



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

**Das Programm-
paket EMOS zur
Analyse der
Langzeitsicherheit
eines Endlagers
für radioaktive
Abfälle**

Version 5



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

Das Programm-
paket EMOS zur
Analyse der
Langzeitsicherheit
eines Endlagers
für radioaktive
Abfälle

Version 5

R. Storck, D. Buhmann,
R.-P. Hirsekorn, T. Kühle,
L. Lührmann

Braunschweig
März 1996



**GSF-Forschungszentrum
für Umwelt und Gesundheit
GmbH**

Institut für Tieflagerung

**GRS - 122
ISBN 3-923875-75-4**

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) unter dem Förderkennzeichen 02 E 8522 3 gefördert. Im Zeitraum bis Juni 1995 wurden die Arbeiten vom GSF-Forschungszentrum am Institut für Tieflagerung in Braunschweig durchgeführt, ab Juli 1995 von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH im neugegründeten Fachbereich Endlagersicherheitsforschung. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt allein bei den Autoren.

Vorwort

V-1 Einleitung

Das ursprünglich von der TU Berlin entwickelte Instrumentarium für die Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers in tiefen geologischen Formationen wurde seit 1984 vom GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH weiterentwickelt. Im Juli 1995 ist dieser Aufgabenbereich von der GSF zur Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH übergegangen. Als Ergebnis lagen zu Beginn des vorliegenden Vorhabens eine dokumentierte Version des Programmpakets EMOS zur Konsequenzanalyse und des Programms SWIFT zur Grundwasserberechnung vor [1], [2].

Der vorliegende Abschlußbericht dokumentiert die Ergebnisse des sonderfinanzierten Vorhabens des Bundesministeriums für Forschung und Technologie (BMFT) - heute Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) - in der Zeit vom 01.09.1991 bis 31.12.1995, Förderkennzeichen 02 E 8522 3. In diesem Vorhaben sollten die Verfahren zur Nuklidausbreitung im Deckgebirge und zur Nuklidfreisetzung aus dem Grubengebäude weiterentwickelt werden. Die Ergebnisse aus dem FE-Vorhaben sind in den folgenden Berichten niedergelegt:

- GRS-122 Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5
- GRS-123 Weiterentwickelte Modellansätze chemischer und physikalischer Effekte im Grubengebäude eines Endlagers im Salinar.
- GRS-124 Das eindimensionale Transportprogramm CHET1 unter Berücksichtigung der Sorption nach dem K_d -Konzept.
- GRS-125 Das eindimensionale Transportprogramm CHET2 unter Berücksichtigung nichtlinearer, elementspezifischer Gleichgewichtssorption.

Das vorliegende Vorwort zum Abschluß des genannten sonderfinanzierten Vorhabens ist allen vier aufgeführten Berichten gemeinsam. Es dient der zusammenfassenden

Darstellung der durchgeführten Arbeiten und der erzielten Ergebnisse sowie der Bewertung des erreichten Entwicklungsstandes.

V-2 Allgemeine Zielsetzung

Das in den zurückliegenden Jahren erarbeitete sicherheitsanalytische Instrumentarium sollte im Rahmen eines sonderfinanzierten Vorhabens hinsichtlich der Modellierung des Nuklidtransports im Deckgebirge und hinsichtlich der Modellierung der Nuklidfreisetzung aus dem Grubengebäude erweitert werden. Als Grundlage für den Entwicklungsbedarf dienten Themen, die im Rahmenplan Endlagersicherheit als dringend bezeichnet wurden [3].

Zur Berechnung der Nuklidausbreitung im Deckgebirge sollte ein neuer Rechencode entwickelt werden, der unterschiedliche Sorptionsansätze verarbeiten und in das Programmpaket EMOS integriert werden kann.

Die modellmäßige Beschreibung der Freisetzung sollte bezüglich ausgewählter Vorgänge im Grubengebäude erweitert werden, die mit dem Laugentransport, der Gebirgskonvergenz, der Sorption und der Mobilisierung von Schadstoffen in Zusammenhang stehen.

Der Entwicklungsstand der Version 5 des Programmpakets EMOS sollte in einer Dokumentation festgehalten werden. Die Dokumentation ist Bestandteil der Abschlußberichte dieses Vorhabens und enthält eine Beschreibung der Module REPOS5, CHET1, CHET2 und EXPOS sowie der Dateien zur Programmsteuerung.

V-3 Ziele und Ergebnisse zur Entwicklung eines Ausbreitungsprogramms

Die Ausbreitungsrechnungen für das Deckgebirge wurden in der vorhergehenden Version 4 des Programmpakets EMOS mit dem Programm TROUGH durchgeführt. Dieses Programm konnte Sorption nur mit einem linearen Ansatz mit Hilfe des K_d -Konzeptes berücksichtigen und konnte außerdem nicht ausreichend an die Erfordernisse bei Monte-Carlo-Simulationen angepaßt werden. Daher ergab sich die Notwendigkeit, einen

neuen eindimensionalen Transportcode zu entwickeln, der unterschiedliche Sorptionsansätze verarbeiten und besser in das Programmpaket EMOS integriert werden kann.

Die Entwicklung des neuen Ausbreitungsprogramms erfolgte in zwei Schritten. Zunächst wurde das grundsätzliche Rechenverfahren unter Verwendung des K_d -Konzeptes entwickelt und in dem Programmcode CHET1 implementiert. In dem zweiten Schritt wurde das Rechenverfahren um nichtlineare Sorptionsansätze erweitert und in der Version CHET2 realisiert.

Die numerische Lösung der Transportgleichung erfolgt für die Versionen CHET1 und CHET2 nach der Methode der Finiten Differenzen mit einem in der Zeit expliziten Verfahren. Der radioaktive Zerfall wird mit einem analytischen Verfahren für Einzelnuclide, lineare Ketten und verzweigte Zerfallsreihen berechnet. Es können heterogene Gebiete mit unterschiedlichen Eigenschaften berücksichtigt werden. Einzelne Parameter können innerhalb des in EMOS implementierten Monte-Carlo-Verfahrens für probabilistische Rechnungen unabhängig variiert werden. Lineare Sorptionsansätze können in beiden Versionen berücksichtigt werden, benötigen aber in der Version CHET2 aufgrund der Abarbeitung elementgleicher Nuclide innerhalb einer Zeitschleife größere Rechenzeiten.

V-3.1 Transportprogramm mit Sorption nach dem K_d -Konzept; CHET1

Im Ausbreitungsprogramm CHET1 wird die Sorption entlang des Transportweges mit einem linearen Ansatz nach dem K_d -Konzept berücksichtigt. Die zur Erhaltung der Stabilität maximal erlaubten Zeitschrittweiten hängen vom Retardationsfaktor ab und sind somit nuklidspezifisch. Daher wird in CHET1 der Transport der Nuclide soweit wie möglich nacheinander abgearbeitet. Nuklidketten werden jedoch aufgrund der gegenseitigen Beeinflussung durch den radioaktiven Zerfall innerhalb der Zeitschleife gerechnet.

Eine Reihe automatisch arbeitender Voreinstellungen, insbesondere die Diskretisierung von Ort und Zeit, sowie die Anbindung an verschiedene Prä- und Postprozessoren gewährleisten die einfache Bedienbarkeit des Rechencodes CHET1. Das Programm wird seit der Fertigstellung im Rahmen von EMOS-Anwendungsrechnungen verwendet.

Zur Überprüfung der korrekten Implementierung der numerischen Algorithmen wurden umfangreiche Verifikationen durchgeführt, einerseits durch Vergleich mit analytischen Lösungen, andererseits durch Vergleich mit anderen numerischen Rechnungen. Es zeigte sich, daß die Ergebnisse der Rechnungen gut mit den analytischen Lösungen und mit denen anderer numerischer Verfahren übereinstimmen. Wegen der analytischen Behandlung des radioaktiven Zerfalls zeigen die Verifikationsrechnungen bezüglich des radioaktiven Zerfalls hervorragende Resultate. Mit der in CHET1 durchgeführten Korrektur der physikalischen durch die numerische Dispersion wird darüberhinaus die Näherungsgenauigkeit des numerischen Verfahrens erhöht.

Die Analytik für den radioaktiven Zerfall und die Korrektur der numerischen Dispersion führen zu einer gegenüber dem Programm TROUGH deutlichen Verbesserung der Approximationsgüte. Die Abarbeitung der Transportalgorithmen nuklid- bzw. nuklidkettenweise bringt zudem eine Ersparnis in der benötigten Rechenzeit. Diese Zeitersparnis ist abhängig von den berücksichtigten Radionukliden und betrug bei einer konkreten Anwendungsrechnung ca. 50%.

Die Dokumentation des Programms CHET1 gibt einen Überblick über die Theorie, die Umsetzung in den Programmcode und die Verifikationsrechnungen. Außerdem werden in einem Anhang die verwendeten COMMON-Blöcke aufgelistet. Die Dateneingabe über die Job-Input-Datei und die benötigten Eingabedateien werden in der EMOS-Dokumentation beschrieben.

V-3.2 Transportprogramm mit Berücksichtigung nichtlinearer Sorption; CHET2

Das Ausbreitungsprogramm CHET2 ist eine Erweiterung des Programms CHET1 um nichtlineare Sorptionsansätze. Es können neben linearen Ansätzen nach dem K_d -Konzept auch nichtlineare Ansätze mit Langmuir- und Freundlich-Isothermen verwendet werden. Die Aufweitung der Schadstoffwolke aufgrund transversaler Dispersion darf bei konzentrationsabhängiger Rückhaltung nicht vernachlässigt werden. In CHET2 wird daher mit Hilfe eines einfachen Ansatzes die transversale Dispersion berücksichtigt und ihr Einfluß auf das Ausbreitungsverhalten der Radionuklide aufgezeigt. Aufgrund der elementspezifischen Sorption müssen in CHET2 nicht zur Zerfallsketten sondern auch

Nuklide desselben Elements innerhalb einer Zeitschleife abgearbeitet werden. Dies kann bei dem K_d -Konzept gegenüber CHET1 zu einer Verlangsamung der Rechnungen führen.

Die mit CHET1 erzielten Verifikationsergebnisse bleiben wegen der identischen Diskretisierungsverfahren auch für CHET2 gültig. Mit dem Programm CHET2 wurden im Hinblick auf die nichtlinearen Sorptionsansätze und die korrekte Behandlung des radioaktiven Zerfalls innerhalb von Zerfallsreihen weitere Verifikationsrechnungen anhand von halbanalytischen Lösungen durchgeführt. Es zeigte sich, daß die Nichtlinearitäten zuverlässig aufgelöst werden. Wird eine Korrektur der numerischen Dispersion auch für nichtlineare Sorptionsansätze durchgeführt, so wird dadurch die Approximationsgenauigkeit des verwendeten numerischen Verfahrens deutlich verbessert. Wie in der Version CHET1 zeigen die Verifikationsrechnungen bezüglich des radioaktiven Zerfalls wegen dessen analytischer Behandlung hervorragende Resultate.

Das Ausbreitungsprogramm CHET2 wurde in das Programmpaket EMOS implementiert. Im Rahmen von Anwendungsrechnungen wurden die verwendeten Sorptionskonzepte miteinander verglichen. Beim Übergang von den linearen auf die nichtlinearen Sorptionsansätze ergaben sich dabei bei einigen Nukliden deutliche Unterschiede im Ausbreitungsverhalten. Bei Verwendung der Freundlich-Isotherme führte die Verringerung der Transportgeschwindigkeit der Mutternuklide innerhalb der Uran-Zerfallsreihe zu einer um einen Faktor fünf höheren Dosisbelastung durch die Tochternuklide.

Die Dokumentation des Programms CHET2 gibt einen Überblick über die Theorie, die Umsetzung in den Programmcode sowie die Verifikations- und Anwendungsrechnungen. Außerdem werden in einem Anhang die verwendeten COMMON-Blöcke aufgelistet. Die Dateneingabe über die Job-Input-Datei und die benötigten Eingabedateien werden in der EMOS-Dokumentation beschrieben.

V-4 Ziele und Ergebnisse zur Weiterentwicklung der Modelle zur Freisetzung

Die Freisetzung von Schadstoffen aus dem Grubengebäude wird mit dem Modul REPOS des Programmpakets EMOS berechnet. Der Schadstofftransport wird dabei durch die Laugenbewegung und andere physikalische und chemische Effekte hervor-

rufen, bzw. beeinflusst. Ziel des FE-Vorhabens war die Entwicklung des Moduls REPOS5, in dem die folgenden Effekte weiterentwickelt oder überprüft sein sollten:

- Auswirkung der Sorption in versetzten Strecken und Einlagerungsorten,
- Beschreibung des Ausfalls von Abfallbehältern durch eine Zufallsgröße,
- Laugenbewegung in teilweise laugegefüllten Streckenabschnitten eines Grubengebäudes,
- Vergleich der Konvergenzdaten des TSS-Versuchs mit Ergebnissen von Modellrechnungen.

V-4.1 Auswirkung der Sorption in versetzten Strecken und Einlagerungsorten

Sorption von Radionukliden am Versatz wurde in bisherigen Sicherheitsanalysen nicht berücksichtigt. Die experimentellen Daten zeigten auch, daß diese Vernachlässigung für die relevanten Radionuklide und für Salzgrus als Versatz gerechtfertigt ist. In der vorliegenden Untersuchung sollte geklärt werden, welchen Einfluß die Sorption an eventuellen Zuschlagstoffen auf die Radionuklidfreisetzung haben kann. Zu diesem Zweck wurden K_d -Werte über eine große Bandbreite variiert und die Freisetzungsraten für ein vereinfachtes Grubengebäude berechnet. Es wurden einige Segmentmodelle innerhalb des Rechencodes erweitert, um die Sorptionseffekte berücksichtigen zu können. Diese Modelle können in zukünftigen Rechnungen verwendet werden.

Es zeigte sich, daß die Freisetzung aus dem Grubengebäude unterschiedlich beeinflusst wird, je nachdem in welchem Teilbereich des Grubengebäudes die Sorption stattfindet. Unter der Annahme einer vollständigen Durchmischung in einem Segment, d.h. einer konstanten Konzentration der Radionuklide innerhalb eines Segments, ist die Sorption im allgemeinen effektiver, wenn sie im Einlagerungsbereich wirkt als wenn sie im nachfolgenden Segment angenommen wird. Unter der Annahme eines Konzentrationsgradienten entlang eines Segments gilt die umgekehrte Aussage. Zusätzlich ist die Freisetzung von den Löslichkeiten der Radionuklide abhängig. Bei schwerlöslichen Radionukliden ist der Einfluß der Sorption geringer als bei leichtlöslichen Radionukliden.

Eine merkliche Rückhaltung ist ab K_d -Werten von etwa $10^{-4} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}$ zu beobachten. Das zeigt, daß die Sorption einen großen Einfluß auf die Freisetzung hat und daß durch Verwendung von sorbierenden Zuschlagstoffen eine Reduktion der Freisetzung aus einem Grubengebäude erreicht werden kann.

V-4.2 Beschreibung des Ausfalls von Abfallbehältern durch eine Zufallsgröße

Es wird angenommen, daß dickwandige Endlagerbehälter (Pollux-Behälter) in Einlagerungsstrecken eine relativ lange Lebensdauer haben. Da in einer Strecke nur wenige Behälter Platz haben, ist die bisherige Beschreibung durch einen gleichförmigen Behälterausfall, d.h. eine stetige Zunahme des Anteils ausgefallener Behälter nicht angemessen. Es wurde daher ein neues Modell entwickelt, bei dem der diskrete Ausfall jedes Behälters berücksichtigt wird. Dies geschieht durch Verwendung einer Zufallsgröße für die Behälterlebensdauer, wobei eine exponentielle Verteilungsfunktion und eine mittlere Lebensdauer vorgegeben werden. In der vorliegenden Untersuchung wurden 6 Pollux-Behälter pro Einlagerungsstrecke angenommen; die zufällig gezogenen Lebensdauern der Behälter lagen für einen Rechenlauf mit ansonsten deterministischer Rechnung zwischen 98 und 1400 Jahren.

Anhand einer vereinfachten Grubengebäudestruktur wurden die Freisetzungsraten aus den Abfällen, aus der Einlagerungsstrecke und aus dem Endlager für die beiden Varianten des gleichförmigen und des diskreten Behälterausfalls verglichen. Bei der deterministischen Rechnung zeigt sich, daß die Freisetzung aus dem Endlager und die dadurch verursachte Dosisbelastung in der Biosphäre von der Art des Behälterausfalls kaum abhängig ist. Durch den Transport im Grubengebäude und im Deckgebirge werden die Unterschiede, die im Einlagerungsbereich vorhanden sind, weitgehend verwischt. Im Einlagerungsort selbst sind die Freisetzungsverläufe in den beiden Varianten unterschiedlich; im Zeitraum, der für die Freisetzung am wichtigsten ist, sind die Freisetzungsraten jedoch von gleicher Größenordnung. Dieser Zeitraum liegt im Bereich der mittleren Lebensdauer der Behälter von etwa 500 Jahren. Eine probabilistische Rechnung mit 100 Monte-Carlo-Simulationen wurde durchgeführt, um den Unterschied zwischen gleichförmigem und diskretem Behälterausfall anhand der mittleren Dosisrate weiter zu untersuchen. Dabei zeigte sich, daß sich die maximalen Dosisraten bei gleich-

förmigem Behälterausfall und die mittlere Dosisrate bei diskretem Behälterausfall kaum unterscheiden.

Die Berücksichtigung des diskreten Behälterausfalls führt damit zu keiner wesentlichen Änderung der Ergebnisse gegenüber der bisherigen Modellierung. Die Darstellung des diskreten Behälterausfalls über eine Zufallsvariable ist jedoch plausibler als ein gleichförmiger Behälterausfall und diese Modellierung sollte daher bei Anwendungen mit wenigen Behältern pro Einlagerungsort verwendet werden. Das einfache Modell des gleichförmigen Behälterausfalls liefert auch für den Einlagerungsort ausreichend genaue Freisetzungsraten und kann als konservative Abschätzung für die Mobilisierungsmodelle verwendet werden, insbesondere wenn in einem Einlagerungsort eine ausreichend große Anzahl von Behältern vorhanden ist.

V-4.3 Laugenbewegung in teilweise laugegefüllten Streckenabschnitten eines Grubengebäudes

In der bisherigen Modellierung in EMOS wurde angenommen, daß ein Segment des Grubengebäudes vollständig mit Lauge gefüllt sein muß, bevor ein Weitertransport in das nächste Segment möglich ist. Diese Annahme ist gerechtfertigt, wenn zwischen zwei Segmenten ein Verschlußbauwerk angeordnet ist, so daß ein Weitertransport nur gegen den Widerstand des Verschlusses möglich ist. In neueren Anwendungsrechnungen wurde es notwendig, Strecken zu unterteilen, wodurch Streckenabschnitte ohne Verschlüsse eingeführt wurden. In diesem Zusammenhang wurde ein Ansatz entwickelt, welcher den Weitertransport zwischen Segmenten erlaubt, auch wenn beide Strecken nur teilweise mit Lauge gefüllt sind.

Der neue Ansatz wurde auf den Laugentransport in einer langen horizontalen Strecke mit 5 Unterteilungen angewandt. Es zeigte sich, daß mit dem neuen Ansatz die Lauge zu früheren Zeiten in weitere Bereiche des Grubengebäudes vordringt, daß aber der Zeitpunkt des Auspreßbeginns von Lauge aus dem Grubengebäude nur unwesentlich verändert wird. Die neue Modellierung führt also bezüglich der Laugenbewegung an der Schnittstelle zwischen dem Deckgebirge und dem Grubengebäude zu keiner wesentlichen Änderung bisheriger Rechenergebnisse. Da aber die Lauge eventuell nach dem

neuen Ansatz anders als bisher bis zu den Abfällen gelangen kann, sind Änderungen im Radionuklidtransport möglich. Diese Auswirkungen sind sehr anwendungsspezifisch und sollen bei der Weiterentwicklung des Programms EMOS in Version 6 untersucht werden.

V-4.4 Vergleich der Konvergenzdaten des TSS-Versuchs mit Ergebnissen von Modellrechnungen

Der mathematische Ansatz zur Beschreibung der Gebirgskonvergenz im Programmpaket EMOS wurde bereits für die erste Version des Programms entwickelt. In der Zwischenzeit wurden eine Reihe von experimentellen Ergebnissen veröffentlicht, in welcher die Konvergenzraten im Salinar in Abhängigkeit von der Temperatur angegeben wurden. In einem parallel durchgeführten Vorhaben wurden diese Ergebnisse mit theoretischen Ansätzen verglichen, siehe Abschlußbericht zum FE-Vorhaben 02 E 8532 1 des BMBF [4]. Die Ergebnisse dieses Vergleichs wurden herangezogen, um den Konvergenzansatz in EMOS zu testen und um Hinweise zu bekommen, in welcher Art der in EMOS verwendete Ansatz verbessert werden könnte.

Der Vergleich wurde anhand der experimentellen Ergebnisse des in-situ-Versuchs zur Thermischen Simulation der Streckenlagerung (TSS) auf der Asse durchgeführt. In diesem Großversuch wurden in den vergangenen 5 Jahren Konvergenzraten in zwei mit Salzgrus verfüllten Strecken gemessen, wobei in den Strecken Attrappen von Pollux-Behältern mit elektrischen Erhitzern eingelagert wurden. Die Konvergenzraten, Porositäten und Temperaturen wurden an verschiedenen Stellen in den Strecken und in der Umgebung der Strecken gemessen.

Die mit EMOS berechneten Konvergenzraten hängen neben der Temperatur und der Porosität auch vom Laugendruck in der Strecke ab. Der Vergleich mit den Experimenten gestattete jedoch nur den Test des Einflusses von Temperatur und Porosität und dies nur für einen vergleichsweise kurzen Zeitraum von 5 Jahren. Wichtigstes Ergebnis des Vergleichs ist, daß die berechneten Konvergenzraten im allgemeinen zu groß sind, wenn die in bisherigen Analysen übliche Auswahl der Temperaturverläufe getroffen wird. So wird zum Beispiel für die Berechnung der Versatzkonvergenz üblicherweise die

Temperatur am Streckenrand verwendet. Zum Anpassen an die gemessenen Werte ist jedoch von deutlich geringeren Temperaturen auszugehen, wie sie in einem Abstand von einigen Streckenradien auftreten. Die Tatsache, daß geringere Temperaturen verwendet werden müssen, wird auch durch andere theoretische Überlegungen gestützt. Dies wird in dem Bericht beschrieben.

Insgesamt ist der Konvergenzansatz von EMOS nicht widerlegt worden, aber es stellte sich heraus, daß die verwendeten Temperaturverläufe sorgfältiger ausgewählt werden müssen.

V-5 Bewertung des erreichten Entwicklungsstandes

Nach Abschluß des sonderfinanzierten Vorhabens sind deutliche Fortschritte bei der Bereitstellung des Instrumentariums für sicherheitsanalytische Arbeiten zu verzeichnen. Das Programmpaket EMOS wurde um die Module CHET1, CHET2 und REPOS5 erweitert, wobei die im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Änderungen vorgenommen wurden. Das Ausbreitungsprogramm CHET ist als Standardwerkzeug in EMOS integriert und wird eingesetzt. Das Programmpaket EMOS ist in der vorliegenden Version dokumentiert.

Trotz deutlicher Fortschritte bei der Weiterentwicklung der Methoden zur Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern sind weitere Verbesserungen des Instrumentariums in Einzelbereichen erforderlich.

- Der Schadstofftransport durch das Deckgebirge wird nach neueren Erkenntnissen durch kolloide Träger beeinflusst. Daher ist es wünschenswert, das vorhandene Transportprogramm für das Deckgebirge um kolloidgetragenen Schadstofftransport zu erweitern oder ein neues Transportmodell zu entwickeln.
- Bei der Anwendung des Rechenprogramms auf reale Endlager hat sich gezeigt, daß es wünschenswert wäre, das Grubengebäude als netzwerkartige Struktur anstelle einer baumförmigen Struktur zu behandeln. Die Weiterentwicklung des Moduls REPOS zur Berechnung des Laugen- und Radionuklidtransports in solchen Netzwerken ist beabsichtigt.

- Im Hinblick auf die Validierung der Modellansätze und Daten der relevanten physikalischen und chemischen Effekte sind weitere Anstrengungen zu unternehmen. Dabei ist zu beachten, daß experimentelle Ergebnisse vielfach nur unzureichend zur Verfügung stehen. Untersuchungen der Effekte Gebirgskonvergenz, Sorption im Nahbereich und Rückhaltung im Deckgebirge wurden in diesem Vorhaben durchgeführt. Weitere Untersuchungen, zum Beispiel zur Durchlässigkeit von Dämmen, Verschlüssen und Versatz, zur Dispersion im porösen Medium oder zur Auswirkung von Gasen im Grubengebäude, sind notwendig.

- Zum Thema Laugentransport in teilweise gefüllten Segmenten ist ggf. ein neues Mobilisierungsmodell zu entwickeln, das die Mobilisierung bei sehr geringen Laugmengen in einem Einlagerungsort korrekt wiedergibt. Mit diesem Modell ist dann der Radionuklidtransport zu berechnen und die Freisetzung mit den Ergebnissen aus bisherigen Rechnungen zu vergleichen. Vorher sollte die Berechnung des Laugentransports in senkrecht angeordneten Segmenten überprüft werden. Eine Behandlung dieser Problematik ist bei der Weiterentwicklung von EMOS vorgesehen.

- Da die Validierung eines Gesamtmodells für ein Endlager aufgrund seiner Großräumigkeit sowie der langen Prognosezeiträume nicht möglich ist, beschränkt sich die Qualitätssicherung eines solchen Modells auf die Verifikation der Integration von verifizierten und validierten Einzelmodellen zu einem Gesamtmodell. Die hierzu notwendigen Maßnahmen zur Qualitätssicherung sind zu erarbeiten und durchzuführen sowie zusammen mit den Rechenprogrammen zu dokumentieren.

Literatur für das Vorwort

- [1] R. Storck, D. Buhmann, R.-P. Hirsekorn, A. Nies, H. Rausch: EMOS: Programmpaket zur Langzeitsicherheitsanalyse eines Endlagers für radioaktive Abfälle, Version 4. GSF-Bericht 32/90. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig (1992).
- [2] G. Arens, S. Hossain, E. Fein: SWIFT: Intera Simulator for Waste Injection Flow and Transport, Version: GSF2. GSF-Bericht 28/90. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig (1992).
- [3] W. Brewitz, R. Storck: Endlagersicherheit in der Nachbetriebsphase, Rahmenplan für notwendige Forschungs- und Entwicklungsarbeiten. GSF-Bericht 6/90. Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München, Braunschweig (1990).
- [4] C. Tix, Auswertung von in-situ-Konvergenzdaten und Ableitung von Modellansätzen, GRS-Bericht, März 1996. In Vorbereitung.

Inhaltsverzeichnis

1	Überblick über das Programmpaket EMOS	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Computerprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse	1
1.3	Aufgabe und Struktur des Programms EMOS	4
1.4	Ablauf einer EMOS-Rechnung	6
1.4.1	Deterministische Rechnung	7
1.4.2	Monte-Carlo-Simulation	9
1.5	Ergebnisdarstellung	12
1.6	Entwicklungsgeschichte und Weiterentwicklung	14
2	Modellierung des Endlagers (das Modul REPOS)	17
2.1	Aufgabenbeschreibung des Moduls REPOS	17
2.2	Unterteilung des Grubengebäudes	19
2.3	Ablauf einer Freisetzungsberechnung	24
2.3.1	Datenversorgung	27
2.3.2	Nuklidwahl	27
2.3.3	Die Zeitschleife des Moduls REPOS	28
2.3.3.1	Die Segmentschleife	29
2.3.3.2	Rechnungen außerhalb der Segmentschleife	31
2.3.3.3	Steuerung der Zeitschrittweiten	31
2.4	Ergebnisdarstellung	39
2.4.1	Druckausgabe	39
2.4.2	Graphische Ausgabe	41
3	Die Mobilisierungsmodelle	43
3.1	Berechnung des Behälterausfalls	45
3.1.1	Gleichverteilte Lebensdauer der Behälter	47
3.1.2	Exponentialverteilte Lebensdauer der Behälter	49
3.1.3	Normalverteilte Lebensdauer der Behälter	50
3.2	MOBG5: Mobilisierung aus der Glasmatrix	51
3.3	Mobilisierung aus zementierten Abfällen	53
3.3.1	MOBZ6: Mobilisierung bei unbegrenzten Laugenmengen	53
3.3.2	MOBZ7: Mobilisierung bei begrenzten Laugenmengen	55
3.4	MOBH1: Mobilisierung aus HTR-Brennelementen	58
3.5	MOBL1: Mobilisierung aus LWR-Brennelementen	61
3.6	MOBL2: Mobilisierung aus LWR-Brennelementen	63
4	Die Segmentmodelle	65
4.1	Behandlung der physikalischen und chemischen Effekte	66
4.1.1	Zusammenwirken der Effekte	68
4.1.2	Beschreibung der Laugenbewegung	74
4.2	Segmentmodelle für Einlagerungsorte	75
4.2.1	Modelle für Bohrlöcher	76

4.2.1.1	Das allgemeine Bohrlochmodell BOALG1	80
4.2.1.2	Besonderheiten des Modells BOMAW1	81
4.2.2	Das Kammermodell KAMAW1	81
4.2.3	Modelle für Einlagerungsstrecken	83
4.2.3.1	Das allgemeine Modell ESALG1 für eine Einlagerungsstrecke	86
4.2.3.2	Das allgemeine Modell ESALG2 für eine Einlagerungsstrecke	87
4.2.3.3	Besonderheiten des Modells ESMAW1	89
4.3	Segmentmodelle für Verbindungsstrecken	90
4.3.1	Das Modell STDAM1 für eine Strecke mit Damm	93
4.3.2	Das Modell STVER1 einer Strecke mit Verschuß	93
4.3.3	Das Modell STOVE1 für einen Streckenteil ohne Verschuß	94
4.3.4	Das Modell STOVOK2 für einen Streckenteil ohne Verschuß mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration	94
4.4	Segmentmodelle für spezielle Teile des Grubengebäudes	95
4.4.1	Das Modell LEALG1 für einen Laugeneinschluß im Salz	95
4.4.2	Das Modell STMIF1 für das Mittelfeld eines Grubengebäudes	97
4.5	Segmentmodelle für spezielle Szenarien	100
4.5.1	Das Modell VQUELLE2 für ein durchströmtes Grubengebäude	101
4.5.2	Die Segmentmodelle CABOT1 und CATOP1 für eine Speicherkaverne	102
4.5.3	Das Modell SUBROS für ein Subrosionsszenario	105
5	Modellierung der physikalischen und chemischen Effekte	109
5.1	Temperatur und Temperaturgradienten im Grubengebäude	111
5.2	Die Konvergenz von Salzgestein	114
5.2.1	Die Konvergenzrate	116
5.2.2	Auswirkungen der Konvergenz	121
5.3	Permeabilität und Widerstand von Verschlüssen, Dämmen und Versatz	124
5.3.1	Permeabilität von Versatzmaterial	124
5.3.2	Strömungswiderstand von Verschlüssen, Dämmen und versetzten Strecken	126
5.3.3	Verschußwiderstand einer Kaverne	126
5.4	Berechnung des Laugendrucks und der Laugenströme	128
5.4.1	Druckberechnung im vertikal ausgedehnten Grubengebäude	131
5.4.2	Diskussion der Randbedingungen	135
5.4.3	Berechnung der Laugenströme	143
5.5	Gasproduktion	147
5.5.1	Gasproduktion durch Korrosion	148
5.5.2	Gasproduktion durch Radiolyse	150
5.6	Modellierung von Austauscheffekten	153
5.6.1	Konvektiver Laugenaustausch aufgrund eines Dichtegradienten	154
5.6.2	Bilanzierung von gelösten Stoffen in Lauge	159
5.6.3	Austausch durch Gastransport	161
5.7	Nuklidtransport	162
5.7.1	Durch Dichtegradienten induzierter Nuklidtransport	163
5.7.2	Durch Gastransport induzierter Nuklidtransport	166
5.7.3	Durch Druckgradienten induzierter Nuklidtransport	169

5.7.4	Nuklidtransport durch Diffusion	169
5.7.5	Gesamtnuklidstrom	170
5.8	Nuklidtransport in Segmenten mit ortsabhängiger Nuklidkonzentration	172
5.9	Ausfällung und Sorption	175
5.10	Radioaktiver Zerfall und Nuklidbilanzierung	177
6	Das Modul CHET	181
6.1	Aufgabenbeschreibung	181
6.2	Physikalische Grundlagen und mathematische Formulierung	182
6.2.1	Beschreibung des Transports	183
6.2.1.1	Transportmechanismen	183
6.2.1.2	Rückhalte­mechanismen	185
	a)	Henry-Isotherme 185
	b)	Langmuir-Isotherme 186
	c).....	Freundlich-Isotherme 186
	d)	Vergleich der Isothermen 187
6.2.1.3	Quellen und Senken	191
6.2.2	Transportgleichung	191
6.3	Numerische Modellierung	193
6.3.1	Diskretisierungsverfahren	193
6.3.1.1	Behandlung von Unstetigkeiten	195
6.3.1.2	Lösungsalgorithmus	196
6.3.1.3	Algorithmus für die Randblöcke und den Quellblock	198
6.3.2	Berechnung der Rückhaltung	199
6.3.3	Kopplung zwischen Transport und Sorption	200
6.3.4	Berechnung des Zerfalls	202
6.3.5	Diskretisierung von Zeit und Ort	202
6.3.5.1	Ortsdiskretisierung	202
6.3.5.2	Stabilitätskriterien	204
6.3.5.3	Korrektur der numerischen Dispersion	207
6.4	Ablauf einer Transportrechnung	209
6.4.1	Eingabe und Überprüfung der Eingangsdaten	209
6.4.2	Vorbereitung der Rechnung	212
6.4.3	Transportrechnung	212
6.4.3.1	Bestimmung der Einstromrate	212
6.4.3.2	Bestimmung der Konzentration zum neuen Zeitpunkt	213
6.4.3.3	Dateiausgabe	214
6.4.4	Protokoll des Rechenlaufs	214
7	Das Modul EXPOS	217
7.1	Aufgabenbeschreibung des Moduls EXPOS	217
7.2	Ermittlung der Dosis­konversions­faktoren	217
7.3	Berechnung der Strahlenexposition	219
7.3.1	Berechnung der Individualdosis	219
7.3.2	Berechnung von Kollektivdosen	220

7.3.3	Zeitdiskretisierung	221
7.4	Datenversorgung	221
7.4.1	Nuklidauswahl	222
7.4.2	Auswahl möglicher Wasserentnahmestellen	222
7.5	Ergebnisdarstellung	223
8	Ein- und Ausgabebeschreibung für das Programm EMOS	225
8.1	Das Job-Input-File	225
8.1.1	Überblick	225
8.1.2	Detaillierte Beschreibung des Job-Input-Files	228
	A: Modulunabhängiger Teilbereich (MODUNAD)	228
	B: Teilbereich für das Modul REPOS	229
	C. Ergänzung zum Teilbereich REPOS	238
	D: Teilbereich für das Modul CHET	240
	E: Ergänzungen zum Teilbereich CHET	245
	F: Teilbereich für das Modul EXPOS	246
	G: Ergänzungen zum Teilbereich EXPOS	251
	H: Teilbereich für eine probabilistische Rechnung (STATISTIK)	251
8.2	Beschreibung der Dateien mit den Eingabedaten aller Module	253
8.2.1	Die nuklidspezifische Datenbasis	257
8.2.2	Dateien mit den Eingabedaten für das Modul Repos	258
8.2.2.1	Die globalen Daten	258
8.2.2.2	Die elementspezifischen Daten	263
8.2.2.3	Die Strukturdaten für die Verknüpfung der Segmente und Gebinde	264
8.2.2.4	Die Gebinde- und Segmentdaten	266
	I. Gebinde:	267
	II. Segmente:	268
	ANHANG zu Kapitel 8.2.2.4:	270
	1. Komponentenbelegung des Datenvektors IBEY für alle zur Zeit vorhandenen Mobilisierungsmodelle:	270
	2. Komponentenbelegung des Datenvektors RBEY für alle zur Zeit vorhandenen Mobilisierungsmodelle:	271
	3. Komponentenbelegung des Datenvektors IBEY für alle zur Zeit vorhandenen Segmentmodelle:	272
	4. Komponentenbelegung des Datenvektors RBEY für alle zur Zeit vorhandenen Segmentmodelle:	278
8.2.2.5	Angaben über Abfallmixturen	284
8.2.2.6	Die Abfalldaten	285
8.2.2.7	Die Temperaturdaten	287
8.2.3	Beschreibung der Dateien mit Eingangsdaten für das Modul CHET	288
8.2.3.1	Beschreibung des Transportweges	289
8.2.3.2	Materialspezifische Daten	290
8.2.3.3	Elementspezifische Daten	291
8.2.4	Dateien mit den Eingabedaten für das Modul Expos	292
8.2.4.1	Die elementspezifischen Daten für das Biosphärenmodul	292

8.2.4.2	Die Dosisdaten	293
8.2.5	Die Statistik-Daten für eine probabilistische Rechnung	294
8.2.6	Die Daten zu den abhängigen Variablen einer Statistikrechnung	298
8.3	Die Dateien mit den Ergebnissen einer EMOS-Rechnung	299
8.3.1	Überblick über die Ergebnisdateien von EMOS	299
8.3.2	Ausgabedateien zur Erzeugung von Abbildungen und Tabellen mit zeitabhängigen Zwischenergebnissen	302
8.3.3	Ausgabedateien von REPOS	305
8.3.3.1	Die Vorspanndatei für die REPOS-Ausgabe (.rvs)	305
8.3.3.2	Die Datei mit den Nuklidausgangsströmen der Segmente (.rns)	306
8.3.3.3	Die Datei mit den sonstigen Strömen aller ausgewählten Segmente und Gebinde (.rss)	307
8.3.3.4	Die Datei mit den weiteren zeitabhängigen Ausgabegrößen (.rzv)	307
8.3.3.5	Die Datei mit den aktuellen Nuklidinventaren und sonstigen Nuklid- daten (.rnd)	308
8.3.3.6	Die Datei mit den Steuergößen für die Zeitschrittweite (.rad)	309
8.3.3.7	Die Datei mit den Konzentrationsprofilen in Segmenten mit ortsabhängiger Radio- nuklidkonzentration (.rok)	309
8.3.4	Ausgabedateien von CHET	310
8.3.4.1	Die Vorspanndatei für die CHET-Ausgabe (.cvs)	310
8.3.4.2	Die Datei mit der Zeitabhängigkeit der Nuklidkonzentration (.czk)	311
8.3.4.3	Die Datei mit der Ortsabhängigkeit der Nuklidkonzentration (.cok)	311
8.3.5	Ausgabedateien von EXPOS	312
8.3.5.1	Die Vorspanndatei für die EXPOS-Ausgabe (.evs)	312
8.3.5.2	Die Ausgabedatei mit den Dosisraten (.edo)	313
8.3.6	Ausgabedateien des Statistikeils	313
8.3.6.1	Die Vorspanndatei der probabilistischen Rechnung (.svs)	313
8.3.6.2	Die Datei mit der Stichprobenmatrix (.spl)	314
8.3.6.3	Die Ergebnisdatei der probabilistischen Rechnung mit den Dosiswerten für alle Si- mulationen (.sdo)	315
8.3.6.4	Die Ergebnisdatei der probabilistischen Rechnung mit den Summendosen (.sdm)	315
8.3.6.5	Die Kontrolldatei der probabilistischen Rechnung (.sko)	316
8.3.7	Ausgabe von Endtabellen	317
8.3.7.1	Endtabellen für REPOS (.ret)	317
8.3.7.2	Endtabellen für CHET (.cet)	319
8.3.7.3	Endtabellen für EXPOS (.eet)	320
9	Literaturverzeichnis	323
	Zusammenstellung der Variablen	327
	Glossar	336
	Abbildungsverzeichnis	341
	Tabellenverzeichnis	345

1 Überblick über das Programmpaket EMOS

1.1 Einleitung

Das Ziel der Endlagerung radioaktiver Abfälle im tiefen geologischen Untergrund ist der langfristige Schutz von Mensch und Umwelt vor der ionisierenden Strahlung der eingelagerten Radionuklide. Für die Nachbetriebsphase, also die Zeit nach Stilllegung des Endlagers, kann möglicherweise nicht vollständig ausgeschlossen werden, daß Radionuklide aus dem verschlossenen Endlager in die Biosphäre transportiert werden. Sie dürfen in diesem Fall nicht zu Individualdosen führen, welche die Werte des §45 der Strahlenschutzverordnung überschreiten. Der Nachweis, daß dieses Schutzziel erreicht werden kann, ist durch eine standortspezifische Langzeitsicherheitsanalyse zu erbringen [1].

Eine Langzeitsicherheitsanalyse ist in zwei Schritte gegliedert: Szenarienanalyse und Konsequenzanalyse. In der Szenarienanalyse werden mögliche zukünftige Entwicklungen der Standortverhältnisse vorausgedacht und Vorgänge identifiziert, die zu einer Freisetzung der eingelagerten Radionuklide in die Biosphäre führen können. Die Relevanz der Szenarien ist auf der Basis ihrer Eintrittswahrscheinlichkeiten und ihrer denkbaren Konsequenzen standortspezifisch zu bewerten. In der anschließenden Konsequenzanalyse wird für die relevanten Szenarien der resultierende Schaden für Mensch und Umwelt abgeschätzt.

Vorgänge, die den Radionuklidtransport ermöglichen und beeinflussen können, laufen oftmals sehr langsam ab und erstrecken sich über Tausende von Jahren. Außerdem handelt es sich bei einem Endlager um ein großräumiges System, das als Ganzes nicht experimentell untersucht werden kann. In Anbetracht dieser Zeiträume und der Komplexität eines Endlagersystems ist es nicht möglich, die Konsequenzen der betrachteten Szenarien in Simulationsexperimenten direkt zu ermitteln.

Es ist vielmehr notwendig, diese Vorgänge auf der Basis des theoretischen Kenntnisstandes und unter Berücksichtigung experimenteller Ergebnisse vereinfachend in mathematischen Modellen nachzubilden. Die Vielzahl zu berücksichtigender physikalischer und chemischer Vorgänge führt zu gekoppelten Differentialgleichungen, die in der Regel nicht analytisch gelöst werden können. Die numerische Auswertung der beschreibenden Gleichungssysteme erfolgt mit Hilfe von Computerprogrammen.

1.2 Computerprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse

Das eingangs erwähnte Schutzziel legt die zeitabhängige Berechnung der Individualdosis für die relevanten Szenarien als Endergebnis der Langzeitsicherheitsanalyse fest. Zur Behandlung der verschiedenen physikalischen und chemischen Prozesse, welche die Strahlenexposition in der Biosphäre beeinflussen können, stehen unterschiedliche Rechenprogramme zur Verfügung, die sich in zwei Kategorien unterteilen lassen:

- Programme zur detaillierten Untersuchung einzelner Prozesse oder Komponenten des Endlagersystems mit dem Ziel der Interpretation von Experimenten und Absicherung von Annahmen und Modellen. Darüberhinaus werden mit diesen Programmen einige Eingangsdaten für die Programme der zweiten Kategorie berechnet.
- Programme zur Berechnung des Radionuklidtransportes aus dem Endlager in die Biosphäre und der resultierenden Strahlenexposition unter Berücksichtigung aller relevanten Einzelprozesse.

Die Ermittlung vieler Eingangsdaten für die Programme beider Kategorien sowie die Validierung der verwendeten Modellansätze erfolgt in Labor- und in-situ Experimenten. Die Wechselwirkungen einiger wichtiger Programme der ersten Kategorie mit den Programmen zur Berechnung des Radionuklidtransportes ist in Abbildung 1 dargestellt. In den folgenden Abschnitten werden die Aufgaben einiger Programme der ersten Kategorie beschrieben.

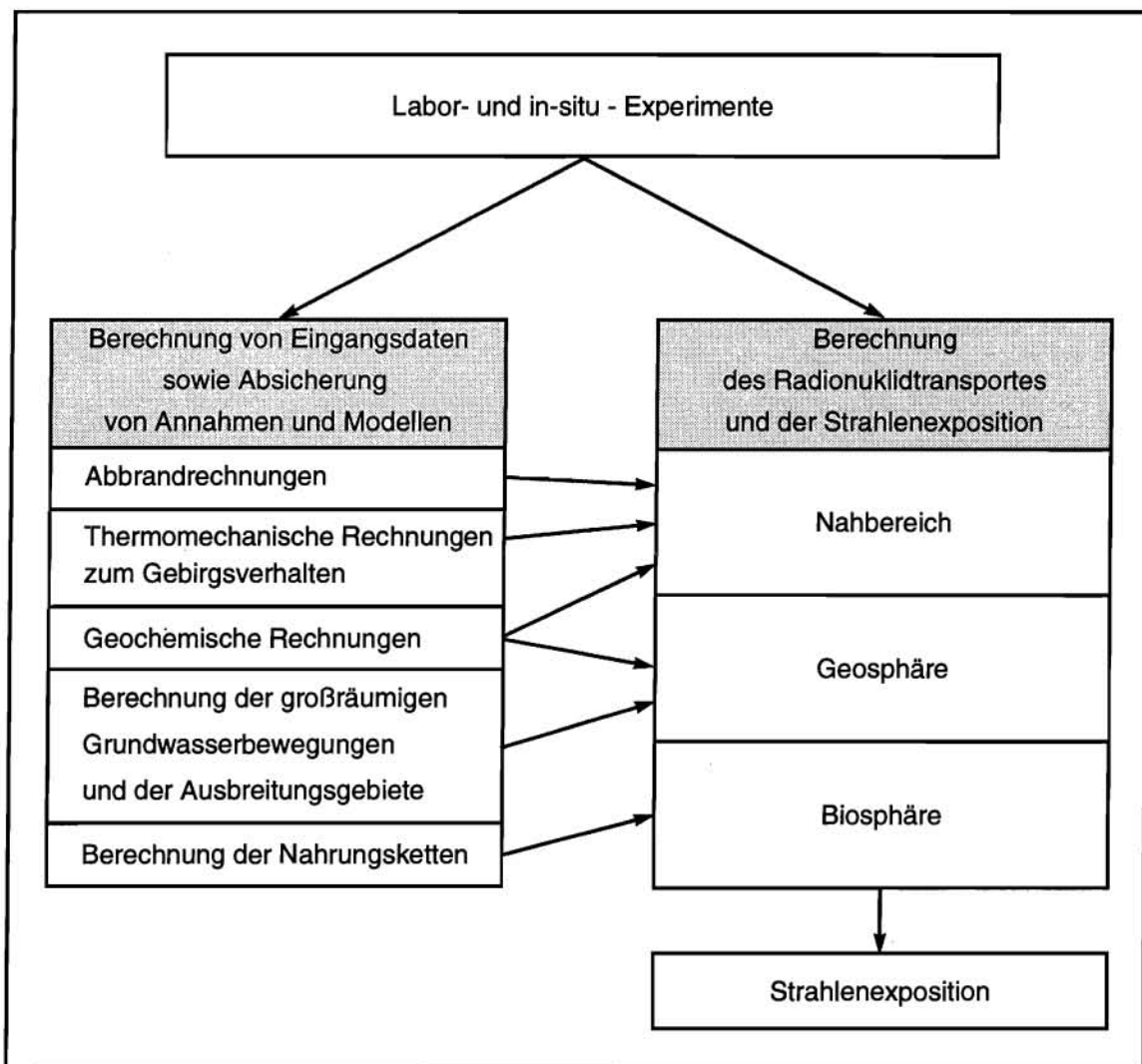


Abbildung 1: Einsatz von Computerprogrammen in der Langzeitsicherheitsanalyse und Bereitstellung von Eingangsdaten.

