoffkonzentration zu dem Simulationsbeginn in jedem Punkt des Transportwegs gleich ist, sie ist null oder hat einen konstanten Wert, je nachdem, ob es sich um ein kontaminiertes oder nicht kontaminiertes Medium handelt.

Als Randbedingung für den Einstromrand wird Undurchlässigkeit für Radionuklide angenommen. Dies bildet den advektiv dominierten Transport gut ab, weil der dispersive Teil des Schadstoffflusses am Einstromrand vernachlässigt werden kann. Für den diffusiven Transport stellt es eine konservative Näherung dar.

Am Ausstromrand ist die Vorgabe eines physikalisch sinnvollen Stroms im Allgemeinen nicht möglich. In der Praxis, wenn es einen Massenstrom über den Rand aus dem Gebiet hinaus gibt, wird häufig die sogenannte Transmissionsrandbedingung verwendet /KIN 92/, /LAP 82/, /RAU 02/. Sie verlangt, dass an einem Ausstromrand der Konzentrationsgradient nach innen gleich dem Konzentrationsgradient nach außen ist. Dies lässt sich mathematisch so ausdrücken:

$$\left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x=L} = 0 \quad , \quad (5.14)$$

$L$  Gesamtlänge des Transportwegs [m].

## 5.4 Numerische Modellierung

Analytische Lösungen der aufgestellten Transportgleichung (5.13) existieren nur für wenige Anwendungsfälle. Im Allgemeinen wird die Gleichung durch numerische Verfahren gelöst. Eine numerische Modellierung kann natürliche Prozesse nur grob abbilden, weil die Strukturen und Abläufe in einem Aquifer zu komplex sind. Die Berechnungen beruhen auf Vereinfachungen. Häufig sind nur wenig Daten und Parameter über das Einsatzgebiet bekannt. Die Vor- und Nachteile der numerischen Modelle werden jedoch bei der Abschätzung der errechneten Ergebnisse in Betracht gezogen, die Ungewissheit der Daten wird durch probabilistische Rechnungen berücksichtigt, was eine adequate Beurteilung der Prozessentwicklung im Einsatzgebiet ermöglicht. Durch die numerische Modellierung lassen sich beispielweise mögliche Probleme noch vor der Realisierung einer Maßnahme erkennen. Es können worst-case Szenarien simuliert werden, die bei der Entscheidungsfindung hilfreich sind.

Die wichtigsten Anforderungen an ein numerisches Verfahren sind, dass es möglichst hohe Genauigkeit aufweist, numerisch stabil ist und physikalisch sinnvolle Lösungen liefert. Wie gut das Verfahren ist, kann nicht pauschal gesagt werden, sondern nur in Anwendung auf ein konkretes Modell und für bestimmte Parameterbereiche. Daher ist es durchaus sinnvoll, soweit möglich, unterschiedliche Verfahren zu implementieren, damit mehr Freiraum bei der Modellierung gewährleistet wird.

Für die Transportmodellierung werden unterschiedliche numerische Verfahren zur Berechnung partieller Differentialgleichungen verwendet. Am häufigsten finden die *Finite*

*Differenzen Methode (FDM)* und die *Finite Elemente Methode (FEM)* Anwendung. Der Unterschied zwischen beiden besteht im Gitternetz.

Bei der FDM ist ein starres, rechteckiges Gitternetz vorgegeben. Die räumliche Auflösung von Rändern des Untersuchungsgebiets durch so ein Gitternetz ist für viele Anwendungsfälle recht unflexibel. Das Netz bei der FEM kann dagegen an die Ränder des Aussagegebiets sehr flexibel angepasst werden, weil die FE-Zellen in verschiedenen geometrischen Formen erstellt werden können. GeoTREND-SP ist für eindimensionale Anwendungsfälle bestimmt, bei denen das Modellgebiet als eine Aneinanderreihung der rechteckigen Blöcke mit unterschiedlichem Durchmesser dargestellt werden kann. Ein rechteckiges Gitternetz eignet sich zur Beschreibung solcher Geometrie hervorragend.

Der wesentliche Vorteil der FDM gegenüber der FEM besteht im erheblich geringeren Rechenaufwand. Die Ableitungen an den Gitterpunkten werden durch Differenzenquotienten approximiert. Die diskretisierte Differentialgleichung enthält keine Ableitungen mehr, sondern nur noch rein algebraische Ausdrücke. Damit ergibt sich ein Gleichungssystem, das mittels verschiedener Algorithmen entweder implizit oder explizit gelöst werden kann. Bei der FE-Methode wird eine Interpolationsfunktion zwischen zwei benachbarten Zellen aufgestellt, so dass eine sprungfreie Lösung generiert wird.

Die Programmierung von FD ist einfacher als bei FE. Wenn eine korrekte Diskretisierung gewährleistet wird, liefern FD zuverlässige Ergebnisse.

Nach dem Abwägen von Vor- und Nachteilen der beiden Methoden wurde eine FDM für den Einsatz in GeoTREND-SP gewählt.

Die Ableitungen in einer partiellen Differentialgleichung können durch die unterschiedlichen Differenzenquotienten ersetzt werden. Die dadurch definierten Differenzenverfahren werden durch Stabilität, Konsistenz und Konvergenz charakterisiert. Die Wahl der Differenzen hat u. a. auch Einfluss auf die Komplexität und die Genauigkeit des Lösungsalgorithmus /LAP 82/.

Ein Algorithmus wird als *stabil* bezeichnet, wenn sich Störungen oder Diskretisierungsfehler nicht mit fortschreitender Zeit aufschaukeln. Die zur Lösung der Differentialgleichung aufgestellte Differenzgleichung ist *konsistent*, wenn der Fehler, der bei der Approximation der Differentialoperatoren durch Differenzenquotienten unter Vernachlässi-

gung der höheren Glieder der Taylor-Entwicklung entsteht, bei örtlicher und zeitlicher Verfeinerung gegen null geht. Konsistenz ist also eine Eigenschaft eines numerischen Verfahrens, die bedeutet, dass der Algorithmus tatsächlich das gegebene Problem löst und nicht ein anderes. Die eigentliche Bedingung, welche die Differenzengleichung zu erfüllen hat, ist die *Konvergenz*. Dies bedeutet, dass die Lösung der Differenzengleichung in jedem Punkt des Lösungsgebietes bei Verfeinerung der örtlichen und zeitlichen Diskretisierung gegen die exakte Lösung der zugehörigen Differentialgleichung konvergiert. Ein konsistentes und stabiles Verfahren ist konvergent /KNA 00/.

Die Vorgehensweise, mit der eine FD-Approximation für ein gewisses Problem aufgestellt werden kann, umfasst drei Schritte:

- Zerlegung des Modellgebiets,
- Diskretisierung der Gleichung,
- Lösung des diskreten Gleichungssystems.

Im Folgenden wird die Aufstellung der in GeoTREND-SP realisierten Differenzengleichung beschrieben und werden ihre Eigenschaften untersucht.

#### **5.4.1 Gitterbildung**

GeoTREND-SP simuliert einen eindimensionalen Nuklidtransport durch das Deckgebirge. Für die Zelle in einem eindimensionalen Gitter wird im Weiteren der Begriff *Block* verwendet.

Bei der räumlichen Diskretisierung werden zwei Verfahren bei den FD-Methoden unterschieden: blockzentriertes und gitterzentriertes Verfahren. In GeoTREND-SP wurde das blockzentrierte Gitter umgesetzt. Beim blockzentrierten Verfahren werden die gesuchten Konzentrationen sowie die Umgebungsparameter dem Punkt zugeordnet, der sich in der Blockmitte befindet.

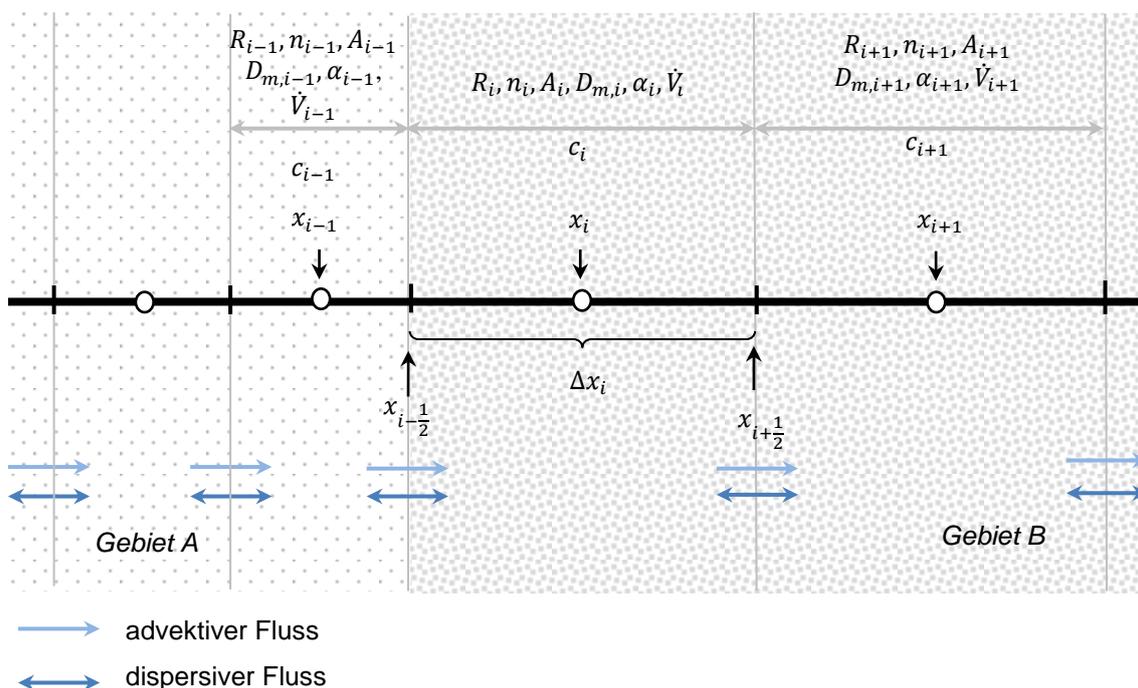
Der Transportweg wird durch eine Unterteilung in verschiedene, aufeinanderfolgende Gebiete festgelegt, wobei ein Gebiet durch eine einheitliche Materialbelegung und durch einen konstanten Querschnitt gekennzeichnet ist. Ein Material ist charakterisiert durch Porosität, Gesteinsdichte, Dispersionslänge und Rückhalteparameter. Weiterhin erfolgt

die Unterteilung jedes Gebiets in Blöcke. Die Blöcke eines Gebiets sind gleich lang. Die Blocklängen unterschiedlicher Gebiete können verschieden sein.

Zur Lösung der Transportgleichung (5.13) wird also der Transportweg in  $n$  Blöcke der Länge  $\Delta x_i$  unterteilt, deren Mittelpunkten Konzentrationen  $c_i$  zugeordnet werden. Innerhalb eines Blockes  $i$  sind die vorgegebenen Parameter konstant:

- Querschnitt  $A_i$ ,
- Porosität  $n_i$ ,
- Diffusionskonstante  $D_{m,i}$ ,
- Dispersionslänge  $\alpha_i$ ,
- Retardationsfaktor  $R_i$ ,
- Volumenstrom  $\dot{V}_i$ .

Abb. 5.1 zeigt einen Ausschnitt aus der Unterteilung des Transportweges mit einer Zuordnung der Parameter sowie die Flüsse, die zur Konzentrationsveränderung in einem beliebigen Block  $i$  führen.



**Abb. 5.1** Ausschnitt aus dem Transportweg mit Zuordnung der Parameter

Der Abstand zwischen zwei benachbarten Blockmittelpunkten wird folgendermaßen definiert:

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1} \quad . \quad (5.15)$$

#### 5.4.2 Advektionsterm

Die ersten Ortsableitungen im Advektionsterm werden durch Rückwärtsdifferenzen (*upwind*-Schema) ersetzt. Die zu den Ortsableitungen zugehörigen Koeffizienten sind variabel, ihr Wert an der Grenze zwischen zwei relevanten Blöcken wird als arithmetisches Mittel berechnet:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\dot{V}(x)c(x)) = c(x) \frac{\partial \dot{V}(x)}{\partial x} + \dot{V}(x) \frac{\partial c(x)}{\partial x} \quad , \quad (5.16)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} (\dot{V}(x)c(x)) \right|_{x=x_{i-\frac{1}{2}}} \approx \frac{c_i + c_{i-1}}{2} \cdot \frac{\dot{V}_i - \dot{V}_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{\dot{V}_i + \dot{V}_{i-1}}{2} \cdot \frac{c_i - c_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (5.17)$$

$$= \frac{\dot{V}_i c_i - \dot{V}_{i-1} c_{i-1}}{\Delta x_i} \quad .$$

#### Diskussion

Die Rückwärtsdifferenzenschema wird im Allgemeinen in den Modellen mit einer stark ausgeprägten Schadstoffverbreitungsrichtung eingesetzt. Dies ist beim advektionsdominierten Transport der Fall. Der Block  $i$  wird hauptsächlich von dem Block  $i - 1$  beeinflusst. Wenn die Ausbreitung der Schadstoffwolke weitgehend symmetrisch erfolgt, wie beim diffusionsdominierten Transport, wird das zentrale Differenzenschema empfohlen. Auf die Abläufe im Block  $i$  haben dabei beide benachbarten Blöcke  $i - 1$  und  $i + 1$  vergleichbare Auswirkungen.

Bei den für GeoTREND-SP vorgesehenen Aufgabenstellungen können sich Materialeigenschaften sowie weitere Einflussgrößen (Austritt der kontaminierten Salzlösung aus dem Grubengebäude in die Geosphäre an unterschiedlichen Stellen, Retardationsfaktor)

sowohl räumlich (von einem Bereich des Transportweges zum anderen) als auch zeitlich (im Laufe der Simulation) gravierend ändern. Dies kann u. U. dazu führen, dass ein anderer Transportmechanismus im Laufe der Zeit in bestimmten Wegabschnitten die dominierende Rolle übernimmt.

Anstatt sich vor Beginn der Rechnung auf ein bestimmtes Differenzenschema festzulegen, das dann während der gesamten Simulation gilt, wäre eine flexiblere Vorgehensweise denkbar. Für jeden Block könnte ermittelt werden, welcher Prozess den Schadstofftransport in diesem Block zu dem aktuellen Zeitpunkt am stärksten beeinflusst. Dementsprechend könnte das zu dem aktuellen Zeitpunkt am besten geeignete Differenzenschema individuell für jeden Block (per Schalter) eingesetzt werden.

Dieses viel versprechende Konzept wurde anfangs in GeoTREND-SP wie beschrieben umgesetzt. Die Tests haben jedoch ergeben, dass der Einsatz des zentralen Differenzenschemas für den Advektionsterm angewendet auf die Aufgabenstellungen, die typisch für die Langzeitsicherheitsanalysen sind, zu Problemen führt. Im Folgenden werden diese Probleme kurz erläutert.

Das Konzept der zentralen Differenzen setzt voraus, dass ein Signal sich im System weitgehend symmetrisch verbreitet, wobei unter einem Signal im beschriebenen Kontext die Schadstoffkonzentration zu verstehen ist. Wenn aber die Schadstoffquelle nah am undurchlässigen Rand (Randbedingung für den Einstromrand im GeoTREND-SP) platziert ist, so ist die symmetrische Verbreitung der Schadstoffe nicht mehr gewährleistet. Der Einsatz von zentralen Differenzen führt in diesem Fall zu unphysikalischen Effekten, z. B. einen Zuwachs der Gesamtschadstoffmasse. Um die Randeffekte auszuschließen, sollte die Quelle ausreichend weit vom Rand entfernt modelliert werden. Die korrekte Modellierung der erforderlichen Distanz vom Rand verlangt von einem Anwender bestimmte Kenntnisse in der Numerik, was nicht vorausgesetzt werden kann. Ein anderer Aspekt ist, dass die Verschiebung des Einstromrandes weiter von der Quelle und folglich die Vergrößerung des Gesamttransportwegs, die sich bei der entsprechenden Modelländerung ergäben, die Gesamtrechnzeit und den Speicherbedarf u. U. erheblich erhöhen würden. Solche Verlängerung des Transportwegs würde außerdem die konservativen Annahmen auflockern, weil ein Teil der Schadstoffe von der Quelle in Richtung des Einstromrandes diffundieren würde. Das beschriebene Problem tritt beim Rückwärtsdifferenzenschema nicht auf.

Ein weiteres Problem beim Einsatz der zentralen Differenzen bestand darin, dass Oszillationen teilweise bei wesentlich geringeren Zeitschrittlängen auftraten als beim Verwenden des Rückwärtsdifferenzenschema.

Der Vergleich der Testergebnisse zeigte, dass beide Differenzenverfahren in dem Bereich, in dem sie korrekt eingesetzt werden konnten, Ergebnisse liefern, die gut sowohl miteinander als auch mit den analytischen Lösungen übereinstimmen und eine ausreichend hohe Genauigkeit aufweisen. Das Rückwärtsdifferenzenschema funktioniert auch dann problemlos, wenn die Schadstoffquelle unmittelbar am Einstromrand platziert wird. Beim Einsatz von Rückwärtsdifferenzen konnten im Allgemeinen größere Zeitschrittlängen in der Simulation verwendet werden. Obwohl das Rückwärtsdifferenzenschema für den advektionsdominierten Transport ausgelegt ist, erweisen die mit Rückwärtsdifferenzen berechneten Ergebnisse eine hohe Genauigkeit auch bei Modellen mit rein diffusivem Transport. Dies ist damit zu erklären, dass der Beitrag durch den Advektionsterm bei einem diffusionsdominierten Schadstofftransport verschwindend klein ist, bei einem rein diffusiven Transport komplett verschwindet und damit das Ergebnis nicht beeinflusst.

Für den für GeoTREND-SP vorbestimmten Aufgabenbereich ist also der Rückwärtsdifferenzen-Ansatz dem zentralen Differenzenschema vorzuziehen. Basierend auf dieser Schlussfolgerung wurde die Entscheidung getroffen, nur das Rückwärtsdifferenzenschema zu unterstützen und den Programmcode entsprechend anzupassen. Durch die entsprechende Anpassung des Programmcodes wurde auch eine wesentliche Verbesserung der Performance erreicht, weil die Aktualisierung der entsprechenden Parameter nach jedem Zeitschritt und die notwendigen Abfragen für die Fallunterscheidung in jedem Simulationsschritt entfallen sind.

### 5.4.3 Dispersionsterm

Bei dem Dispersionsterm  $\frac{\partial}{\partial x} \left( nAD \frac{\partial c}{\partial x} \right)$  handelt es sich um eine zweite Ortsableitung mit einem variablen Koeffizient  $a(x) = nAD$ . Die Diskretisierung erfolgt nach dem zentralen Differenzenverfahren in zwei Schritten /HUY 83/, /LAN 03/.

Zuerst wird die äußere Ableitung diskretisiert:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( a(x) \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_i} \approx \frac{1}{\Delta x_i} \left( a \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} - a \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_{i-\frac{1}{2}}} \right) \quad (5.18)$$

Im zweiten Schritt wird die innere Ableitung ebenfalls durch zentrale Differenzen ersetzt:

$$a \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} \approx a_{i+\frac{1}{2}} \frac{c_{i+1} - c_i}{x_{i+1} - x_i} = a_{i+\frac{1}{2}} \frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta x_{i+1}} \quad (5.19)$$

Die Werte von  $a(x)$  an den Blockrändern  $a_{i+\frac{1}{2}}$  und  $a_{i-\frac{1}{2}}$  werden als Mittel der Werte zweier benachbarten Blöcke berechnet. Dafür gibt es i. A. drei Möglichkeiten:

- gewichtetes arithmetisches Mittel,
- gewichtetes harmonisches Mittel,
- gewichtetes geometrisches Mittel.

Der Dispersionskoeffizient in der im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse zu betrachteten Aufgabestellung ist i. A. eine unstetige Funktion, deren Werte sich sprunghaft an der Blockgrenze ändern können. Dabei leistet der Block mit dem minimalen Wert des Dispersionskoeffizienten den maximalen Widerstand. Bei diesem Sachverhalt verwendet man das gewichtete harmonische Mittel, das wie folgt definiert ist für den rechten Blockrand:

$$\overline{a}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_{i+1} - x_i}{\frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_i}{a_i} + \frac{x_{i+1} - x_{i+\frac{1}{2}}}{a_{i+1}}} = \frac{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) a_i a_{i+1}}{\Delta x_i a_{i+1} + \Delta x_{i+1} a_i} \quad (5.20)$$

und entsprechend für den linken Blockrand:

$$\overline{a}_{i-\frac{1}{2}} = \frac{(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}) a_{i-1} a_i}{\Delta x_{i-1} a_i + \Delta x_i a_{i-1}} \quad (5.21)$$

Das Einsetzen von (5.19), (5.20) und (5.21) in (5.18) ergibt für den Dispersionsterm

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( nAD \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_i} \approx \frac{1}{\Delta x_i} \left( \overline{nAD}_{i+\frac{1}{2}} \frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta x_{i+1}} - \overline{nAD}_{i-\frac{1}{2}} \frac{c_i - c_{i-1}}{\Delta x_i} \right) \quad (5.22)$$

#### 5.4.4 Quellterm

Ein Nuklideintrag finden in einem oder mehreren beliebig vorgebbaren Blöcken statt und wird während eines Zeitschritts als konstant angenommen. Damit ergibt sich für den entsprechenden Term in der Transportgleichung (5.13):

$$\sigma(t)A \approx \frac{q(t)}{\Delta x_i} , \quad (5.23)$$

$q(t)$  Einstromrate des Schadstoffs zum Zeitpunkt  $t$  [mol/a].

#### 5.4.5 Radioaktiver Zerfall

Die Diskretisierung der Terme, die in der Transportgleichung (5.13) die Änderung der Radionuklidkonzentration durch den radioaktiven Zerfall wiedergeben, ergibt:

$$-\lambda n A R c + n A \sum_k \lambda_k R_k c_k \approx -\lambda n_i A_i R_i c_i + n_i A_i \sum_k \lambda_k R_{k_i} c_{k_i} , \quad (5.24)$$

$k$  Index für die Mütter des Radionuklids.

### Diskussion

In diesem Abschnitt werden Überlegungen erläutert, die die Entscheidung darüber geprägt haben, wie die Berücksichtigung von radioaktiven Zerfallsprozessen in Geo-TREND-SP realisiert ist, die von der früheren Vorgehensweise in CHET1 und CHET2 sowie im Nahfeldmodul LOPOS abweicht. Zur Vereinfachung wird der Beitrag zur Konzentrationsänderung eines Radionuklids durch den Zerfall seiner Mütter in diesem Abschnitt nicht berücksichtigt.

Eine Zerfallskonstante  $\lambda$  kann als "Geschwindigkeit", mit der das entsprechende Radionuklid zerfällt, aufgefasst werden. Ist die Anzahl der Atome  $N$  einer Radionuklidprobe zum Zeitpunkt  $t$  bekannt, so kann die volumenbezogene Aktivität folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$c(t) = \lambda N(t) = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = c_0 e^{-\lambda t} , \quad (5.25)$$

- $N_0$  volumenbezogene Anzahl der Atome zum Zeitpunkt  $t = 0$ ,  
 $c_0$  volumenbezogene Aktivität zum Zeitpunkt  $t = 0$ .

Der Abbau eines Radionuklids durch den radioaktiven Zerfall wird entsprechend (5.25) mit einer Reaktion erster Ordnung beschrieben:

$$\frac{dc(t)}{dt} = -\lambda c(t) . \quad (5.26)$$

Für die Zeitintegration wurde in CHET1 und CHET2 wie auch im Nahfeldmodul LOPOS das explizite Differenzenschema eingesetzt, d. h. dass für die Berechnung der unbekanntes Konzentration im aktuellen Zeitschritt  $c(t)$  der aus dem letzten Zeitschritt bereits berechnete Wert  $c(t - \Delta t)$  verwendet wird. Auf den Zerfall angewandt würde das bedeuten:

$$\frac{c(t) - c(t - \Delta t)}{\Delta t} = -\lambda c(t - \Delta t) , \quad (5.27)$$

$$c(t) = c(t - \Delta t) - \lambda \Delta t c(t - \Delta t) . \quad (5.28)$$

Der explizite Ansatz führt zu einem Stabilitätsproblem, wenn  $\lambda \Delta t > 1$ . Die Zeitschrittlänge muss also so klein gewählt werden, dass innerhalb eines Zeitintervalls  $[t - \Delta t, t]$  rechnerisch nicht mehr Radionuklidmenge abgebaut werden kann als anfänglich im Block vorhanden ist. Dies bedeutet:

$$\Delta t \leq \frac{1}{\lambda} . \quad (5.29)$$

Die Bedingung (5.29) stellt damit das zusätzliche Stabilitätskriterium des expliziten numerischen Verfahrens dar, das streng erfüllt werden muss. Die Einhaltung des Stabilitätskriteriums (5.29) kann die Wahl der maximal zulässigen Zeitschrittlänge sehr beeinträchtigen und folglich zu hohen Gesamtrechnenzeiten führen. Um dieses Problem zu umgehen, wurde in CHET1 und CHET2 sowie auch in LOPOS bewusst auf die Modellierung des Zerfalls nach (5.28) verzichtet. Stattdessen wird die analytische Formel zur Berücksichtigung der Zerfallsprozesse herangezogen. Dabei wurden zwei unterschiedliche Ansätze verfolgt:

Die Berechnung des Beitrags zur Änderung der Radionuklidkonzentration durch den Zerfall ist in LOPOS wie folgt realisiert /STR 96/:

$$c(t - \Delta t) - c(t) = c(t - \Delta t) - c(t - \Delta t)e^{-\lambda\Delta t} \quad . \quad (5.30)$$

Zur Ermittlung werden ausschließlich bereits bekannte Werte der "alten" Zeitebene  $c(t - \Delta t)$  verwendet. Dieser Beitrag wird als entsprechender Term in der diskretisierten Bilanzgleichung berücksichtigt.

In CHET1 und CHET2 wurde ein anderes Verfahren umgesetzt. Im ersten Schritt wird die Nuklidkonzentration aus der Transportberechnung ohne Zerfall  $\tilde{c}(t)$  ermittelt. Im Anschluss wird die analytische Formel zur Bestimmung der gesuchten Radionuklidkonzentration zum Zeitpunkt  $t$  folgendermaßen eingesetzt /KUE 96/, /LUE 96/:

$$c(t) = \tilde{c}(t)e^{-\lambda\Delta t} \quad . \quad (5.31)$$

Die Verwendung der Exponentialfunktion lässt in diesem Kontext zunächst beliebig große Zeitschritte zu, ohne die Stabilität des numerischen Algorithmus zu gefährden. Diese beiden Herangehensweisen verletzen jedoch die Regeln des expliziten Zeitintegrationskonzepts, was im Zusammenspiel mit den simultan verlaufenden Konzentrationsänderungen durch Transport und Adsorption zu einer Fehlbilanzierung bis hin zur numerischen Instabilität führen kann. Bei in Bezug auf den Parameter  $\Delta t$  hohen Halbwertszeiten sind die Konzentrationsänderungen durch den radioaktiven Zerfall innerhalb eines Zeitschritts sehr gering. Dementsprechend akzeptabel klein ist auch der Fehler. Bei kleineren Halbwertszeiten ist die Auswirkung des Zerfallsprozesses während eines Zeitschritts jedoch wesentlich. In diesem Fall können die Ergebnisse erhebliche Fehler aufweisen, was die im Abschnitt 5.6.1.3 beschriebenen Tests bestätigen. Durch eine Minimierung des Zeitschritts kann der Fehler reduziert werden. Die Zeitschrittlänge  $\Delta t$  in CHET1 und CHET2 sowie auch in LOPOS wird ausschließlich durch die *Courant-*, *Pecletzahl-* und *Neumann-*Stabilitätskriterien bestimmt. Die Überlegung, dass der Parameter  $\Delta t$  zusätzlich ins Verhältnis zu Halbwertszeiten gestellt werden muss, ist nicht umgesetzt. In den Fernfeldmodulen CHET1 und CHET2 besteht jedoch die Möglichkeit, die Zeitschrittlänge anhand eines vom Benutzer vorgebbaren Multiplikationsfaktors entsprechend zu verringern.

In GeoTREND-SP wurden implizite Zeitintegrationsverfahren realisiert. Bei einer impliziten Zeitintegration werden die unbekanntenen Werte aus dem aktuellen Zeitschritt  $t$  bei der Auswertung der Terme eingesetzt. Z. B. für das implizite Euler-Schema:

$$\frac{c(t) - c(t - \Delta t)}{\Delta t} = -\lambda c(t) \quad . \quad (5.32)$$

Der implizite Ansatz führt zu einem Gleichungssystem, das gelöst werden muss. Beim impliziten Verfahren (5.32) entstehen keine Stabilitätsprobleme. Der Ausdruck (5.32) kann umgeformt werden in

$$c(t) = \frac{c(t - \Delta t)}{1 + \lambda \Delta t} \quad . \quad (5.33)$$

Aus der Formel (5.33) wird es leicht ersichtlich, dass bei diesem Ansatz die im aktuellen Zeitschritt zerfallene Stoffmenge bei beliebig gewählten Zeitschrittlängen  $\Delta t$  die anfangs vorhandene Menge nicht überschreiten kann. Das in GeoTREND-SP umgesetzte numerische Verfahren ist in diesem Kontext absolut stabil.

Die Einschränkung bei der Wahl des Zeitschritts  $\Delta t$  entsteht daher lediglich durch die Anforderung an die Genauigkeit der Ergebnisse. Die Gleichungen (5.27) und (5.32) entstehen durch eine Linearisierung der Exponentialfunktion, das heißt, dass die Terme höherer Ordnung nach der Taylor-Entwicklung der Funktion vernachlässigt werden. Die Zeitschrittweite  $\Delta t$  muss so gewählt werden, dass der Abschneidefehler tatsächlich als verschwindend klein angesehen werden darf. Eine mit der Halbwertszeit des Radionuklids vergleichbare Zeitschrittlänge wäre zu grob, um die Entwicklung mit ausreichender Genauigkeit abzubilden. Der Einsatz der Verfahren höherer Ordnung, wie z. B. das in GeoTREND-SP realisierte Crank-Nicolson-Verfahren, erlaubt im Hinblick auf die Genauigkeit eine wesentlich flexiblere Wahl der Zeitschrittlänge. Im Abschnitt 5.5.3.2 wird erläutert, wie dieser Aspekt in GeoTREND-SP bei der Entscheidung über den Parameter  $\Delta t$  berücksichtigt wird.

#### **5.4.6 Zeitintegration**

Nach der FD-Methode wird die zeitliche Ableitung durch einen Differenzenquotienten angenähert:

$$\frac{\partial(Rc)}{\partial t} \approx \frac{R(t)c(t) - R(t - \Delta t)c(t - \Delta t)}{\Delta t} . \quad (5.34)$$

Damit stellt die Zeit kein Kontinuum mehr dar und muss zur Lösung des Transportproblems diskretisiert werden.

Die Transportgleichung (5.13) kann aufgeschrieben werden als

$$nA \frac{\partial(Rc)}{\partial t} = F(x, t) . \quad (5.35)$$

Bei der Zeitdiskretisierung muss festgelegt werden, zu welchem Zeitpunkt die auf der rechten Seite von (5.35) in den örtlichen Differenzenquotienten auftretenden Konzentrationen zu nehmen sind. Die allgemeine Vorschrift verwendet ein gewichtetes Mittel:

$$\frac{R(t)c(t) - R(t - \Delta t)c(t - \Delta t)}{\Delta t} = \omega F(x, t) + (1 - \omega)F(x, t - \Delta t) , \quad (5.36)$$

$\omega$  Gewichtsparameter mit dem Wertebereich  $[0,1]$ .

Es werden grundsätzlich zwei Verfahren unterschieden: *explizite* und *implizite*. Das *explizite Euler Verfahren* ergibt sich bei  $\omega = 0$ , wenn zur Berechnung der Konzentration zum Zeitpunkt  $t$  die ausschließlich aus dem vorigen Zeitschritt  $t - \Delta t$  bereits bekannten Konzentrationswerte  $c(t - \Delta t)$  herangezogen werden. Beim expliziten Verfahren kann jede Gleichung separat nach der Unbekannten  $c(t)$  aufgelöst werden und ist von der Form:

$$c(t) = f(c(t - \Delta t)) . \quad (5.37)$$

Bei  $\omega > 0$  spricht man von impliziten Verfahren. Bei einem impliziten Verfahren werden bei den Berechnungen zum Zeitpunkt  $t$  die unbekannt Konzentrationen  $c(t)$  auch auf der rechten Seite von (5.36) eingesetzt. Dies bewirkt, dass zur Berechnung der Konzentrationsverteilung zum Zeitpunkt  $t$  die Lösung eines Gleichungssystems mit  $n$  simultanen linearen Gleichungen für die  $n$  unbekannt Konzentrationen erforderlich ist, wobei  $n$  die Anzahl der Blöcke ist.

In GeoTREND-SP wurden die zwei am häufigsten verwendeten impliziten Verfahren realisiert:

- das *voll implizite* oder *implizite Euler-Verfahren*, das sich ergibt, wenn der Parameter  $\omega = 1$  gewählt wird,
- das *Crank-Nicolson-Verfahren*, das der Wahl des Parameters  $\omega = 0,5$  entspricht und damit die zentralen Differenzen in der Zeit darstellt.

## Diskussion

Der größte Vorteil von expliziten Verfahren ist ihre einfache und kostengünstige numerische Behandlung, weil die resultierenden Gleichungssysteme nach den Funktionswerten der neuen Zeitebene explizit aufgelöst werden können, so dass eine direkte Berechnung des unbekanntes Wertes  $c(t)$  aus den bekannten Werten  $c(t - \Delta t)$  ermöglicht wird.

Die impliziten Verfahren führen dagegen zu einem Gleichungssystem, aus welchem die Werte für den aktuellen Zeitpunkt  $t$  ermittelt werden müssen. Die Lösung eines Gleichungssystems ist sehr rechenzeitintensiv.

Allerdings sind die expliziten Verfahren mit einer starken Einschränkung verbunden. Sie betrifft die maximal zulässigen Zeitschrittweite  $\Delta t_{\max}$ . Wenn die Zeitschrittlänge  $\Delta t$  den maximal zulässigen Wert  $\Delta t_{\max}$  überschreitet, wird der numerische Algorithmus instabil.

Die in GeoTREND-SP realisierten impliziten Verfahren sind dagegen absolut, d. h. unabhängig von der Zeitschrittweite  $\Delta t$  stabil. Dies ermöglicht i. A. den Einsatz von wesentlich größeren Zeitschritten, was folglich zu einer deutlich geringeren Anzahl der für die Simulation erforderlichen Zeitschritte führt. Dadurch kann der Gesamtrechenaufwand erheblich reduziert werden, obwohl die Behandlung eines einzelnen Zeitschritts gegenüber den expliziten Verfahren wesentlich mehr Rechenzeit erfordert.

Einschränkungen auf die Länge des Zeitschritts sind aber auch durch die Anforderungen an die Genauigkeit der Ergebnisse bedingt. Das Crank-Nicolson-Verfahren gehört zu den Verfahren 2. Ordnung. Die akzeptable Genauigkeit kann bei diesem Diskretisierungsverfahren im Vergleich zu den Verfahren erster Ordnung mit größeren Zeitschrittlängen erreicht werden.

Das voll implizite oder implizite Euler- wie auch das explizite Euler-Verfahren führen zu Diskretisierungsverfahren, die bezüglich der Zeitkoordinate lediglich erster Ordnung genau sind. Es ist interessant, dass die absolute Stabilität des impliziten Euler-Verfahrens keinerlei Vorteile bei der Wahl des Parameters  $\Delta t$  bringen kann. Das Ersetzen der Ableitungen erster Ordnung nach Ort und Zeit durch entsprechende Differenzenquotienten bringt Abbruchfehler mit sich, die zu signifikanten numerischen Dispersionen führen können. Im Abschnitt 5.4.11.3 ist es erläutert, wie die Transportgleichung angepasst wird, um diesem Problem entgegenzuwirken. Der Dispersionskoeffizient wird dabei folgendermaßen modifiziert:

$$D_c = D - \frac{1}{2}u\Delta x - \frac{1}{2}\frac{u^2}{R}\Delta t . \quad (5.38)$$

Die numerische Dispersion darf die physikalische nicht überschreiten. Genau diese Anforderung stellt eine Einschränkung auf die Wahl der Zeitschrittweite  $\Delta t$ :

$$\frac{1}{2}u\Delta x + \frac{1}{2}\frac{u^2}{R}\Delta t \leq D . \quad (5.39)$$

Bei der expliziten Methode hat der Abbruchfehler bezüglich der Zeitkoordinate das andere Vorzeichen, so dass er durch den aus der Ortsdiskretisierung stammenden Fehler reduziert wird, was die Problematik bezüglich der numerischen Dispersion an dieser Stelle deutlich mildern kann:

$$\frac{1}{2}u\Delta x - \frac{1}{2}\frac{u^2}{R}\Delta t \leq D . \quad (5.40)$$

Somit kann die beim impliziten Euler-Verfahren einzuhaltende Bedingung (5.39) an die Zeitschrittweite  $\Delta t$  sogar wesentlich strikter sein als die Anforderungen, die die Stabilitätskriterien expliziter Verfahren an die Länge des Zeitschritts stellen.

Die Tatsache, dass der Einsatz der impliziten Euler-Zeitintegration im Falle der Transportgleichung (5.13) im Vergleich zu expliziten Verfahren wenig Sinn macht, kann allerdings nicht verallgemeinert werden. Es sind Aufgabenstellungen denkbar, bei denen

- die zeitliche Änderung gar nicht bzw. nur ganz langsam erfolgt oder
- der Diffusionsprozess dominiert ( $u \approx 0$ ).

Wird die Lösung eines solchen Problems gesucht, so kommt man mit dem impliziten Euler-Verfahren schneller ans Ziel als mit dem expliziten, weil die Möglichkeit, mit wesentlich größeren Zeitschrittweiten zu arbeiten, die Verluste durch die aufwändigere Lösung des Gleichungssystems mehr als ausgleicht. In solchen Fällen ist das implizite Euler-Verfahren auch dem Crank-Nicolson-Verfahren vorzuziehen. Beim Crank-Nicolson-Differenzenschema ist die Berechnung von Koeffizienten des resultierenden Gleichungssystems aufwändiger als beim voll impliziten Euler-Verfahren, weil sowohl der implizite als auch explizite Anteile ermittelt werden müssen.

#### **5.4.7 Resultierende Differenzgleichung**

In der Differenzialgleichung zur Beschreibung des eindimensionalen Schadstofftransports durch das Deckgebirge (5.13) werden die Ableitungen in Raum und Zeit durch die in vorigen Abschnitten beschriebenen Differenzenquotienten dargestellt. Die Approximation durch Differenzenquotienten führt dazu, dass sowohl das Modellgebiet als auch der Simulationszeitraum kein Kontinuum mehr darstellen. Die Konzentrationen werden nicht mehr zu jeder Zeit überall im Transportweg berechnet, sondern nur noch an den Blockmittelpunkten zu den spezifizierten Zeitpunkten. Die resultierende diskretisierte Differenzgleichung hat die Form:

$$\begin{aligned}
& n_i A_i \frac{R_i(t)c_i(t) - R_i(t - \Delta t)c_i(t - \Delta t)}{\Delta t} = \frac{q(t)}{\Delta x_i} \\
& + \omega \cdot \left[ -\frac{\dot{V}_i(t)c_i(t) - \dot{V}_{i-1}(t)c_{i-1}(t)}{\Delta \chi_i} \right. \\
& \quad + \frac{1}{\Delta x_i} \left( \frac{1}{nAD_{c_{i+\frac{1}{2}}}}(t) \frac{c_{i+1}(t) - c_i(t)}{\Delta \chi_{i+1}} - \frac{1}{nAD_{c_{i-\frac{1}{2}}}}(t) \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta \chi_i} \right) \\
& \quad \left. - \lambda n_i A_i R_i(t)c_i(t) + n_i A_i \sum_k \lambda_k R_{k_i}(t)c_{k_i}(t) \right] \\
& + (1 - \omega) \cdot \left[ -\frac{\dot{V}_i(t - \Delta t)c_i(t - \Delta t) - \dot{V}_{i-1}(t - \Delta t)c_{i-1}(t - \Delta t)}{\Delta \chi_i} \right. \\
& \quad + \frac{1}{\Delta x_i} \left( \frac{1}{nAD_{c_{i+\frac{1}{2}}}}(t - \Delta t) \frac{c_{i+1}(t - \Delta t) - c_i(t - \Delta t)}{\Delta \chi_{i+1}} \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{nAD_{c_{i-\frac{1}{2}}}}(t - \Delta t) \frac{c_i(t - \Delta t) - c_{i-1}(t - \Delta t)}{\Delta \chi_i} \right) \\
& \quad \left. - \lambda n_i A_i R_i(t - \Delta t)c_i(t - \Delta t) \right. \\
& \quad \left. + n_i A_i \sum_k \lambda_k R_{k_i}(t - \Delta t)c_{k_i}(t - \Delta t) \right] .
\end{aligned} \tag{5.41}$$

In jedem Zeitschritt ist demnach ein System aus  $n$  linearen Gleichungen mit  $n$  Unbekannten  $c_i$  ( $i \in [1, n]$ ) zu lösen.