Beispiele für Programme, in denen Eingangsdaten berechnet werden, sind die Abbrandrechnungen und die Rechnungen zum Aktivitätstransport durch die verschiedenen Nahrungsketten. Als Ergebnisse liefern sie das Aktivitätsinventar eines abgebrannten Brennelementes bzw. nuklid-spezifische Dosiskonversionsfaktoren.

In thermomechanischen Rechnungen zum Gebirgsverhalten nach der Hohlraumerstellung und dem mit der Abfalleinlagerung verbundenen Wärmeeintrag werden zeitabhängige Temperatur- und Spannungsverteilungen sowie Verformungen der erstellten Hohlräume ermittelt. Aus den berechneten Verformungen lassen sich vereinfachte Modellansätze zur Beschreibung der Gebirgskonvergenz als Funktion verschiedener Einflußgrößen ableiten. Die berechneten Spannungsverteilungen lassen Rückschlüsse auf die Möglichkeit der Entstehung von Wegsamkeiten zwischen dem Endlager und grundwasserführenden Schichten zu. Die thermomechanischen Rechnungen leisten damit einen Beitrag zur Absicherung der Annahmen in der Szenarienanalyse und der Nahbereichsmodellierung.

Die eingelagerten Radionuklide können in nennenswertem Umfang nur dann in die Biosphäre gelangen, wenn Lösungen in das Endlager bis zu den Abfällen vordringen und im weiteren Verlauf als Transportmedium zur Verfügung stehen. Die Ermittlung der großräumigen Grundwasserbewegungen und entsprechender potentieller Ausbreitungsgebiete für freigesetzte Radionuklide auf der Basis der hydrogeologischen Standortverhältnisse sind daher wesentliche Bestandteile der Konsequenzanalyse.

In geochemischen Modellrechnungen wird die Zusammensetzung vorhandener Lösungen und die Verteilung der Spezies auf Lösung und Feststoffe mit verschiedenen Zielsetzungen bestimmt:

- Aus der Zusammensetzung zutretender Lösungen kann das Ausmaß chemischer Umsetzungen der Verfüllmaterialien und der Einlagerungsformation abgeschätzt werden.
- Aus der Verteilung der Spezies auf Lösung und Feststoffe kann die Rückhaltung der Radionuklide im Nahbereich und in der Geosphäre abgeschätzt werden.
- Aus Gleichgewichtsbetrachtungen zwischen den gelösten Spezies und dem Angebot an Mineralen in den anstehenden Feststoffen in der Geosphäre lassen sich Rückschlüsse auf die Grundwasserbewegung ziehen.

Mit den Programmen der zweiten Kategorie, zu denen das Programm EMOS gehört, wird die potentielle Freisetzung von Radionukliden aus einem Endlager und die sich daraus ergebende Strahlenexposition in der Biosphäre ermittelt. Für vorgegebene Szenarien ermöglichen sie die zeitabhängige Berechnung der Individualdosis, die mit den Grenzwerten der Strahlenschutzverordnung verglichen wird. Die Ergebnisse der Programme der ersten Kategorie fließen mittelbar über Annahmen und unmittelbar über Modellansätze und Eingangsdaten in die Programme der zweiten Kategorie ein. Letztere stellen somit eine Synthese der gewonnenen Erkenntnisse hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf die Strahlenexposition dar.

Die Programme zur Berechnung der Radionuklidausbreitung enthalten als wesentliche Bestandteile Module für die drei Hauptkomponenten eines Endlagersystems:

- Nahbereich oder Endlager,
- Geosphäre oder Deckgebirge,
- Biosphäre.

Da die Vorgänge in den drei Hauptkomponenten oftmals unterschiedlich sind und unter anderem mit verschiedenen numerischen Verfahren bearbeitet werden, sind die zugehörigen Module weitgehend eigenständig. Zur Modellierung des gesamten Endlagersystems mit dem Ziel der Berechnung der Strahlenexposition werden die Module für die drei Hauptkomponenten nacheinander durchgerechnet.

Die Programme der zweiten Kategorie müssen eine hohe Flexibilität in ihrem Aufbau aufweisen, um einen leichten Austausch von Unterprogrammen zu ermöglichen. Zum einen ist die Auswahl der Vorgänge, die in den Teilsystemen modelliert werden müssen, standort- und konzeptspezifisch: sie wird von der Endlagerformation, dem technischen Einlagerungskonzept und dem betrachteten Szenario beeinflusst. Zum anderen werden mit fortschreitendem Kenntnisstand implementierte Modelle veralten und durch verbesserte Modelle zu ersetzen sein.

1.3 Aufgabe und Struktur des Programms EMOS

Das Programmpaket EMOS (Endlagerbezogene Modellierung von Szenarien) erlaubt die Berechnung der Nuklidausbreitung durch die drei Hauptkomponenten eines Endlagersystems (siehe Kapitel 1.2) und somit die Ermittlung der resultierenden Strahlenexposition. Zur Erfüllung dieser Aufgabe enthält EMOS Programme für die Ansteuerung und Datenversorgung der Module zur Berechnung der Nuklidausbreitung in dem entsprechenden Teil des Endlagersystems. Dazu gehört auch die Sicherstellung des Datentransfers zwischen den Modulen, wenn sie in einem Rechenlauf hintereinander durchgerechnet werden. Die Ergebnisse der einzelnen Module sowie die Strahlenexposition als Gesamtergebnis eines Rechenlaufs werden innerhalb von EMOS teilweise aufgearbeitet und zunächst in Dateien abgelegt. Eine Beschreibung der Ergebnisdarstellung befindet sich in Kapitel 1.5. Das Programmpaket EMOS ist vollständig in FORTRAN 77 programmiert.

Die Module für die drei Hauptkomponenten sind innerhalb des Programmpaketes EMOS eigenständig in dem Sinne, daß sie individuell angesteuert werden können. EMOS kann also beispielsweise genutzt werden, um lediglich den Radionuklidtransport durch die Geosphäre zu berechnen, ohne daß unmittelbar vorher eine Berechnung der Nuklidfreisetzung aus dem Nahbereich der Abfälle ermittelt wurde. EMOS stellt für diesen Fall die Verbindung zu einer von dem Anwender anzugebenden Inputdatei her, in der sich die Quellterme für die Transportrechnung befinden.

Die Rechnungen mit EMOS können deterministisch oder probabilistisch als Monte-Carlo-Simulation durchgeführt werden. In einer deterministischen Rechnung werden alle Eingangsparameter als Konstanten behandelt. Ihnen wird bei der Verarbeitung der Inputdaten ein fester Wert zugewiesen und das Endlagersystem wird anschließend deterministisch ausgewertet. Für jeden Zeitpunkt erhält man feste Zahlenwerte als Ergebnisse, etwa die nuklidspezifischen Freiset-

zungsraten aus dem Grubengebäude. Eine Beschreibung des Ablaufs einer deterministischen Rechnung befindet sich in Kapitel 1.4.1.

Bei einer Monte-Carlo-Simulation werden die Unsicherheiten, die über die Werte der Modellparameter bestehen, explizit berücksichtigt. Dazu werden relevante und unsichere Parameter als Zufallsvariablen mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung behandelt, die wiedergibt, welchen Wert der Parameter mit welcher Wahrscheinlichkeit annimmt. Nach dem Ziehen einer Stichprobe von Werten aus den Verteilungen wird das System für die ermittelten Eingangsdatensätze wiederholt deterministisch ausgewertet. Auf diese Weise erhält man für jeden Zeitpunkt als Ergebnis eine Verteilung von möglichen Werten, welche die Streubreite der Ergebnisse, etwa der radiologischen Konsequenzen, aufgrund der Unsicherheiten in den Eingangsdaten wiedergibt.

Das Programmpaket EMOS ist in eine Vielzahl von Programmteilen untergliedert, um die erforderliche Flexibilität bei dem Austausch von Modulen für die Hauptkomponenten zu gewährleisten. Abbildung 2 gibt einen Überblick über die Grobstruktur von EMOS. Zunächst ist EMOS in die drei Programmteile INPUT, SAMPLE und CALCULATION gegliedert, in denen die Eingangsdaten verarbeitet, im Fall einer Monte-Carlo-Simulation eine Stichprobe gezogen und die eigentliche Rechnung durchgeführt werden.

Die Vorgänge im Nahbereich der Abfälle werden in dem Modul REPOS (final repository: Endlager) bearbeitet. Ihre Beschreibung stellt den Schwerpunkt der vorliegenden Dokumentation dar

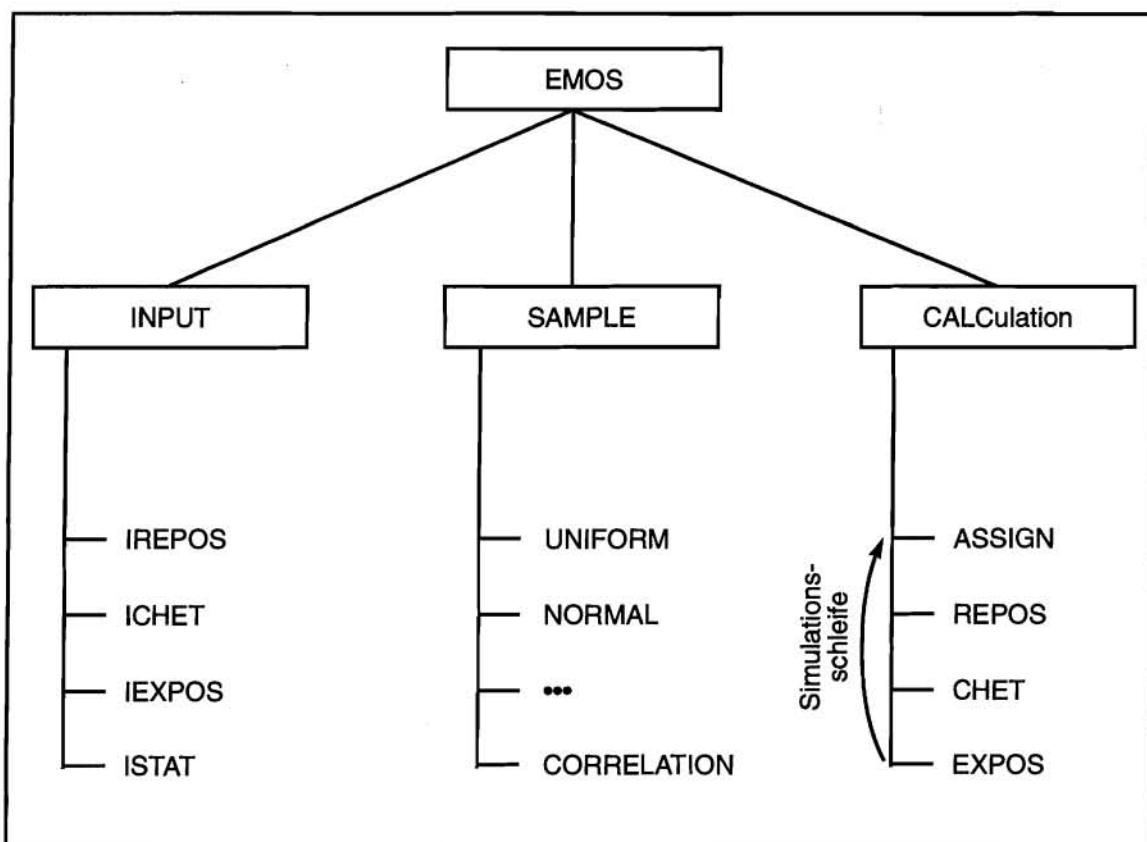


Abbildung 2: Grobstruktur des Programmpakets EMOS.

(Kapitel 2 bis 5). Dies hat zum einen historische Gründe, da dieses Modul zeitlich als erstes entwickelt wurde. Zum anderen liegt es daran, daß bezüglich der Modellierung der Biosphäre Verwaltungsvorschriften [2] eine einfache Behandlung der einzelnen Ausbreitungswege festlegen. Daher werden im Modul EXPOS (radiation exposure: Strahlenbelastung) lediglich Dosiskonversionsfaktoren zur Berechnung der radiologischen Konsequenzen verwendet (siehe Kapitel 7).

Der Nuklidtransport durch die Geosphäre wird mit dem Modul CHET (Verknüpfung von chemischen Effekten und Transport) ermittelt. Dabei handelt es sich um ein selbst entwickeltes Programm, in dem die eindimensionale Transportgleichung unter Berücksichtigung der linearen oder nichtlinearen Sorption sowie des radioaktiven Zerfalls mit der Methode der finiten Differenzen gelöst wird. Dieses Programm wird in Kapitel 6 beschrieben. Der zugehörige Teil des Job-Input-Files sowie die entsprechenden Dateien mit Eingabedaten werden in Kapitel 8 behandelt.

Falls eine Monte-Carlo-Simulation mit EMOS durchgeführt wird, sind die Eingangsdaten um die Angaben zu den Verteilungsfunktionen zu ergänzen (Programm ISTAT in Abbildung 2). Im Programmteil SAMPLE wird eine Stichprobenmatrix aufgebaut, welche die Eingangsdatensätze für die verschiedenen Simulationen enthält. Dabei können auch Benutzervorgaben zur Korrelation bestimmter Eingangsparameter berücksichtigt werden. Zu Beginn der Simulationsschleife im Rechenteil (CALCulation) werden im Programmteil ASSIGN die aktuellen Werte an die Zufallsvariablen zugewiesen. Eine detaillierte Beschreibung des Ablaufes einer Monte-Carlo-Simulation befindet sich in Kapitel 1.4.2.

Die systematische Untergliederung des Programmpakets wird in den Modulen für die Hauptkomponenten des Endlagersystems fortgeführt. So gibt es beispielsweise in REPOS zwei Ebenen, in denen Programmteile ohne größere Schwierigkeiten ausgetauscht bzw. ergänzt werden können. Auf der einen Ebene werden die verschiedenen physikalischen und chemischen Effekte behandelt, die im Nahbereich der Abfälle eine Rolle spielen können (siehe Kapitel 5). Auf der anderen Ebene werden Teilbereiche des Grubengebäudes wie etwa ein Abfallgebäude (siehe Kapitel 3), ein Bohrloch mit einem Verschuß oder ein Streckenstück mit einem Damm (siehe Kapitel 4) beschrieben. Eine derartige Programmstruktur erhöht die Transparenz und gewährleistet die notwendige Flexibilität des Programms, wenn weitere Effekte oder andere Endlagerkonzepte berücksichtigt werden sollen.

1.4 Ablauf einer EMOS-Rechnung

In Kapitel 1.3 wurde bereits erläutert, daß eine EMOS-Rechnung sowohl deterministisch als auch als Monte-Carlo-Simulation durchgeführt werden kann. In beiden Nutzungsarten werden dieselben Modelle der physikalischen und chemischen Vorgänge verwendet.

Das Endlagersystem wird in jedem Fall deterministisch ausgewertet. Die beiden Vorgehensweisen unterscheiden sich, was den Ablauf der EMOS-Rechnung angeht, lediglich darin, daß die Nuklid Ausbreitung bei einer deterministischen Rechnung nur einmal mit festen Eingangsdaten berechnet wird. In einer Monte-Carlo-Simulation hingegen wird die Nuklid Ausbreitung einige

hundert bis einige tausend Mal mit verschiedenen Eingangsdatensätzen berechnet, die zuvor als Stichprobe aus den möglichen Werten der Eingangsparameter ermittelt werden.

1.4.1 Deterministische Rechnung

Bei der Durchführung einer deterministischen EMOS-Rechnung werden nur die zwei Programmteile INPUT und CALCulation aus Abbildung 2 angesprochen. Im Programmteil INPUT werden alle Eingangsdaten gelesen und geprüft, in Feldern abgelegt und gegebenenfalls zu Kontrollzwecken wieder ausgegeben, bevor in CALCulation die eigentliche Rechnung erfolgt. Dies gilt auch für den Fall, daß mehrere Hauptkomponenten des Endlagersystems direkt nacheinander simuliert werden, etwa um die Strahlenexposition zu berechnen, die als Konsequenz eines angenommenen Szenarios auftritt.

Die Eingangsdaten für eine EMOS-Rechnung werden aus zwei Quellen übernommen. Zum einen wird für jeden Rechenlauf ein Job-Input-File erstellt und zum anderen steht dem Benutzer eine umfangreiche Datenbibliothek zur Verfügung. Die verschiedenen Dateien in der Datenbibliothek werden über Namen angesprochen, die in dem Job-Input-File anzugeben sind. Sie enthalten beispielsweise physikalische Konstanten, die Zusammensetzung der eingelagerten Abfälle oder nuklidspezifische Daten wie Halbwertszeiten und Dosiskonversionsfaktoren. In dem Job-Input-File macht der Benutzer insbesondere Angaben zur Steuerung des Rechenlaufs. Beispielsweise ist anzugeben, welche Hauptkomponenten des Endlagers gerechnet werden sollen und welche Zwischen- und Endergebnisse für die spätere Ausgabe in Dateien abgelegt werden sollen. Das Job-Input-File und die Datenbibliothek werden in Kapitel 8 detailliert beschrieben.

Unmittelbar nachdem Daten eingelesen wurden, werden sie auf ihre formale Richtigkeit nach verschiedenen Kriterien geprüft. Falls die Eingaben inkonsistent sind, werden Warnungen oder Fehlermeldungen ausgegeben, die erforderlichenfalls zum Abbruch des Rechenlaufes führen. Programmintern werden die Daten in Feldern abgelegt, die entsprechend ihrer inhaltlichen Zugehörigkeit zu COMMON-Blöcken zusammengefaßt sind. Auf diese Arbeitsspeicher wird im Laufe der Rechnung zurückgegriffen, wann immer die entsprechenden Daten benötigt werden.

Der Anwender kann die Kontrollausgabe aller Eingangsdaten oder spezieller Teilmengen hiervon durch entsprechende Angaben im Job-Input-File steuern. Sowohl die programminternen Fehlerprüfungen als auch die Möglichkeit der Kontrollausgabe der Eingangsdaten sind Bestandteile der Qualitätssicherung, der im Hinblick auf den Einsatz des Programmpakets im Rahmen von Planfeststellungsverfahren besondere Bedeutung zukommt.

Die Programmteile ISTAT, SAMPLE und ASSIGN in Abbildung 2 sind nur bei einer Monte-Carlo-Simulation von Bedeutung und werden bei einer deterministischen Rechnung übersprungen. Nach Abschluß der Aufbereitung der Eingangsdaten einer deterministischen Rechnung beginnt unmittelbar die Auswertung der Hauptkomponenten des Endlagersystems, deren Bearbeitung in dem Job-Input-File gewählt wurde. Dabei werden die Vorgänge in jeder Hauptkomponente für den ganzen Analysezeitraum bearbeitet, bevor die Vorgänge in der nächsten Hauptkomponente betrachtet werden. Zunächst wird also beispielsweise der gesamte Zeitverlauf einer eventuellen

Nuklidfreisetzung aus dem Endlager ermittelt, bevor die Berechnung des Transports der freigesetzten Nuklide durch die Geosphäre erfolgt.

Im Nahbereich des Endlagersystems (REPOS) wird zunächst der Zutritt von Lösungen in die Resthohlräume des Grubengebäudes berechnet, falls das betrachtete Szenario nicht einen sofortigen Kontakt der Gebinde mit Lösungen unterstellt. Weitere wesentliche Bestandteile von REPOS sind die Mobilisierung der Radionuklide aus den Abfällen (siehe Kapitel 3) sowie der Transport der Radionuklide durch die Teilbereiche des Grubengebäudes (siehe Kapitel 4) aufgrund der verschiedenen physikalischen und chemischen Effekte (siehe Kapitel 5). Die Schnittstelle zur Geosphäre ist mit der Berechnung des Zeitverlaufs der nuklidspezifischen Freisetzungsraten aus dem Nahbereich gegeben.

Der Transport der freigesetzten Radionuklide durch die Geosphäre (CHET) erfolgt mit der Grundwasserbewegung (Advektion) sowie durch Verteilung in den wassergefüllten Hohlräumen der Formationen (Dispersion). Gleichzeitig werden die Radionuklide an den anstehenden Feststoffen zeitweilig gebunden (Sorption), so daß sich ihr Fortkommen gegenüber dem des Grundwassers zum Teil erheblich verzögert. Als Ergebnisse werden nuklidspezifische Aktivitätskonzentrationen und -ströme im oberflächennahen Grundwasser berechnet.

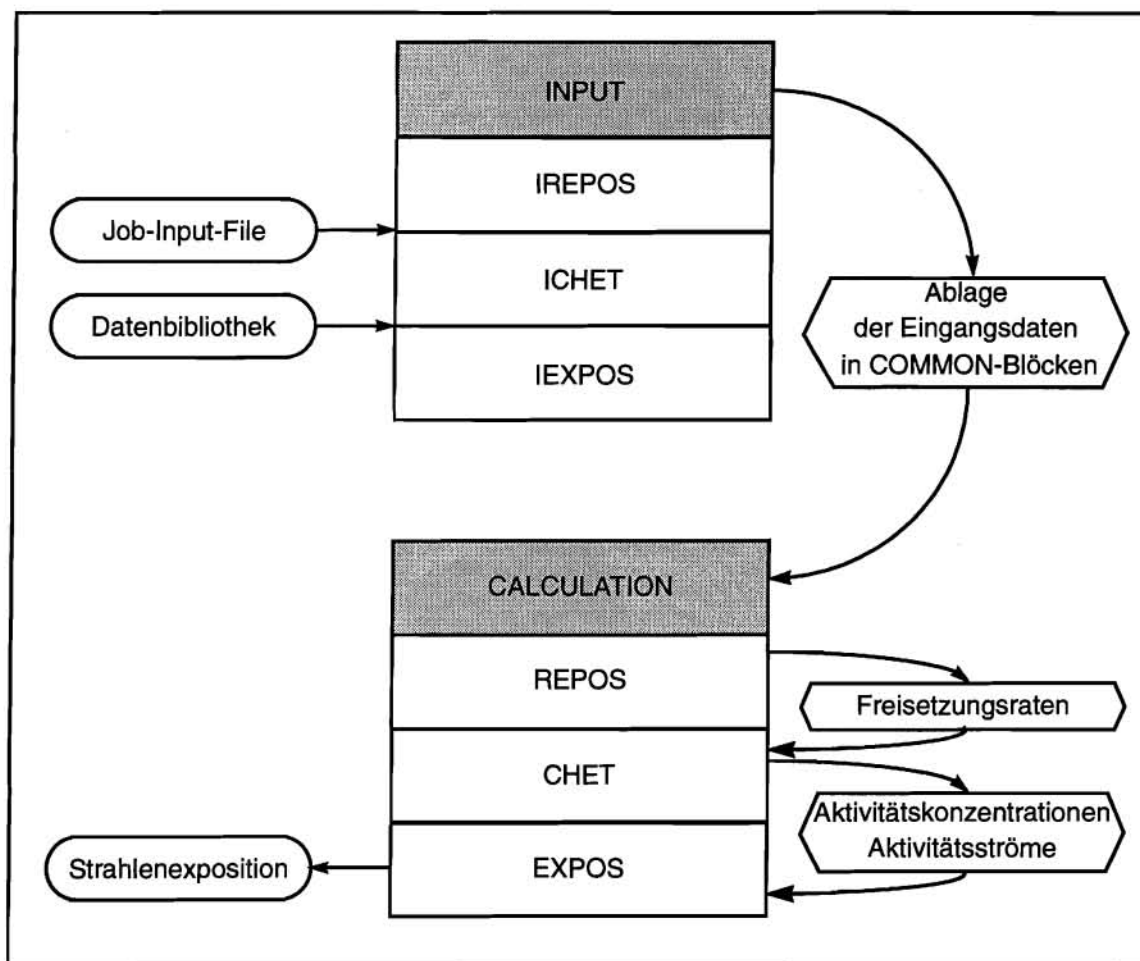


Abbildung 3: Programmablauf und Datenfluß bei einer deterministischen EMOS Rechnung.

Das kontaminierte Grundwasser kann auf verschiedenen Wegen zum Menschen gelangen. Es kann beispielsweise direkt als Trinkwasser genutzt werden oder zur Beregnung von Pflanzen verwendet werden, deren Früchte von Menschen verzehrt werden. In EXPOS wird zum einen die resultierende Individualdosis mit Hilfe von Dosiskonversionsfaktoren aus den Aktivitätskonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser berechnet. Zum anderen werden Kollektivdosen aus denselben Aktivitätskonzentrationen oder aus den Aktivitätsströmen beim Eintritt in die Biosphäre ermittelt (siehe Kapitel 7). Insgesamt erhält man als Ergebnis die Zeitverläufe der nuklidspezifischen Strahlenexposition, die sich als Konsequenz aus dem betrachteten Szenario ergeben.

Die wesentlichen Schritte des Ablaufs einer deterministischen EMOS-Rechnung sind in Abbildung 3 zusammengefaßt.

1.4.2 Monte-Carlo-Simulation

In die deterministischen Modelle, die im einzelnen in den Kapiteln 3 bis 7 beschrieben werden, gehen eine Fülle von Parametern ein, über deren aktuelle Werte zum Teil erhebliche Unsicherheit besteht. Die Ursachen dieser Unsicherheiten reichen von Meßfehlern für physikalische Größen über die mögliche räumliche Variabilität der Parameterwerte bis zu weitgehender Unkenntnis der Werte einzelner Parameter, wie sie etwa bei dem Eintrittszeitpunkt für ein Störfallszenario gegeben sein kann. Tieferliegende Gründe der Unsicherheiten sind der lange Zeitraum, über den die Endlagersicherheit gewährleistet werden muß, und der Zielkonflikt zwischen der Erkundung eines Standortes und seiner angestrebten Unversehrtheit für die Endlagerung.

Im Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE) wurde bei dem Umgang mit diesen Unsicherheiten Konservativität angestrebt, deren Nachweis jedoch nicht vollständig erbracht werden konnte [3]. Die zwischenzeitlich vorliegenden Erfahrungen aus den Projekten PAGIS ([4] und [5]), PACOMA [6], SAM [7] und SEK [8] zeigen, daß die Quantifizierung des Einflusses von Datenunsicherheiten eine notwendige Ergänzung realistischer Analysen ist. Dieser Erkenntnis wird dadurch Rechnung getragen, daß das Programm EMOS für eine Monte-Carlo-Simulation des Endlagersystems eingesetzt werden kann.

Zur Durchführung einer Monte-Carlo-Simulation wird der Ablauf einer deterministischen Rechnung, wie er in Abbildung 3 dargestellt ist, um einige weitere Programmteile ergänzt. Programmablauf und Datenfluß bei einer Monte-Carlo-Simulation sind in Abbildung 4 dargestellt, wobei die gegenüber Abbildung 3 hinzugekommenen Teile dunkel schattiert sind.

Im Programm ISTAT werden die zusätzlichen Eingangsdaten für eine Monte-Carlo-Simulation eingelesen, kontrolliert und abgelegt. Dadurch wird zunächst festgelegt, welche Modellparameter in der aktuellen Rechnung als Zufallsvariablen betrachtet werden; die anderen Parameter werden wie bisher als Konstante behandelt. Für jeden Eingangsparameter, der als Zufallsvariable behandelt werden soll, wird eine Wahrscheinlichkeitsverteilung eingelesen. Diese wird bei der Erstellung der entsprechenden Inputdatei so festgelegt, daß sie die vorhandene Information über die möglichen Werte des Parameters möglichst gut wiedergibt.

Sind kaum Informationen vorhanden, wird man beispielsweise eine gleichförmige Verteilung über den Bereich denkbarer Werte wählen. Größere Datenmengen können etwa durch eine Lognormal- oder eine Beta-Verteilung approximiert werden. In der derzeitigen Fassung des Programms können 8 Verteilungen verarbeitet werden: gleichförmig, logarithmisch gleichförmig, Histogramme auf linearer und logarithmischer Basis, normal, lognormal, Beta- und Dreiecksverteilung.

In SAMPLE werden aus den festgelegten Verteilungen der Zufallsvariablen Stichproben gezogen, deren Umfang der Anzahl der beabsichtigten Simulationen entspricht. SAMPLE ist eine angepaßte Fassung des Programms LHS (Latin Hypercube Sampling) [9] und erlaubt sowohl eine zufällige Stichprobennahme als auch eine nach dem Latin-Hypercube-Verfahren [10]. Die Vorteile dieses geschichteten Stichprobenverfahrens sind derzeit noch umstritten [11].

Bei beiden Verfahren werden für jede der k Zufallsvariablen n Stichprobenwerte ermittelt, wobei n die Anzahl der beabsichtigten Simulationen ist. Im Latin-Hypercube-Verfahren wird dazu die Grundgesamtheit jeder Variablen in n disjunkte Intervalle gleicher Wahrscheinlichkeit eingeteilt. Aus jedem Intervall wird ein Stichprobenwert entsprechend der vorgegebenen Verteilung zufällig

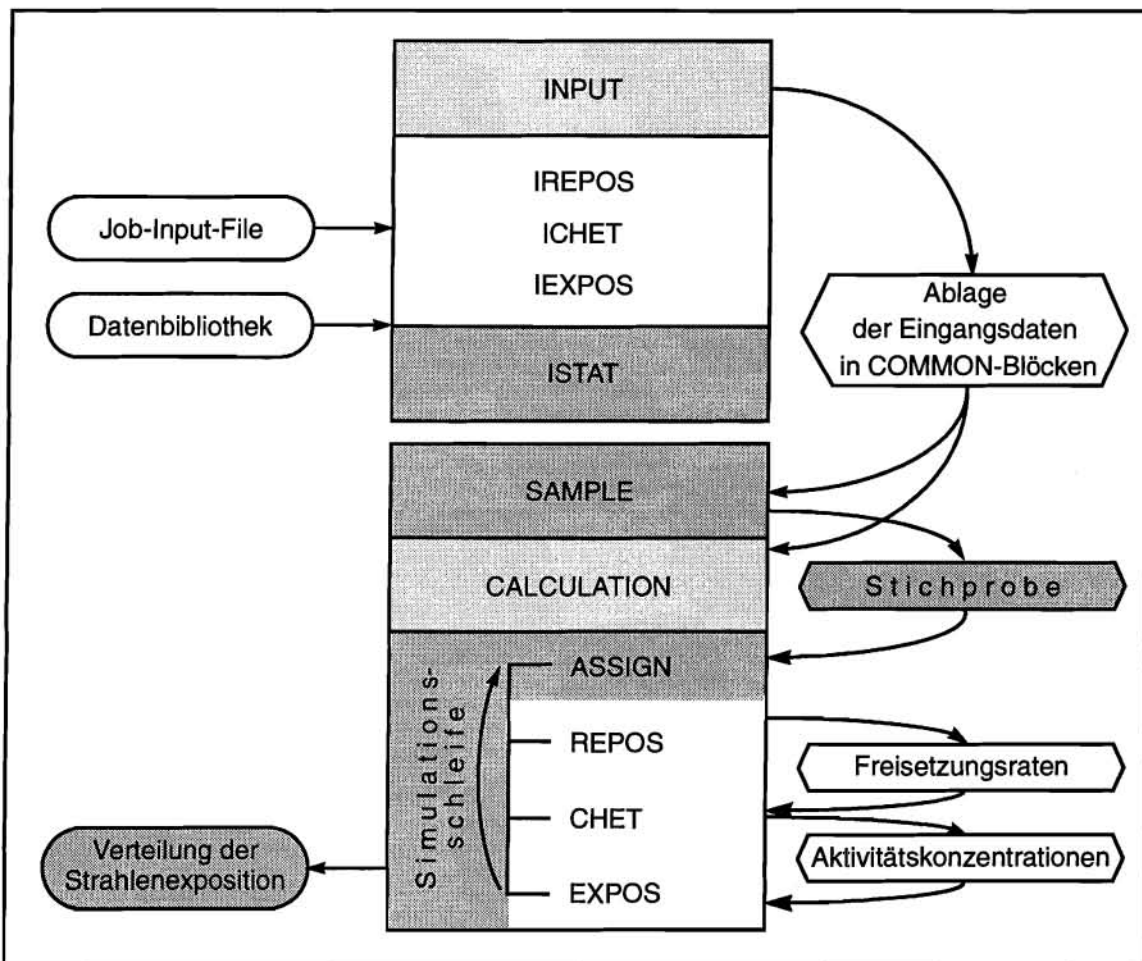


Abbildung 4: Programmablauf und Datenfluß bei einer Monte-Carlo-Simulation.

gezogen. Bei der zufälligen Stichprobennahme werden alle Stichprobenwerte aus der Grundgesamtheit zufällig gezogen. Bei beiden Verfahren wird anschließend je ein zufällig gezogener Stichprobenwert jeder einzelnen Variablen zu einem Vektor mit k Komponenten kombiniert. Diese Vektoren stellen die Eingangsdatensätze der n Simulationen dar.

Obwohl die Stichproben für je zwei Zufallsvariablen unabhängig voneinander gezogen und zufällig kombiniert werden, können die beiden Stichproben eine unerwünschte Korrelation zeigen. Andererseits sind häufig Korrelationen unter den Eingangsparametern bekannt und eine entsprechende Korrelation der Stichproben ist wünschenswert. Vorgaben zur Korrelation können berücksichtigt werden, indem die Kombination der einzelnen Stichprobenwerte zu Vektoren nicht mehr zufällig erfolgt, sondern entsprechend den Vorgaben aus der Inputdatei eingeschränkt wird [12].

Als Ergebnis von SAMPLE liegt eine Stichprobe vor, die für jede beabsichtigte Simulation einen Vektor mit Eingangsdaten für die Zufallsvariablen enthält. Wie in Abbildung 4 dargestellt, ist der Rechenteil von EMOS um eine Simulationsschleife erweitert, welche die wiederholte Auswertung der Hauptkomponenten des Endlagersystems mit den verschiedenen Eingangsdaten ermöglicht. Zu Beginn der Simulationsschleife werden die aktuellen Eingangsdaten den Zufallsvariablen zugewiesen (ASSIGN).

Neben der direkten Zuweisung der aktuellen Werte an die unabhängigen Zufallsvariablen ist auch die Möglichkeit vorgesehen, abgeleitete Werte an abhängige Zufallsvariablen zuzuweisen. Diese Möglichkeit ist beispielsweise bei elementspezifischen Parametern wie Löslichkeitsgrenzen oder K_d -Werten nützlich. In einer Gruppe von Elementen mit ähnlichem chemischen Verhalten wird lediglich etwa die Löslichkeitsgrenze eines Elementes als unabhängige Zufallsvariable betrachtet. Die Löslichkeitsgrenzen der anderen Elemente haben den gleichen Verteilungstyp, so daß sich ihr aktueller Wert aus dem Stichprobenwert des ausgewählten Elementes ermitteln läßt.

Eine Reihe von Eingangsparametern, wie etwa die Dispersionslänge oder die Geschwindigkeit des Grundwassers in der Geosphäre, haben Einfluß auf die Zeitschrittweite bei der numerischen Auswertung des Nuklidtransports durch die Geosphäre. Zur Optimierung der Rechenzeit wird daher im Anschluß an die Zuweisung der aktuellen Eingangsdaten die Zeitschrittweite des Moduls CHET so eingestellt, daß sie den numerisch noch zulässigen maximalen Wert erhält.

Die Ergebnisse jeder einzelnen Simulation des gesamten Endlagersystems sind wie die Ergebnisse einer deterministischen Rechnung nuklidspezifische Zeitverläufe der Strahlenexposition. Diese Zeitverläufe werden als Zeitreihen in einer Datei abgelegt. Dabei werden die Stützpunkte der Zeitreihen, also die Zeitpunkte, zu denen die Dosiswerte abgespeichert werden, vom Anwender im Job-Input-File vorgegeben. Für die weitere statistische Auswertung wird somit aus jeder Simulation eine Matrix abgelegt, die für jedes gerechnete Nuklid und jeden gewählten Zeitpunkt die berechnete Dosis enthält.

1.5 Ergebnisdarstellung

Das Programmpaket EMOS enthält umfassende Möglichkeiten zur Ergebnisausgabe. Die Ausgabe erfolgt zunächst in Dateien, wobei alle Daten in formatierter Form abgelegt werden. Ein Teil dieser Dateien wird nur zur Druckausgabe verwendet, in einer weiteren Gruppe von Dateien werden Zeitverläufe ausgewählter Größen für eine spätere graphische oder tabellarische Ausgabe abgelegt. Schließlich werden bei einer Monte-Carlo-Simulation Dateien angelegt, in denen die berechneten Dosiswerte der einzelnen Simulationen für eine spätere statistische Auswertung abgelegt werden.

Der Umfang der Ergebnisausgabe wird durch entsprechende Angaben im Job-Input-File gesteuert. Die Möglichkeiten der Steuerung sind weitreichend und umfassen zum Beispiel die Auswahl der Teilbereiche des Endlagersystems, für die eine Ausgabe erfolgen soll. Dabei kann diese Auswahl für verschiedene Hauptkomponenten und teilweise für die spätere Druck- oder Plotausgabe unterschiedlich festgelegt werden. Ferner können die Inhalte der Ausgabe, also die physikalischen Größen und andere Ergebnisse, individuell ausgewählt werden. Die EMOS-Rechnung selbst bleibt von diesen Auswahlvorgängen unbeeinflusst.

In die Dateien für eine spätere Druckausgabe können sowohl detaillierte Zwischenergebnisse als auch Endergebnisse der Rechnung ausgegeben werden. Daneben enthält eine dieser Dateien Kurzinformationen über den Rechenlauf, wie den Namen des Anwenders, die verwendete Programmversion oder einen Kommentar zu dem Rechenlauf sowie die Kontrollausgabe der Eingangsdaten entsprechend den Angaben des Anwenders im Job-Input-File. Einige Ergebnisdaten werden in diese Datei in Form von Tabellen ausgegeben, deren Ausdruck unmittelbar in Berichte über die Rechnungen übernommen werden kann.

Typische Beispiele aus einer Rechnung zu einem Laugenzutritt in ein Grubengebäude im Salz sind Tabellen mit Angaben, welcher Teilbereich zu welchem Zeitpunkt mit Lauge gefüllt ist oder aufgrund der Konvergenz der Resthohlräume nicht mehr weiter von Lauge durchströmt werden kann. Die Zeitpunkte, wann die Mobilisierung der Radionuklide aus den verschiedenen Abfallgebindetypen beginnt und abgeschlossen ist oder wann elementspezifische Löslichkeitsgrenzen der Radionuklide in welchen Teilbereichen des Grubengebäudes erreicht werden, können ebenfalls in Tabellenform ausgegeben werden. Im Bereich des Deckgebirges oder der Biosphäre sind Tabellen von Interesse, in denen für jedes Nuklid die Maximalkonzentration im oberflächennahen Grundwasser, bzw. die daraus resultierende Maximaldosis sowie der Zeitpunkt ihres Auftretens eingetragen sind.

Die Ausgabe von Zeitverläufen umfaßt insbesondere die Endergebnisse der drei Hauptkomponenten des Endlagersystems: Freisetzungsraten aus dem Nahbereich, Aktivitätskonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser und Individualdosen. Darüberhinaus können die Zeitverläufe anderer physikalischer Größen, wie der aufgrund der Konvergenz abnehmenden Porosität der Resthohlräume eines Grubengebäudes im Salz oder des Aktivitätsflusses in der Geosphäre, ausgegeben werden. Diese und andere Zeitverläufe können nicht nur an den Enden der jeweiligen Hauptkomponenten des Endlagersystems, sondern für jeden Teilbereich eines Grubengebäudes oder jede Zelle eines Deckgebirgsmodells verfolgt werden.

Zeitverläufe können für eine spätere Druckausgabe und eine Plotausgabe gespeichert werden. Während die Druckausgabe im Rahmen der Prüfung der Einzelheiten einer Rechnung nützlich ist, wird man die graphische Darstellung für die Ergebnisausgabe häufig bevorzugen. Die Schnittstelle des Programmpakets EMOS mit der graphischen und tabellarischen Ausgabe wird durch Dateien gebildet, welche die Zeitverläufe der vom Anwender ausgewählten Größen in formatierter Form enthalten. Die eigentliche graphische Ausgabe erfolgt mit einem eigenständigen Programm EmosPlot, das die interaktive Gestaltung der Graphiken und die Archivierung der Graphikinformation ermöglicht. Die tabellarische Ausgabe erfolgt mit dem eigenständigen Programm EmosPrint.

Eine ähnliche Schnittstelle besteht zwischen dem Programmpaket EMOS und dem Postprozessor EmosStatist, in dem die statistische Auswertung der Ergebnisse einer Monte-Carlo-Simulation erfolgt. Wie am Ende von Kapitel 1.4.2 bereits erwähnt, wird als Ergebnis einer derartigen EMOS-Rechnung aus jeder Simulation eine Matrix abgespeichert, die für jedes gerechnete Nuklid und jeden gewählten Zeitpunkt die berechnete Dosis enthält. In dem statistischen Postprozessor erfolgt die Aufbereitung und Auswertung dieser Daten im Rahmen einer Unsicherheitsanalyse und einer globalen Sensitivitätsanalyse.

In der Unsicherheitsanalyse wird festgestellt, zu welcher Variabilität in den Ergebnissen die Unsicherheiten in den Eingangsdaten führen. Diese Untersuchung kann sowohl für die Dosiswerte einzelner Nuklide als auch für die Summen der nuklidspezifischen Dosiswerte erfolgen. Typische Elemente einer Unsicherheitsanalyse sind das Studium der charakteristischen Parameter der Ergebnisverteilungen wie ihrer Momente, also etwa Mittelwert und Varianz, und ihrer Quantile. Mit der Berechnung von Vertrauensintervallen etwa für die Mittelwerte wird die Güte dieser Schätzwerte dargestellt. In Scatter-Plots wird die Verteilung der Dosiswerte für alle zufällig gezogenen Werte eines Eingangsparameters dargestellt.

Ziel der globalen Sensitivitätsanalyse ist die Quantifizierung des Beitrages der Unsicherheiten in den einzelnen Eingangsparametern zu der Variabilität der Ergebnisse. Dieser Beitrag wird mit Hilfe verschiedener statistischer Techniken, etwa der Regressionsanalyse, der Berechnung von Korrelationskoeffizienten oder der Anwendung von Hypothesentests, ermittelt. Als Ergebnis erhält man eine Tabelle, in der die unsicheren Eingangsparameter in einer Rangfolge angeordnet sind, die ihrem Beitrag zu der Unsicherheit in den Ergebnissen entspricht. Die globale Sensitivitätsanalyse ist damit Entscheidungshilfe bei der Konzentration zukünftiger Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Reduktion der Unsicherheiten in den Eingangsdaten auf wesentliche Parameter.

Sowohl der statistische Postprozessor als auch die Programme EmosPlot und EmosPrint sind eigenständige Programme außerhalb des Programmpakets EMOS und werden in der vorliegenden Dokumentation nicht beschrieben.

1.6 Entwicklungsgeschichte und Weiterentwicklung

Die Entwicklung des Programmpakets EMOS erfolgte in mehreren Phasen. Der Steuerteil von EMOS sowie das Modul für ein Grubengebäude im Salz wurden in den Jahren 1981 bis 1984 im Rahmen des Projektes Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE) an der Technischen Universität Berlin entwickelt. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Entwicklung und Erprobung von Modellansätzen für die Vorgänge im Nahbereich der Abfälle und die Vielzahl der Effekte, die den Transport und die Rückhaltung der freigesetzten Radionuklide beeinflussen. Die programmtechnische Realisierung wurde auf einer CD-Rechenanlage unter Verwendung von Overlay-Strukturen und dynamisch adressierbaren Arbeitsspeichern vollzogen. Eine Dokumentation dieser ersten Version des Programmes liegt nicht vor.

In den Jahren 1985 bis 1995 wurden die Entwicklungsarbeiten an dem Institut für Tief Lagerung des GSF-Forschungszentrums für Umwelt und Gesundheit zunächst auf einer DEC-, später auf einer CONVEX-Rechenanlage und zuletzt auf SUN-Workstations fortgeführt. Schwerpunkte der programmtechnischen Weiterentwicklung waren die Neustrukturierung des gesamten Programms, die Umstellung auf ein virtuelles Betriebssystem, die Entwicklung von Präprozessoren zur Dateneingabe sowie die Erstellung von Postprozessoren zur Datenausgabe und Auswertung statistischer Rechnungen. Bei einem virtuellen Betriebssystem ist die Verwendung von Overlay-Strukturen und dynamisch adressierbaren Arbeitsspeichern durch den Anwender nicht mehr erforderlich.

Bei der Neustrukturierung des Programms wurden insbesondere die Verwaltung der Datenbibliothek, die Datenspeicherung und der Datenfluß im Programm umgestellt. Die Programmteile zur Datenübernahme und Datenaufbereitung wurden neu strukturiert und programmiert. Gleichzeitig wurden Modelle für ein Grubengebäude im Eisenerz entwickelt, so daß das Programm für die Langzeitsicherheitsanalyse des Standortes Konrad eingesetzt werden konnte. Diese Entwicklungen wurden Ende 1985 mit der Dokumentation von EMOS2 [13] abgeschlossen. Die Programmversion EMOS2 wurde im Rahmen des Planfeststellungsverfahrens Konrad angewendet.

In den Jahren 1986 bis 1990 wurden hauptsächlich die Programmteile zur Durchführung einer zeitdiskreten Rechnung im Grubengebäude neu strukturiert. Die modulare Struktur des Programms wurde vervollständigt, der Monte-Carlo-Rahmen wurde implementiert und die räumliche und zeitliche Diskretisierung wurden verfeinert. Eine Reihe von neuen Modellen, etwa für die Mobilisierung der Radionuklide aus verschiedenen Abfallarten (siehe Kapitel 3) oder für einzelne Effekte (siehe Kapitel 5), wurde entwickelt oder verbessert und implementiert.

Als ein wichtiges Beispiel ist die Neugestaltung der Berechnung der Druckverhältnisse und der daraus resultierenden Durchströmung des Grubengebäudes hervorzuheben. Während diese in früheren Programmversionen nacheinander für die einzelnen Teilbereiche des Grubengebäudes erfolgte, wird sie nunmehr durch iterative Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems für alle Teilbereiche gleichzeitig durchgeführt (siehe Kapitel 5.4). Dadurch konnten sowohl die numerische Güte des Programms nachhaltig verbessert als auch die Rechenzeit beträchtlich verkürzt werden.

Zur Berücksichtigung der Unsicherheiten in den Eingangsdaten der Modelle wurde das Programmpaket EMOS um die Möglichkeit der Durchführung einer Monte-Carlo-Simulation erweitert. Die in Abbildung 2 gezeigte Struktur wurde etabliert und die Programmteile SAMPLE zur Erzeugung einer Stichprobe und ASSIGN zur Zuweisung der aktuellen Eingangsdaten wurden neu aufgenommen. Die Ergebnisse der Entwicklungsarbeiten in den Jahren bis 1990 wurden in der Programmdokumentation EMOS4 [14] veröffentlicht.

In den Jahren 1991 bis 1995 lag der Schwerpunkt auf der Entwicklung des Transportprogramms CHET für den eindimensionalen Radionuklidtransport durch die Geosphäre (siehe Kapitel 6). Dieses Programm ersetzt das bisher verwendete Programm TROUGH [15] und ermöglicht eine schnellere Transportrechnung sowie die Implementation nichtlinearer Rückhalte-mechanismen für Radionuklide.

Das gesamte Programmpaket EMOS wurde in den letzten Jahren auf SUN-Workstations portiert und die Dateneingabe und das Postprocessing dieser Umgebung angepaßt. Beispielsweise wurden die Programme EmosPlot zur graphischen Ausgabe von Zeitverläufen, EmosPrint zur Tabellenausgabe und EmosStatist für die statistische Auswertung der Ergebnisse aus Monte-Carlo-Simulationen erstellt. Diese Postprozessoren basieren auf der XWindow-Umgebung der Workstations. Eine ebenfalls XWindow-basierendes Programm zur Erstellung von Dateien mit Eingangsdaten sowie zur Verwaltung und Erstellung von Job-Input-Files und zum Programmstart bildet den vorläufigen Abschluß der aktuellen Programmentwicklung.

Für die nächste Version des Programmpaketes EMOS ist die Berücksichtigung ringförmiger Grubengebäudestrukturen, bei denen zirkulierende Laugenströme innerhalb von Maschen auftreten können, vorgesehen. Durch diese Entwicklung wird EMOS noch flexibler einsetzbar werden, insbesondere bei der Anwendung auf reale Grubengebäude.

2 Modellierung des Endlagers (das Modul REPOS)

2.1 Aufgabenbeschreibung des Moduls REPOS

Im Modul REPOS (final repository = Endlager) wird die Freisetzung von Radionukliden aus einem Endlager berechnet, wobei entweder Bergwerke und Kavernen im Steinsalz oder Hohlräume in anderen Formationen in Betracht kommen. Im folgenden wird für jede geometrische Form eines Endlagers der Begriff Grubengebäude verwendet.

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

Die Berechnung der Nuklidfreisetzung erfolgt im Rahmen der Konsequenzanalyse für ein vorgegebenes Szenario (siehe Kapitel 1). Ein mögliches Szenario für ein Bergwerk im Steinsalz ist, daß Lauge über den Hauptanhydrit in den Bereich des Mittelfeldes des Grubengebäudes und von dort zu den Abfällen vordringt. Als Folge der Gebirgskonvergenz kann anschließend kontaminierte Lauge wieder ausgepreßt werden. Darüberhinaus wird die Möglichkeit eines begrenzten Laugenzutritts aus Laugennestern im umgebenden Gebirge in einen beliebigen Abschnitt des Grubengebäudes betrachtet.

In anderen Wirtsgesteinen kann eine konstante Durchströmung des Grubengebäudes mit Lauge angenommen werden. Die Flexibilität des Moduls REPOS erlaubt es, für beliebige Einlagerungsformationen Freisetzungsberechnungen durchzuführen. In Kapitel 4 werden einige der bisher betrachteten Szenarien und die dazu vorgenommenen Unterteilungen der Grubengebäude in Segmente erläutert. Für andere, bisher nicht berücksichtigte Einlagerungsformationen oder für andere Szenarien können entsprechende Modellierungen vorgenommen werden, indem das vorgegebene Endlager in geeignete Segmente aufgeteilt wird.

Gelangt die in ein Grubengebäude eindringende Lauge an den physikalischen Barrieren, d.h. den Verschlüssen und Dämmen vorbei bis in die Einlagerungsorte der Abfälle, so beginnt dort die Korrosion der eingelagerten Behälter sowie die Mobilisierung der Nuklide aus den Abfällen (siehe Kapitel 3). Nach der Mobilisierung aus den Abfällen werden die Nuklide mit der Lauge durch das Grubengebäude transportiert und an einer bestimmten Stelle in das Deckgebirge freigesetzt. Der Ort der Freisetzung in das Deckgebirge ist abhängig vom gewählten Szenario und wird durch Eingabe in den Strukturdaten und im Job-Input-File ausgewählt (siehe Kapitel 8).

Die Rechnung innerhalb des Moduls REPOS umfaßt den Transport der Lauge bis zu den Abfällen, die Mobilisierung der Nuklide aus den Abfallgebänden und den gesamten Transport der Nuklide durch das Grubengebäude. Der Transport wird unter Berücksichtigung von physikalischen und chemischen Effekten, wie zum Beispiel Ausfüllung und Gebirgskonvergenz berechnet (siehe

Kapitel 5). Die für den vorgegebenen Austrittsort berechneten zeitabhängigen Freisetzungsraten werden als Übergabegrößen an das Deckgebirgsmodul CHET in einer Datei abgespeichert.

Der zeitliche Bezugspunkt ($t = 0$) für eine Freisetzungsberechnung ist das Ende der Betriebsphase, d.h. der Zeitpunkt, an dem die Einlagerung von Abfällen in das Grubengebäude beendet und das gesamte Grubengebäude verfüllt und verschlossen ist (siehe Abbildung 5). Die Einlagerung der Abfälle erfolgt kontinuierlich während der Betriebsphase des Endlagers, d.h. zu Zeitpunkten $t < 0$. Jeder REPOS-Rechenlauf beginnt mit dem Zeitpunkt des Beginns der Betriebsphase des Endlagers, d.h. bei $t = -t_B$.

Die Einlagerungszeitpunkte der einzelnen Abfallgebinde können als Eingangsdaten festgelegt werden. Es ist außerdem möglich, eine Zwischenlagerzeit der Abfälle vor der Einlagerung im Endlager zu berücksichtigen.

Für die Dauer dieser Zwischenlagerzeit wird der Zerfall der Radionuklide berechnet. Die weitere Berechnung des radioaktiven Zerfalls erfolgt in allen Fällen ab dem Beginn der Einlagerung. Ein REPOS-Rechenlauf endet im allgemeinen nach einer im Job-Input-File vorgegebenen Zeitdauer, sofern das Endlager seine Endporosität nicht bereits vorher erreicht hat. Dies wird im folgenden Absatz näher erläutert.

Wie bereits erwähnt, wird bei einem Endlager im Steinsalz die plastische Verformung des Salzes berücksichtigt. Dieser als Gebirgskonvergenz bezeichnete Prozeß führt nach Beendigung der Einlagerung von Abfällen und nach Verfüllung der verbliebenen Hohlräume mit Versatz im Laufe der Zeit zu einer Abnahme der Rest-Hohlraumvolumina. Wird durch diesen Prozeß in einem Teilbereich des Grubengebäudes eine vorgegebene minimale Porosität (Endporosität) unterschritten, so wird dieser Teilbereich als laugenundurchlässig angesehen. Es erfolgt dann keine Laugenbewegung mehr, so daß auch ein weiterer Nuklidtransport durch diesen Teilbereich ausgeschlossen werden kann. Falls das Grubengebäude an der Schnittstelle zum Deckgebirge die Endporosität erreicht hat, hört die Freisetzung in das Deckgebirge auf und der REPOS-Rechenlauf wird vorzeitig beendet.

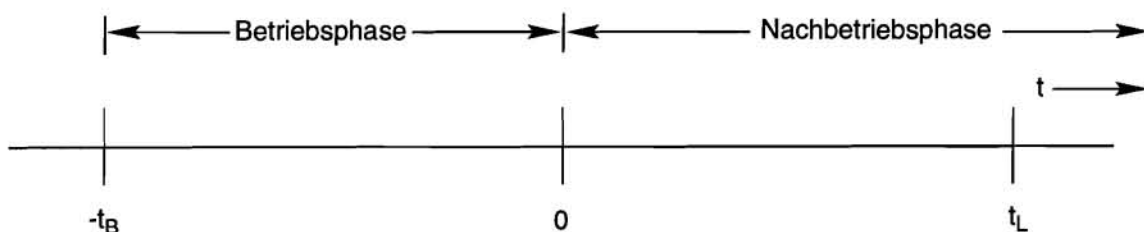


Abbildung 5: Schematische Darstellung der Zeitachse für das Modul REPOS.

t_B = Betriebsdauer des Endlagers

t_L = Zeitpunkt des Laugenzutritts

Als Eingangsdaten für eine Freisetzungsrechnung werden folgende Angaben benötigt:

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

Die Eingabedateien, die alle Informationen zu diesen Bereichen enthalten, werden in Kapitel 8 beschrieben.

Als Ergebnis einer Freisetzungsrechnung werden sowohl Aktivitätsströme an das Deckgebirgsmodul zur weiteren Berechnung übergeben als auch eine Reihe von Dateien zur Druck- und Plotausgabe erstellt (siehe Kapitel 2.4). Beide Dateiarten enthalten vom Anwender ausgewählte zeitabhängige Größen aus der Freisetzungsrechnung, zum Beispiel Aktivitäts- oder Laugenströme. Die Druckausgabe der zeitabhängigen Ergebnisse und von Teilen der Endergebnisse erfolgt mit Hilfe des Postprozessors EmosPrint. Zusätzlich werden Fehlermeldungen und einige weitere Endtabellen in einer Datei mit der Erweiterung out gespeichert, die mit Hilfe eines Editors gelesen werden kann. Die graphische Ausgabe der zeitabhängigen Größen ist nur mit dem Postprozessor EmosPlot möglich.

2.2 Unterteilung des Grubengebäudes

Zur Modellierung der Vorgänge in einem Endlager wird das Grubengebäude in Segmente zerlegt. Die Segmente bestehen aus einem offenen oder versetzten Hohlraum und sind meistens durch einen Verschuß in Richtung zum möglichen Zutrittsort von Lauge aus dem Deckgebirge abgeschlossen. Durch Hintereinanderschaltung von Einzelsegmenten kann ein beliebiges Grubengebäude dargestellt werden, wobei derzeit nur baumförmige Strukturen durch REPOS bearbeitet werden können (siehe Abbildung 6). Das Wurzelsegment der Baumstruktur ist durch den Laugenzutrittsort gegeben und stellt in den bisherigen Sicherheitsanalysen das Mittelfeld eines Grubengebäudes dar. Ein ringförmiges Grubengebäude, bei dem Strecken nach einer Verzweigung wieder zusammenkommen, kann explizit nicht durch eine Baumstruktur dargestellt werden. Bei Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften ist es aber oftmals möglich, ein ringförmiges Grubengebäude in eine Baumstruktur zu überführen.

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

Ein segmentiertes Grubengebäude läßt sich in vielen Fällen schematisch in drei Bereiche einteilen, siehe Abbildung 7:

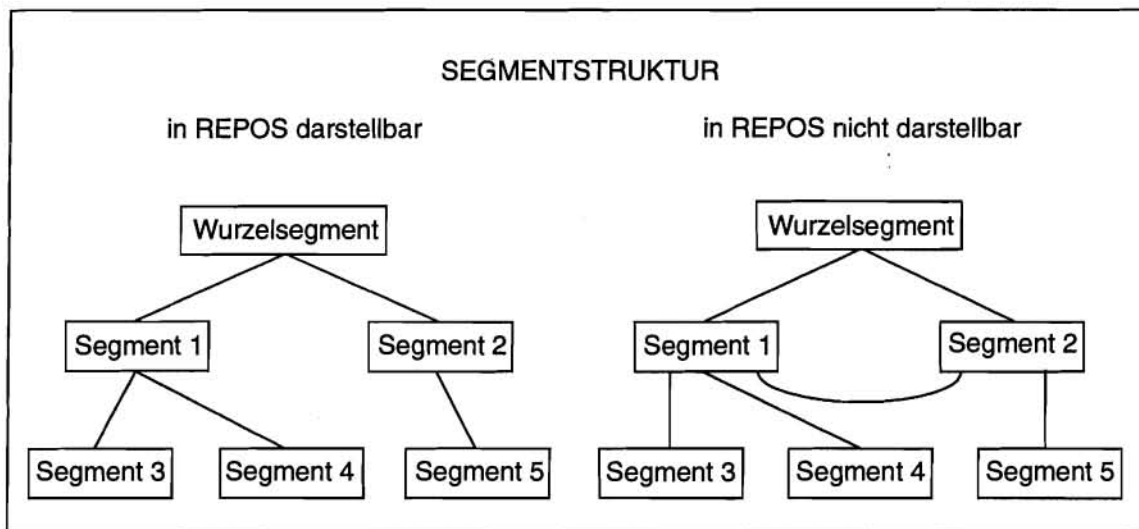


Abbildung 6: Mögliche Segmentstrukturen eines Grubengebäudes. Links: Baumstruktur. Rechts: Ringstruktur mit einer zusätzlichen Verbindung zwischen Segment 1 und Segment 2.

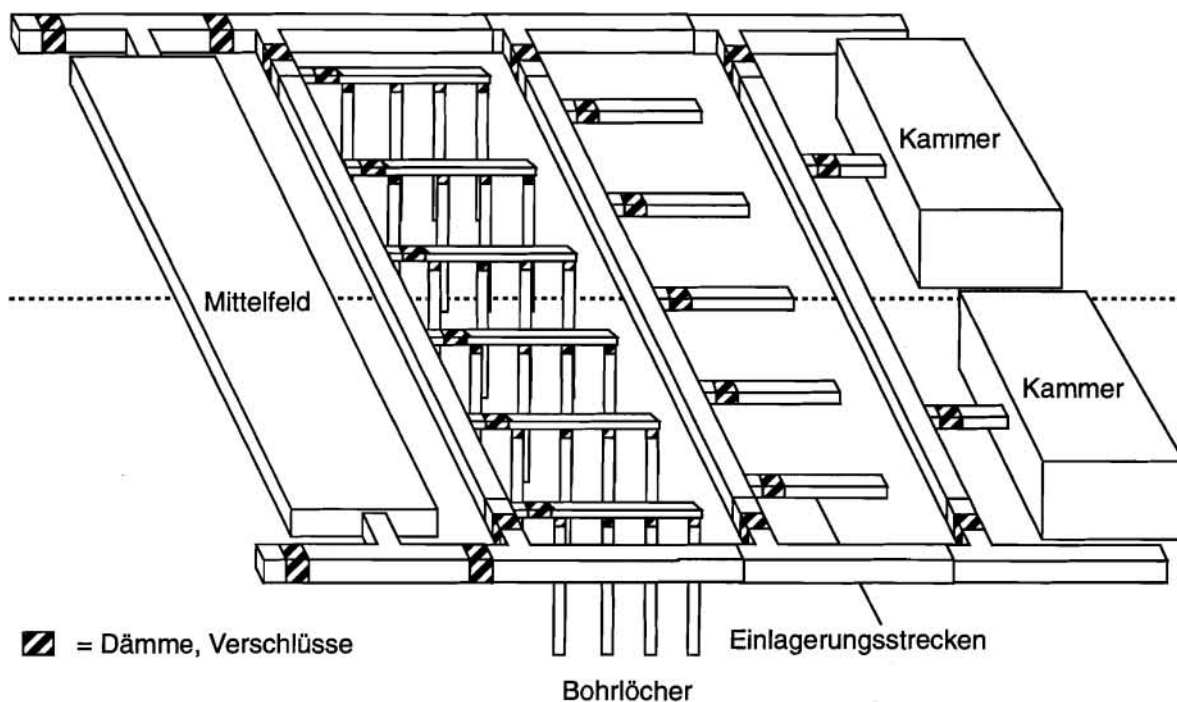


Abbildung 7: Schematische Darstellung typischer Teilbereiche eines Grubengebäudes.

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

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

Die Verbindungsstrecken sind alle Teile eines Grubengebäudes zwischen dem Mittelfeld und den Einlagerungsorten, also die Richtstrecken und Querschläge sowie die Beschickungsstrecken bei der Einlagerung in Bohrlöchern. Die Einlagerungsorte sind Hohlräume mit dem radioaktiven Abfall und entweder Bohrlöcher, Kammern oder Strecken.

Betrachtet man ein beliebiges Segment, das zwischen dem Wurzelsegment und einem Einlagerungsort liegt, so wird für die Anordnung seiner Nachbarsegmente die folgende Bezeichnungweise eingeführt. Als äußere Segmente werden diejenigen in Richtung Wurzelsegment und als innere Segmente diejenigen in Richtung Einlagerungsort bezeichnet. Abfallgebände liegen in dieser so definierten Struktur immer innen.

Um von einem Grubengebäude mit zahlreichen Verbindungsstrecken zu einer baumförmigen Segmentstruktur zu kommen, muß das Grubengebäude gegebenenfalls durch Symmetrieüberlegungen geeignet aufgeteilt werden, etwa durch einen vertikalen Längsschnitt durch das Grubengebäude (siehe gestrichelte Linie in Abbildung 7). Abbildung 8 zeigt schematisch die auf diese Weise entstehende Baumstruktur des Grubengebäudes mit den Abfallgebänden als innerster Ebene und daran anschließend den Einlagerungsorten, den Verbindungsstrecken und dem Wurzelsegment. Die Abfallgebände sind keine Segmente des Grubengebäudes, werden aber in REPOS wie die Segmente behandelt, da in den zugehörigen Modellen vergleichbare Ausgangsgrößen berechnet werden (siehe Ende dieses Kapitels und Kapitel 3).

Aus der Baumstruktur folgt die wichtige Eigenschaft, daß jedes Segment oder Gebinde genau ein äußeres Segment, aber beliebig viele innere Segmente oder Gebinde besitzt. Für das Wurzelsegment gibt es kein äußeres Segment, da es die Schnittstelle zum Deckgebirge darstellt.

Zur Beschreibung der Vorgänge in einem Segment des Grubengebäudes sind Segmentmodelle entwickelt worden. In diesen werden alle Vorgänge berücksichtigt, die zur Modellierung des zugehörigen Teilbereiches des Grubengebäudes notwendig sind. Das Segment wird zu diesem Zweck in einen geometrischen Hohlraum und gegebenenfalls einen Verschuß aufgeteilt. Ein Verschuß kann dabei ein einfaches Abschlußbauwerk, ein komplexer Damm oder ein Bohrlochstopfen sein. Für beide Bereiche des Segments, den geometrischen Hohlraum und den Verschuß, werden die Laugenbewegung, der Nuklidtransport durch Konvektion und Austausch-effekte sowie eine Reihe chemischer und physikalischer Effekte behandelt (siehe Kapitel 5). Bei mehrsöhligen Grubengebäuden ist für jedes Segment die relative Teufe in Bezug auf ein Referenzniveau anzugeben.

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

Außerdem kann es in verschiedenen Bereichen eines Grubengebäudes Segmente geben, in denen gleiche oder ähnliche Vorgänge ablaufen. Diese Segmente können, wenn sie sich in einigen wesentlichen Parametern unterscheiden, nicht zusammengefaßt werden, lassen sich aber durch dasselbe Segmentmodell beschreiben. Ein Beispiel für die Aufteilung eines Grubengebäudes in Segmente nach diesem Verfahren enthält Referenz [4].

Alle bisher für die Modellierung von Grubengebäuden entwickelten Segmentmodelle werden in Kapitel 4 beschrieben. Es stehen in REPOS insgesamt 14 Segmentmodelle zur Beschreibung folgender Bereiche zur Verfügung:

- Modelle für Einlagerungsorte,
- Modelle für Verbindungsstrecken,
- Modelle für spezielle Teile des Grubengebäudes,
- Modelle für spezielle Szenarien.

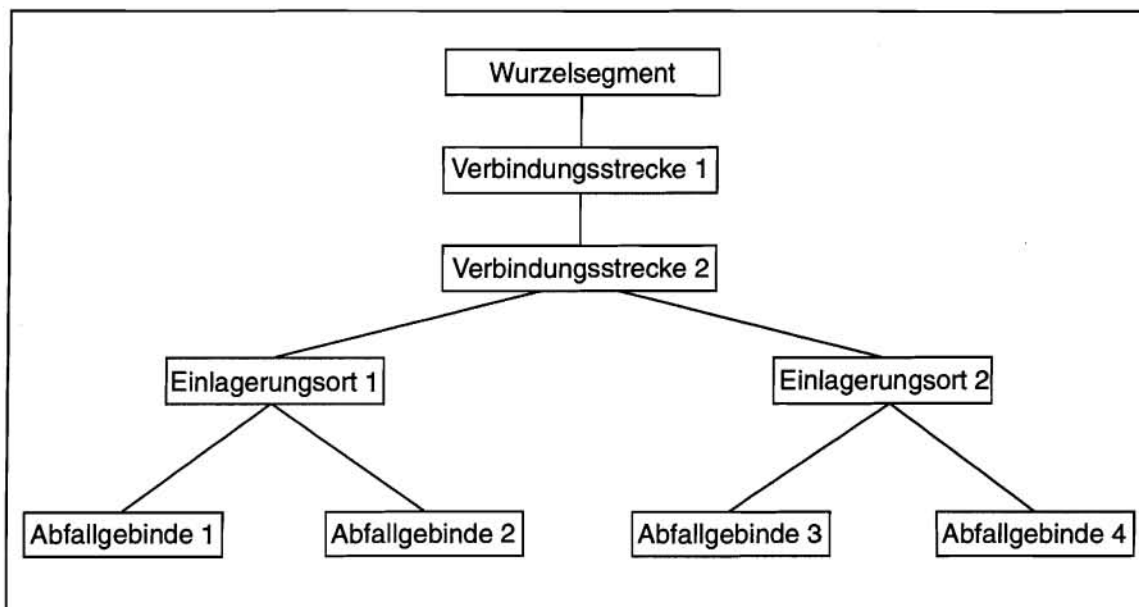


Abbildung 8: Schematische Anordnung der Segmente und Abfallgebinde in einem Grubengebäude. Die zeitliche Abarbeitung der entsprechenden Modelle erfolgt von unten nach oben (siehe Kapitel 2.3.3).

Für Einlagerungsorte wurden Modelle von Bohrlöchern, Strecken und Kammern entwickelt. Bei Verbindungsstrecken sind Modelle vorhanden, die einen Verschuß oder einen Damm berücksichtigen und solche, die keinen Abschluß enthalten. Die Modelle für spezielle Teile eines Grubengebäudes beschreiben diejenigen Segmente, in denen ein begrenzter oder unbegrenzter Laugenzufluß in das Endlager stattfinden kann. Dies sind das Wurzelsegment, d.h. im allgemeinen das Mittelfeld eines Grubengebäudes und die begrenzten Laugeneinschlüsse.

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

Für eine Reihe von speziellen Szenarien wurden weitere Modelle entwickelt. Das Modellvolumen für ein durchströmtes Grubengebäude beschreibt zum Beispiel einen Hohlraum mit radioaktivem Inventar, der nicht konvergiert und mit konstanter Rate von Lauge durchströmt wird. Das Segmentmodell für das Subrosionsszenario behandelt die Freisetzung von Radionukliden aus einem Endlager, das nach Ablaugung des Salzstockes über dem Endlager direkt dem Grundwasser ausgesetzt ist und kontinuierlich durch Laugeneinwirkung abgetragen wird. Im Kavernenszenario wird angenommen, daß eine Kaverne zur Speicherung von Öl, Gas oder ähnlichem ein ehemaliges Endlager im Steinsalz trifft und nach Betriebsende der Kaverne mit Lauge voll läuft. Durch die Gebirgskonvergenz kann anschließend kontaminierte Lauge aus der Kaverne gepreßt werden.

Zur Berechnung der Nuklidfreisetzung aus einem Endlager werden neben den Segmentmodellen, die alle Vorgänge in den Teilbereichen des Grubengebäudes behandeln, weitere Modelle benötigt, welche die Mobilisierung aus den Abfallgebinden beschreiben (siehe Kapitel 3). In diesen Mobilisierungsmodellen werden die Aktivitätsströme berechnet, die in jedem Zeitschritt aus einem Abfallgebinde in die umgebende Lauge übergehen. Zusätzlich werden noch zwei weitere Ausgangsgrößen berechnet, die Gasproduktion aus der Korrosion der Abfallbehälter und die Gasproduktion aus der Radiolyse der Lauge durch α -, β - und γ -Strahlung des im Gebinde vorhandenen Inventars. Die Gasproduktionsraten werden vom Mobilisierungsmodell an die übergeordneten Segmentmodelle der Einlagerungsorte weitergegeben, da sie Einfluß auf die Laugenbewegung in den Segmenten haben.

Die Gebinde lassen sich wie die Segmente durch Berücksichtigung ihrer Anzahl zu Einheiten zusammenfassen, sofern sie in allen wesentlichen Parametern übereinstimmen. Ebenso können ähnliche Gebinde, die sich in wesentlichen Parametern unterscheiden, durch dasselbe Mobilisierungsmodell beschrieben werden.

Für folgende Abfallarten stehen in REPOS insgesamt fünf Mobilisierungsmodelle zur Verfügung:

- verglaste hochaktive Abfälle,
- zementierte mittelaktive Abfälle,
- abgebrannte Brennelemente.

Alle Modelle werden in Kapitel 3 ausführlich beschrieben.

2.3 Ablauf einer Freisetzungsberechnung

Eine Freisetzungsberechnung mit dem Modul REPOS umfaßt programmtechnisch einen Eingabeteil und einen Rechenteil. Der Eingabeteil besteht aus dem Programm IREPOS und hat die Aufgabe, die eingegebenen Daten für die Rechnung aufzubereiten und den Rechenteil REPOS mit Daten zu versorgen (siehe Kapitel 2.3.1 und 2.3.2). Im Rechenteil werden die Nuklidströme und andere zeitabhängige Größen für alle Bereiche des Grubengebäudes zeitschrittweise berechnet (siehe Kapitel 2.3.3).

Wie im vorigen Kapitel dargestellt, wird ein Endlager für eine Freisetzungsberechnung in Abfallgebände und Segmente aufgeteilt. Die Mobilisierungsmodelle beschreiben den Nuklidübergang aus den Abfallgebänden in die Lauge, die Segmentmodelle die Vorgänge in den entsprechenden Segmenten des Grubengebäudes. Die Anzahl und die Anordnung der einzelnen Abfallgebände und Segmente sind vom angenommenen Szenario und dem betrachteten Grubengebäude abhängig und frei wählbar mit der Einschränkung, daß die Gebände in der Struktur des Grubengebäudes immer an unterster Stelle stehen. Alle Modelle werden bei jedem Zeitschritt einer REPOS-Rechnung in der Reihenfolge abgearbeitet, in der sie in der Datei mit den Strukturdaten abgelegt sind. Dieser Programmteil wird im folgenden als Segmentenschleife bezeichnet und behandelt neben den Segmentmodellen auch die Mobilisierungsmodelle.

Eine schematische Darstellung des Ablaufs einer Freisetzungsberechnung zeigt Abbildung 9. Der obere Teil dieser Abbildung beschreibt die Eingabe und Aufarbeitung der Eingangsdaten im Programmteil IREPOS. Vor Beginn der Zeitschleife werden einige Eingangsdaten auf lokale Variablen in den Segment- und Mobilisierungsmodellen zugewiesen. Im mittleren Teil der Abbildung ist die Zeitschleife des Moduls REPOS dargestellt. In dieser Schleife werden einerseits die Laugendrucke und Laugenströme für alle Segmente global berechnet und andererseits alle Rechnungen der Segmentenschleife durchgeführt. Am Beginn und Ende der Rechnung werden Daten für die Druckausgabe abgespeichert, während des Durchlaufens der Zeitschleife werden zeitabhängige Daten wahlweise in Dateien für die Druckausgabe und die graphische Ausgabe abgespeichert.

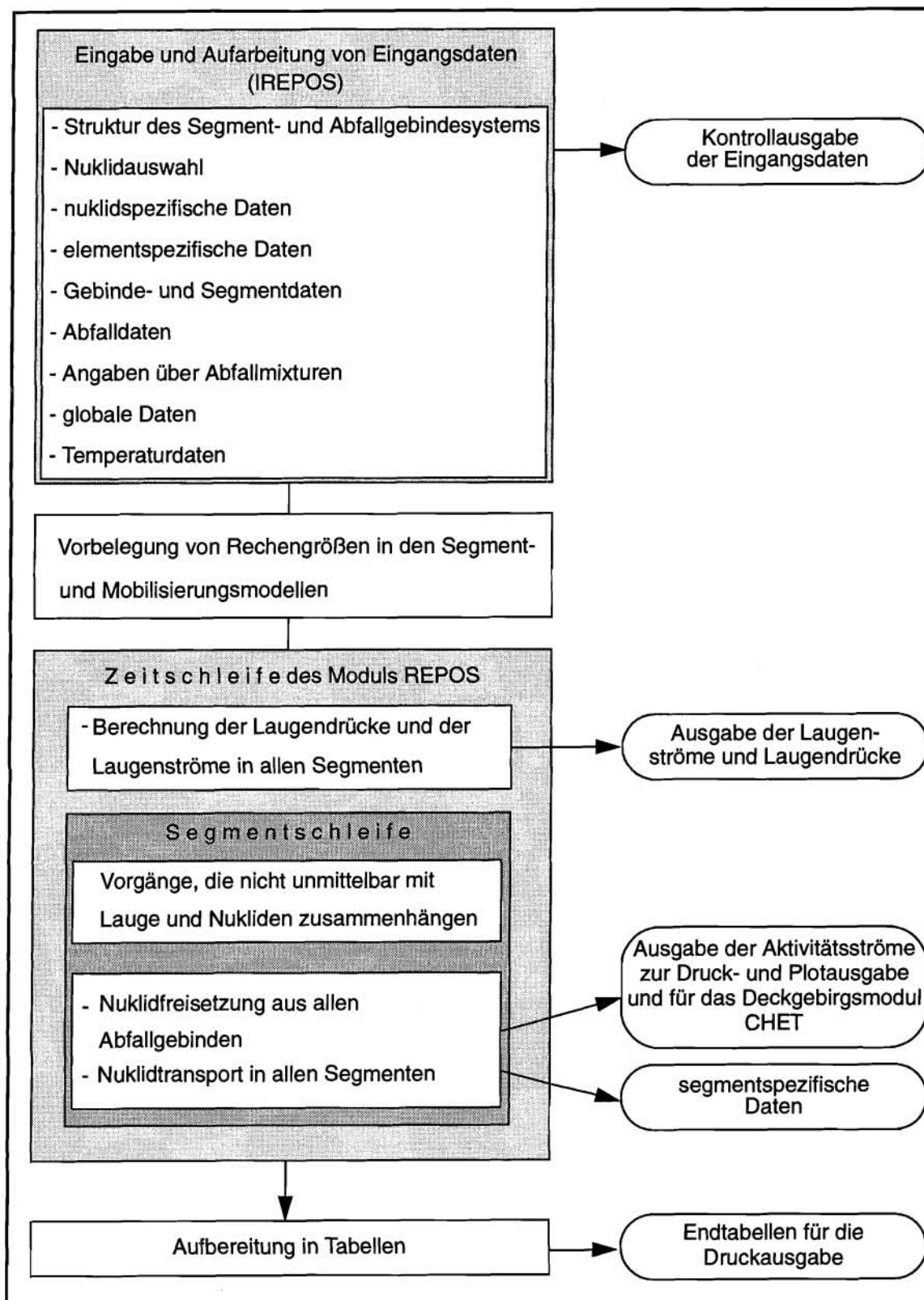


Abbildung 9: Fließschema einer Freisetzungsrechnung mit dem Eingabeteil IREPOS und dem Rechenteil REPOS. Die Segmentschleife wird innerhalb der Zeitschleife bei jedem Zeitschritt einmal durchlaufen.

Art der Eingabedatei	Inhalt der Eingabedatei
globale Daten (GODA-Datei)	Referenz-Konvergenzrate physikalische Konstanten Gebirgsdruck und hydrostatischer Druck Anfangs porositäten Endporosität Parameter der Modellansätze
elementspezifische Daten (ELDA-Datei)	für jedes Element: Mobilisierungsdauern Löslichkeitsgrenzen Sorptionsdaten
Strukturdaten (SUDA-Datei)	Verknüpfungsplan der Gebinde und Segmente eines Grubengebäudes
Gebindedaten (BADA-Datei)	für jedes Abfallgebinde: Zuordnung des Mobilisierungsmodells gebindespezifische Mobilisierungsdauern Behälterstandzeiten Einlagerungszeitpunkte
Segmentdaten (BADA-Datei)	für jedes Segment: Zuordnung des Segmentmodells geometrische Abmessungen Angaben über zusätzliche Hohlräume Einlagerungszeitpunkte Angaben zur Temperaturberechnung Reduktionsfaktoren zur Berücksichtigung der Stützwirkung der Behälter
Abfalldaten (ABDA-Datei)	für jeden Gebindetyp: Massen und Volumina der Abfallgebinde abfallspezifische Zwischenlagerzeit Nuklidinventare
Angaben zu den Abfallmixturen (AMDA-Datei)	Zusammensetzung von Mixturen aus Einzelabfällen
nuklidspezifische Daten (NUDA-Datei)	für jedes Nuklid: Halbwertszeit Strahlungsart (α , β , γ) Verknüpfung der Zerfallsreihen
Temperaturdaten (TEDA-Datei)	für jede räumliche Stützstelle: Temperaturwerte zu festen Zeitpunkten

Tabelle 1: Beispiele für den Inhalt der Eingabedateien aus der Datenbibliothek für einen REPOS-Rechenlauf. In Klammern die Namen der Dateien (siehe Kapitel 8).

2.3.1 Datenversorgung

Wie in Kapitel 1 dargelegt wurde, sind alle Eingangsdaten für einen EMOS-Rechenlauf entweder in der Datenbibliothek oder im Job-Input-File abgelegt. Die Eingabe und Aufbereitung der Daten für REPOS erfolgt über den Programmteil IREPOS. Für jede Freisetzungsberechnung werden aus der Datenbibliothek beispielsweise Eingangsdaten für die Abfallgebinde und die Segmente des Grubengebäudes, über die Art und Anzahl der eingelagerten Abfälle, sowie allgemeine physikalische und chemische Daten benötigt (siehe Tabelle 1).

Weitere Eingabegrößen, die für den REPOS-Rechenlauf benötigt werden, stehen im Job-Input-File zur Verfügung. Diese Datei ist für jeden Rechenlauf spezifisch und enthält für eine Freisetzungsberechnung die folgenden Angaben:

- Namen der benötigten Bibliotheksdateien,
- Nuklidauswahl für die REPOS-Rechnung,
- Auswahl eines Segmentes, für das die Nuklidfreisetzung aus dem Endlager berechnet werden soll (= Schnittstelle zur Deckgebirgsrechnung),
- Steuerparameter für die Berechnung der Zeitschrittweite,
- Steuerparameter für die Druck- und Plotausgabe:
 - Nuklid- und Segmentauswahl,
 - Nuklidauswahl für die Berechnung von Massensummen,
- Zeitangaben zum Szenarienablauf:
 - Dauer der Freisetzungsberechnung,
 - Dauer der Betriebsphase des Endlagers,
 - Zeitpunkt des Laugenzutritts in das Endlager,
 - globale Zwischenlagerzeit für alle Abfälle.

Alle eingelesenen Daten werden im Programmteil IREPOS in COMMON-Blöcken gespeichert und stehen damit allen Unterprogrammen des Moduls REPOS zur Verfügung.

2.3.2 Nuklidauswahl

Das Modul REPOS benötigt aus der Datenbibliothek zwei Dateien mit nuklidspezifischen Daten. Eine Datei (ABDA) enthält die Nuklidinventare und andere Abfalldaten für jeden Abfalltyp, die andere Datei (NUDA) die übrigen nuklidspezifischen Daten, wie Halbwertszeiten und Strahlungsart (siehe Tabelle 1 und Kapitel 8). Aus dieser Datenbasis für eine große Anzahl von Nukliden kann durch Auswahl einzelner Nuklide eine beliebige Teilmenge verwendet werden. Der Zweck der Nuklidauswahl ist vor allem die Reduzierung der Rechenzeit für eine Freisetzungsberechnung, da viele Berechnungen in Nuklidschleifen erfolgen. Außerdem ergibt sich eine bessere Übersichtlichkeit und leichtere Interpretierbarkeit von Ergebnissen durch die Beschränkung auf wesentliche Nuklide.

Die Nuklide werden im Job-Input-File durch Angabe ihrer Namen ausgewählt. Im Programmteil IREPOS werden für die ausgewählten Nuklide die entsprechenden Daten aus der nuklidspezifischen Datenbasis in REPOS-spezifische COMMON-Blöcke übernommen. In diesem Programm-

teil wird also der Nuklidvektor der Datenbasis verkürzt und gleichzeitig der Bezug der einzelnen Nuklide untereinander in den Zerfallsketten neu festgelegt.

Die für eine REPOS-Rechnung benötigten Abfalldaten sind in der ABDA-Datei abgelegt, deren Nuklidzahl der nuklidspezifischen Datenbasis entsprechen muß. Entsprechend der Nuklidwahl werden hieraus die Inventare der ausgewählten Nuklide übernommen. Außerdem besteht die Option, die Inventare von nicht ausgewählten, in der Regel kurzlebigen Mutternukliden, zu den Inventaren der ausgewählten Tochternuklide zu addieren.

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

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

2.3.3 Die Zeitschleife des Moduls REPOS

Nach der Eingabe und Aufbereitung der Daten sowie der Nuklidwahl im Programmteil IREPOS wird mit der Zeitschleife des Programmteils REPOS die eigentliche Freisetzungsrechnung eröffnet (siehe Abbildung 9). Für jeden Zeitpunkt ab Beginn der Betriebsphase bis zum vorgesehenen Ende der Freisetzungsrechnung werden in variablen Zeitschritten für alle Abfallgebinde und für alle Segmente eines Grubengebäudes die für die Freisetzung relevanten Größen berechnet, z.B. die Laugen-, Nuklid- und Gasströme oder die Änderungen der geometrischen Abmessungen der Segmente. Kernstück der Zeitschleife sind die Rechnungen innerhalb der Segmentschleife, also die Berechnung aller Vorgänge in den einzelnen Gebinden und Segmenten des Grubengebäudes. Erreicht das Wurzelsegment seine Endporosität, so wird die Zeitschleife vorzeitig abgebrochen.

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

- räumliche Diskretisierung in Segmente und Gebinde, in denen einige Parameter als ortsunabhängig angesehen werden können (siehe Kapitel 2.3.1),
- zeitliche Diskretisierung zur Umwandlung der Differentialgleichungen in Differenzgleichungen.

In den folgenden Unterkapiteln werden zunächst die Rechenschritte beschrieben, die aus der räumlichen Diskretisierung herrühren (siehe Kapitel 2.3.3.1) und danach die in der Zeitschleife außerhalb der Segmentschleife notwendigen Rechnungen (siehe Kapitel 2.3.3.2). In Kapitel 2.3.3.3 wird das Verfahren geschildert, das zur Festlegung einer neuen Zeitschrittweite führt.

2.3.3.1 Die Segmentschleife

In der Segmentschleife werden alle Mobilisierungs- und Segmentmodelle entsprechend der Struktur des Grubengebäudes durchlaufen und die jeweiligen Ausgangsgrößen berechnet. Die Reihenfolge des Durchlaufs durch das Gebinde- und Segmentensystem ist in der Datei mit den gebinde- und segmentspezifischen Daten abgelegt. In jedem Zeitschritt beginnt der Durchlauf jeweils bei den Abfallgebänden, gefolgt von den Einlagerungssegmenten und dem Streckensystem des Grubengebäudes bis zum Wurzelsegment (siehe Abbildung 8).

Die in einem Mobilisierungs- oder Segmentmodell berechneten Ausgangsgrößen, wie beispielsweise Nuklidströme oder Gasströme werden an die äußeren Segmentmodelle weitergegeben. Diese weitergegebenen Ausgangsgrößen sind Eingangsgrößen der benachbarten äußeren Segmentmodelle. In Abbildung 10 ist die Weitergabe von berechneten Größen für ein vorgegebenes Segment dargestellt. Die im aktuellen Zeitschritt berechneten Ausgangsgrößen stehen dem benachbarten äußeren Segment wegen des Durchlaufs durch die Segmentschleife von innen nach außen bereits im aktuellen Zeitschritt zur Verfügung (Pfeil E_2). Den inneren Segmenten und dem betrachteten Segment selbst sind sie aber erst im neuen Zeitschritt als Eingangsgrößen bekannt (Pfeile E_x und E_1).

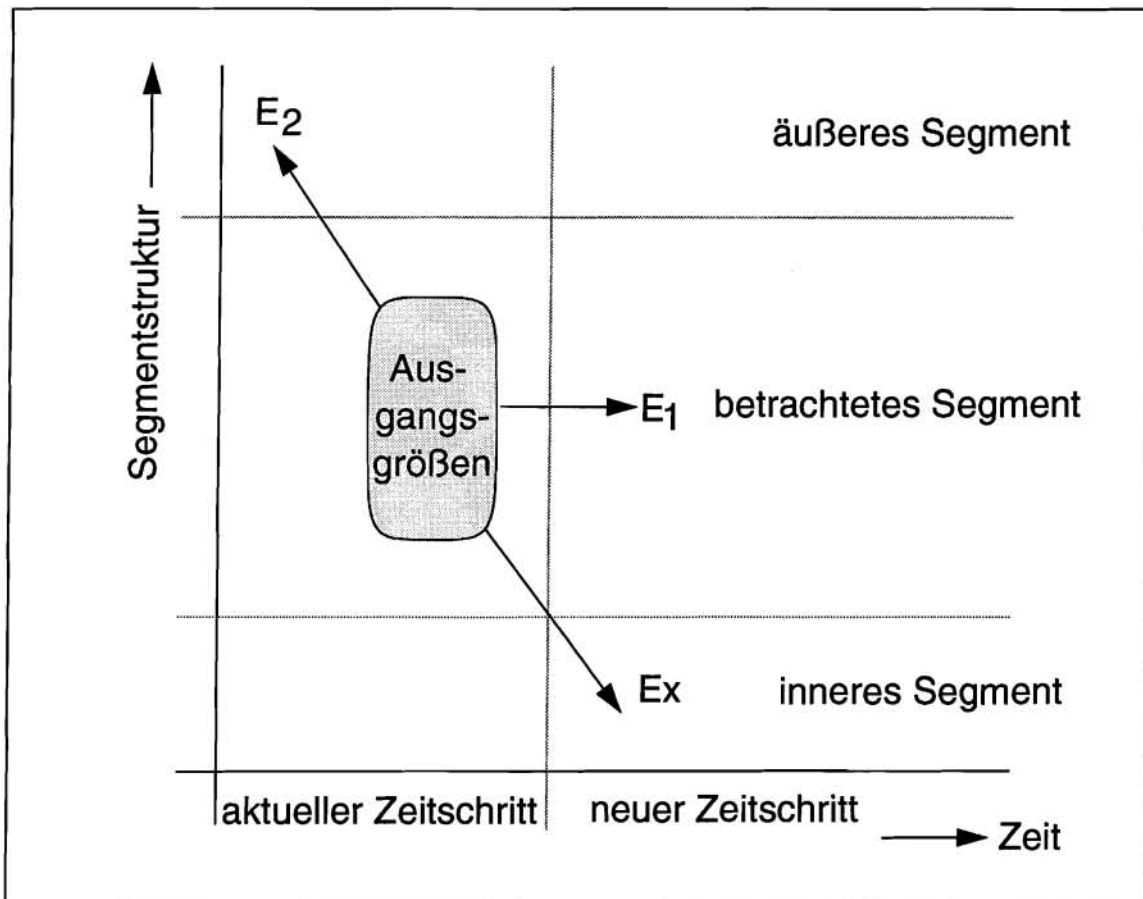


Abbildung 10: Weitergabe von berechneten Ausgangsgrößen an benachbarte Segmente in Bezug zum zeitlichen Ablauf eines REPOS-Rechenlaufs.