Das Gleichungssystem (5.41) kann in der Matrixform folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$\mathbf{M}\mathbf{c}^l = \mathbf{B}\mathbf{c}^{l-1} + \mathbf{g} . \tag{5.42}$$

$l$  laufender Index für die Zeit,

$\mathbf{c}^l$  zu dem Zeitschritt  $l$  gesuchter Lösungsvektor  $(c_1^l, \dots, c_n^l)^T$ ,

$\mathbf{c}^{l-1}$  aus dem vorigen Zeitschritt  $l - 1$  bekannter Lösungsvektor.

Die Einträge des Vektors  $\mathbf{g}$  sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
g_i &= \frac{q(t)}{\Delta x_i} \\
&+ \omega \cdot n_i A_i \sum_k \lambda_{k_i} R_{k_i}(t) c_{k_i}(t) \\
&+ (1 - \omega) \cdot n_i A_i \sum_k \lambda_k R_{k_i}(t - \Delta t) c_{k_i}(t - \Delta t) .
\end{aligned} \tag{5.43}$$

Das Programm ist so organisiert, dass die Abarbeitung einer Zerfallsreihe mit den obersten Mutternukliden beginnt und mit dem letzten Tochternuklid endet. Die Berechnung eines Radionuklids setzt erst dann ein, wenn alle seine Mutternuklide bereits abgearbeitet und die Konzentrationswerte  $c_{k_i}(t)$  bereits bekannt sind.

Die rechte Seite von (5.42) kann zu einem Vektor  $\mathbf{b}$  zusammengefasst werden:

$$\mathbf{b} = \mathbf{B}\mathbf{c}^{l-1} + \mathbf{g} . \tag{5.44}$$

Zur Vereinfachung werden folgende Hilfsgrößen eingeführt:

$$A_{i,i-1} = -\frac{\dot{V}_{i-1}}{\Delta \chi_i} - \frac{\overline{nAD}_{c_{i-\frac{1}{2}}}}{\Delta x_i \Delta \chi_i} , \tag{5.45}$$

$$A_{i,i} = \frac{\dot{V}_i}{\Delta \chi_i} + \frac{\overline{nAD}_{c_{i+\frac{1}{2}}}}{\Delta x_i \Delta \chi_{i+1}} + \frac{\overline{nAD}_{c_{i-\frac{1}{2}}}}{\Delta x_i \Delta \chi_i} + \lambda n_i A_i R_i , \tag{5.46}$$

$$A_{i,i+1} = -\frac{\overline{nAD}_{c_{i+\frac{1}{2}}}}{\Delta x_i \Delta \chi_{i+1}} . \tag{5.47}$$

Nach dem Einsetzen von (5.44) erhält die Gleichung (5.42) die Form:

$$\mathbf{M}\mathbf{c}^l = \mathbf{b} . \tag{5.48}$$

Die Einträge der Matrix  $\mathbf{M}$  und des Vektors  $\mathbf{b}$  sind dabei wie folgt definiert:

$$M_{i,i-1} = \omega \cdot A_{i,i-1}(t), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.49)$$

$$M_{i,i} = \frac{1}{\Delta t} n_i A_i R_i(t) + \omega \cdot A_{i,i}(t), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.50)$$

$$M_{i,i+1} = \omega \cdot A_{i,i+1}(t), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.51)$$

$$M_{i,j} = 0, \text{ wenn } i \neq 1, i \neq n, j \neq i-1, j \neq i, j \neq i+1, \quad (5.52)$$

$$b_i = \frac{1}{\Delta t} n_i A_i R_i(t - \Delta t) c_i(t - \Delta t) + g_i \\ + (1 - \omega) [-A_{i,i-1}(t - \Delta t) c_{i-1}(t - \Delta t) \\ - A_{i,i}(t - \Delta t) c_i(t - \Delta t) \\ - A_{i,i+1}(t - \Delta t) c_{i+1}(t - \Delta t)], \quad i = 2, \dots, n-1. \quad (5.53)$$

Die Einträge der Matrix  $\mathbf{M}$  und des Vektors  $\mathbf{b}$  für die Randblöcke ( $i = 1$  und  $i = n$ ) können nach den Formeln (5.49) - (5.53) nicht berechnet werden. Die erste und die letzte Gleichung des System (5.48), die die Randblöcke abbilden, werden aus den Randbedingungen abgeleitet.

Zur Berechnung der Konzentrationen zur Zeit  $t$  ist die Kenntnis über die Konzentrationen im vorangehenden Zeitschritt erforderlich. Im ersten Zeitschritt müssen die Konzentrationen zum Simulationsbeginn als diskretisierte anfängliche Konzentrationsverteilung bekannt sein.

Um die Spezifikation des Gleichungssystem (5.48) abzuschließen, ist es somit notwendig, die Randbedingungen an die Randblöcke und die Anfangsbedingungen festzulegen.

### 5.4.8 Einarbeiten der Anfangs- und Randbedingungen

Durch Randbedingungen werden die Vorschriften zum Ausrechnen der Einträge der ersten und der letzten Reihe der Matrix  $M$  und des Vektors  $b$  der Gleichung (5.48) festgelegt.

Es werden hauptsächlich drei Typen von Randbedingungen unterschieden:

- Bei Randbedingungen der *ersten Art (Dirichlet-Randbedingung)* wird eine Konzentration am Gebietsrand vorgegeben:

$$c = f(t) . \quad (5.54)$$

- Die Randbedingung *zweiter Art (Neumann-Randbedingung)* gibt den Konzentrationsgradienten und damit den dispersiven Schadstofffluss senkrecht zum Rand an:

$$\frac{\partial c}{\partial n} = (\nabla c) \cdot \mathbf{n} = f(t) , \quad (5.55)$$

$\mathbf{n}$  Normaleneinheitsvektor.

- Die *dritte Art* von Randbedingung (*Cauchy-Randbedingung*) legt eine lineare Kombination von Konzentration und Normalenableitung auf dem Gebietsrand fest:

$$(\mathbf{u}c - D\nabla c) \cdot \mathbf{n} = f(t) . \quad (5.56)$$

Die *Anfangsbedingungen* werden durch eine Konzentrationsverteilung zu dem Simulationsstartzeitpunkt spezifiziert.

#### 5.4.8.1 Einstromrand und Anfangsbedingung

Bei der Wahl der Randbedingungen für den Einstromrand des Modellgebiets wurden folgende Überlegungen in Betracht gezogen.

Bei der Modellierung der Aufgabenstellungen im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen wird stets der *konservative Fall* vorausgesetzt. Unter den konservativen Annahmen werden auf Sicherheit bedachte Annahmen verstanden, bei denen von ungünstigsten

Voraussetzungen ausgegangen wird. Solche Annahmen führen zur Überschätzung der errechneten Auswirkungen. In Bezug auf den Einstromrand bedeutet das, dass es sicherzustellen ist, dass die Schadstoffe den Transportweg durch den Einstromrand nicht verlassen können. Es muss also gewährleistet werden, dass durch den Einstromrand keine Diffusion/Dispersion der Schadstoffe erfolgt.

Durch den Rand fließt unkontaminiertes Wasser zu, so dass die Konzentrationen der zu berechnenden Schadstoffe am Einstromrand immer null sind. In einigen Fällen müssen jedoch auch die Zuflüsse konstanter, nichtverschwindender Konzentration abgebildet werden. Das ist z. B. dann erforderlich, wenn Wasser mit bereits vorhandener Schadstoffkonzentration zufließt. Auch im Fall von nichtlinearen Sorptionskonzepten ist es wichtig abzubilden, dass unschädliche Isotope bestimmter Elemente im Grundwasser bereits enthalten sein können, weil diese unschädlichen Isotope das Sorptionsverhalten der schädlichen Isotope beeinflussen. Andere Fälle, wie z. B. zeitlich abhängige Konzentrationen am Einstromrand des Modellgebiets, sind zunächst nicht vorgesehen.

Die beschriebenen Eigenschaften können durch einen Spezialfall der Dirichlet-Randbedingung abgebildet werden. Dabei wird eine konstante Konzentration am Einstromrand angenommen:

$$c|_{x=0} = \text{const} \geq 0 \quad . \quad (5.57)$$

Die Undurchlässigkeit des Randes wird dadurch modelliert, dass die molekulare Diffusionskonstante  $D_m$  und die Dispersionslänge  $\alpha$  am Rand zu null angenommen werden.

Zur Aufstellung der ersten Gleichung des Gleichungssystems (5.48) wird ein Block mit dem Index 0 vor dem Randblock mit folgenden Eigenschaften postuliert:

$$c_0 = \text{const} \geq 0, \quad \alpha_0 = 0, \quad D_{m_0} = 0, \quad \Delta x_0 = \Delta x_1 \quad . \quad (5.58)$$

Bei diesen Annahmen ergibt sich für das harmonische Mittel des Dispersionsterms

$$\overline{nAD_{c_1-\frac{1}{2}}} = 0 \quad . \quad (5.59)$$

Der Volumenstrom im Block 0  $\dot{V}_0$  ist gleich dem Volumenstrom des Grundwassers im unmittelbar angrenzenden Gebiet rechts vom Einstromrand und bleibt während der gesamten Simulationszeit konstant.

Das Einsetzen dieser Parameter in die diskretisierte Transportgleichung (5.41) ergibt für die erste Gleichung ( $i = 1$ ) des Systems:

$$\begin{aligned}
& \left[ \frac{n_1 A_1 R_1(t)}{\Delta t} + \omega \cdot \left( \frac{\dot{V}_1(t)}{\Delta \chi_1} + \frac{\overline{nAD}_{c_{1+\frac{1}{2}}}(t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} + \lambda n_1 A_1 R_1(t) \right) \right] c_1(t) \\
& + \omega \cdot \left[ -\frac{\overline{nAD}_{c_{1+\frac{1}{2}}}(t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} \right] c_2(t) \\
& = \frac{\dot{V}_0}{\Delta \chi_1} c_0 + \frac{1}{\Delta t} n_1 A_1 R_1(t - \Delta t) c_1(t - \Delta t) + \frac{q(t)}{\Delta x_1} \\
& + \omega \cdot n_1 A_1 \sum_k \lambda_k R_{k_1}(t) c_{k_1}(t) \tag{5.60} \\
& + (1 - \omega) \cdot \\
& \left[ -\left( \frac{\dot{V}_1(t - \Delta t)}{\Delta \chi_1} + \frac{\overline{nAD}_{c_{1+\frac{1}{2}}}(t - \Delta t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} + \lambda n_1 A_1 R_1(t - \Delta t) \right) c_1(t - \Delta t) \right. \\
& \left. + \left( \frac{\overline{nAD}_{c_{1+\frac{1}{2}}}(t - \Delta t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} \right) c_2(t - \Delta t) + n_1 A_1 \sum_k \lambda_k R_{k_1}(t - \Delta t) c_{k_1}(t - \Delta t) \right].
\end{aligned}$$

Die Berechnungsvorschriften für die Einträge der ersten Zeile der Matrix  $\mathbf{M}$  und des Vektors  $\mathbf{b}$  sind damit wie folgt definiert:

$$M_{1,1}(t) = \frac{n_1 A_1 R_1(t)}{\Delta t} + \omega \cdot \left( \frac{\dot{V}_1(t)}{\Delta \chi_1} + \frac{\overline{nAD}_{c_{1+\frac{1}{2}}}(t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} + \lambda n_1 A_1 R_1(t) \right), \tag{5.61}$$

$$M_{1,2}(t) = \omega \cdot \left( -\frac{\overline{nAD}_{c_{1+\frac{1}{2}}}(t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} \right) = \omega \cdot A_{1,2}(t), \tag{5.62}$$

$$M_{1,j} = 0, \quad j = 3, \dots, n, \quad (5.63)$$

$$b_1 = \frac{\dot{V}_0}{\Delta\chi_1} c_0 + \frac{1}{\Delta t} n_1 A_1 R_1(t - \Delta t) c_1(t - \Delta t) + g_1 \quad (5.64)$$

$$+ (1 - \omega) \cdot [-A_{1,1}(t - \Delta t) c_1(t - \Delta t) - A_{1,2}(t - \Delta t) c_2(t - \Delta t)] .$$

Die beschriebene Randbedingung ist also ein Spezialfall der Dirichlet-Randbedingung. Die Zuflüsse konstanter verschwindender oder nichtverschwindender Konzentrationen können durch diese Randbedingung abgebildet werden. Der dispersive Anteil des Schadstoffzuflusses auf dem Rand wird vernachlässigt. Somit ist diese Randbedingung gut für den advektionsdominierten Transport geeignet.

Aber auch beim diffusionsdominierten Transport ist die Anforderung an den Einstromrand durch diese Randbedingung erfüllt. In diesem Fall ergibt die feste Randkonzentration im Zusammenspiel mit der verschwindenden Grundwasserströmung einen entsprechend verschwindenden advektiven Zufluss des Schadstoffes. Durch die Annahme, dass die Diffusions-/Dispersionsparameter am Rand null sind, ist der dispersive Randfluss nicht möglich, der Rand ist somit undurchlässig.

In GeoTREND-SP wurden die Rechenvorschriften (5.61)-(5.64) zur Bestimmung der Einträge der Matrix  $\mathbf{M}$  und des Vektors  $\mathbf{b}$ , die die erste Gleichung des Gleichungssystems (5.41) spezifizieren, realisiert.

Im Kontext der zu betrachtenden Modelle beginnt die Simulation mit dem Anfangszeitpunkt des Schadstoffeintrags. Als Anfangsbedingung wird somit angenommen, dass die Konzentration der Schadstoffe zum Startzeitpunkt der Simulation im gesamten Transportweg identisch und mit der Randbedingung (5.57) gekoppelt ist:

$$c_i|_{t=0} = c|_{x=0} \text{ const} \geq 0 \quad \text{für alle } i . \quad (5.65)$$

## Diskussion

Der diffusionsdominierte Transport mit einem undurchlässigen Einstromrand wird häufig durch eine so genannte *no-flow*-Randbedingung, ein Spezialfall der Neumann-Randbedingung, abgebildet. Dort gilt immer

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 . \quad (5.66)$$

Der verschwindende advektive Fluss an undurchlässigen Rändern ergibt sich aus der verschwindenden Strömungskomponente senkrecht zum undurchlässigen Rand:

$$u|_{x=0} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \dot{V}|_{x=0} = 0 . \quad (5.67)$$

Aus (5.66) wird abgeleitet:

$$\frac{c_1 - c_0}{\Delta x} = 0 \quad \rightarrow \quad c_1 = c_0 . \quad (5.68)$$

Das Einsetzen von (5.68) in die diskretisierte Transportgleichung (5.41) für  $i = 1$  ergibt unter der Berücksichtigung von (5.67)

$$\begin{aligned}
& \left[ \frac{n_1 A_1 R_1(t)}{\Delta t} + \omega \cdot \left( \frac{\dot{V}_1(t)}{\Delta \chi_1} + \frac{\overline{nAD}_{c_1+\frac{1}{2}}(t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} + \lambda n_1 A_1 R_1(t) \right) \right] c_1(t) \\
& + \omega \cdot \left[ -\frac{\overline{nAD}_{c_1+\frac{1}{2}}(t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} \right] c_2(t) \\
& = \frac{1}{\Delta t} n_1 A_1 R_1(t - \Delta t) c_1(t - \Delta t) + \frac{q(t)}{\Delta x_1} \\
& + \omega \cdot n_1 A_1 \sum_k \lambda_k R_{k_1}(t) c_{k_1}(t) \tag{5.69} \\
& + (1 - \omega) \cdot \\
& \left[ -\left( \frac{\dot{V}_1(t - \Delta t)}{\Delta \chi_1} + \frac{\overline{nAD}_{c_1+\frac{1}{2}}(t - \Delta t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} + \lambda n_1 A_1 R_1(t - \Delta t) \right) c_1(t - \Delta t) \right. \\
& \left. + \left( \frac{\overline{nAD}_{c_1+\frac{1}{2}}(t - \Delta t)}{\Delta x_1 \Delta \chi_2} \right) c_2(t - \Delta t) + n_1 A_1 \sum_k \lambda_k R_{k_1}(t - \Delta t) c_{k_1}(t - \Delta t) \right].
\end{aligned}$$

Der Vergleich der Formeln (5.60) und (5.69) zeigt, wie erwartet, dass die *no-flow*-Randbedingung ein Spezialfall der im Abschnitt 5.4.8.1 beschriebenen Randbedingung bei  $\dot{V}_0 = 0$  ist. Somit erfüllt die Umsetzung (5.61)-(5.64) tatsächlich auch bei Dominanz der diffusiven Prozesse die Anforderung an den Einstromrand bezüglich seiner Undurchlässigkeit.

#### 5.4.8.2 Ausstromrand

Für den Ausstromrand wird in GeoTREND-SP die Transmissionsrandbedingung definiert. Sie wird häufig in der Praxis bei solchen Aufgabenstellungen angewendet, bei denen die modellierte Schadstofffahne das Modellgebiet verlässt /KIN 92/, /RAU 02/. Die Transmissionsrandbedingung besagt, dass der Konzentrationsgradient, der sich von innen eingestellt hat, nach außen fortgesetzt wird:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=L} = \text{const} . \quad (5.70)$$

Die Bedingung (5.70) ergibt

$$c_{n+1} = 2c_n - c_{n-1} . \quad (5.71)$$

Der ungehinderte Transport der Schadstoffe durch den Ausstromrand kann durch die Annahme modelliert werden, dass die Umgebungsparameter rechts und links vom Rand gleich sind. Es wird rechts vom Ausstromrand ein zusätzlicher Block mit dem Index  $n + 1$  angenommen, der dieselbe Blocklänge und dieselben Parameter wie der Block  $n$  aufweist. Die Gleichung für den im Modellgebiet letzten Block  $n$  lässt sich dann aus (5.41) wie folgt ableiten:

$$\begin{aligned}
& \omega \cdot \left[ -\frac{\dot{V}_{n-1}(t)}{\Delta\chi_n} + \frac{n_n A_n D_{c_n}(t) - \overline{nAD}_{c_{n-\frac{1}{2}}}(t)}{\Delta x_n \Delta\chi_n} \right] c_{n-1}(t) \\
& + \left[ \frac{n_n A_n R_n(t)}{\Delta t} + \right. \\
& \left. \omega \cdot \left( \frac{\dot{V}_n(t)}{\Delta\chi_n} + \frac{\overline{nAD}_{c_{n-\frac{1}{2}}}(t) - n_n A_n D_n(t)}{\Delta x_n \Delta\chi_n} + \lambda n_n A_n R_n(t) \right) \right] c_n(t) \\
& = \frac{1}{\Delta t} n_n A_n R_n(t - \Delta t) c_n(t - \Delta t) + \frac{q(t)}{\Delta x_n} + \omega \cdot n_n A_n \sum_k \lambda_k R_{k_n}(t) c_{k_n}(t) \\
& + (1 - \omega) \cdot \tag{5.72} \\
& \left[ \left( \frac{\dot{V}_{n-1}(t - \Delta t)}{\Delta\chi_n} - \frac{n_n A_n D_{c_n}(t - \Delta t) - \overline{nAD}_{c_{n-\frac{1}{2}}}(t - \Delta t)}{\Delta x_n \Delta\chi_n} \right) c_{n-1}(t - \Delta t) \right. \\
& - \left( \frac{\dot{V}_n(t - \Delta t)}{\Delta\chi_n} + \frac{\overline{nAD}_{c_{n-\frac{1}{2}}}(t - \Delta t) - n_n A_n D_n(t - \Delta t)}{\Delta x_n \Delta\chi_n} \right. \\
& \quad \left. \left. + \lambda n_n A_n R_n(t - \Delta t) \right) c_n(t - \Delta t) \right. \\
& \left. + n_n A_n \sum_k \lambda_k R_{k_n}(t - \Delta t) c_{k_n}(t - \Delta t) \right].
\end{aligned}$$

Die Einträge der letzten Zeile der Matrix  $\mathbf{M}$  und des Vektors  $\mathbf{b}$  sind damit wie folgt definiert:

$$M_{n,n-1}(t) = \omega \cdot \left( \frac{-\dot{V}_{n-1}(t)}{\Delta\chi_n} + \frac{n_n A_n D_n(t) - \overline{nAD}_{c_{n-\frac{1}{2}}}(t)}{\Delta x_n \Delta\chi_n} \right) = \omega A_{n,n-1}(t), \tag{5.73}$$

$$\begin{aligned}
M_{n,n}(t) &= \\
& \frac{n_n A_n R_n(t)}{\Delta t} + \omega \cdot \left( \frac{\dot{V}_n(t)}{\Delta \chi_n} + \frac{\overline{nADc_{n-\frac{1}{2}}}(t) - n_n A_n D_n(t)}{\Delta x_n \Delta \chi_n} + \lambda n_n A_n R_n(t) \right) \quad (5.74) \\
& = \frac{n_n A_n R_n(t)}{\Delta t} + \omega \cdot A_{n,n}(t) ,
\end{aligned}$$

$$M_{n,j} = 0, \quad j = 1, \dots, n-2, \quad (5.75)$$

$$\begin{aligned}
b_n &= \frac{1}{\Delta t} n_n A_n R_n(t - \Delta t) c_n(t - \Delta t) + g_n \quad (5.76) \\
& + (1 - \omega) \cdot [-A_{n,n-1}(t - \Delta t) c_{n-1}(t - \Delta t) - A_{n,n}(t - \Delta t) c_n(t - \Delta t)].
\end{aligned}$$

Für den Fall des diffusionsdominierten Transports muss Folgendes berücksichtigt werden:

Die Transmissionsrandbedingung führt dazu, dass die Konzentration der Randzelle  $n$  am Ende des Modellgebiets sich nur durch advective Flüsse ändert, da der diffusive Fluss aus der Zelle heraus dem diffusiven Zustrom gleichgesetzt wird. Ist der advective Fluss nicht vorhanden, so bleibt die Konzentration in der Randzelle künstlich auf dem Anfangswert gehalten und kann demzufolge deutlich unterschätzt werden. Der Schadstoffstrom wird dagegen deutlich höher berechnet. Sind die Schadstoffströme als Ergebnisausgabe von Interesse, so entspricht die Transmissionsrandbedingung den konservativen Annahmen.

Bei durch diffusive Prozesse dominierten Modellgebieten mit geringen advectiven Flüssen kann auf die Modellierung eines undurchlässigen Ausstromrandes (*no-flow*-Randbedingung 2. Art) zurückgegriffen werden. Da in diesem Fall der Schadstofftransport über den Modellrand hinaus unterdrückt wird, kann die Konzentration am Modellrand je nach Szenario zum Teil deutlich überschätzt werden. Handelt es sich bei der Ergebnisausgabe um die Schadstoffkonzentrationen, so würde die *no-flow*-Randbedingung dem konservativen Fall entsprechen.

Um eine korrekte Konzentrationsentwicklung bei diffusiv dominierten Modellen zu gewährleisten, müsste eine Verlängerung des Modellgebietes über die Übergabestelle hinaus vorgenommen werden. Dies sollte vom Programm automatisch durchgeführt werden, ohne vom Benutzer eine Entscheidung über die Art der verwendeten Randbedingungen oder eine nicht intuitive und folglich fehlerträchtige Modellierung des Transportgebietes zu verlangen.

Die geschilderte Erweiterung für den diffusiven Fall kann für die zukünftige Weiterentwicklung vorgesehen werden. In allen bis jetzt bekannten Anwendungsfällen dominieren advective Transportmechanismen in Modellgebieten. Andererseits wurden die CHET-Rechenmodule für den rein diffusiven Transport auch nicht ausgelegt. GeoTREND-SP dagegen wurde auch für Modelle mit diffusiv dominierten Prozessen konzipiert. Im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalysen handelt es sich bei Modellen mit rein diffusivem Transport jedoch stets um sehr geringe Schadstoffströme. Die überschätzten Ergebnisse für Nuklidströme, die auf die aktuelle Realisierung der Randbedingung zurückzuführen sind, liegen im akzeptablen Genauigkeitsbereich, was die durchgeführten Tests bestätigen, und sind folglich durchaus aussagekräftig. Die Konzentrationen in der Randzelle werden dagegen auf dem Anfangswert gehalten, sind damit nicht repräsentativ. Mit der Umsetzung der beschriebenen Erweiterung der Randbedingungen für den Ausstromrand wäre eine korrekte Ergebnisberechnung auch für diffusionsdominierte Modellszenarien gewährleistet.

#### **5.4.9 Lösen des Gleichungssystems**

Das Gleichungssystem (5.48) ist durch (5.49)-(5.53), (5.61)-(5.64), (5.73)-(5.76) und (5.65) vollständig spezifiziert.

Zur Lösung des Gleichungssystems können direkte oder iterative Methoden herangezogen werden. Direkte Gleichungslöser brauchen wesentlich mehr Speicherplatz als iterative Methoden. Dafür erfordern iterative Verfahren deutlich mehr Zeitaufwand bei schlechter Konditionierung.

Die Matrix  $M$  des Gleichungssystems (5.48) ist tridiagonal. Direkte Verfahren sind in diesem Fall optimal. In GeoTREND-SP sind zwei direkte Löser integriert:

- *Thomas-Algorithmus* oder auch *Tridiagonalmatrix-Algorithmus (TDMA)* /WWW TH/,

- *Gaußsches -Eliminationsverfahren mit LR- Zerlegung* (LU-Decomposition) oder einfach *Gauß-Verfahren* *WWW GA*.

Standardmäßig wird das Gleichungssystem in GeoTREND-SP nach dem Thomas-Algorithmus gelöst. Der Thomas-Algorithmus ist speziell zum Lösen von linearen Gleichungssystemen mit einer Tridiagonalmatrix optimiert. Der Rechenaufwand dieses Verfahrens ist  $O(n)$ , d. h. dass die Lösung bei einer  $n \times n$ -Matrix nach ca.  $n$  Rechenoperationen gefunden werden kann. Der Thomas-Algorithmus ist nur auf positiv definite Matrizen anwendbar. Dies ist auch meist der Fall bei den Aufgabestellungen in Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen.

Alternativ kann das Gleichungssystem mit dem Gauß-Verfahren gelöst werden. Dieses Verfahren hat i. A. die Komplexität  $O(n^3)$ . Angewendet auf die Gleichungssysteme mit einer Tridiagonalmatrix ist jedoch auch dieser Algorithmus recht schnell.

Beide Verfahren sind der Bestandteil der *GNU Scientific Library (GSL)* *WWW GS*, einer C++-Programmbibliothek, die eine Vielzahl von gut qualifizierten Funktionen für numerische Berechnungen zur Verfügung stellt. GSL bietet auch eine Reihe anderer Gleichungslöser an, die ohne großen Aufwand in GeoTREND-SP integriert werden können.

#### **5.4.10 Berechnung der Schadstoffrückhaltung**

In GeoTREND-SP wurde die Möglichkeit realisiert, das Sorptionskonzept separat für jedes Element und sogar gebietsspezifisch festzulegen. Bei der Definition stehen folgende im Abschnitt 5.2.3 erläuterte Adsorptionsisothermen zur Wahl:

- Henry-Isotherme ( $K_d$ -Konzept),
- Langmuir-Isotherme,
- Freundlich-Isotherme.

Die Berechnung der Retardationsfaktoren für jedes Nuklid in jedem Block erfolgt gemäß dem Sorptionskonzept, das im entsprechenden Gebiet für das betreffende Element spezifiziert wurde. Im Fall vom linearen  $K_d$ -Konzept bleiben die Retardationsfaktoren während der gesamten Simulationszeit unverändert, deswegen werden sie noch vor Beginn der Rechnung ermittelt.

Bei Verwendung einer Freundlich-Isotherme strebt der Retardationsfaktor  $R$  bei sehr niedrigen Konzentrationen  $c_e$  gegen unendlich. Um dieses Verhalten bezüglich der Numerik in den Griff zu bekommen, wird der Retardationsfaktor für Konzentrationen  $c_e$  kleiner als der vom Benutzer vorgegebene Wert  $\varepsilon_e$  durch die Vorschrift angenähert:

$$R = 1 + \frac{1-n}{n} \rho k_1 \varepsilon_e^{p-1} \quad . \quad (5.77)$$

Dabei wird angenommen, dass die Sorption bei sehr niedrigen Konzentrationen linear verläuft, d. h. dass der Retardationsfaktor  $R$  durch eine Konstante abgebildet werden kann ( $K_d$ -Konzept). Durch diesen Ansatz werden unrealistisch hohe Sorptionswerte für sehr niedrige Konzentrationen, wie sie häufig in Rechnungen zur Langzeitsicherheitsanalysen auftreten, vermieden. Bei der Spezifikation der Sorptionsparameter eines Elements muss der Benutzer im Fall einer Freundlich-Isotherme auch die minimale Konzentration  $\varepsilon_e$  vorgeben. Der Wert  $\varepsilon_e$  könnte z. B. die minimale bekannte Konzentration sein, für die die durch Experimente definierten Sorptionsparameter  $k_1$  und  $p$  gelten.

Das Rechenmodul GeoTREND-SP erwartet einen positiven Wert für  $\varepsilon_e$ , die Eingabe von negativen Werten an dieser Stelle ist nicht möglich. Die Spezifikation der minimalen Konzentration  $\varepsilon_e$  ist für den Benutzer obligatorisch. Es kann aus technischen Gründen jedoch nicht verhindert werden, dass der ungültige Wert  $\varepsilon_e = 0$  eingegeben wird. In diesem Fall wird der Defaultwert  $\varepsilon_e = 10^{-8} \text{ mol/m}^3$  bei der Rechnung verwendet, der Benutzer wird durch eine entsprechende Warnmeldung auf diesen Sachverhalt hingewiesen.

Betrachtet man die Ausbreitung einer Schadstoffwolke in einer homogenen Parallelströmung, so zeigt sich aufgrund der transversalen Dispersion eine Ausbreitung der Schadstoffwolke senkrecht zur Transportrichtung, was zu unterschiedlicher Konzentrationsverteilung innerhalb eines Querschnitts führt. In der aktuellen Umsetzung wird angenommen, dass die Konzentration innerhalb eines Querschnitts gleichverteilt ist. Diese Annahme kann speziell bei nichtlinearen, konzentrationsabhängigen Rückhalteprozessen zu inkorrekten Ergebnissen führen. In CHET2 wurde der Einfluss transversaler Dispersion auf das Adsorptionsverhalten der Schadstoffe mittels des sogenannten Trichter-Konzepts modelliert /LUE 96/. Die Modellierung und die Umsetzung des beschriebenen Sachverhalts in GeoTREND-SP sind für die spätere Projektphase angedacht.

Die Verwendung nichtlinearer Langmuir- und/oder Freundlich-Isothermen erfordert die Berechnung der Retardationsfaktoren zu jedem Zeitschritt. Die einzelnen Rückhaltewerte sind elementspezifisch und hängen von der Summe der Konzentrationen aller zu den jeweiligen Elementen  $e$  gehörenden Nuklide  $k$  ab. Entsprechend der Gleichung (5.12) ergeben sich die elementspezifischen Retardationsfaktoren für ein Nuklid zu

$$R(t) = 1 + \frac{1-n}{n} \rho \frac{f(c_e(t))}{c_e(t)}, \quad (5.78)$$

$$c_e(t) = \sum_{k \in e} c_k(t). \quad (5.79)$$

Beim Einsatz der nichtlinearen Sorptionsisothermen besteht die Kopplung zwischen der Berechnung der Konzentrationen  $c$  und Berechnung der elementspezifischen Retardationsfaktoren  $R$ , d. h. eine Veränderung der Retardationsfaktoren verändert die Konzentrationswerte und umgekehrt. Zur Lösung solcher nichtlinearen Gleichungssysteme sind Iterationsverfahren mit Rückkopplung erforderlich. Die Berechnung der Ergebnisse in einem Zeitschritt erfordert dabei mehrere Iterationsschritte. In einem Iterationsschritt werden sowohl Konzentrationen als auch Retardationsfaktoren berechnet. Diese Ergebnisse werden als Ausgangswerte im darauffolgenden Iterationsschritt verwendet. Am Ende jedes Iterationsschritts wird der Konzentrationswert mit dem entsprechenden Wert aus der letzten Iteration verglichen. Wenn die Konzentrationsänderung unterhalb einer vorgegebenen Schranke liegt, dann ist das Ergebnis hinreichend genau bestimmt, die Iterationsschleife wird beendet.

Es gibt unterschiedliche iterative Verfahren. Eines der bekanntesten Beispiele ist das Newton-Raphson-Verfahren. Das Maß der Güte einer Iterationsmethode ist die Geschwindigkeit, mit der die Iterationsfolge gegen den Grenzwert konvergiert. In CHET2 werden die nichtlinearen Abhängigkeiten mittels einer Fixpunktiteration, ebenfalls ein gebräuchliches Verfahren, behandelt.

Die Umsetzung eines iterativen Verfahrens in GeoTREND-SP wurde aus zeitlichen Gründen auf eine spätere Projektphase verschoben. Die vorläufige aktuelle Umsetzung kann als Basis für die geplante Weiterentwicklung betrachtet werden. Bevor die Transportrechnung für den Zeitschritt  $t$  beginnt, werden die Rückhaltefaktoren  $R(t)$  für die Elemente mit nichtlinearen Sorptionsisothermen entsprechend der Formel (5.78) ermit-

telt. Bei der Berechnung werden die aus dem vorangehenden Zeitschritt  $t - \Delta t$  bekannten Konzentrationen  $c_e(t - \Delta t)$  verwendet. Die ermittelten Werte  $R(t)$  werden in das Gleichungssystem eingesetzt, das anschließend gelöst wird. Die Ergebnisse  $c(t)$  werden als die für den aktuellen Zeitschritt  $t$  gültigen Schadstoffkonzentrationen gespeichert. Der beschriebene Vorgang kann als ein Iterationsschritt interpretiert werden. Weil weitere Iterationsschritte fehlen, können die mittels einer einzigen Iteration gewonnenen Ergebnisse  $c(t)$  von den tatsächlichen Grenzwerten deutlich abweichen, was auch die im Abschnitt 5.6.2 dargestellten Testergebnisse bestätigen.

Die aktuelle Version von GeoTREND-SP ist damit für die Berücksichtigung der Sorption nach nichtlinearen Konzepten noch nicht geeignet.

#### **5.4.11 Analyse numerischer Probleme**

In diesem Abschnitt wird analysiert, wie anfällig der in GeoTREND-SP verwendete numerische Algorithmus bezüglich numerischer Probleme ist. Es werden zudem die realisierten Konzepte vorgestellt, die ggf. den numerischen Problemen entgegenwirken.

##### **5.4.11.1 Stabilität**

Die in GeoTREND-SP eingesetzten Differenzenschemas sind uneingeschränkt stabil, d. h. dass der numerische Fehler bei beliebiger Wahl der Diskretisierungsparameter  $\Delta x$  und  $\Delta t$  zeitlich nicht anwächst. Die absolute Stabilität des verwendeten numerischen Verfahrens kann auch leicht z. B. mittels der Neumannschen Stabilitätsanalyse gezeigt werden /LAN 03/.

Weil die örtliche Schrittlänge  $\Delta x$  (Blocklänge) bei den praktischen Anwendungen vorgegeben wird, wird im Kontext der Stabilität eines Verfahrens lediglich die Zeitschrittweite  $\Delta t$  als einzige während der Simulation vorzuschreibende Größe in Betracht gezogen. Eine hohe Zeitschrittweite bedeutet einen schnelleren Fortgang der zeitlichen Integration und damit eine reduzierte Bearbeitungsdauer. Die in GeoTREND-SP eingesetzten impliziten Methoden legen keine Einschränkungen auf die Länge des Zeitschritts hinsichtlich der Stabilität und sind damit wesentlich recheneffizienter gegenüber expliziten Verfahren.

Obwohl das numerische Verfahren mathematisch gesehen bezüglich der Wahl von  $\Delta t$  uneingeschränkt stabil ist, zeigt sich in den praktischen Anwendungen abhängig von physikalischen oder numerischen Einflüssen ein gewisses oberes Limit für die Zeitschrittweite. Bei der Wahl der geeigneten Länge des Zeitschritts muss neben der numerischen Stabilität auch die Anforderung an die Genauigkeit der Ergebnisse berücksichtigt werden.

#### 5.4.11.2 Konsistenz

Unter der Konsistenz wird die Fähigkeit einer numerischen Approximation verstanden, die ursprüngliche Gleichung zu repräsentieren, wenn die Diskretisierungsparameter verfeinert werden. Mit anderen Worten ist eine numerische Approximation konsistent, wenn der Abschneidefehler bei  $\Delta x \rightarrow 0$  und  $\Delta t \rightarrow 0$  verschwindet.

Bei den in GeoTREND-SP eingesetzten Differenzenverfahren ist der numerische Fehler proportional zu  $(\Delta x)^n$  und  $(\Delta t)^n$  und geht folglich gegen null, wenn die Diskretisierungsparameter verfeinert werden. Dementsprechend ist der numerische Algorithmus bedingungslos konsistent.

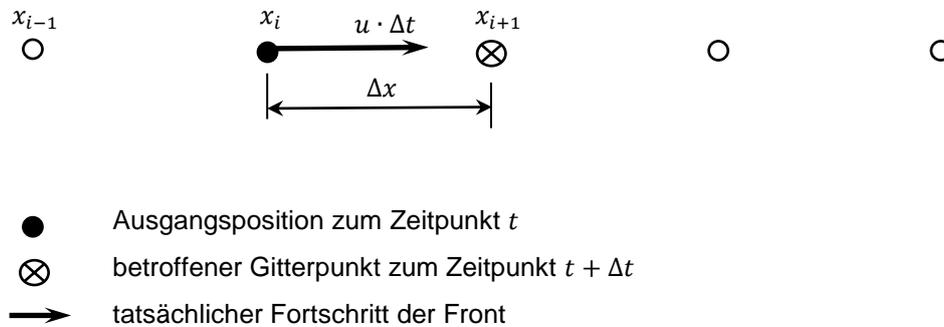
#### 5.4.11.3 Numerische Dispersion und Oszillation

Bei der Lösung der Transportgleichung mittels eines Diskretisierungsverfahrens zeigen sich zwei Typen von numerischen Problemen: *numerische Dispersion* und *Oszillation* (Überschwingen). Diese Fehler sind auf zwei Faktoren zurückzuführen:

- Die numerische Lösung wird nur an einer begrenzten Zahl von Punkten ermittelt.
- Die berechneten Werte stimmen sowohl aufgrund des Rundungsfehlers des Computers als auch durch das eingesetzte numerische Verfahren, das lediglich eine Approximation des Problems darstellt, nur begrenzt.

Wenn die Front einer Schadstoffwolke zum Zeitpunkt  $t$  den Gitterknoten  $x_i$  verlässt, wird sie zur Zeit  $t + \Delta t$  unter der Bedingung  $\Delta t < \Delta x/u$  eine Position zwischen den Knoten  $x_i$  und  $x_{i+1}$  erreichen (Abb. 5.2). Aufgrund der Diskretisierung wird die Schadstoffmasse auf die beiden Blöcke verteilt. Das heißt, obwohl die Front der Schadstoffwolke den Gitterknoten  $x_{i+1}$  zu dem Zeitpunkt  $t + \Delta t$  noch nicht erreicht hat, wird an diesem bereits

eine Konzentrationserhöhung festgestellt, als ob dispersive Vorläufer der Front vorausgeschritten wären. Dieser Effekt wird als *numerische Dispersion* bezeichnet.



**Abb. 5.2** Numerische Dispersion

Generell lässt sich sagen, dass durch eine Verfeinerung der Diskretisierung eine bessere numerische Lösung erreicht wird.

Numerische Probleme lassen sich durch eine einfache formale Analyse abschätzen /KIN 92/, /MAR 86/. Dazu wird die vereinfachte Transportgleichung mit konstanten Umgebungsparametern betrachtet:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} + D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} . \quad (5.80)$$

Beim Ersetzen der partiellen Ableitungen durch Differenzenquotienten entstehen Fehler, die mit dem größten Glied der abgebrochenen Taylorentwicklung charakterisiert werden. Der größte Eintrag in die numerischen Störungen kommt von den ersten Ableitungen nach Zeit und Ort.