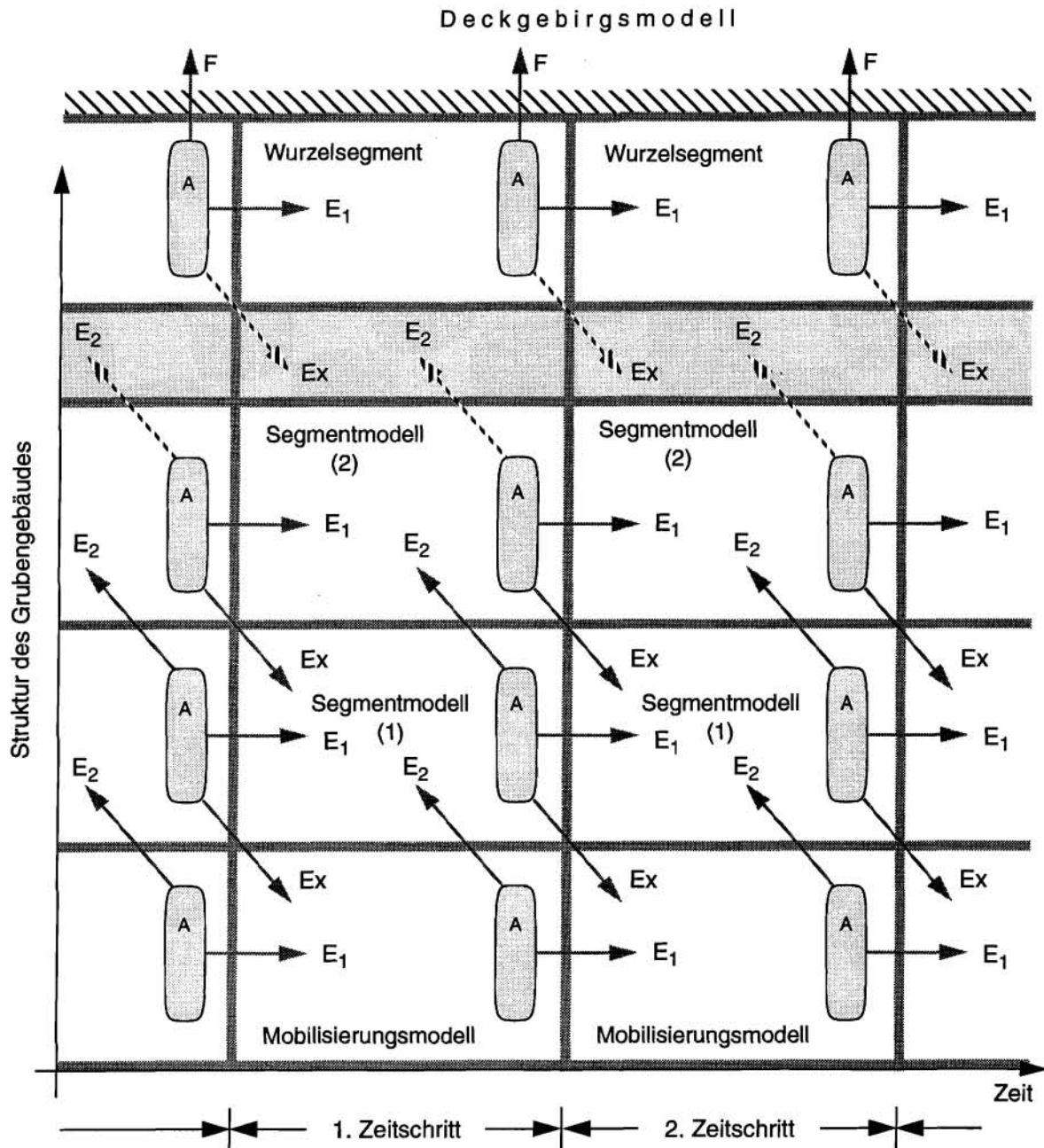


Abbildung 11: Schematischer Ablaufplan einer Freisetzungsrechnung mit dem Datenfluß zwischen den Modellen.

- A : Berechnete Ausgangsgrößen in einem Segment- oder Mobilisierungsmodell
- E_1 : Eingangsgrößen aus dem alten Zeitschritt
- E_2 : Eingangsgrößen aus dem inneren Segment- oder Mobilisierungsmodell aus demselben Zeitschritt
- Ex : Eingangsgrößen aus dem benachbarten äußeren Segment aus dem alten Zeitschritt
- F : Freisetzungsraten in das Deckgebirge

Zu einem festen Zeitpunkt erfolgt auf diese Weise eine sukzessive Berechnung der Ausgangsgrößen von den Abfallgebänden zum Wurzelsegment hin (siehe Abbildung 11). Da das Wurzelsegment die Verbindungsstelle zum Deckgebirge ist, wird durch dieses Verfahren unter anderem der Nuklidtransport von den Abfällen zum Freisetzungsort in das Deckgebirge hin berechnet. Wie bereits erwähnt, erfolgt außer dem Datentransfer von inneren Segment- und Mobilisierungsmodellen zu äußeren Segmentmodellen auch ein Datentransfer von einem äußeren Segmentmodell in ein inneres Modell. Damit wird beispielsweise erreicht, daß die Mobilisierung aus einem Abfallgebände unmittelbar nach dem Fluten des Einlagerungsortes beginnt, oder daß ein Segmentmodell für die weiteren Berechnungen abgeschaltet wird, sobald ein äußeres Segment seine Endporosität erreicht hat und damit keinen Nuklidtransport mehr zuläßt.

2.3.3.2 Rechnungen außerhalb der Segmentschleife

Für die Berechnung des Laugendruckes und der Laugenströme in den einzelnen Segmenten wird ein anderes numerisches Verfahren verwendet, als bei der Berechnung der im vorangehenden Kapitel beschriebenen übrigen Vorgänge in den Segmenten. Laugendruck und Laugenströme werden global vor der Segmentschleife in allen Segmenten gleichzeitig berechnet (siehe Kapitel 5.4). Durch diese Vorgehensweise werden numerische Probleme vermieden und Rechenzeit eingespart.

Nach Beendigung der Segmentschleife werden alle neu berechneten Größen für eine eventuelle Druck- und Plotausgabe sowie zur Übergabe an das Deckgebirgsmodul CHET in Ausgabedateien gespeichert (siehe Abbildung 9). Bei Bedarf werden Kontrollrechnungen über das aktuelle Nuklidinventar in allen Segmenten und Abfallgebänden durchgeführt. Zum Abschluß wird der nächste anzusteuernde Zeitpunkt, bzw. die neue Zeitschrittweite berechnet (siehe das folgende Kapitel).

Die Zeitschrittweiten in REPOS orientieren sich an den Erfordernissen einer Freisetzungsberechnung und sind variabel. Dadurch liegen die Freisetzungsraten aus dem Freisetzungsort in das Deckgebirge zu variablen Zeitpunkten vor. Der anschließenden Deckgebirgsrechnung mit dem Modul CHET werden die Freisetzungsraten ab Beginn der Freisetzung mit Hilfe der *rns*-Datei übergeben. Das Modul CHET interpoliert aus den variablen Zeitschritten intern die Freisetzungsraten für äquidistante Zeitpunkte (siehe Kapitel 6).

2.3.3.3 Steuerung der Zeitschrittweiten

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

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

Die Steuerung der Schrittweite erfolgt auf zwei unterschiedliche Weisen:

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

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

Die Zielgröße bei der lokalen Steuerung ist sowohl die Zeitschrittweite als auch der Zeitpunkt. Bei der Vorgabe einer Zeitschrittweite aus einem einzelnen Effekt oder einem individuellen Segment werden im allgemeinen auch relative Änderungen von physikalischen Größen betrachtet, wobei jedoch die betrachtete Größe und auch das verwendete Kriterium individuell sind. Die Steuerung über Zeitpunkte erlaubt die Berechnung von Größen, die zu vorgegebenen Zeitpunkten vorliegen sollen. Die Vorgabe eines anzusteuernenden Zeitpunktes erfolgt beispielsweise, wenn Einlagerungszeitpunkte eines Gebindes berücksichtigt werden müssen oder wenn der Anfangszeitpunkt eines Laugenzutritts eingehalten werden muß.

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

Die Steuerung der Zeitschrittweite für kontinuierliche Prozesse basiert auf der relativen Änderung von Aktivitätsströmen und Laugenströmen in allen Segmenten und Gebinden, wobei untere und obere Grenzwerte nicht unter- oder überschritten werden. Die Untergrenze der Zeitschrittweite Δt_u wird als globale Größe vom Anwender vorgegeben und dient zur Vermeidung unnötig langer Rechenzeiten. Die Obergrenze Δt_o wird aufgrund der individuellen Meldungen einzelner Segmente und Effekte jeweils neu festgelegt. Eine Übersicht über die Schrittweitensteuerung für kontinuierliche Prozesse ist in Abbildung 12 dargestellt.

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

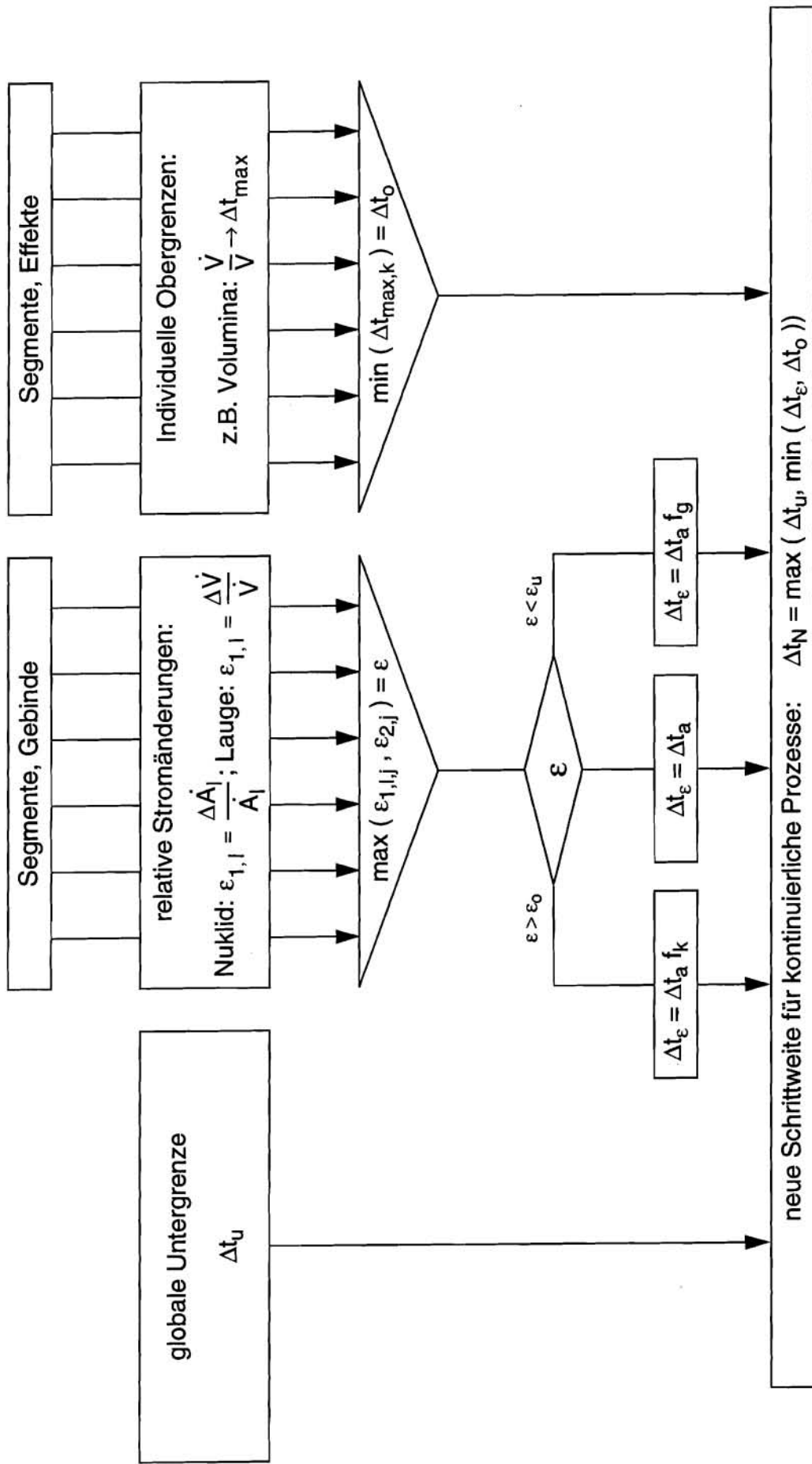


Abbildung 12: Steuerung der Zeitschrittweite für kontinuierliche Prozesse.

mung mit Lauge wird der gesamte Laugenvolumenstrom \dot{V}_L im Verhältnis zum gesamten Porenraum $V_{P,G}$ betrachtet und folgende maximale Schrittweite definiert:

$$\Delta t_{\max, 1} = \frac{V_{P,G}}{|\dot{V}_L|} \quad (1)$$

Die zweite Anforderung ergibt sich aus Diffusionsprozessen, die durch einen fiktiven Austauschstrom $\dot{V}_{L,D}$ repräsentiert werden können. Bezogen auf das verfügbare Porenvolumen wird eine Obergrenze der Zeitschrittweite wie folgt bestimmt:

$$\Delta t_{\max, 2} = \frac{1}{2} \frac{V_{P,G}}{|\dot{V}_{L,D}|} \quad (2)$$

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

$$\Delta t_{\max, 3} = \frac{\phi}{K} f_{\text{rel}} \quad (3)$$

Durch den Parameter f_{rel} wird die Obergrenze der relativen Änderung des Porenvolumens in einem Zeitschritt durch den Anwender vorgegeben.

Bei der Berücksichtigung von relativen Änderungen von Strömen wird ein umfangreiches Verfahren zur Schrittweitensteuerung verwendet. Zuerst wird das Maximum ε_1 der relativen Änderungen der Aktivitätsströme im aktuellen Zeitintervall Δt_a ermittelt. Es gilt:

$$\varepsilon_1 = \max_{i,j} \left| \frac{|\dot{A}_{i,j}(t - \Delta t_a)| - |\dot{A}_{i,j}(t)|}{|\dot{A}_{i,j}(t - \Delta t_a)|} \right| \quad (4)$$

mit dem Nuklidindex i , dem Index j für Segmente und Abfallgebände und dem Aktivitätsstrom \dot{A} . Die relative Änderung der Aktivitätsströme kann nur für Nuklide berechnet werden, für die der Nenner in Gleichung 4 nicht verschwindet, d.h. die im vorhergehenden Zeitschritt einen Nuklidstrom aufwiesen. Darüberhinaus wird Gleichung 4 für solche Nuklide verwendet, die der folgenden Bedingung genügen:

$$\frac{\dot{A}_{i,j}(t) \Delta t_a}{\int_0^t \dot{A}_{i,j}(t') dt'} > \alpha. \quad (5)$$

Die Bedingung 5 bewirkt, daß der Nuklidstrom kurzlebiger Nuklide zu großen Zeiten, wo deren Aktivität auf unbedeutende Werte abgeklungen ist, die Zeitschrittweite nicht mehr beeinflußt. Die Schranke α für die minimal transportierte Aktivität im aktuellen Zeitintervall Δt_a , bezogen auf die insgesamt bis zu diesem Zeitpunkt aus dem Gebinde oder Segment heraustransportierte Aktivität, kann beliebig vorgegeben werden.

Die gleiche Rechnung wie für die Aktivitätsströme wird für die relative Änderung der sonstigen zeitschrittrelevanten Ausgangsströme durchgeführt, wobei in der vorliegenden Version von REPOS nur der Laugenausgangsstrom \dot{V}_L jedes Segments verwendet wird:

$$\varepsilon_2 = \max_j \left| \frac{|\dot{V}_{L,j}(t - \Delta t_a)| - |\dot{V}_{L,j}(t)|}{|\dot{V}_{L,j}(t - \Delta t_a)|} \right|. \quad (6)$$

Der Index j bezieht sich auf die Segmente. Das Maximum ε der auf diese Weise bestimmten relativen Änderungen ε_1 und ε_2 (siehe Gleichungen 4 und 6),

$$\varepsilon = \max(\varepsilon_1, \varepsilon_2), \quad (7)$$

wird dann in der folgenden Weise zur Zeitschrittsteuerung verwendet. Liegt das Maximum der relativen Stromänderungen in einer vorgegebenen Bandbreite,

$$\varepsilon_u \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0, \quad (8)$$

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

$$\varepsilon_u = \varepsilon_m f_K^2, \quad (9)$$

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_m f_G^2 \quad (10)$$

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

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

$$\Delta t_\varepsilon = \begin{cases} \Delta t_a f_G & \text{für } \varepsilon_u > \varepsilon \\ \Delta t_a & \text{für } \varepsilon_u \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0 \\ \Delta t_a f_K & \text{für } \varepsilon > \varepsilon_0 \end{cases} \quad (11)$$

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

$$\Delta t_o = \min_k (\Delta t_{\max, k}) \quad (12)$$

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

$$\Delta t_N = \max [\Delta t_u, \min (\Delta t_\varepsilon, \Delta t_o)] \quad (13)$$

Die auf diese Weise ermittelte neue Zeitschrittweite wird in REPOS immer dann verwendet, wenn keine direkt anzusteuenden Zeitpunkte vorliegen. Falls innerhalb des nächsten Zeitintervalls ($t_a, (t_a + \Delta t_N)$) ein anzusteuender Zeitpunkt vorliegt, so wird der früheste Zeitpunkt angesteuert und die Zeitschrittweite dementsprechend angepaßt. Die diesbezügliche Vorgehensweise ist in Abbildung 13 dargestellt.

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

- Einlagerung der Gebinde in einem Einlagerungsort,
- Beginn des Behälterausfalls und der Mobilisierung,
- Beginn des unbegrenzten Laugenzuflusses in das Wurzelsegment,
- Beginn des Zuflusses aus einem begrenzten Laugeneinschluß,

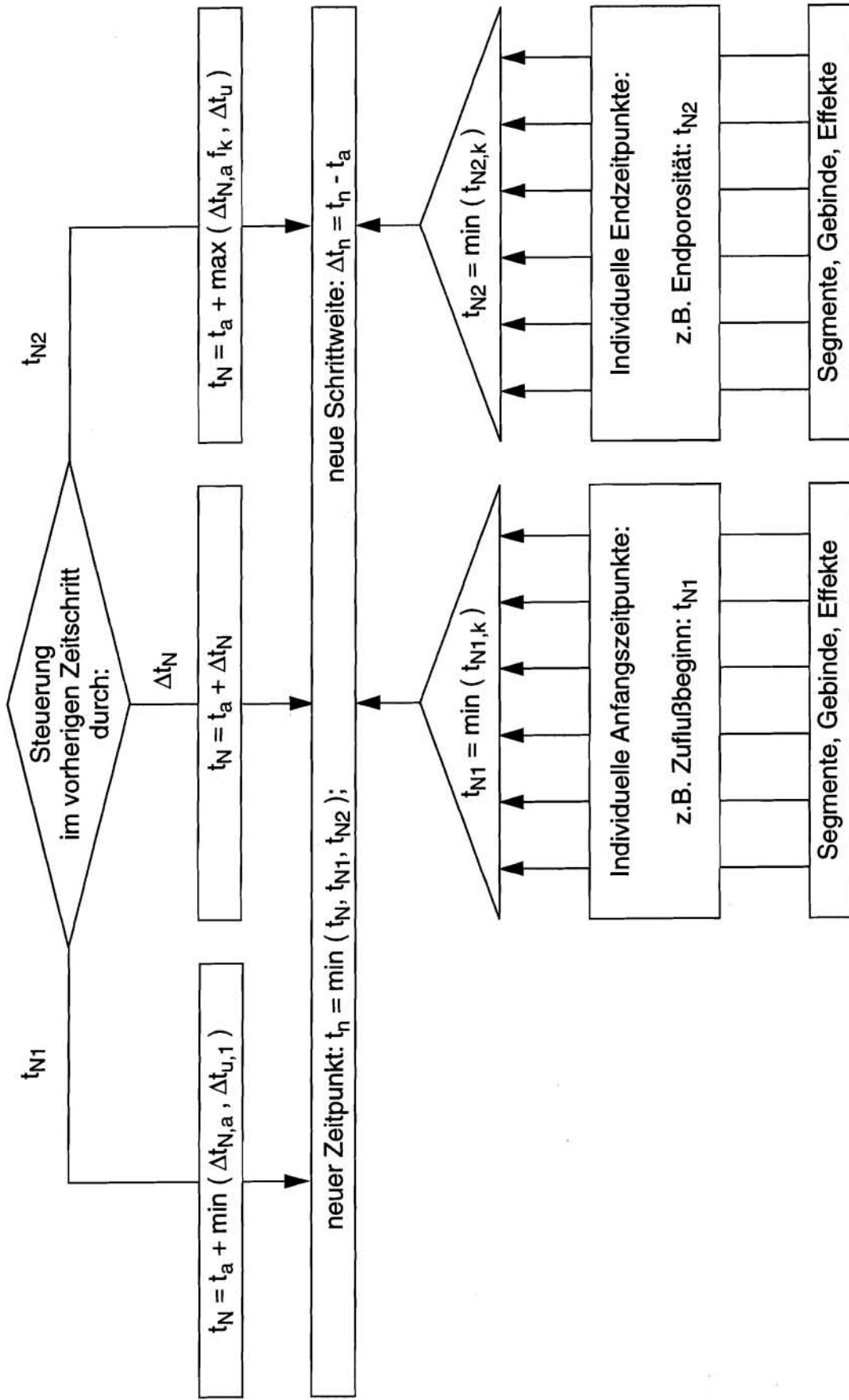


Abbildung 13: Steuerung der Zeitschrittweite unter Berücksichtigung diskontinuierlicher Prozesse.

- Zeitpunkt des spontanen Laugenzuflusses in ein Segment,
- Zeitpunkt des Vollaufens eines Segments mit Lauge.

Nach Erreichen des anzusteuernenden Zeitpunktes beginnt dann ein neuer Prozeß, auf den die Schrittweitensteuerung aufgrund von relativen Stromänderungen nicht vorbereitet sein kann. Nach Erreichen des anzusteuernenden Zeitpunktes wird daher die Schrittweite auf einen vorzugebenden Anfangswert $\Delta t_{u,1}$ reduziert, falls nicht schon die Schrittweite im vorangegangenen Zeitschritt ausreichend klein war.

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

- Ende des Behälterausfalls und der Mobilisierung,
- Erreichen der vorausgerechneten Endporosität von Versatz.

Die Ansteuerung solcher Zeitpunkte ist zum korrekten Abschluß bereits laufender Prozesse notwendig. Da die aktuelle Schrittweitensteuerung den Prozeß über relative Schrittweitenänderungen bereits berücksichtigt und diese Anforderung nach Erreichen des anzusteuernenden Zeitpunktes entfällt, kann dann im darauffolgenden Zeitschritt die ursprünglich vorgesehene Zeitschrittweite $\Delta t_{N,a}$ verwendet werden, wobei diese sicherheitshalber vom Anwender reduziert werden kann. Falls ein Endzeitpunkt gleichzeitig der Anfangszeitpunkt eines neuen Prozesses ist, so ist die Steuerung über die Ansteuerung von Anfangszeitpunkten zu verwenden.

Innerhalb der Zeitschleife von REPOS können in jedem Segment- und Mobilisierungsmodell mehrere anzusteuernende Zeitpunkte vorgegeben werden, wobei diese immer über dem aktuellen Zeitpunkt t_a liegen müssen. Die Festlegung der Einzelzeitpunkte in einem Segment- oder Mobilisierungsmodell orientiert sich an den zu berücksichtigenden Effekten. Der nächste anzusteuernende Zeitpunkt ergibt sich als Minimum aus allen Einzelmeldungen jeweils zu

$$t_N = \min_k(t_{N,k}) \quad (14)$$

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

Während einer vorgegebenen Anzahl von Zeitschritten zu Beginn einer REPOS-Rechnung wird die Zeitschrittweite auf einem konstanten Anfangswert $\Delta t_{u,0}$ gehalten, der vom Anwender vorgegeben ist. Hierdurch wird vermieden, daß in der Anfangsphase Fehler durch die Steuerung mit neu belegten Größen auftreten. Bei jedem Zeitschritt wird zur Information in der Druckausgabe abgespeichert, welcher Effekt für die Zeitschrittsteuerung aktuell verantwortlich war.

2.4 Ergebnisdarstellung

Während eines REPOS-Rechenlaufes werden wahlweise mehrere Dateien für die graphische Ausgabe und die Druckausgabe sowie stets eine weitere Datei mit ausgewählten Tabellen zur Druckausgabe angelegt und beschrieben. Die spezielle Datei für die Druckausgabe enthält ausgewählte Eingangsdaten und ausgewählte Tabellen mit Rechenergebnissen, wobei die Auswahl der auszugebenden Ergebnisse über das Job-Input-File erfolgt (siehe Kapitel 8.1). Es kann angegeben werden, für welche Nuklide, Abfallgebinde und Segmente die Tabellen ausgegeben werden.

Für die Druckausgabe zeitabhängiger Größen und für die graphische Ausgabe wird eine Gruppe von zusammengehörigen Dateien erstellt, die nach Beendigung des EMOS-Rechenlaufes mit Postprozessoren (EmosPrint oder EmosPlot) bearbeitet werden können. Die zu erstellenden Dateien und deren Inhalte werden im Job-Input-File ausgewählt. Dabei enthalten einige Dateien Informationen zu mehreren in REPOS berechneten Größen (siehe Kapitel 2.4.1 und 2.4.2).

2.4.1 Druckausgabe

Wichtige Daten des Rechenlaufs und die Endergebnisse der Rechnungen sind formatiert in der Standard-Ausgabedatei von EMOS abgelegt. Diese Datei mit der Erweiterung out enthält zunächst Angaben über das Datum der Rechnung und den Benutzer sowie den Namen des Job-Input-Files. Neben den Daten aus dem REPOS-Rechenlauf werden in dieser Datei Ergebnisse von Transportrechnungen mit dem Deckgebirgsmodul CHET (siehe Kapitel 6) und Ergebnisse von Dosisberechnungen mit dem Modul EXPOS (siehe Kapitel 7) abgelegt.

Aus einem REPOS-Rechenlauf können optional folgende Daten in Tabellenform ausgegeben werden:

- a) Eingangsdaten der Rechnung:
- Steuerdaten und Nuklidauswahl,
 - Globale Daten,
 - Element- und nuklidspezifische Daten,
 - Temperaturdaten,
 - Strukturdaten,
 - Segment- und Gebindedaten,
 - Nuklidinventare und Angaben zu Abfallmixturen.

Die Tabellenausgabe dieser Daten erfolgt nur über die Datei mit der Erweiterung out.

- b) Daten nach Beendigung des REPOS-Rechenlaufes:
- aus dem Grubengebäude freigesetzte Aktivitäten und Massen (absolut oder in Bezug auf das eingelagerte Inventar),

- aus einem ausgewählten Abfallgebinde oder Segment transportierte Aktivitäten (absolut und in Bezug auf das eingelagerte Inventar, bzw. in Bezug auf die Gesamtfreisetzung),
- Chronik aller Abfallgebinde und Segmente, d.h. die Zusammenstellung von charakteristischen, gebinde- und segmentspezifischen Zeitpunkten (beispielsweise Beginn und Ende des Laugenzutritts),
- Zeitpunkte des Erreichens von Löslichkeitsgrenzen in allen Segmenten,
- maximale Element- und Nuklidkonzentrationen in allen Segmenten,
- Laugenvolumina im gesamten Endlager und in ausgewählten Segmenten.

Die Daten nach Beendigung des Rechenlaufes werden außer in der Datei mit der Erweiterung out auch in einer speziell formatierten Datei mit der Erweiterung ret (Repos Endtabellen) gespeichert. Mit Hilfe des Postprozessors EmosPrint können hieraus Endtabellen erstellt werden, die für die Weiterverarbeitung mit einer Textverarbeitung geeignet sind.

c) zeitabhängige Größen:

Die Ausgabe der Ergebnisse innerhalb der Zeitschleife von REPOS erfolgt über mehrere Dateien und nur über den Postprozessor EmosPrint. In diesen Dateien stehen die folgenden Daten bereit:

Datei mit der Erweiterung rad (allgemeine Daten):

- für jeden Zeitschritt:
 - aktueller Zeitpunkt und Nummer des Zeitschrittes,
 - Effekte, die auf die aktuelle Zeitschrittsteuerung Einfluß nehmen,
 - Angabe, welches Segment und welcher Effekt den aktuellen Zeitschritt gesteuert hat.

Datei mit der Erweiterung rvs (Vorspann):

- Anzahl und Auswahl der in REPOS gerechneten Nuklide,
- Anzahl und Auswahl der Segmente und Abfallgebinde zur Druck- und graphischen Ausgabe,
- Für jedes ausgewählte Segment oder Abfallgebinde:
 - Anzahl und Bezeichnung der Übergangsströme (RUS) sowie der physikalischen Größen (RBP).

Datei mit der Erweiterung rns (Nuklidstrome):

- Für jeden Zeitschritt:
 - aktueller Zeitpunkt,
 - für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Segment und jedes weitere ausgewählte Segment oder Abfallgebinde der aktuelle Wert des Nuklidstroms für jedes in REPOS gerechnete Nuklid.

Datei mit der Erweiterung rss (sonstige Strome):

- Für jeden Zeitschritt:

- aktueller Zeitpunkt,
- für jedes ausgewählte Segment oder Abfallgebinde der aktuelle Wert jedes Übergangstroms und des Leitwertes.

Datei mit der Erweiterung rzv (sonstige zeitlich veränderliche Variablen)

- Für jeden Zeitschritt:
 - aktueller Zeitpunkt,
 - für jedes ausgewählte Segment oder Abfallgebinde der aktuelle Wert jeder sonstigen zeitlich veränderlichen Größe.

Datei mit der Erweiterung rnd (Nukliddatensätze)

- Für jeden Zeitschritt:
 - aktueller Zeitpunkt,
 - für jedes ausgewählte Segment oder Abfallgebinde das aktuelle Inventar und maximal 9 weitere segment- oder abfallspezifische Daten für jedes in REPOS gerechnete Nuklid.

Dabei ist jeweils die Anzahl auszuwählender Segmente oder Abfallgebinde auf 10 begrenzt.

Die Dateien rvs und rns dienen neben der Druck- und graphischen Ausgabe der Übergabe an das Deckgebirgsmodul CHET. Das bedeutet, daß diese beiden Dateien bei jedem Rechenlauf erstellt werden, bei dem nachfolgend eine Rechnung mit dem Deckgebirgsmodul CHET erfolgt. Die Dateien rns, rss, rzv und rnd werden nur erzeugt, wenn sie im Job-Input-File ausgewählt wurden.

2.4.2 Graphische Ausgabe

Für die graphische Ausgabe wird die gleiche Gruppe von Ausgabedateien wie für die Druckausgabe zeitabhängiger Größen verwendet (siehe Punkt (c) des vorhergehenden Kapitels 2.4.1). Mit Hilfe des Postprozessors EmosPlot können aus jeweils einer Gruppe zusammengehörender Dateien Bilder erzeugt werden. Das Programm EmosPlot ist nicht Bestandteil des Programmpaketes EMOS. Es ermöglicht die interaktive Erzeugung und Verwaltung von Bildbeschreibungsdateien und die Ausgabe von Graphiken auf dem Bildschirm oder in eine Datei zur Weiterverarbeitung mit einer Textverarbeitung.

3 Die Mobilisierungsmodelle

Das in einem Abfallgebände enthaltene Nuklidinventar kann nur dann freigesetzt werden, wenn bei einem für eine Langzeitsicherheitsanalyse zugrundegelegten Störfall Lauge in einen Einlagerungsort gelangt. Dieser Übergang von Nukliden aus Abfallgebänden in die umgebende Lauge wird als Mobilisierung bezeichnet und mit Hilfe von Mobilisierungsmodellen beschrieben.

Ein Mobilisierungsmodell berücksichtigt neben dem Behälterausfall die durch Lauge verursachte Umsetzung der Abfallmatrix zu Korrosionsprodukten und die Diffusion von Radionukliden aus der Abfallmatrix. Je nach Abfallart werden diese Teilprozesse in detaillierter Form oder pauschal z.B. durch eine konstante Rate beschrieben. Es wird angenommen, daß die in der Matrix verteilten Nuklide bei der Mobilisierung zunächst vollständig in die Lauge übergehen. Eine möglicherweise anschließende Ausfällung oder Sorption an den Korrosionsprodukten und am Versatzmaterial wird nicht in den Mobilisierungsmodellen, sondern in den Segmentmodellen für die Einlagerungsorte behandelt (siehe Kapitel 4.2).

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

In einem Einlagerungsort sind im allgemeinen eine Vielzahl gleichartiger Abfallgebände vorhanden. Während der Ausfall eines einzelnen Behälters ein Zufallsereignis ist, kann bei einer ausreichend großen Anzahl der Ausfall der Gesamtheit der Behälter deterministisch beschrieben werden. Zur Berechnung des Anteils ausgefallener Behälter wird dann die Verteilungsfunktion der Behälterlebensdauer verwendet.

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

Die Mobilisierung aus den Abfallgebänden ergibt sich aus der Überlagerung von drei Prozessen, dem Behälterausfall, der Korrosion der Abfallmatrix und der Diffusion aus der Abfallmatrix. Zur Beschreibung des Gesamtprozesses der Mobilisierung aus der Gesamtheit gleichartiger Abfallgebände wird in den meisten Mobilisierungsmodellen eine effektive Mobilisierungsrate $\dot{\mu}_{\text{eff}}$ als relative Rate eingeführt. Diese Rate beschreibt sowohl den Ausfall der Behälter als auch den Aktivitätsübergang aus der Abfallmatrix in die Lauge. In dem Mobilisierungsmodell MOBL2 wird die effektive Mobilisierungsrate nicht verwendet und die Mobilisierungsrate für jeden Behälter einzeln berechnet.

Der Aktivitätsstrom aus allen Abfallgebänden ergibt sich durch Multiplikation der effektiven Mobilisierungsrate mit dem gesamten eingelagerten Inventar. Für Zeitpunkte nach der Einlagerung ist dies ein hypothetisches Inventar, das sich aus dem Anfangsinventar unter alleiniger Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls ergibt. Das hypothetische Inventar ist ein anderer Begriff für das in den Gebänden aktuell noch vorhandene Inventar plus dem bereits mobilisierten Inventar. Im

Mobilisierungsmodell MOB2 wird der gesamte Aktivitätsstrom aller Gebinde durch Addition der Aktivitätsströme der Einzelbehälter ermittelt.

Für folgende Abfallarten stehen Mobilisierungsmodelle zur Verfügung. In Klammern ist jeweils der Name des Modells im Modul REPOS angegeben:

- verglaste hochaktive Abfälle, (MOBG5)
- zementierte Abfälle bei unbegrenzten Laugenmengen, (MOBZ6)
- zementierte Abfälle bei begrenzten Laugenmengen, (MOBZ7)
- abgebrannte Brennelemente aus Hochtemperatur-Reaktoren, (MOBH1)
- abgebrannte LWR-Brennelemente mit gleichförmigem Behälterausfall, (MOBL1)
- abgebrannte LWR-Brennelemente mit diskretem Behälterausfall. (MOBL2)

Bei anderen Abfallarten, beispielsweise bituminierten oder unverfestigten Abfällen, können diese Mobilisierungsmodelle in einigen Fällen durch geeignete Parameterbestückung ebenfalls verwendet werden. Falls dies nicht möglich ist, können entsprechende Mobilisierungsmodelle entwickelt werden.

Die verglasten hochaktiven Abfälle entstehen bei der Wiederaufarbeitung abgebrannter Brennelemente und werden in Kokillen endgelagert. Die zementierten Abfallgebände enthalten die meisten der anfallenden schwach- und mittelaktiven Abfälle aus der Wiederaufarbeitung, dem Kraftwerksbetrieb, der Forschung und anderen Quellen. Im Mobilisierungsmodell MOBZ6 wird die Korrosion der Zementmatrix mit einem einfachen linearen Zeitgesetz modelliert. In dem Modell MOBZ7 wird der gesamte Prozeß der Mobilisierung detaillierter behandelt. Es wird die Korrosion der Zementmatrix durch angreifende Lauge in Abhängigkeit von der Verfügbarkeit von Magnesium in der Lauge berechnet und die Diffusion der Nuklide aus der intakten Zementmatrix berücksichtigt.

Die abgebrannten Brennelemente aus LWR- und HTR-Reaktoren werden bei der direkten Endlagerung im allgemeinen in dickwandigen Behältern endgelagert. Die kugelförmigen Brennelemente aus HTR-Reaktoren werden bei Bohrlochlagerung in einfache Fässer und bei der Streckenlagerung in spezielle HTR-Polluxbehälter gefüllt. Die stabförmigen LWR-Brennelemente werden bei der Bohrlochlagerung in Pollux-Kokillen und bei der Streckenlagerung ebenfalls in Pollux-Behältern eingelagert. Für die Pollux-Behälter mit LWR-Brennelementen wird im Modell MOB1 die Aktivitätsfreisetzung nach dem bereits beschriebenen Verfahren über die effektive Mobilisierungsrate μ_{eff} berechnet. Im Modell MOB2 wird der Behälterausfall explizit als Zufallereignis berücksichtigt und die Aktivitätsfreisetzung aus jedem Behälter einzeln berechnet.

Außer der Mobilisierung der Nuklide wird in den Mobilisierungsmodellen die Gasentwicklung aus der Korrosion des Behältermaterials und die Gasentwicklung aus der radiolytischen Zersetzung der Lauge aufgrund des nicht mobilisierten Aktivitätsinventars berechnet (siehe Kapitel 5.5). Als wesentliche Ausgangsgrößen aus einem Mobilisierungsmodell stehen für jeden Zeitschritt der Aktivitätsstrom der Nuklide sowie die Gasströme aus der Behälterkorrosion und der Radiolyse der Lauge zur Verfügung.

3.1 Berechnung des Behälterausfalls

Zur Endlagerung radioaktiver Abfälle sind eine Reihe von Behältern entwickelt worden, die in Bezug auf ihre Barrierenfunktion unterschiedliche Anforderungen erfüllen. In Abbildung 14 sind eine Reihe von üblichen Abfallbehältern für die Endlagerung radioaktiver Abfälle dargestellt.

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

Um die Vielzahl der Behältertypen in allen Mobilisierungsmodellen berücksichtigen zu können, wurde ein gemeinsames Unterprogramm entwickelt, das den Behälterausfall durch drei verschiedene Gesetze beschreibt. Als Lebensdauer der Behälter kann dabei entweder eine Gleichverteilung, eine Exponentialverteilung oder eine Normalverteilung verwendet werden.

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

$$n_B(\tau) = \frac{N_B(\tau)}{N_B(0)} = F(\tau), \quad (15)$$

als Verteilungsfunktion der Behälterlebensdauer berechnet. Desweiteren wird der relative Zuwachs an ausgefallenen Behältern pro Zeiteinheit,

$$\dot{n}_B(\tau) = \frac{\dot{N}_B(\tau)}{N_B(0)} = f(\tau), \quad (16)$$

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

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

$$\tau = t - t_L, \quad (17)$$

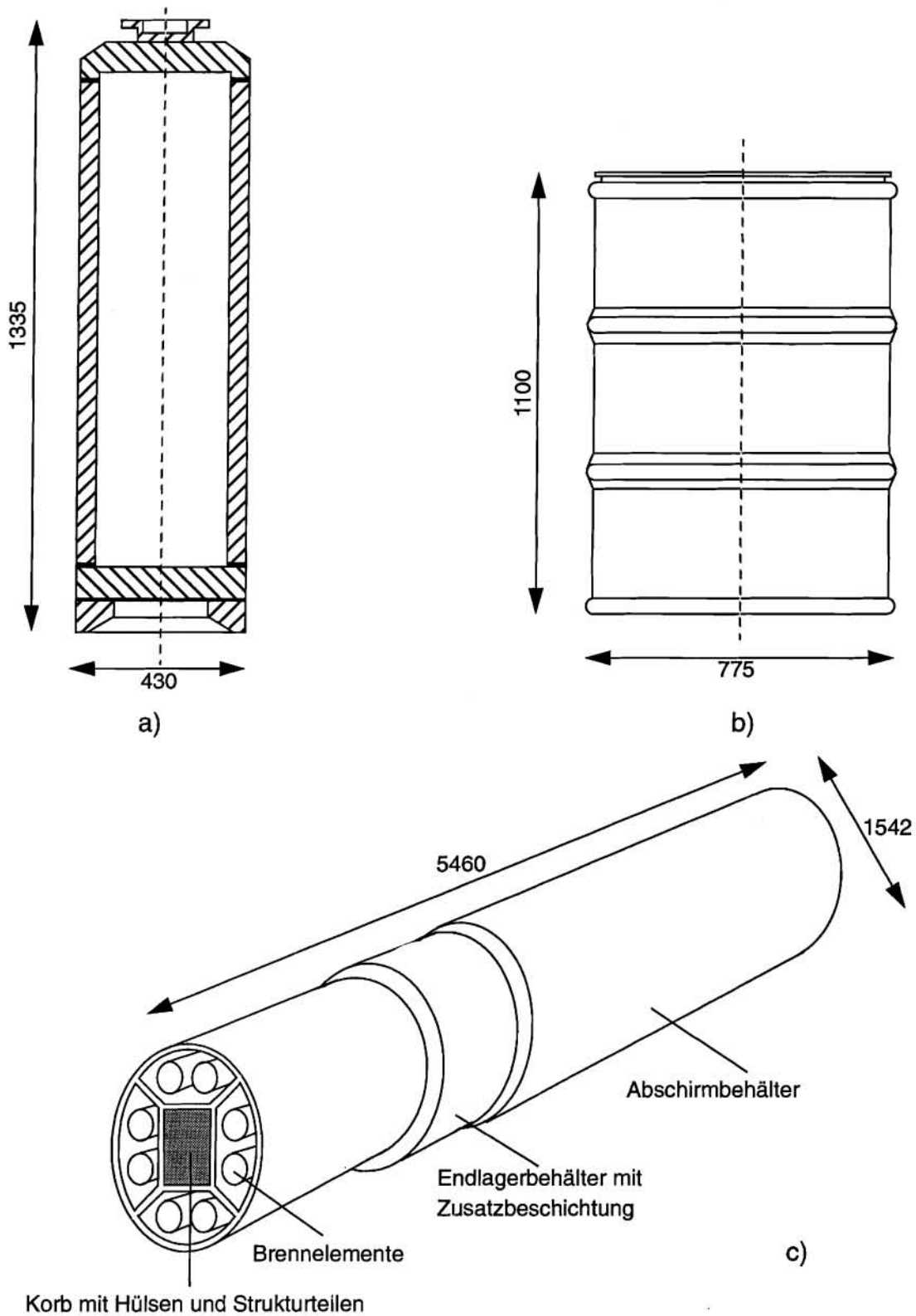


Abbildung 14: Beispiele für Behälter mit radioaktiven Abfällen. a) Kokille für LWR-Brennelemente, b) Rollsickenfaß für zementierte Abfälle, c) Pollux-Behälter für LWR-Brennelemente. Alle Maßangaben sind in mm.

wobei t_L der Zeitpunkt des Laugenzutritts ist. Da der Behälterausfall nur für Zeiten nach dem Laugenzutritt berechnet wird, sind negative Werte von τ nicht möglich.

Im Mobilisierungsmodell MOBL2 wird der Behälterausfall als Zufallsereignis behandelt, d.h. es wird aus einer vorgegebenen Verteilung der Behälterlebensdauern mit einem Zufallsverfahren die Lebensdauer jedes einzelnen Behälters ermittelt. In diesem Fall wird nicht von einer Behälterausfallrate gesprochen, sondern stets von der Anzahl ausgefallener Behälter. Die Mobilisierung muß dann für jeden Behälter getrennt behandelt werden, siehe in der Beschreibung des Mobilisierungsmodells in Kapitel 3.6.

3.1.1 Gleichverteilte Lebensdauer der Behälter

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

Der Anteil ausgefallener Behälter $n_B(\tau)$ steigt linear von Null zu Beginn des Behälterausfalls auf Eins bei der maximalen Behälterlebensdauer τ_B an (siehe Abbildung 15). Die maximale Lebensdauer ist bei Gleichverteilung doppelt so groß wie die mittlere Lebensdauer der Behälter τ_{Bm} . Für Zeiten, die größer als die maximale Lebensdauer sind, ist die Ausfallrate $\dot{n}_B(\tau)$ Null. Die Behälterausfallrate und der Anteil der ausgefallenen Behälter ergeben sich demnach zu

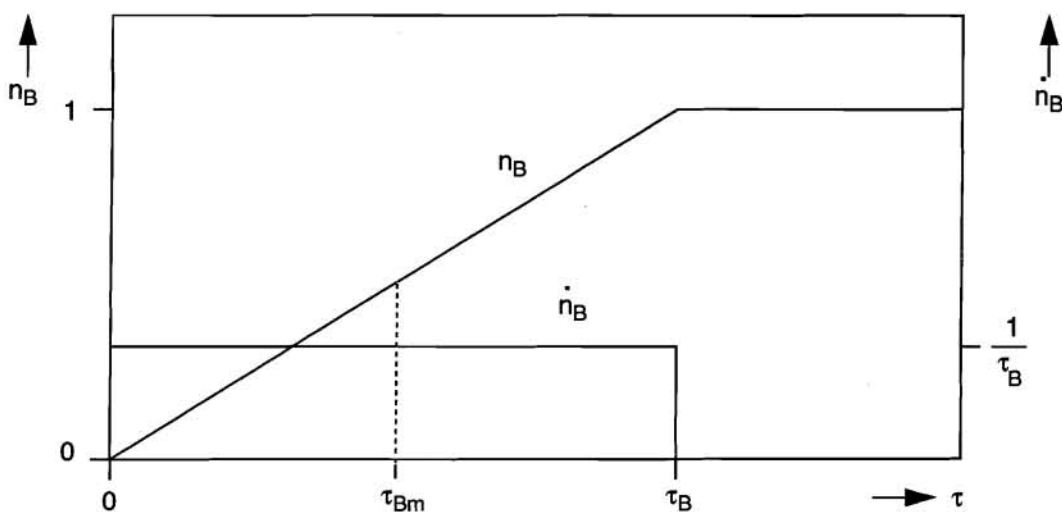


Abbildung 15: Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate \dot{n}_B bei gleichverteilter Lebensdauer der Behälter.

τ_B : maximale Behälterlebensdauer

τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer

$$\dot{n}_B(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_B} & \text{für } 0 \leq \tau < \tau_B \\ 0 & \text{für } \tau \geq \tau_B \end{cases} \quad (18)$$

$$n_B(\tau) = \begin{cases} \frac{\tau}{\tau_B} & \text{für } 0 \leq \tau < \tau_B \\ 1 & \text{für } \tau \geq \tau_B \end{cases} \quad (19)$$

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

In den Gebindedaten (siehe Kapitel 8.2.2.4) wird eine maximale Behälterlebensdauer $\tau_{B,i}$ vorgegeben. Diese ist auf das Ende der Betriebsphase ($t = 0$) bezogen und gibt an, wann der letzte Behälter ausgefallen ist, wenn der Laugenzutritt bei $t = 0$ einsetzt. Tritt die Lauge zu einem späteren Zeitpunkt zu, so wird die Behälterlebensdauer auf diesen Zeitpunkt bezogen. Wegen der mechanischen Einwirkungen vor dem Laugenzutritt wird aber die vorgegebene maximale Behälterlebensdauer $\tau_{B,i}$ um einen bestimmten Betrag verkleinert. Damit ergibt sich eine reduzierte maximale Lebensdauer τ_B ,

$$\tau_B = \max\left(\frac{1}{10}\tau_{B,i}, \tau_{B,i} - (t_L - t_E)\right). \quad (20)$$

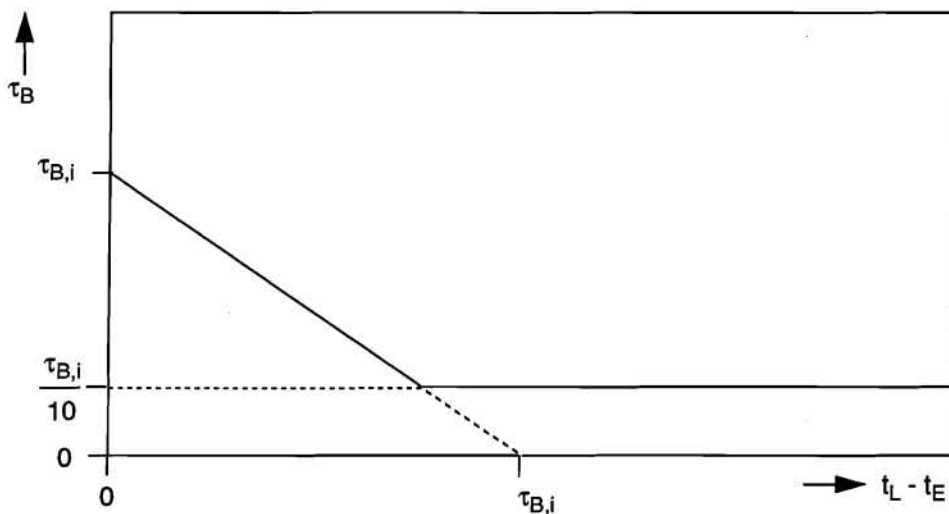


Abbildung 16: Variation der maximalen Behälterlebensdauer τ_B als Funktion des Zeitpunktes des Laugenzutritts.

Hierbei bezeichnet t_L den Zeitpunkt des Laugenzutritts, t_E den Einlagerungszeitpunkt und $\tau_{B,i}$ die vorgegebene maximale Behälterlebensdauer. Durch die reduzierte maximale Lebensdauer wird also die mechanische Beanspruchung der Behälter während der Zeit bis zum Laugenzutritt berücksichtigt, wobei die Behälterlebensdauer bei einem späten Laugenzutritt nicht auf kleinere Werte als 10% reduziert wird. Der Wert von 10% ist hierbei willkürlich angenommen worden.

In Abbildung 16 ist dargestellt, wie sich die maximale Behälterlebensdauer τ_B als Funktion des Zeitpunktes des Laugenzutritts (t_L) bezogen auf den Einlagerungszeitpunkt ($t_E < 0$) verändert.

3.1.2 Exponentialverteilte Lebensdauer der Behälter

Einige Behältertypen aus dickwandigem Stahl halten dem Gebirgsdruck stand, so daß die Lebensdauer durch die mechanische Belastung zwischen dem Einlagerungszeitpunkt und dem Laugenzutrittszeitpunkt nicht beeinflußt wird. Durch die Auftragung einer korrosionshemmenden Schicht kann auch das zukünftige Ausfallverhalten unabhängig von der erreichten Lebensdauer und damit vom Korrosionsfortschritt der Schutzschicht sein.

Für Behältertypen, deren zukünftiges Ausfallverhalten unabhängig von der gesamten Vorgeschichte und der bereits erreichten Lebensdauer ist, werden exponentialverteilte Lebensdauern angenommen. Dies trifft zum Beispiel für die in Abbildung 14 dargestellten Pollux-Behälter mit LWR-Brennelementen zu.

Für den Fall der exponentialverteilten Lebensdauer ergeben sich mit der mittleren Lebensdauer τ_{Bm} die Behälterausfallrate und der Anteil der ausgefallenen Behälter zu

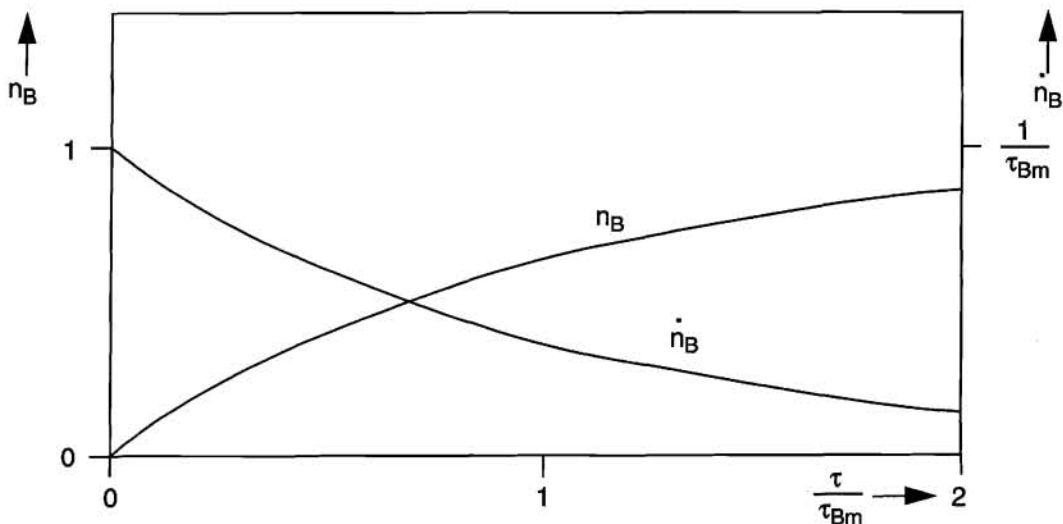


Abbildung 17: Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate \dot{n}_B bei exponentialverteilter Lebensdauer der Behälter.

τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer

$$\dot{n}_B(\tau) = \frac{1}{\tau_{Bm}} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_{Bm}}\right), \quad (21)$$

$$n_B(\tau) = 1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_{Bm}}\right). \quad (22)$$

Abbildung 17 zeigt den graphischen Verlauf dieser Funktionen.

3.1.3 Normalverteilte Lebensdauer der Behälter

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

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

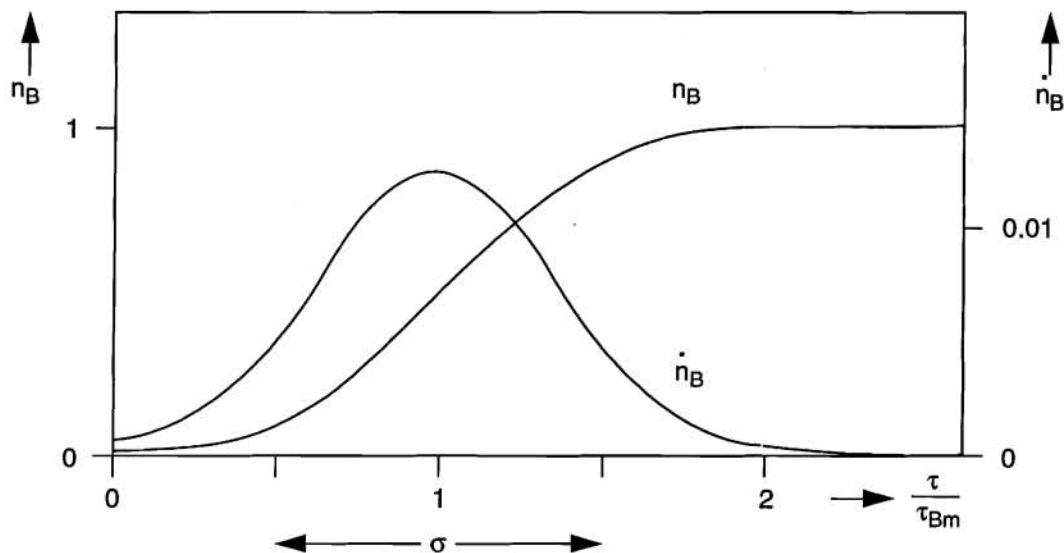


Abbildung 18: Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate \dot{n}_B bei normalverteilter Lebensdauer der Behälter.

τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer

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

$$\dot{n}_B(\tau) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\tau - \tau_{Bm})^2}{2\sigma^2}\right). \quad (23)$$

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

$$n_B(\tau) = \frac{1}{2} \left(1 + \text{erf}\left(\frac{\tau - \tau_{Bm}}{\sigma\sqrt{2}}\right) \right). \quad (24)$$

In Abbildung 18 ist der Verlauf der Behälterausfallrate und des Anteils ausgefallener Behälter graphisch dargestellt. Vergleicht man die Abbildungen 17 und 18 miteinander, so zeigt sich, daß bei normalverteilter Lebensdauer die Behälter anfangs langsamer ausfallen als bei exponentialverteilter Lebensdauer. Bei Zeiten $\tau > \tau_{Bm}$ geht der Anteil der ausgefallenen Behälter aber schneller gegen Eins.

3.2 MOBG5: Mobilisierung aus der Glasmatrix

Hochaktiver Abfall aus der Wiederaufarbeitung abgebrannter Brennelemente wird in einer Glasmatrix fixiert. Der verglaste Abfall wird in Kokillen verpackt und im Normalfall in Bohrlöchern gelagert oder bei Streckenlagerung mit einem Pollux-Behälter als zusätzlicher Verpackung versehen.

Der Mobilisierungsansatz für verglasten Abfall beruht auf den Ergebnissen der Experimente, die an C31-3EC-Borosilikatglas in begrenzten Laugenmengen bei realistischen Temperaturen und Drücken durchgeführt wurden [17]. Dieser Ansatz beschreibt eine inkongruente Glasauflösung, bei der während der Auflösung der Glasmatrix durch Fällung neue Feststoffe entstehen. Der Ansatz berücksichtigt die Temperaturabhängigkeit des Auflösungsprozesses.

Die Umsetzung der Glasmatrix wird im Mobilisierungsmodell MOBG5 als proportional zu der Oberfläche des Glases angenommen. Für die oberflächenbezogene Reaktionsrate $j(\tau)$ gilt:

$$j(\tau) = j_r \exp\left(-\frac{Q_G}{R} \left(\frac{1}{T(\tau + t_L)} - \frac{1}{T_r} \right)\right), \quad (25)$$

mit

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

Bei der Ermittlung der Temperaturverläufe ist der andersartige zeitliche Bezugspunkt zu berücksichtigen. Die Vorgehensweise bei der Bereitstellung der Temperaturverläufe und bei deren Verwendung in den Mobilisierungs- und Segmentmodellen wird in Kapitel 5.1 erläutert.

Die Mobilisierung von Radionukliden aus der Glasmatrix beginnt zu dem Zeitpunkt, an dem Lauge an das Glas herankommt, d.h. nachdem die ersten Behälter durch Laugeneinwirkung ausgefallen sind. Der Anteil der ausgefallenen Behälter wird je nach Behältertyp mit dem in Kapitel 3.1 beschriebenen Ansatz berechnet.

Ist $n_B(\tau)$ der Anteil der zur Zeit τ ausgefallenen Behälter und $m_G(0)$ die Anfangs-Glasmasse eines Gebindes, so ergibt sich die Mobilisierungsrate für ein Abfallgebäude,

$$\dot{\mu}_{\text{eff}}(\tau) = \frac{n_B(\tau) O_{\text{eff}} j(\tau)}{m_G(0)}. \quad (26)$$

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

In Abbildung 19 ist der qualitative Verlauf der Mobilisierungsrate bezogen auf ein Einzelgebäude dargestellt. Für den Behälterausfall wird eine gleichverteilte Lebensdauer mit einem Maximalwert von $\tau_B = 10$ a berücksichtigt. Nach dem Laugenzutritt bei $\tau = 0$ a ist der Kurvenverlauf bis $\tau = t_L + \tau_B$ durch die Überlagerung der konstanten Behälterausfallrate mit der Reaktionsrate $j(\tau)$

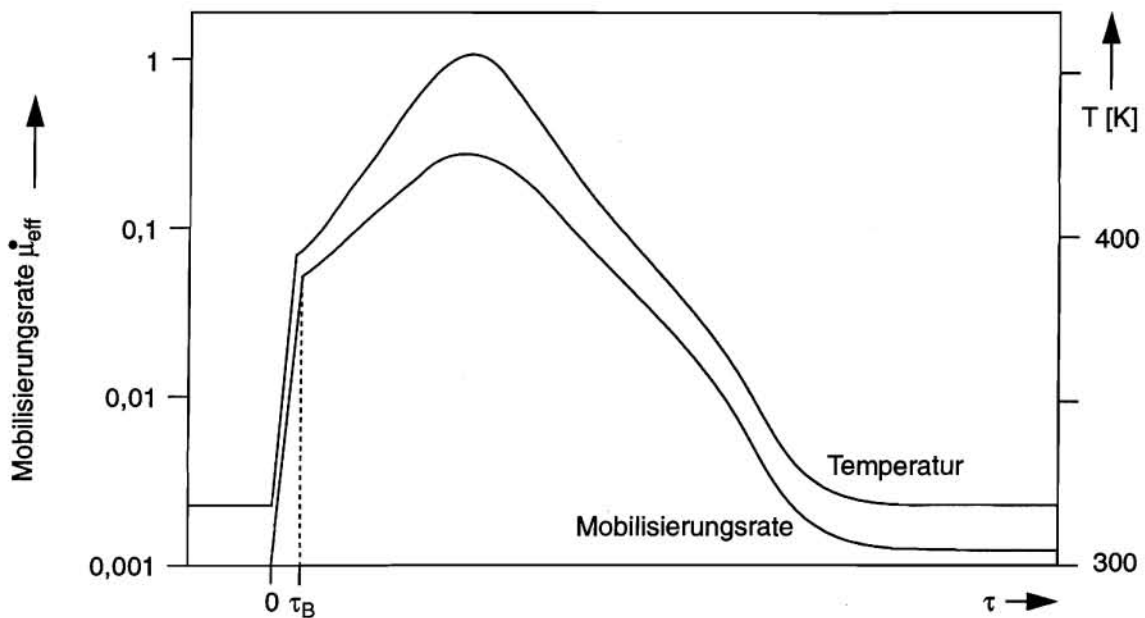


Abbildung 19: Temperaturverlauf und Mobilisierungsrate für verglaste Abfallgebäude.

gekennzeichnet, wobei die Änderung des Anteils ausgefallener Behälter die Änderung der Reaktionsrate überwiegt. Danach ist der Verlauf alleine durch die Temperaturentwicklung bestimmt, wie durch Vergleich mit dem ebenfalls eingezeichneten Temperaturverlauf zu sehen ist.

Ist $A_{0,i}(\tau)$ das hypothetische Aktivitätsinventar des i -ten Nuklids in der Glasmatrix, so ist der Aktivitätsstrom des i -ten Nuklids aus einem Gebinde

$$\dot{A}_i(\tau) = \dot{\mu}_{\text{eff}}(\tau) A_{0,i}(\tau) . \quad (27)$$

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

3.3 Mobilisierung aus zementierten Abfällen

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

Die in einen Einlagerungsort zutretende Lauge kann nach dem Behälterausfall die Abfallmatrix, also den Zement und eventuell die Metallteile des Abfalls korrodieren. Im einfachsten Fall wird angenommen, daß diese Korrosion mit einer konstanten Rate erfolgt und von der Menge der zur Verfügung stehenden Lauge unabhängig ist. Ein solcher Vorgang wird durch das Mobilisierungsmodell MOBZ6 beschrieben.

In einem Einlagerungsort wird in den meisten Fällen jedoch nur eine begrenzte Menge an Lauge zur Verfügung stehen und damit die Zementkorrosion nach einer bestimmten Zeit zum Stillstand kommen. Experimentell wurde gefunden, daß die Zementkorrosion hauptsächlich durch das in der Lauge vorhandene Magnesium verursacht wird. In dem Mobilisierungsmodell MOBZ7 wird daher die Korrosion des Zements an die Menge des zur Verfügung stehenden Magnesiums gekoppelt. Sobald alles Magnesium in der zur Verfügung stehenden Lauge verbraucht ist, wird die Korrosion des Zements beendet. Neben der Zementkorrosion wird im Mobilisierungsmodell MOBZ7 ein langsamer Diffusionsprozeß der Nuklide aus der noch nicht korrodierten Matrix betrachtet.

3.3.1 MOBZ6: Mobilisierung bei unbegrenzten Laugenmengen

Das einfachste Modell einer Mobilisierung aus zementierten Abfällen besteht aus der Annahme einer zeitlich konstanten Umsetzung des Matrixmaterials, ohne weitere Spezifikation des zugrun-

deliegenden Umsetzungsprozesses. Die Umsetzung der Matrix wird durch eine konstante Rate charakterisiert. Sie führt zu einer Umsetzungsdauer τ_M , nach welcher die Umsetzung der Matrix beendet ist,

$$\tau_M = \frac{1}{\dot{\mu}}. \quad (28)$$

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

Falls Erkenntnisse über elementspezifische Vorgänge bei der Umsetzung des Matrixmaterials vorliegen, können die Umsetzungsraten auch elementspezifisch betrachtet werden. Aus den elementspezifisch vorgegebenen Umsetzungsraten $\dot{\mu}_e$ ergeben sich dann für die einzelnen chemischen Elemente die Umsetzungsdauern

$$\tau_{M,e} = \frac{1}{\dot{\mu}_e}. \quad (29)$$

Die Umsetzung der Zementmatrix nach Gleichung 28 oder 29 kann erst nach dem Ausfall der umgebenden Behälter beginnen. Der Behälterausfall wird dabei je nach Gebindeart mit einer der in Kapitel 3.1 beschriebenen Gesetzmäßigkeiten berücksichtigt. Ist $n_B(\tau)$ der Anteil der zum aktuellen Zeitpunkt ausgefallenen Behälter, so ergibt sich die Mobilisierungsrate $\dot{\mu}_{\text{eff}}$ als Überlagerung des Anteils ausgefallener Behälter mit der Umsetzungsrate:

$$\dot{\mu}_{\text{eff}}(\tau) = n_B(\tau) \dot{\mu}(\tau). \quad (30)$$

In Abbildung 20 ist der Verlauf der Mobilisierungsrate bei Annahme einer gleichverteilten Lebensdauer der Behälter dargestellt.

Der Aktivitätsstrom des i-ten Nuklids ergibt sich mit der Mobilisierungsrate aus Gleichung 30 als

$$\dot{A}_i(\tau) = \dot{\mu}_{\text{eff}}(\tau) A_{0,i}(\tau). \quad (31)$$

$A_{0,i}(\tau)$ ist das hypothetische Aktivitätsinventar des i-ten Nuklids eines Abfallgebindes. Die Mobilisierung aller Nuklide ist beendet, sobald die gesamte Zementmasse korrodiert ist. Im letzten Zeitschritt wird dabei der Aktivitätsstrom so begrenzt, daß genau das noch vorhandene Inventar mobilisiert wird.

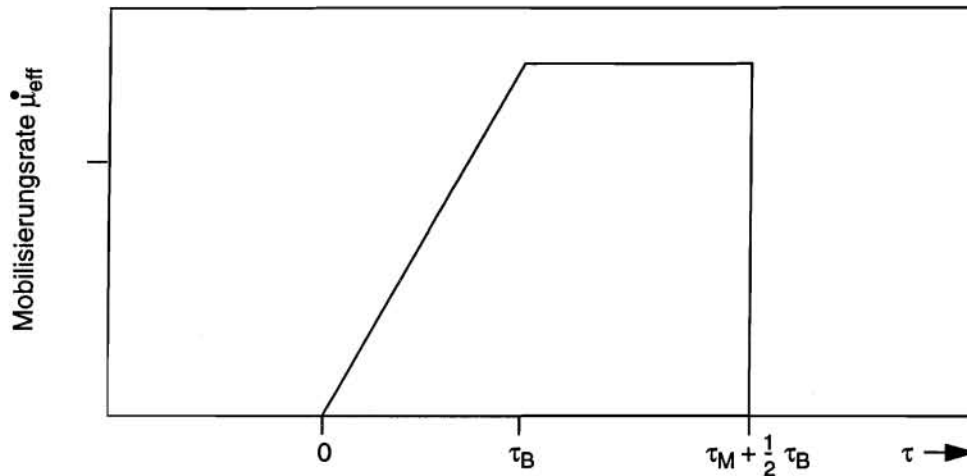


Abbildung 20: Qualitativer Verlauf der Mobilisierungsrate im Mobilisierungsmodell MOBZ6 bei gleichverteilter Lebensdauer der Behälter sowie $\tau_M > \tau_B$.

3.3.2 MOBZ7: Mobilisierung bei begrenzten Laugenmengen

Aufgrund der experimentellen Beobachtung, daß die Korrosion von Zement hauptsächlich von der Menge des in der Lauge vorhandenen Magnesiums abhängig ist [18], wurde die verfügbare Magnesiummenge in die Modellierung des Mobilisierungsprozesses aufgenommen. Das Mobilisierungsmodell MOBZ7 berücksichtigt die begrenzten Laugenmengen und die bei der Zementkorrosion im Detail ablaufenden Vorgänge, indem die Korrosion der Zementmatrix an die Existenz von Magnesium in der Lauge gekoppelt wird. Ist das gesamte Magnesium in der Lauge verbraucht, so hört die Korrosion auf. Dies führt vor allem in Bohrlöchern mit geringem Laugeninhalt zu einer starken Begrenzung der Zementkorrosion und damit zu einer Verlangsamung der Mobilisierung.

Die Mobilisierung aus der Zementmatrix wird als Summe aus zwei Prozessen angenommen: der Korrosion des Zements und der Diffusion der Nuklide aus der intakten Zementmatrix. Der Diffusionsprozeß ist im allgemeinen langsam, so daß zunächst die Zementkorrosion überwiegt. Falls jedoch die Zementkorrosion durch Verbrauch des Magnesiums in der Lauge beendet wird, ist die Diffusion der einzige Mechanismus für die Mobilisierung der im intakten Zement verbliebenen Nuklide.

Zur Vereinfachung des Rechenmodells werden für die Diffusion und die Korrosion zeitlich konstante Raten angesetzt. Die unterschiedlichen Geschwindigkeiten beider Prozesse können durch geeignete Wahl der Parameterwerte berücksichtigt werden.

Aus den experimentellen Beobachtungen ist ebenfalls erkennbar, daß die Sorption an den Korrosionsprodukten des Zements eine wesentliche Begrenzung für den Nuklidstrom aus einem

Einlagerungsort darstellt. In dem Mobilisierungsmodell wird daher die Menge des korrodierten Zements ermittelt und als Sorbensmenge an das übergeordnete Segmentmodell des Einlagerungsortes übergeben. In den Segmentmodellen BOMAW1 und ESMAW1, die im Zusammenhang mit dem Mobilisierungsmodell MOBZ7 verwendet werden müssen, wird dann die Sorption der Nuklide berücksichtigt.

Solange ausreichend Magnesium zur Korrosion der Zementgebände im Einlagerungsort verfügbar ist, wird die zeitliche Änderung der aktuellen Masse korrodierten Zements folgendermaßen berechnet:

$$\dot{m}_Z(\tau) = m_Z(0) r_K(\tau) . \quad (32)$$

Hierbei sind $m_Z(0)$ die Anfangs-Zementmasse und $r_K(\tau)$ die Korrosionsrate für Zement. Falls das Magnesium in der Lauge verbraucht ist, hört der Korrosionsprozeß auf, die Rate in Gleichung 32 wird dann unabhängig von der noch vorhandenen Zementmasse $m_Z(\tau)$ Null. Bei Annäherung an den Zeitpunkt des vollständigen Magnesiumverbrauchs wird in der zeitdiskreten Rechnung die Korrosionsrate an die verbliebene Magnesiummasse angepaßt. In diesem Fall gilt für die zeitliche Änderung der aktuellen Masse korrodierten Zements,

$$\dot{m}_Z(\tau) = \frac{m_{Mg}(\tau) f_Z}{\Delta t} . \quad (33)$$

Die Magnesiummasse $m_{Mg}(\tau)$ liefert hierbei durch den Umrechnungsfaktor f_Z die aktuell korrodierte Zementmasse. Der Faktor f_Z gibt an, wieviel Zement von einer bestimmten Menge Magnesium korrodiert werden kann. Durch Gleichung 33 wird insbesondere im Fall einer geringfügigen Nachlieferung von Magnesium z.B. durch Austauschvorgänge zwischen einem Einlagerungsort und einer Beschickungsstrecke die Zementkorrosion korrekt beschrieben.

Als Mobilisierungsrate der Nuklide aus der Korrosion des Zements (Index K) ergibt sich mit Hilfe der Korrosionsrate $r_K(\tau)$ und Gleichung 32:

$$\dot{\mu}_K(\tau) = n_B(\tau) \frac{\dot{m}_Z(\tau)}{m_Z(0)} . \quad (34)$$

Hierbei ist $n_B(\tau)$ der Anteil ausgefallener Behälter zur Zeit τ .

Die Mobilisierungsrate aus der Diffusion der Nuklide (Index D) wird elementspezifisch mit Hilfe einer diffusionsbedingten Rate $r_{D,e(i)}$ berechnet, wobei $e(i)$ der Elementindex des i -ten Nuklids ist. Es gilt:

$$\dot{\mu}_{i,D}(\tau) = n_B(\tau) r_{D,e(i)} \cdot \quad (35)$$

Die Diffusion wird also mit einer konstanten Rate $r_{D,e(i)}$ berechnet, während die Rate $r_K(\tau)$ bei der Korrosion wegen der Abhängigkeit vom verfügbaren Magnesium zeitabhängig sein kann. Die gesamte Mobilisierungsrate aus Korrosion und Diffusion ergibt sich durch Summation der Gleichungen 34 und 35. Sie ist wegen Gleichung 35 elementspezifisch und lautet für das i-te Nuklid:

$$\dot{\mu}_{\text{eff},i}(\tau) = \dot{\mu}_K(\tau) + \dot{\mu}_{i,D}(\tau) \cdot \quad (36)$$

Der Aktivitätsstrom des i-ten Nuklids ergibt sich schließlich aus der elementspezifischen Mobilisierungsrate und dem hypothetischen Aktivitätsinventar,

$$\dot{A}_i(\tau) = \dot{\mu}_{\text{eff},i}(\tau) A_{0,i}(\tau) \cdot \quad (37)$$

In Abbildung 21 ist der Verlauf der Mobilisierungsrate entsprechend Gleichung 36 dargestellt. Betrachtet wird die Mobilisierung zementierter Abfälle in Bohrlöchern, wobei realistische Laugenmengen berücksichtigt worden sind. Zu frühen Zeitpunkten $0 < \tau < \tau_{\text{Mg}}$ ist die Mobilisierung durch die hohe Korrosionsrate für Zement gekennzeichnet, zu späteren Zeiten $\tau > \tau_{\text{Mg}}$ durch die relativ geringe Mobilisierungsrate aufgrund der Diffusion. Der Zeitpunkt τ_{Mg} ist dadurch gekennzeichnet, daß zum ersten Mal das gesamte Magnesium in der Lauge des Einlagerungsortes ver-

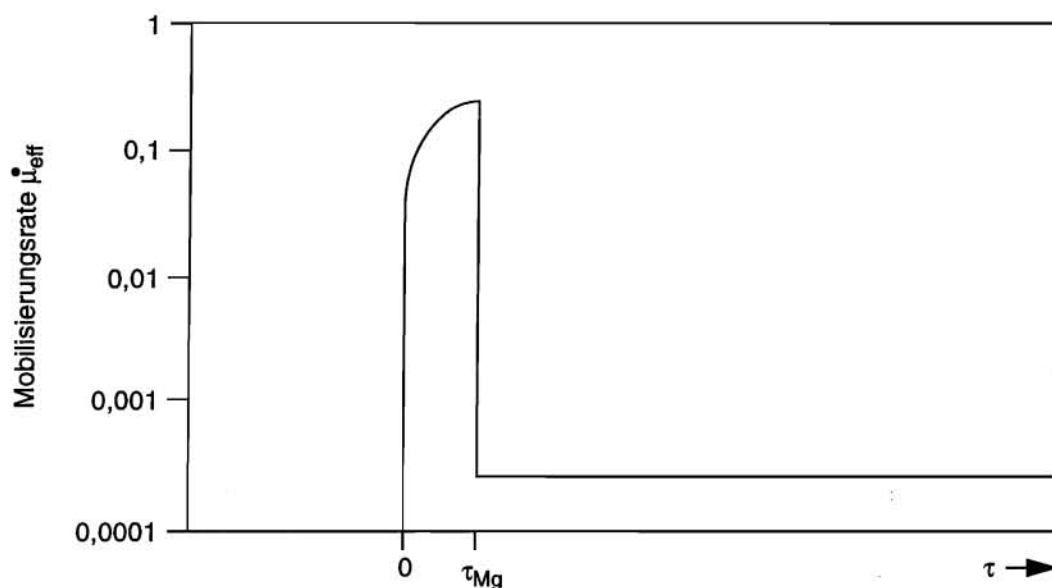


Abbildung 21: Mobilisierungsrate in zementierten Abfallgebänden bei begrenzten Laugenmengen in Modell MOBZ7.

braucht ist. Zu späteren Zeiten tritt weiteres Magnesium durch Austausch aus der Beschickungsstrecke zu, die dadurch verursachte Mobilisierung von Nukliden durch Korrosion ist aber dann gegenüber dem Diffusionsprozeß vernachlässigbar klein.

Die Mobilisierung ist abgeschlossen, wenn die gesamte Zementmasse korrodiert ist oder wenn alle Nuklide aus dem unkorrodierten Zement herausdiffundiert sind, d.h. wenn die Nuklidinventare auf Null abgefallen sind. Im letzten Zeitschritt wird dabei der Aktivitätsstrom so begrenzt, daß genau das noch vorhandene Inventar mobilisiert wird.

3.4 MOBH1: Mobilisierung aus HTR-Brennelementen

Die kugelförmigen HTR-Brennelemente werden entweder in Fässern und Kannen in Bohrlöchern, oder in speziellen Pollux-Behältern in Strecken eingelagert. Die Brennelementkugeln weisen eine heterogene Struktur auf, deren prinzipieller Aufbau in Abbildung 22 dargestellt ist [16]. Die Partikel mit dem eigentlichen Brennstoff sind in eine Matrix aus Graphit eingebettet. In den Porenraum der Graphitmatrix kann im Störfall Lauge eindringen. Ein Brennstoffpartikel ist im unteren Teil von Abbildung 22 vergrößert herausgezeichnet. Es besteht aus dem Brennstoff und einer Umhüllung aus pyrolytischem Kohlenstoff (PyC) als Puffer. Ein eventuell vorhandener Hohlraum in den Brennstoffpartikeln wird nicht explizit betrachtet, sondern ist gegebenenfalls im Porenraum der Graphitmatrix zu berücksichtigen.

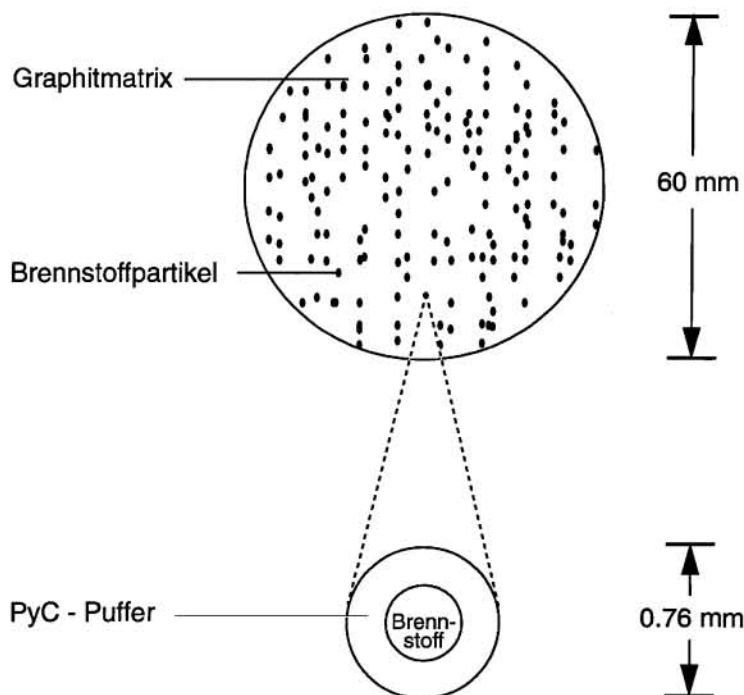


Abbildung 22: Aufbau einer HTR-Brennelementkugel.

Für die Beschreibung der Mobilisierung werden die HTR-Brennelementkugeln in vier Bereiche aufgeteilt, in denen jeweils Nuklidinventare vorhanden sein können. Diese vier Bereiche sind in Abbildung 23 dargestellt:

- Bereich 1: Poren in der Graphitmatrix,
- Bereich 2: Körner in der Graphitmatrix,
- Bereich 3: PyC-Puffer der Brennstoffpartikel,
- Bereich 4: Brennstoff.

Das gesamte Nuklidinventar eines Brennelementes wird elementspezifisch durch relative Inventaranteile auf diese vier Bereiche verteilt. Die Mobilisierung wird in jedem Bereich mit unterschiedlichen, elementspezifischen Raten beschrieben. Die Mobilisierung aus dem Porenraum des Graphit (Bereich 1) und aus dem PyC-Puffer des Partikels (Bereich 3) wird als instantan angenommen. Für die übrigen Bereiche werden konstante Raten $r_{M,y}$ angesetzt. Damit ergeben sich die folgenden Mobilisierungsraten in den einzelnen Bereichen,

$$\dot{\mu}_{\text{eff},1,i}(\tau) = \dot{n}_B(\tau) a_{1,e(i)}, \quad (38)$$

$$\dot{\mu}_{\text{eff},2,i}(\tau) = n_B(\tau) a_{2,e(i)} r_{M,K}, \quad (39)$$

$$\dot{\mu}_{\text{eff},3,i}(\tau) = \dot{n}_B(\tau) a_{3,e(i)}, \quad (40)$$

$$\dot{\mu}_{\text{eff},4,i}(\tau) = n_B(\tau) a_{4,e(i)} r_{M,P} r_{M,B}. \quad (41)$$

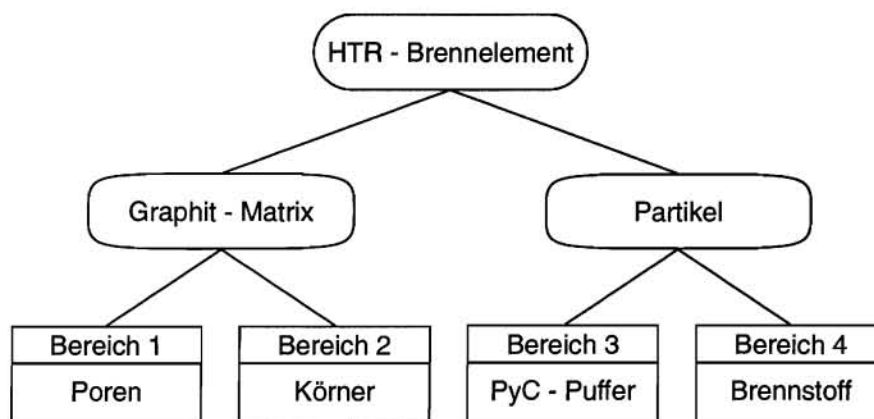


Abbildung 23: Mobilisierungszonen eines HTR-Brennelementes.

Hierbei sind $n_B(\tau)$ der Anteil ausgefallener Behälter und $\dot{n}_B(\tau)$ die Behälterausfallrate. Beide Größen werden je nach Behältertyp mit dem in Kapitel 3.1 beschriebenen Verfahren berechnet. Die Größen $a_{x,e(i)}$ sind die relativen Inventaranteile des Elementes $e(i)$ im Bereich x . Die Raten $r_{M,y}$ gelten für die Bereiche 2 ($r_{M,K}$ = Korrosionsrate der Matrixkörner) und 4 ($r_{M,P}$ = Korrosionsrate des PyC-Puffers und $r_{M,B}$ = Mobilisierungsrate aus dem Brennstoff).

Im Bereich 4 ist die Mobilisierung durch die Überlagerung von zwei Prozessen gekennzeichnet, weil die Nuklide nur dann aus dem Brennstoff herauskönnen, wenn zuvor der PyC-Puffer ausgefallen ist. Es wird angenommen, daß dieser Ausfall mit einer zeitlich konstanten Rate erfolgt.

In Abbildung 24 ist die Mobilisierungsrate für alle Bereiche eines HTR-Brennelementes bei einer exponentialverteilten Lebensdauer der Behälter dargestellt. Die mittlere Lebensdauer der Behälter ist als 500 a, die Raten $r_{M,y}$ in allen Bereichen als $0,002 \text{ a}^{-1}$ angenommen worden. Da alle Nuklide gleichmäßig auf die 4 Bereiche verteilt sind ($a_{x,e(i)} = 0,25$ für alle x), zeigt sich, daß zu Beginn die Mobilisierung aus dem Porenraum der Graphitmatrix und dem Kohlenstoffpuffer überwiegt, zu größeren Zeiten aber die Mobilisierung aus dem Brennstoff von wachsender Bedeutung ist.

Ist $A_{0,i}(\tau)$ das hypothetische Aktivitätsinventar des i -ten Nuklids, so kann mit Hilfe der Gleichungen 38 bis 41 der gesamte Aktivitätsstrom des i -ten Nuklids aus allen Bereichen des Brennelementes berechnet werden,

$$\dot{A}_i(\tau) = \sum_x \dot{\mu}_{\text{eff},x,i} A_{0,i}(\tau) \quad (42)$$

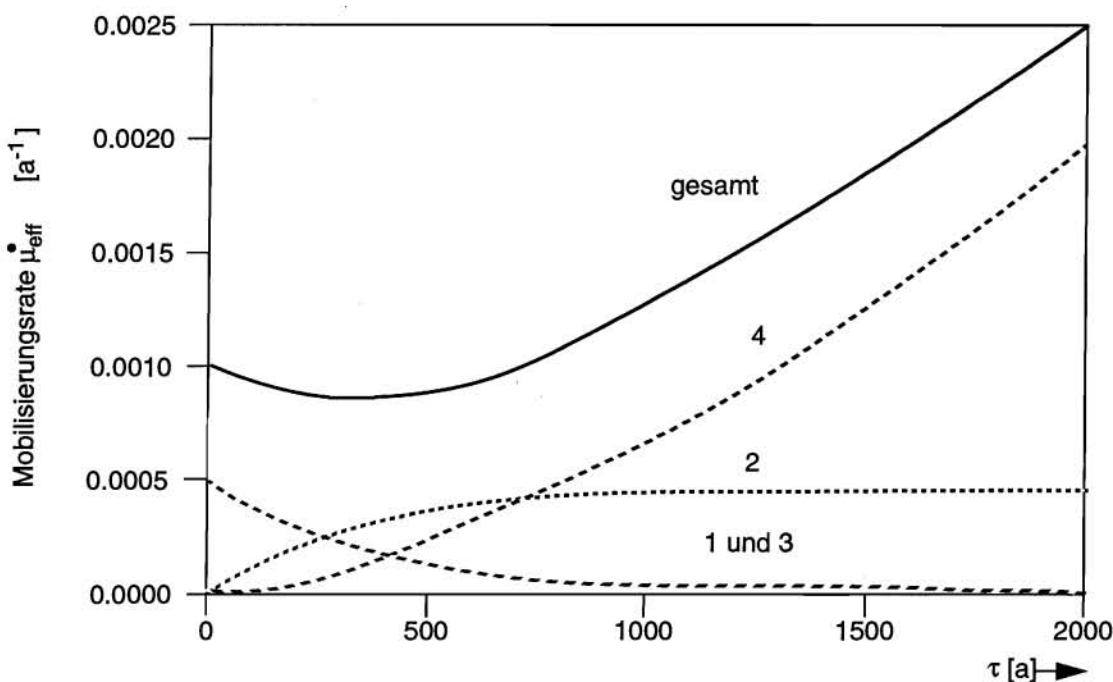


Abbildung 24: Mobilisierungsraten aus den einzelnen Bereichen (1 bis 4) eines HTR-Brennelementes im Modell MOBH1.

Die Mobilisierung ist beendet, wenn das aktuelle Inventar aller Nuklide im Gebinde auf Null abgefallen ist. Im letzten Zeitschritt wird dabei der Aktivitätsstrom so begrenzt, daß genau das noch vorhandene Inventar mobilisiert wird.

3.5 MOBL1: Mobilisierung aus LWR-Brennelementen

Abgebrannte Brennelemente aus LWR-Reaktoren werden in dickwandigen Metallbehältern endgelagert. Je nach Entsorgungskonzept werden dabei eine feste Anzahl von Brennelementen und eventuell zusätzlich das Brennelementgerüst in je 1 Pollux-Behälter oder 1 Pollux-Kokille eingesetzt (siehe Abbildung 14). Die Pollux-Behälter bestehen aus einer Trockenlagerbüchse, Graugußkörpern und einer Zwischenschicht aus korrosionshemmendem Hastelloy und sind für die Streckenlagerung vorgesehen. Die Pollux-Kokillen sind von gleichen Abmessungen wie die HAW-Kokillen und für die Einlagerung in Bohrlöchern vorgesehen.

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

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

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

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

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

$$\dot{\mu}_{\text{eff}, x, i}(\tau) = n_B(\tau) a_{x, e(i)} r_{M, x} \quad , \quad x = 1 \text{ bis } 3. \quad (43)$$

Hierbei sind $r_{M, x}$ die Mobilisierungsraten im x-ten Bereich, $n_B(\tau)$ der Anteil ausgefallener Behälter und $a_{x, e(i)}$ der relative Inventaranteil des Elementes $e(i)$ im Bereich x . Die Raten $r_{M, x}$ werden alle als konstant angenommen.

In Abbildung 25 ist der Verlauf der Mobilisierungsrate bei exponentialverteilter Lebensdauer der Behälter dargestellt. Die mittlere Lebensdauer der Behälter ist mit 500 a, die Raten $r_{M,x}$ in den drei Bereichen sind mit Werten von 0,02, 0,1 und 0,0016 a^{-1} angenommen worden. Für jeden Bereich des LWR-Brennelementes und für die Gesamtmobilisierung ergibt sich eine Exponentialkurve, die aus dem Verlauf des Behälterausfalls resultiert.

Der Aktivitätsstrom $\dot{A}_i(\tau)$ des i-ten Nuklids aus einem Abfallgebäude ergibt sich durch Multiplikation der Mobilisierungsrate nach Gleichung 43 mit dem hypothetischen Aktivitätsinventar $A_{0,i}(\tau)$,

$$\dot{A}_i(\tau) = \sum_x \dot{\mu}_{\text{eff},x,i}(\tau) A_{0,i}(\tau). \quad (44)$$

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

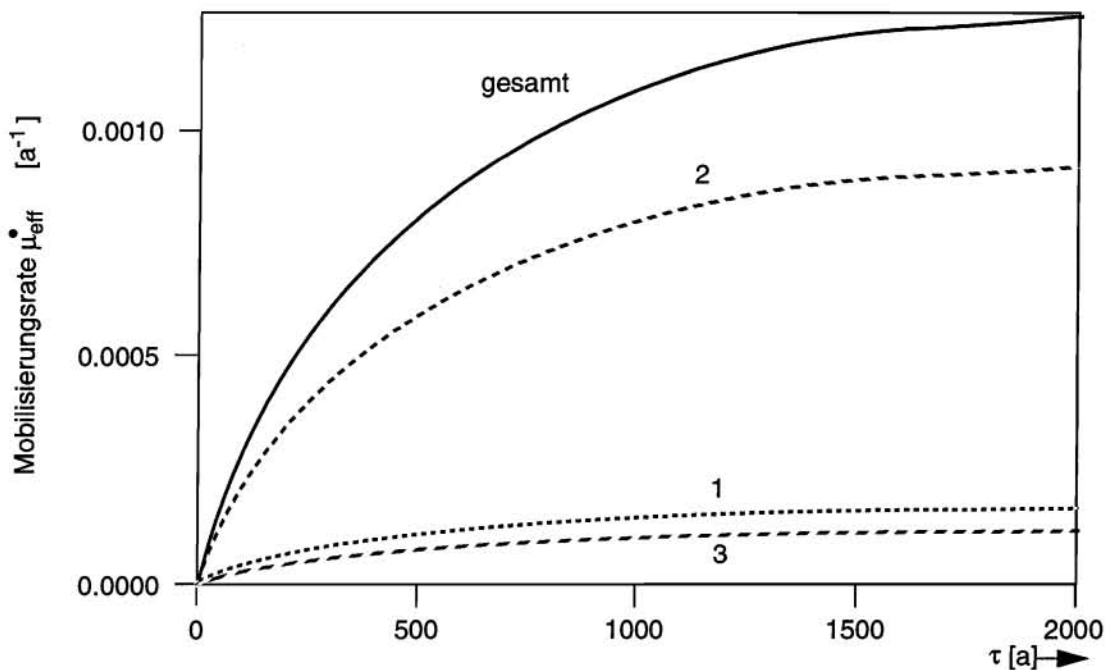


Abbildung 25: Mobilisierungsraten in den einzelnen Bereichen (1 bis 3) eines LWR-Brennelementes im Modell MOBL1.

3.6 MOBL2: Mobilisierung aus LWR-Brennelementen

Das Modell MOBL2 unterscheidet sich von dem Modell MOBL1 in der Berechnung des Behälterausfalls. Der Behälterausfall wird als diskretes zufälliges Ereignis angesehen, so daß zu einem bestimmten Zeitpunkt eine bestimmte Anzahl an Behältern ausgefallen ist und daß nur aus diesen ausgefallenen Behältern Radionuklide freigesetzt werden können. Diese Vorgehensweise bedingt eine Aufteilung des gesamten Radionuklidinventars auf die einzelnen Abfallgebinde und eine Bilanzierung des Inventars für jedes Gebinde.