Die erste räumliche Ableitung wird in GeoTREND-SP durch das implizite Euler-Differenzschema ersetzt:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x} + D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} . \quad (5.81)$$

Entwicklung des Terms  $c_{i-1}$  in eine Taylorreihe bis zur zweiten Ordnung um  $x_i$  ergibt

$$c_{i-1} = c_i - \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x_i} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x_i} \Delta x^2 + \dots \quad (5.82)$$

Daraus folgt für die erste Ableitung

$$\frac{c_i - c_{i-1}}{\Delta x} = \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x_i} - \frac{1}{2} \Delta x \left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x_i} + O(\Delta x^2) \quad (5.83)$$

Das heißt, dass das implizite Euler-Verfahren, angewendet auf die erste Ableitung nach der Koordinate  $x$ , einen Fehler  $\frac{1}{2} \Delta x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$  mit sich bringt, der nach der Größenordnung mit dem Dispersionsterm der Transportgleichung (5.80) vergleichbar ist. Das Einsetzen von (5.83) in die Gleichung (5.81) zeigt, dass der Dispersionsterm  $D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$  durch den Abbruchfehler um einen künstlichen Dispersionsterm vergrößert wird:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} + \left( D + \frac{1}{2} u \Delta x \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (5.84)$$

Für die implizite Euler-Zeitdifferenz kann ebenfalls geschrieben werden:

$$\frac{c(t) - c(t - \Delta t)}{\Delta t} = \left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_t - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \right|_t \Delta t + O(\Delta t^2) \quad (5.85)$$

Die Ableitung zweiter Ordnung nach der Zeit kann mittels der Gleichung (5.80) durch die Ableitung nach Koordinate unter der Vernachlässigung der Ableitungen dritter Ordnung folgendermaßen angenähert werden:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \approx - \frac{u}{R} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial c}{\partial t} \right) = - \frac{u}{R} \frac{\partial}{\partial x} \left( - \frac{u}{R} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{D}{R} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \approx \frac{u^2}{R^2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (5.86)$$

Somit ergibt sich für (5.85)

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_t = \frac{c(t) - c(t - \Delta t)}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{u^2}{R^2} \Delta t \left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_t + O(\Delta t^2) \quad (5.87)$$

Das explizite Euler-Verfahren in der zeitlichen Ableitung bringt betragsmäßig den gleichen Fehler, jedoch mit dem anderen Vorzeichen:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{t-\Delta t} = \frac{c(t) - c(t - \Delta t)}{\Delta t} - \frac{\mathbf{1} \mathbf{u}^2}{2 \mathbf{R}^2} \Delta t \left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{t-\Delta t} + O(\Delta t^2) . \quad (5.88)$$

Das Crank-Nicolson-Verfahren ist der Mittelwert der expliziten (5.88) und impliziten Euler-Differenzen (5.87):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c(t) - c(t - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t^2) . \quad (5.89)$$

Die Genauigkeit dieses Verfahrens ist von der 2. Ordnung. Die Terme  $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$  der Taylor-Entwicklung sind von praktisch gleichem Wert, jedoch mit unterschiedlichen Vorzeichen und eliminieren einander.

Die numerischen Störungen können folgendermaßen zusammengefasst werden:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} + \left( D + \frac{\mathbf{1}}{2} \mathbf{u} \Delta x + \left( \omega - \frac{\mathbf{1}}{2} \right) \frac{\mathbf{u}^2 \Delta t}{\mathbf{R}} \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} . \quad (5.90)$$

Dabei wird der entstehende Fehler beim impliziten Euler-Verfahren durch  $\omega = 1$ , beim Euler expliziten durch  $\omega = 0$  und beim Crank-Nicolson-Verfahren durch  $\omega = \frac{1}{2}$  abgebildet. Wenn also die Ableitungen erster Ordnung nach Zeit und Ort ohne weiteres durch die beschriebenen Differenzenquotienten ersetzt werden, dann wird das resultierende Differenzenverfahren nicht die ursprüngliche Gleichung (5.80) lösen sondern die um einen künstlichen Dispersionsterm erweiterte Gleichung (5.90).

Der Abbruchfehler kann allein durch die Anpassung der Parameter  $\Delta x$  und  $\Delta t$  nicht im ausreichenden Maße reduziert werden. Um das Problem zu entschärfen, können Verfahren gewählt werden, die in Bezug auf den Abbruchfehler die Genauigkeit höherer Ordnung als die voll expliziten oder voll impliziten Differenzen haben, wie z. B. das Crank-Nicolson-Verfahren. Oder es können Methoden gewählt werden, die zusammen eingesetzt Abbruchfehler mit zueinander komplementären Vorzeichen ergeben, wodurch

der künstliche Dispersionsterm bei geeigneter Wahl der Diskretisierungsparameter reduziert werden kann.

In GeoTREND-SP wird die sogenannte Lanz-Methode zur Korrektur der numerischen Dispersion angewendet /MAR 86/, /GEN 78/.

Bei dieser Methode wird der künstliche Dispersionsterm kompensiert:

$$D_C = D_m + \alpha_C u = D_m + \left[ \alpha - \frac{1}{2} \Delta x - \left( \omega - \frac{1}{2} \right) \frac{u \Delta t}{R} \right] u . \quad (5.91)$$

In der diskretisierten Transportgleichung wird dann der korrigierte Dispersionskoeffizient  $D_C$  anstatt des ursprünglichen  $D$  eingesetzt.

Damit die Physik der Transportgleichung durch die beschriebene Korrektur nicht gestört wird, muss gewährleistet werden, dass  $D_C \geq 0$  bleibt. Diese Bedingung

$$D \geq \frac{1}{2} u \Delta x + \left( \omega - \frac{1}{2} \right) \frac{u^2 \Delta t}{R} \quad (5.92)$$

kann zu starken Einschränkungen insbesondere bei der Wahl der Zeitschrittweite im Fall des impliziten Euler-Zeitintegrationsverfahren führen (s. Abschnitt 0). Der negative Wert des Dispersionsterms führt zu Oszillationen.

Durch die Lanz-Korrektur der numerischen Dispersion werden nur die Abbruchfehler abgefangen, die infolge des Ersetzens erster Ableitungen nach Zeit und Ort durch Differenzenquotienten verursacht werden. Der Abbruchfehler ist zwar die wesentliche Ursache der numerischen Probleme, es sind aber auch andere numerische Störungen vorhanden, die durch weitere physikalische und numerische Einflüsse hervorgerufen werden. Diese Störungen liegen im Normalfall im akzeptablen Bereich, können jedoch bei ungünstiger Konstellation der Parameter, insbesondere bei ungeeigneter Wahl der Diskretisierungsparameter, zu deutlichen Abweichungen der Ergebnisse von der genauen Lösung führen. Das ist z. B. der Fall, wenn die Kurzlebigkeit der Radionuklide bei der Wahl der Zeitschrittlänge nicht berücksichtigt wird. Durch eine sorgfältige Modellierung des Anwendungsfalls, vor allem durch die Einhaltung der empfohlenen Richtlinien bei

der Festlegung der Block- und Zeitschrittlängen, die in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 ausführlich erläutert sind, können derartige Fehler weitgehend vermieden werden.

An dieser Stelle ist noch auf die Eigenschaften der numerischen Störungen und ihre Konsequenzen hinzuweisen. Numerische Dispersionen sind schwer identifizierbar, sie sind nicht offensichtlich, genau das macht sie so tückisch. Die Auswirkungen sind schlecht abschätzbar. Numerische Dispersionen führen zu einer fehlerhaften Darstellung der Mischung der interagierenden Stoffe, das sind z. B. Radionuklide einer Zerfallsreihe, und damit zu falschen Reaktionsraten. Oszillationen verursachen unphysikalische Phänomene, wie z. B. negative Konzentrationen oder Zunahme statt Abnahme der Gesamtmasse oder können zu Instabilitäten führen, wie z. B. unendliche Ergebniswerte. Oszillationen sind im Gegensatz zu numerischen Dispersionen gut erkennbar. Sie sind damit ein guter Indikator für Diskretisierungsfehler und sollten bei Geringfügigkeit akzeptiert oder anderenfalls durch Verbesserung der Diskretisierung beseitigt werden.

## **5.5 Ablauf einer Transportrechnung**

In diesem Abschnitt wird der generelle Ablauf einer Transportrechnung in GeoTREND-SP dargestellt. In den darauffolgenden Unterabschnitten wird auf die Aspekte einzelner Arbeitsschritte eingegangen, die eine zusätzliche Erläuterung erfordern.

Als erstes werden die Eingangsdaten eingelesen, die den modellierten Anwendungsfall spezifizieren. Diese Daten werden über die graphische Oberfläche XENIA eingegeben und sind in einer Datei im *JSON*-Format gespeichert. Entsprechend diesen Daten werden Initialisierungen vorgenommen, darunter auch die Diskretisierung des Transportwegs in Blöcke und die Aufteilung der Nuklide in Nuklidketten, dabei wird ein Einzelnuclid programmtechnisch als eine aus einem Nuklid bestehende Nuklidkette behandelt.

Die Rechnung beginnt mit dem Zeitpunkt des ersten Eintritts der Schadstoffe in das Modellgebiet. Das Simulationsende ist durch die Benutzerangabe festgelegt. Das Fortschreiten der Transportrechnung erfolgt diskretisiert in Zeitschritten. Die Zeitschrittweite wird vom Benutzer vorgegeben und kann je nach Benutzereinstellung vom Programm auf einen passenden Wert korrigiert werden. Des Weiteren kann eingestellt werden, ob die Länge des Zeitschritts über die gesamte Simulation konstant bleiben oder in jeder Iteration vom Programm automatisch auf einen optimalen Wert geändert werden soll.

Die Transportrechnung in einem einzelnen Zeitschritt läuft nuklidkettenweise ab. Die Abarbeitung einer Nuklidkette beginnt mit den obersten Mutternukliden und endet mit dem letzten Nuklid der Nuklidkette. Die Behandlung eines Nuklids erfolgt nur dann, wenn alle seine Mutternuklide bereits abgearbeitet wurden.

Bevor die Transportrechnung in einer zeitlichen Iteration gestartet wird, werden folgende vorbereitende Aktionen durchgeführt:

- ggf. wird die Länge des nächsten Zeitschritts angepasst,
- die Umgebungsparameter werden entsprechend dem zu berechnenden Zeitpunkt aktualisiert:
  - Einstromraten der Schadstoffe,
  - Volumenströme,
  - ggf. Retardationsfaktoren,
  - Dispersionskoeffizienten,
- die Einträge der Matrix  $\mathbf{M}$  und des Vektors  $\mathbf{b}$ , die das Gleichungssystem (5.48) spezifizieren, werden berechnet.

Im Anschluss wird das Gleichungssystem für jedes Nuklid gelöst. Aus den berechneten Konzentrationen werden Nuklidströme am Ende des Transportwegs und einige Kontrollgrößen ermittelt. Die Ergebnisse werden gespeichert.

Nach dem Ablauf der gesamten Simulation werden Ergebnisse sowie auch einige allgemeine Informationen zu dem Simulationsverlauf in die Ausgabedateien geschrieben.

### 5.5.1 Eingangsdaten

Daten, die einen Rechenlauf spezifizieren, werden in der graphischen Bedingungsfläche XENIA (s. Kapitel 3) eingegeben und in einer Datei im *JSON*-Format */WWW JS/* gespeichert. GeoTREND-SP bezieht die erforderlichen Eingangsdaten aus dieser *JSON*-Datei.

In XENIA werden Daten, die eine logische Einheit bilden, in sogenannten *Modulen* zusammengefasst. Um einen klaren Unterschied zu den ausführbaren Rechenmodulen zu gewährleisten, wird im Weiteren bei der Bezeichnung der XENIA-Modulen ein "X" dem

Modulnamen vorangestellt. Dann ist beispielweise unter "X-GeoTREND-SP" ein entsprechendes XENIA-Modul und unter "GeoTREND-SP" ein Rechenmodul zu verstehen.

Die Daten, die für eine Simulation mit GeoTREND-SP erforderlich sind und über XENIA eingegeben werden, werden in drei Modulen zusammengefasst:

- In dem Modul X-GeoTREND-SP werden
  - eine Namensliste der zu berechnenden Nuklide zusammengestellt,
  - der Transportweg entsprechend dem modellierten Anwendungsfall spezifiziert und
  - die den Rechenlauf steuernden Parameter festgelegt.
- Das Sorptionsverhalten aller in der Rechnung zu berücksichtigenden chemischen Elemente wird in einem oder mehreren Hilfsmodulen *elementdata-FF* definiert. In dem Modul X-GeoTREND-SP werden Referenzen (Objektnamen) zu den relevanten *elementdata-FF*-Objekten angegeben.
- Im Hilfsmodul *nucliddata* werden Eigenschaften aller Nuklide spezifiziert. Dieses Modul darf nur einmal in der Spezifikation eines Rechenlaufs vorkommen.

Für eine Rechnung mit GeoTREND-SP ist außerdem die Kenntnis von der Schadstofffreisetzung in das Modellgebiet über die gesamte Simulationszeit erforderlich. Die Schadstofffreisetzung wird von einem der vorangehenden Rechenmodule berechnet und in einem spezifizierten Format in zwei ASCII-Dateien gespeichert:

- eine Ausgabedatei mit der Erweiterung *\*sk* mit Freisetzungsraten und Konzentrationen der Schadstoffe zu den bestimmten Zeitpunkten, wobei für die Simulation nur die Freisetzungsraten relevant sind,
- eine Vorspanndatei mit der Erweiterung *\*vs* mit den Daten, die zur Interpretation der oben genannten *\*sk* Ausgabedatei notwendig sind,

wobei das *\**-Symbol an dieser Stelle als Platzhalter für einen Buchstaben verwendet wird.

Die Namen beider zusammengehörenden Dateien müssen bis auf die Erweiterung identisch sein. Der Buchstabe anstelle des *\**-Symbols gibt die Auskunft darüber, von welchem Rechenmodul die Daten stammen. Von GeoTREND-SP werden akzeptiert:

- rvs- und rsk-Datei – Ausgabe des EMOS-Nahfeldmoduls LOPOS /STR 96/,
- gvs- und gsk-Datei, die vom EMOS-Rechenmodul CLAYPOS stammen,
- cvs- und csk-Datei, die von einem der EMOS-Fernfeldmodulen (CHET1, CHET2, CHETMAD, TRAPIC) oder von dem RepoTREND-Rechenmodul GeoTREND-SP ausgegeben werden.

Beide Dateinamen sind an der entsprechenden Stelle des Moduls X-GeoTREND-SP in der JSON-Datei angegeben.

Das Rechenmodul GeoTREND-SP bezieht sich bei der Initialisierung des Rechenlaufs und bei der Simulationsdurchführung auf die beschriebenen drei Dateien. Sowohl bei der Initialisierung als auch während der gesamten Simulation werden die Eingangsdaten auf Vollständigkeit und Plausibilität überprüft. Bei festgestellten Inkonsistenzen oder beim Fehlen der Daten wird der Benutzer durch eine entsprechende Meldung auf das Problem hingewiesen, das Programm wird ggf. abgebrochen.

Bezüglich der Funktionalität zum Einlesen der Eingangsdaten sind folgende Anpassungen und Erweiterungen für eine spätere Projektphase geplant:

- EMOS-Rechenmodule schreiben die Ergebnisse nach jedem einzelnen Simulationsschritt in temporäre Dateien. Für die Ausgabe werden Daten aus diesen temporären Dateien zeilenweise eingelesen, verarbeitet und sukzessive in die Ausgabedateien geschrieben. Bei dieser Umsetzung ist ein Datenaustausch zwischen den Rechenmodulen nur mittels Ausgabedateien möglich. Dateizugriffe sind sehr rechenintensive Programmschritte. In der aktuellen Umsetzung von GeoTREND-SP werden, um viele Dateizugriffe zu vermeiden, die Ergebnisse der gesamten Simulation in einem Objekt im Arbeitsspeicher gehalten und erst nach dem Ablauf der gesamten Simulationszeit in die Ausgabedateien geschrieben. Bei diesem Ansatz kann ein nachfolgender Rechenmodul die Ergebnisse des vorhergehenden Rechenmoduls direkt aus dem Arbeitsspeicher übernehmen und weiterverarbeiten. Das Einlesen der meisten Eingangsdaten aus den Dateien wird in diesem Fall überflüssig, wodurch ein deutlicher Performance-Gewinn erzielt werden kann. Sobald das beschriebene Konzept der Ergebnisspeicherung in mehreren Rechenmodulen realisiert wird, soll über die entsprechende Erweiterung der Funktion zum Einlesen der Eingangsdaten diskutiert werden.

- Zu überprüfen, ob das Format *HDF5* *WWW* *HD/* statt derzeitig verwendeter ASCII-Formate als Datenaustauschformat zwischen den Rechenmodulen eingeführt werden soll. Das HDF5-Format ermöglicht eine deutlich kompaktere und dabei wesentlich anschaulichere Datenhaltung. Wenn das neue Format eingeführt wird, muss die Routine von GeoTREND-SP zum Dateneinlesen entsprechend geändert werden.

## 5.5.2 Ortsdiskretisierung

Im Modul X-GeoTREND-SP der JSON-Datei bzw. in XENIA wird das Deckgebirge, durch das die Ausbreitung von Schadstoffen gerechnet werden soll, charakterisiert. Der Transportweg wird in aufeinanderfolgende Gebiete unterteilt. Ein Gebiet ist durch eine einheitliche Materialbelegung und durch einen konstanten Querschnitt gekennzeichnet. Es werden die Gesamtlänge des Modellgebiets und die relativen Längenanteile der einzelnen Gebiete angegeben.

Für die numerische Berechnung wird eine Unterteilung der einzelnen Gebiete in Blöcke vorgenommen, wobei jeweils eine gebietsspezifische Blocklänge  $\Delta x_j$  berechnet wird. Dem Benutzer stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung, die Berechnung der Blocklänge eines Gebiets zu steuern.

Die erste Möglichkeit ist, die gewünschte Blocklänge  $\Delta x_{\max,j}$  beim Spezifizieren eines Gebiets in XENIA direkt vorzugeben. Dafür steht das optionale Attribut *block length (grid discretisation)* bereit. Der eingegebene Wert  $\Delta x_{\max,j}$  wird in diesem Fall vom Programm so abgeändert, dass die Gesamtanzahl der Blöcke  $N_j$  mit der korrigierten Blocklänge  $\Delta x_j$  im Gebiet eine Ganzzahl ergibt:

$$N_j = \text{int}\left(\frac{L \cdot l_j}{\Delta x_{\max,j}}\right) + 1 \quad , \quad (5.93)$$

- $j$  Gebietsindex,
- $N_j$  Anzahl der Blöcke im Gebiet  $j$ ,
- $L$  Gesamtlänge des Transportwegs [m],
- $l_j$  relative Länge des Gebiets  $j$  [-],

$$\Delta x_j = \frac{L \cdot l_j}{N_j} . \quad (5.94)$$

Der nach diesem Verfahren berechnete Wert  $\Delta x_j$  wird vom Programm als Blocklänge bei der Diskretisierung des Gebiets  $j$  verwendet.

Wenn die Blocklänge nicht explizit eingegeben wurde, so wird für ihre Berechnung die *Gitter-Peclet-Zahl*  $Pe$  herangezogen, die wie folgt definiert ist:

$$Pe = \frac{u \Delta x}{D} = \frac{u \Delta x}{D_m + \alpha u} . \quad (5.95)$$

Die Gitter-Peclet-Zahl  $Pe$  ist ein Maß dafür, welche Prozesse numerisch gesehen in einer Gitterzelle bei der gewählten Diskretisierung dominieren. Anhand der Gitter-Peclet-Zahl können i. A. Aussagen bezüglich der Stabilität der eingesetzten numerischen Algorithmen und der numerischen Genauigkeit gemacht werden.

Die Eingabe der Gitter-Peclet-Zahl  $Pe$  ist für den Benutzer obligatorisch, auch dann, wenn eine gebietsspezifische Blocklänge  $\Delta x$  vorgegeben ist. Bei der Berechnung der Blocklänge wird konservativ angenommen, dass der advektive Transport dominiert:

$$Pe \approx \frac{\Delta x_{\max,j}}{\alpha_j} . \quad (5.96)$$

Aus (5.96) ergibt sich für die Blocklänge

$$\Delta x_{\max,j} = \alpha_j Pe . \quad (5.97)$$

Der so ermittelte Wert  $\Delta x_{\max,j}$  wird weiterhin nach dem Verfahren (5.93)-(5.94) zu der im Gebiet  $j$  zu verwendenden Blocklänge  $\Delta x_j$  korrigiert.

Die direkte Vorgabe der Gebietsblocklänge hat somit eine höhere Priorität. Demzufolge kann es vorkommen, dass die gebietsspezifischen Gitter-Peclet-Zahlen unterschiedlich sind, was, wie im Weiteren erklärt wird, zu einem numerischen Problem führen kann.

Der Benutzer wird auf diese Problematik durch eine entsprechende Meldung hingewiesen.

Bei der Wahl der Parameter  $Pe$  und  $\Delta x_{\max,j}$  sollten einige Überlegungen in Betracht gezogen und bestimmte Richtlinien befolgt werden, um die numerischen Probleme im Griff zu halten:

- Die Blocklänge  $\Delta x$  sollte nicht größer als die physikalische Dispersionslänge  $\alpha$  sein. Dadurch wird vermieden, dass die numerische Dispersion, die durch die Ortsdiskretisierung verursacht wird, die physikalische überschreitet (s. Abschnitt 5.4.11.3). Diese Bedingung wird häufig als Gitter-Peclet-Zahl-Kriterium bezeichnet und stellt gleichzeitig eine Richtlinie für die Wahl des obligatorisch vorzugebenden Parameters  $Pe$  dar:

$$Pe \approx \frac{\Delta x}{\alpha} \leq 1 \quad . \quad (5.98)$$

- Die Unstetigkeiten im numerischen Modell stellen für ein numerisches Verfahren ein Problem dar. Die Unstetigkeiten können durch eine sprunghafte signifikante Änderung der Parameterwerte verursacht werden. Deswegen sollten sich die Blocklängen wie auch die Gitter-Peclet-Zahlen zweier benachbarter Gebiete nicht sehr voneinander unterscheiden. Als Faustregel kann zwei als der maximal zugelassene Faktor angenommen werden.

Der Parameter  $Pe$  ist in diesem Kontext besonders kritisch. Das Verfahren, bei dem alle gebietsspezifischen Blocklängen aus einer obligatorisch einzugebenden Gitter-Peclet-Zahl ermittelt werden, ist deswegen vorzuziehen.

- Die explizite Vorgabe der Blocklänge sollte nur in begründeten Fällen verwendet werden, wenn die Einhaltung der oben genannten Richtlinien oder der sich aus diesen Richtlinien ergebenden Diskretisierung schlecht oder gar nicht möglich ist.
- Alle in GeoTREND-SP eingesetzten numerischen Verfahren sind uneingeschränkt, d. h. auch bei beliebigen Werten von  $Pe$  stabil. Die Anforderungen an die Genauigkeit der Ergebnisse dürfen jedoch nicht außer Acht gelassen werden. Die durch die örtliche Diskretisierung verursachte numerische Dispersion ist bei  $Pe = 2$  gleich der physikalischen Dispersion (s. Abschnitt 5.4.11.3). Numerische Dispersion wird allerdings nach dem Lanz-Konzept korrigiert, was die erforderliche Genauigkeit gewähr-

leistet. Andererseits stellt die Lanz-Korrektur eine gewisse Einschränkung bei der Wahl der Diskretisierungsparameter dar. Gitter-Peclet-Zahlen  $Pe > 2$  könnten zu negativen Werten des korrigierten Dispersionskoeffizienten führen, was als Folge Oszillationen hervorrufen kann. Bei der Spezifikation der Größen, durch die die Blocklängen festgelegt werden, sollte darauf geachtet werden, dass alle resultierenden gebietsspezifischen Gitter-Peclet-Zahlen den Wert 2 nicht überschreiten:

$$Pe_j \leq 2 \quad . \quad (5.99)$$

## Diskussion

Wie bereits erwähnt, kann eine sprunghafte Änderung der Parameterwerte zu Unstetigkeiten im numerischen Modell und folglich zu numerischen Problemen führen, selbst dann, wenn die eingesetzten numerischen Konzepte absolut stabil sind. Je nach Verfahren und je nach Eigenschaften der Unstetigkeiten können numerische Fehler unterschiedlichen Charakter aufweisen. Es können Oszillationen auftreten, ein Verfahren kann zwar eine scharfe Unstetigkeit liefern, jedoch an der falschen Stelle oder das numerisch berechnete Ergebnis kann an der Unstetigkeitsstelle stetig sein. Die unangenehmsten Fehler sind zweifelsohne solche, bei denen die Lösung richtig aussieht, aber dennoch falsch ist.

In diesem Kontext sollte die Modellierung des Transportwegs als eine Aneinanderreihung mehrerer Gebiete mit unterschiedlichen Eigenschaften mit großer Sorgfalt vorgenommen werden. Als besonders kritisch für eine numerische Berechnung ist der Fall zu betrachten, wenn zwei benachbarte Gebiete einen signifikanten Unterschied der physikalischen Parameter aufweisen, was in der Realität durchaus vorkommt.

Eine Verfeinerung der Diskretisierung wird dieses Problem nicht mildern. Bei der aktuellen Umsetzung wird die Parameteränderung immer einen sprunghaften Charakter haben – vom letzten Block des ersten Gebiets zu dem ersten Block des Nachfolgegebiets.

Das Problem könnte z. B. durch eine genauere Auflösung der Unstetigkeiten gelöst werden. Dabei wird eine künstliche Modifikation der Umgebungsparameter wie auch der Diskretisierung von denjenigen Bereichen vorgenommen, die in unmittelbarer Nähe zur

Gebietsgrenze liegen. Die realen physikalischen Werte werden durch interpolierte Werte ersetzt, so dass der Übergang von einem Gebiet zu dem benachbarten dann als stetig angenommen werden kann. Die erforderliche Anpassung könnte vom Programm automatisch vorgenommen werden. Die beschriebene Erweiterung könnte in einer späteren Projektphase realisiert werden.

In der aktuellen Umsetzung sollte der Modellierer bei der Aufstellung des Modells eines Anwendungsfalls auf die beschriebene Problematik eingehen. Eine höhere Auflösung des Gebietsgrenzbereichs kann z. B. explizit modelliert werden. Es kann auch in begründeten Fällen in Erwägung gezogen werden, den Transport durch einzelne Gebiete separat nacheinander zu rechnen. Das wäre dann gerechtfertigt, wenn die Rückkopplung vernachlässigt werden kann. Z. B. wenn der Schadstofftransport in einem Gebiet rein diffusiv aber im darauffolgenden Gebiet ausgeprägt advektiv verläuft, dann ist der Rückfluss der Schadstoffe aus dem zweiten Gebiet in den davorliegenden verschwindend klein.

### 5.5.3 Zeitdiskretisierung

Die Zeitschrittlänge  $\Delta t$  wird vom Benutzer vorgegeben und kann je nach Programmeinstellungen modifiziert werden.

Der Benutzer kann die Option wählen, bei der das untere Limit für die Zeitschrittweite  $\Delta t_{\min}$  vom Programm bestimmt werden kann. Für die Berechnung wird das *Courant*-Kriterium herangezogen:

$$Co = \frac{u \Delta t_{Co}}{\Delta x} \leq 1 \quad \rightarrow \quad \Delta t_{Co} = \frac{\Delta x}{u} \quad . \quad (5.100)$$

Der untere Grenzwert für die Länge des Zeitschritts wird nach folgender Vorschrift festgelegt:

$$\Delta t_{\min} = \begin{cases} \Delta t_{Co}, & \Delta t_{Co} < \Delta t \\ \Delta t, & \Delta t_{Co} \geq \Delta t \end{cases} \quad . \quad (5.101)$$

Wenn  $\Delta t_{C_0} < \Delta t$  ist, dann wird auch die vom Benutzer vorgegebene Zeitschrittlänge auf diesen berechneten Wert korrigiert:  $\Delta t = \Delta t_{C_0}$ . Bei den weiteren Berechnungen wird diese angepasste Zeitschrittweite benutzt.

In der Formel (5.100) wird die während der gesamten Simulationszeit maximal mögliche Abstandsgeschwindigkeit  $u$  eingesetzt. Der maximale Volumenstrom setzt sich dabei aus dem maximalen Grundwasserstrom des Modelgebiets und dem maximalen Zustrom der Lauge über alle Schnittstellen mit dem Grubengebäude zusammen. Wenn die Abstandsgeschwindigkeit  $u$  null ist, strebt die resultierende Zeitschrittlänge gegen unendlich. Um das dadurch hervorgerufene numerische Problem in den Griff zu bekommen, wird die Abstandsgeschwindigkeit in diesem Fall durch die Konstante  $u = 10^{-20}$  m/a ersetzt.

Des Weiteren steht dem Benutzer die Option zur automatischen Steuerung der Zeitschrittlänge zur Verfügung. Wenn diese Option gewählt wird, müssen folgende Zeitschrittsteuerungsparameter vom Benutzer vorgegeben werden:

- *upper control limit in %* – obere Toleranzgrenze für die relative Differenz zwischen Ergebnissen aus dem aktuellen und aus dem vorangehenden Simulationsschritten. Im Programm wird der relative Wert  $d_{\max}$  benutzt, der sich aus der Division des vorgegebenen Werts durch 100 ergibt.
- *lower control limit in %* – entsprechend untere Toleranzgrenze  $d_{\min}$ .
- *minimal concentration for time control* – minimaler Konzentrationswert  $c_{\min}$  in  $[\text{mol}/\text{m}^3]$ .

Die Bedeutung dieser Parameter wird im Weiteren erklärt. Wenn die automatische Zeitschrittsteuerung nicht gewählt wird, so wird die gesamte Simulation mit konstanter Zeitschrittlänge  $\Delta t$  ausgeführt.

### 5.5.3.1 Automatische Steuerung der Zeitschrittlänge

Die uneingeschränkte Stabilität der in GeoTREND-SP verwendeten numerischen Verfahren erlaubt eine höhere Flexibilität bei der Wahl der Zeitschrittlänge als in CHET1, CHET2 und LOPOS. Die Länge des Zeitschritts wird lediglich durch die Anforderungen

an die Genauigkeit der Ergebnisse bestimmt. Bei der Aufstellung dieser Anforderungen sind folgende Überlegungen in Betracht zu ziehen.

Die Unstetigkeiten, d. h. signifikante Änderungen der Lösungsfunktion bei minimaler Änderung ihrer Parameter müssen wesentlich feiner zeitlich aufgelöst werden als stetige Abschnitte. Mit anderen Worten, wenn das System in einem bestimmten Zeitraum signifikante Änderungen der Schadstoffkonzentrationen aufweist, so müssen diese Änderungen in Zeitlupe, d. h. in kleineren Zeitschritten verfolgt werden. Für die Berechnung der Zeiträume, in denen keine bedeutenden Systemänderungen erfolgen, können dagegen wesentlich größere Zeitschrittweiten eingesetzt werden.

Basierend auf diesem Konzept wurde in GeoTREND-SP eine automatische Zeitschrittsteuerung umgesetzt. Die Anpassung der Länge des Zeitschrittintervalls wird automatisch in Abhängigkeit von dem Charakter der Konzentrationsentwicklung vorgenommen.

Nach dem Ablauf eines Simulationsschritts werden die gewonnenen Konzentrationswerte in jedem Block mit den entsprechenden Konzentrationswerten, die im vorangehenden Simulationsschritt ermittelt wurden, verglichen. Die maximale relative Differenz  $d_{\text{aktuell}}$  wird für weitere Analyse benutzt:

$$d_{\text{aktuell}} = \max \left| \frac{c_{i,\text{aktuell}} - c_{i,\text{vorig}}}{c_{i,\text{aktuell}}} \right| \quad (5.102)$$

$c_{i,\text{aktuell}}$  im aktuellen Zeitschritt  $t$  berechnete Konzentration im Block  $i$

$c_{i,\text{vorig}}$  im Zeitschritt  $t - \Delta t$  berechnete Konzentration im Block  $i$

Wenn diese maximale Differenz  $d_{\text{aktuell}}$  unter der vom Benutzer vorgegebenen unteren Toleranzgrenze  $d_{\text{min}}$  liegt, kann der Ergebnisunterschied als unbedeutend bewertet werden. Die Länge des aktuellen Zeitschritts  $\Delta t$  wird um einen Multiplikationsfaktor  $p_1$  ( $p_1 > 1$ ) vergrößert:

$$\Delta t = p_1 \cdot \Delta t, \quad \text{wenn } d_{\text{aktuell}} < d_{\text{min}} \quad (5.103)$$

Der nächste Simulationsschritt wird mit der größeren Zeitschrittweite  $\Delta t$  ausgeführt.

Überschreitet die maximale Differenz  $d_{\text{aktuell}}$  dagegen die vorgegebene obere Toleranzgrenze  $d_{\text{max}}$ , so wird die Änderung der Konzentrationen als signifikant eingestuft. In diesem Fall wird die Länge des Zeitintervalls um einen Multiplikationsfaktor  $p_2$  ( $0 < p_2 < 1$ ) verkleinert:

$$\Delta t = p_2 \cdot \Delta t, \quad \text{wenn } d_{\text{aktuell}} > d_{\text{max}} \quad . \quad (5.104)$$

Der Simulationszeitschritt wird mit der kleineren Zeitschrittweite wiederholt.

Liegen die Konzentrationsänderungen innerhalb des vorgegebenen Toleranzbereichs  $d_{\text{min}} \leq d_{\text{aktuell}} \leq d_{\text{max}}$ , so wird die Zeitschrittlänge  $\Delta t$  beibehalten.

Die Multiplikationsfaktoren  $p_1$  und  $p_2$  sind zurzeit als bestimmte Konstanten fest in den Programmcode integriert, der Benutzer hat auf sie keinen Einfluss. Die aktuell verwendeten Werte haben sich aus den zahlreichen Tests als optimal bezüglich Rechenzeit, Speicherverbrauch und Erfassung der Ergebnisse erwiesen. Später, nachdem reichlich Erfahrungen gesammelt und analysiert sein werden, soll ein anderes Konzept für Bestimmung der Multiplikationsfaktoren entwickelt und realisiert werden, z. B. als Funktion der aktuellen relativen Differenz der Ergebnisse  $d_{\text{aktuell}}$ .

Es wurden zahlreiche Testrechnungen unterschiedlicher Anwendungsfälle mit je unterschiedlichen Angaben für den Toleranzbereich durchgeführt. Bei der Bewertung der Ergebnisse wurde insbesondere auf drei Aspekte geachtet: Genauigkeit bei der Abbildung von Unstetigkeiten (sehr wechselhafte Funktionsabschnitte), Rechenzeit und Speicherverbrauch. Als optimal erwiesen sich:

- die obere Toleranzgrenze von 10-15 % und
- das untere Limit von 5 %.

Ein zu klein gewählter Toleranzbereich führt zu unnötig hohen Rechenzeiten. Bei zu breiten Toleranzbereichen kann es vorkommen, dass die Unstetigkeiten nicht ausreichend genau dargestellt werden, die lokalen Extrema werden zwar registriert, jedoch möglicherweise in etwas gemilderter Form, was hauptsächlich durch die Mittelung der Schadstoffeinstromraten über größere Zeiträume verursacht wird. Bei den statistischen Rechenläufen wird die Auswertung über tausende Spiele vorgenommen, dabei können

gewisse Abstriche bezüglich der Genauigkeit der Ergebnissen einzelner Spiele zu Gunsten erheblich kürzeren Rechenzeiten durchaus toleriert werden.

Bei der Vergrößerung wie auch bei der Verkleinerung der Zeitschrittlänge nach dem beschriebenen Verfahren sind Schranken nach oben wie auch nach unten gesetzt. Das untere Limit wird durch die minimale Länge  $\Delta t_{\min}$  (5.101) festgelegt und bleibt während der gesamten Simulation unverändert. Die maximal zulässige Zeitschrittlänge ist von dem aktuellen Simulationszeitpunkt wie folgt abhängig:

$$\Delta t_{\max} = \begin{cases} 1, & 0 < t \leq 1 \text{ [a]} \\ 10, & 1 < t \leq 10 \text{ [a]} \\ 50, & 10 < t \leq 100 \text{ [a]} \\ 100, & 100 < t \leq 1000 \text{ [a]} \\ 500, & 1000 < t \leq 10\,000 \text{ [a]} \\ 1000, & 10\,000 < t \leq 100\,000 \text{ [a]} \\ 5000, & t > 100\,000 \text{ [a]} \end{cases} \quad (5.105)$$

In der aktuellen Umsetzung sind die Werte für das maximale Limit als Konstanten im Programmcode fest eingebunden, der Benutzer hat keinen Zugriff auf diesen Parameter. In der späteren Projektphase, nachdem ausreichend Erfahrungen in der Anwendung des Zeitschrittsteuerungskonzepts gesammelt sein werden, kann ein anderes Verfahren zum Ermitteln der maximal zulässigen Länge des Zeitintervalls entwickelt und umgesetzt werden.

Der Ergebnisvergleich wird nur dann durchgeführt, wenn einer der beiden Konzentrationswerte größer als der von dem Benutzer vorgegebene minimale Konzentrationswert  $c_{\min}$  ist. Es findet kein Vergleich statt, sofern das nicht der Fall ist, die maximale relative Differenz  $d_{\text{aktuell}}$  wird als null angenommen. Durch diese Optimierung kann die Rechenzeit deutlich verbessert werden, weil einige rechenintensive Programmschritte bei den minimalen Konzentrationen entfallen. Die Tests ergaben einen Performancegewinn je nach Anwendungsfall bis zu 20 %. Die minimale Konzentration  $c_{\min}$  bezeichnet damit eine gewisse Grenze. Die Schadstoffkonzentrationen unter dem Wert  $c_{\min}$  werden berücksichtigt, die Abweichungen im vorgegebenen Toleranzbereich gelten jedoch als vernachlässigbar. Der Wert  $c_{\min}$  wird in der Maßeinheit  $[\text{mol}/\text{m}^3]$  erwartet, gilt für alle Nuklide und berücksichtigt demzufolge individuelle Aktivität der Nuklide nicht. Dieser Aspekt

muss bei der Vorgabe von  $c_{\min}$  beachtet werden. Bei den durchgeführten Tests haben sich die Werte  $10^{-19}$ - $10^{-20}$  mol/m<sup>3</sup> bewährt.

### 5.5.3.2 Berücksichtigung kurzlebiger Radionuklide

Die Konzentrationsentwicklung eines Radionuklids kann nur dann mit ausreichender Genauigkeit festgehalten werden, wenn die Zeitschrittlänge bezüglich seiner Halbwertszeit nicht zu grob gewählt ist, so dass die durch den radioaktiven Zerfall verursachten Änderungen in ausreichend feinen Zeitabschnitten wahrgenommen werden. Dieses Thema wird unter anderen Blickwinkeln auch in den Abschnitten 5.4.5 und 5.6.1.3 diskutiert.

Bei der automatischen Bestimmung der Länge des aktuellen Zeitschrittintervalls muss demzufolge die kürzeste Halbwertszeit der Radionuklide, die zu dem aktuellen Zeitpunkt im Ausbreitungsgebiet enthalten sind, berücksichtigt werden. Das Verfahren dazu ist noch zu entwickeln und umzusetzen.

Die bisher realisierten Konzepte arbeiten bei den Radionukliden mit hohen Halbwertszeiten sehr gut. Die kurzlebigen Radionuklide werden beim Transport durch das Deckgebirge nur selten betrachtet. Aus diesem Grund wurde die Umsetzung der Abhängigkeit der Zeitschrittlänge von den Halbwertszeiten auf eine spätere Projektphase verschoben.

Wenn kurzlebige Radionuklide in der aktuellen Umsetzung gerechnet werden müssen, dann sollten folgende Einstellungen vorgenommen werden:

- Crank-Nicolson-Zeitintegrationsschema,
- Zeitschrittlänge  $\Delta t$  maximal ein Drittel der kleinsten Halbwertszeit,
- keine automatische Zeitschrittsteuerung.

Ohne automatische Zeitschrittsteuerung ist zwar mit relativ hohen Rechenzeiten zu rechnen, die ausreichende Genauigkeit der Ergebnisse ist jedoch bei diesen Einstellungen gewährleistet.

### 5.5.3.3 Diskussion

In GeoTREND-SP sind implizite, absolut stabile numerische Algorithmen eingesetzt. Im Allgemeinen wird auch für die impliziten Differenzenschemas empfohlen, das Courant-Kriterium (5.100) einzuhalten, weil Oszillationen damit weitgehend unterdrückt werden können /KIN 92/. Eine strikte Einhaltung dieses Kriteriums führt jedoch zu erheblichen Einschränkungen bezüglich der Zeitschrittweite und folglich zu hohen Rechenzeiten. Die Vorteile, die implizite Verfahren insbesondere hinsichtlich der großen Flexibilität bei der Wahl der Zeitschrittlänge bieten, sollten entsprechend genutzt werden. Die zahlreichen Tests, die im Rahmen der Verifizierung von GeoTREND-SP durchgeführt wurden, aber auch die, die in der Literatur beschrieben sind /KIN 92/, bestätigen, dass eine ausreichend hohe Genauigkeit auch bei großen Courant-Zahlen  $Co$  erreicht wird.

In diesem Kontext kann die höchste Effizienz bei den Transportrechnungen mit GeoTREND-SP durch den Einsatz automatischer Steuerung der Zeitschrittlänge sowie automatischer Berechnung der minimalen zulässigen Länge des Zeitschrittintervalls erzielt werden. Wenn das System innerhalb eines Zeitraums signifikante Änderungen aufweist, so wird das Courant-Kriterium während dieser Periode quasi eingehalten. Sind die Veränderungen klein, werden die Zeitintervalle entsprechend vergrößert.

Inwiefern sich die unterschiedlichen Programmeinstellungen in Bezug auf Rechenzeit und Speicherverbrauch auswirken, ist in Tab. 5.1 dargestellt. Ein und derselbe Rechenlauf wurde mit drei möglichen Einstellungen bezüglich der Zeitschrittlänge durchgeführt. Die Simulation erfasste 1 Mio. Jahre. Die Rechnung mit CHET1 dauerte 4 Min. 38 Sek. Die Genauigkeit der Ergebnisse war in allen Rechnungen praktisch gleich.

**Tab. 5.1** Vergleich von Rechenzeiten und Speicherbedarf bei unterschiedlichen Programmeinstellungen

automatische Zeitschrittsteuerung	automatische Berechnung von $\Delta t_{\min}$	$\Delta t$ [a]		Rechenzeit	Speicherbedarf
		vorgegeben durch Benutzer	als $\Delta t_{\min}$ im Programm verwendet		
		10	10	22 Min. 35 Sek.	50 MB
X		10	10	46 Sek.	20 MB
X	X	10	1,9	1 Min. 4 Sek.	30 MB

#### 5.5.4 Bestimmung der Einstromrate

Zur Definition des Schadstoffzustroms müssen folgende Daten in der JSON-Datei bzw. im Modul X-GeoTREND-SP in XENIA angegeben werden:

- vollständige Namen der für die Simulation relevanten Dateien \*vs und \*sk,
- Bezeichnung des Rechenmoduls, von dem diese Dateien ausgegeben wurden,
- relative Ortsangabe der Schadstoffzuflussstelle.

Der Bezug kann nur zu einem Rechenmodul vorgenommen werden. Wenn es sich dabei um das Rechenmodul LOPOS handelt, so kann die LOPOS-Ausgabedatei rsk Daten zu mehreren Segmenten, die in diesem Kontext als Ausgabesegmente bezeichnet werden, enthalten (s. Anhang B). Der Austritt der Schadstoffe aus dem Grubengebäude in das Deckgebirge kann durchaus an mehreren Stellen erfolgen. GeoTREND-SP ist ein Fernfeld-Rechenmodul, bei dem es, anders als bisher bei CHET1 und CHET2, möglich ist, das Szenario mit mehreren Schadstoffeintrittsstellen abzubilden. Vom Benutzer müssen Namen und relative Ortsangaben derjenigen Ausgabesegmente spezifiziert werden, die als Schnittstellen zu der Geosphäre fungieren. Es werden Daten aus den relevanten Datenblöcken der rsk-Datei ausgelesen und verarbeitet.

Anhand der Ortsangabe wird die Zugehörigkeit einer Schnittstelle zu einem Block festgestellt. Einem Block können mehrere Schnittstellen zugeordnet werden.

Die Freisetzungsraten sind in der \*sk-Datei zeitabhängig angegeben. Die Zeitdiskretisierung deckt sich mit der Zeitdiskretisierung der in GeoTREND-SP ablaufenden Simulation i. A. nicht. Um eine für den Zeitraum  $t$  bis  $t + \Delta t$  gültige Freisetzungsrates  $q$  zu ermitteln, wird ein arithmetisches Mittel aus den Freisetzungsraten zu den in diesem Zeitintervall liegenden und aufeinanderfolgenden Zeitpunkten der \*sk-Datei  $t_1$  bis  $t_N$  ausgerechnet:

$$q = \frac{1}{\Delta t} \left( (t_1 - t)q(t_0) + \sum_{i=1}^{N-1} (t_{i+1} - t_i)q(t_i) + (t + \Delta t - t_N)q(t_N) \right). \quad (5.106)$$

Falls mehrere Schnittstellen einem Block zugeordnet wurden, wird die Summe über die nach (5.106) ermittelten Freisetzungsraten relevanter Schnittstellen gebildet.

Der Benutzer kann eine Programmeinstellung wählen, bei der die Freisetzungsraten der Mutternuklide  $k'$ , die nicht in der Nuklid Auswahl des X-GeoTREND-SP-Moduls jedoch in der \*sk-Datei enthalten sind, zu den Freisetzungsraten der entsprechenden Töchter  $k$  hinzugefügt werden. Das Aufaddieren erfolgt auf der Basis der Teilchenerhaltung:

$$q_{k,gesamt} = q_k + \sum_{k'} q_{k'} \quad (5.107)$$

### 5.5.5 Volumenstrom

Der im aktuellen Zeitschritt im Block  $i$  gültige Volumenstrom  $\dot{V}_i$  setzt sich zusammen aus

- dem Grundwasservolumenstrom des relevanten Gebiets und
- den Volumenströmen der Flüssigkeit, die aus den links von dem rechten Rand des Blocks  $i$  liegenden Schnittstellen mit Grubengebäude eintritt.

Der für den aktuellen Zeitintervall  $\Delta t$  gültige Volumenstrom durch eine Schnittstelle wird als arithmetisches Mittel aus den Volumenströmen zu den in diesem Zeitraum liegenden und aufeinanderfolgenden Zeitpunkten der \*sk-Datei  $t_1$  bis  $t_N$  berechnet.

## **Diskussion**

In den EMOS-Fernfeldmodulen wird der Volumenstrom in dem gesamten Gebiet innerhalb eines Simulationsschritts als konstant angenommen, d. h. dass der aus dem Grubengebäude austretende aktuelle Volumenstrom zu dem Grundwasserstrom jedes Blocks des Transportwegs, unabhängig von der Position der Schnittstelle aufaddiert wird. Auch die Blöcke, die links von der Schnittstelle liegen, erfahren die gleiche Aktualisierung des Volumenstroms. Dieser Ansatz kann zum Verdünnen des Schadstoffs führen, wenn die Schadstoffquelle entfernt von dem Einstromrand platziert ist, und der zufließende Volumenstrom gegenüber dem Grundwasserstrom nicht als vernachlässigbar klein angenommen werden kann.

Wie bereits beschrieben erfolgt die Aktualisierung des Volumenstroms in GeoTREND-SP nicht im ganzen Modellgebiet, sondern nur in einem Abschnitt des Modellgebiets, nämlich ab der Position des Flüssigkeitseintritts bis zum Ausstromrand (also nur in die Fließrichtung). Der Volumenstrom der Bereiche, die links vor der Schnittstelle liegen, bleibt durch diese unbeeinflusst. Dieser Ansatz bildet Modellgebiete dann gut ab, wenn durch Pegelhöhenunterschiede und hydraulische Parameter gesichert ist, dass zuströmendes Wasser in Richtung des Ausstromrands fließt. Dieser Aspekt muss bei der Modellierung eines Anwendungsfalls in Betracht gezogen werden. Die genannte Bedingung ist z. B. im Fall von Stauwasser nicht erfüllt.

Die in GeoTREND-SP realisierte Herangehensweise führt im Vergleich mit dem ebenfalls möglichen Ansatz, dass das zuströmende Wasser anteilig zum linken und zum rechten Rand fließt, nicht zu einem verspäteten oder verkleinerten Schadstoffaustrag am Ausstromrand, und kann damit als konservative Näherung des letzteren gesehen werden.

### **5.5.6 Kontrolle der Ergebnisse**

Nach jedem Simulationsschritt werden die ermittelten Ergebnisse kontrolliert. Dabei wird überprüft, ob negative Konzentrationen aufgetreten sind. Negative Werte sind ungültig und weisen normalerweise auf Oszillationen im System hin. Um die Oszillationen zu dämpfen, wird die Länge des nächsten Zeitschritts auf die minimal zulässige gesetzt. Der Benutzer wird über die Negativwerte durch eine entsprechende Meldung informiert.

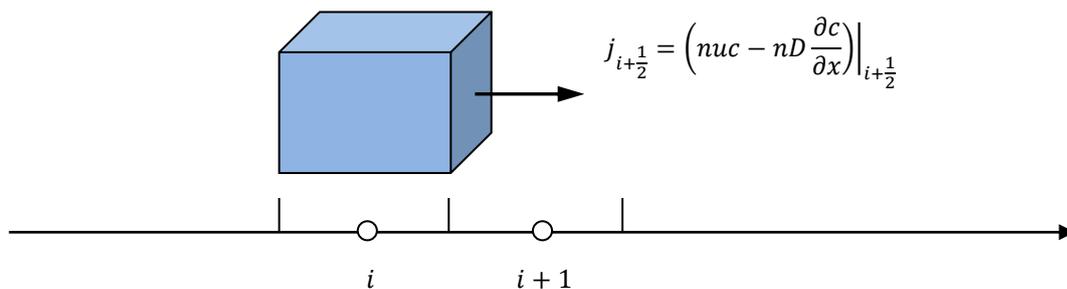
Diese realisierte Vorgehensweise ist zum Erkennen der Oszillationen nicht ausreichend. Oszillationen, bei denen die Werte positiv bleiben, werden vom Programm nicht erkannt. Sollte sich in der Praxis erweisen, dass Oszillationen ein häufig auftretendes Problem sind, so können weitere Verfahren zu ihrer Erkennung integriert werden. Z. B. könnte zusätzlich die Richtungsänderung des Ergebnisvektors in jedem Simulationsschritt ausgewertet werden. Diese Maßnahmen erfordern jedoch zusätzliche Rechenzeit, deswegen wurde auf ihre Realisierung vorerst verzichtet.

### 5.5.7 Berechnung der Schadstoffströme

Die csk-Ausgabedatei enthält zeitabhängige Angaben zu Volumenstrom, Konzentrationen und Schadstoffströmen am Ausstromrand.

Bei der Berechnung des Schadstoffstroms  $q$  durch eine Oberfläche sind grundlegende Transportmechanismen relevant (s. Abb. 5.3):

- advektive Bewegung in Richtung und mit der lokalen Geschwindigkeit  $u$  des Wassers,
- molekulare Diffusion und Dispersion  $D$ .



**Abb. 5.3** Massenstrom durch eine Oberfläche

Der Massenstrom über die gesamte Fläche des Ausstromrandes des Blocks  $i$  kann wie folgt ermittelt werden:

$$\begin{aligned}
q_i &= (Aj)_{i+\frac{1}{2}} = \left( nAuc - nAD \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}} = \left( \dot{V}c - nAD \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}} \\
&= \dot{V}_i c_i - \overline{nAD}_{i+\frac{1}{2}} \frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta\chi_{i+1}} .
\end{aligned} \tag{5.108}$$

Bei der Berechnung des Ausstroms an dem letzten Block  $n$  wird die Transmissionsrandbedingung (5.70) einbezogen, die besagt, dass der Konzentrationsgradient, der sich vor dem Rand einstellt, beibehalten bleibt, was einen ungehinderten Weiterfluss gewährleistet. Für den Randblock kann folglich angenommen werden:

$$\overline{nAD}_{n+\frac{1}{2}} \frac{c_{n+1} - c_n}{\Delta\chi_{n+1}} = n_n A_n D_n \frac{c_n - c_{n-1}}{\Delta\chi_n} . \tag{5.109}$$

Nach dem Einsetzen von (5.109) in (5.108) ergibt sich für den Schadstoffstrom durch den Ausstromrand

$$q_n = \dot{V}_n c_n - n_n A_n D_n \frac{c_n - c_{n-1}}{\Delta\chi_n} . \tag{5.110}$$

### 5.5.8 Kontrollgrößen

Zu Kontrollzwecken werden für alle Nuklide folgende Größen an den einzelnen für die Ausgabe ausgewählten Zeitpunkten  $t$  berechnet:

- die Menge eines Nuklids, die zum ausgewählten Zeitpunkt  $t$  im Transportweg vorhanden ist:

$$M(t) = \sum_{i=1}^n c_i(t) n_i A_i \Delta x_i R_i(t) , \tag{5.111}$$

- die Menge eines Nuklides, die bis zum ausgewählten Zeitpunkt  $t$  in den Transportweg eingetreten ist:
  - über den Einstromrand,
  - über jede Schnittstelle separat:

$$Q_S(t) = \sum_{\Delta t} \Delta t \cdot q_{S,\Delta t} \quad , \quad (5.112)$$

$\sum_{\Delta t}$  die Summierung über alle in der Simulation bis zu dem Zeitpunkt  $t$  verwendeten Zeitintervalle  $\Delta t$ ,

$q_{S,\Delta t}$  im Zeitintervall  $\Delta t$  gültige Einstromrate eines Nuklids über den Einstromrand bzw. über die Schnittstelle  $S$ ,

- sowie die Gesamtmenge:

$$Q(t) = \sum_S Q_S(t) \quad , \quad (5.113)$$

- der bis zum ausgewählten Zeitpunkt  $t$  kumulierte Austrag aus dem Transportweg:

$$S(t) = \sum_{\Delta t} \Delta t \cdot q_{n,\Delta t} \quad , \quad (5.114)$$

$q_{n,\Delta t}$  im Zeitintervall  $\Delta t$  gültiger Nuklidstrom aus dem letzten Block  $n$ , berechnet nach (5.110).

Außerdem werden Maximalwerte der Konzentrationen am Ausstromrand, d. h. im letzten Block des Transportwegs sowie die Zeiten, an denen diese Werte registriert wurden, gespeichert.

### 5.5.9 Speicherung der Ergebnisse für die Ausgabe

Nach jedem Simulationsschritt liegt ein Ergebnis vor. Um die Schadstoffausbreitung ausreichend genau darzustellen, werden jedoch nicht alle Ergebnisse benötigt. Die Entscheidung darüber, welches Ergebnis für die Ausgabe relevant ist, wird mittels zweier vom Benutzer zu spezifizierender Parameter gesteuert:

- Der Wert des Parameters *relative significant difference in %* bestimmt die obere Grenze in % für die akzeptable Differenz der Ergebnisse. Das im aktuellen Simulationsschritt ermittelte Ergebnis wird blockweise mit dem für die Ausgabe zuletzt gespeicherten Ergebnis verglichen. Das neue Ergebnis wird nur dann für die Ausgabe gespeichert, wenn der Unterschied zwischen beiden Ergebnissen in mindestens ei-

nem Block den vorgegebenen Parameterwert überschreitet. In den Testrechnungen hat sich der Wert 15 % sehr gut bewährt.

- Der beschriebene Vergleich wird nur dann durchgeführt, wenn beide zu vergleichenden Konzentrationen größer als die durch den Wert des Parameters *minimal concentration for output control* festgelegte minimale Nuklidkonzentration sind. Wenn die Ergebnisse unter diesem Wert liegen, wird die Ergebnisdifferenz als null angenommen.

Bei sehr kleinen Konzentrationswerten ist die oben beschriebene signifikante Differenz fast immer vorhanden. Um zu vermeiden, dass beinahe jedes Ergebnis in diesem Wertebereich gespeichert wird, was folglich zu unnötig hohem Arbeitsspeicherbedarf sowie einer langen Programmausführungszeit führt, wurde dieser Parameter eingeführt. Für die praktische Anwendung sind hier Werte zu empfehlen, die nicht kleiner sind als  $10^{-16}$  [mol/m<sup>3</sup>].

Alle für die Ausgabe relevanten Ergebnisse werden im Arbeitsspeicher abgelegt und nach dem Ablauf der Simulation in einem Arbeitsschritt in die Dateien ausgegeben. Ferner können die Ergebnisse von den weiterführenden Rechenmodulen zur weiteren Bearbeitung direkt aus dem Arbeitsspeicher übernommen werden. Durch das realisierte Konzept der Datenhaltung werden viele rechenintensive Dateizugriffe vermieden, was zur Verkürzung der gesamten Programmausführungszeit erheblich beiträgt. Bei dieser Umsetzung kann es allerdings je nach Anwendungsfall, abhängig von der Wahl der beschriebenen Kontrollparameter und der Eigenschaften des Zielrechners, dazu kommen, dass der zur Verfügung stehende Arbeitsspeicher zur Aufnahme aller für die Ausgabe relevanten Ergebnisse nicht ausreicht. Für diesen Fall soll in der späteren Projektphase ein alternatives Konzept realisiert werden, bei dem die Daten während der Simulation sukzessiv in die Dateien geschrieben werden.

Die Zeitdiskretisierung in der Ergebnisausgabe wird bei der aktuellen Umsetzung von dem Programm aufgrund der Parameterwahl bestimmt und ist i. A. bei verschiedenen Rechenläufen unterschiedlich. Später soll die Option realisiert werden, bei der der Benutzer bestimmte Zeitpunkte vorgeben kann. Für diese Zeitpunkte soll dann die Berechnung des Schadstofftransports und die Ausgabe der Ergebnisse erfolgen. Durch diese Maßnahme kann ein besserer Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher Rechenläufe erzielt werden.

## Diskussion

In allen EMOS-Rechenmodulen werden nicht die in der Simulation tatsächlich berechneten Ergebnisse, sondern die auf bestimmte Zeitpunkte bzw. bestimmte Positionen linear interpolierten Werte ausgegeben. Die Ausgabezeiten bzw. -positionen, für die die Interpolation der Ergebnisse stattfindet, werden folgendermaßen festgelegt:

- für die zeitabhängigen Ausgaben (Dateien \*sk, \*zk) werden
  - die Ausgabezeitpunkte anhand der vom Benutzer vorgegebenen Anzahl der Zeitschritte pro Dekade ermittelt und
  - als Ausgabepositionen die vom Benutzer vorgegebenen Beobachtungsstellen und die Position der Übergabestelle an das weiterführende Rechenmodul verwendet,
- für die ortsabhängige Ausgabe (Datei \*ok) werden als Ausgabezeiten die vom Benutzer spezifizierten Beobachtungszeitpunkte benutzt.

Der generelle Nachteil linearer Interpolation ist, dass für die Berechnung des Wertes in dem gewünschten Punkt nur zwei tatsächlich vorhandene Nachbarpunkte in Betracht gezogen werden. Das kann dazu führen, dass signifikante, für die Interpolation jedoch irrelevante berechnete Ergebnisse (lokale Extrema) übersprungen werden und damit unbemerkt bleiben. Dieses Problem ist insbesondere für die zeitabhängigen Ausgaben, durch die die Entwicklung der Schadstoffwolke im Modellgebiet über die gesamte Simulationszeit nachvollzogen wird, kritisch.

Um dem Problem entgegenzuwirken wurde in der Praxis beispielweise bei der zeitabhängigen Ausgabe eine höhere Anzahl von Zeitschritten pro Dekade gewählt. Durch diese Maßnahme wird zwar die Anzahl der bei der Interpolation zu beachtenden Simulationsergebnisse erhöht, jedoch keine Lösung des beschriebenen Problems gesichert. Diese Vorgehensweise kann außerdem dazu führen, dass unnötigerweise mehrere Interpolationszeitpunkte zwischen zwei tatsächlich berechneten erzeugt und gespeichert werden.

Im Allgemeinen werden statt linearer Interpolation andere Interpolationsmethoden wie Spline- oder Akima-Interpolation, bei denen deutlich mehr als zwei benachbarte Punkte zur Auswertung herangezogen werden, empfohlen. Bei dem Einsatz dieser Methoden ist die Gefahr, dass wichtige Extremwerte bei der Interpolation ausgelassen werden, we-

sentlich geringer. Versuche haben allerdings gezeigt, dass die durch die Anwendung dieser Interpolationsalgorithmen ermittelte resultierende Ergebnisfunktion zumindest im Aufgabenbereich der Langzeitsicherheitsanalysen häufig die Anforderungen an die Approximationseigenschaften nicht erfüllt, die Interpolationsergebnisse oszillieren.

Weitere Aspekte, die in diesem Kontext in Betracht gezogen wurden, sind:

- Bei einer Interpolation findet eine weitere Mittelung der Daten statt, wodurch Extremwerte gemildert werden. Die lokalen Extrema haben jedoch im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalysen einen hohen Informationswert.
- Die Durchführung einer Interpolation der Daten erfordert zusätzliche nicht vernachlässigbare Rechenzeit.

Aus den hier erläuterten Gründen wurde bei der Realisierung von GeoTREND-SP auf eine sowohl zeitliche als auch räumliche Interpolation der Ergebnisse bewusst verzichtet. Dadurch sollte eine bessere Aussagekraft der ausgegebenen Daten und eine Reduzierung der Gesamtrechenzeit erzielt werden.

#### **5.5.10 Programmoptimierung**

Um die Rechenzeit und den Speicherbedarf so klein wie möglich zu halten, wurde GeoTREND-SP an diversen Stellen optimiert. Da sich die meisten der dazu umgesetzten Strategien besser im Kontext der anderen Abschnitte erschließen, sind sie auch dort erläutert. Hier werden nur die anderswo nicht erklärten Konzepte vorgestellt.

In jedem Simulationsschritt wird untersucht, bevor die Berechnung der Konzentrationswerte für ein Nuklid gestartet wird, ob dieser Arbeitsschritt notwendig ist. Es wird geprüft, ob:

- die Gesamtmasse des Nuklids im Transportweg zu dem aktuellen Zeitpunkt unter dem vom Benutzer vorgegebenen Wert (Parameter *effective zero for total amount*) liegt und
- im aktuellen Zeitschritt  $\Delta t$  kein Zufluss dieses Nuklids in das Ausbreitungsgebiet stattfindet.

Wenn beide Bedingungen zutreffen, wird die Konzentration eines Nuklids als quasi-null angesehen, und werden keine Berechnungen von Konzentrationen für dieses Nuklid im aktuellen Zeitschritt durchgeführt. Als aktuelle Ergebnisse werden die Ergebnisse aus dem vorangegangenen Simulationsschritt übernommen.

Die Gesamtmasse eines Nuklids im Ausbreitungsgebiet, die als vernachlässigbar klein angesehen wird, muss obligatorisch vom Benutzer festgelegt werden. Dieser Wert wird in [mol] angegeben und gilt für alle Nuklide. Demzufolge werden die Unterschiede in der Aktivität bei dieser Angabe nicht in Betracht gezogen. Der Wert sollte deswegen entsprechend klein gewählt werden. In den durchgeführten Testrechnungen bewährte sich in diesem Kontext der Wert  $10^{-20}$ .

### **5.5.11 Negative Ströme**

In der \*sk-Datei sind manchmal Ströme mit negativem Vorzeichen enthalten. Negative Flüssigkeitsströme aus dem Grubengebäude bilden spezielle Ereignisabläufe in Szenarien ab, bei denen einzelne Hohlräume oder Teilbereiche innerhalb eines kurzen Zeitraums aufgefüllt werden, und aufgrund derer ein Zufluss aus dem Deckgebirge ins Grubengebäude erfolgt.

Negative Ströme werden in GeoTREND-SP auf null gesetzt. Das entspricht der konservativen Annahme, dass alle Schadstoffe, die in das Deckgebirge eingetreten sind, dort bleiben und nicht mehr ins Grubengebäude zurückfließen. Die Möglichkeit eines Rückflusses ist programmtechnisch nicht realisiert.

Der Benutzer wird über negative Ströme durch eine Warnmeldung informiert. Der Sachverhalt stellt i. A. eine Unstetigkeit im System dar, was zu numerischen Problemen führen kann. Die Ergebnisse sollten in diesem Kontext entsprechend kritisch untersucht werden.

### **5.5.12 Stabile Nuklide**

In die Nuklidauswahl der Rechenläufe können neben den Radionukliden auch stabile Nuklide aufgenommen werden, die meistens als Tracer im Ausbreitungsgebiet eingesetzt werden. In EMOS-Rechenmodulen werden stabile Nuklide behelfs als Radionukli-

de mit sehr langen Halbwertszeiten modelliert. In GeoTREND-SP ist es möglich, stabile Nuklide als solche zu behandeln. Die Stabilität wird bei folgenden Programmschritten in Betracht gezogen:

- Vom Programm wird grundsätzlich angenommen, dass die Maßeinheit aller Eingangsdaten (Nuklidströme, Konzentrationen), die sich auf stabile Isotope beziehen, [mol] ist, unabhängig davon, in welcher Maßeinheit die Daten für Radionuklide vorliegen.
- Bei der Berechnung des Transports von stabilen Nukliden wird kein radioaktiver Zerfall berücksichtigt.
- Resultierende Ströme und Konzentrationen stabiler Isotope werden generell nur in [mol] ausgegeben, unabhängig davon, in welcher Maßeinheit die Ergebnisse zu den Radionukliden ausgegeben werden.

### 5.5.13 Ausgaben in die Ergebnisdateien

Rechenergebnisse sowie wichtige Informationen zum Simulationsablauf werden in einer Reihe von Dateien gespeichert. Alle Ausgabedateien außer der log-Datei haben bis auf die Erweiterung denselben Namen. Im Allgemeinen wird der Rechenlaufname als Dateiname verwendet. Wenn der Benutzer den optionalen Parameter *module ID* mit einem Wert belegt hat, dann wird die eingegebene Zeichenkette bei der Zusammenstellung des Dateinamens an den Rechenlaufnamen angehängt. Der Parameter *module ID* sollte insbesondere dann spezifiziert werden, wenn mehrere Transportrechnungen mit GeoTREND-SP innerhalb eines Rechenlaufs durchgeführt werden müssen, um zu verhindern, dass Dateien überschrieben werden.

Folgende Ausgabedateien werden von GeoTREND-SP zu einem Rechenlauf erstellt:

- \*.cvs Die sogenannte *Vorspanndatei* enthält Daten, die zur Interpretation anderer Ausgabedateien benötigt werden. Die wichtigsten Größen dabei sind Anzahl und Namen der gerechneten Nuklide, Anzahl und Liste von Beobachtungszeitpunkten sowie auch Beobachtungsstellen.

Der Benutzer kann optional bestimmte Zeiten und Positionen im Transportweg wählen. Zu jeder angegebenen Zeit wird der nächstgelegene in der Simulation gerechnete Zeitpunkt ermittelt, der als relevanter Beobachtungszeitpunkt fungiert. Als Be-

obachtungsstelle wird der Blockmittelpunkt verwendet, der zu der vom Benutzer vorgegebenen Position nächstgelegenen ist. Zu der Menge der Beobachtungsstellen zählt auch die Übergabestelle an weiterführende Rechenmodule. Als Übergabestelle ist der Mittelpunkt des letzten Blocks definiert, der letzte Punkt im Modellgitter, an dem die Werte berechnet wurden. Die Übergabestelle ist an der ersten Stelle der Liste von den Beobachtungsstellen in der cvs-Datei platziert.

Unterschiedliche zeit- und ortsabhängige Ausgaben aber auch die Berechnung von Kontrollgrößen beziehen sich auf die Beobachtungsstellen und –zeitpunkte.

- \*.csk      Mittels \*sk-Dateien findet der Datenaustausch zwischen den Rechenmodulen statt. Die csk-Datei enthält Blöcke mit Daten zu jedem während der Simulation gespeicherten Ausgabezeitpunkt in chronologischer Reihenfolge. Ein Datenblock umfasst folgende Angaben:
  - Ausgabezeitpunkt,
  - Volumenstrom an der Übergabestelle zu dem relevanten Ausgabezeitpunkt,
  - Massenströme für alle gerechneten Nuklide durch den Ausstromrand des Transportwegs zu dem relevanten Ausgabezeitpunkt,
  - Konzentrationen für alle gerechneten Nuklide an der Übergabestelle zu dem relevanten Ausgabezeitpunkt.
  
- \*.czk      Die czk-Datei enthält wie die csk-Datei Angaben zu jedem Ausgabezeitpunkt:
  - Ausgabezeitpunkt,
  - zugehörige Konzentrationen für alle Nuklide an den in der cvs-Datei angegebenen Beobachtungsstellen (inkl. Übergabestelle).
  
- \*.cok      Die Datei mit der Erweiterung cok enthält folgende Angaben zu jedem Block des Transportwegs:
  - absolute Ortsangabe des Blockmittelpunkts,
  - zugehörige Konzentrationen für alle Nuklide an den in der cvs-Datei angegebenen Beobachtungszeitpunkten.
  
- \*.ctime    Mittels dieser Datei kann die Änderung der Zeitschrittlänge während der gesamten Simulation nachvollzogen werden. Bei jedem Wechsel werden die neue Zeitschrittlänge und der Zeitpunkt, ab dem diese verwendet wird, registriert.

- \*.out In der out-Datei werden Informationen zur Kontrolle des ausgeführten Rechenlaufs ausgegeben. Die wichtigsten Angaben sind:
  - Datum,
  - Name des Rechenlaufs,
  - Angaben zu benötigter Rechenzeit und benutztem Arbeitsspeicher,
  - entsprechend den Benutzerangaben ermittelte Beobachtungsstellen und -zeitpunkte,
  - Anzahl der in der Simulation gerechneten und für die Ausgabe gespeicherten Zeitpunkte,
  - Beschreibung des generierten Modelgitters (örtliche Diskretisierung),
  - maximale Nuklidkonzentrationen an der Übergabestelle und Kontrollgrößen (s. Abschnitt 5.5.8).
- \*.pbd In der pbd-Datei werden in einer übersichtlichen Form alle vom Benutzer zur Spezifikation des Rechenlaufs angegebenen Parameter gespeichert.
- -.log In der log-Datei werden alle in den Programmcode eingebauten Fehler-, Warn-, Debug- und Infomeldungen ausgegeben. Jede Meldung hat einen eindeutigen Bezug auf die relevante Programmcodezeile. Die log-Datei dient in erster Linie der Problemanalyse auf der Programmcodeebene.

Das Format der Dateien \*.cvs, \*.cok und \*.czk ist in /STR 96/ genau spezifiziert. Die Formatänderungen, die im Rahmen der Umsetzung von GeoTREND-SP eingeführt wurden, sind im Anhang B festgehalten.

Der Benutzer kann auswählen, ob die Dateien \*.cok und \*.czk erstellt werden sollen. Die Erstellung der übrigen Ausgabedateien erfolgt obligatorisch.

Die Dateien \*.cvs, \*.csk, \*.cok und \*.czk werden nach einem Rechenlauf grundsätzlich neu erstellt. Bevor eine dieser Ausgabedateien generiert wird, wird geprüft, ob eine gleichnamige Datei im Arbeitsverzeichnis bereits existiert. Wenn das der Fall ist, wird der Benutzer mittels einer Warnmeldung darauf hingewiesen, die existierende Datei wird umbenannt, dabei wird die Erweiterung .bak an den Dateinamen angehängt, und anschließend wird mit der Dateierstellung begonnen.

Die Datei \*.ctime wird nach einem Rechenlauf neu erstellt. Sollte sich eine Datei mit diesem Namen im Arbeitsverzeichnis befinden, so wird sie ohne Warnungen überschrieben.

Bei der \*.out-, \*.pbd- und log-Datei wird im ersten Schritt das Arbeitsverzeichnis nach der Datei mit dem entsprechenden Namen durchsucht. Wenn die Suche erfolgreich war, wird die gefundene Datei geöffnet, die relevanten Informationen zu dem durchgeführten Rechenlauf werden am Ende der Datei angehängt. Nur wenn keine Datei gefunden wird, wird eine neue erstellt.

Die von dem Benutzer durch den Parameter *unit* festgelegte Maßeinheit für die auszugebende Schadstoffströme und -konzentrationen bezieht sich ausschließlich auf die Radionuklide. Werte für stabile Nuklide werden stets in [mol] ausgegeben (s. Abschnitt 5.5.12).

## 5.6 Verifizierung

Die Verifizierung von GeoTREND-SP erfolgt mittels nachvollziehbarer Analyse von Ergebnissen einiger Testrechnungen. Dabei werden einerseits, wenn möglich, analytische Lösungen der simulierten Prozesse angegeben, andererseits die Simulationsergebnisse des bereits verifizierten Programmcodes CHET1 herangezogen.

In CHET-Rechenmodulen wird das explizite Zeitintegrationsschema verwendet. In GeoTREND-SP wurden zwei implizite Verfahren realisiert:

- Crank-Nicolson und
- implizites Euler-Differenzenschema.

Bei der Durchführung der Testrechnungen wurden neben der Verifizierung der Simulationsergebnisse auch die Eigenschaften der beiden impliziten Verfahren genau untersucht. Jeder Testanwendungsfall wurde gerechnet:

- mit beiden Zeitintegrationsverfahren,
- jeweils mit und ohne automatische Steuerung der Zeitschrittlänge sowie
- mit und ohne Korrektur der minimalen zulässigen Zeitschrittweite.

Aus den Analysen lässt sich generell ableiten, dass die Ergebnisse, die mittels beider Zeitintegrationsverfahren sowohl mit als auch ohne Zeitschrittsteuerung erzielt wurden, eine akzeptable Genauigkeit aufweisen. Die signifikanten Unterschiede bestehen lediglich bei der Wahl der korrekten Zeitschrittweite  $\Delta t$  und folglich resultierenden Rechenzeit. Beide Verfahren erwiesen sich als stabil. Wenn der Parameter  $\Delta t$  ungünstig gewählt wurde, so äußerte sich dies bei den ausgeführten Testsimulationen in dadurch entstandenen visuell gut wahrnehmbaren Oszillationen, die im Laufe der Simulation entweder gedämpft wurden oder auf dem gleichen Niveau geblieben sind. Bei der Verwendung automatischer Zeitschrittsteuerung und beim Einhalten der empfohlenen Richtlinien bezüglich der Wahl des Parameters  $\Delta t$  wurden im Rahmen der durchgeführten Tests keine numerischen Probleme festgestellt.

Auf die Besonderheiten der Verfahren wird daher im Weiteren nur in der Analyse derjenigen Testsimulationen eingegangen, bei denen nennenswerte Unterschiede in der Genauigkeit der numerischen Lösungen festgestellt wurden.

### 5.6.1 Vergleich mit analytischer Lösung für Schadstoffquelle als $\delta$ -Impuls

Die eindimensionale Transportgleichung lässt sich für den Fall, dass die Masse des Schadstoffs  $M$  zur Zeit  $t = 0$  an einem Punkt  $x_0$  des anfänglich unbelasteten homogenen Aquifers injiziert wird

$$c(x, 0) = c_0 \delta(x - x_0) \quad , \quad \text{wobei} \quad c_0 = M/nAR \quad , \quad (5.115)$$

bei der Forderung verschwindender Konzentrationen im Unendlichen:

$$c(\pm\infty, t) = 0 \quad (5.116)$$

analytisch wie folgt lösen /KIN 92/:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi\alpha ut/R}} \exp\left(-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{4\alpha ut/R}\right) \exp(-\lambda t) \quad (5.117)$$

In Tab. 5.2 sind die Parameter angegeben, die für die in diesem Abschnitt beschriebenen Testrechnungen verwendet wurden.

**Tab. 5.2** Parameter für die Testsimulation zur Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$M$	1	[mol]	injizierte Schadstoffmasse
$\alpha$	2	[m]	Dispersionslänge
$D_m$	0	[m <sup>2</sup> /a]	molekulare Diffusionskonstante
$\rho$	1	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte
$A$	1	[m <sup>2</sup> ]	Querschnitt
$n$	1	[-]	Porosität
$\dot{V}$	1	[m <sup>3</sup> /a]	Volumenstrom
$R$	1	[-]	Retardationsfaktor
$\lambda$	0	[a <sup>-1</sup> ]	Zerfallskonstante
$L$	200	[m]	Gesamtlänge des Transportwegs
$\Delta x$	1	[m]	Blocklänge
$x_0$	19,5	[m]	Injektionsstelle (Mittelpunkt eines Blocks)

Die Injektionsstelle  $x_0$  wurde mit einigem Abstand vom Rand gewählt, um die Verbreitung des Schadstoffs auch in die Richtung des Einstromrands abbilden und analysieren zu können.

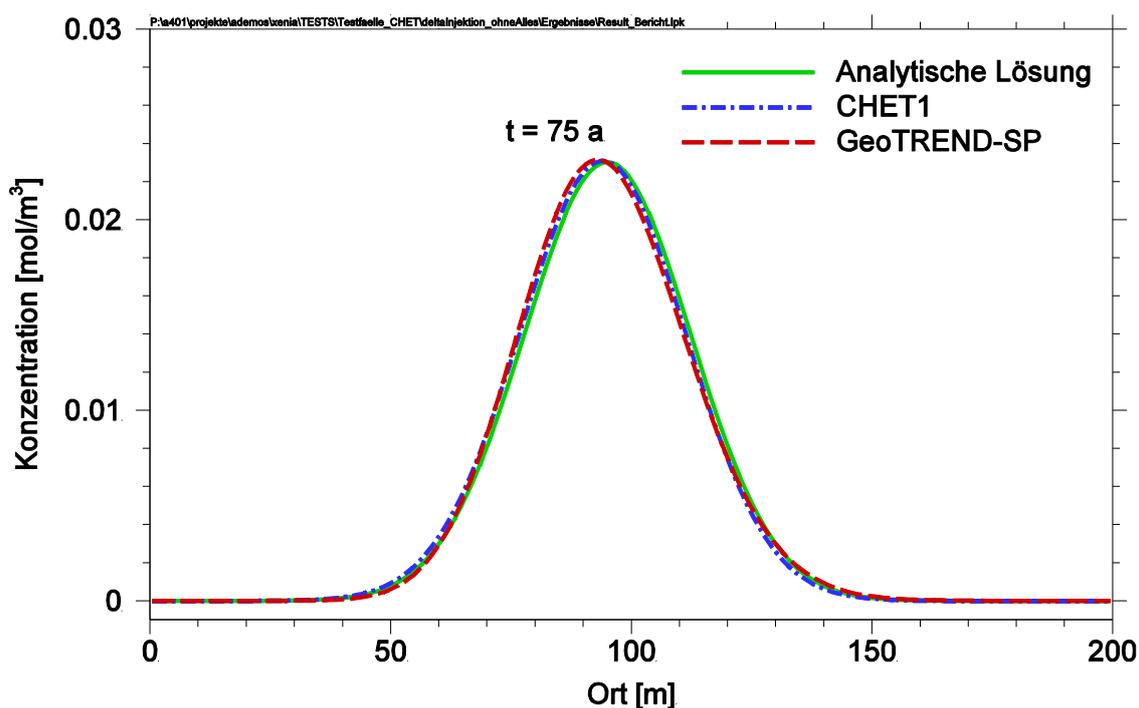
Der Einstrom des Schadstoffes ist sowohl in GeoTREND-SP als auch in CHET1 durch die Eingangsdatei \*sk geregelt. Zum Modellieren eines  $\delta$ -Impulses wird die entsprechende \*sk-Datei so angepasst, dass die Schadstoffmasse 1 mol komplett innerhalb des ersten in der Simulation verwendeten Zeitschritts in das Ausbreitungsgebiet einströmt. Nach dem ersten Zeitschritt erfolgt bis zum Simulationsende kein weiterer Zustrom des Schadstoffs.

Die Zeitschrittlänge in CHET1 wird automatisch anhand der Stabilitätskriterien berechnet und beträgt bei diesen Testrechnungen  $\Delta t = 0,2$  a. Die Simulationen in GeoTRENDS-SP wurden mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten ausgeführt.

### 5.6.1.1 Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses ohne Zerfall und ohne Rückhaltung

Um die Umsetzung der grundlegenden Transportmechanismen – Advektion, Diffusion und Dispersion zu testen, wurde die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses ohne Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls ( $\lambda = 0$ ) und ohne Rückhaltung ( $R = 1$ ) berechnet.

In Abb. 5.4 sind die Simulationsergebnisse für den Zeitpunkt  $t = 75$  a dargestellt. Die mit GeoTRENDS-SP ermittelten numerischen Ergebnisse stimmen mit der analytischen Lösung gut überein. Zum Vergleich sind auch die mit CHET1 erzielten numerischen Ergebnisse dargestellt.