Nach einem eventuellen Zutritt von Lauge in den Einlagerungsort verhindern zunächst die Behälter den Kontakt der Lauge mit den Brennstäben und damit den Übergang von Radionukliden in die Lauge. Erst wenn die Behälter unter der Laugeneinwirkung ausfallen, beginnt die Freisetzung. Es wird angenommen, daß die Behälter frühestens bei Laugenzutritt ausfallen können, die Lebensdauer eines Behälters wird dann als das Zeitintervall zwischen dem Beginn des Laugenkontaktes und dem Ausfall definiert. Die Lebensdauern werden als Zufallsereignis angesehen und mittels einer Verteilungsfunktion beschrieben. Entsprechend der Verteilungsfunktion wird für jeden Behälter über ein Zufallsverfahren ein Ausfallzeitpunkt ermittelt. Die Ermittlung der Zufallszahlen erfolgt im Unterprogramm BERTBA oder im Unterprogramm SAMPLE, je nachdem, ob eine deterministische oder eine probabilistische EMOS-Rechnung durchgeführt wird.

Die Radionuklide sind wie bei dem Modell MOBL1 auf die drei Bereiche des Brennelements verteilt: die Metallteile, den Gasraum innerhalb der Brennelemente und die Brennstoffmatrix. Das Gesamtinventar eines LWR-Brennelements wird über elementspezifische Anteile auf die drei Bereiche verteilt. Die Mobilisierung aus jedem der drei Bereiche wird mit einer jeweils konstanten Rate angenommen. Der Aktivitätsstrom eines Radionuklids i aus einem Abfallgebinde ergibt sich somit durch Multiplikation von relativen Freisetzungsraten mit dem Aktivitätsinventar $A_{i0}(t)$ des Gebindes. $A_{i0}(t)$ ist das Anfangsinventar zum Zeitpunkt der Einlagerung, modifiziert um den radioaktiven Zerfall bis zum Zeitpunkt t .

Der Aktivitätsstrom des Radionuklids i aus dem zum Zeitpunkt t_k ausgefallenen Abfallgebinde k ergibt sich durch Summation über die drei Bereiche $x = 1, 2, 3$ zu

$$\dot{A}_{ik}(t) = \sum_{x=1}^3 r_x(t) \cdot a_{x,e} \cdot A_{i0}(t) \quad (45)$$

mit den Mobilisierungsraten

$$r_x(t) = \begin{cases} r_x & t_k \leq t \leq t_k + t_x \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (46)$$

Dabei beschreiben $t_x = 1/r_x$, ($x = 1, 2, 3$) die Mobilisierungsdauern in den drei Bereichen und $a_{x,e}$ die relativen elementspezifischen Inventaranteile in dem jeweiligen Bereich.

Die gesamte Freisetzungsrates des Radionuklids i aus allen Gebinden eines Einlagerungsortes zum Zeitpunkt t ergibt sich aus der additiven Überlagerung der Freisetzungsrates \dot{A}_{ik} aus den einzelnen Behältern

$$\dot{A}_{i, ges}(t) = \sum_{k=1}^n \dot{A}_{ik}(t) , \quad (47)$$

wobei n die Gesamtzahl der eingelagerten Behälter und der Aktivitätsstrom aus noch nicht ausgefallenen Behältern Null ist.

Die Mobilisierung aller Radionuklide eines ausgefallenen Behälters ist beendet, wenn das Inventar auf Null abgefallen ist. Im letzten Zeitschritt wird dabei der Aktivitätsstrom so begrenzt, daß genau das noch vorhandene Inventar mobilisiert wird. Dabei ist die Mobilisierung von im vorletzten Zeitschritt entstandenen Tochternukliden berücksichtigt, auch wenn deren ursprüngliches Inventar bereits vollständig freigesetzt war.

4 Die Segmentmodelle

Zur Modellierung der Vorgänge im Endlager wird das Grubengebäude in einzelne Segmente zerlegt. Die Vorgehensweise bei der Zerlegung des Grubengebäudes in Segmente wurde in Kapitel 2 dargestellt.

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

Die Zuordnung der passenden Segmentmodelle zu den Segmenten geschieht durch Angabe des Namens des Segmentmodells in der Datei mit den Segment- und Gebindedaten (siehe Kapitel 8.2.2.4). Die zur Zeit verfügbaren Segmentmodelle lassen sich in vier Gruppen einordnen:

1. Segmentmodelle für Einlagerungsorte:

- ein allgemeines Bohrlochmodell für die Einlagerung von HAW, MAW, HTR- und LWR-Brennelementen,
- ein spezielles Bohrlochmodell für die Einlagerung von zementierten Abfällen, das die Begrenzung der Zementkorrosion bei nur geringen Laugenmengen berücksichtigt,
- ein Kammermodell zur Einlagerung von MAW und LAW,
- ein allgemeines Streckenmodell für die Einlagerung von Pollux-Behältern mit HAW, HTR- und LWR-Brennelementen,
- ein allgemeines Streckenmodell für die Einlagerung von Pollux-Behältern mit LWR-Brennelementen unter Berücksichtigung eines zeitdiskreten Behälterausfalls,
- ein spezielles Streckenmodell für die Einlagerung von zementierten Abfällen, das die Begrenzung der Zementkorrosion bei nur geringen Laugenmengen berücksichtigt.

In jedem der Modelle werden die Hohlräume im Abfall, in den Behältern und im Versatz getrennt modelliert, da sie sich beim Konvergenzvorgang unterschiedlich verhalten.

2. Segmentmodelle für Verbindungsstrecken:

- ein Modell für ein Streckenelement mit einem kompaktierbaren Verschuß,
- ein Modell für ein Streckenelement mit einem nicht kompaktierbaren Verschuß bzw. Damm,
- ein Modell für ein Streckenelement ohne Verschuß,
- ein Modell für ein Streckenelement ohne Verschuß und mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration.

Jedem Streckenelement mit Ausnahme des Elements mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration kann ein beliebig großes Zusatzvolumen beigelegt werden, das Laugenmengen aufnehmen kann, aber nicht zum Strömungswiderstand beiträgt. Die Streckenelemente ohne Verschuß werden für die feinere Unterteilung einer Verbindungsstrecke verwendet.

3. Segmentmodelle für spezielle Teile des Grubengebäudes:
 - ein Modell für die Beschreibung eines begrenzten Laugenzutritts aus einem Laugeneinschluß,
 - ein Modell für die Beschreibung des Mittelfeldes eines Grubengebäudes als Laugenzutrittsort.

Beide Modelle erlauben den Zutritt von Lauge ins Endlager zu vorgegebenen Zeitpunkten.

4. Segmentmodelle für spezielle Szenarien:
 - ein Modell für ein durchströmtes Grubengebäude,
 - ein Modell für eine Kaverne,
 - ein Modell für einen Kavernensumpf,
 - ein Modell für ein Subrosionsszenario.

Diese Segmentmodelle können nur für spezielle Modellierungen verwendet werden. Sie sind nicht in ein Grubengebäudemodell einfügbar, das aus den unter 1 bis 3 angegebenen Segmenten zusammengesetzt ist.

Im folgenden werden die Segmentmodelle und deren Besonderheiten im Detail beschrieben.

4.1 Behandlung der physikalischen und chemischen Effekte

Ein Segmentmodell besteht im wesentlichen aus einer Abfolge von Unterprogrammen, in denen die in Kapitel 5 beschriebenen Effekte behandelt werden. Mit Hilfe entsprechender Modelle für diese Effekte werden eine Reihe physikalischer und chemischer Prozesse beschrieben, die für die Laugenzugbewegung in jedem Segment und den nuklid-spezifischen Aktivitätsausgangsstrom verantwortlich sind.

Die zeitliche Abfolge für die Berechnung der Effekte ist in allen Segmenten gleich. Sie berücksichtigt, daß zur Berechnung einer Größe zur Zeit t sowohl Werte anderer Variablen dieses Segments zur Zeit t als auch Werte derselben Größe aus dem vorangehenden Zeitschritt $t - \Delta t$ benötigt werden und eventuell Werte aus den Nachbarsegmenten zur Verfügung stehen müssen (siehe Kapitel 2, Abbildung 11).

Für die Modellierung der physikalischen und chemischen Effekte, die in den Segmentmodellen berücksichtigt werden können, stehen die unten angegebenen Unterprogramme zur Verfügung. In Klammern stehen jeweils die Namen der entsprechenden Effektprogramme. Sie sind in der Reihenfolge aufgeführt, in der sie in den Segmentmodellen aufgerufen werden.

- | | | |
|----|---|----------|
| 1) | Temperatur im Versatz, Verschuß oder Damm | (TEMP4) |
| 2) | Temperaturgradient im Versatz, Verschuß oder Damm | (TEMP4) |
| 3) | Energiestrom durch α - und β - γ -Zerfall | (WALE2) |
| 4) | Radiolysegasproduktion in der Lauge | (GAPRL1) |
| 5) | Permeabilität im Versatz, Verschuß oder Damm | (PERM4) |
| 6) | Laugenaustausch im Versatz, Verschuß oder Damm | |

a) durch Gastransport	(GASTRA3)
b) durch Temperaturgradient	(TEMTRA3)
c) durch Dichte-(Konzentrations-)gradienten	(KONTRA3)
d) durch Diffusion	(DIFFUS3)
7) Überlagerung der Austauscheffekte	(MINISLA1)
8) Nuklidtransport	(NUTRA1)

Die Berechnung aller Größen in einem Segment für den aktuellen Zeitpunkt t ist mit Punkt 8 abgeschlossen. In dem speziellen Segmentmodell STOVOK2 wird anstelle des Programms NUTRA1 das Unterprogramm TRAMO1 zur Berechnung des Radionuklidtransports aufgerufen. Außerdem wird in diesem Segmentmodell das Unterprogramm DISPERS1 zur Berechnung der Dispersion innerhalb des Segments aufgerufen.

Die mit Punkt 9 beginnend in den Effektprogrammen bestimmten Ausgangsgrößen werden zum Teil beim nächsten Durchgang durch die Segmentschleife (siehe Kapitel 2.3) als Eingangsgrößen in den Effektprogrammen 1 bis 8 verwendet, bzw. stellen Eingangsgrößen für die Berechnung der Laugendrucke und Laugenströme bereit (z.B. die Programme 13, 14, 15 und 17). Da der Laugendruck außerhalb der Segmentmodelle global für alle Segmente gleichzeitig berechnet wird, ist das zugehörige Effektprogramm DRUCK2 hier nicht aufgeführt.

9) Konvergenzrate im Versatz und Verschluß	(POKON5)
10) Bilanzierung des Matrixmaterials	(BILMA2)
11) Bilanzierung der Magnesiumgehalts der Lauge	(BILMG1)
12) Radionuklid-Bilanzierung und radioaktiver Zerfall	(BIRAZ2)
13) Auswirkung der Konvergenz im Zusatzvolumen, Versatz und Verschluß	(EFFKON2)
14) Druckunabhängiger Anteil der Konvergenz	(BEKON2)
15) Zustand eines Segments bzgl. Laugenbewegung, Laugenvolumen und Zuflußzeiten	(STATUS3)
16) Sorption und Ausfällung	(MOBIL2)
17) Inverser Widerstand	(RINV1)
18) Endporositätskontrolle	(ENDPOR3)

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

- alle Übergangsströme auf Null zu setzen, wenn die Porosität vom Versatzmaterial oder Verschluß des Segmentes einen Wert kleiner als die Endporosität erreicht hat, (RUZERO)
- einen segmentspezifischen Zeitpunkt für die Zeitschrittsteuerung zu setzen, (SETTNE)
- einen Wert für die nächste Zeitschrittweite vorzuschlagen, (SETDTM)
- einen definierten Programmabbruch bei Auftreten eines Eingabefehlers zu ermöglichen. (HRSTOP)

Die Anzahl der berücksichtigten Effekte unterscheidet sich in den einzelnen Segmentmodellen. Dies trifft insbesondere auf den Aktivitätstransport durch Austauscheffekte zu, der nicht in allen

Segmenten gleich behandelt wird. Daher wird bei allen folgenden Beschreibungen der einzelnen Segmentmodelle jeweils ein schematischer Überblick der betrachteten Effekte gegeben. Eine detaillierte Darstellung aller im Modul REPOS betrachteten Effekte erfolgt in Kapitel 5.

4.1.1 Zusammenwirken der Effekte

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

Ein wichtiger Prozeß in einem Endlager im Salz ist das Verschließen der Resthohlräume durch die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins. Dieser Vorgang führt einerseits bei der ungestörten Entwicklung eines Endlagers innerhalb verhältnismäßig kurzer Zeit zu einem endgültigen Verschließen der Resthohlräume des Grubengebäudes. Andererseits ist die Konvergenz bei einem unterstellten Laugenzutritt ins Endlager der wesentliche Antriebsmechanismus für eine Radionuklidfreisetzung durch Auspressen kontaminierter Lauge aus dem Grubengebäude.

In fast allen Segmentmodellen werden die Auswirkungen der Konvergenz auf das Hohlraumvolumen des jeweiligen Segments und auf die Laugenbewegung durch Berechnung einer Konvergenzrate ermittelt. Abbildung 26 zeigt schematisch die an dem Konvergenzprozeß beteiligten Effekte und deren Rückwirkung auf die Konvergenzrate.

Die Konvergenzrate ist eine Funktion der im allgemeinen zeitabhängigen Größen Temperatur, Laugendruck und Porosität des versetzten Hohlraumes (siehe Kapitel 5.2.1). Die Temperatur wird im Programm TEMP4 aus den in der TEDA-Datei angegebenen Daten bestimmt (siehe Kapitel 5.1). Die zeitliche Änderung der Porosität berechnet sich aus der Veränderung des Hohlraumvolumens (siehe Kapitel 5.2.2).

Der Laugendruck wird zusammen mit den durch die Konvergenz erzwungenen advektiven Laugenströmen außerhalb der Segmentmodelle für alle Segmente zugleich ermittelt (siehe Kapitel 2.3.3.2 und 5.4). Die einzelnen Segmentmodelle liefern für diese Berechnung die folgenden Eingangsgrößen:

- die Information, in welchem aktuellen Zustand sich das Segment in Bezug auf die Laugenbewegung befindet, also in der Zuflußphase, Auspreßphase, o.ä. (siehe Kapitel 5.4, bzw. Kapitel 5.4.2),
- den druckunabhängigen Anteil der Konvergenz (siehe Kapitel 5.4.1),
- den Strömungswiderstand in Abhängigkeit von den Permeabilitäten des Verschlusses und Versatzes (siehe Kapitel 5.3).

Abbildung 27 zeigt die zur Berechnung der Laugendrucks in einem Segment beitragenden Effekte sowie Eingangsgrößen aus den Nachbarsegmenten.

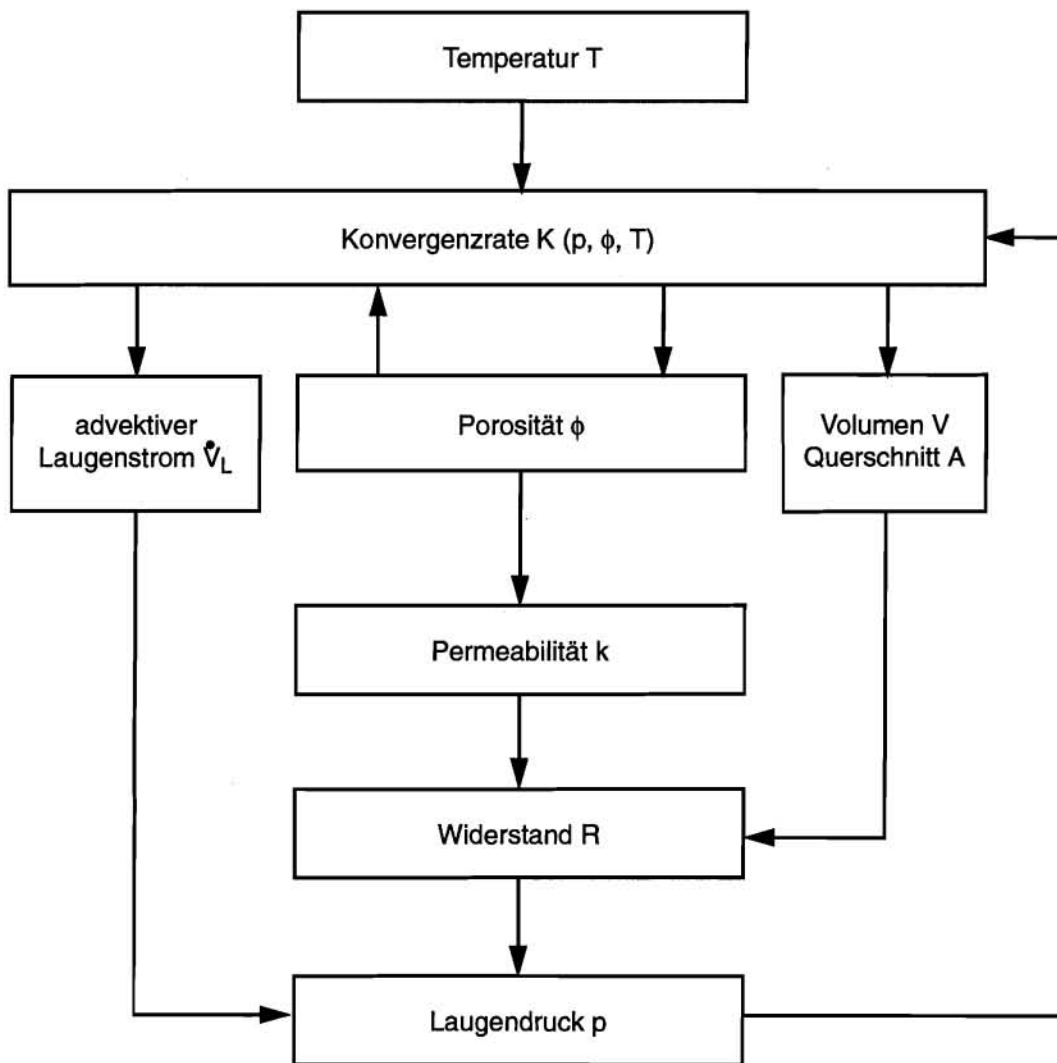
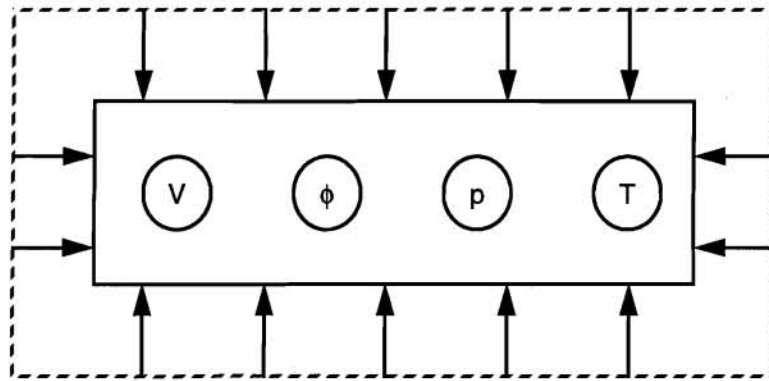


Abbildung 26: Konvergenz eines versetzten Hohlräume und das Zusammenwirken der beteiligten Prozesse.

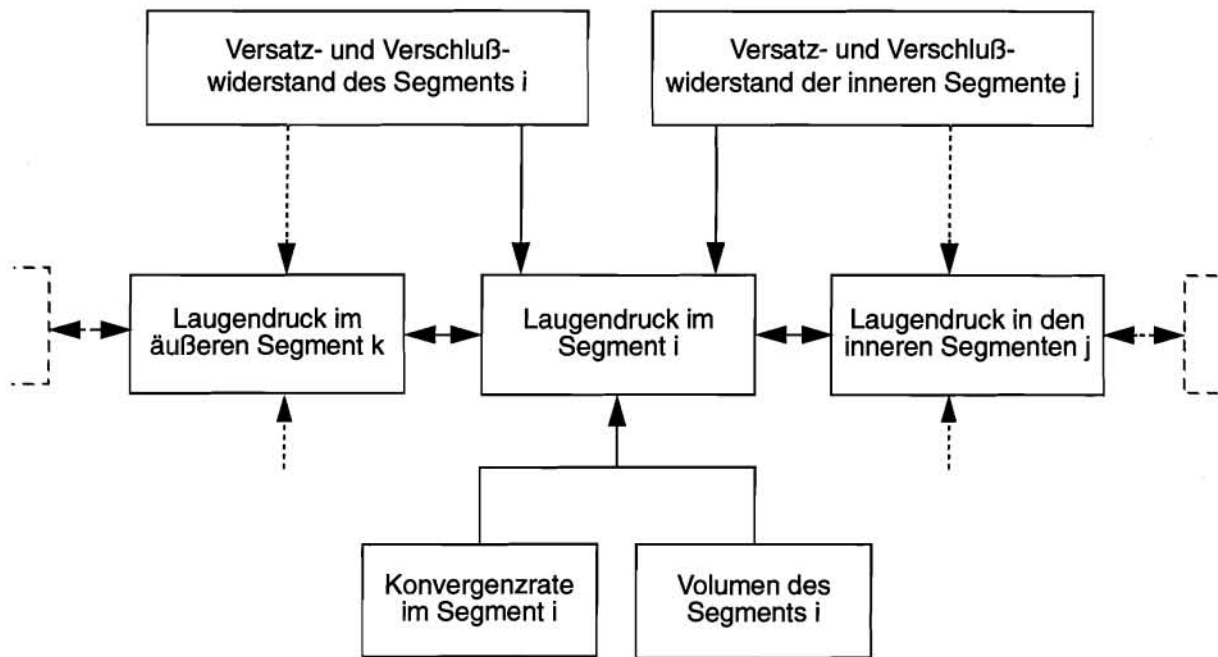


Abbildung 27: Eingangsgrößen zur Laugendruckberechnung.

Solange ein Segment noch nicht oder nur teilweise mit Lauge gefüllt ist, kann der atmosphärische oder der hydrostatische Druck gegenüber dem Laugendruck von mehreren MPa in gefüllten Segmenten vernachlässigt werden. Daher wird der Laugendruck in leeren und teilgefüllten Segmenten auf Null gesetzt. Für alle gefluteten Segmente werden die Laugendrücke im Programm DRUCK2 nach der im Kapitel 5.4.1 angegebenen Gleichung berechnet. Mit den so bestimmten Laugendrücken können die Ströme in allen Segmenten mit Hilfe der im Kapitel 5.4.3 (Beschreibung des Programms STROM2) angegebenen Gleichungen berechnet werden.

Die Berechnung des Laugendrucks in teilweise gefluteten Segmenten ist in einer Weiterentwicklung des Moduls REPOS verwirklicht. Hierbei ist in Hinblick auf die Modellierung eines beliebig vernetzten Grubengebäudes auch die Berechnung des Strömungswiderstandes verändert worden. Daher ist diese modifizierte Programmversion nicht in der Version 5 integriert.

Neben den durch die Konvergenz erzwungenen advektiven Laugenströmen können Laugenbewegungen durch Austauscheffekte auftreten, z.B. aufgrund von Temperatur- oder Konzentrationsgradienten (siehe Kapitel 5.6.1). Daneben kann ein Laugenaustausch durch die Bewegung von Korrosions- oder Radiolysegasbläschen durch das mit Lauge gefüllte poröse Medium erfolgen (siehe Kapitel 5.6.3).

Die Gasproduktion durch Radiolyse (siehe Kapitel 5.5.2) wird in allen Segmenten berechnet, die kontaminierte Lauge enthalten. Die Gasproduktion durch Korrosion der Metallbehälter wird in

den Mobilisierungsmodellen bestimmt (siehe Kapitel 5.5.1). Das gleiche gilt für die Radiolyse-gasproduktion durch die noch nicht mobilisierten Radionuklide. Die von allen Abfallgebänden eines Einlagerungsortes gebildete Gasmenge wird dann den Segmentmodellen durch Parameter übergeben.

Radionuklide können sowohl mit den erzwungenen Laugenströmen als auch mit der durch die Austauscheffekte hervorgerufenen Laugenbewegung (Laugenaustausch) sowie durch Diffusion in der Lauge transportiert werden (siehe Kapitel 5.7.3). Aus programmtechnischen Gründen wird die Diffusion der Radionuklide wie ein (Laugen-) Austauscheffekt behandelt. In Abbildung 28 sind die Effekte schematisch dargestellt, die zu den Aktivitätsströmen beitragen. Bei der Berechnung eines resultierenden Aktivitätsstromes durch ein Segment wird folgendermaßen vorgegan-gen:

Die in die Berechnung der Laugenbewegung durch Austauscheffekte eingehenden Größen Permeabilität bzw. Porosität, Temperaturgradient und Konzentration einer in der Lauge gelösten Substanz sind im allgemeinen im Verschuß und im versetzten Bereich eines Segments verschieden. Daher werden die Beiträge zum Aktivitätsstrom aus Dichtegradienten, Gastransport und Diffusion zunächst im Verschuß und im versetzten Bereich getrennt berechnet (siehe Kapitel 5.6 und 5.7) und anschließend in jedem Teilbereich wie im Kapitel 5.7.5 beschrieben überlagert. Da nicht mehr Aktivität durch ein Segment transportiert werden kann, als durch jeden der

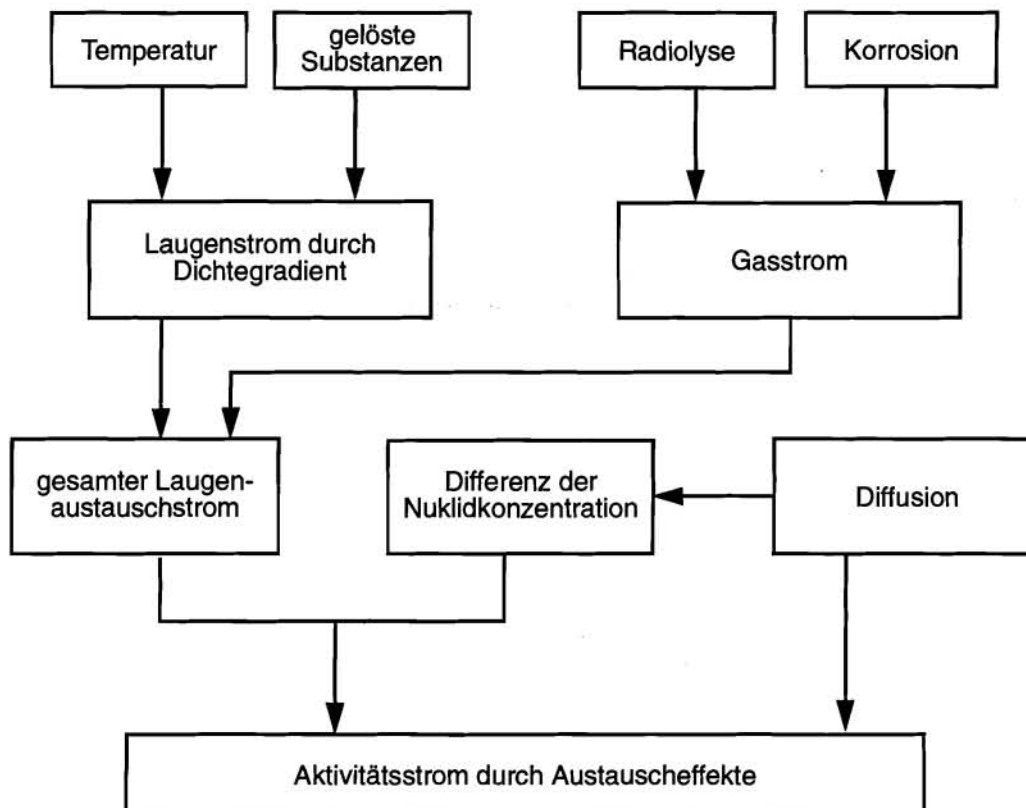


Abbildung 28: Berechnung des Aktivitätsstroms, der durch konvektiven Laugenaustausch bewirkt wird.

beiden Teilbereiche hindurchgeht, ergibt sich der resultierende Aktivitätstransport durch ein Segment als das Minimum aus den Aktivitätsströmen in Verschuß und Versatz.

Zu diesem Aktivitätsstrom wird derjenige addiert, der sich aus dem erzwungenen Laugenstrom ergibt. Letzterer liefert im allgemeinen den größeren Beitrag. Abweichungen von diesem Vorgehen bei den Einlagerungssegmenten werden im Kapitel 4.2 diskutiert.

Die Bilanz der nuklidspezifischen Aktivität ergibt sich zu jedem Zeitpunkt aus dem aktuellen Aktivitätsinventar, dem Aktivitätseingangsstrom in das Segment und dem Aktivitätsausgangsstrom nach der im Kapitel 5.10 angegebenen Gleichung.

In allen Segmentmodellen, die mit kontaminierter Lauge in Berührung kommen, werden chemische Sorption und Ausfällung von Nukliden aufgrund einer begrenzten Löslichkeit berechnet (siehe Kapitel 5.9). Durch die Berücksichtigung dieser Effekte werden die Aktivitätsströme in einigen Segmenten beeinflusst. In der Bilanzgleichung für die nuklidspezifische Aktivität ist dann nur das zum Transport beitragende, gelöste Inventar einzusetzen.

In jedem Segmentmodell werden die berechneten Laugenströme, die in ein Segment hineinströmen, und die Austauschströme zwischen benachbarten Segmenten zur Steuerung der Zeitschrittweite verwendet. Hierbei wird sichergestellt, daß die pro Zeitschritt transportierte Laugenmenge nicht das verfügbare Hohlräumvolumen bzw. das vorhandene Laugenvolumen übersteigt.

In Abbildung 29 ist der Ablaufplan eines Segmentmodells dargestellt. In der Spalte "Modellsteuerung" wird abgefragt, ob das Segment schon existiert oder ob das Segment seine Endporosität bereits erreicht hat. Durch die Abfrage "existent" wird berücksichtigt, daß während der Betriebsphase eine schrittweise Beladung des Endlagers erfolgt und Segmente erst dann zu betrachten sind, wenn sie einer zeitlichen Entwicklung unterworfen werden. Dies ist im allgemeinen mit der Einlagerung von Abfällen und der Verfüllung gegeben. Programmtechnisch wird ab diesem Zeitpunkt das Segment "zugeschaltet". Durch die Abfrage "Endporosität" wird berücksichtigt, daß die zeitliche Entwicklung eines Segments endet, indem die geringen Porositäten und Permeabilitäten eine weitere Konvergenz und eine weitere Laugenbewegung unterbinden. In beiden Fällen wird bei entsprechender Antwort das Segmentmodell nicht durchlaufen. Der Begriff spontaner Laugenzutritt wird im Kapitel 4.1.2 erläutert.

In den nächsten beiden Spalten sind die Effektprogramme zusammengefaßt, die zur Berechnung der Konvergenz im versetzten Bereich und im Verschuß beitragen. Die folgenden Spalten geben die Programme wieder, die allgemein zur Bilanzierung, zur Berechnung der Gasproduktion, des Laugenaustauschs und des Nuklidtransports dienen. Die verbindenden Pfeile geben die oben beschriebene Reihenfolge wieder, in der die Effektprogramme in einem Segmentmodell durchgerechnet werden.

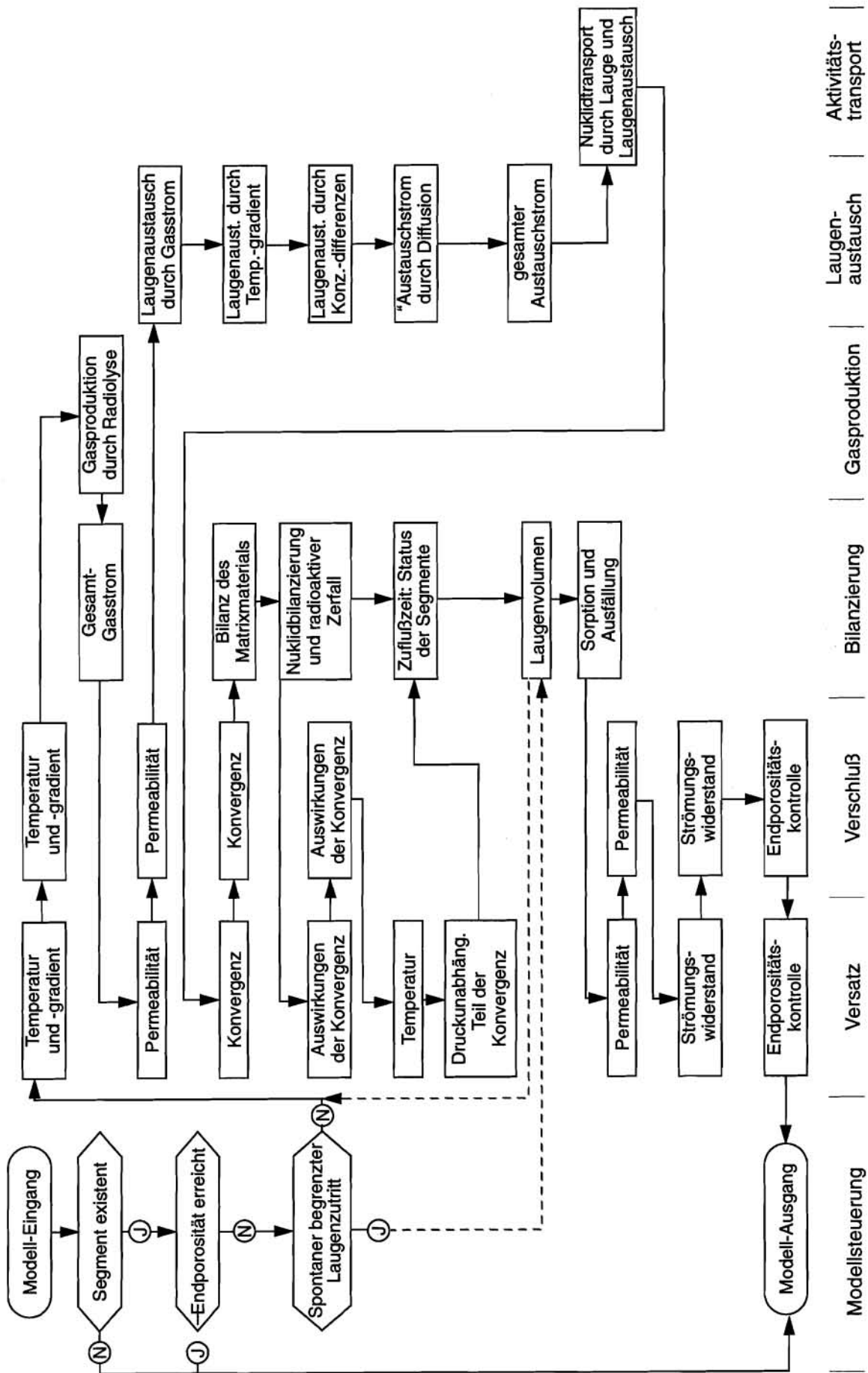


Abbildung 29: Ablaufplan eines Segmentmodells.

4.1.2 Beschreibung der Laugenbewegung

Bei der Modellierung der Vorgänge in einem Segment lassen sich 4 Phasen unterscheiden, die jedes Segment nacheinander durchlaufen kann:

- die Trockenphase,
- die Zuflußphase,
- die Durchströmungsphase und
- die Auspreßphase.

Die Trockenphase kennzeichnet den Zeitbereich zwischen Verfüllen und Verschließen des Teilbereichs und dem Zeitpunkt des ersten Laugenzutritts in das Segment. In diesem Zeitbereich braucht nur eine geringe Anzahl von Effekten betrachtet zu werden. Dies sind insbesondere die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins und die damit verbundene Volumen- und Porositätsänderung in dem Segment (siehe Kapitel 5.2.2).

In der Zuflußphase wird das Segment mit Lauge aufgefüllt. Da diese Lauge kontaminiert sein kann, wird in der Zuflußphase erstmals der Nuklidtransport, der radioaktive Zerfall, die Gasproduktion durch Radiolyse, sowie Sorption und Ausfällung von Radionukliden berechnet.

In der Durchströmungs- und der Auspreßphase sind auch benachbarte Segmente mit Lauge gefüllt. Zwischen diesen Segmenten kann ein konvektiver Laugenaustausch stattfinden. Sofern treibende Kräfte als Dichtegradienten oder Gasstrom vorhanden sind, werden zusätzlich die entsprechenden Laugenaustauschströme und Aktivitätsströme berechnet.

Unter der vereinfachenden Voraussetzung eines Laugenzutritts in das Grubengebäude vom äußersten Segment her, d.h. aus Richtung des Wurzelsegments, ergibt sich für die einzelnen Segmente der folgende Ablauf des Laugenzutritts.

Mit dem Vollaufen des äußeren Nachbarsegments und dem dort damit verbundenen Druckaufbau beginnt die Zuflußphase für ein betrachtetes Segment. Ist der Porenraum dieses Segmentes vollständig mit Lauge gefüllt, so beginnt dort der Aufbau eines Laugendruckes und als Folge davon das Zufließen der Lauge in die inneren Nachbarsegmente (Beginn der Durchströmungsphase). Mit dem Beginn des Laugenzutritts in einen Einlagerungsort beginnt schließlich die Mobilisierung des eingelagerten Inventars.

Ist auch der Einlagerungsort vollständig mit Lauge gefüllt, oder ist der Strömungswiderstand der inneren Segmente mit fortschreitender Konvergenz so groß geworden, daß sich die Strömungsrichtung der Lauge umdreht, dann beginnt die Auspreßphase.

Die Freisetzung von Radionukliden aus dem Grubengebäude beginnt, wenn kontaminierte Lauge aus dem Wurzelsegment ins Deckgebirge austritt. Dieser Zeitpunkt ist nicht notwendigerweise identisch mit dem Zeitpunkt des Vollaufens des Grubengebäudes als Ganzes. Vielmehr kann je nach dem Verhältnis der Widerstände der Dämme und Verschlüsse kontaminierte Lauge aus dem Endlager herausgepreßt werden, während sich zugleich noch Bereiche des Endlagers in der Zulaufphase befinden. Hierbei können bereits mobilisierte Radionuklide auch in tieferliegen-

de Bereiche des Endlagers oder in einen anderen Flügel des Grubengebäudes transportiert werden.

Das Auspressen der kontaminierten Lauge stellt den Haupttransportmechanismus für die Aktivitätsfreisetzung aus dem Endlager dar. Weitere Effekte, die eine Aktivitätsfreisetzung bewirken, sind die oben erwähnten Austauschvorgänge durch Gastransport, Temperaturgradienten, Konzentrationsdifferenzen von in der Lauge gelösten Stoffen und speziell durch Diffusion der Radionuklide.

Bei einem Laugenzutritt aus einem begrenzten Laugeneinschluß in einen Einlagerungsort wird das Segmentssystem zusätzlich von den Einlagerungsorten, also den innersten Segmenten her mit Lauge gefüllt. Mobilisierung von Radionukliden und Transport von kontaminierter Lauge kann in diesem Fall schon einsetzen, bevor Lauge über das Wurzelsegment in das Grubengebäude eintritt. Eine Freisetzung von Radionukliden aus dem Endlager ist im allgemeinen aber nur möglich, wenn die Lauge aus dem begrenzten Laugeneinschluß mit der Lauge aus dem Wurzelsegment zusammentrifft.

Im Gegensatz zu dem kontinuierlichen Laugenzutritt von einem Nachbarsegment her, kann in jedes Segment eine in den Segmentdaten vorwählbare Laugenmenge zu einem ebenfalls vorwählbaren Zeitpunkt spontan zutreten (siehe Beschreibung der Datei mit den Segment- und Gebindedaten, Kapitel 8.2.2.4). Das auf diese Weise zutretende Laugenvolumen wird automatisch auf das zur Verfügung stehende Porenvolumen begrenzt, d.h. ist das Laugenvolumen größer als das Porenvolumen, so wird die überschüssige Laugenmenge ignoriert. Der Effekt des spontanen Laugenzutritts wird zur Zeit dazu benutzt, ein Segment zu einem bestimmten Zeitpunkt vollständig mit Lauge zu füllen, z.B. um eine Kaverne (siehe Kapitel 4.5.2) zu fluten.

4.2 Segmentmodelle für Einlagerungsorte

Einlagerungsorte sind solche Teilbereiche des Grubengebäudes, in denen Behälter, Fässer oder Kokillen mit radioaktiven Abfällen gelagert werden. Bei der Zerlegung des Grubengebäudes in Segmente wird jedem Einlagerungsort zunächst ein eigenes Segment zugeordnet. In allen Parametern, z.B. Geometrie, Inventar, Temperatur, Einlagerungszeitpunkt usw., übereinstimmende Einlagerungsorte können dann in der Struktur unter einem gemeinsamen Segmentnamen aufgeführt werden. In diesem Fall muß in den Segmentdaten die Anzahl der identischen Segmente angegeben werden (siehe Beschreibung der Segmentdaten, Kapitel 8.2.2.4).

Vorgesehene Einlagerungsorte sind:

- Bohrlöcher für wärmeproduzierenden hoch- und mittelradioaktiven Abfall, HTR- und LWR-Brennelemente,
- Kammern für mittel- und schwachradioaktiven Abfall,
- Einlagerungsstrecken für die Einlagerung von Pollux-Behältern mit HAW, HTR- oder LWR-Brennelementen und von Großbehältern mit MAW.

Bei der durch Konvergenz bewirkten Volumenverringerng der Einlagerungsorte ist zu unterscheiden zwischen der Verkleinerung des Porenvolumens im Versatz und der Verkleinerung der Hohlräume in den eingelagerten Abfallgebänden. Abgesehen von Hohlräumen in den Abfallgebänden, die nicht komprimiert werden können (siehe Kapitel 4.2.1.1 und 4.2.3.1), wird in beiden Fällen die Volumenreduktion mit Hilfe der im Kapitel 5.2.2 angegebenen Beziehung bestimmt. Der in den Abfallgebänden anders ablaufende Konvergenzprozeß durch die Stützwirkung z.B. der Behälter wird durch einen geeignet gewählten Reduktionsfaktor f_r in der Konvergenzrate Rechnung getragen (siehe Kapitel 5.2.1).

Durch eine Übergangsphase bei der Anwendung des Reduktionsfaktors in der zeitabhängigen Modellrechnung wird berücksichtigt, daß eine Volumenreduktion erst voll einsetzen kann, wenn die Korrosion der Behälter weit genug fortgeschritten ist. Der Reduktionsfaktor wächst daher von einem minimalen Wert f_t (stark verkleinerte Konvergenzrate), der vor einem Laugenzutritt in den Einlagerungsort gilt ($V_L = 0$) nach Beginn des Laugenzutritts kontinuierlich auf einen maximalen Wert f_n (weniger reduzierte Konvergenz) an. Dieses kontinuierliche Anwachsen wird mit Hilfe der Beziehung

$$f_r = f_t + (f_n - f_t) \frac{V_L}{V_P} \quad (48)$$

beschrieben, wobei V_L das aktuell vorhandene Laugenvolumen und V_P das gesamte Hohlräumvolumen des Einlagerungssegments sind. Die Größen f_t und f_n sind Eingabeparameter der Segmentdaten (siehe Kapitel 8.2.2.4).

Bei allen Einlagerungsorten wird angenommen, daß relativ schnell eine gleichmäßige Durchmischung der eingedrungenen Lauge mit den mobilisierten Radionukliden stattfindet. Daher kann, abweichend von dem im Kapitel 4.1.1 dargestellten allgemeinen Vorgehen, auf die Berechnung von Austauschströmen im Einlagerungsbereich verzichtet werden. Austauschvorgänge werden daher ausschließlich über den Verschluß berechnet.

4.2.1 Modelle für Bohrlöcher

Bei einer Einlagerung in Bohrlöchern werden für HAW und LWR-Brennelemente Kokillen verwendet, für MAW und für HTR-Brennelemente Fässer. Der HAW ist verglast, der MAW ist im allgemeinen zementiert. Die Kokillen für LWR-Brennelemente enthalten jeweils ein halbes Brennelement ohne die Hülsen und Strukturteile. Die HTR-Brennelemente werden mit Quarzsandfüllung in den Fässern fixiert.

Alle Bohrlöcher werden ohne Versatzmaterial mit Fässern oder Kokillen gefüllt und mit Stopfen verschlossen (siehe Abbildung 30). Die Stopfen werden als homogene Gebilde angenommen, die aus einem kompaktierbaren Material bestehen, das sich wie Salzgrus verhält. Wegen der

Konvergenz des umgebenden Salzgesteins nehmen der Querschnitt, die Porosität und die Permeabilität des Stopfens mit der Zeit ab.

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

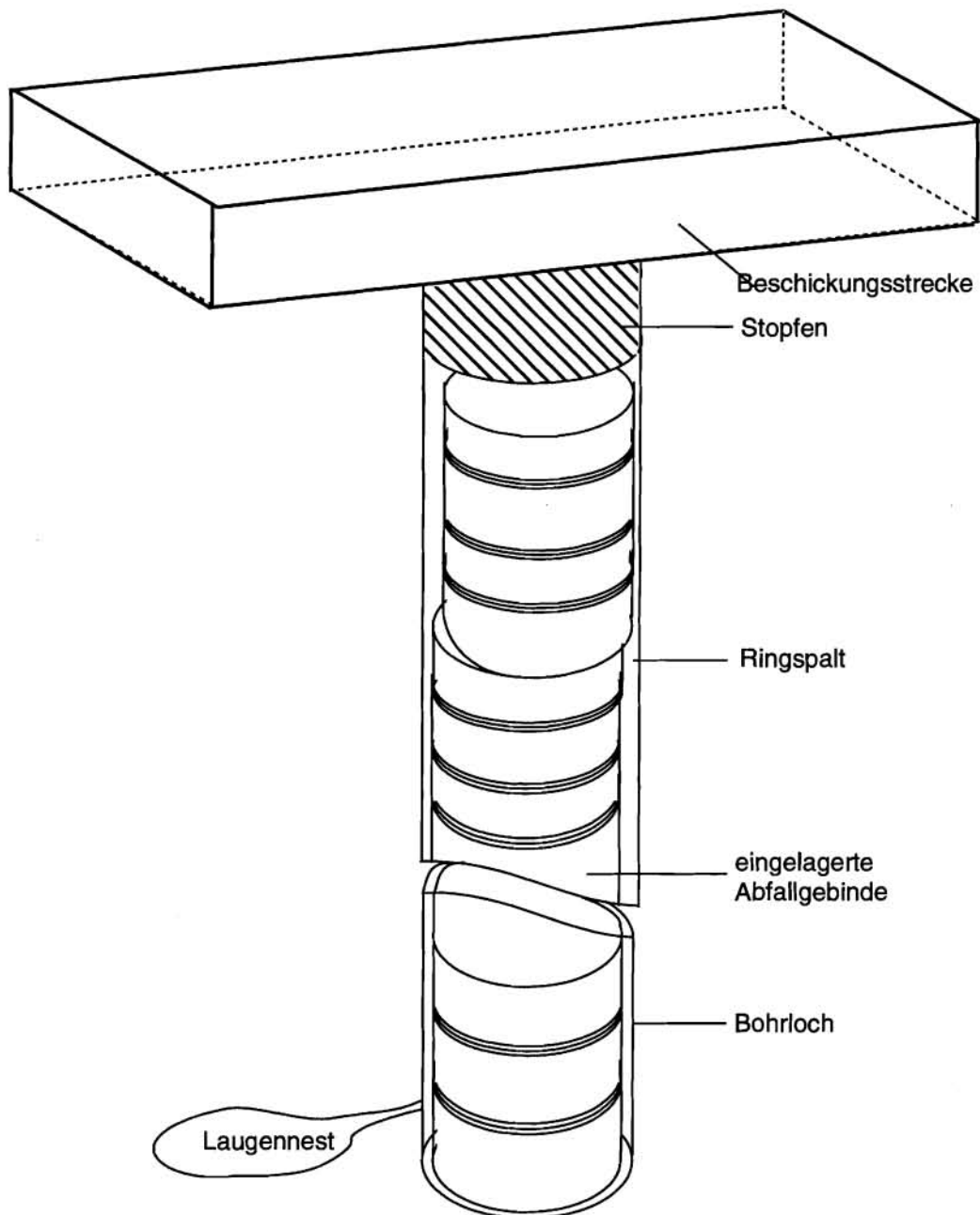


Abbildung 30: Schematische Darstellung eines Bohrlochs mit eingelagertem Abfall und Bohrlochverschluss. Zusätzlich angedeutet ist der Laugenzutritt aus einem Laugennest im Nahbereich des Bohrlochs.

ersten Laugenzutritt geschlossen, so daß die Vernachlässigung des Ringspaltes in den Bohrlochmodellen gerechtfertigt ist.