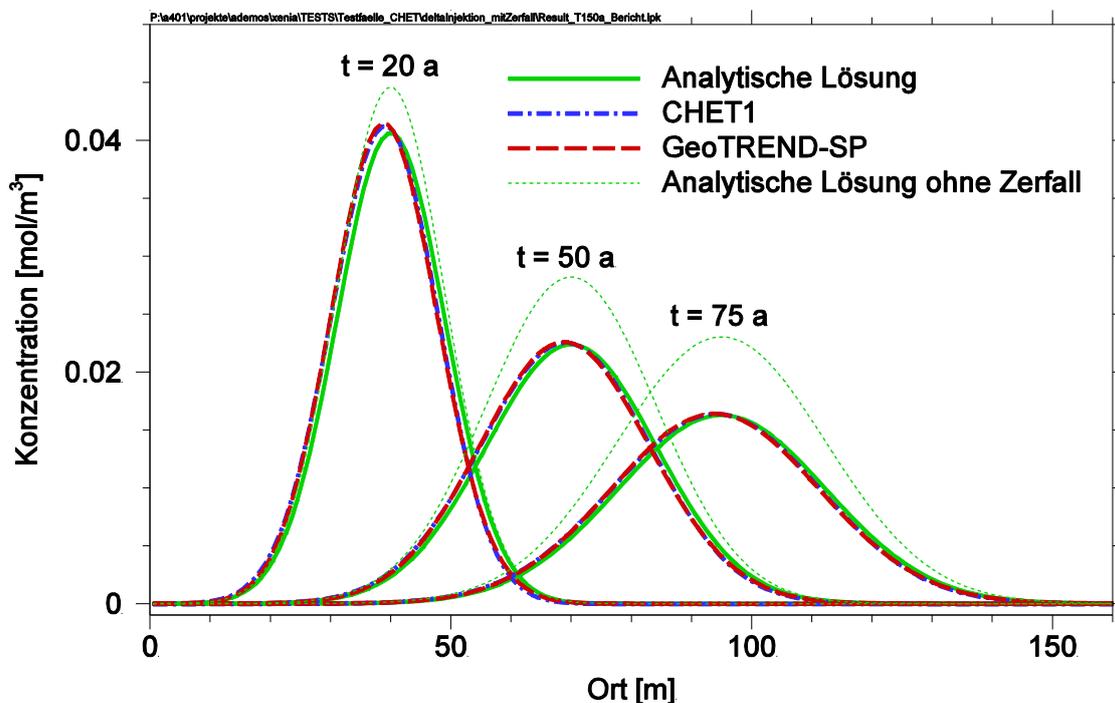


**Abb. 5.4** Vergleich der mit GeoTRENDS-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses ohne Zerfall und ohne Rückhaltung

### 5.6.1.2 Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall (langlebige Radionuklide), ohne Rückhaltung

Als nächstes soll auch der radioaktive Zerfall des Schadstoffes bei der Ausbreitungsrechnung berücksichtigt werden, wobei die Rückhaltung zunächst unbeachtet bleibt ( $R = 1$ ).

Die Ergebnisse der Transportrechnung bei der gewählten Halbwertszeit des Schadstoffes  $T = 150$  a sind in Abb. 5.5 für einige ausgewählte Zeitpunkte dargestellt. Die numerisch berechnete Konzentrationsverteilung stimmt mit der analytischen Lösung sowie auch mit den numerischen Ergebnissen der mit CHET1 durchgeführten Simulation gut überein.



**Abb. 5.5** Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses mit Zerfall bei der Halbwertszeit  $T = 150$  a, ohne Rückhaltung

Bei der Berechnung in CHET1 wurde die Zeitschrittlänge  $\Delta t = 0,2$  a verwendet. Die Simulation in GeoTREND-SP wurde mit unterschiedlichen konstanten wie auch variablen

Zeitschrittlängen ausgeführt, die Länge des Zeitschritts während der gesamten Simulation blieb jedoch deutlich kleiner als die gewählte Halbwertszeit  $\Delta t \ll T$ . Zum Vergleich ist auch die analytische Lösung ohne Zerfall abgebildet.

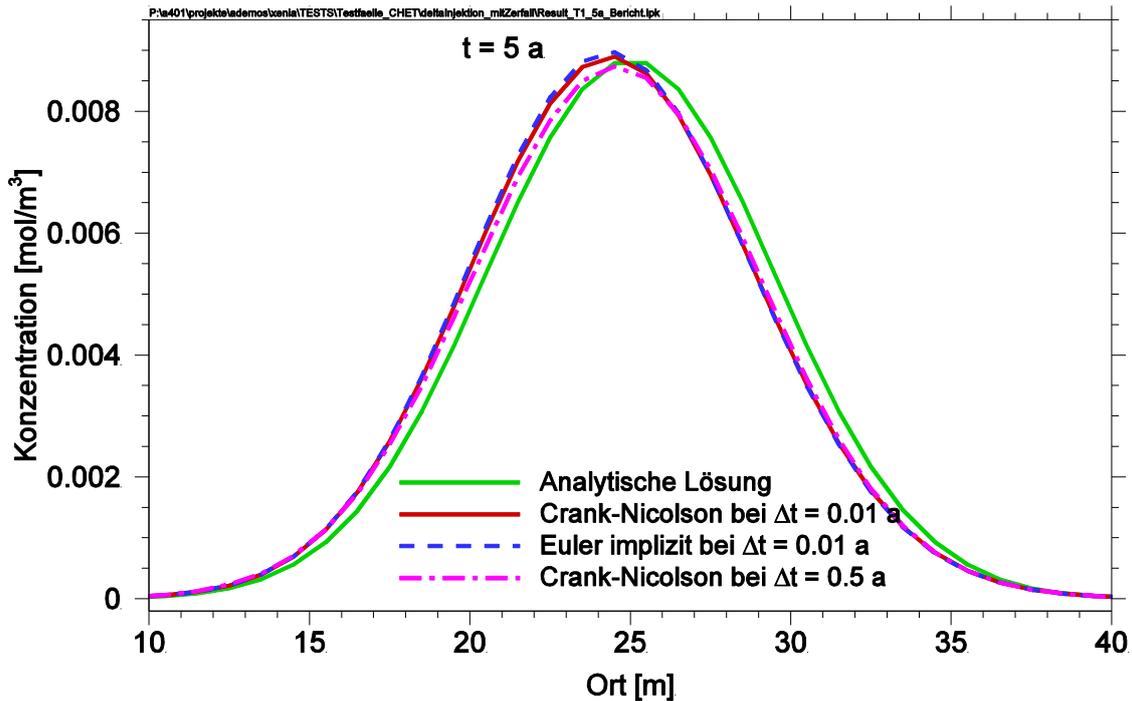
### **5.6.1.3 Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall (kurzlebige Radionuklide), ohne Rückhaltung**

In den Abschnitten 5.4.5 und 5.5.3.2 wurde die Problematik bezüglich kurzlebiger Radionuklide erläutert. Im Rahmen der Ausbreitungsrechnung für einen  $\delta$ -Impuls wurde untersucht, wie gut die in GeoTREND-SP verwendeten numerischen Algorithmen das Verhalten kurzlebiger Radionuklide abbilden. Für die entsprechende Simulation wurde ein Radionuklid mit der Halbwertszeit  $T = 1,5$  a gewählt.

Um die Zuverlässigkeit des Vergleichs mit der analytischen Lösung bei derart kurzen Halbwertszeiten zu gewährleisten, ist es beim Modellieren eines  $\delta$ -Impulses besonders wichtig, abzubilden, dass die Schadstoffmasse  $M$  möglichst genau zum Zeitpunkt  $t = 0$  ins Ausbreitungsgebiet injiziert wird. Ist die Länge des Zeitschritts vergleichbar mit der Halbwertszeit, dann wäre die oben beschriebene Modellierung eines  $\delta$ -Impulses anhand einer entsprechenden \*sk-Datei, bei der der Zustrom der gesamten Schadstoffmasse während des ersten Zeitschritts erfolgt, bei diesem Test ungeeignet, weil eine signifikante Menge des Radionuklids innerhalb dieses Zeitschritts bereits zerfällt. Eine Verkleinerung der Zeitschrittlänge wäre in GeoTREND-SP durchaus möglich, jedoch nicht zielführend. Der Zweck der Untersuchung war, herauszufinden, wie gut das numerische Verfahren bei den Zeitschrittweiten, die mit der Halbwertszeit des Radionuklids vergleichbar sind, funktioniert. Für die Modellierung des  $\delta$ -Impulses wurde deswegen ein anderer Weg gewählt, und zwar durch die Anfangsbedingung. Die Anfangskonzentration im Quellblock wurde auf den entsprechenden Wert  $c_{0, \text{Quellblock}} = 1 \text{ mol/m}^3$  gesetzt, wobei die Anfangskonzentrationen in anderen Blöcken als null definiert wurden. Es erfolgte kein weiterer Zustrom des Schadstoffs.

Die Simulation wurde sowohl mit dem Crank-Nicolson als auch mit dem impliziten Euler-Verfahren unter Einsatz unterschiedlicher, jedoch während der gesamten Rechenzeit konstanter Zeitschrittweiten durchgeführt. Die Ergebnisse zu dem Zeitpunkt  $t = 5$  a sind in Abb. 5.6 dargestellt.

Die dargestellten Ergebnisse weisen eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung auf. Um eine präzise Aussage bezüglich der Güte der Ergebnisse in diesem Testfall zu ermöglichen, wurde die Genauigkeit der verwendeten Algorithmen zusätzlich mit Hilfe der Exponentialfunktion  $c(t) = c_0 e^{-\lambda t}$  kontrolliert. Zu bestimmten Zeitpunkten  $t$  wurde die Änderung der Gesamtmasse  $M$  analytisch berechnet und mit den numerischen Ergebnissen verglichen. Die entsprechenden Daten sind in Tab. 5.3 angegeben.



**Abb. 5.6** Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen und mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösungen für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses mit Zerfall bei der Halbwertszeit  $T = 1,5$  a, ohne Rückhaltung

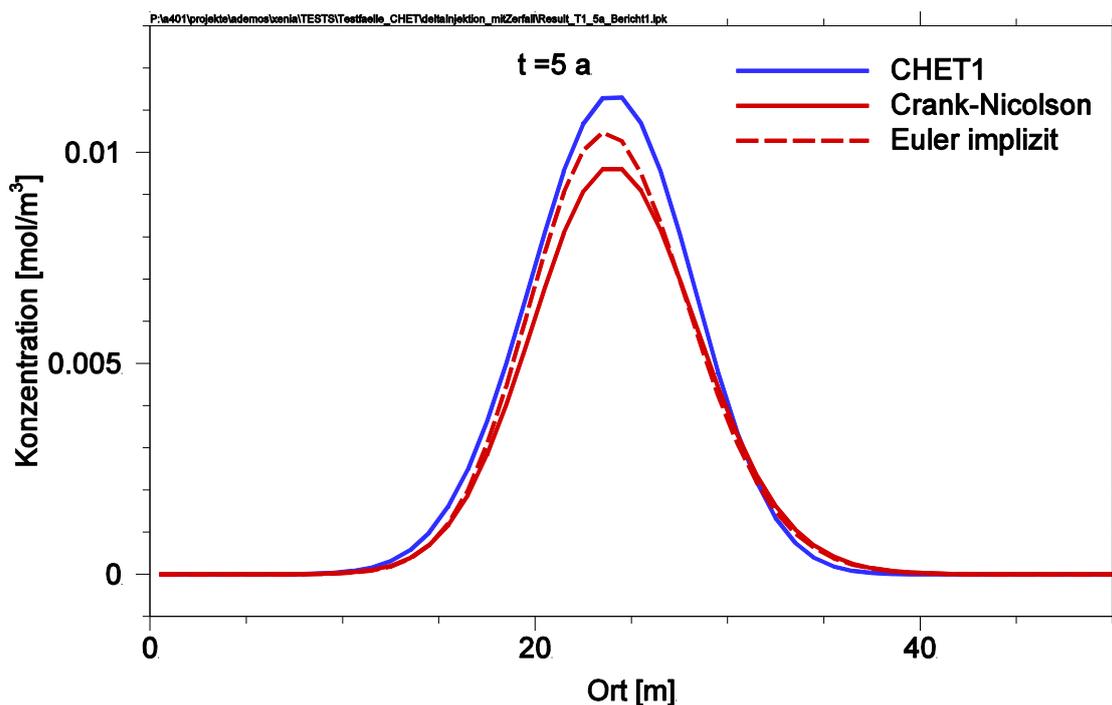
**Tab. 5.3** Änderung der Gesamtmasse eines Radionuklids mit  $T = 1,5$  a, berechnet analytisch und numerisch mit Crank-Nicolson (CN) und implizitem Euler-Verfahren (EI)

$t$ [a]	$M$ [mol], analytisch	$M$ [mol], numerisch			rel. Differenz [%] bezogen auf analytisch berechneten Wert		
		$\Delta t = 0,5$ a (CN)	$\Delta t = 0,01$ a (CN)	$\Delta t = 0,01$ a (EI)	$\Delta t = 0,5$ a (CN)	$\Delta t = 0,01$ a (CN)	$\Delta t = 0,01$ a (EI)
1	6,3002e-01	6,2866e-01	6,2996e-01	6,3063e-01	0,22	0,01	0,10
3	2,5007e-01	2,4845e-01	2,5000e-01	2,5080e-01	0,65	0,03	0,29
5	9,9261e-02	9,8190e-02	9,9212e-02	9,9742e-02	1,08	0,05	0,48
10	9,8528e-03	9,6412e-03	9,8431e-03	9,9484e-03	2,15	0,10	0,97

Den in Tab. 5.3 dargestellten Ergebnissen kann entnommen werden, dass, wie auch erwartet, das Crank-Nicolson-Verfahren als ein Verfahren höherer Ordnung bezüglich der Zeitdiskretisierung bessere Ergebnisse lieferte als das implizite Euler-Schema. Die Zeitschrittlänge konnte im Fall des Crank-Nicolson Zeitintegrationsschemas bis maximal  $\Delta t = 0,5$  a gewählt werden. Bei dieser bezüglich der Halbwertszeit des gerechneten Radionuklids hohen Zeitschrittweite weisen die numerischen Ergebnisse immer noch eine sehr gute Genauigkeit auf. Bei größeren Zeitschrittlängen treten Oszillationen an den Stellen mit starkem Konzentrationsgradient auf. Eine vergleichbare Genauigkeit der Ergebnisse konnte beim Einsatz des impliziten Euler-Schemas erst mit wesentlich kleineren Zeitschrittweiten  $\Delta t < 0,02$  a erzielt werden.

Die Analyse der Ergebnisse der beschriebenen Testsimulationen (wie auch der in weiteren Abschnitten 5.6.3, 5.6.4 und 5.6.5.2 vorgestellten Testrechnungen) zeigt, dass der in GeoTREND-SP gewählte Ansatz zur Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls den entsprechenden Prozess korrekt abbildet. Die geeignete Wahl der Zeitschrittlänge ist hier vorauszusetzen.

Ferner ist der Vergleich mit den numerischen Ergebnissen des Programms CHET1, in dem ein anderer, analytischer Ansatz zur Zerfallsberechnung realisiert ist, interessant. Die Halbwertszeit der Radionuklide wird in die Berechnung der Zeitschrittlänge in diesem Rechenmodul nicht einbezogen. Folglich wird in CHET1 bei der gewählten Parametrisierung auch für die Halbwertszeit  $T = 1,5$  a die Zeitschrittlänge  $\Delta t = 0,2$  a berechnet. Die Angabe der von null verschiedenen Anfangskonzentrationsverteilung ist in CHET1 nicht möglich. Demzufolge wäre der Vergleich von CHET1-Ergebnissen mit der analytischen Lösung in diesem Fall nicht berechtigt. Deswegen wird die mit CHET1 ermittelte Lösung mit den Ergebnissen der Simulation in GeoTREND-SP verglichen, dessen Verhalten bezüglich der Abbildung vom Zerfall kurzlebiger Radionuklide verifiziert wurde. In beiden Programmen wurde die Zeitschrittlänge  $\Delta t = 0,2$  a verwendet, die während der gesamten Simulation konstant blieb. Der  $\delta$ -Impuls wurde mittels einer entsprechend angepassten \*sk-Datei modelliert. Die Ergebnisse der ausgeführten Simulationen sind in Abb. 5.7 präsentiert.



**Abb. 5.7** Vergleich der mit CHET1 und mit GeoTREND-SP ermittelten numerischen Ergebnisse für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses mit Zerfall bei der Halbwertszeit  $T = 1,5$  a, ohne Rückhaltung

Die zuvor beschriebene Testrechnung hat gezeigt, dass der Crank-Nicolson Algorithmus bei der Zeitschrittlänge  $\Delta t = 0,2$  a Ergebnisse mit einer hohen Genauigkeit liefert, die bei dieser Schrittlänge erzielte Lösung kann damit als nahe der exakten angenommen werden. Das implizite Euler-Verfahren wies dagegen schon in der vorangegangenen Testsimulation bei dieser Zeitschrittlänge aufgrund der niedrigeren Ordnung des Zeitdiskretisierungsfehlers signifikante Abweichungen von der exakten Lösung auf. Dieser numerische Fehler war folglich auch bei der aktuellen Simulation zu erwarten und ist in Abb. 5.7 deutlich zu sehen (relative Differenz der Gesamtmasse ca. 9 %). Die mit CHET1 gewonnene Lösung weicht jedoch noch mehr von der exakten ab (relative Differenz der Gesamtmasse ca. 22 %).

In CHET1 ist der explizite Euler-Ansatz für die Zeitintegration realisiert. Dieses Verfahren ist von der gleichen Ordnung wie das implizite Euler-Schema. Der durch die Zeitdiskretisierung hervorgerufene Fehler wird in CHET1 durch den Fehler, der durch die Ortsdiskretisierung entsteht, sogar teilweise kompensiert, weil beide Fehler im gesamten numerischen Schema mit den entgegengesetzten Vorzeichen vorkommen (s. Abschnitt 5.4.11.3). Folglich kann der numerische Fehler der CHET1-Lösung allein mit der niedrigen Ordnung des realisierten Zeitintegrationsschemas bezüglich des Zeitdiskretisierungsfehlers nicht erklärt werden und ist auf den in CHET1 realisierten analytischen Ansatz bei der Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls zurückzuführen. Dieser Aspekt wird im Abschnitt 5.4.5 ausführlich diskutiert.

#### **5.6.1.4 Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung nach dem linearen Sorptionsmodell ( $K_d$ -Konzept), ohne Zerfall**

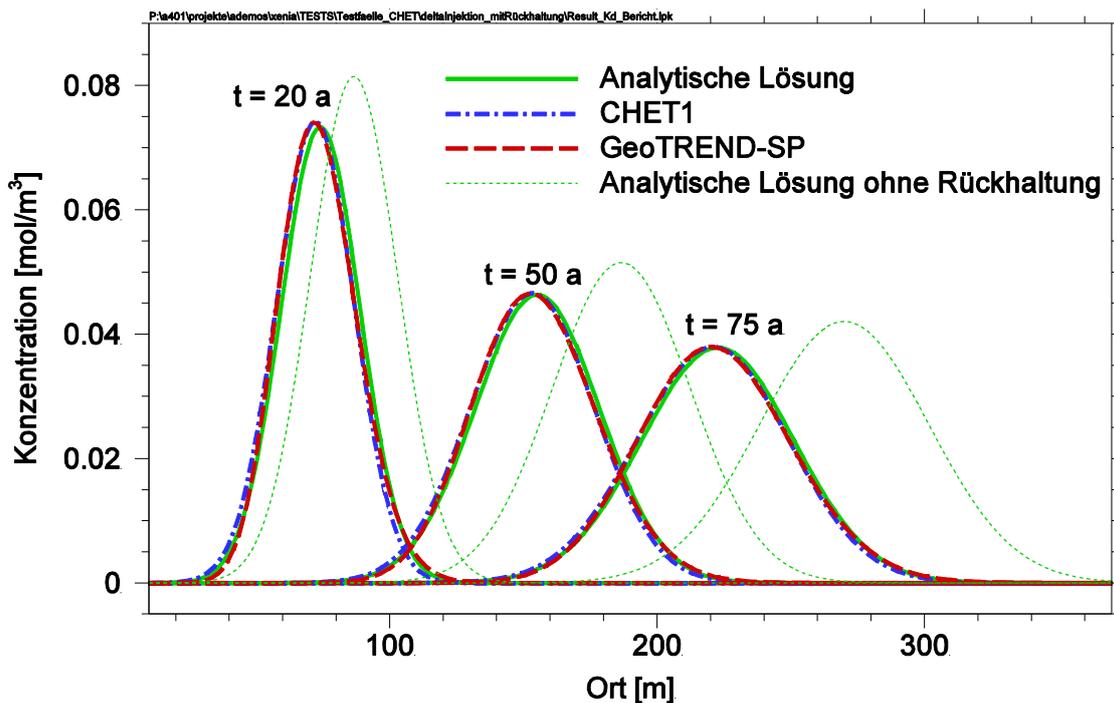
Die Umsetzung des linearen Sorptionskonzepts ( $K_d$ -Konzept) wurde ebenfalls durch den Vergleich mit der analytischen Lösung zur Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses verifiziert.

Um den Sorptionseffekt deutlich abbilden zu können, wurden einige in Tab. 5.2 angegebene Parameter entsprechend Tab. 5.4 geändert. Der radioaktive Zerfall wurde nicht berücksichtigt ( $\lambda = 0$ ).

**Tab. 5.4** Parametersetzung bei Berücksichtigung von Rückhaltung nach  $K_d$ -Konzept

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$\rho$	1 000	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte
$n$	0,3	[-]	Porosität
$K_d$	0,0001	[m <sup>3</sup> /kg]	Verteilungskoeffizient ( $K_d$ -Wert) der Henry-Isotherme
$L$	400	[m]	Gesamtlänge des Transportwegs

In Abb. 5.8 sind die Simulationsergebnisse zu einigen ausgewählten Zeitpunkten dargestellt. Die mit GeoTRENDS-SP ermittelten numerischen Ergebnisse stimmen mit der analytischen Lösung gut überein. Zum Vergleich sind auch die mit CHET1 erzielten numerischen Ergebnisse und die analytische Lösung ohne Rückhaltung dargestellt.



**Abb. 5.8** Vergleich der mit GeoTRENDS-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung nach dem  $K_d$ -Konzept, ohne Zerfall

Im Abschnitt 5.6.2 ist beschrieben, wie die Umsetzung von nichtlinearen Sorptionskonzepten getestet wurde.

### 5.6.2 Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung nach Langmuir- und Freundlich-Sorptionskonzepten, ohne Zerfall

Für Transportmodelle mit nichtlinearen Ansätzen für Sorption existieren keine geschlossenen Lösungen, speziell gilt dies für Langmuir- und Freundlich-Sorptionsmodelle. Deswegen ist ein Vergleich mit einer analytischen Lösung nicht möglich.

In der aktuellen Projektphase wurde zunächst die Basisumsetzung beider nichtlinearen Konzepte integriert (s. Abschnitt 5.4.10). Die erforderliche Realisierung eines Iterationsverfahrens zur Berücksichtigung der Rückkopplung von Retardationsfaktoren und Konzentrationen sowie die Umsetzung eines Konzepts, das die Auswirkungen der transversalen Dispersion bei der Berechnung der Rückhaltung einbeziehen würde, sind für eine spätere Projektphase geplant.

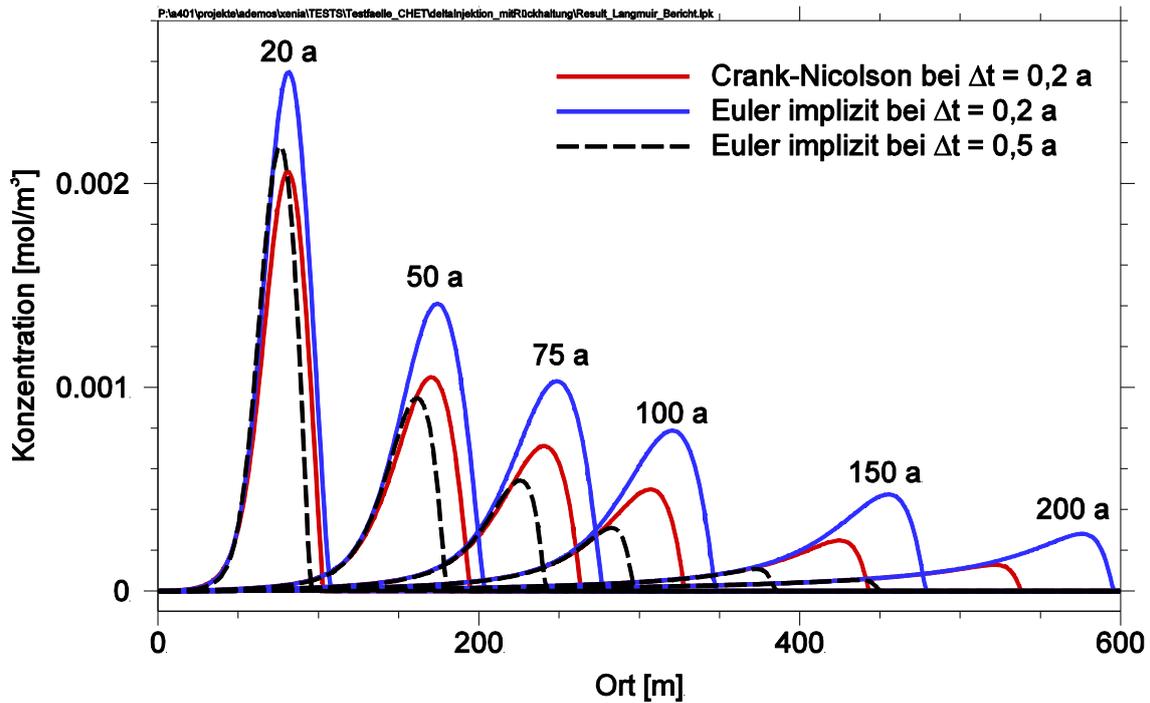
Zum Testen der vorhandenen Basisumsetzung für Sorptionsmodelle mit Langmuir- und Freundlich-Isothermen wurde die Simulation eines  $\delta$ -Impulses durchgeführt. Die Simulationen wurden unter dem Einsatz von Crank-Nicolson und implizitem Euler-Verfahren mit unterschiedlichen Zeitschrittlängen ausgeführt.

Für die Ausbreitungsrechnung unter Berücksichtigung der Sorption entsprechend der Langmuir-Isotherme wurden die in Tab. 5.2 und Tab. 5.5 angegebenen Parameter verwendet. Die Ergebnisse zu einigen ausgewählten Zeitpunkten sind in Abb. 5.9 dargestellt.

**Tab. 5.5** Parametersetzung bei Berücksichtigung der Rückhaltung entsprechend der Langmuir-Isotherme

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$\rho$	1 000	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte
$n$	0,3	[-]	Porosität
$K_L$	0,01	[m <sup>3</sup> /kg]	Stoffkonstante (Bindungsaffinität) der Langmuir-

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
			Isotherme
$\kappa$	$1,0 \cdot 10^{-8}$	[mol/kg]	Beladungskapazität der Langmuir-Isotherme
$L$	600	[m]	Gesamtlänge des Transportwegs



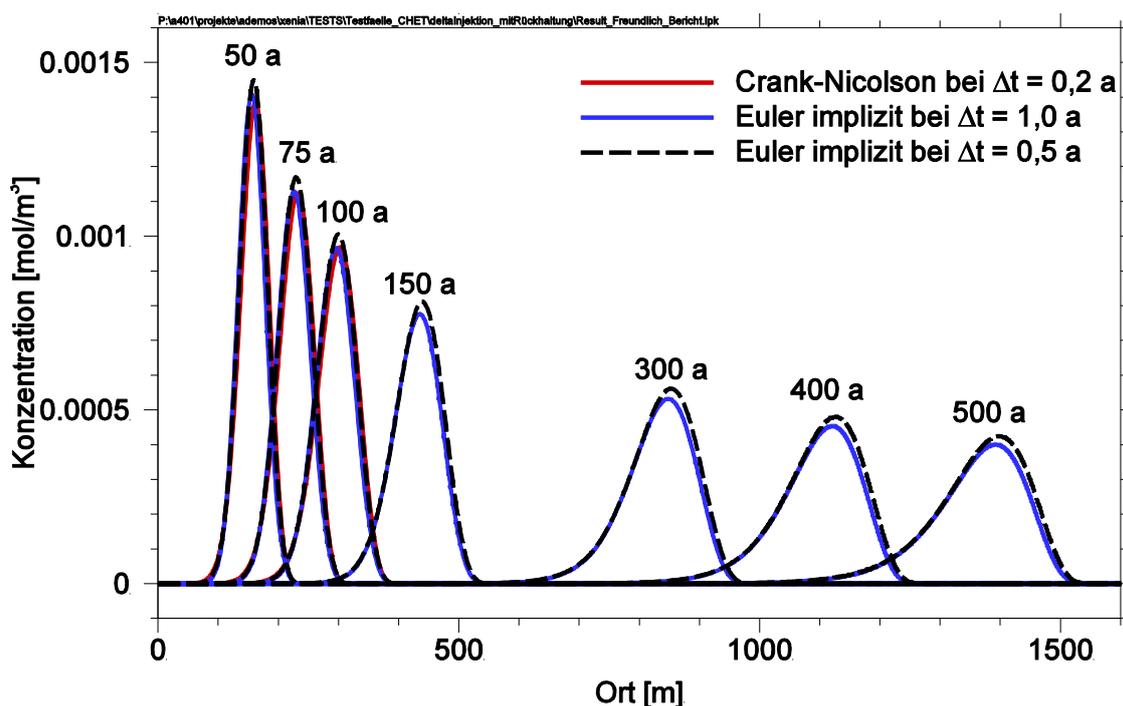
**Abb. 5.9** Mit GeoTREND-SP ermittelte numerische Ergebnisse für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung entsprechend der Langmuir-Isotherme, ohne Zerfall

Bei der Simulation unter Berücksichtigung der Rückhaltung mit dem Freundlich-Sorptionsmodell wurden die in Tab. 5.2 und Tab. 5.6 angegebenen Parameter eingesetzt. In Abb. 5.10 sind die berechneten numerischen Lösungen präsentiert.

**Tab. 5.6** Parametersetzung bei Berücksichtigung der Rückhaltung entsprechend der Freundlich-Isotherme

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$\rho$	1000	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$n$	0,3	[-]	Porosität
$k_1$	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$[m^3/kg]$	Stoffkonstante der Freundlich-Isotherme
$\kappa$	0,81	[-]	Exponent der Freundlich-Isotherme
$L$	1800	[m]	Gesamtlänge des Transportwegs



**Abb. 5.10** Mit GeoTREND-SP ermittelte numerische Ergebnisse für die Ausbreitung eines  $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung entsprechend der Freundlich-Isotherme, ohne Zerfall

Wie Abb. 5.9 und Abb. 5.10 zeigen, liefert GeoTREND-SP ohne Anwendung eines Iterationsverfahrens teilweise unterschiedliche Ergebnisse je nach eingesetztem Zeitintegrationskonzept und je nach gewählter Zeitschrittlänge. Somit ist die aktuelle Umsetzung als nicht fertiggestellt in Bezug auf nichtlineare Sorptionskonzepte anzusehen, GeoTREND-SP kann für die Rechnungen in diesem Kontext noch nicht eingesetzt werden.

Die erhaltenen Ergebnisse beider nichtlinearen Sorptionsverfahren zeigen jedoch das erwartete Verhalten, was für die korrekte Umsetzung der Basisgleichungen spricht.

Nichtlineare Sorptionsisothermen verzögern und deformieren die Schadstoffverbreitung. Sowohl Langmuir- als auch Freundlich-Isotherme gehören zu den konvexen Adsorptionsisothermen (Retardationsfaktor  $R$  nimmt mit zunehmender Konzentration ab) und führen zu einem Aufsteilen der Konzentrationsfront. Der Grund dafür ist, dass die niedrigen Konzentrationen in Vorläufen der Front stärker retardiert werden als höhere Konzentrationen. Letztere können "aufholen".

### 5.6.3 Massenerhaltung beim Zerfall in einer Nuklidkette bei einer $\delta$ -Injektion des Schadstoffes

Die Massenerhaltung beim Zerfall in einer Nuklidkette wurde ebenfalls anhand einer Testsimulation kontrolliert. Betrachtet wurde folgende Nuklidkette:



mit den in Tab. 5.7 angegebenen Eigenschaften.

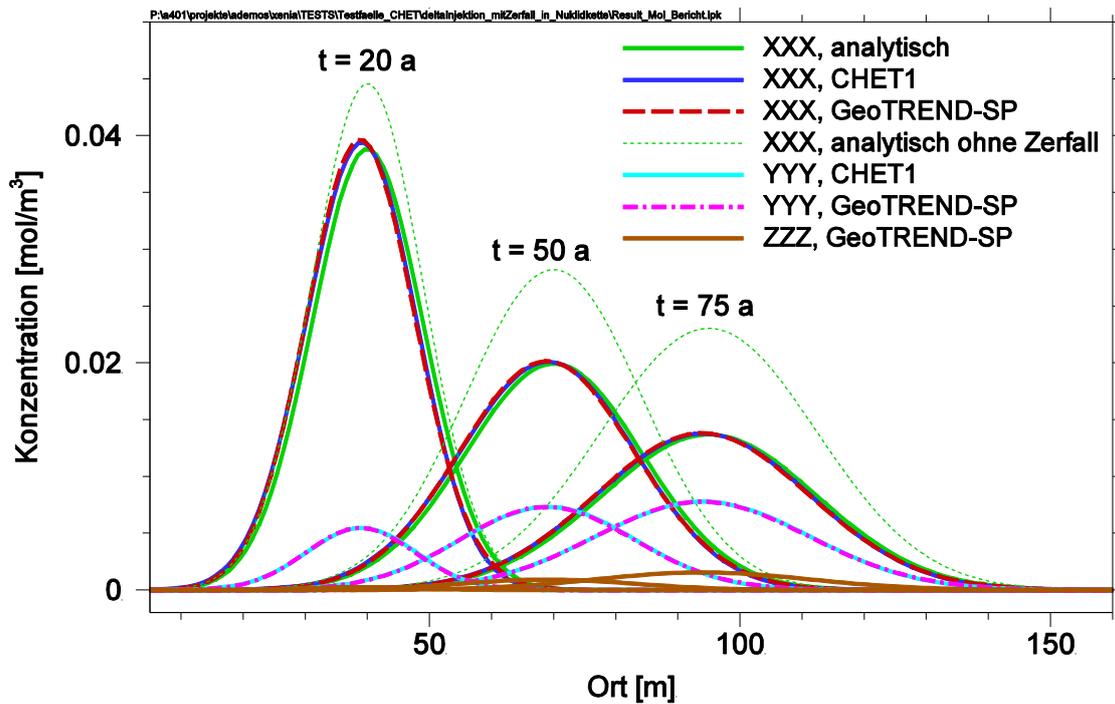
**Tab. 5.7** Parameter der Testnuklide im Testfall zur Überprüfung der Massenerhaltung

Nuklidname	Zerfallsprodukt	Halbwertszeit
XXX	YYY	100 a
YYY	ZZZ	150 a
ZZZ	-	stabil

Die Eingangsparameter für die Transportrechnung sind in Tab. 5.2 angegeben. In das Modellgebiet wurde 1 mol des in der Nuklidkette obersten Nuklids XXX innerhalb des ersten Zeitschritts injiziert. Die Tochternuklide entstehen als Zerfallsprodukte während der Simulation. Rückhaltung wurde bei dieser Simulation nicht berücksichtigt ( $R = 1$ ).

In Abb. 5.11 sind die berechneten Konzentrationsverteilungen zu einigen ausgewählten Zeitpunkten dargestellt. Die Entwicklung des Nuklids XXX wurde zudem numerisch mit CHET1 und analytisch nach der Formel (5.117) berechnet. Der Vergleich zeigt auch anhand dieses Beispiels, dass die Modellierung des radioaktiven Zerfalls eines Nuklids in GeoTREND-SP diesen Prozess zufriedenstellend abbildet. Die Entstehung und zeitli-

che Entwicklung des Tochternuklids YYY wurde auch numerisch mit CHET1 berechnet. Die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse von GeoTREND-SP und CHET1 ist auch bezüglich des Zerfallsprodukts YYY sehr gut. In der letzten Version von CHET1 können keine stabilen Isotope gerechnet werden. Für das Tochternuklid ZZZ sind in Abb. 5.11 nur die mit GeoTREND-SP erzielten Ergebnisse präsentiert.



**Abb. 5.11** Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen und mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung zur Simulation zur Kontrolle der Massenerhaltung beim Zerfall in einer Nuklidkette

Solange der Ausstromrand von keinem der Nuklide erreicht wird, beträgt die Gesamtmasse der Nuklide im Transportweg im Rahmen der numerischen Genauigkeit 1 mol, die Gesamtanzahl der Atome blieb erhalten. Angaben zu der Masse der Stoffe zu einigen gewählten Zeitpunkten sind in Tab. 5.8 dargestellt.

**Tab. 5.8** Nuklidmasse zu einigen gewählten Zeitpunkten

Zeitpunkt, [a]	XXX, [mol]	YYY, [mol]	ZZZ, [mol]	Gesamtmasse, [mol]
1	0,996 546 234	0,003 445 805	7,963e-06	0,999 816 098
25	0,843 851 033	0,147 429 642	0,008 755 755	1,000 036 431
50	0,709 606 995	0,257 935 232	0,032 517 005	1,000 059 232
75	0,596 706 527	0,336 241 468	0,067 112 852	1,000 050 848

#### 5.6.4 Dauergleichgewicht beim Zerfall in einer Nuklidkette bei einer $\delta$ -Injektion des Schadstoffes

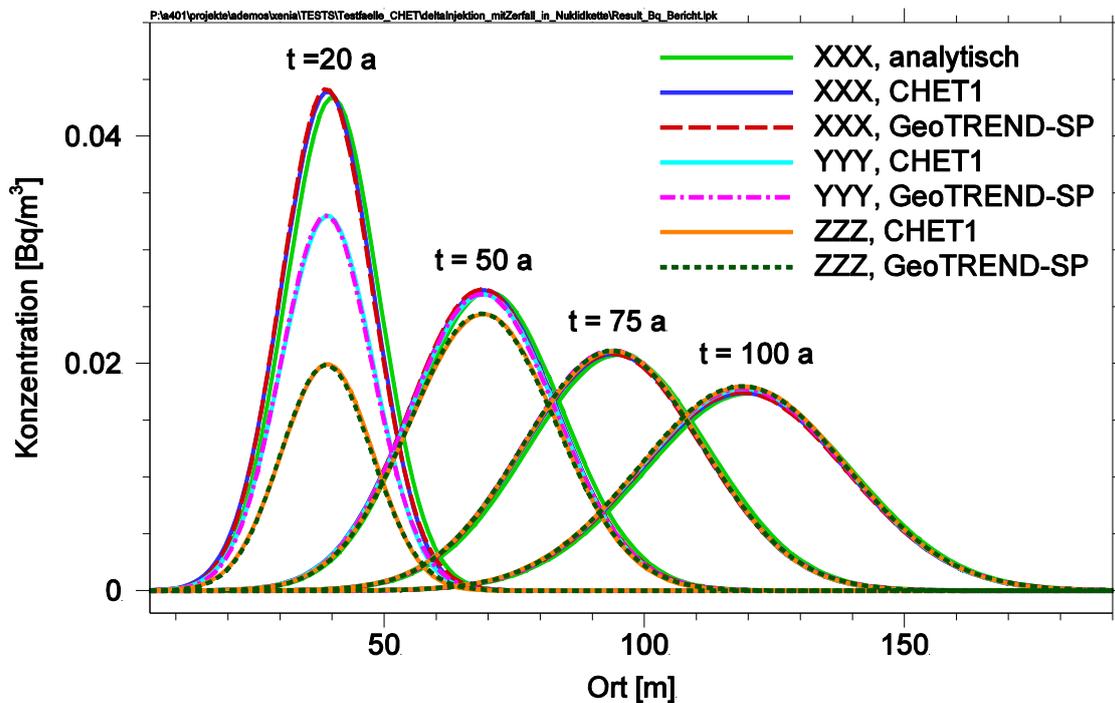
Als *radioaktives Dauergleichgewicht* wird der Zustand bezeichnet, bei dem die Aktivitäten des Mutter- und Tochternuklids gleich sind. Die Voraussetzung dafür ist, dass das Mutternuklid eine sehr lange Halbwertszeit hat und das Tochternuklid vergleichsweise kurzlebig ist. Die Aktivität des Mutternuklids nimmt innerhalb der Versuchszeit praktisch nicht ab, so dass das Tochternuklid zeitlich konstant generiert wird. Die Anzahl der Atome und der Aktivität des Tochternuklids wächst anfänglich exponentiell mit der Zeit an. Bei  $t \rightarrow \infty$  stellt sich der Gleichgewichtszustand ein. In der Praxis beobachtet man das Dauergleichgewicht bereits nach ca. sechs Halbwertszeiten des Tochternuklides.

Die Modellierung des Zerfalls in einer Zerfallskette wurde nun auch daran getestet, ob sich das Dauergleichgewicht bei der entsprechenden Wahl der Parameter einstellt. Der im Abschnitt 5.6.3 beschriebene Testfall wurde wie folgt modifiziert. Die Halbwertszeiten der Nuklide wurden so gewählt, dass die Halbwertszeit des obersten Mutternuklids XXX eine Größenordnung größer als die Halbwertszeit seines Zerfallsprodukts YYY ist. Das letzte Glied der Nuklidkette ZZZ ist nicht stabil. Die Eigenschaften der Testnuklide sind in Tab. 5.9 angegeben. Der angegebene Nuklidstrom für XXX liegt in [Bq/a] vor. Die resultierenden Konzentrationen werden in [Bq/m<sup>3</sup>] ausgegeben.

**Tab. 5.9** Parameter der Testnuklide in Testfall zum Dauergleichgewicht

Nuklidname	Zerfallsprodukt	Halbwertszeit, [a]
XXX	YYY	500
YYY	ZZZ	10
ZZZ	-	8

In Abb. 5.12 sind die Ergebnisse zu einigen ausgewählten Zeitpunkten dargestellt. Zum Vergleich sind auch die mit CHET1 ermittelte numerische Lösung sowie die analytische Lösung für das Nuklid XXX abgebildet. Es ist zu sehen, dass sich nach einer gewissen Zeit ein Aktivitätsgleichgewicht einstellt. Das Ergebnis entspricht den Erwartungen.



**Abb. 5.12** Vergleich der mit GeoTRENDS-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen und mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung zur Simulation eines Dauergleichgewichts beim Zerfall in einer Nuklidkette

### 5.6.5 Vergleich mit analytischer Lösung für permanente Schadstoffquelle

Die analytische Lösung für den Fall einer permanenten Injektion des Schadstoffs im Punkt  $x_0$  des anfänglich unbelasteten Aquifers beginnend zur Zeit  $t = 0$  bei der Forderung verschwindender Konzentrationen im Unendlichen

$$c(x_0, t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ c_0 & \text{für } t \geq 0 \end{cases}, \quad (5.118)$$

$$c(\infty, t) = 0 \quad \text{für alle } t,$$

$$c(x, 0) = 0 \quad \text{für } x > 0$$

hat die Form /KIN 92/:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \exp\left(\frac{x}{2\alpha}\right) \cdot \left[ \exp\left(-\frac{x\gamma}{2\alpha}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - ut\gamma/R}{2 \cdot \sqrt{\alpha ut/R}}\right) - \exp\left(\frac{x\gamma}{2\alpha}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + ut\gamma/R}{2 \cdot \sqrt{\alpha ut/R}}\right) \right] \quad (5.119)$$

mit

$$\gamma = \sqrt{1 + 4\lambda\alpha R/u} \quad (5.120)$$

sowie der komplementären Fehlerfunktion

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi \quad (5.121)$$

Die Parameter, die für die in diesem Abschnitt beschriebenen Testfälle verwendet wurden, sind in Tab. 5.10 angegeben.

**Tab. 5.10** Parameter für die Testsimulation mit einer permanenter Schadstoffquelle

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$\alpha$	2	[m]	Dispersionslänge
$D_m$	0	[m <sup>2</sup> /a]	molekulare Diffusionskonstante
$\rho$	1	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte
$A$	1	[m <sup>2</sup> ]	Querschnitt
$n$	1	[-]	Porosität
$\dot{V}$	1	[m <sup>3</sup> /a]	Volumenstrom
$R$	1	[-]	Retardationsfaktor
$\lambda$	0	[a <sup>-1</sup> ]	Zerfallskonstante
$L$	200	[m]	Gesamtlänge des Transportwegs
$\Delta x$	1	[m]	Blocklänge
$x_0$	19,5	[m]	Injektionsstelle (Mittelpunkt eines Blocks)

Die permanente Schadstoffquelle wird sowohl in GeoTREND-SP als auch in CHET1 durch die \*sk-Datei simuliert, in der der Zustrom des Schadstoffs  $q = 1$  mol/a beträgt und über die ganze Simulationszeit konstant bleibt. Es kommt kein Volumenstrom aus dem Grubengebäude, so dass die Abstandsgeschwindigkeit über die gesamte Simulationszeit konstant bleibt.

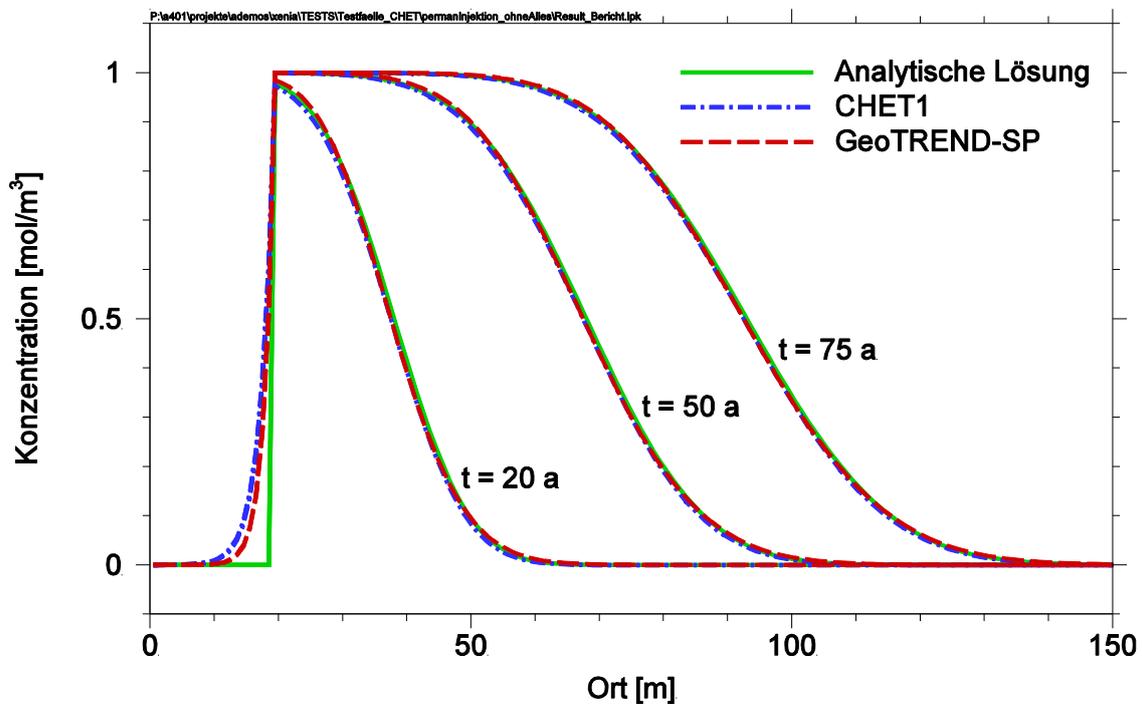
Die Injektionsstelle  $x_0$  für die hier beschriebenen Testsimulationen wurde mit einigem Abstand vom Rand gewählt.

Bei der gewählten Parametersetzung wurde in CHET1 die Zeitschrittlänge  $\Delta t = 0,2$  a berechnet.

### 5.6.5.1 Schadstoffausbreitung bei permanenter Quelle ohne Zerfall und ohne Rückhaltung

Um die Umsetzung der grundlegenden Transportmechanismen – Advektion, Diffusion und Dispersion – zu testen, wurde die Schadstoffausbreitung bei permanenter Quelle ohne Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls ( $\lambda = 0$ ) und ohne Rückhaltung ( $R = 1$ ) berechnet.

In Abb. 5.13 sind die Simulationsergebnisse für einige ausgewählte Zeitpunkte dargestellt. Die mit GeoTREND-SP ermittelten numerischen Ergebnisse stimmen mit der analytischen Lösung gut überein. Zum Vergleich sind auch die mit CHET1 erzielten numerischen Ergebnisse dargestellt.

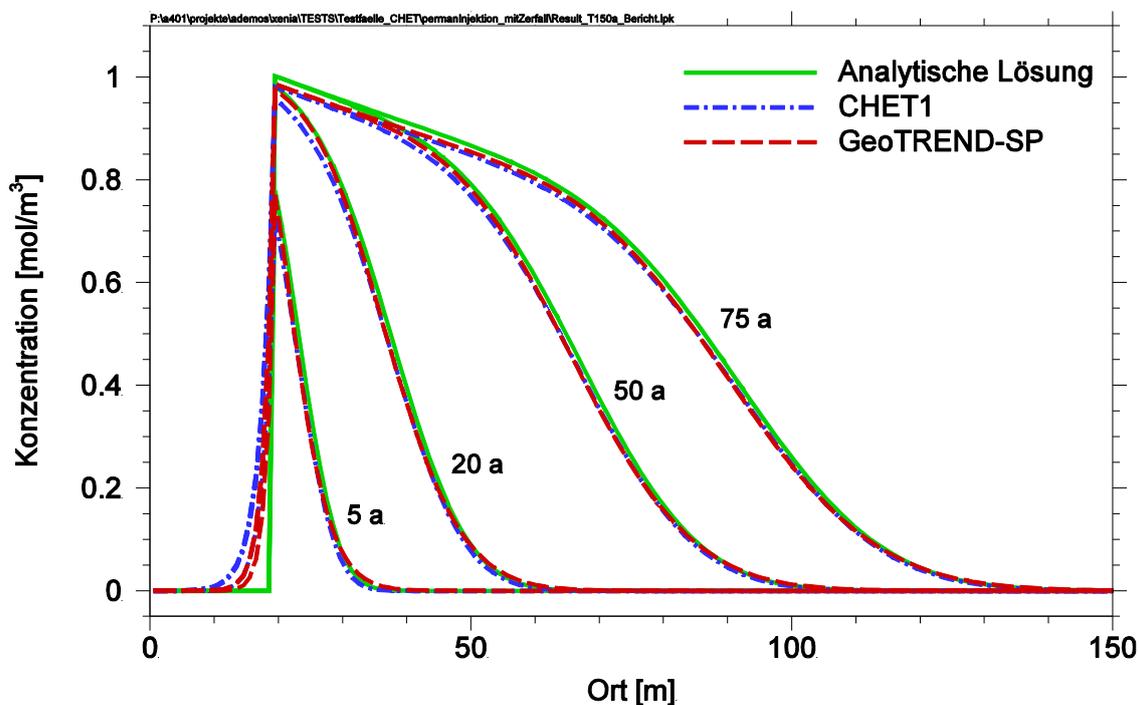


**Abb. 5.13** Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Schadstoffausbreitung bei einer permanenten Quelle ohne Zerfall und ohne Rückhaltung

### 5.6.5.2 Schadstoffausbreitung bei permanenter Quelle mit Zerfall ohne Rückhaltung

In der in diesem Abschnitt beschriebenen Testsimulation soll auch der radioaktive Zerfall des Schadstoffes bei der Ausbreitungsrechnung berücksichtigt werden, wobei die Rückhaltung zunächst unbeachtet bleibt ( $R = 1$ ).

Die Ergebnisse der Transportrechnung bei der gewählten Halbwertszeit des Schadstoffes  $T = 150$  a sind in Abb. 5.14 für einige ausgewählte Zeitpunkte dargestellt. Die numerisch berechnete Konzentrationsverteilung stimmt mit der analytischen Lösung sowie auch mit den numerischen Ergebnissen der mit CHET1 durchgeführten Simulation gut überein.



**Abb. 5.14** Vergleich der mit GeoTrend-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Schadstoffausbreitung bei einer permanenten Quelle mit Zerfall bei der Halbwertszeit  $T = 150$  a, ohne Rückhaltung

Bei der Berechnung in CHET1 wurde die Zeitschrittlänge  $\Delta t = 0,2$  a verwendet. Die Simulation in GeoTrend-SP wurde mit unterschiedlichen konstanten wie auch variablen

Zeitschrittlängen ausgeführt, die Länge des Zeitschritts während der gesamten Simulation blieb jedoch deutlich kleiner als die gewählte Halbwertszeit  $\Delta t \ll T$ .

### 5.6.6 Vergleich mit CHET1 bei Simulation eines komplexen Anwendungsfalls

Die Berechnung der Schadstoffausbreitung in komplexen Anwendungsfällen unter Berücksichtigung von Zerfall und Rückhaltung wurde durch den Vergleich mit dem Programm CHET1 getestet.

Für den Test wurden Rechnungen, die für die Langsicherheitsanalysen eines Endlagers für schwach- und mittelaktive Abfälle durchgeführt wurden, herangezogen. Das Modellgebiet hat eine Länge von  $L = 300$  m und besteht aus zwei Bereichen, die als *Bereich 1* und *Bereich 2* bezeichnet werden. Die Eigenschaften beider Bereiche sind in Tab. 5.11 angegeben.

**Tab. 5.11** Eigenschaften der Bereiche bei der Simulation eines Endlagers

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bereich 1	Bereich 2
$l$	[-]	Länge relativ zu der Gesamtlänge $L$	0,8029	0,1971
$\alpha$	[m]	Dispersionslänge	4	4
$D_m$	[m <sup>2</sup> /a]	molekulare Diffusionskonstante	0,0158	0,0158
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte	2500	2500
$A$	[m <sup>2</sup> ]	Querschnitt	150	12500
$n$	[-]	Porosität	0,3	0,3
$\dot{V}$	[m <sup>3</sup> /a]	Volumenstrom vom Grundwasser	0	15000
$\Delta x$	[m]	Blocklänge	8	8
$x_0$	[m]	relative Position der Schnittstelle	0,01212	-

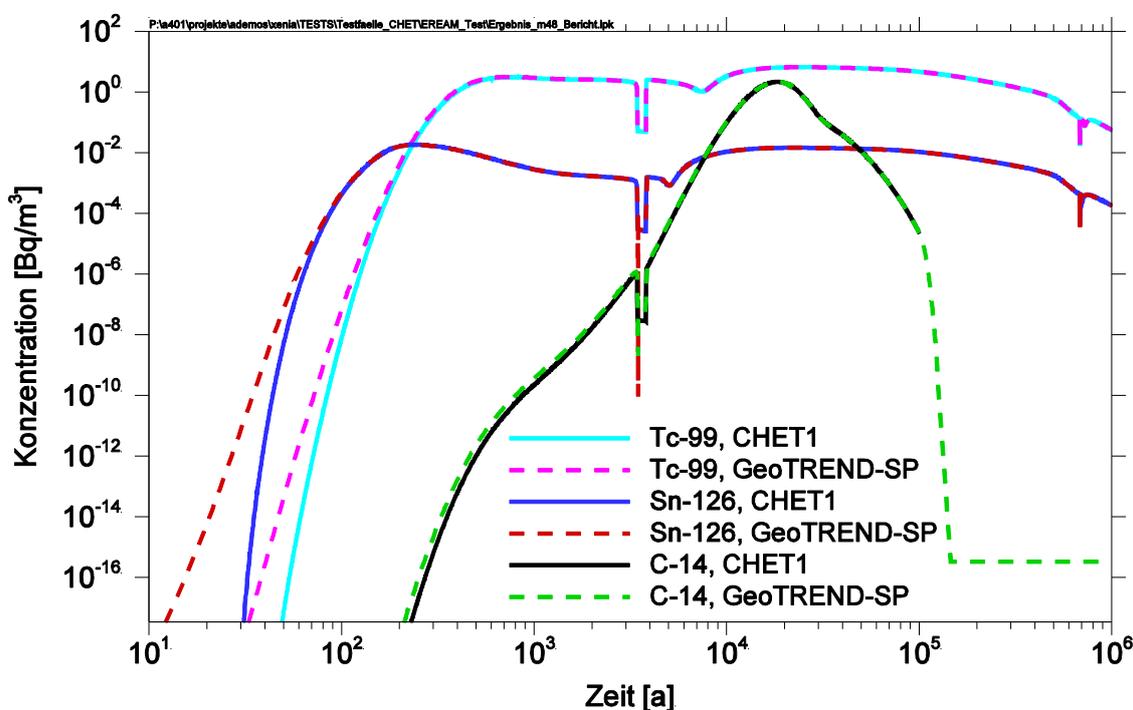
Das Modellgebiet ist anfänglich unbelastet. Die Freisetzungsraten der Nuklide sowie der Volumenstrom aus dem Grubengebäude wurden der Übergabedatei (*m48.rsk*) entnommen, die von dem vorangegangenen Rechenmodul LOPOS erstellt wurde. Die Einheit der Eingangs- und Ausgangsdaten ist [Bq].

Auf die kleinen Anpassungen des GeoTREND-SP-Modells, die wegen einiger konzeptueller Änderungen gegenüber dem CHET1-Konzept vorgenommen werden mussten, wird an dieser Stelle nicht weiter eingegangen.

Der Vergleich zwischen den mit GeoTREND-SP und CHET1 ermittelten numerischen Ergebnissen fällt befriedigend aus. In Abb. 5.15 sind einige repräsentative Beispiele für die zeitliche Entwicklung der Nuklidkonzentrationen an der Übergabestelle an die Biosphäre dargestellt. Die in der Simulation verwendeten Halbwertszeiten und  $K_d$ -Werte können Tab. 5.12 entnommen werden.

**Tab. 5.12** Eigenschaften der der Nuklide bei der Simulation eines Endlagers

Nuklid	Halbwertszeit, [a]	$K_d$ -Wert in DGS, [ $m^3/kg$ ]	$K_d$ -Wert in Aquifer, [ $m^3/kg$ ]
Tc-99	210000	0,00035	0
Sn-126	234500	0	0
C-14	5730	0,003	0



**Abb. 5.15** Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösungen für eine ERAM-Simulation

Die Abweichungen der Lösungen voneinander am Anfang der Konzentrationsverteilungskurve sind bei der Berechnung mit und ohne automatische Zeitschrittsteuerung bei denjenigen Nukliden zu beobachten, deren Freisetzungsraten am Anfang ihrer Emission sehr niedrig sind, und sind wie folgt zu erklären.

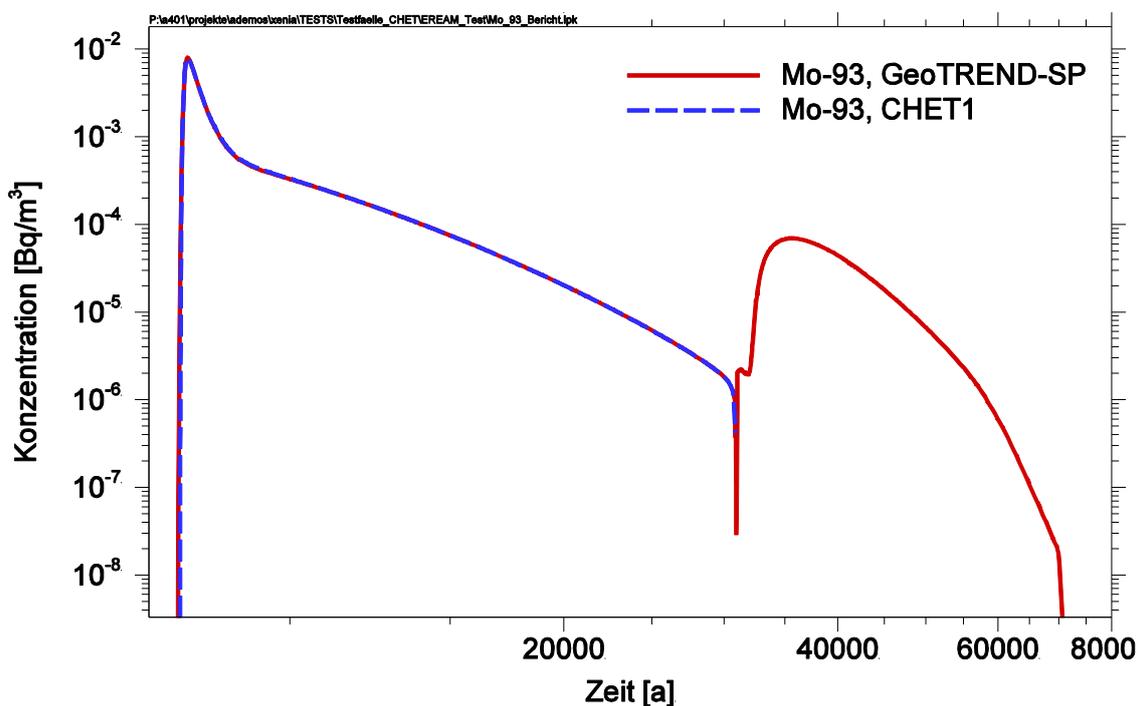
Sowohl in CHET1 als auch in GeoTREND-SP wird ein Nuklid in einem Simulationsschritt nur dann gerechnet, wenn seine Gesamtmasse im Transportweg über einem vorgegebenen Wert liegt. In CHET1 werden darüber hinaus Konzentrationen, die unter einem bestimmten Wert liegen, auf null gesetzt. Folglich werden die anfänglich kleinen Konzentrationen vom Programm nicht wahrgenommen, Stoffmengen in diesem Wertebereich werden nicht kumuliert, und der Nuklidtransport wird dementsprechend nicht berechnet. Diese Vorgehensweise kann bei sehr kleinen Zeitschrittlängen dazu führen, dass innerhalb jedes Zeitintervalls nur Stoffmengen einströmen, die kleiner als das vorgegebene Limit sind, so dass die Emission eines Nuklids sogar gänzlich unbemerkt bleiben kann. Aus diesem Grund wurde in GeoTREND-SP auf diese Vorgehensweise bewusst verzichtet. Folglich werden in GeoTREND-SP beliebig kleine Stoffmengen kumuliert. Aus diesem Grund sind kleine Mengen jedes Nuklids schon zu entsprechend früheren Zeiten an der Übergabestelle zu beobachten. Die Gesamtnuklidmasse ist in der GeoTREND-SP-Simulation entsprechend größer als in der CHET1-Rechnung, der Unterschied ist allerdings gering.

Wenn darüber hinaus bereits zum Simulationsbeginn in GeoTREND-SP größere Zeitschritte als in CHET1 eingesetzt werden, dann erfolgt die Mittelung der Nuklideinstromraten über ein entsprechend größeres Zeitintervall, was dazu führen kann, dass schon zum Anfang der Rechnung signifikante Stoffmengen wahrgenommen werden und dementsprechend die Berechnung des relevanten Nuklids schon zu früheren Zeiten als in CHET1 beginnt. Dies ist ein weiterer Grund für die beobachtete Abweichung der Ergebnisse.

Auf Abb. 5.15 ist außerdem zu sehen, dass GeoTREND-SP lokale Extrema teilweise besser als CHET1 abbildet. Dies ist darauf zu führen, dass GeoTREND-SP nicht interpolierte Werte wie in CHET1 sondern die tatsächlich berechneten ausgibt.

Wenn die Gesamtmasse eines Nuklids in CHET1 während der Simulation einmal unter einen bestimmten Wert absinkt, wird die Transportrechnung für dieses Nuklid zu diesem

Zeitpunkt beendet, es wird bei dem weiteren Simulationsverlauf nicht mehr beachtet. In Abb. 5.15 ist es beispielweise zu sehen, dass die Simulation des Nuklids C-14 zu dem Zeitpunkt  $10^5$  a abgeschlossen wurde. Diese Vorgehensweise wurde eingeführt, um die Gesamtrechnenzeit zu reduzieren. Bei diesem Ansatz kann es jedoch vorkommen, dass ein erneutes Auftreten signifikanter Mengen des relevanten Nuklids zu einem späteren Zeitpunkt unbemerkt bleibt. Ein solcher Fall ist in Abb. 5.16 präsentiert (Endlager-Simulation mit den Einstromraten aus der Übergabedatei *m52.rsk*). Aus diesem Grund wurde diese Strategie in GeoTREND-SP nicht übernommen.



**Abb. 5.16** Abbruch der Rechnung für Mo-93 in CHET1 bei einer Endlager-Simulation

## 5.7 Geplante Weiterarbeiten

In diesem Abschnitt sind die Arbeiten zusammengefasst, die im Rahmen des Arbeitspakets GeoTREND-SP in einer späteren Projektphase noch zu leisten sind.

Die erforderlichen Erweiterungen sind in Tab. 5.13 aufgelistet. Für eine bessere Planung wurde eine Zuordnung der Erweiterungen zu folgenden Kategorien durchgeführt:

- A – unbedingt notwendig, die Umsetzung erfolgt in der nächsten Projektphase,

- B – fachlich notwendig, die Umsetzung ist spätestens im Kontext konkreter Anwendungsfälle zu leisten,
- C – ggf. umzusetzen, d. h., die Notwendigkeit der Realisierung bzw. die Umsetzbarkeit solcher Erweiterungen noch zu überprüfen.

**Tab. 5.13** Erweiterungen für GeoTREND-SP

Erweiterung	A	B	C
Iterations-Verfahren innerhalb eines Zeitschritts beim Einsatz der nichtlinearen Sorptionskonzepte (s. Abschnitt 5.4.10)		X	
Konzept zur Berücksichtigung der transversalen Dispersion im Fall von nichtlinearen Sorptionsisothermen (s. Abschnitt 5.4.10)		X	
Anpassung bezüglich der Transmissionsrandbedingung am Ausstromrand auf die Modelle mit rein diffusivem Transport (s. Abschnitt 5.4.8.2)		X	
Erweiterung für die Übernahme der Rechenergebnisse des vorhergehenden Rechenmoduls zu ihrer Weiterverarbeitung nicht aus den Dateien sondern direkt aus dem Arbeitsspeicher (s. Abschnitt 5.5.1)	X		
Konzept zur alternativen Speicherung der Ergebnisse für den Fall, dass die Kapazität des Arbeitsspeichers bei der aktuellen Umsetzung der Datenhaltung nicht ausreicht (s. Abschnitt 5.5.9)	X		
Umstellung der Funktionalität zum Einlesen der Eingangsdaten auf das neu einzuführende HDF5-Datenaustauschformat (s. Abschnitt 5.5.1)			X
automatische Modifizierung der physikalischen Parameter von Blöcken, die an der Grenze zwischen zwei Gebieten mit signifikant unterschiedlichen Eigenschaften anliegen, um die dadurch verursachten Unstetigkeiten im numerischen Modell zu vermeiden (s. Abschnitt 5.5.2)		X	
Konzept zur Bestimmung der Multiplikationsfaktoren $p_1$ und $p_2$ , die bei der Steuerung der Zeitschrittlänge eingesetzt werden, abhängig von Umgebungsparametern (s. Abschnitt 5.5.3.1)			X
Konzept zur Ermittlung der maximal zulässigen Zeitschrittlänge (s. Abschnitt 5.5.3.1)			X
Verfahren zur Berücksichtigung der Abhängigkeit der Zeitschrittlänge von	X		

Erweiterung	A	B	C
den Halbwertszeiten (s. Abschnitt 5.5.3.2)			
Berücksichtigung der durch die Lanz-Korrektur bedingten Einschränkung bei der Bestimmung der minimalen zulässigen Zeitschrittlänge im Fall von impliziten Euler-Zeitintegrationsverfahren (s. Abschnitt 5.4.11.3)		X	X
Verfahren zur besseren Erkennung und Dämpfung von Oszillationen, falls Oszillationen in der Praxis ein häufig auftretendes Problem darstellen werden, und das realisierte Konzept sich als eine nicht ausreichende Maßnahme erweisen wird (s. Abschnitt 5.5.6)		X	X
Vorgabe bestimmter Zeitpunkte, zu denen die Berechnung des Schadstofftransports und die Ausgabe der Ergebnisse erfolgen soll (s. Abschnitt 5.5.9)	X		
Verfeinerung des Verfahrens zur Behandlung negativer Ströme	X		
Ausgabedateien cim und cet sind nicht umgesetzt und sollten bei Bedarf später umgesetzt werden. Die cet ist evtl. nicht mehr erforderlich, weil die zugehörigen Daten bereits in anderen Ausgabedateien im passenden Format enthalten sind.			X

Folgende Erweiterungen wurden eingeführt, jedoch noch nicht verifiziert:

- mehrere Schnittstellen mit dem Grubengebäude,
- rein diffusiver Transport,
- Anfangskonzentrationen sowie Zufluss konstanter Konzentrationen größer null können vorgegeben werden,
- Einheit [kg] für die Eingangs- und Ausgabegrößen ist möglich.

Die Verifikation der genannten Punkte soll in der nächsten Projektphase erfolgen.

## 6 Probabilistische Rechnungen

Grundsätzlich ist zwischen *deterministischen* und *probabilistischen* Rechenläufen zu unterscheiden. Bei einem deterministischen Lauf wird ein einzelner, fester Datensatz verwendet und die Kette der Rechenmodule einmal abgearbeitet. Bei einem probabilistischen Lauf ist dagegen eine größere Anzahl von Einzelrechenläufen durchzuführen, die als *Spiele* bezeichnet werden. Diese verwenden jeweils Datensätze, in denen einzelne Eingabedaten von Spiel zu Spiel variieren. Von den Ausgabedaten jedes Spiels ist ein bestimmter Teil zu extrahieren und über alle Spiele zu sammeln und für die Gesamtausgabe zusammenzufassen, wobei die vorgegebene Reihenfolge eingehalten werden muss.

Das Programmpaket RepoTREND erlaubt die Durchführung und Auswertung probabilistischer Analysen zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse. Gegenüber dem Programmsystem EMOS wurden die hierfür verfügbaren Möglichkeiten inhaltlich deutlich erweitert und flexibler gestaltet. Weiterhin war ein sinnvoller Ersatz für die aufwändige, fehleranfällige und technisch unbefriedigende Lösung zum Umgang mit Abhängigkeiten zwischen statistischen Variablen zu finden.

Im Folgenden wird zunächst umrissen, wie eine probabilistische Rechnung prinzipiell funktioniert. Anschließend wird erläutert, wie dies im Programmsystem EMOS umgesetzt war und worin die spezifischen Nachteile dieser Lösung bestehen. Schließlich wird das Konzept für probabilistische Rechnungen dargelegt, welches für das neue Programmpaket RepoTREND entwickelt wurde. Die programmtechnische Umsetzung ist Gegenstand des Kapitels 6.5.

### 6.1 Ablauf einer probabilistischen Rechnung

Bei einer deterministischen Rechnung wird das numerische Modell bzw. die Kette von Rechenmodulen genau einmal mit fest vorgegebenen Eingangsdaten durchgerechnet. Diese Daten sind jedoch in der Regel mit Ungewissheit behaftet, sodass auch das Ergebnis der Rechnung als ungewiss anzusehen ist. Es ist wichtig, einerseits diese Ungewissheit selbst zuverlässig einzuschätzen (Unsicherheitsanalyse) und andererseits diejenigen Eingangsparameter zu identifizieren, deren Ungewissheiten die des Ergebnisses besonders stark beeinflussen (Sensitivitätsanalyse). Solche Untersuchungen werden

typischerweise als Monte-Carlo-Analysen (probabilistische Rechenläufe) durchgeführt. Dies geschieht in drei Schritten, die jeweils unabhängig voneinander, jedoch unter Einhaltung der Reihenfolge auszuführen sind:

- Stichprobenziehung,
- Wiederholte Ausführung des Rechenmodells,
- Kollektive Auswertung.

### **6.1.1 Stichprobenziehung**

Im ersten Schritt werden zunächst alle Eingangsparameter identifiziert, deren Ungewissheit in der geplanten Untersuchung berücksichtigt werden soll. Dies wird in der Regel nur ein kleiner Teil aller Modellparameter sein. Diesen wird jeweils durch Expertenbewertung eine statistische Verteilungsfunktion zugewiesen. Anschließend wird eine *Stichprobenziehung* durchgeführt, wobei allen statistischen Parametern Werte entsprechend ihren Verteilungsfunktionen zugewiesen werden. Für diese Ziehung existieren verschiedene Verfahren, deren Anwendung zum Teil von der Art der beabsichtigten Auswertung abhängt. Dabei können auch statistische Korrelationen zwischen verschiedenen Parametern berücksichtigt werden. Resultat der Ziehung ist eine Stichprobe vom Umfang  $n$ , also eine Tabelle, die  $n$  Sätze von Werten für die statistischen Parameter bereitstellt. Der Stichprobenumfang  $n$  ist für die beabsichtigte Untersuchung geeignet zu wählen und kann von unter 100 bis zu mehreren 10000 betragen.

### **6.1.2 Wiederholte Ausführung des Rechenmodells**

Das gesamte Modell, d. h. die Kette von Rechenmodulen, ist dann mit jedem einzelnen der  $n$  Parametersätze durchzurechnen. Diese Einzelsimulationen werden als *Spiele* bezeichnet. Bei jedem Spiel müssen zunächst die gezogenen Werte den entsprechenden Programmeingangsgrößen zugewiesen werden. Hierbei sind ggf. Abhängigkeiten zwischen diesen Eingangsgrößen zu beachten (siehe Abschnitt 6.2). Anschließend wird das Spiel mit den entsprechend gesetzten Eingangsdaten gerechnet.

Bei probabilistischen Rechnungen mit großen Stichprobenumfängen können erhebliche Datenmengen entstehen, von denen für die Auswertung jedoch nur ein kleiner Teil benötigt wird. Aus Effektivitätsgründen ist es daher sinnvoll, die benötigten Daten jeweils

nach Beendigung eines Spiels in eine spezielle Sammeldatei zu kopieren und den Rest des Outputs zu löschen. Nach Abschluss aller Spiele steht dann eine Tabelle zur Verfügung, die jedem Parametersatz einen oder mehrere Ergebniswerte zuordnet. Diese Tabelle liefert die Grundlage für die Unsicherheits- und/oder Sensitivitätsanalyse.

### **6.1.3 Kollektive Auswertung**

Sobald alle Spiele durchgerechnet sind, kann mithilfe der o. g. Sammeldatei eine kollektive Auswertung durchgeführt werden. Es gibt eine Reihe von verschiedenen Verfahren zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse, auf die im vorliegenden Zusammenhang nicht im Detail eingegangen wird /CON 80/, /SAC 84/, /SAL 00/. Es ist jedoch zu beachten, dass einige Verfahren eine bestimmte Art der Stichprobenziehung verlangen. Bei der Planung der Analyse müssen deshalb die Auswerteverfahren ggf. schon vor der Stichprobenziehung spezifiziert werden. Die Stichprobendatei wird im Allgemeinen für die Auswertung benötigt.

Ergebnis der Auswertung können je nach Verfahren statistische Kennwerte (z. B. Mittelwert, Standardabweichung, Quantile, Konfidenzgrenzen), Sensitivitätsindizes, Ranglisten oder Zeitverläufe solcher Werte sein.

## **6.2 Parameterabhängigkeiten**

Eine bei probabilistischen Untersuchungen häufige Situation besteht darin, dass bestimmte Modellparameter miteinander verknüpft sind, obwohl sie bei deterministischen Rechnungen als unabhängige Größen auftreten. Solche Abhängigkeiten müssen bei der Zuweisung der gezogenen Werte an die Eingangsparameter eines Spiels korrekt berücksichtigt werden.

Es sind prinzipiell zwei Typen von Abhängigkeiten zu unterscheiden, die grundsätzlich verschieden gehandhabt werden: *statistische Korrelationen* und *strenge Abhängigkeiten*.

### 6.2.1 Statistische Korrelationen

Durch eine statistische Korrelation wird mathematisch zum Ausdruck gebracht, dass die Verteilungen zweier statistischer Zufallsparameter  $X$  und  $Y$  miteinander verknüpft sind. Wird z. B. für den ersten Parameter ein Wert aus dem oberen Bereich seiner Bandbreite gezogen, so steigt bei positiver Korrelation die Wahrscheinlichkeit, dass auch der zweite Parameter im oberen Bereich seiner Bandbreite liegt. Bei negativer Korrelation würde der zweite Parameter dann vorzugsweise in den unteren Bereich seiner Bandbreite fallen. Die mathematische Definition des Korrelationskoeffizienten zweier Zufallsvariablen  $X$  und  $Y$  lautet

$$\rho(X, Y) = \frac{E\left((X - E(X))(Y - E(Y))\right)}{\sqrt{\text{Var}(X)}\sqrt{\text{Var}(Y)}} \quad , \quad (6.1)$$

$E$  Erwartungswert,

$\text{Var}$  Varianz.

Der Korrelationskoeffizient liegt immer zwischen  $-1$  und  $+1$ , wobei  $0$  unkorrelierte Werte bedeutet.

Statistische Ziehungsverfahren liefern normalerweise unkorrelierte Parameter, d. h., alle Korrelationskoeffizienten liegen nahe bei null. Manchmal ist eine gewisse statistische Korrelation jedoch aus physikalischen Gründen erwünscht. Wenn beispielsweise Porosität und Permeabilität einer geologischen Barriere als Parameter eines Schadstofftransportmodells erscheinen, so ist bei hoher Porosität auch eher mit hoher Permeabilität zu rechnen, selbst wenn keine strenge Formelbeziehung zwischen diesen Größen bekannt ist. In solchen Fällen kann ein Korrelationskoeffizient als Zielgröße vorgegeben werden, der dann vom Ziehungsalgorithmus zumindest näherungsweise eingestellt wird.

Statistische Korrelationen sind somit allein über die Stichprobenziehung zu realisieren. Sie brauchen daher nur im ersten Schritt der im Kapitel 6.1 dargestellten Ablaufkette berücksichtigt zu werden.

### **6.2.2      Strenge Abhängigkeiten**

Es kommt oft vor, dass ein statistischer Parameter eine bestimmte Setzung anderer Programmeingangsgrößen erzwingt. Solche Zusammenhänge sind häufig durch das zu untersuchende Szenario bedingt und daher nicht bereits im Programm verdrahtet. Soll z. B. das Sorptionsvermögen einer geologischen Barriere für alle Elemente kollektiv als statistischer Eingangsparameter betrachtet werden, so müssen die elementspezifischen Sorptionsdaten in strenger Abhängigkeit voneinander variiert werden. Möglich ist auch, dass ein bestimmter Zeitpunkt für verschiedene Bereiche des Endlagers in gleicher Weise gesetzt werden soll. Es ist aber auch denkbar, dass z. B. das gesamte Systemverhalten in Abhängigkeit vom Zahlenwert eines Parameters verändert werden soll.

Es wäre wenig sinnvoll, solche Abhängigkeiten bei der Stichprobenziehung zu berücksichtigen. Dazu müssten ggf. sehr viele Parameter definiert und gezogen werden, die tatsächlich gemeinsam nur einen einzigen Parameter repräsentieren. Dies würde viel Datenballast erzeugen und die Auswertung erschweren. Komplexere Zusammenhänge zwischen Programmparametern wären auf diese Weise gar nicht zu realisieren.

Strenge Abhängigkeiten werden deshalb im zweiten Schritt der im Abschnitt 6.1 dargestellten Ablaufkette, d. h. während der Abarbeitung der Spiele berücksichtigt. Bei jedem einzelnen Spiel müssen die Abhängigkeiten ausgewertet und jeweils unter Zugrundelegung eines oder ggf. auch mehrerer gezogener Werte in spielspezifische Werte für die betroffenen Programmparameter umgesetzt werden. Dies ist programmtechnisch nicht einfach zu realisieren. Beim neuen Programmkonzept RepoTREND wurde hierzu ein völlig neuer Weg beschritten.

### **6.3            Statistikrahmen des Programmpakets EMOS**

In diesem Kapitel wird zunächst kurz dargestellt, wie Statistikrechnungen mit dem Programmpaket EMOS realisiert wurden. Der Statistikrahmen ist in /STR 96/, /BOE 97/, /BUH 99/ detailliert beschrieben. An dieser Stelle sollen insbesondere die spezifischen Schwächen deutlich gemacht werden, die zur Entscheidung für eine völlige Neukonzeption geführt haben.

### 6.3.1 Programmablauf

Bei EMOS unterscheidet sich ein probabilistischer Rechenlauf grundlegend von einem deterministischen. Bei einem probabilistischen Rechenlauf können für bestimmte Parameter mittels einer speziellen Eingabedatei Verteilungen vorgegeben werden. Diese Parameter sind nicht frei wählbar, sondern in den verschiedenen Modulen fest verdrahtet. Es müssen zwar nicht alle diese Parameter tatsächlich statistisch gezogen werden, aber ohne Quelltextmodifikation und Neukompilierung kann kein Parameter statistisch variiert werden, der hierfür nicht bereits bei der Programmentwicklung vorgesehen war. Dies bedeutet für den Anwender, der mit dem Quellcode nicht vertraut ist, eine erhebliche Einschränkung der Flexibilität.

Anders als im Abschnitt 6.1 dargestellt zerfällt der Ablauf einer probabilistischen EMOS-Rechnung nicht in drei, sondern nur in zwei unabhängige Teile. Die Stichprobenziehung wird bei einem als probabilistisch gekennzeichneten Rechenlauf automatisch immer als Modul STATIST vor der eigentlichen Modulkette ausgeführt. Sollen mehrere Analysen mit derselben Stichprobe ausgeführt werden, so kann dies erreicht werden, indem der Keim der Zufallszahlenerzeugung konstant gehalten wird. Dies stellt zwar sicher, dass immer dieselbe Stichprobe gezogen wird, bedeutet letztlich aber eine Verschwendung von Rechenressourcen. Die Verwendung einer extern gezogenen Stichprobe sieht das Programmkonzept nicht vor, dies wurde jedoch in neuerer Zeit durch einen technischen Workaround ermöglicht, der die Stichprobenziehung unterdrückt.

Die Zuweisung der gezogenen Werte zu den Parametern der einzelnen Module geschieht durch spezielle Routinen innerhalb der Module. Module, die vom Entwickler nicht für statistische Rechnungen konzipiert wurden, können auch nicht dafür verwendet werden. Die Zuweisungsrouinen werden nur aufgerufen, wenn der Rechenlauf als probabilistisch gekennzeichnet ist. Sie werden nach den allgemeinen Einleseroutinen ausgeführt, sodass die zunächst eingelesenen Werte aus den normalen Eingabedateien für die statistischen Parameter überschrieben werden. Eine Kontrollausgabe erfolgte dabei ursprünglich nicht. Wenn bei der Zuweisung irgendein Fehler passierte, blieb dies somit für den Anwender nicht erkennbar, was zu schweren Fehlern bei der Auswertung führen konnte. Obwohl die Kontrollausgabe zumindest bei einigen Modulversionen nachgerüstet wurde, bleibt das Verfahren unübersichtlich und fehleranfällig.