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

In Tabelle 2 sind die zur Zeit verfügbaren Bohrlochmodelle aufgelistet. Das allgemeine Modell BOALG1 ist für die Beschreibung der Einlagerung aller Abfallarten in Bohrlöchern geeignet. Im Fall der Einlagerung zementierter Abfälle kann die Mobilisierung der Radionuklide jedoch nicht mit dem Modell MOBZ7 (siehe Kapitel 3.3.2) behandelt werden.

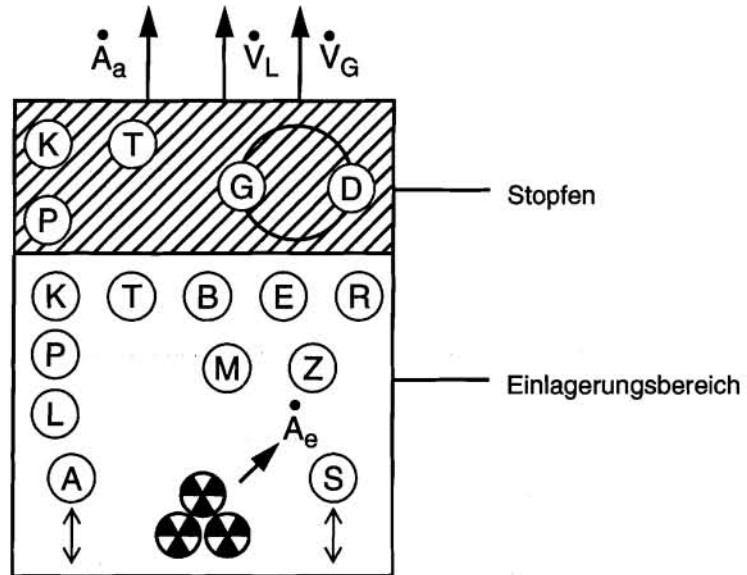
Bohrlochmodell	Beschreibung
BOALG1	Allgemeines Modell für die Einlagerung aller Abfallarten in Bohrlöchern
BOMAW1	Spezielles Modell für die Einlagerung von mittelaktivem, mit Zement verfestigtem Abfall

Tabelle 2: Modelle für Einlagerungs-Bohrlöcher.

Das spezielle Modell BOMAW1 enthält zusätzlich zu den Effekten, die im Modell BOALG1 berücksichtigt werden, die Bilanzierung von Magnesium in der Lauge. Es ist daher geeignet, mit dem Modell MOBZ7 für die Mobilisierung von Radionukliden aus zementierten Abfällen verknüpft zu werden. Im Modell MOBZ7 wird die Zementauflösung in nur geringen Laugenmengen behandelt, wobei vorhandenes Magnesium für den Korrosionsprozeß entscheidend ist (siehe Kapitel 3.3.2).

Lauge tritt entweder über den Stopfen aus einem darüberliegenden Segment oder, wie z.B. in der Abbildung 30 angedeutet, aus einem angrenzenden Laugennest im Gebirge (begrenzter Laugenzutritt aus einem Laugeneinschluß) direkt in das Bohrloch ein. Der anschließende Laugentransport aus dem Bohrloch erfolgt durch den Stopfen hindurch und wird hauptsächlich durch den Auspreßvorgang infolge der Gebirgskonvergenz und zu einem geringen Anteil durch Austauschvorgänge verursacht.

Wie bereits erläutert, werden in Einlagerungssegmenten Austauscheffekte nur über den Verschuß betrachtet. Analytische und numerische Stabilitätsuntersuchungen [19] haben gezeigt, daß ein eventuell vorhandener vertikaler Dichtegradient nicht stark genug ist, die Schwelle für das Einsetzen einer Konvektionsströmung zu überwinden. Daher kann hier die Berechnung der Austauschströme aufgrund von Dichtegradienten entfallen. In einem Bohrlochstopfen werden daher von den Austauscheffekten nur der Laugenaustausch durch Gastransport und die Diffusion der Radionuklide berücksichtigt. Im einzelnen werden alle in Abbildung 31 dargestellten chemischen und physikalischen Effekte in den Bohrlochmodellen berücksichtigt.



- (A) Ausfällung durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenze
- (B) Bilanzierung des Matrixmaterials
- (D) Laugenaustausch durch Diffusion
- (E) Energiestrom durch α -, β - und γ -Zerfall
- (G) Laugenaustausch durch Gastransport
- (K) Konvergenz
- (L) Laugentransport
- (M) Magnesiumbilanzierung (nur in BOMAW 1)
- (P) Permeabilität und Widerstand
- (R) Gasproduktion durch Radiolyse
- (S) Sorption
- (T) Temperatur
- (Z) Bilanzierung der Aktivität incl. Zerfall
- \dot{A}_a Aktivitätsausgangsstrom \dot{A}_e Aktivitätseingangsstrom
- \dot{V}_L Laugenstrom
- \dot{V}_G Gasstrom
- Abfallgebände

Abbildung 31: Schematische Darstellung der in einem Bohrlochmodell behandelten physikalischen und chemischen Effekte.

4.2.1.1 Das allgemeine Bohrlochmodell BOALG1

Das allgemeine Bohrlochmodell BOALG1 ist so angelegt, daß es für die Beschreibung der Bohrlochlagerung aller Abfallarten verwendet werden kann. Die eventuell vorhandenen Hohlräume in den Behältern und im Abfall selbst, die sich bei der durch Konvergenz bewirkten Volumenverringern unterschiedlich verhalten können, werden gesondert behandelt. Zum Beispiel wird bei Anwendung des Modells auf Bohrlöcher für HTR-Brennelemente die Tatsache berücksichtigt, daß die HTR-Brennstoffpartikel teilweise dem Gebirgsdruck standhalten, so daß die darin vorhandenen Hohlräume nicht konvergieren. Die Verkleinerung anderer kompaktierbarer Hohlräume in den Abfallgebänden wird wie im Kapitel 5.2.1 beschrieben berechnet, wobei geeignete Reduktionsfaktoren für die Konvergenzrate verwendet werden.

Das Hohlraumvolumen des Bohrloches wird daher in 2 Teile aufgeteilt, einen kompaktierbaren Hohlraum $V_{P,k}$ und einen nicht kompaktierbaren Hohlraum $V_{P,n}$. Beide Größen werden zusammen mit anderen Abfalldaten eingegeben (siehe Beschreibung der Datei mit den Abfalldaten, Kapitel 8.2.2.6). Dem kompaktierbaren Hohlraum wird eine fiktive Porosität ϕ_B zugeordnet, die sich wie folgt ergibt

$$\phi_B = V_{P,k} / (V_B - V_{P,n}), \quad (49)$$

wobei V_B das gesamte Bohrlochvolumen ist. Mit Hilfe der so bestimmten Porosität und einem zusätzlichen, geeignet zu wählenden Konvergenz-Reduktionsfaktor (siehe Kapitel 4.2) wird die Stützwirkung des Abfalls und der Behälter bei der Berechnung der Konvergenzrate (siehe Kapitel 5.2.1) berücksichtigt.

Zur Bestimmung der Gesamtporosität ϕ_G des Bohrloches wird das Volumen des nicht kompaktierbaren Hohlraumes hinzugefügt,

$$\phi_G = (V_{P,k} + V_{P,n}) / V_B, \quad (50)$$

d.h. die Gesamtporosität ist definiert als der Quotient von Gesamthohlraum und Gesamtvolumen des Bohrloches. Diese Gesamtporosität wird für die Berechnung der Gasproduktion durch Radio-lyse sowie zur Berechnung der Permeabilität des Bohrloches verwendet.

Falls Abfall ohne einen nicht konvergierenden Hohlraum betrachtet wird, ist in den Segmentdaten das nicht kompaktierbare Volumen $V_{P,n}$ auf Null zu setzen.

4.2.1.2 Besonderheiten des Modells BOMAW1

Neben den im Modell BOALG1 berücksichtigten Effekten wird im Bohrlochmodell BOMAW1 zusätzlich der Magnesiumgehalt der Lauge bilanziert. Die Modellierung der Magnesiumbilanz im Effektprogramm BILMG1 wird im Kapitel 5.6.2 beschrieben.

Da das Bohrlochmodell ausschließlich für zementierten mittelaktiven Abfall verwendet werden soll, fehlt das nicht kompaktierbare Hohlraumvolumen.

Um die unterschiedlichen chemischen Milieus während und nach der Auflösung des Zements zu berücksichtigen, kann die Sorption mit zwei unterschiedlichen Datensätzen und die Ausfällung mit unterschiedlichen Löslichkeitsgrenzen gerechnet werden. Die Auswahl der Datensätze erfolgt in der Datei mit den Segment- und Gebindedaten (siehe Beschreibung der Eingabedateien, Kapitel 8). Das Umschalten von einem Datensatz zum anderen erfolgt programmtechnisch, wenn im Segment alles Magnesium zur Zementkorrosion verbraucht ist und auch kein weiteres Magnesium von einem Nachbarsegment mehr nachgeliefert wird.

4.2.2 Das Kammermodell KAMAW1

Die Einlagerung großer Mengen mittel- und schwachaktiver Abfälle ohne nennenswerte Wärmeentwicklung erfolgt in Kammern (siehe Abbildung 32). Die Abfallgebände werden übereinandergestapelt und der verbleibende Hohlraum zwischen den Gebinden wird mit Salzgrus verfüllt. Die Kammer wird durch einen Verschluss aus kompaktierbarem Material gegen die Beschickungsstrecke abgeschlossen.

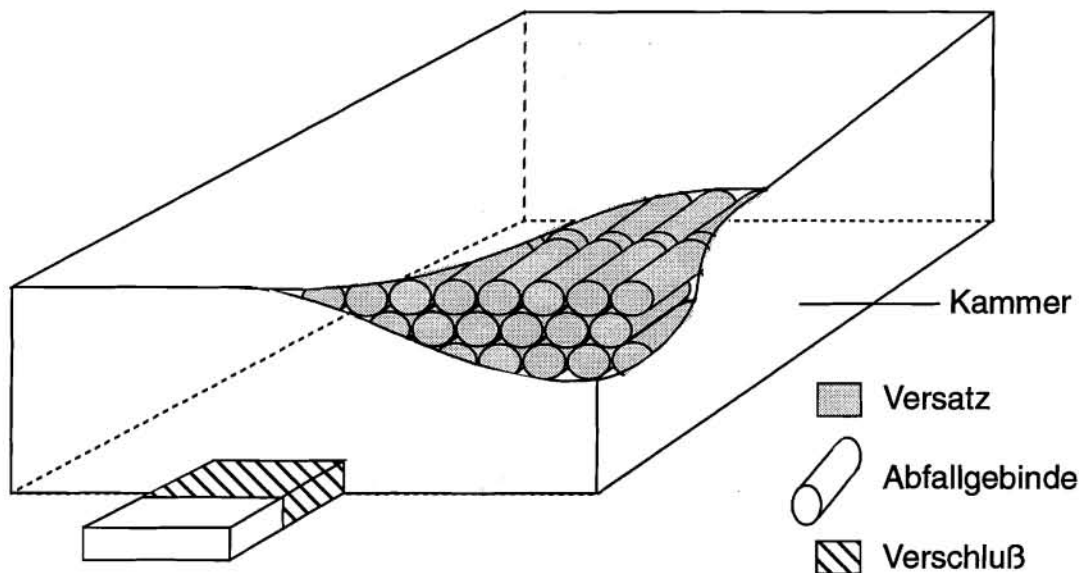
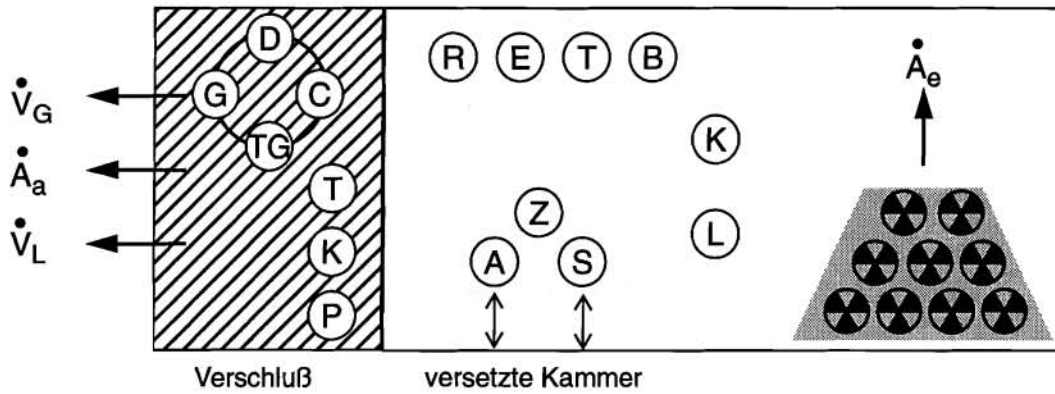


Abbildung 32: Einlagerungskammer für schwach- und mittelaktive Abfälle.





- (A) Ausfällung durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenze
- (B) Bilanzierung des Matrixmaterials
- (C) Laugenaustausch durch Konzentrationsdifferenz
- (D) Laugenaustausch durch Diffusion
- (E) Energiestrom durch α -, β - und γ -Zerfall
- (G) Laugenaustausch durch Gastransport
- (K) Konvergenz
- (L) Laugentransport
- (P) Permeabilität und Widerstand
- (R) Gasproduktion durch Radiolyse
- (S) Sorption
- (T) Temperatur
- (TG) Laugenaustausch durch Temperaturgradient
- (Z) Bilanzierung der Aktivität incl. Zerfall
- \dot{A}_a Aktivitätsausgangsstrom \dot{A}_e Aktivitätseingangsstrom
- \dot{V}_L Laugenstrom
- \dot{V}_G Gasstrom
-  Abfallgebinde  Versatz

Abbildung 33: Schematische Darstellung der in einem Kammermodell berücksichtigten physikalischen und chemischen Effekte.

Die Lauge gelangt entweder aus einem Laugennest im Gebirge (siehe Kapitel 4.4.1) oder bei einem externen Laugenzutritt über den Verschuß von der Beschickungsstrecke her in die Kammer. Das Auspressen der kontaminierten Lauge aus den Einlagerungskammern erfolgt durch Gebirgskonvergenz. Als Austauscheffekte über den Verschuß (siehe Kapitel 4.2) werden Laugenbewegung durch Gastransport, durch einen Temperatur- oder Konzentrationsgradienten und die Diffusion der Radionuklide berücksichtigt. Abbildung 33 zeigt alle physikalischen und chemischen Effekte, die in dem Kammermodell KAMAW1 betrachtet werden.

Die Länge, Breite und Höhe einer Kammer werden im Modell nicht spezifiziert, stattdessen wird nur der Anfangswert V_K des Gesamtvolumens der Kammer angegeben. Das gesamte Hohlraumvolumen $V_{P,G}$ setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, dem Porenvolumen im Versatz (Salzgrus) $V_{P,S}$ und dem Hohlraum in den Abfallgebinden $V_{P,B}$.

Die Größe $V_{P,B}$ wie auch das Behältervolumen stammen aus den Abfalldaten (siehe Kapitel 8.2.2.6). Das Volumen des Versatzmaterials zwischen den Abfallbehältern bestimmt sich aus der Differenz zwischen Kammervolumen V_K und dem gesamten Behältervolumen V_B . Ihm wird wegen der eventuell nicht vollständigen Verfüllung der Hohlräume zwischen den Gebinden eine Porosität $\phi_{S,K}$ zugeordnet, die im allgemeinen etwas größer ist als die des reinen Versatzmaterials. Hieraus ergibt sich das gesamte Hohlraumvolumen der Kammer zu

$$V_{P,G} = (V_K - V_B) \phi_{S,K} + V_{P,B}, \quad (51)$$

und die Gesamtporosität ϕ_G der Kammer zu

$$\phi_G = V_{P,G} / V_K. \quad (52)$$

Mit fortschreitender Gebirgskonvergenz nehmen beide Größen monoton ab. Das gesamte Hohlraumvolumen bestimmt die Laugenmenge, die maximal in eine Kammer eindringen kann. Die Gesamtporosität wird bei der Radiolysegasproduktion benötigt. Sie bestimmt außerdem die Stützwirkung, die eine verfüllte Kammer bei der Berechnung der Konvergenzrate hat. Hierbei wird die zusätzliche Stützwirkung der unvollständig korrodierten Behälter durch einen Reduktionsfaktor für die Konvergenzrate berücksichtigt (siehe Kapitel 5.2.1).

4.2.3 Modelle für Einlagerungsstrecken

Die Segmentmodelle für Einlagerungsstrecken unterscheiden sich vom Kammermodell im wesentlichen durch eine detailliertere Beschreibung der Hohlraumvolumina in den Abfallgebinden und deren Veränderung durch die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins. Außerdem wird neben der zeitlichen Entwicklung des Streckenvolumens auch jeweils die Höhe und Breite der Strecke berechnet.

Bei der Streckenlagerung von HAW und Brennelementen werden unterschiedliche Pollux-Behälter verwendet. Bei der Einlagerung von LWR-Brennelementen werden 8 Brennelemente und deren Hülsen und Strukturteile in einen Pollux-Behälter verpackt. Für HAW wird ein Pollux-Behälter verwendet, der 6 HAW-Kokillen aufnehmen kann. Die HTR-Brennelemente werden in einem HTR-Pollux-Behälter gelagert, der eine lose Schüttung von HTR-Brennelementen enthält. Der MAW wird in MAW-Großbehältern eingelagert, die eine nicht näher spezifizierte verlorene Abschirmung darstellen und jeweils 4 Fässer aufnehmen können.

Der Raum zwischen den Behältern und um die Behälter herum wird mit Salzgrus verfüllt. Alle Einlagerungsstrecken werden mit einem Verschuß aus kompaktierbarem Material versehen (siehe Abbildung 34).

Lauge gelangt entweder aus einem Laugennest im Gebirge (siehe Kapitel 4.4.1) oder durch den Streckenverschuß von der Beschickungsstrecke her in eine Einlagerungsstrecke. Das Auspressen der kontaminierten Lauge aus den Einlagerungsstrecken erfolgt durch Gebirgskonvergenz.

Als Austauscheffekte über den Verschuß (siehe Kapitel 4.2) werden Laugenbewegung durch Gastransport, durch einen Temperatur- oder Konzentrationsgradienten und die Diffusion der Radionuklide berücksichtigt.

In Tabelle 3 ist eine Zusammenstellung der zur Zeit verfügbaren Segmentmodelle für Einlagerungsstrecken angegeben. Abbildung 35 zeigt alle physikalischen und chemischen Effekte, die in den Modellen für Einlagerungsstrecken betrachtet werden.

Das allgemeine Modell ESALG1 ist für die Beschreibung der Streckenlagerung zusammen mit allen Abfallarten geeignet. Im Fall der Einlagerung zementierter Abfälle kann die Mobilisierung der Radionuklide jedoch nicht mit dem Modell MOBZ7 (siehe Kapitel 3.3.2) behandelt werden.

Das allgemeine Modell ESALG2 ist ebenfalls für die Beschreibung der Streckenlagerung zusammen mit allen Abfallarten geeignet. Zur Zeit ist es jedoch nur in Kombination mit dem Mobilisierungsmodell MOBL2 für LWR-Brennelemente anwendbar. In ESALG2 wird berücksichtigt, daß

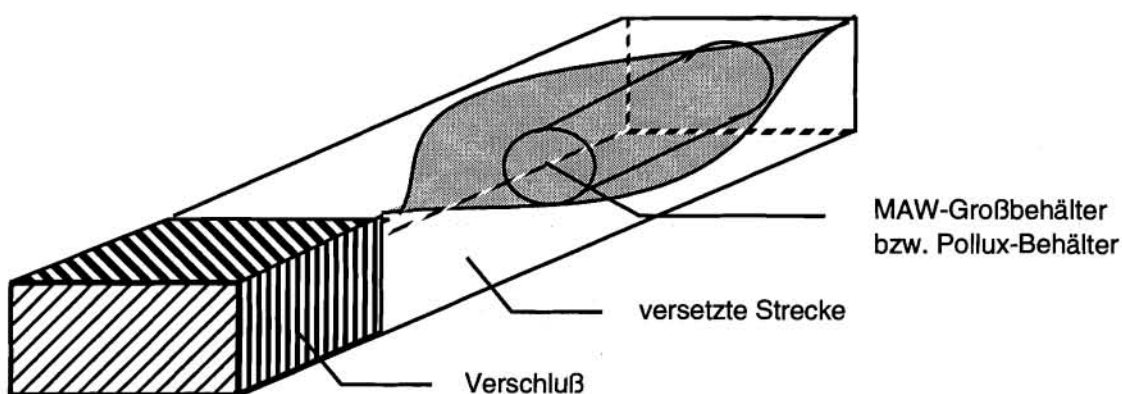
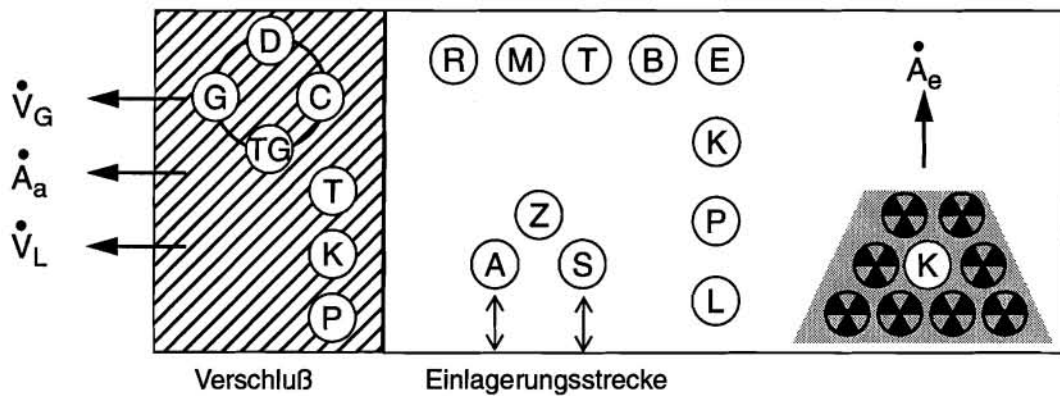


Abbildung 34: Einlagerungsstrecke für Pollux-Behälter und MAW-Großbehälter.



- (A) Ausfällung durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenze
- (B) Bilanzierung des Matrixmaterials
- (C) Laugenaustausch durch Konzentrationsdifferenz
- (D) Laugenaustausch durch Diffusion
- (E) Energiestrom durch α -, β - und γ -Zerfall
- (G) Laugenaustausch durch Gastransport
- (K) Konvergenz
- (L) Laugentransport
- (M) Magnesiumbilanzierung (nur in ESMAW 1)
- (P) Permeabilität und Widerstand
- (R) Gasproduktion durch Radiolyse
- (S) Sorption
- (T) Temperatur
- (TG) Laugenaustausch durch Temperaturgradient
- (Z) Bilanzierung der Aktivität incl. Zerfall
- \dot{A}_a Aktivitätsausgangsstrom \dot{A}_e Aktivitätseingangsstrom
- \dot{V}_L Laugenstrom
- \dot{V}_G Gasstrom
- Abfallgebinde Versatz

Abbildung 35: Schematische Darstellung der in einer Einlagerungsstrecke behandelten physikalischen und chemischen Effekte.

Streckenmodell	Beschreibung
ESALG1	Allgemeines Modell für die Einlagerung von Pollux-Behältern mit HAW-Kokillen oder mit LWR- oder HTR-Brennelementen
ESALG2	Allgemeines Modell für die Einlagerung von Pollux-Behältern mit LWR-Brennelementen unter Berücksichtigung eines zeitdiskreten Behälterausfalls
ESMAW1	Modell für die Einlagerung von Großbehältern mit zementiertem, mittelaktivem Abfall

Tabelle 3: Modelle für Einlagerungsstrecken.

die Abfallbehälter zeitlich diskret ausfallen und daher die Volumina in der Einlagerungsstrecke für jedes Gebinde getrennt berechnet werden müssen.

Das spezielle Modell ESMAW1 enthält zusätzlich zu den Effekten, die im Modell ESALG1 berücksichtigt werden, die Bilanzierung von Magnesium in der Lauge. Es ist daher geeignet, mit dem Modell MOBZ7 für die Mobilisierung von Radionukliden aus zementierten Abfällen verknüpft zu werden. Im Modell MOBZ7 wird die Zementauflösung in nur geringen Laugenmengen behandelt, wobei vorhandenes Magnesium für den Korrosionsprozeß entscheidend ist (siehe Kapitel 3.3.2)

4.2.3.1 Das allgemeine Modell ESALG1 für eine Einlagerungsstrecke

Das allgemeine Modell ESALG1 ist so angelegt, daß es für die Beschreibung der Streckenlagerung aller Abfallarten in Pollux-Behältern oder anderen Großbehältern verwendet werden kann. Daher werden neben dem Porenvolumen im Streckenversatz die eventuell vorhandenen Hohlräume in den Behältern und im Abfall selbst, die sich bei der durch Konvergenz bewirkten Volumenverringern unterschiedlich verhalten können, gesondert behandelt.

Zum Beispiel wird bei Anwendung des Modells auf Einlagerungsstrecken für HTR-Brennelemente in Pollux-Behältern die Tatsache berücksichtigt, daß die HTR-Brennstoffpartikel teilweise dem Gebirgsdruck standhalten, so daß die darin vorhandenen Hohlräume nicht konvergieren. Die Verkleinerung anderer kompaktierbarer Hohlräume in den Abfallgebänden wird wie im Kapitel 5.2.1 beschrieben berechnet, wobei geeignete Reduktionsfaktoren für die Konvergenzrate verwendet werden.

Alle Pollux-Behälter werden in den Strecken mit einem Abstand von jeweils wenigen Metern zueinander gelagert. Der verbleibende Hohlraum in der Strecke wird mit Salzgrus verfüllt. Der gesamte Hohlraum einer Einlagerungsstrecke setzt sich damit aus dem Porenvolumen im Versatz $V_{P,S}$, dem kompaktierbaren Hohlraum $V_{P,K}$ in den Behältern und dem nicht kompaktierbaren Hohlraum $V_{P,n}$ in den Brennelementen zusammen,

$$V_{P,G} = V_{P,S} + V_{P,k} + V_{P,n} \quad (53)$$

Er bestimmt, wieviel Lauge maximal in eine Strecke eindringen kann. Die Größen $V_{P,k}$ und $V_{P,n}$ werden mit den Abfalldaten eingegeben (siehe Beschreibung der Datei mit den Abfalldaten, Kapitel 8.2.2.6). Das Porenvolumen im Versatz erhält man aus dem verfüllten Hohlraum der Strecke V_S und der Porosität ϕ_S des Verfüllmaterials

$$V_{P,S} = V_S \phi_S, \quad (54)$$

wobei der verfüllte Hohlraum sich aus der Differenz von gesamtem Streckenvolumen V_G und gesamtem Behältervolumen V_B ergibt,

$$V_S = V_G - V_B. \quad (55)$$

Mit Hilfe dieser Volumina läßt sich eine fiktive Porosität der Abfallgebände ϕ_B definieren

$$\phi_B = V_{P,k} / (V_B - V_{P,n}), \quad (56)$$

die für die Kompaktierung der korrodierenden Behälter verwendet wird (siehe Kapitel 5.5.2), und die Gesamtporosität ϕ_G der Einlagerungsstrecke

$$\phi_G = V_{P,G} / V_G, \quad (57)$$

die bei der Berechnung der Gasproduktion durch Radiolyse (siehe Kapitel 5.5.2) und bei der Bestimmung von Permeabilität und gesamtem Strömungswiderstand der Strecke (siehe Kapitel 5.3) verwendet wird.

Falls Abfall ohne einen nicht konvergierenden Hohlraum betrachtet wird, ist in den Segmentdaten das nicht kompaktierbare Volumen $V_{P,n}$ auf Null zu setzen.

4.2.3.2 Das allgemeine Modell ESALG2 für eine Einlagerungsstrecke

Das Segmentmodell ESALG2 für eine Einlagerungsstrecke mit Pollux-Behältern dient der Beschreibung der physikalischen und chemischen Vorgänge innerhalb der Einlagerungsstrecke. In Analogie zum Segmentmodell ESALG1 kann es prinzipiell für alle Abfallarten in Pollux-Behältern

oder in anderen Behältern eingesetzt werden, sofern geeignete Mobilisierungsmodelle vorhanden sind. Allerdings ist es derzeit nur in Kombination mit dem Mobilisierungsmodell MOBL2 verwendbar, da im Vergleich zum bisherigen Segmentmodell der Konvergenzprozeß im Bereich der Abfallgebände anders behandelt wird. Die berücksichtigten physikalischen und chemischen Prozesse entsprechen denen für das Segmentmodell ESALG1.

Durch die Berücksichtigung des zeitdiskreten Behälterausfalls im Mobilisierungsmodell MOBL2 ergibt sich im Modell ESALG2 gegenüber dem Modell ESALG1 eine Änderung bei der Berechnung einzelner Effekte. Die in der Strecke eingelagerten Behälter fallen zeitlich nacheinander aus, so daß das in den Behältern vorhandene Hohlraumvolumen bei jedem Behälterausfall einzeln zu dem Gesamthohlraumvolumen addiert werden muß. Nach Ausfall eines Behälters steht der im Einlagerungsort bereits eingedrungenen Lauge ein größeres Volumen zur Verfügung, so daß der Zustand der Einlagerungsstrecke von der Auspreßphase wieder in die Zuflußphase übergehen kann, bis der gesamte Hohlraum wieder mit Lauge gefüllt ist.

Bei der Volumenreduktion des Einlagerungsortes infolge der Gebirgskonvergenz wird zwischen der Reduktion des Porenvolumens im Versatz und der Reduktion der Hohlräume in den einzelnen Abfallgebänden unterschieden. Solange ein Behälter intakt ist, wird das Volumen im Abfallgebände nicht reduziert. Der in den Abfallgebänden anders ablaufende Konvergenzprozeß, beispielsweise durch die Stützwirkung der Behälter, wird über einen Reduktionsfaktor f_r berücksichtigt.

Das Porenvolumen im Versatzbereich und die vorhandenen Hohlräume in den Behältern und im Abfall selbst werden gesondert behandelt. Für den Hohlraum in einer Strecke wird folgende Definition vorgenommen: Der gesamte Hohlraum $V_{P,G}$ in der Einlagerungsstrecke setzt sich zusammen aus dem kompaktierbaren Porenraum im Versatz $V_{P,S}$, dem kompaktierbaren Hohlraum in den Behältern $V_{P,B}$ und dem nicht kompaktierbaren Hohlraum $V_{P,n}$ in den Brennelementen. Dabei werden nur die bereits ausgefallenen Behälter berücksichtigt, so daß der gesamte Hohlraum u.a. abhängig von der Anzahl an ausgefallenen Behältern n_α ist. Der (aktuell vorhandene) gesamte Hohlraum bestimmt, wieviel Lauge in den Einlagerungsort eindringen kann. Es gilt

$$V_{P,G} = V_{P,S} + V_{P,B} + n_\alpha \cdot V_{P,n}, \quad (58)$$

wobei

$$V_{P,B} = \sum_{i=1}^{n_\alpha} V_{P,B_i} \quad (59)$$

das kompaktierbare Hohlraumvolumen aller ausgefallenen Behälter und V_{P,B_i} das kompaktierbare Hohlraumvolumen des ausgefallenen Behälters i beschreiben. Der gesamte Hohlraum ist

also nicht der physikalisch vorhandene Hohlraum, sondern nur derjenige, der für Lauge zur Verfügung steht. Sind alle Behälter ausgefallen, so sind diese beiden Volumina gleich.

Das Porenvolumen im Versatz erhält man aus der Porosität ϕ_S im Versatz mittels der Beziehung

$$V_{P,S} = V_S \cdot \phi_S \quad (60)$$

Der verfüllte Hohlraum V_S ergibt sich aus der Differenz des gesamten Streckenvolumens V_G und dem gesamten Behältervolumen V_B

$$V_S = V_G - V_B \quad (61)$$

mit

$$V_B = \sum_{i=1}^n V_{B_i} \quad (62)$$

Die Größe n repräsentiert die Gesamtzahl an Behältern und V_{B_i} das Volumen des Behälters i .

Die Porosität in den Behältern wird für jedes Gebinde individuell berechnet. Für jedes ausgefallene Abfallgebände läßt sich eine fiktive Porosität ϕ_{B_i} einführen, welche u.a. zur Beschreibung der Endporosität des Behälters i verwendet wird, siehe Kapitel 5

$$\phi_{B_i} = \frac{V_{P,B_i}}{V_{B_i} - V_{P,n}} \quad (63)$$

Für den gesamten Einlagerungsbereich läßt sich wie in Gleichung 57 eine Gesamtporosität ϕ_G aus dem Verhältnis des gesamten Porenraumes zum Gesamtvolumen definieren. Diese Größe geht über die Berechnung der Permeabilität in die Berechnung des Strömungswiderstandes für Lauge ein (siehe Kapitel 5.3).

4.2.3.3 Besonderheiten des Modells ESMW1

Neben den im Modell ESALG1 berücksichtigten Effekten wird im Modell ESMW1 analog zum Bohrlochmodell BOMAW1 zusätzlich der Magnesiumgehalt der Lauge bilanziert. Die Modellierung der Magnesiumbilanz im Effektprogramm BILMG1 wird im Kapitel 5.6.2 beschrieben.

Da das Modell ESMAW1 ausschließlich für zementierten mittelaktiven Abfall verwendet werden soll, fehlt das nicht kompaktierbare Hohlräumvolumen.

Wegen des unterschiedlichen chemischen Milieus während und nach der Auflösung des Zements kann die Sorption mit zwei unterschiedlichen Datensätzen und die Ausfällung mit unterschiedlichen Löslichkeitsgrenzen gerechnet werden. Die Auswahl der Datensätze erfolgt in der Datei mit den Segment- und Gebindedaten (siehe Beschreibung der Eingabedateien, Kapitel 8.2.2.2 und 8.2.2.4). Das Umschalten von einem Datensatz zum anderen erfolgt programmtechnisch, wenn im Segment alles Magnesium zur Zementkorrosion verbraucht ist und auch kein weiteres Magnesium von einem Nachbarsegment mehr nachgeliefert wird.

4.3 Segmentmodelle für Verbindungsstrecken

Unter Verbindungsstrecken innerhalb eines Grubengebäudes werden alle Strecken zwischen dem Schachtbereich und den Einlagerungsorten, also Richtstrecken, Querschläge und Beschickungsstrecken verstanden.

Streckenmodell	Beschreibung
STDAM1	Universelles Modell für eine Strecke, die mit einem Damm verschlossen ist
STVER1	Universelles Modell für eine Strecke, die mit einem kompaktierbaren Verschluß verschlossen ist
STOVE1	Universelles Modell für einen Streckenteil ohne einen Verschluß
STOVOK2	Universelles Modell für einen Streckenteil ohne einen Verschluß, aber mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration

Tabelle 4: Modelle für Verbindungsstrecken.

Die Modellierung der Verbindungsstrecken geschieht durch Segmentmodelle, die im allgemeinen jeweils einen verfüllten Hohlraum und einen Streckenverschluß oder Damm besitzen (siehe Abbildung 36). Diese Verbindungsstrecken enthalten keine Abfallbinde. Sie sind nach Ende der Betriebsphase als Wegsamkeiten für die kontaminierte und unkontaminierte Lauge anzusehen. In Tabelle 4 ist eine Zusammenstellung aller zur Verfügung stehenden Modelle für Verbindungsstrecken angegeben.

Die Modellierung der Verbindungsstrecken eines Grubengebäudes geschieht im allgemeinen so, daß zunächst jeder Strecke ein Segmentmodell zugeordnet wird. Für Richtstrecken, die mit einem Damm verschlossen werden, wird das Segmentmodell STDAM1 verwendet. Querschläge und Beschickungsstrecken werden mit einem Verschluß aus Salzbeton oder kompaktiertem Salzgrus verschlossen. Daher ist für diese Strecken das Modell STVER1 geeignet. Zur feineren Unterteilung langer Strecken kann das Segmentmodell STOVE1 verwendet werden, das nur einen versetzten Hohlraum ohne Verschluß darstellt. Als Alternative zur Unterteilung langer Strecken

ken mit dem Segmentmodell STOVE1 dient das Modell STOVOK2, bei dem eine ortsabhängige Radionuklidkonzentration entlang der Strecke berechnet wird.

In allen Parametern, z.B. Geometrie, Temperatur, Zeitpunkt des Streckenabwurfs usw., übereinstimmende Strecken oder Streckenteile können dann zusammengefaßt und in der Struktur unter einem Segmentnamen aufgeführt werden, wobei in den Segmentdaten die entsprechende Anzahl angegeben werden muß (siehe Kapitel 8.2.2.4). Jede Verbindungsstrecke mit Ausnahme der Strecke mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration kann ein versetztes Zusatzvolumen enthalten, das Lauge aufnehmen kann, dessen versetzter Hohlraum aber nicht zum Strömungswiderstand beiträgt. Solche Zusatzvolumina repräsentieren in den Streckenmodellen Hohlräume, die nicht durch die Streckenabmessungen abgedeckt sind. Dies sind im wesentlichen die Verbindungsstollen zwischen parallelen Strecken und die Rolllöcher zu den Abwetterstrecken. Der Anfangswert eines Zusatzvolumens wird in den Segmentdaten eingegeben. Die zeitliche Veränderung des Zusatzvolumens wird mit der gleichen Konvergenzrate berechnet wie die des Volumens der verfüllten Strecke. Die Anfangswerte des Streckenvolumens und des Verschlußquerschnitts werden aus den Eingabegrößen Breite, Höhe und Länge ermittelt. Die zeitliche Veränderung dieser Größen wird durch den Konvergenzprozeß bestimmt (siehe Kapitel 5.2.2).

Der Aktivitätstransport wird wie im Kapitel 4.1.1 beschrieben berechnet. Beiträge kommen vom advektiven Laugentransport infolge der Gebirgskonvergenz und von den konvektiven Austauschströmen aufgrund eines Dichtegradienten und eines Gasstromes und von der Diffusion der Radionuklide.

Im einzelnen werden in den Modellen für Verbindungsstrecken die in der Abbildung 37 dargestellten Effekte behandelt.

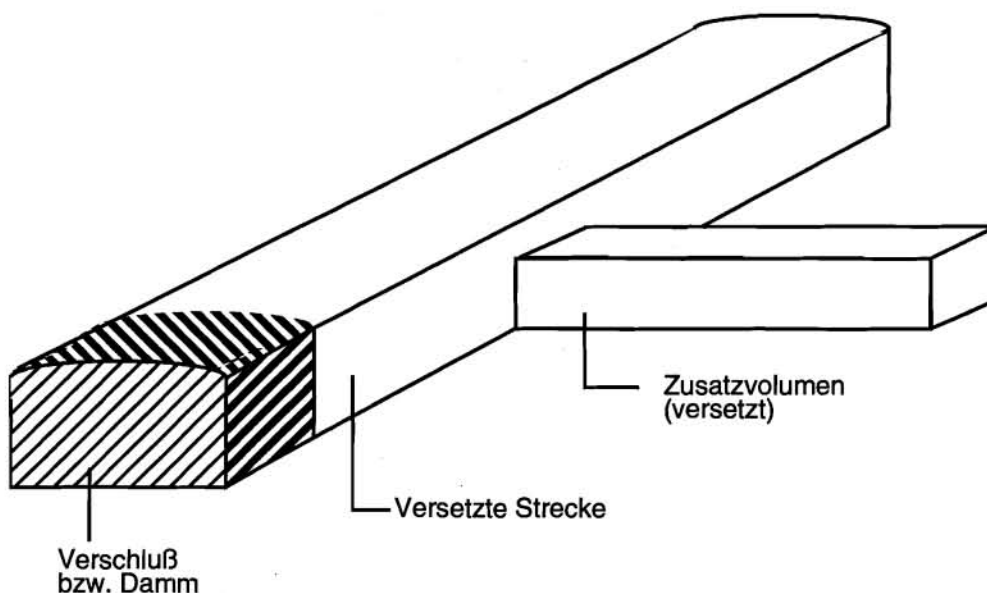
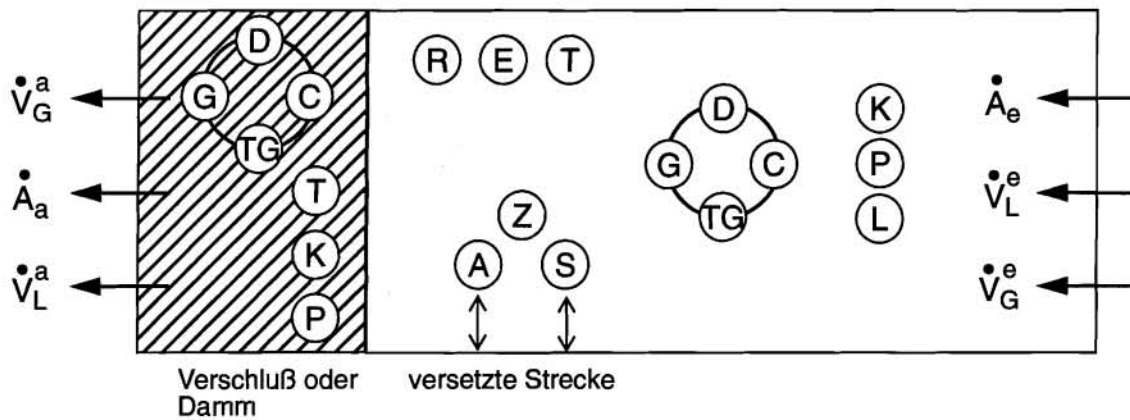


Abbildung 36: Strecke mit Verschluß, bzw. Damm und Zusatzvolumen.



- | | | | |
|---------------|--|---------------|-------------------------|
| (A) | Ausfällung durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenze | | |
| (C) | Laugenaustausch durch Konzentrationsdifferenz | | |
| (D) | Laugenaustausch durch Diffusion | | |
| (E) | Energiestrom durch α -, β - und γ -Zerfall | | |
| (G) | Laugenaustausch durch Gastransport | | |
| (K) | Konvergenz | | |
| (L) | Laugentransport | | |
| (P) | Permeabilität und Widerstand | | |
| (R) | Gasproduktion durch Radiolyse | | |
| (S) | Sorption | | |
| (T) | Temperatur | | |
| (TG) | Laugenaustausch durch Temperaturgradient | | |
| (Z) | Bilanzierung der Aktivität incl. Zerfall | | |
| \dot{A}_a | Aktivitätsausgangsstrom | \dot{A}_e | Aktivitätseingangsstrom |
| \dot{V}_L^a | Laugenausgangsstrom | \dot{V}_L^e | Laugeneingangsstrom |
| \dot{V}_G^a | Gasausgangsstrom | \dot{V}_G^e | Gaseingangsstrom |

Abbildung 37: Schematische Darstellung der in den Modellen für Verbindungsstrecken berücksichtigten physikalischen und chemischen Effekte.

4.3.1 Das Modell STDAM1 für eine Strecke mit Damm

Richtstrecken werden im allgemeinen mit einem Damm verschlossen, damit ein frühzeitiger Laugenzutritt ins Grubengebäude zumindest für eine gewisse Zeit ausgeschlossen werden kann. Ein solcher Damm ist ein komplexes Gebilde aus Beton mit abdichtenden Elementen aus Bitumen, Salzbeton oder ähnlichem Material. Vereinfachend wird angenommen, daß er trotz der Konvergenz des umgebenden Salzgestein nicht weiter kompaktiert wird und seine Abmessungen beibehält. Daher wird für einen Damm eine konstante Porosität und eine konstante Permeabilität angenommen (vgl. Kapitel 5.3.1). Porosität, Permeabilität und die Abmessungen werden als Eingangsdaten vorgegeben (siehe Kapitel 8.2). An den Damm schließt sich ein Streckenteil an, welcher mit Versatzmaterial verfüllt wird und im allgemeinen ein ebenfalls verfülltes Zusatzvolumen besitzt (siehe Kapitel 4.3). Anfangswerte des Volumens und des Querschnitts einer Strecke werden aus den Eingangsgrößen Breite, Höhe und Länge ermittelt. Die Abmessungen des Zusatzvolumens werden nicht näher spezifiziert. In den Segmentdaten wird nur der Anfangswert des Zusatzvolumens angegeben. Es wird vorausgesetzt, daß das Versatzmaterial in der Strecke und im Zusatzvolumen das gleiche ist.