Nach Durchlaufen der Modulkette wird bei jedem Spiel das Programm STATOUT ausgeführt, welches die Daten für die Auswertung in eine Datei mit der Endung \*.sdo kopiert. Dieses Programm liest nur die Ausgabedateien der Module EXCON/EXMAS. Es ist allein auf die Auswertung der zeitabhängigen und maximalen Dosisdaten ausgelegt. Eine Auswertung anderer Ergebnisgrößen ist ohne Codemodifikation nicht möglich.

Die Auswertung selbst findet als eigenständiger Rechenprozess statt. Dabei hat der Benutzer die Möglichkeit, die Auswertungen "Unsicherheitsanalyse" und "Sensitivitätsanalyse" sowie verschiedene Zeitpunkte zu wählen. Damit ist die Ausgabe des Postprozessors festgelegt. Hier besteht keinerlei Flexibilität, andere als die verdrahteten Methoden stehen nicht zur Verfügung.

Die Auswertungen werden von dem statistischen Postprozessor EMOSStatist durchgeführt /BOE 98/. Dieser beruht auf einer veralteten grafischen Software, die auf modernen PC-Systemen nicht lauffähig ist. Schon aus diesem Grund ist das Programm kaum noch einsetzbar. Es wurde allerdings zwischenzeitlich ein MATLAB-Programm entwickelt, mit dem die Auswertung einer \*.sdo-Datei unter Zuhilfenahme der Bibliothek SIMLAB durchgeführt werden kann. In Kombination mit dem oben erwähnten Workaround zur externen Stichprobenziehung lassen sich so auch flexible Sensitivitätsanalysen mit modernen Verfahren durchführen. Dies ist allerdings mit viel Handarbeit verbunden.

### **6.3.2      Behandlung strenger Abhängigkeiten**

Das Programmsystem EMOS betrachtet bei probabilistischen Rechenläufen sämtliche Programmparameter entweder als Variable oder als Konstanten. Während für Konstanten immer der Wert verwendet wurde, der in der entsprechenden Eingabedatei eingetragen ist, werden Variable zwar zunächst ebenfalls aus den Eingabedateien eingelesen, bei jedem Spiel aber mit einem statistischen Wert überschrieben. Dabei wird zwischen unabhängigen Variablen und abhängigen Variablen unterschieden. Die unabhängigen Variablen entsprechen direkt den statistischen Variablen aus der Stichprobenziehung. Dabei kann zwar eine statistische Korrelation berücksichtigt werden, aber keine strenge Abhängigkeit. Alle Programmparameter, die in irgendeinem strengen Zusammenhang mit den gezogenen Werten stehen, werden als abhängige Variable behandelt.

Technisch geschieht die Zuweisung dadurch, dass durch spezielle Zuweisungsroutinen innerhalb der Module nach dem Einlesen der Eingabedateien bei jedem Spiel zunächst die Werte der unabhängigen Variablen aus der Stichprobendatei gelesen und die Programmparameter entsprechend überschrieben werden. Anschließend wird jeweils eine Zuweisungsroutine für abhängige Variablen aufgerufen, die die für den Rechenfall benötigten Abhängigkeiten umsetzt. Dies ist jedoch eine Aufgabe, die nicht allgemein zu definieren und programmtechnisch zu realisieren ist.

Bei der ursprünglichen Konzeption des Programmpakets EMOS war nur eine einzige Form von Abhängigkeiten, nämlich eine lineare Kopplung vorgesehen. Die entsprechende Zuweisungsroutine wurde so gestaltet, dass für jede abhängige Variable eine Referenzvariable aus der Gruppe der unabhängigen Variablen sowie individuelle Intervallgrenzen angegeben werden muss. Die Zuweisung erfolgt dann so, dass die abhängige Variable mittels einer linearen Strahlensatzrechnung auf die gleiche relative Position in ihrem Intervall projiziert wird, auf der der gezogene Wert der Referenzvariable im zugehörigen Intervall liegt. Auf diese Weise können z. B. Sorptionsparameter für alle Elemente an denjenigen eines Referenzelements gekoppelt werden.

Die beschriebene Methode der Zuweisung abhängiger Variabler nach der Strahlensatzformel hat den entscheidenden Nachteil, dass die Form der Abhängigkeit im Quelltext verankert ist und vom Benutzer lediglich Intervallgrenzen vorgegeben werden können. In der Praxis reicht dies jedoch nicht aus. Bei realistischen Analysen kommen Abhängigkeiten vor, die sich nicht mit der Strahlensatzmethode ausdrücken lassen. So ist es beispielsweise möglich, dass für der Wert eines Programmparameters nichtlinear von einem anderen abhängt oder durch mehrere unabhängige Variable bestimmt wird. Ein typisches Problem ist auch, dass nach einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung zwischen zwei oder mehreren Alternativszenarien umgeschaltet werden soll, wobei jeweils mehrere Parameter entsprechend zu setzen oder sogar Segmentmodelle auszutauschen sind. Solche Fälle erfordern bei EMOS jeweils problemspezifische Versionen der Zuweisungsroutine für die abhängigen Variablen, in denen die gewünschten Abhängigkeiten umgesetzt werden. Mit anderen Worten: für jeden probabilistischen Rechenfall ist ein Eingriff in den Quelltext des Programms und eine Neukompilierung erforderlich. Dies ist ein sehr unbefriedigendes Verfahren, weil es zum einen zu einer Vielzahl paralleler Programmversionen führt, die jeweils nur für einen bestimmten Rechenfall anwendbar sind, und zum anderen eine enge Abstimmung zwischen Anwender und Entwickler

erfordert. Es besteht die Gefahr, dass eine Programmversion, die für einen bestimmten Rechenfall erfolgreich eingesetzt wurde, intuitiv auch für einen modifizierten Rechenfall für anwendbar gehalten wird, bei dem sie jedoch dann eine mehr oder weniger fehlerhafte Zuweisung von abhängigen Variablen vornimmt. Darüber erhält der Anwender keine Rückmeldung, sodass hier eine große Gefahr unbemerkt falscher Ergebnisse besteht.

## **6.4 Neukonzeption des Statistikrahmens**

Im vorangegangenen Abschnitt wurden einige Nachteile des Statistikrahmens von EMOS dargestellt, die sich in der langjährigen Anwendungspraxis als unterschiedlich problematisch erwiesen haben. So bedeutet die Beschränkung auf wenige in den Modulen fest verdrahtete statistische Parameter zwar eine reduzierte Flexibilität, birgt aber keine Fehlergefahr. Im Gegensatz dazu ist es durch die Zuweisung der gezogenen Werte zu den statistischen Parametern innerhalb der Module aufgrund fehlender Kontrollmöglichkeiten in einigen Fällen zu Fehlberechnungen gekommen. Die Umsetzung strenger Abhängigkeiten durch problemspezifisch zu programmierende Zuweisungsrouninen ist nicht nur technisch unbefriedigend, sondern bei einer Entkopplung von Entwicklung und Anwendung ebenfalls mit erheblichen Fehlergefahren verbunden. Deshalb wurde eine völlige Neukonzeption beschlossen, die auf den nachfolgend dargestellten Vorgaben beruht.

### **6.4.1 Statistische Variablen**

Die Unterscheidung zwischen unabhängigen und abhängigen statistischen Programmparametern erscheint bei genauerem Hinsehen willkürlich und wenig sinnvoll. Sie wird deshalb in dieser Form aufgegeben. Stattdessen definiert der Anwender einen Satz von statistischen Variablen, die nicht mit den Programmparametern der Rechenmodule identisch sind und frei benannt werden können. Für diese Variablen werden Verteilungsfunktionen und ggf. Korrelationen festgelegt. Die eigentlichen Programmparameter werden dann über ebenfalls vom Anwender zu definierende Beziehungen an diese statistischen Variablen gekoppelt. Durch solche Beziehungen können einfache Identitäten, aber auch komplexere mathematische oder logische Zusammenhänge, ggf. auch mit mehreren der

statistischen Variablen, abgebildet werden. Auf diese Weise lassen sich Abhängigkeiten zwischen Programmparametern sehr viel flexibler darstellen als mit der alten Technik.

#### **6.4.2 Stichprobenziehung**

Bei der Stichprobenziehung werden die vom Anwender definierten statistischen Variablen mit Zahlenwerten für alle Spiele belegt. Die Ziehung wird nicht mehr innerhalb des statistischen Rechenlaufs vorgenommen, sondern vorab und unabhängig durchgeführt. Dazu wird eine externe Software eingesetzt. Hierfür wurde die Programmbibliothek SIMLAB 3.2 ausgewählt [WWW SL]. Diese wurde für die Unsicherheits- und insbesondere die Sensitivitätsanalyse komplexer Rechenmodelle entwickelt und enthält Routinen für die Stichprobenziehung sowie die Auswertung nach zahlreichen klassischen und modernen Verfahren. Dabei können die Verteilungstypen flexibel vorgegeben werden. Statistische Korrelationen können ebenfalls berücksichtigt werden.

#### **6.4.3 Belegung der Programmparameter**

Beim Programmpaket EMOS wurden die Stichprobenwerte innerhalb der einzelnen Module gelesen und den Programmparametern durch Überschreiben der Originalwerte zugewiesen. Stattdessen wird nach der neuen Technik jeweils vor Beginn eines Spiels der komplette Parametersatz generiert und in Form einer spielspezifischen Eingabedatei im JSON-Format abgelegt. Mit dieser wird dann das Spiel wie ein deterministischer Rechenlauf gerechnet. Spezielle Zuweisungsrouinen innerhalb der Rechenmodule sind somit nicht mehr erforderlich.

Die Beziehungen zwischen den statistischen Variablen und den Programmparametern werden vom Anwender in der Eingabedatei für den Gesamtrechenlauf festgelegt. Dies ist im Prinzip für jeden Parameter möglich, Voraussetzung ist nur, dass eine statistische Variation des Parameters in der Modulbeschreibung von XENIA vorgesehen ist. Die Beziehungen werden mittels einer einfachen Formelnotation definiert. Ein spezielles Vorbereitungsmodul interpretiert diese Notation zur Laufzeit jeweils vor Beginn eines Spiels und erzeugt die spielspezifische JSON-Datei. Eingriffe in den Quellcode zur Definition von Abhängigkeiten sind damit nicht mehr erforderlich.

#### **6.4.4 Zusammenstellung der Ausgabedaten**

Um bei großen Stichprobenumfängen die verfügbaren Datenspeicherkapazitäten nicht unnötig zu belasten, ist es erforderlich, jeweils nach Abschluss eines Spiels diejenigen Daten, die später ausgewertet werden sollen, nach entsprechenden Anwendervorgaben zu extrahieren und über alle Spiele zu sammeln. Hierzu wird jeweils nach Abschluss eines Spiels ein Datensammlermodul aufgerufen, welches die Anwendervorgaben einliest, die entsprechenden Ausgabedaten identifiziert und diese, mit der Spielnummer gekennzeichnet, in eine Sammeldatei kopiert.

#### **6.4.5 Statistische Auswertung**

Für die statistische Auswertung der Ergebnisse eines probabilistischen Rechenlaufs wird wieder die Programmbibliothek SIMLAB herangezogen. Sie enthält Routinen zur Unsicherheits- sowie zur Sensitivitätsanalyse nach zahlreichen verschiedenen Verfahren. Die Auswertung wird unabhängig von dem Rechenlauf selbst zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt durchgeführt. Das dafür zu verwendende Programm wird unter MS-Windows ausgeführt. Es liest die Sammeldatei ein, greift auf die Routinen der Bibliothek SIMLAB zu und gibt statistische Kenngrößen aus bzw. erzeugt Dateien, die mittels des kommerziellen Programms TECPLOT in grafische Darstellungen umgewandelt werden können.

### **6.5 RepoTREND-Statistikrahmen**

Der Statistikrahmen des Programms RepoTREND setzt sich aus mehreren Programmbestandteilen (Modulen) zusammen, die unabhängig voneinander und zum Teil sogar auf verschiedenen Betriebssystemumgebungen laufen. Die Kommunikation zwischen diesen Bestandteilen und den Rechenmodulen geschieht über ASCII-Dateien.

Der Aufbau des Statistikrahmens mit den einzelnen Programmbestandteilen ist in Abb. 6.1 schematisch dargestellt.

Über die Benutzerschnittstelle XENIA ist ein statistischer Rechenlauf bei seiner Spezifikation zunächst als solcher zu kennzeichnen und mit den für die Probabilistik erforderlichen Daten zu versorgen. Letzteres geschieht über zwei spezielle Module – *Statist* (im Weiteren als *X-Statist* bezeichnet) und *Statist-Control* (im Weiteren *X-Statist-Control*) –

sowie über die XENIA-Module, die zur Spezifikation eines deterministischen Rechenlaufs erforderlich sind. Bei Vorhandensein des Moduls X-Statist-Control wird ein Rechenlauf als statistischer Rechenlauf behandelt, andernfalls werden eventuell vorhandene Statistik-Angaben in anderen Modulen ignoriert. Der Rechenlauf als Ganzes wird über ein Python-Skript gesteuert, welches selbst nicht auf die JSON-Datei zugreift. Die Auswertung wird mit einem eigenständigen und komplett unabhängigen Programm durchgeführt.

In den folgenden Unterkapiteln werden zunächst die Aufgaben der einzelnen Programmbestandteile beschrieben, ohne auf die Details der programmtechnischen Umsetzung einzugehen.

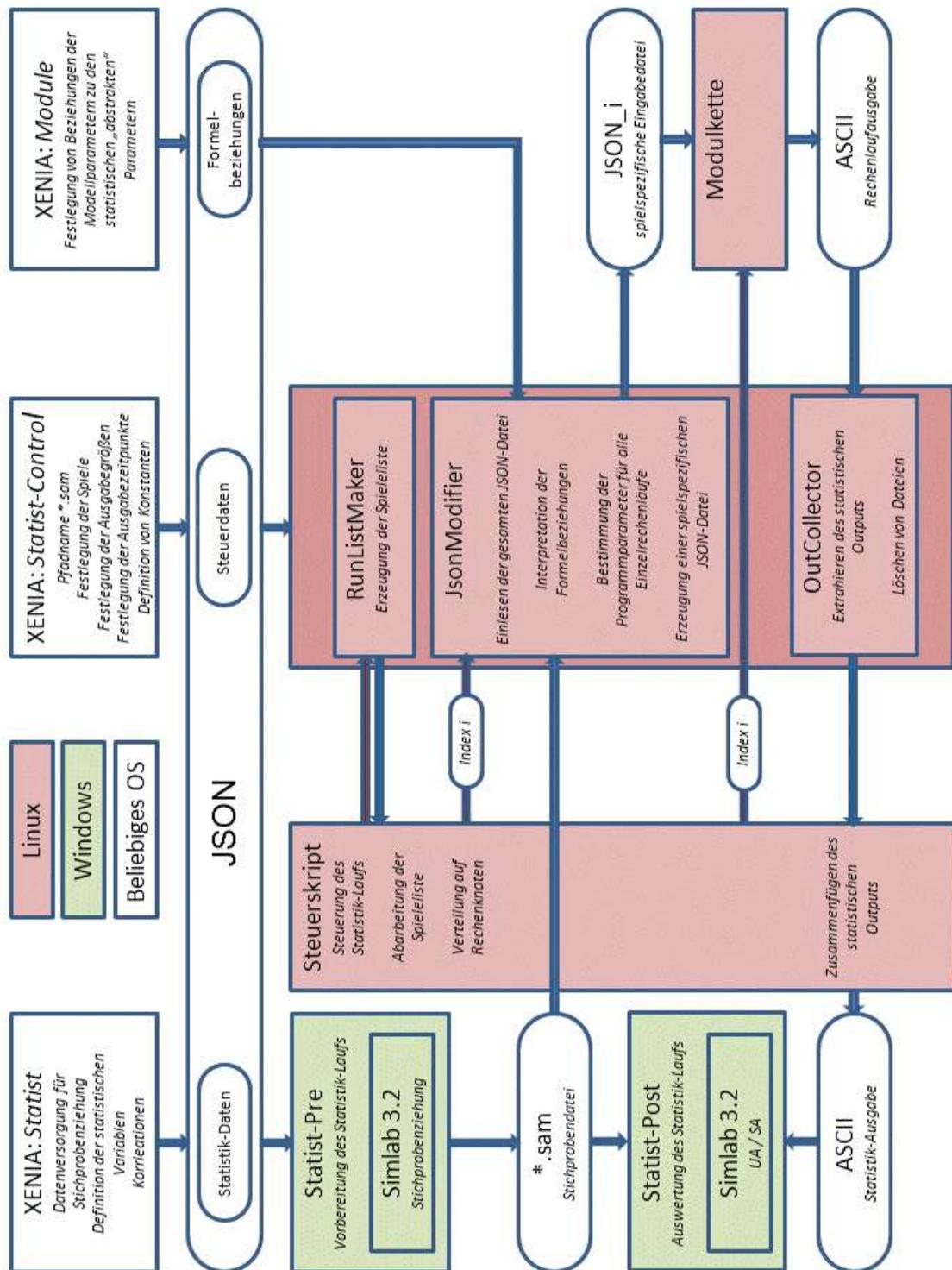


Abb. 6.1 Aufbau und Funktion des RepoTREND-Statistikrahmens

### 6.5.1 Vorbereitung und Stichprobenziehung

Das Modul X-Statist dient zur Vorbereitung des eigentlichen statistischen Rechenlaufs, d. h. zur Definition der statistischen Variablen sowie zur Stichprobenziehung. Das Programm wird vorab und unabhängig vom eigentlichen Rechenlauf ausgeführt. Die dabei verarbeiteten Daten sind Verteilungstypen und -parameter sowie Korrelationskoeffizienten. Diese werden bei der Ausführung des statistischen Rechenlaufs nicht mehr benötigt, es wird dann nur noch auf die gezogene Stichprobe zugegriffen. Es bleibt daher dem Anwender überlassen, ob er das Modul Statist als Bestandteil der Modulkette in den Produktions-Rechenlauf einbindet, oder als selbständigen und unabhängigen Vorbereitungs-Rechenlauf anlegt. Letzteres kann z. B. sinnvoll sein, wenn mehrere verschiedene statistische Produktionsläufe mit ein und derselben Stichprobe durchgeführt werden sollen.

In dem zum Modul X-Statist gehörigen Datenbereich definiert der Benutzer die Namen der statistischen Variablen und legt die zugehörigen Verteilungsfunktionen mit ihren Parametern fest. Für jeden Typ von Verteilungsfunktionen sind charakteristische Parameter zu spezifizieren. Die zur Auswahl stehenden Verteilungstypen und ihre Parameter sind in Tab. 6.1 aufgelistet. Für eine genaue Erklärung wird auf /WWW SL/ verwiesen.

**Tab. 6.1** Verteilungstypen und Parameter

Verteilungstyp	Parameter
Gleichförmig (uniform)	untere Grenze obere Grenze
Logarithmisch-gleichförmig (log-uniform)	untere Grenze obere Grenze
Abschnittsweise gleichförmig (multi-uniform)	Zahl der Intervalle je Intervall: untere Grenze obere Grenze Wahrscheinlichkeit

Verteilungstyp	Parameter
Abschnittsweise logarithmisch-gleichförmig (multi-log-uniform)	Zahl der Intervalle je Intervall: untere Grenze obere Grenze Wahrscheinlichkeit
Normal	Erwartungswert Standardabweichung untere Abschneidegrenze obere Abschneidegrenze
Logarithmisch-normal	Erwartungswert (log) Standardabweichung (log) untere Abschneidegrenze obere Abschneidegrenze
Dreieck (triangular)	untere Grenze Spitzenwert obere Grenze
Exponentiell	Parameter $\lambda$ Parameter $b$ obere Grenze
Beta	Parameter $\alpha$ Parameter $\beta$ untere Grenze obere Grenze
Gamma	Parameter $r$ Parameter $\lambda$ Parameter $b$ obere Grenze

Verteilungstyp	Parameter
Weibull	Parameter $\beta$ Parameter $n$ Parameter $b$ obere Grenze
Diskret	Zahl der diskreten Werte je Wert: Zahlenwert Wahrscheinlichkeit

Gewünschte statistische Korrelationen zwischen jeweils zwei Variablen, die bei der Stichprobenziehung berücksichtigt werden sollen, können in beliebiger Anzahl durch Angabe jeweils eines Variablenpaars und eines Korrelationskoeffizienten festgelegt werden. Weiterhin legt der Benutzer den Stichprobenumfang sowie den Keim der Zufallszahlziehung fest. Er hat die Möglichkeit, zwischen verschiedenen Ziehungsverfahren – derzeit Random, LHS, FAST, EFAST und Sobol – zu wählen.

Das mit dem XENIA-Modul X-Statist verbundene Programm *PreStatist* liest diesen Datenbereich ein und bereitet die Daten für die Weiterleitung an die Bibliothek SIMLAB auf. Mittels bestimmter Funktionen aus dieser Bibliothek wird daraus zunächst eine Hintergrundumgebung erstellt, in der sämtliche statistischen Variablen mit ihren Namen und Verteilungsfunktionen sowie die Korrelationsbeziehungen definiert sind. Aus dieser Umgebung heraus wird die Stichprobenziehung nach dem gewählten Verfahren durchgeführt. Als Ergebnis entsteht eine Datei mit der Endung \*.sam, die an einem vom Benutzer spezifizierten Ort im Dateisystem abgelegt wird. Diese Datei enthält alle für die Statistik benötigten Informationen, d. h. die vom Benutzer definierten Variablennamen, deren Verteilungstypen und -parameter sowie insbesondere die gezogenen Stichprobenwerte. Diese Datei dient als Schnittstelle zum eigentlichen statistischen Rechenlauf.

Das Programm *PreStatist* wird unter dem Betriebssystem Windows ausgeführt. Dies ist erforderlich, weil die Bibliothek SIMLAB nur für Windows verfügbar ist. Nachdem die Stichprobendatei erzeugt wurde, wird das Programm beendet. Der eigentliche Rechenlauf kann dann zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt unter Linux ausgeführt werden. Dafür wird dann nur noch die \*.sam-Datei benötigt, der X-Statist-Modul der JSON-Datei

wird nicht mehr eingelesen. Solange mit derselben Stichprobe gearbeitet werden soll, ist keine erneute Ausführung von PreStatist mehr erforderlich.

## **6.5.2 Steuerung des Programmablaufs**

Ein statistischer Rechenlauf wird als eine Folge von Einzelrechenläufen oder Spielen behandelt, deren Eingangsdaten jeweils in spielspezifischen JSON-Dateien abzulegen sind. Die Ablaufsteuerung wird von dem im nächsten Kapitel 7 beschriebenen Skriptprogramm übernommen. An dieser Stelle genügt es, festzuhalten, dass für jedes Spiel eine festgelegte Kette von Einzelaufgaben auszuführen ist. Soweit diese über die bei deterministischen Rechenläufen erforderlichen Aufgaben hinausgehen, werden sie von dem Modul Statist-Control ausgeführt.

In der JSON-Datei werden im Modul X-Statist-Control verschiedene Daten zur Steuerung des Ablaufs eines Statistik-Rechenlaufs abgelegt, z. B. die Nummern der durchzuführenden Spiele aus der Stichprobe und die zur Auswertung ausgewählten Ausgabe-Größen. Das Steuerskript selbst greift nicht auf die JSON-Datei zu, sondern überlässt deren Auswertung dem Modul Statist-Control, dessen Komponenten zu verschiedenen Zeitpunkten innerhalb der Ablaufkette ausgeführt werden. Diese Programmkomponenten sind lose gekoppelte Bestandteile des Programms Statist-Control Sie werden im Folgenden einzeln beschrieben.

Das Modul Statist-Control setzt voraus, dass eine gültige Stichprobendatei mit der Endung \*.sam im Arbeitsverzeichnis existiert.

### **6.5.2.1 RunListMaker**

Nicht in jedem Fall möchte der Benutzer im Rahmen des Statistik-Rechenlaufs die gesamte Stichprobe durchrechnen. Häufig müssen einzelne Spiele oder Gruppen von Spielen wiederholt werden oder der Benutzer möchte gezielt nur einen Teil der Stichprobe verwenden. Dies kann über XENIA in der JSON-Datei eingetragen werden. Aus den entsprechenden Daten ist dann eine Liste in Form einer ASCII-Datei zu erzeugen, die die zeilenweise Nummern aller zu rechnenden Spiele aufführt und vom Steuerskript als Stapel verwendet wird. Diese Aufgabe wird von der Programmkomponente *RunList-*

*Maker* ausgeführt, welche vom Steuerskript zu Beginn des Statistik-Rechenlaufs einmalig aufgerufen wird.

### 6.5.2.2 **JsonModifier**

Die Komponente `JsonModifier` ist der wichtigste und aufwändigste Bestandteil des Moduls `Statist-Control`. Ihre Aufgabe besteht darin, für jedes einzelne Spiel eine spezifische JSON-Datei zu erzeugen, in der die Werte aller statistisch zu variierenden Parameter durch diejenigen ersetzt sind, die sich für das betreffende Spiel aus der gezogenen Stichprobe ergeben. Wie im Kapitel 6.4.3 ausgeführt, werden diese Parameterwerte nicht direkt aus der Stichprobendatei übernommen, sondern sind mittels einer einfachen Formelsprache mit den dort abgelegten statistischen Variablen verknüpft. Diese Formeln werden als spezielle Statistik-Anweisungen eingegeben. Damit diese den richtigen Parametern eindeutig zuzuordnen sind, wurden für die Gestaltung der Modulbeschreibungen folgende Regeln festgelegt:

- Der XENIA-Administrator, der die Modulbeschreibung für ein Rechenmodul gestaltet, legt fest, welche Parameter statistisch variiert werden können. Dieser Administrator ist in der Regel identisch mit dem Entwickler des Rechenmoduls.
- Statistik-Anweisungen werden als optionale String-Attribute angegeben. Der Name des Attributs muss mit dem Kennwort `[statistic]` beginnen und ansonsten mit dem Namen des zu variierenden Parameters exakt übereinstimmen.
- Die Statistik-Anweisungen müssen innerhalb der JSON-Struktur entweder auf derselben Hierarchieebene stehen wie der Parameter selbst oder auf einer genau parallelen Ebene. Im letzteren Fall muss der Name dieser Ebene mit dem Kennwort `[statistic]` beginnen und ansonsten mit dem Namen der abzubildenden parallelen Ebene exakt übereinstimmen. Dasselbe Prinzip ist auch bei eventuell vorhandenen Zwischenebenen zu beachten. Das Weglassen des `[statistic]`-Kennworts bei solchen Zwischenebenen ist zwar unschädlich, solange der Pfad eindeutig bleibt, aber nicht zu empfehlen.

Im Prinzip kann für nahezu jeden Programmparameter jedes Moduls eine Statistik-Anweisung vorhanden sein. Das Modul `JsonModifier` muss also die gesamte JSON-Datei einlesen, sämtliche Statistik-Anweisungen finden, die entsprechenden Formeln

interpretieren, mit den so errechneten Werten die Originalwerte überschreiben und schließlich die modifizierte JSON-Datei wieder ausgeben. Zur Auswertung der Statistik-Anweisungen müssen die Namen der statistischen Variablen sowie deren Werte für die beim Aufruf übergebene Spielnummer bekannt sein. Diese Informationen sind aus der \*.sam-Datei zu lesen.

Das Modul `JsonModifier` durchläuft den gesamten JSON-Baum des Rechenlaufs systematisch und speichert dabei den jeweils aktuellen kompletten Pfad. Wo ein `[statistic]`-Kennwort gefunden wird, wird dieses zuvor entfernt. Trifft es auf einen Endpunkt des Baumes, also ein mit `[statistic]` gekennzeichnetes Attribut, so interpretiert es die dort vorgefundene Formel und überschreibt mit dem errechneten Wert denjenigen Parameter, der unter dem im Speicher befindlichen Pfad steht. Weil alle `[statistic]`-Kennungen vor dem Speichern entfernt wurden, ist dies automatisch der zugehörige Originalparameter.

Eine zentrale Aufgabe des Moduls ist das Interpretieren der Statistik-Anweisungen. Hierfür wurde eine einfache Formelsprache definiert, mittels derer gültige Bezeichner zu einem eindeutig auswertbaren Ausdruck verknüpft werden können. Gültige Bezeichner sind dabei die Namen der in der \*.sam-Datei definierten statistischen Variablen sowie beliebige Konstanten, die vom Benutzer im Modul `X-Statist-Control` selbst definiert werden können.

Die Formelsprache stellt folgende Elemente zur Verfügung:

- die binären algebraischen Operatoren `+`, `-`, `*`, `/`, außerdem das unäre `-` als Vorzeichenoperator,
- die Zeichen `^` und `**` als gleichwertige Synonyme für den Exponentialoperator,
- runde Klammern,
- die mathematischen Funktionen `sin`, `cos`, `tan`, `asin`, `acos`, `atan`, `atan2`, `sinh`, `cosh`, `tanh`, `log` (Synonym: `ln`), `log10`, `exp`, `pow`, `sqrt`, `fabs`, `ceil`, `floor` in Anlehnung an die Programmiersprache C,
- die fünfstellige Funktion `scale` zur linearen Abbildung eines Referenzpunkts aus einem Referenzintervall auf einen Zielpunkt in einem Zielintervall: `scale (Referenz-`

*punkt, untere Grenze Zielintervall, obere Grenze Zielintervall, untere Grenze Referenzintervall, obere Grenze Referenzintervall) = Zielpunkt,*

- die booleschen Operatoren `<`, `<=`, `>`, `>=`, `==`, `!=` in Anlehnung an die Programmiersprache C,
- Zugriff auf den Originalwert des zu modifizierenden Parameters über das Zeichen `$`,
- den ternären Entscheidungsoperator `(a ? b : c)` – die Klammern sind obligatorisch –, der den booleschen Ausdruck `a` auswertet und im Fall `a = true` (oder `a != 0`) `b`, andernfalls `c` zurückgibt.

Mit diesen Elementen ist es möglich, auch komplexere Zusammenhänge darzustellen. Das Programm ist so aufgebaut, dass weitere Funktionen bei Bedarf ohne großen Programmieraufwand hinzugefügt werden können.

Die Programmkomponente `JsonModifier` wird vom Steuerskript jeweils zu Beginn eines Spiels aufgerufen und bekommt die Nummer dieses Spiels als Übergabeparameter, sodass sie die korrekten Stichprobenwerte für die statistischen Variablen aus der `*.sam`-Datei einlesen kann.

### **6.5.2.3 OutCollector**

Es ist meist wenig sinnvoll, den gesamten Output sämtlicher Spiele aufzuheben, was zu einer erheblichen Belastung der Speicher- und Datentransferkapazitäten führen würde. Für die statistische Auswertung wird von jedem Spiel normalerweise nur ein kleiner Teil der produzierten Ausgabedaten benötigt, z. B. die Zeitreihen der Nuklidströme in die Biosphäre oder der Summendosis. Diese Größen legt der Benutzer vor Beginn des Rechenlaufs im Modul `X-Statist-Control` fest. Aufgabe der Programmkomponente `OutCollector` ist es, diese Eingaben auszuwerten und die entsprechenden Daten aus dem Output jedes Spiels zu extrahieren. Das Programm wird jeweils nach Abschluss eines Spiels aufgerufen. Es erzeugt dann jeweils eine mit der Nummer des Spiels gekennzeichnete Datei, die die gewünschten Ausgabedaten enthält, und löscht anschließend die originalen Ausgabedateien, sofern der Benutzer deren Sicherung nicht ausdrücklich angefordert hat, was bei Analyserechenläufen mit geringer Spieleanzahl unter Umständen sinnvoll sein kann. Nach Abschluss des gesamten statistischen Rechenlaufs werden die

Einzeldateien vom Steuerskript auf Betriebssystemebene zu einer Datei zusammengefügt, die zur Übergabe an den Postprozessor bereitgestellt wird.

### **6.5.3      Auswertung einer Statistik-Rechnung**

Ebenso wie die Vorbereitung findet auch die Auswertung einer Statistik-Rechnung unabhängig vom eigentlichen Rechenlauf statt. Sie kann zu einem beliebigen Zeitpunkt nach Abschluss des Rechenlaufs durchgeführt werden. Dafür muss neben der Stichprobendatei auch die Sammeldatei mit den Ausgabedaten eingelesen werden. Der Benutzer kann selbstverständlich nur diejenigen Daten auswerten, die in der Sammeldatei vorhanden sind, die er also bereits vor Durchführung des Rechenlaufs zur Auswertung ausgewählt hat. Im Normalfall wird aber nur ein Teil dieser Daten tatsächlich zur Auswertung herangezogen, außerdem ist die Art der Auswertung festzulegen. Die dafür zu erteilenden Benutzeranweisungen sind nicht rechenlaufspezifisch, sondern allein auf die Auswertung des bereits durchgeführten Rechenlaufs bezogen, die eventuell auch mehrfach mit unterschiedlichen Vorgaben durchgeführt wird. Es wäre daher nicht sinnvoll, diese mittels XENIA in der rechenlaufspezifischen JSON-Datei einzutragen. Es ist vielmehr erforderlich, dass der Benutzer zum Zeitpunkt der Auswertung über eine geeignete Schnittstelle mit dem Programm kommunizieren kann. Hierfür wird eine eigene grafische Oberfläche bereitgestellt, welche zum jetzigen Zeitpunkt jedoch noch nicht realisiert ist.

## **7 Ablaufsteuerung**

Jeder Rechenlauf besteht aus einer Abfolge von Programmen, die zum Teil aufeinander aufbauen und deshalb in geeigneter Reihenfolge nacheinander auszuführen sind. Die Steuerung dieses Ablaufs wird mittels eines Skriptprogramms durchgeführt.

Über die Eingabeoberfläche XENIA kann der Benutzer die Ausführung eines ausgewählten Rechenlaufs auslösen, wenn alle Daten vollständig vorliegen (siehe Kapitel 3). Dieser Vorgang besteht im Wesentlichen aus zwei Teilen:

- Transfer von Kopien der für den Rechenlauf erforderlichen Dateien zum Dateisystem des ausführenden Rechners. Neben der JSON-Datei und ggf. benötigten weiteren Daten gehören hierzu auch die ausführbaren Programme.
- Weitergabe des Rechenauftrags an den ausführenden Rechner. Dies geschieht, indem das Skriptprogramm dem Rechner zur Ausführung übergeben wird, welches festlegt, wie mit den bereitgestellten Daten umzugehen ist.

Das Skriptprogramm startet und steuert den Rechenlauf, indem es die Kommunikation mit dem Betriebssystem übernimmt, die einzelnen Rechenmodule aufruft und die Datenströme organisiert. Seine Funktionsweise wird in diesem Kapitel genauer beschrieben.

### **7.1 Technische Rahmenbedingungen**

Um die Anforderungen an das Steuerskript verständlich zu machen, ist es zunächst erforderlich, die verschiedenen technischen Rahmenbedingungen, mit denen es umgehen können muss, zu erläutern.

Während Arbeitsplatzrechner heute vorwiegend mit Betriebssystemen aus der Windows-Familie der Fa. Microsoft ausgestattet sind, arbeiten größere Rechenanlagen zumeist mit einem Derivat des Open-Source-Betriebssystems Linux. Prinzipiell wird angestrebt, dass lauffähige RepoTREND-Module für beide Umgebungen erstellt werden. Auch das Skriptprogramm muss dann für Windows und Linux realisiert werden. Zur Vereinfachung der Wartung sowie der Verwendung durch XENIA sollte ein einheitliches Skript für beide Plattformen angestrebt werden. Da jedoch zurzeit von den Rechenmodulen nur Linux-Versionen vorliegen, wurde auch das Steuerskript zunächst für Linux entwickelt, wobei

aber Windows bereits berücksichtigt wurde. Eine Unterstützung anderer Betriebssysteme wie Mac-OS oder proprietärer Unix-Varianten ist derzeit nicht vorgesehen.

Typische Großrechner sind aus mehreren gleichartigen Einheiten aufgebaut, die parallel und unabhängig voneinander Rechnungen durchführen können, wobei sie in systemabhängigem Ausmaß auf gemeinsame Ressourcen zurückgreifen. Solche Systeme werden als *Cluster* bezeichnet. Oft sind dabei jeweils mehrere Prozessoren (CPUs) zu einem sogenannten Knoten zusammengefasst, wobei jeder Prozessor seinerseits mehrere Rechenkerne besitzen kann (multicore-CPUs). Als Schnittstelle nach außen dient dabei ein sogenanntes *Frontend*, welches als selbstständiger Rechner in Erscheinung tritt und die eingehenden Rechenaufträge an die Rechenknoten verteilt.

Für Clustersysteme existieren unterschiedliche Architekturen. So können entweder alle Prozessoren einen großen gemeinsamen Hauptspeicher nutzen (shared memory), oder jeder Prozessor oder Knoten besitzt seinen eigenen Hauptspeicher (distributed memory). In ähnlicher Weise können entweder vorrangig zentrale Festplatten genutzt werden, oder jeder Knoten arbeitet mit einer eigenen lokalen Platte. Damit das Steuerskript universell einsetzbar ist, wurde es so gestaltet, dass es mit möglichst vielen Architekturen kompatibel ist, auch wenn dadurch manche Systeme vielleicht nicht optimal genutzt werden. Es wird deshalb von distributed memory, lokalen Festplatten und single-core-CPUs ausgegangen.

Bei Clustersystemen kommen zur Verteilung der verfügbaren Kapazitäten im Allgemeinen sogenannte *Queueing-Systeme* zum Einsatz. Ein solches System ordnet die eingehenden Rechenaufträge in Warteschlangen (Queues) ein, die sich z. B. durch ihre Priorität oder den Zugriff auf Ressourcen unterscheiden können. Sobald ein Rechenauftrag an der Reihe ist, wird diesem einfachsten Fall ein einzelner Rechenkern zugewiesen, auf dem das Programm dann sequenziell abgearbeitet wird. Sofern das Queueing-System dies vorsieht, kann aber ein Rechenauftrag auch mehrere Rechenkerne anfordern und in eigener Verantwortlichkeit Aufgaben an diese verteilen. Die Aufteilung des Rechenauftrags in solche Teilaufgaben wird als *Parallelisierung* bezeichnet. Inwieweit die RepOTREND-Module intern Parallelisierung nutzen, bleibt diesen überlassen. Das Steuerskript in der vorliegenden Form geht jedoch davon aus, dass jeder Ablauf einer Kette von Modulen sequenziell auf einem Rechenkern abzuarbeiten ist. Im Falle eines Paketauftrags, der aus mehreren unabhängigen Einzelrechenläufen besteht, kann es diese

allerdings in eigener Verantwortung an separate Rechenkerne verteilen, sobald diese zur Verfügung stehen, und dadurch die Abarbeitung beschleunigen. Dies ist bei probabilistischen Rechenläufen von Bedeutung.

## 7.2 Funktionsweise des Steuerskripts

Jeder Rechenlauf, egal ob deterministisch oder probabilistisch, ist zunächst durch eine einzige JSON-Datei definiert, die von XENIA erzeugt und gemeinsam mit dem Steuerskript an das Frontend übergeben wird. Im Unterschied zu deterministischen Rechenläufen, die vom Benutzer für eine einmalige Abarbeitung zusammengestellt werden, stellen probabilistische Rechenläufe Paketaufträge dar, die aus voneinander unabhängigen Einzelaufträgen bestehen, und sich als solche für eine Parallelisierung durch Abarbeiten auf mehreren Rechenkernen anbieten. Das Skriptprogramm muss dafür sorgen, dass die zugeteilten Rechenkerne überwacht und bei Verfügbarkeit sofort mit dem nächsten Spiel beauftragt werden. Die Reihenfolge der Abarbeitung spielt dabei keine Rolle, da die einzelnen Spiele nicht wechselseitig auf Ergebnisse angewiesen sind. Nach Beendigung aller Spiele müssen die Ergebnisse jedoch sortiert werden, weil die Auswertung die korrekte Reihenfolge erfordert. Alle konkreten Aufgaben werden von speziellen Zusatzmodulen ausgeführt, das Steuerskript braucht sich nur so weit darum zu kümmern, dass diese zum richtigen Zeitpunkt aufgerufen werden.

Im Folgenden wird beschrieben, wie das Skript im Fall von probabilistischen Rechenläufen arbeitet, die aus mehreren Spielen bestehen. Es wird vorausgesetzt, dass zum Zeitpunkt des Rechenlaufstarts eine gültige Stichprobendatei mit der Dateiendung \*.sam vorliegt, die im Rahmen des Präprozessings erzeugt worden ist. Bei deterministischen Rechenläufen vereinfacht sich der Ablauf dahingehend, dass nur ein einziges Spiel ausgeführt werden muss und natürlich auch keine Stichprobendatei benötigt wird.

Mit Blick auf die dargestellten Vorgaben und Annahmen fallen dem Steuerskript, das zur Laufzeit interpretiert wird, folgende Aufgaben zu:

- optimale Ausnutzung der vom System zugeteilten Rechenkapazität,
- Bereitstellung der erforderlichen Daten auf dem Datenspeicher des jeweiligen Rechenknotens,
- Übergabe der Programmkontrollanweisungen an den jeweiligen Rechenknoten.

Die genannten Aufgaben wurden wie folgt realisiert:

Für jeden dem Rechenauftrag vom System zugeteilten Rechenkern wird ein sogenannter *Wächterprozess* gestartet, der folgende Aufgaben übernimmt:

- Datenverteilung an den betreffenden Rechenkern,
- Auslösen der Abarbeitung des Spiels,
- Rücktransfer der Ergebnisse nach Abschluss des Spiels,
- Start des nächsten Spiels, sobald eins beendet und der Rechenkern wieder verfügbar ist.

Die Wächterprozesse werden zentral von einem sogenannten Elternprozess überwacht. Dessen Aufgaben sind:

- Transfer der Daten vom und zum Frontend des Clusters,
- Erzeugung eines Stapels mit den zu rechnenden Spielen,
- Start der Wächterprozesses,
- Verarbeiten der relevanten Daten, sobald der Spielestapel geleert ist.

Der Ablauf eines probabilistischen Rechenlaufs kann demnach folgendermaßen beschrieben werden (s. Abb. 7.1):

Mittels der Schaltfläche *Submit* wird XENIA durch den Benutzer angewiesen, den Rechenlauf zu starten. Dabei werden Kopien

- der JSON-Datei (JSON),
- der Stichprobendatei (sam),
- aller weiteren eventuell benötigten Dateien (Dat) sowie
- der benötigten ausführbaren Programmdateien der Rechenmodule (Exe)

an das Dateisystem des angegebenen Frontends übertragen. Anschließend wird dort ein auf das konkrete System abgestimmter Systembefehl (SysB) ausgeführt. Über diesen wird die Queue festgelegt, die vom Benutzer festgelegte Zahl von Rechenkernen angefordert, die Modulkette, d. h. die Reihenfolge der auszuführenden Programme definiert, und schließlich das Steuerskript dem Queueing-System (Q) übergeben. Sobald die angeforderten Rechenkerne zur Verfügung stehen, wird das Steuerskript (SS) auf einem dieser Rechenkerne ausgeführt. Diesem wird die Rolle des *Masters* zugewiesen, alle

übrigen Rechenkern werden als *Slaves* behandelt. Da der Master als solcher nur geringe Rechenressourcen benötigt, übernimmt er zusätzlich selbst die Funktion eines Slaves. Der Arbeitsumgebung des Masters wird die Modulreihenfolge als Umgebungsvariable übergeben.

Das Steuerskript wird auf dem Master ausgeführt und bildet dort den Elternprozess (PE). Dieser legt den Spielestapel (SpieIS) an und generiert zwei weitere Skripte. Das erste (SW) wird einmal je Rechenknoten auf dem Master ausgeführt und löst dort jeweils einen Wächterprozess (PW) aus. Die Wächterprozesse lesen jeweils die Nummer des obersten Spiels aus dem Spielestapel, transferieren die entsprechenden Daten und ausführbaren Programme zu ihrem Slave und starten dort das zweite Skript (SM), welches einen Prozess (PM) auslöst, der die spielspezifische JSON-Datei erzeugt und die Modulkette steuert. Sobald die Kontrolle an den zuständigen Wächterprozess zurückgegeben wird, transferiert dieser die Ergebnisdateien zum Master, löscht alle Daten auf dem Slave und fährt dann mit dem nächsten Spiel aus dem Spielestapel fort. Wenn der Spielestapel abgearbeitet ist, liegen somit alle Ergebnisdaten auf dem Master vor. Der Elternprozess fügt diese in der richtigen Reihenfolge zusammen und transferiert sie zum Dateisystem des Frontends. Damit ist der Rechenlauf beendet. Mittels XENIA kann der Benutzer durch die Schaltfläche *Finalize* den Rechenauftrag abschließen und die Übertragung ausgewählter Daten vom Frontend in die Datenbank veranlassen.

Das Steuerskript wurde in der Skriptsprache *Python* realisiert. Dadurch ist eine betriebssystemübergreifende Implementierung möglich. Weiterhin kann auf eine umfangreiche Modullbibliothek, die u.a. Threading und Queueing bereitstellt, zurückgegriffen werden.

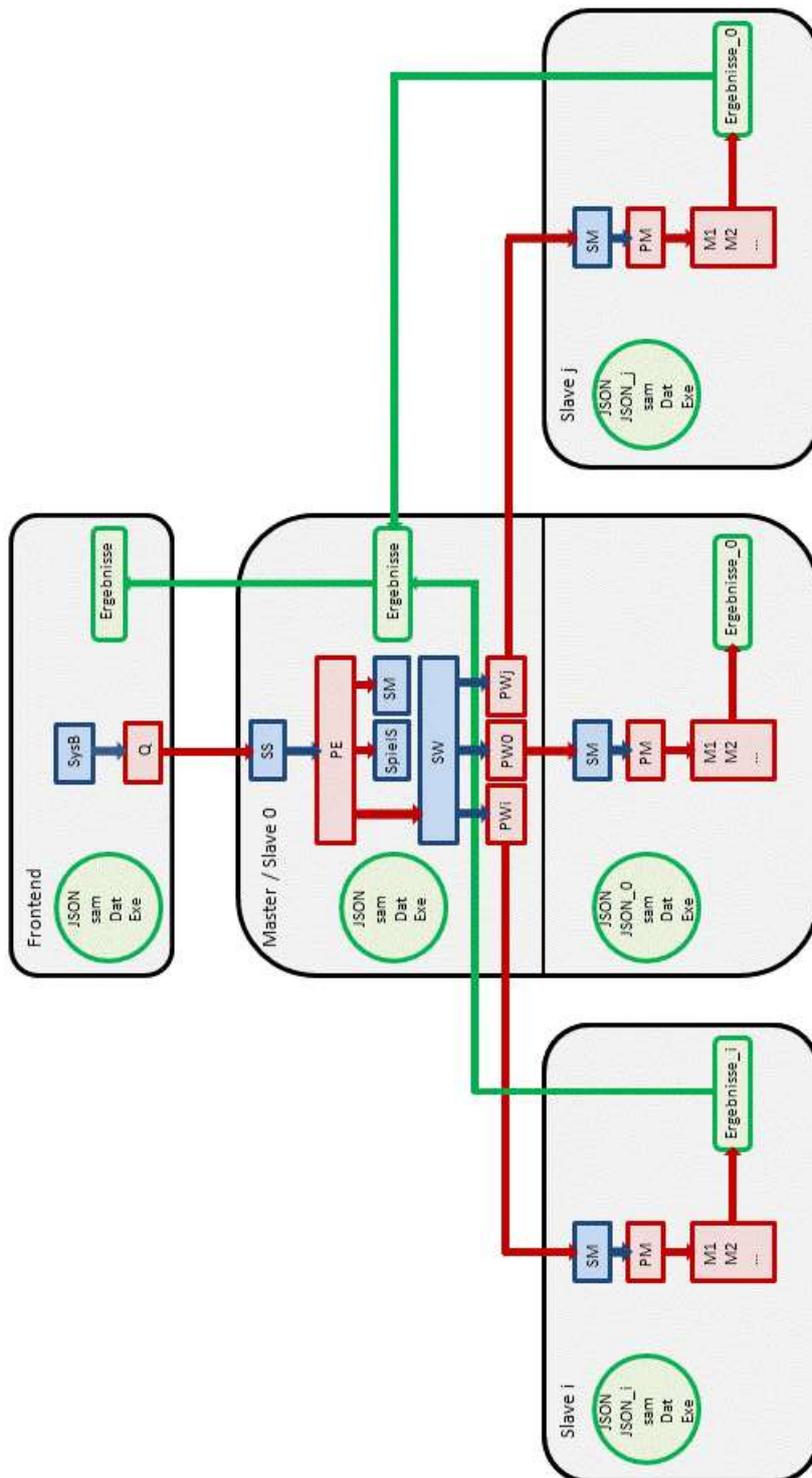


Abb. 7.1 Steuerung des Programmablaufs

## **8 Anpassung des Rechenmoduls LOPOS**

### **8.1 Ausgangssituation**

Das EMOS-Modul LOPOS modelliert die Radionuklidausbreitungsvorgänge im Nahbereich eines Endlagers, das aus einem Netzwerk aus Kammern und Strecken besteht. Es stellt das aufwändigste der bestehenden EMOS-Module dar und wurde während der letzten 25 Jahre kontinuierlich erweitert und an spezielle Anforderungen angepasst. Dabei ist ein verteilter und relativ ballastreicher FORTRAN-Code entstanden, der im Detail sorgsam durchdachte und effektive Prozeduren enthält, im Ganzen aber strukturell unübersichtlich geworden ist und auf heute als veraltet anzusehenden Programmier-techniken beruht. Ein großer Nachteil dieses Codes ist seine schlechte Wartbarkeit. Weiterentwicklungen waren zuletzt mit unangemessen hohem Zeitaufwand verbunden.

Eine Umstellung von LOPOS auf moderne, wartungs- und weiterentwicklungsfreundliche Programmstrukturen ist nicht durch eine einfache "Übersetzung" des Quellcodes in eine andere Programmiersprache zu bewerkstelligen. Es ist vielmehr erforderlich, das Programm komplett neu aufzubauen, ohne dabei das während der langjährigen Entwicklungsphase eingeflossene Know-how zu verlieren. Dies ist eine anspruchsvolle und mit umfangreichen Verifizierungstests verbundene Aufgabe, die im Rahmen der hier beschriebenen Projektphase nicht zu leisten war und auf eine spätere Bearbeitungsphase verschoben werden musste. Der bestehende LOPOS-Code wird deshalb noch für eine Reihe von Jahren für Anwendungs- und Verifikationsrechnungen benötigt.

### **8.2 Erforderliche Anpassungen**

Die beschriebene Problematik hat zu der Entscheidung geführt, als Übergangslösung das bestehende LOPOS-Modul in das neue Programmpaket RepoTREND zu integrieren. Dabei wurden keine inhaltlichen Veränderungen durchgeführt, d. h., die Programmstrukturen und Algorithmen wurden beibehalten. Im Quelltext wurden lediglich an einigen Stellen kleinere syntaktische Modifikationen zur Verbesserung der Lesbarkeit durchgeführt. Das Datenformat der Ausgabedateien wird vorerst beibehalten.

Bedingt durch die Eigenschaften des neuen Dateneingabe- und -verwaltungswerkzeugs XENIA war jedoch eine Umarbeitung der Einleseroutinen erforderlich. Weitere ProgrammROUTINEN waren im Hinblick auf erweiterte Steuerungs- und Nutzungsmöglichkeiten zu modifizieren. Im Einzelnen wurden folgende geänderte Anforderungen berücksichtigt:

- Elementnamen können aus drei (statt bisher maximal zwei) Buchstaben bestehen.
- Die Datensätze für elementsspezifische Daten werden mittels eines Bezeichners statt eines Indexes zugeordnet.
- Die den Einlagerungssegmenten zugeordneten Abfallmischungen werden im Rahmen der segmentspezifischen Daten unmittelbar über ihre Zusammensetzung aus Einzelabfällen definiert. Bisher konnten benannte Abfallmischungen in einer speziellen Eingabedatei definiert und den Einlagerungssegmenten zugewiesen werden. Dieses unübersichtliche Verfahren entfällt.
- Es wird zwischen Radionukliden und stabilen Isotopen unterschieden. Bisher wurden alle Schadstoffe einheitlich als Radionuklide behandelt, stabile Isotope mussten mittels einer sehr großen Halbwertszeit dargestellt werden. Dieses Vorgehen führte dementsprechend zu sehr kleinen Inventarwerten in Becquerel.
- Es können jetzt mehrere Segmente als Schnittstellen zum Deckgebirge definiert werden, um z. B. mehrere Transportpfade zu betrachten.
- Die Ausgabe wurde in zweierlei Hinsicht erweitert:
  - Die Einheit der Ergebnisse wird für Radionuklide und stabile Isotope unterschieden, wobei die Werte für stabile Nuklide stets in [mol] ausgegeben werden (s. Anhang B).
  - Die Anzahl der Schnittstellen zum Deckgebirge wird explizit angegeben. Die Namen der Schnittstellensegmente sind dann die ersten Namen aus der Segmentliste in der Vorspanndatei (s. Anhang B).

Weiterhin waren aus dem Quelltext diejenigen Routinen zu entfernen, die die Zuweisung von unabhängigen und abhängigen statistischen Variablen vornehmen. Diese Zuweisung wird künftig außerhalb der Rechenmodule von einem eigens programmierten Statistik-Rahmen (s. Kapitel 6) vorgenommen.

### 8.3 Umsetzung der Anpassungen

Als Ausgangsbasis für das modifizierte LOPOS-Modul wurde die Version 7.02 verwendet. Diese ist aus einer Vereinigung früher existierender Spezialversionen für verschiedene Anwendungszwecke (LZSA Asse, LZSA ERAM, LZSA für nicht spezifizierte Endlager) hervorgegangen, die bislang parallel existierten und jeweils für den betreffenden Anwendungsfall relevante Effekte und Modellbesonderheiten berücksichtigen.

An den FORTRAN-Routinen der Version 7.02 wurden die notwendigen Änderungen im Sinne der genannten Anforderungen durchgeführt. Für das Einlesen der JSON-Datei wird eine spezielle FORTRAN-Schnittstelle eingesetzt, die Bibliothek JSON-C verwendet. Die Methoden zum lesenden Zugriff und zum Parsen der JSON-Datei wurden im neu entwickelten Modul *GetJSON* gekapselt. Dieses Modul definiert alle notwendigen Datentypen mit ihren statischen Dimensionierungen und kann auch für andere EMOS-Module verwendet werden.

Die Verifikation des angepassten Rechenmoduls LOPOS wurde anhand der Anwendungsrechnungen ERAM und ISIBEL durchgeführt.

## Literaturverzeichnis

- /BEA 79/ Bear, J.: Hydraulics of Groundwater, McGraw-Hill Book Company, 1979
- /BEA 87/ Bear, J., Verruijt, A.: Modeling Groundwater Flow and Pollution. Theory and Application of Transport in Porous Media, D, Reidel Publishing Company, 1987
- /BOE 97/ Boese, B.: Inhaltliche Beschreibung des Präprozessors STATIST, Interner Bericht, GRS, 1997
- /BOE 98/ Boese, B.: Inhaltliche Beschreibung des Postprozessors EmosStatist, Interner Bericht, GRS 1998.
- /BUH 99/ Buhmann, D.: Das Programmpaket EMOS. Ein Instrumentarium zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern, GRS-Bericht 159, Braunschweig, 1999.
- /CON 80/ Conover, W. J.: Practical Nonparametric Statistics, John Wiley & Sons, 1980.
- /GEN 78/ Van Genuchten, M. Th., Gray, W.: Analysis of some dispersion corrected numerical schemes for solution of the transport equation, Int. J. Numer. Meth. Eng., vol. 12, 347-404, 1978.
- /HUY 83/ Huyakorn, P. S., Pinder, G. F.: Computational methods in subsurface flow, ACADAMIC PRESS, INC.. London, 1983.
- /KIN 92/ Kinzelbach, B.: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1992.
- /KNA 00/ Knaber, P., Angermann, L.: Numerik partieller Differentialgleichungen, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2000.

- /KUE 96/ Kühle, T., Zude, F., Lührmann, L.: Das eindimensionale Transportprogramm CHET1 unter Berücksichtigung der Sorption nach dem  $K_d$ -Konzept, GRS-Bericht 124, Braunschweig, 1996.
- /LAN 03/ Langtangen, H. P.: Computational Partial Differential Equations. Numerical Methods and Diffpack Programming, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999, 2003.
- /LAP 82/ Lapidus, L., Pinder, G.F.: Numerical Solution of Partial Differential Equation in Science and Engineering, John Wiley & Sons, New York, 1982.
- /LUE 01/ Lührmann, L.: Transportmodellierung in geklüftet-porösen Medien, Abschlussbericht, GRS 2001, nicht veröffentlicht.
- /LUE 96/ Lührmann, L., Nosek, U.: Das eindimensionale Transportprogramm CHET2 unter Berücksichtigung nichtlinearer, elementspezifischer Gleichgewichtssorption, GRS-Bericht 125, Braunschweig, 1996.
- /LUE 99/ Lührmann, L.: Modellierung des kolloidbeeinflussten Schadstofftransports mit dem Rechenprogramm TRAPIC, GRS-Bericht 149, GRS, 1999.
- /MAR 86/ Marsily, G. de: Quantitative Hydrogeology, Academic Press, Inc., San Diego, 1986.
- /RAU 02/ Rausch, R., Schäfer, W., Wagner, Ch.: Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser, Gebrüder Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 2002.
- /SAC 84/ Sachs, L.: Angewandte Statistik, Springer-Verlang 1984.
- /SAL 00/ Saltelli, A. (ed): Sensitivity Analysis, John Wiley & Sons 2000.
- /STR 96/ Strock, R., Buhmann, D., Hirsekorn, R.-P., Kühle, T., Lührmann, L.: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5, GRS-Bericht 122, Braunschweig, 1996.
- /WWW EC/ <http://www.eclipse.org/>, Homepage von Eclipse

/WWW GA/ [http://de.wikipedia.org/wiki/Gau%C3%9Fsches\\_Eliminationsverfahren](http://de.wikipedia.org/wiki/Gau%C3%9Fsches_Eliminationsverfahren), Wikipedia.

/WWW GS/ <http://www.gnu.org/software/gsl/>, Benutzerdokumentation von GNU.

/WWW HD/ <http://www.hdfgroup.org/HDF5/>, Homepage des HDF5-Projekts.

/WWW JS/ <http://www.json.org/json-de.html>, Homepage des Formats JSON.

/WWW TH/ <http://de.wikipedia.org/wiki/Thomas-Algorithmus>, Wikipedia.

/WWW SL/ <http://simlab.jrc.ec.europa.eu/>, Homepage von Simlab 3.2

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abb. 3.1</b>	Hauptmenü der Bedienungsfläche XENIA .....	9
<b>Abb. 3.2</b>	Schematische Darstellung der Einbindung der Datenbank .....	10
<b>Abb. 3.3</b>	Beispiel für den Inhalt einer JSON-Datei.....	11
<b>Abb. 3.4</b>	Ansicht zur Auswahl von Rechenmodulen .....	12
<b>Abb. 3.5</b>	Ansicht für Dateneingabe.....	13
<b>Abb. 3.6</b>	Ansicht für Eingaben zum Starten von Rechenläufen .....	14
<b>Abb. 3.7</b>	Rechenlauf archivieren .....	15
<b>Abb. 3.8</b>	Eingabeoberfläche zum Hinzufügen von Dokumenten.....	15
<b>Abb. 5.1</b>	Ausschnitt aus dem Transportweg mit Zuordnung der Parameter.....	33
<b>Abb. 5.2</b>	Numerische Dispersion.....	64
<b>Abb. 5.3</b>	Massenstrom durch eine Oberfläche .....	86
<b>Abb. 5.4</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses ohne Zerfall und ohne Rückhaltung.....	99
<b>Abb. 5.5</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall bei der Halbwertszeit $T = 150$ a, ohne Rückhaltung .....	100
<b>Abb. 5.6</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen und mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösungen für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall bei der Halbwertszeit $T = 1,5$ a, ohne Rückhaltung.....	102
<b>Abb. 5.7</b>	Vergleich der mit CHET1 und mit GeoTREND-SP ermittelten numerischen Ergebnisse für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Zerfall bei der Halbwertszeit $T = 1,5$ a, ohne Rückhaltung .....	104

<b>Abb. 5.8</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung nach dem $K_d$ -Konzept, ohne Zerfall.....	106
<b>Abb. 5.9</b>	Mit GeoTREND-SP ermittelte numerische Ergebnisse für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung entsprechend der Langmuir-Isotherme, ohne Zerfall.....	108
<b>Abb. 5.10</b>	Mit GeoTREND-SP ermittelte numerische Ergebnisse für die Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses mit Rückhaltung entsprechend der Freundlich-Isotherme, ohne Zerfall.....	109
<b>Abb. 5.11</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen und mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung zur Simulation zur Kontrolle der Massenerhaltung beim Zerfall in einer Nuklidkette.....	111
<b>Abb. 5.12</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen und mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung zur Simulation eines Dauergleichgewichts beim Zerfall in einer Nuklidkette.....	113
<b>Abb. 5.13</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Schadstoffausbreitung bei einer permanenten Quelle ohne Zerfall und ohne Rückhaltung.....	116
<b>Abb. 5.14</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der analytischen sowie mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösung für die Schadstoffausbreitung bei einer permanenten Quelle mit Zerfall bei der Halbwertszeit $T = 150$ a, ohne Rückhaltung.....	117
<b>Abb. 5.15</b>	Vergleich der mit GeoTREND-SP berechneten Ergebnisse mit der mit CHET1 ermittelten numerischen Lösungen für eine ERAM-Simulation....	119
<b>Abb. 5.16</b>	Abbruch der Rechnung für Mo-93 in CHET1 bei einer Endlager-Simulation.....	121
<b>Abb. 6.1</b>	Aufbau und Funktion des RepoTREND-Statistikrahmens .....	136
<b>Abb. 7.1</b>	Steuerung des Programmablaufs .....	150

**Abb. B.1** Schnittstellendefinition in XENIA

## Tabellenverzeichnis

<b>Tab. 5.1</b>	Vergleich von Rechenzeiten und Speicherbedarf bei unterschiedlichen Programmeinstellungen.....	83
<b>Tab. 5.2</b>	Parameter für die Testsimulation zur Ausbreitung eines $\delta$ -Impulses.....	98
<b>Tab. 5.3</b>	Änderung der Gesamtmasse eines Radionuklids mit $T = 1,5$ a, berechnet analytisch und numerisch mit Crank-Nicolson (CN) und implizitem Euler-Verfahren (EI).....	103
<b>Tab. 5.4</b>	Parametersetzung bei Berücksichtigung von Rückhaltung nach $K_d$ -Konzept.....	106
<b>Tab. 5.5</b>	Parametersetzung bei Berücksichtigung der Rückhaltung entsprechend der Langmuir-Isotherme.....	107
<b>Tab. 5.6</b>	Parametersetzung bei Berücksichtigung der Rückhaltung entsprechend der Freundlich-Isotherme.....	108
<b>Tab. 5.7</b>	Parameter der Testnuklide im Testfall zur Überprüfung der Massenerhaltung.....	110
<b>Tab. 5.8</b>	Nuklidmasse zu einigen gewählten Zeitpunkten.....	112
<b>Tab. 5.9</b>	Parameter der Testnuklide in Testfall zum Dauergleichgewicht.....	113
<b>Tab. 5.10</b>	Parameter für die Testsimulation mit einer permanenter Schadstoffquelle.....	115
<b>Tab. 5.11</b>	Eigenschaften der Bereiche bei der Simulation eines Endlagers.....	118
<b>Tab. 5.12</b>	Eigenschaften der der Nuklide bei der Simulation eines Endlagers.....	119
<b>Tab. 5.13</b>	Erweiterungen für GeoTREND-SP.....	122
<b>Tab. 6.1</b>	Verteilungstypen und Parameter.....	137

## Anhang A Symbolverzeichnis

Die Liste gibt die wichtigsten im Text verwendeten Symbole an. Eine Reihe von Symbolen kann mit Indizes für einen Gitterknoten oder ein Element (Nuklid) versehen auftreten. Symbole, die nur einmal vorkommen, sind nicht aufgelistet. Ebenfalls nicht verzeichnet sind die Symbole, die als Kürzel oder Laufvariable in Algorithmen verwendet werden. Die angegebenen Maßeinheiten entsprechen den Maßeinheiten, die für die Realisierung der Rechenmodule relevant sind.

Symbol	Einheit	Beschreibung
$A$	$[\text{m}^2]$	Querschnittsfläche des Aquifers senkrecht zum Transportweg
$c$	$[\text{mol}/\text{m}^3]$	Konzentration eines im Fluid gelösten Schadstoffs
$c_{ad}$	$[\text{mol}/\text{kg}]$	Konzentration eines auf der Matrix adsorbierten Schadstoffs
$c_{\min}$	$[\text{mol}/\text{m}^3]$	minimale Konzentration bei Zeitschrittsteuerung
$Co$	$[-]$	Courant-Zahl
$D$	$[\text{m}^2/\text{a}]$	Dispersionskoeffizient
$D_m$	$[\text{m}^2/\text{a}]$	molekulare Diffusionskonstante
$k_1$	$[\text{m}^3/\text{kg}]$	Stoffkonstante der Freundlich-Isotherme
$K_d$	$[\text{m}^3/\text{kg}]$	Verteilungskoeffizient ( $K_d$ -Wert) der Henry-Isotherme
$K_L$	$[\text{m}^3/\text{kg}]$	Stoffkonstante (Bindungsaffinität) der Langmuir-Isotherme
$L$	$[\text{m}]$	Gesamtlänge des Transportwegs
$l_j$	$[-]$	relative Länge des Gebiets $j$
$m_a$	$[\text{kg}]$	atomare Masseneinheit

Symbol	Einheit	Beschreibung
$n$	[-]	Porosität
$N_j$	[-]	Anzahl der Blöcke im Gebiet $j$
$N(t)$	[-]	Anzahl der Atome zu einem Zeitpunkt $t$
$N_A$	[mol <sup>-1</sup> ]	Avogadro-Konstante
$p$	[-]	Exponent der Freundlich-Isotherme
$p_1$	[-]	Multiplikationsfaktor zur Vergrößerung der Zeitschrittlänge $\Delta t$
$p_2$	[-]	Multiplikationsfaktor zur Verkleinerung der Zeitschrittlänge $\Delta t$
$q$	[mol/a]	Schadstoffeinstromsrate
$t$	[a]	Zeit
$\Delta t$	[a]	Zeitschrittlänge
$\Delta t_{\max}$	[a]	oberes Limit für die Zeitschrittlänge
$\Delta t_{\min}$	[a]	unteres Limit für die Zeitschrittlänge
$u$	[m/a]	Abstandsgeschwindigkeit des Fluids
$\dot{V}$	[m <sup>3</sup> /a]	Volumenstrom
$\Delta x$	[m]	Blocklänge
$\alpha$	[m]	Dispersionslänge
$\kappa$	[mol/kg]	Beladungskapazität der Langmuir-Isotherme
$\lambda$	[a <sup>-1</sup> ]	Zerfallskonstante
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Gesteinsdichte
$\sigma$	[mol m <sup>-3</sup> a <sup>-1</sup> ]	volumenbezogener Quellterm

Symbol	Einheit	Beschreibung
$\Delta\chi$	[m]	Abstand zwischen zwei benachbarten Blockmittelpunkten
$\omega$	[-]	Gewichtsparemeter

## Anhang B Formatänderungen bei Ausgabedateien

Die Realisierung diverser neuer Funktionalitäten erforderte einige Modifikationen der Datenaustauschformate. In diesem Anhang wird über die eingeführten Änderungen berichtet.

### B.1 Mehrere Schnittstellen des Grubengebäudes mit dem Deckgebirge

Mit der letzten Version des EMOS-Nahfeldmoduls LOPOS ist es möglich, Massenströme und Nuklidkonzentrationen für mehrere Segmente in der rsk-Datei, aus der die weiterführenden Rechenmodule die Eingangsdaten beziehen, auszugeben. Die Anzahl dieser Segmente sowie ihre Bezeichnungen wurden bis jetzt nur in der med-Datei von LOPOS definiert. Die med-Datei wird von GeoTREND-SP jedoch nicht ausgewertet. Die erforderlichen Informationen wurden in die Vorspanndatei rvs integriert, so dass sie für GeoTREND-SP zugänglich sind. Die Formatänderung wird anhand folgenden Beispiels erläutert:

```
%%SEGMENT
      85      3
  DG500-L  DG574-L  F1-700-L  F2-700-L  FS1-700-L  FS2-700-L  FS1-679-L  FS2-679-L
  FS1-658-L  FS2-658-L  FS1-637-L  FS2-637-L  FS1-616-L  FS2-616-L  FS1-595-L  FS2-595-L
  F1-574-L  FS1-574-L  F2-574-L  FS2-574-L  F1-558-L  FS1-558-L  F2-558-L  FS2-558-L
  F1-532-L  FS1-532-L  F2-532-L  FS2-532-L  F1-500-L  F2-500-L  F1-496-L  F2-496-L
  V3-L      V10-L      V12-L      V14-L      UMAW-L      UMAW-ZL      MAW-ZL      MAW-BL
  S-MAW-L  A-UMAW-L  Carn_s.woL  Carn_s.ooL  Carn_o-L    Carn_w-L    Carn wo-L  Carn_s.o-L
  Carn_s.w-L  HA-4-L    JS725-L    JS725O-L    JS725W-L    V-LAW1B-L  V-AS725-LS-  JS725W-L
  S-JS725O-L  V-JS725-L  S-LAW1A-L  S-LAW2-L    S-LAW3-L    S-NK3-L     AS1-L     AS2-O-L
  AS2-W-L    LAW1B-L   LAW1A-L    LAW2-L     LAW3-OL     LAW3-WL     LAW4-OL     LAW4-WL
  NK3-L      V-AS725-L  V-JS725-L  V-LAW1B-L  S-ULAW1-L   ULAW1-L     AS1-L     H-ULAW1-L
  H-1.AS-L   H-4.Ca-L   FB-M-L     FB-N-L     FB-S-L
```

In der zweiten Zeile des Abschnitts %%SEGMENT sind zwei Zahlen enthalten. Die erste ist die Gesamtanzahl der aufgelisteten Segmente. Die zweite Zahl (Format I10) zeigt die Anzahl derjenigen Segmente, die bei der Ausgabe in die rsk-Datei berücksichtigt wurden. Diese Segmente werden in diesem Kontext *rsk-Segmete* genannt. Die weiterfolgende Segmentliste beginnt mit den Namen der rsk-Segmente. Das Beispiel besagt, dass die Segmentliste insgesamt 85 Segmente enthält, davon drei die rsk-Segmente sind, das sind DG500-L, DG574-L und F1-700-L.

Bei der Spezifikation des Rechenlaufs in XENIA bzw. in der JSON-Datei muss mindestens ein Segment als Schnittstelle zu dem Deckgebirge mit der entsprechenden Ortsangabe genannt werden (s. Abb. B.1). Legitim sind dabei nur Namen der rsk-Segmente.



**Abb. B.1** Schnittstellendefinition in XENIA

## B.2 Stabile Isotope

Wenn in der Liste der gerechneten Nuklide stabile Nuklide enthalten sind, so ist für Konzentrationen und Massenströme stabiler Isotope sowohl in den Eingabe- als auch in den Ausgabedateien stets die Maßeinheit [mol] (s. Abschnitt 5.5.12) anzunehmen. Die Größen, die sich auf Radionuklide beziehen, können dabei in Bq oder kg angegeben werden sein. In der Vorspanndatei \*vs des relevanten Rechenmoduls werden in diesem Fall im entsprechenden durch die Zeichenkette %%UNITS gekennzeichneten Abschnitt zwei verwendeten Maßeinheiten angegeben:

```
%%UNITS      Masseinheit fuer stabile Isotope MOL
              2
              BEQ      MOL
```

Wenn stabile Nuklide enthalten sind, die Maßeinheit MOL jedoch fehlt, bricht das Programm mit der entsprechenden Fehlermeldung ab.

Folgende getroffene Vereinbarung zur Konvention bezüglich der Auswahl von Tracer-Bezeichnungen sollte eingehalten werden:

Stabile Isotope werden meistens als Tracer im Modell eingesetzt. Häufig werden dabei virtuelle Substanzen mit ganz bestimmten Eigenschaften definiert. Um solche Tracer von den realen Stoffen leichter zu unterscheiden, ist es zu empfehlen, bei der Wahl ihrer Bezeichnung folgende Konvention einzuhalten:

- Tracer-Name besteht aus drei Buchstaben,
- der erste Buchstabe in der Tracer-Bezeichnung ist einer, der in der Tabelle der chemischen Elemente nicht an der ersten Position des Elementnamens verwendet wird (z. B. Q),
- der zweite und dritte Buchstabe werden entsprechend der Tracer-Anzahl in der alphabetischen Reihenfolge gewählt: Qaa, Qab,..., Qaz, Qba, Qbb,..., Qbz,...

### **B.3 Beobachtungsstellen und -zeitpunkte in der Vorspanndatei cvs**

In GeoTREND-SP werden nicht interpolierte sondern die tatsächlich berechnete Größen ausgegeben (s. Abschnitt 5.5.9). Die Beobachtungsstellen und Beobachtungszeitpunkte werden nach dem im Abschnitt 5.5.13 beschriebenen Verfahren ermittelt. In der Vorspanndatei cvs werden nicht mehr die vom Benutzer vorgegebene sondern diese ermittelten Größen in den entsprechenden durch Kennwörter %%ORT bzw. %ZEIT gekennzeichneten Textbereichen aufgelistet.

## Stichwortverzeichnis

### A

Abstand zwischen Blockmittelpunkten .....	34
Abstandsgeschwindigkeit .....	22
Adsorption .....	24
Adsorptionsisotherme .....	24, 59
Advektion .....	22
Aktivität .....	6
Anfangsbedingung .....	29, 49
archivieren Rechenlauf .....	14
Ausgabedateien .....	93
Ausstromrand .....	30, 54
automatische Zeitschrittsteuerung .....	77
Avogadro-Konstante .....	6, 162

### B

Beladungskapazität .....	25
benutzerspezifisches Modul, XENIA .....	8
Beobachtungsstelle .....	94, 166
Beobachtungszeitpunkt .....	93, 166
Bindungsaffinität .....	25
BioTREND .....	2
Block .....	32
block length (grid discretisation), Attribut .....	72
Blocklänge .....	33, 72

### C

Cauchy-Randbedingung .....	49
CHET1 .....	18
CHET2 .....	18
CHETLIN .....	18
CHETMAD .....	18
CHETNIS .....	18
Cluster .....	146
cok-Ausgabedatei .....	94
Courant-Kriterium .....	76

Crank-Nicolson-Verfahren .....	43
csk-Ausgabedatei .....	94
ctime-Ausgabedatei .....	94
cvs-Ausgabedatei .....	93
czk-Ausgabedatei .....	94

### D

Datenbank .....	9
deterministische Rechnung .....	124
deterministischer Rechenlauf .....	124, 129
Diffusion .....	22
Diffusionskonstante .....	23
Dirichlet-Randbedingung .....	49
Dispersion .....	23, 24
Dispersionskoeffizient .....	23
Dispersionslänge .....	23
Dispersionsterm .....	36

### E

effective zero for total amount, Attribut .....	91
Einstromrand .....	29, 49
Einstromrate .....	83
elementdata-FF .....	70
Elternprozess .....	148, 149
EMOSStatist .....	130
Erwartungswert .....	127
Euler Verfahren, explizit .....	42
Euler Verfahren, implizit .....	43
Euler-Verfahren, voll implizit .....	43
explizites Euler Verfahren .....	42
explizites Verfahren .....	42
Exponent der Freundlich-Isotherme .....	26

### F

FDM .....	31
FEM .....	31

Finalize, Schaltfläche .....	149	K <sub>d</sub> -Wert .....	25
Finite Differenzen Methode .....	31	Konfigurationsdatei .....	8
Finite Elemente Methode.....	31	konservativer Fall .....	49
Formatänderungen.....	164	Konsistenz.....	31, 63
Freundlich-Isotherme .....	26, 59, 107	Kontrollgrößen .....	87
Frontend .....	146, 147	Konvergenz .....	32
<b>G</b>		Korrelation, statistische.....	127
<i>Gaußsches Eliminationsverfahren</i> .....	59	Korrelationskoeffizient .....	127
Gebiet .....	32	kurzlebige Radionuklide .....	40, 81, 101
GeoTREND .....	2, 18	<b>L</b>	
GeoTREND-SP .....	2, 19, 20	Langmuir-Isotherme .....	25, 59, 107
Gesteinsdichte.....	26	Lanz-Korrektur der numerischen Dispersion ...	67
GetJSON, Modul von LOPOS.....	153	log-Datei .....	93, 95
gewichtetes harmonisches Mittel .....	37	LOPOS .....	151
Gitter-Peclet-Zahl .....	73	lower control limit in %, Attribut.....	77
Gitter-Peclet-Zahl-Kriterium .....	74	<b>M</b>	
GNU Scientific Library.....	59	Maßeinheit .....	5, 165
GSL.....	59	Massenerhaltung.....	110
<b>H</b>		Master .....	148
HDF5 .....	72	maximale Konzentrationswerte .....	88
Henry-Isotherme .....	25, 59	minimal concentration for output control, Attribut.....	89
Hilfsmodul, XENIA.....	8	minimal concentration for time control, Attribut .....	77
<b>I</b>		minimale Konzentration bei Zeitschrittsteuerung .....	80
implizites Euler-Verfahren.....	43	Modul .....	4
implizites Verfahren .....	42	Modul, XENIA.....	7, 11, 69
Interpolation.....	90	Modulbeschreibung.....	8
Iterationsverfahren .....	61	module ID, Attribut.....	93
<b>J</b>		Module Parameter, XENIA-Ansicht .....	12
Job Parameter and Execution, XENIA-Ansicht..	14	molekulare Diffusionskonstante.....	23
JSON .....	2, 68, 69, 133	<b>N</b>	
JsonModifier .....	141	NaTREND .....	2
<b>K</b>			
K <sub>d</sub> -Konzept.....	59, 105		

negative Konzentrationen .....	85	Retardationsfaktor .....	26, 59
negative Ströme .....	92	rsk-Segmete .....	164
Neumann-Randbedingung .....	49	Rückwertsdifferenz.....	34
no-flow-Randbedingung .....	53	RunListMaker.....	141
nucliddata.....	70	<b>S</b>	
Nuklidstrom .....	86	sam-Datei .....	139
numerische Dispersion .....	63	Schadstoff .....	4
<b>O</b>		Schadstoffstrom .....	86
obere Toleranzgrenze.....	77	Schnittstelle .....	164
Ortsdiskretisierung .....	72	Senke .....	27
Oszillation .....	63, 86	SIMLAB.....	130, 133, 134
out-Ausgabedatei .....	95	Slaves .....	149
OutCollector .....	143	Sorption .....	24
<b>P</b>		Spiel .....	124, 125
Parallelisierung .....	146	Spielestapel .....	149
Parameterabhängigkeiten.....	126	stabile Isotope .....	92, 96, 165
pbd-Ausgabedatei .....	95	stabile Nuklide .....	92, 96, 165
Peclet-Zahl.....	73	Stabilität .....	31, 62
Porosität .....	22	Standard Executable.....	12
PreStatist .....	139	Standardmodul, XENIA .....	8
probabilistische Rechnung .....	124	starten Rechenlauf .....	14
probabilistischer Rechenlauf .....	124, 129	Statist.....	137
Python .....	149	statistische Korrelationen.....	126, 127
<b>Q</b>		statistische Variablen .....	132
Quelle .....	27	STATOUT.....	130
Queueing-System .....	146	Steuerskript .....	145
<b>R</b>		Stichprobe .....	125
radioaktiver Zerfall .....	27, 38	Stichprobenziehung.....	125
radioaktives Dauergleichgewicht .....	112	Stoffkonstante der Freundlich-Isotherme .....	26
Randbedingung .....	29, 48, 49	strenge Abhängigkeiten.....	126
Read Only .....	13	Submit, Schaltfläche .....	148
Rechenmodul .....	4	<b>T</b>	
relative significant difference in %, Attribut.....	88	TDMA.....	58
RepoTREND .....	1	Thomas-Algorithmus .....	58
		Tracer.....	92, 166

Tracer-Name, Konvention .....	166	Verteilungskoeffizient .....	25
Transmissionsrandbedingung.....	30, 54, 87	Volumenstrom.....	22, 84
transversale Dispersion .....	60	Vorspanndatei .....	93, 165
TRAPIC .....	18	<b>W</b>	
Trichter-Konzept.....	60	Wächterprozess.....	148, 149
Tridiagonalmatrix-Algorithmus .....	58	<b>X</b>	
<b>U</b>		XENIA.....	2, 7
Übergabestelle .....	94	<b>Z</b>	
unit, Attribut.....	96	Zeitdiskretisierung.....	76
Unstetigkeit .....	78	Zeitschrittlänge.....	76
untere Toleranzgrenze .....	77	Zeitschrittsteuerung .....	77
upper control limit in %, Attribut .....	77	Zerfall.....	27, 38
up-wind-Schema.....	34	Zerfallskonstante .....	6, 162
User Executable .....	12		
<b>V</b>			
Varianz.....	127		

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

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

Forschungszentrum  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200  
**10719 Berlin**  
Telefon +49 30 88589-0  
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4  
**38122 Braunschweig**  
Telefon +49 531 8012-0  
Telefax +49 531 8012-200

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