Durch den Konvergenzprozeß ändern sich das Zusatzvolumen sowie Volumen und Querschnitt der versetzten Strecke. Hierbei wird jeweils die Länge der Strecke als konstant angesehen (siehe Kapitel 5.2.2). Aus der Querschnittsänderung wird die zeitliche Veränderung der Größen Breite und Höhe des versetzten Streckenteils ermittelt. Der Anfangswert des Porenvolumens in der Strecke und im Zusatzvolumen wird aus Anfangsporosität und Anfangsvolumen ermittelt.

Wie im einleitenden Kapitel 4.3 erwähnt, werden Laugenbewegungen durch Austauscheffekte sowie der dadurch bewirkte Aktivitätstransport sowohl im Versatzbereich als auch im Damm berechnet. Bei der Gasproduktion durch Radiolyse und bei der Diffusion der Radionuklide finden die Dammporosität bzw. die Porosität des Streckenversatzes Verwendung. Bei den anderen Austauscheffekten werden im Damm die Dammporosität, in der Strecke die Permeabilität des Streckenversatzes verwendet.

4.3.2 Das Modell STVER1 einer Strecke mit Verschuß

Querschläge und Beschickungsstrecken werden im Anschluß an die Verfüllung mit einem Verschuß abgedichtet. Ein solcher Verschuß besteht aus Salzbeton oder kompaktiertem Salzgrus. Er hat eine Anfangsporosität, die deutlich kleiner ist als die des Streckenversatzes. Durch die Konvergenz des umgebenden Salzgesteins wird der Verschuß im Laufe der Zeit weiter kompaktiert. Er wird für Lauge als dicht angesehen, wenn er schließlich die vorgegebene Endporosität erreicht hat (siehe Kapitel 2.3.3), die vergleichbar ist mit der des umgebenden Steinsalzes.

Der sich anschließende Streckenteil ist mit Versatzmaterial verfüllt, dessen Anfangsporosität als Eingangsgröße vorgegeben wird. Anfangswerte des Volumens und des Querschnitts einer Strecke und ihres Verschlusses werden aus den Eingangsgrößen Breite, Höhe und Länge ermittelt. Die Abmessungen des Zusatzvolumens (siehe einleitendes Kapitel 4.3) werden nicht näher

spezifiziert. In den Segmentdaten wird nur der Anfangswert des Zusatzvolumens angegeben. Es wird vorausgesetzt, daß es mit dem gleichen Versatzmaterial verfüllt ist wie die Strecke.

Durch den Konvergenzprozeß ändern sich das Zusatzvolumen sowie Volumen und Querschnitt der versetzten Strecke und des Verschlusses. Hierbei werden jeweils die Länge der Strecke und die des Verschlusses als konstant angesehen (siehe Kapitel 5.2.2). Aus der Querschnittsänderung wird die zeitliche Veränderung der Größen Breite und Höhe der Teilbereiche Verschluß und Streckenteil ermittelt (siehe Kapitel 5.2.2). Die Anfangswerte der Porenvolumina in den einzelnen Teilbereichen der Strecke werden aus den Anfangsporositäten und Anfangsvolumina ermittelt.

Wie im einleitenden Kapitel 4.3 erwähnt, werden Laugenbewegungen durch Austauscheffekte sowie der dadurch bewirkte Aktivitätstransport sowohl im Versatzbereich als auch im Verschluß berechnet. Bei der Gasproduktion durch Radiolyse und bei der Diffusion der Radionuklide finden die Verschlußporosität bzw. die Porosität des Streckenversatzes Verwendung. Bei den anderen Austauscheffekten werden im Verschluß die Verschlußpermeabilität, in der Strecke die Permeabilität des Streckenversatzes verwendet. Der Unterschied zum Modell STDAM1 besteht hierbei darin, daß Porosität und Permeabilität im Verschluß zeitlich veränderlich sind.

4.3.3 Das Modell STOVE1 für einen Streckenteil ohne Verschluß

Das Modell STOVE1 wird dazu benutzt, eine lange Richtstrecke, einen Querschlag oder eine Beschickungsstrecke feiner zu unterteilen. Dies kann erforderlich sein, wenn Teilbereiche einer Strecke unterschiedliche Temperaturen aufweisen oder das Volumen einer Strecke so groß ist, daß im Hinblick auf die Modellierung der Auffüllung mit Lauge eine feinere Diskretisierung erforderlich ist. Daneben wird eine feinere Unterteilung des Grubengebäudes und damit der Verbindungsstrecken zum Testen der Genauigkeit der Freisetzungsrechnung bezüglich der räumlichen Diskretisierung verwendet. Das Modell unterscheidet sich von den oben beschriebenen Streckenmodellen nur darin, daß der Verschluß bzw. Damm fehlt, und damit alle diesbezüglichen Effekte entfallen.

4.3.4 Das Modell STOVOK2 für einen Streckenteil ohne Verschluß mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration

Mitunter ist es sinnvoll, einen längeren versetzten Streckenabschnitt zur Berechnung des Radionuklidtransports feiner zu unterteilen, als für die Berechnung der Laugenströmung. Bei geringer Strömungsgeschwindigkeit werden die Nuklide nur sehr langsam in den Streckenversatz eindringen, die Annahme einer instantanen Durchmischung über die gesamte Strecke kann in solchen Fällen zu stark verfälschten Freisetzungsverläufen führen. Um dies zu vermeiden, könnte man eine derartige Strecke in eine Anzahl kleiner Teilstrecken zerlegen, die jeweils mit dem Modell STOVE1 zu behandeln wären. Dieses Vorgehen hätte jedoch zur Folge, daß sich einerseits der Bedienungsaufwand erhöht und daß andererseits die zeitaufwendige Druck- und Stromberech-

nung über eine erhöhte Zahl von Segmenten erfolgen würde, ohne daß dadurch eine nennenswerte Verbesserung der numerischen Ergebnisse bezüglich der Laugenströmung zu erzielen wäre. Außerdem würden die sehr kleinen Segmente aufgrund ihrer geringen Schadstoffkapazität die Zeitschrittweiten für das gesamte Grubengebäude herabsetzen und dadurch einen weiteren Rechenzeitnachteil zur Folge haben.

Das Modell STOVOK2 tritt nach außen, d. h. insbesondere bezüglich der Druck- und Stromberechnung sowie der Zeitschrittsteuerung, als einzelnes Segment in Erscheinung, führt aber intern eine Nuklidtransportrechnung durch. Die Nuklidkonzentration wird also nicht, wie in allen anderen Segmentmodellen, als räumlich konstant, sondern als ortsabhängig angesehen. Zu diesem Zweck wird das gesamte Segment intern in eine frei wählbare Zahl von Blöcken unterteilt, welche die Ortsdiskretisierung für die Transportrechnung darstellen. Erforderlichenfalls wird auch eine verfeinerte, nur für das behandelte Segment intern gültige Zeitdiskretisierung realisiert. Die ortsabhängige Transportrechnung wird unabhängig von der Durchströmungsrichtung durchgeführt. Abgesehen von der Berechnung des Nuklidtransports entspricht das Modell dem Modell STOVE1.

Das Segmentmodell STOVOK2 kann überall dort eingesetzt werden, wo ein längerer Streckenteil unter annähernd konstanten physikalischen Bedingungen (Teufenlage, Temperatur, ...) zu modellieren ist. Da es Dämme oder Verschlüsse ebensowenig berücksichtigt wie ein Zusatzvolumen, muß es gegebenenfalls mit anderen Segmentmodellen kombiniert werden, indem kleine Bereiche als eigenständige Segmente abgekoppelt werden.

4.4 Segmentmodelle für spezielle Teile des Grubengebäudes

Unter speziellen Teilen des Grubengebäudes werden im folgenden solche Segmente verstanden, die neben den in den anderen Segmenten betrachteten Effekten einen direkten Zutritt von Lauge ins Endlager erlauben. Das heißt, der Zutritt erfolgt nicht ausschließlich von einem Nachbarsegment her, sondern aus einem Laugenreservoir. Dieses kann entweder ein Laugeneinschluß in Salzgestein sein oder die praktisch unbegrenzte Laugenmenge, die vom Grundwasserleiter über dem Salzstock durch eine Wegsamkeit den Zugang ins Endlager findet. Bei dem Anhydritszenario ist diese Wegsamkeit durch den Hauptanhydrit gegeben.

4.4.1 Das Modell LEALG1 für einen Laugeneinschluß im Salz

Laugeneinschlüsse im Salz können in ihrer Größe sehr unterschiedlich sein. Es können mikroskopische Laugeneinschlüsse vorkommen, aber auch solche mit bis zu einigen hundert Kubikmetern Lauge. In Extremfällen sind Lauggenester angetroffen worden, die mehrere tausend Kubikmeter Lauge enthalten. Größe und Häufigkeit hängen von der betrachteten Formation ab.

Trotz eines Erkundungsprogrammes und unterschiedlicher zerstörungsfreier Verfahren zur Erkundung der Umgebung der aufgefahrenen Hohlräume, kann es nicht vollständig ausgeschlossen werden, daß einige Laugeneinschlüsse im Nahbereich des Endlagers unentdeckt bleiben.

Infolge der Druckentlastung des Salzgesteins durch das Auffahren der Hohlräume oder aufgrund thermomechanischer Spannungen, die von der Wärmeproduktion der Abfälle verursacht werden, kann es zur Entstehung von Wegsamkeiten zwischen den Laugeneinschlüssen und den Endlager Hohlräumen kommen.

Ein Laugeneinschluß im Salzgestein, der sich in der Nachbarschaft einer Verbindungsstrecke oder eines Einlagerungsortes befindet, wird als ein Segment des Endlagermodells betrachtet. Dieses Segment wird durch das spezielle Segmentmodell LEALG1 beschrieben.

Das mit Lauge gefüllte Volumen (Laugennest) wird als ein fiktives poröses Medium angesehen, dessen Abmessungen (Breite, Höhe und Länge) nicht näher spezifiziert werden. Die ebenfalls nicht näher spezifizierte Verbindung zwischen dem Laugeneinschluß und einem anderen Segment des Grubengebäudes kann zu einem in den Segmentdaten angegebenen Zeitpunkt für die eingeschlossene Lauge durchlässig werden. Hierbei wird der Strömungswiderstand der Verbindung vereinfachend so modelliert, daß ein fester Leitwert R^{-1} in den Segmentdaten angegeben wird.

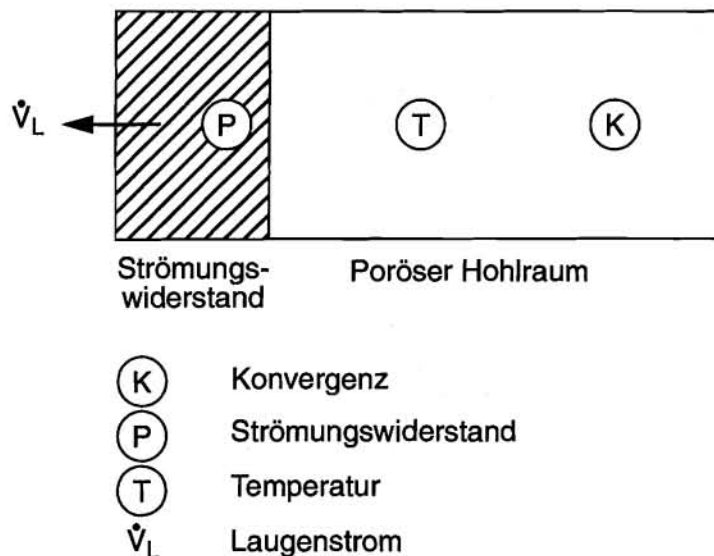


Abbildung 38: Modellierung eines Laugennestes und berücksichtigte Effekte.

Vor Öffnung der Verbindung ist der Laugendruck im Einschluß gleich dem lokalen, der Teufe entsprechenden Gebirgsdruck, so daß das Volumen seine Größe beibehält. Nach Öffnung der Verbindung fällt der Laugendruck im Einschluß momentan auf den durch den Strömungswiderstand und den Außendruck im Nachbarsegment bestimmten Wert ab (siehe Kapitel 5.4.1). Wegen der jetzt einsetzenden, durch die Gebirgskonvergenz hervorgerufenen Verkleinerung des Einschlußvolumens wird die enthaltene Lauge ausgepreßt und strömt in ein angeschlossenes Einlagerungs- oder Streckensegment. Abbildung 38 zeigt einen schematischen Überblick der modellierten Effekte für einen Laugeneinschluß.

Es wird angenommen, daß kontaminierte Lauge nicht durch Austauscheffekte gegen die kontinuierlich ausgepreßte Lauge in das Laugennest vordringen kann, d.h. in diesem Segment sind keine Nuklide vorhanden. Außerdem werden sich Dichteänderungen durch Auflösung von Zement nicht in das Laugennest ausbreiten. Daher entfällt die Behandlung aller Effekte, welche die Anwesenheit von Nukliden oder Matrixmaterial voraussetzen.

4.4.2 Das Modell STMIF1 für das Mittelfeld eines Grubengebäudes

Das Segmentmodell STMIF1 wurde ursprünglich für das Mittelfeld eines Grubengebäudes entwickelt. Seine wesentliche Eigenschaft ist jedoch, daß es die Verbindung zum Deckgebirge darstellt. Es beschreibt daher sowohl einen Laugenzutrittsort als auch zugleich das Segment, aus dem die Radionuklidfreisetzung ins Deckgebirge stattfindet. In der Baumstruktur des Segment-systems (siehe Kapitel 2.2) stellt es das Wurzelsegment dar.

Das Segmentmodell STMIF1 kann gegebenenfalls durch geeignete Wahl der geometrischen Eingangsparameter auch für ein anderes Streckenteil als Laugenzutrittsort und Ort der Radionuklidfreisetzung verwendet werden. In der folgenden Beschreibung wird jedoch immer von einem Modell für das Mittelfeld gesprochen.

Das Mittelfeld eines Grubengebäudes wird im wesentlichen wie eine Verbindungsstrecke mit einem Damm modelliert, das außerdem ein Zusatzvolumen besitzt. Der Damm riegelt das Mittelfeld gegen den Laugenzutrittsort ab (siehe Abbildung 39). Mit dem Zusatzvolumen werden alle Hohlräume modelliert, welche die ehemalige Infrastruktur des Grubengebäudes repräsentieren.

Frühere standortunabhängige Planungen und geologische Verhältnisse am Standort Gorleben ließen die Möglichkeit zu, daß der Hauptanhydrit zwischen dem Schacht und dem Infrastrukturbereich angefahren wird. Durch die Einlagerung wärmeproduzierender Abfälle treten thermomechanische Spannungen auf, die sich im Laufe der Zeit durch das Salzgestein ausbreiten. Dane-

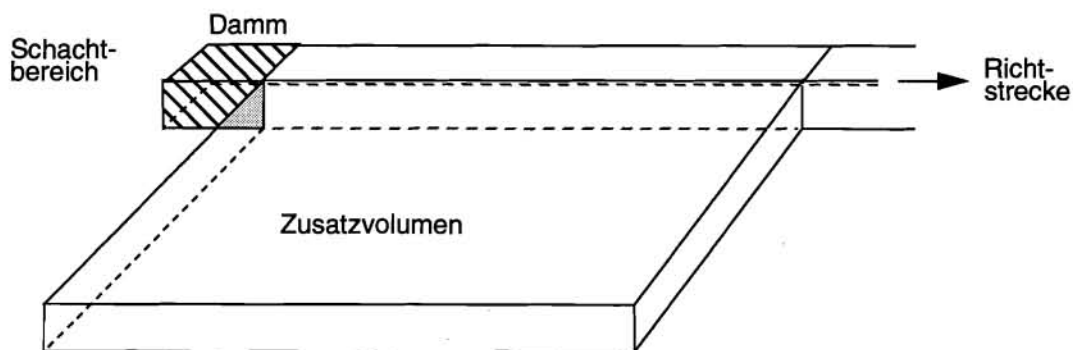


Abbildung 39: Schematische Darstellung des Mittelfeldes eines Grubengebäudes, wobei die gesamte Infrastruktur, z.B. Werkstätten, Wendelstrecken usw., durch ein Zusatzvolumen repräsentiert wird.

ben können durch das Kriechen des Salzgesteins in die Resthohlräume des Endlagers mechanische Spannungen entstehen.

Es kann daher nicht ausgeschlossen werden, daß sich diese Spannungen nach einer gewissen Zeit bis in den Bereich des Anhydrits ausbreiten, so daß hier durch das Aufreißen verheilte Klüfte Wegsamkeiten für Grundwasser entstehen. Reichen der Hauptanhydrit und die entstehenden Wegsamkeiten durchgehend vom Salzspiegel bis in den Bereich des Endlagers, so kann hierdurch eine Wegsamkeit entstehen, durch die Wässer aus dem Deckgebirge in die Resthohlräume des Endlagers gelangen.

Für die Modellierung des Mittelfeldes als Laugenzutrittsort wird daher angenommen, daß der Hauptanhydrit zwischen dem Schachtbereich und dem Infrastrukturbereich angetroffen wird. Um das Grubengebäude vor einem Wassereinbruch durch diese Wegsamkeit zu schützen, wird das Mittelfeld mit eventuell mehreren Dämmen gegen den Schachtbereich abriegelt. Diese parallelen Dämme werden im Modell wie ein Damm mit entsprechend größerer Länge behandelt, daher wird im folgenden stets nur von einem Damm gesprochen.

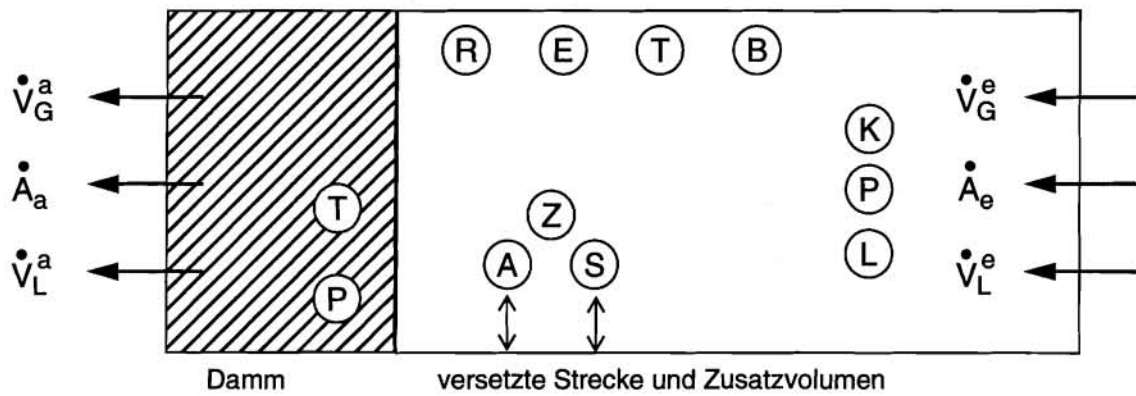
Zur Beschreibung eines Laugenzutritts wird die Wegsamkeit zu einem in den Segmentdaten angegebenen Zeitpunkt (Beginn des Laugenzutritts im Störfall) für Lauge durchlässig. Vor dem das Mittelfeld abriegelnden Damm baut sich ein Druck auf, der dem hydrostatischen Druck in der Tiefe des Endlagers entspricht.

Für eine gewisse Zeit wird der Damm diesem Laugendruck widerstehen können (minimale Dammstandzeit). Für eine Langzeitsicherheitsanalyse kann jedoch eine unbegrenzte Standzeit nicht vorausgesetzt werden. Daher wird angenommen, daß ein Damm nach einer gewissen Zeit für Lauge durchlässig wird, aber eine begrenzte Permeabilität besitzt, also auch für lange Zeiten der Laugenbewegung einen Widerstand entgegensetzt. Der Zutrittszeitpunkt der Lauge ins Mittelfeld muß so gewählt werden, daß auch die Zeit, die ein Damm dem sich aufbauenden Laugendruck widerstehen kann, mit berücksichtigt ist. Vereinfachend wird angenommen, daß die Permeabilität des Dammes zeitlich konstant ist. Der Strömungswiderstand der Wegsamkeit wird in der Modellierung gegenüber dem des Dammes vernachlässigt.

Das Vollaufen des Mittelfeldes mit Lauge und der damit verbundene Druckaufbau, die Konvergenz der Hohlräume und das damit verbundene Auspressen der Lauge wird im Segmentmodell STMIF1 wie in den anderen Modellen für Strecken und Einlagerungsorte behandelt (siehe Kapitel 5.4).

Die durch das Zusatzvolumen repräsentierten Räume liegen im allgemeinen nicht auf direktem Weg zwischen den Einlagerungsorten und der Zutrittswegsamkeit. Der eigentlich durchströmte Bereich des Mittelfeldes wird als Strecke modelliert, deren Breite, Höhe und Länge in den Segmentdaten angegeben wird. Hinzu kommt als Eingabewert die Anfangsgröße des Zusatzvolumens, wobei die Abmessungen der ehemaligen Räume mit der Infrastruktur nicht näher spezifiziert werden.

Die Nuklidfreisetzung aus dem Endlager beginnt frühestens, wenn sich der Laugenstrom zwischen Anhydrit und Mittelfeld umdreht. Dieser Zeitpunkt kennzeichnet den Beginn der Freisetzung und ist nicht notwendigerweise identisch mit dem des Vollaufens des Endlagers als



- (A) Ausfällung durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenze
 - (B) Bilanzierung des Matrixmaterials
 - (E) Energiestrom durch α -, β - und γ -Zerfall
 - (K) Konvergenz
 - (L) Laugentransport
 - (P) Permeabilität und Widerstand
 - (R) Gasproduktion durch Radiolyse
 - (S) Sorption
 - (T) Temperatur
 - (Z) Bilanzierung der Aktivität incl. Zerfall
- | | |
|-------------------------------------|-------------------------------------|
| \dot{A}_a Aktivitätsausgangsstrom | \dot{A}_e Aktivitätseingangsstrom |
| \dot{V}_L^a Laugenausgangsstrom | \dot{V}_L^e Laugeneingangsstrom |
| \dot{V}_G^a Gasausgangsstrom | \dot{V}_G^e Gaseingangsstrom |

Abbildung 40: Schematischer Überblick der im Mittelfeld modellierten physikalischen und chemischen Effekte.

Ganzes. Je nach dem Verhältnis der Widerstände der einzelnen Dämme und Verschlüsse kann kontaminierte Lauge aus dem Endlager herausgepreßt werden, während sich zugleich noch Bereiche des Endlagers in der Zulaufphase befinden.

Das Mittelfeld wird beim betrachteten Szenario im allgemeinen zunächst mit unkontaminierter Lauge gefüllt, so daß auch das Zusatzvolumen anfänglich mit nicht kontaminierter Lauge gefüllt ist. Da beim Auspressen kontaminierter Lauge aus den inneren Bereichen des Grubengebäudes das Zusatzvolumen nicht direkt durchströmt wird, ist es für Nuklide nur durch Austauscheffekte und Diffusion erreichbar. Beim Auspressen kontaminierter Lauge aus dem Endlager ins Deckgebirge wirkt das Zusatzvolumen als Reservoir mit unkontaminierter Lauge, was zu einer Verdünnung der freigesetzten kontaminierten Lauge führt.

Wenn jedoch kontaminierte Lauge, die z.B. aus Laugeneinschlüssen in Einlagerungssegmente gepreßt wurde (siehe Kapitel 4.4.1), das Mittelfeld erreicht, bevor dieses vollständig geflutet ist, so wird auch das Zusatzvolumen mit kontaminierter Lauge gefüllt. Zum anderen kann, wie oben beschrieben, kontaminierte Lauge durch das Mittelfeld in einen anderen, noch nicht vollständig gefüllten Flügel des Grubengebäudes transportiert werden. In beiden Fällen hat die Lauge im Zusatzvolumen keinen Verdünnungseffekt auf die aus dem Endlager ausgepreßte, kontaminierte Lauge. Zur Vereinfachung des Modells wird angenommen, daß das gesamte Volumen des Mittelfeldes einschließlich des Zusatzvolumens in jedem Fall in der Auspreßphase kontaminiert ist.

Abbildung 40 zeigt einen schematischen Überblick der modellierten Effekte für das Mittelfeld. Austauscheffekte, wie sie in den anderen Segmentmodellen enthalten sind, können hier aus zwei Gründen vernachlässigt werden. Zum einen erreicht an der Stelle des Laugenaustritts der erzwungene Laugenstrom sein Maximum und dominiert somit eindeutig gegenüber den Laugenaustauschströmen. Zum anderen werden sich bei einem Weitertransport über einen Hauptanhydrit dort recht schnell die Aktivitätskonzentrationen des Austrittsortes einstellen und somit Austauscheffekte nicht zu einem Aktivitätstransport führen.

4.5 Segmentmodelle für spezielle Szenarien

Die im folgenden beschriebenen Segmentmodelle unterscheiden sich von den bisherigen Modellen dadurch, daß sie entweder nicht in Kombination mit anderen Segmentmodellen verwendbar sind, oder daß sie wesentliche Effekte der Modellierung von Grubengebäuden (Konvergenz, Laugentransport, usw.) nicht oder nur in vereinfachter Form berücksichtigen. Der formale Aufbau dieser speziellen Segmentmodelle entspricht jedoch den übrigen Segmentmodellen, insbesondere können außer beim Subrosionsmodell alle Mobilisierungsmodelle aus Kapitel 3 als Unterprogramme für die Mobilisierung der Aktivitätsinventare verwendet werden.

In Tabelle 5 sind alle Segmentmodelle für spezielle Szenarien zusammengefaßt.

Das Modell VQUELLE2 behandelt ein Grubengebäude in einer anderen Formation als Steinsalz und vernachlässigt die Laugenbewegung durch Konvergenz. Als Antriebsmechanismus für den Laugentransport und eine damit verbundene Radionuklidfreisetzung wird eine Durchströmung des Grubengebäudes mit Grundwasser angenommen.

Segmentmodell	Beschreibung
VQUELLE2	Modell eines Grubengebäudes mit eingelagerten radioaktiven Abfällen, das von einem konstanten Lösungsvolumenstrom durchspült wird
CABOT1	Modell des Sumpfes einer ausgesolten Speicherkaverne, in dem Behälter mit radioaktivem Abfall aus einem bei der Aussolung getroffenen Endlagern enthalten sein können
CATOP1	Modell für das Speichervolumen der ausgesolten Kaverne
SUBROS	Segmentmodell zur Beschreibung eines Subrosionsszenarios, bei dem durch Zusammenwirken von Diapirismus und Subrosion ein Endlager für radioaktive Abfälle in einem Salzstock dem Tiefen Grundwasserstrom ausgesetzt wird

Tabelle 5: Segmentmodelle für spezielle Szenarien.

Die beiden Modelle CABOT1 und CATOP1 beschreiben eine durch Aussohlung erstellte Speicherkaverne im Steinsalz, die durch Zufall ein ehemaliges Endlager für radioaktive Abfälle getroffen hat. Das Modell CABOT1 beschreibt hierbei den Kavernensumpf, in dem die bei der Aussohlung freigelegten Kanister mit radioaktivem Abfall enthalten sind. Das Modell CATOP1 beschreibt den Speicherraum der Kaverne. Nach Aufgabe der Kaverne für Speicherzwecke wird dieses Volumen geflutet und mobilisierte Radionuklide können durch Konvergenzprozesse aus der Kaverne freigesetzt werden.

Im Segmentmodell SUBROS wird ein Subrosionsszenarios modelliert. Es wird angenommen, daß durch Zusammenwirken von Diapirismus und Subrosion das Salzgestein über einem Endlager für radioaktive Abfälle abgetragen wird und schließlich das Endlager freigelegt wird, so daß der tiefe Grundwasserstrom Radionuklide durch das Deckgebirge bis eventuell zur Biosphäre transportieren kann.

4.5.1 Das Modell VQUELLE2 für ein durchströmtes Grubengebäude

Im Segmentmodell VQUELLE2 wird der Aktivitätsstrom aus einem Modellvolumen berechnet, das von einem konstanten Lösungsvolumenstrom durchflossen wird. Die Summen der aktuellen Mobilisierungsraten aus den Abfallgebinden bilden den Aktivitätseingangsstrom in das Modellvolumen. Unter Berücksichtigung der Sorption und der Ausfällung von Nukliden (siehe Kapitel 5.9) wird die aktuelle Aktivitätskonzentration in der Lösung berechnet. Die gelöste Aktivität wird konvektiv mit dem durchströmenden Grundwasser abtransportiert. Der Aktivitätsausgangsstrom für das i -te Nuklid ergibt sich als Produkt des Lösungsvolumenstroms mit der aktuellen Aktivitätskonzentration in Lösung $A_i(t)/V_L$ zu

$$\dot{A}_{a,i}(t) = \frac{\dot{V}_L A_i(t)}{V_L} \quad (64)$$

Das Segmentmodell beschreibt einen Hohlraum mit konstantem Volumen, d.h. eine Konvergenz des umgebenden Gesteins wird nicht betrachtet. Die Zeitdauer der Auffüllung des Hohlraumes mit Grundwasser wird vernachlässigt, so daß die Resthohlräume des Modellvolumens mit Beginn der Nachbetriebsphase als wassergesättigt modelliert werden. Das Modellvolumen hat keine Verschlüsse. Außerdem werden keine Austauscheffekte berücksichtigt.

Es wird davon ausgegangen, daß jedes Abfallgebinde im Mittel von der gleichen Lösungsmenge angeströmt wird. Dies bedeutet, daß sich zu jedem Zeitpunkt eine räumlich konstante Nuklidkonzentration in dem Modellvolumen einstellt und daß zeitweilige lokale Konzentrationunterschiede nicht betrachtet werden.

In der Abbildung 41 sind die im Modellvolumen berücksichtigten Effekte schematisch dargestellt.

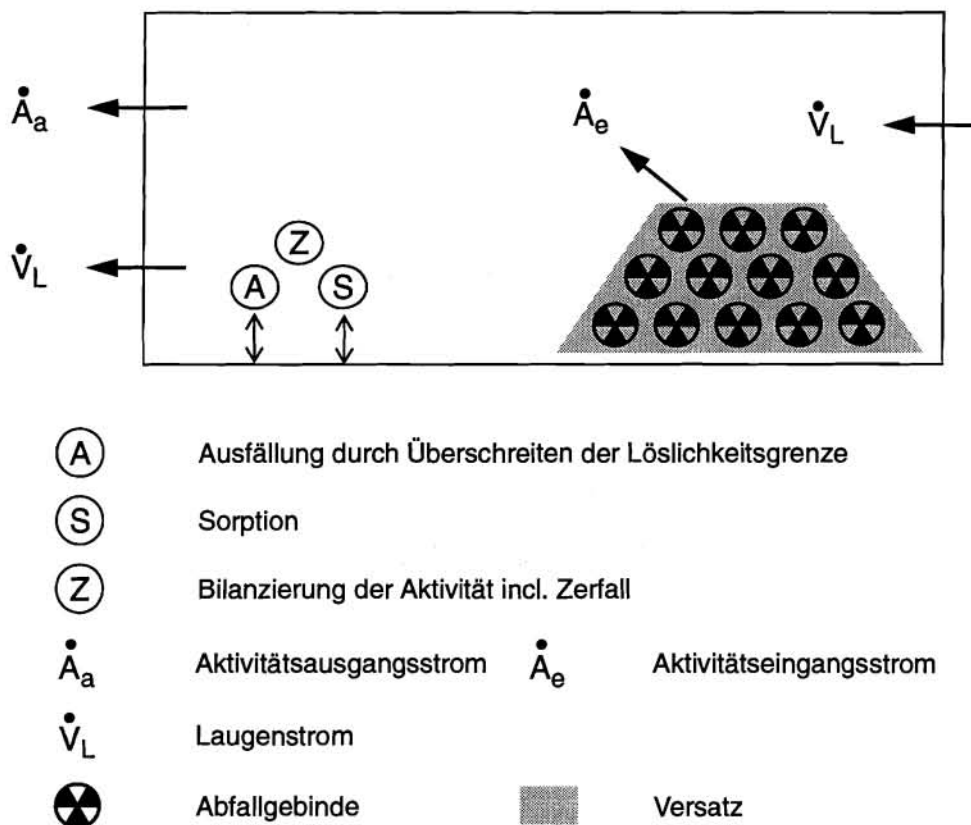


Abbildung 41: Schematische Darstellung des Modellvolumens und der modellierten Effekte.

4.5.2 Die Segmentmodelle CABOT1 und CATOP1 für eine Speicherkaverne

In einem speziellen Szenario wird angenommen, daß in Zukunft Kavernen in Salzstöcken als Lagerungsstätten für Erdöl, Gas o.ä. verwendet werden. Beim Aussolen dieser Kavernen ist es möglich, daß ein ehemaliges Endlager für radioaktive Abfälle getroffen wird (siehe Abbildung 42) und daß nach der Aufgabe der Lagerkaverne radioaktive Substanzen in das Deckgebirge freigesetzt werden können.

Zur Modellierung dieses Szenarios werden zwei verschiedene Segmente verwendet:

- ein Speicherraum, der mit dem Modell CATOP1 beschrieben wird, und
- ein Kavernensumpf, für den das Modell CABOT1 verwendet wird.

In Abbildung 43 ist die Aufteilung der Speicherkaverne in die beiden Segmente "Speicherraum" und "Sumpf" dargestellt. Außerdem ist schematisch angegeben, welche Effekte in den beiden Segmenten jeweils berücksichtigt werden. Zur Vereinfachung wird die gesamte Kaverne als aufrecht stehender Zylinder behandelt. Während der Betriebszeit der Kaverne ist der Speicherraum

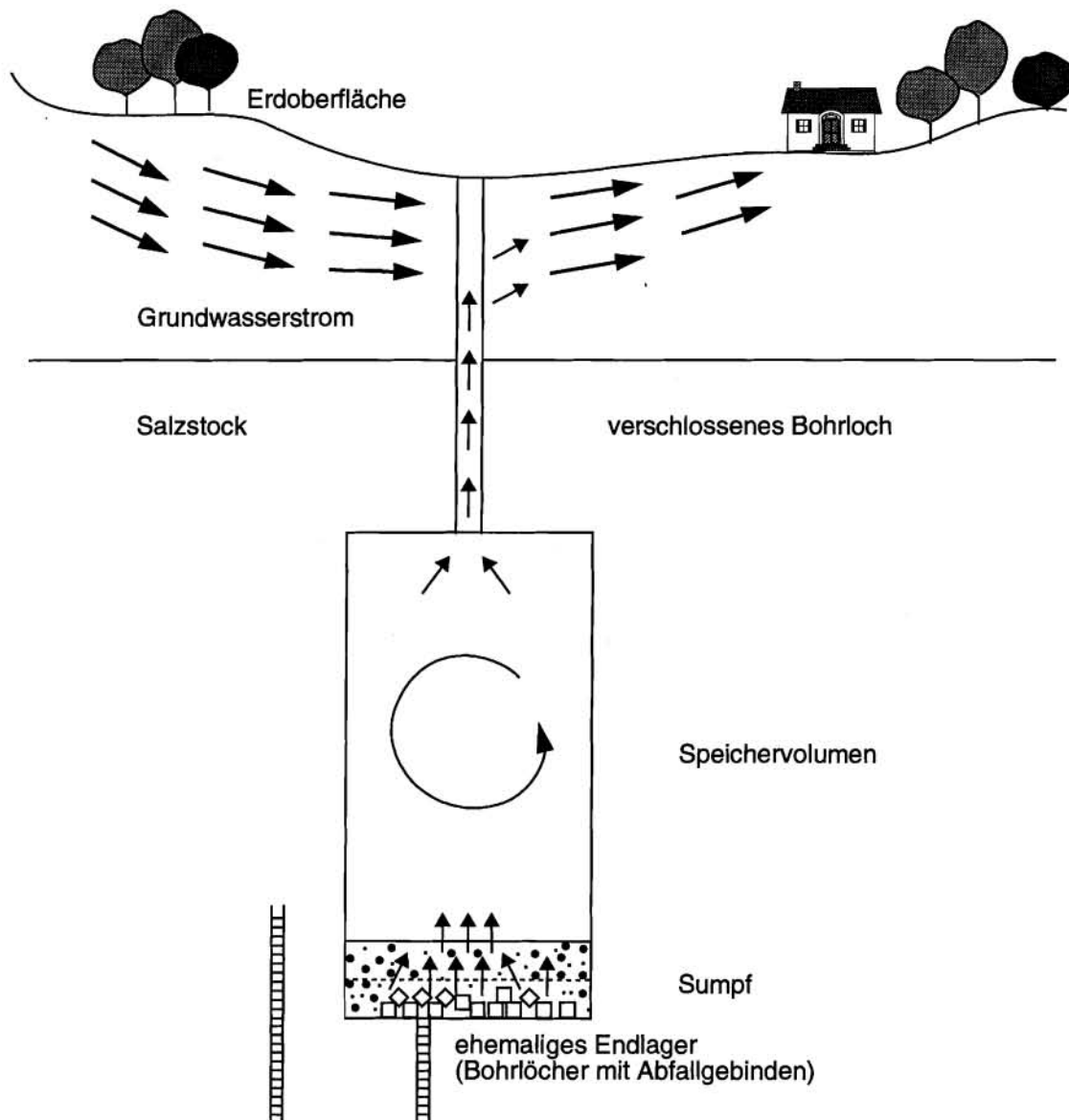


Abbildung 42: Darstellung des Kavernenszenarios. Eine für Speicherzwecke gespülte Kaverne trifft auf ein ehemaliges Endlager radioaktiver Abfälle; die Abfallgebinde fallen in den Sumpf der Kaverne.

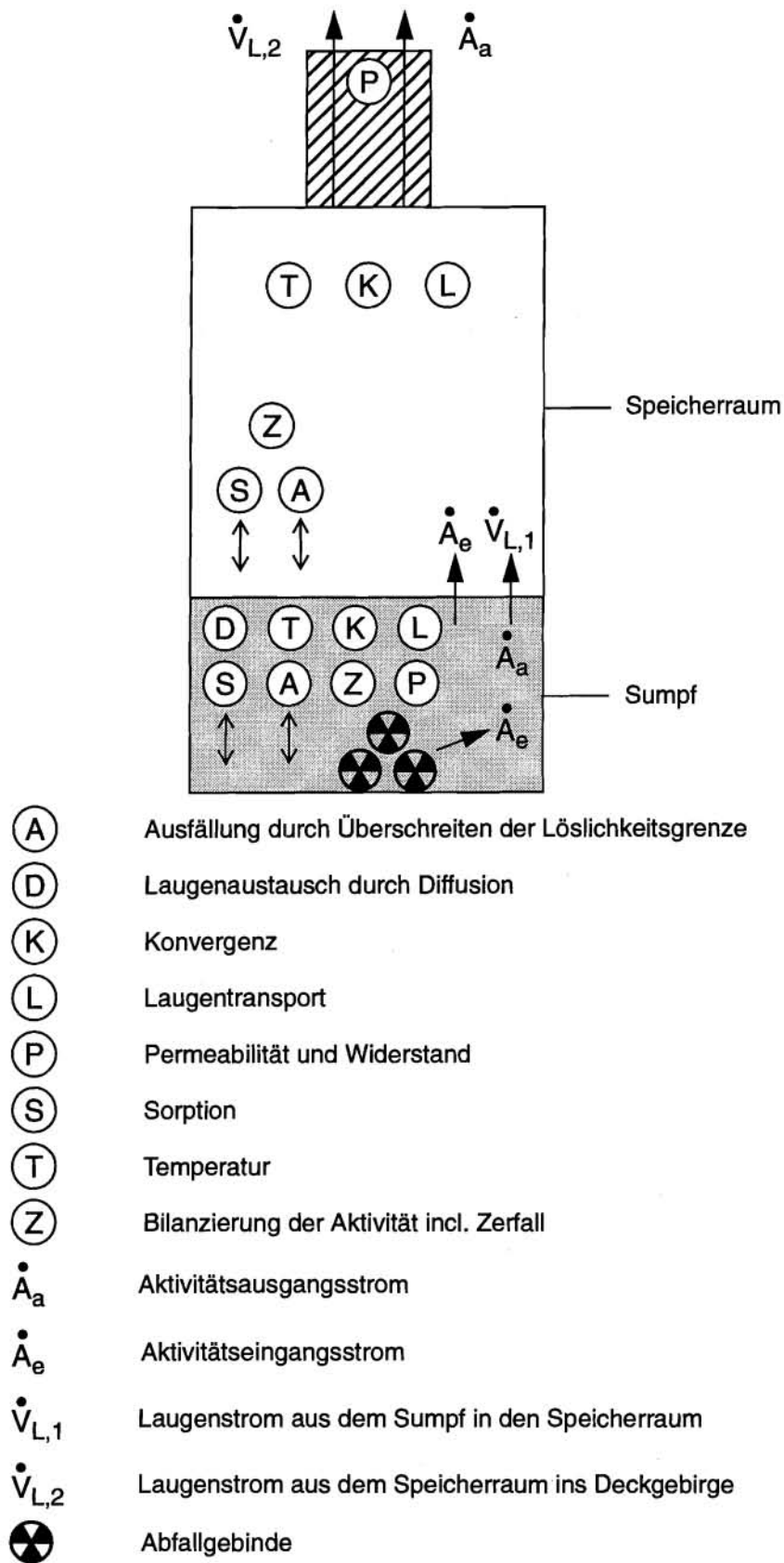


Abbildung 43: Schematische Darstellung der beiden Segmentmodelle für den Speicherraum und den Sumpf und der jeweils berücksichtigten Effekte.

mit einem anderen Medium als Wasser gefüllt. Für diesen Zeitraum wird nur die Konvergenz des Hohlraums berechnet, wobei vorausgesetzt wird, daß der Druck in der nicht verschlossenen Kaverne nur durch den hydrostatischen Druck des Speichermediums gegeben ist. Nach der Aufgabe des Verwendungszweckes der Kaverne wird diese mit Wasser geflutet und verschlossen. Im Modell wird angenommen, daß der Speicherraum instantan mit Wasser vollläuft.

Der Kavernensumpf ist mit den unlöslichen Bestandteilen des Salzgesteins gefüllt und enthält die bei Aussolung der Kaverne freigelegten radioaktiven Abfälle. Außerdem ist der Kavernensumpf von Beginn des Szenarios mit Lauge gefüllt, die noch aus der Aussolung des Kavernenhohlraumes herrührt. Dadurch werden bereits während der Betriebszeit der Kaverne Nuklide aus dem im Sumpf befindlichen Abfall mobilisiert. Sie verbleiben aber in der Lauge des Sumpfes. Der Kavernensumpf wird als Segment ohne Verschuß modelliert und kann bei Bedarf zur feineren Abbildung 44 Modellierung in mehrere Segmente zerlegt werden, wobei jedes mit dem Modell CABOT1 beschrieben wird.

Die Grenzfläche zwischen Speichermedium und Lauge wird durch die Konvergenz des Kavernensumpfes um einen gewissen Betrag in den Speicherraum hinein verschoben. Es wird jedoch angenommen, daß es zu keiner Durchmischung von Lauge und Speichermedium kommt. Der Transport der Nuklide aus dem Sumpf in den Speicherraum erfolgt über Advektion mit der ausgepreßten Lauge und durch Diffusion. Aus dem vollständig mit Lauge gefüllten Speicherraum kann bei Erreichen eines bestimmten Laugendruckes die jetzt kontaminierte Lauge durch Gebirgskonvergenz in das Deckgebirge freigesetzt werden.

Der Verschuß des Speicherraumes wird anders als in den bisherigen Segmentmodellen behandelt. Durch eine Begrenzung des Laugendruckes in der Kaverne auf einen festen Wert (siehe Kapitel 5.3.3) wird simuliert, daß sich der Verschuß beim Überschreiten eines bestimmten Maximaldruckes öffnet, ansonsten aber dicht ist. Hierdurch stellt sich ein Gleichgewicht zwischen Konvergenzprozessen im Speicherraum und Öffnungsprozessen des Verschlusses durch Überdruck der Lauge ein.

Für den hydrostatischen und den petrostatischen Druck in einer Kaverne sind Mittelwerte anzusetzen, die sich aus den geometrischen Abmessungen und der Lage der Kaverne innerhalb des Salzstockes ergeben. Es ist empfehlenswert, als Bezugspunkt für diese Werte die Teufe des ehemaligen Endlagers zu verwenden, da für dieses Niveau die meisten Parameter bekannt sind.

4.5.3 Das Modell SUBROS für ein Subrosionsszenario

Das Modell SUBROS für das Subrosionsszenario ist eine Kombination aus einem Nahbereichsmodell und einem Transportmodell im Deckgebirge. Als Ausgangsgröße aus dem Modell wird direkt die Nuklidkonzentration an einer Wasserentnahmestelle berechnet. Dadurch schließt sich an eine Rechnung mit dem Modell SUBROS direkt eine Rechnung mit dem Modul EXPOS für die Dosisbelastung an.

Unter Subrosion wird die unter der Erdoberfläche stattfindende Auflösung von Steinsalzen durch Grundwasser oder ungesättigte Lösungen verstanden. Diapirismus bezeichnet die Durchdrin-

gung der überlagernden Schichten durch Steinsalz infolge seiner Plastizität. Im Subrosionsszenario wird vorausgesetzt, daß sich Diapirismus und Subrosion das Gleichgewicht halten. Daher wird zunächst vereinfachend angenommen, daß trotz der geologisch langen Zeiträume, während derer sich die Subrosion abspielt, keine wesentliche Änderung des Deckgebirges eintritt, wodurch die Grundwasserbewegung entscheidend verändert würde. Außerdem wird eine konstante Subrosionsrate angenommen, mit welcher der Salzstock durch Grundwasser abgetragen wird.

Es ist geplant, ein Endlager im Salzstock einige hundert Meter unterhalb des Salzspiegels einzurichten. Dadurch vergeht ein beträchtlicher Zeitraum, bis durch die Ablösung der oberen Salzschichten der Endlagerbereich erreicht wird. Dieser Zeitraum bis zum Beginn der Freisetzung von Radionukliden durch weitere Subrosion kann im Segmentmodell SUBROS variiert werden. Er liegt in der Größenordnung von einigen Millionen Jahren. Demgegenüber sind die Transportzeiten der Radionuklide durch das Deckgebirge um Größenordnungen kleiner und damit vernachlässigbar.

Hat die Abtragung des Salzes den Endlagerbereich erreicht, so wird angenommen, daß die Radionuklide proportional mit der Salzabtragung freigesetzt werden. Es wird also eine gleichförmige Verteilung aller eingelagerten Nuklide und damit eine konstante Nuklidkonzentration über den Endlagerbereich angenommen.

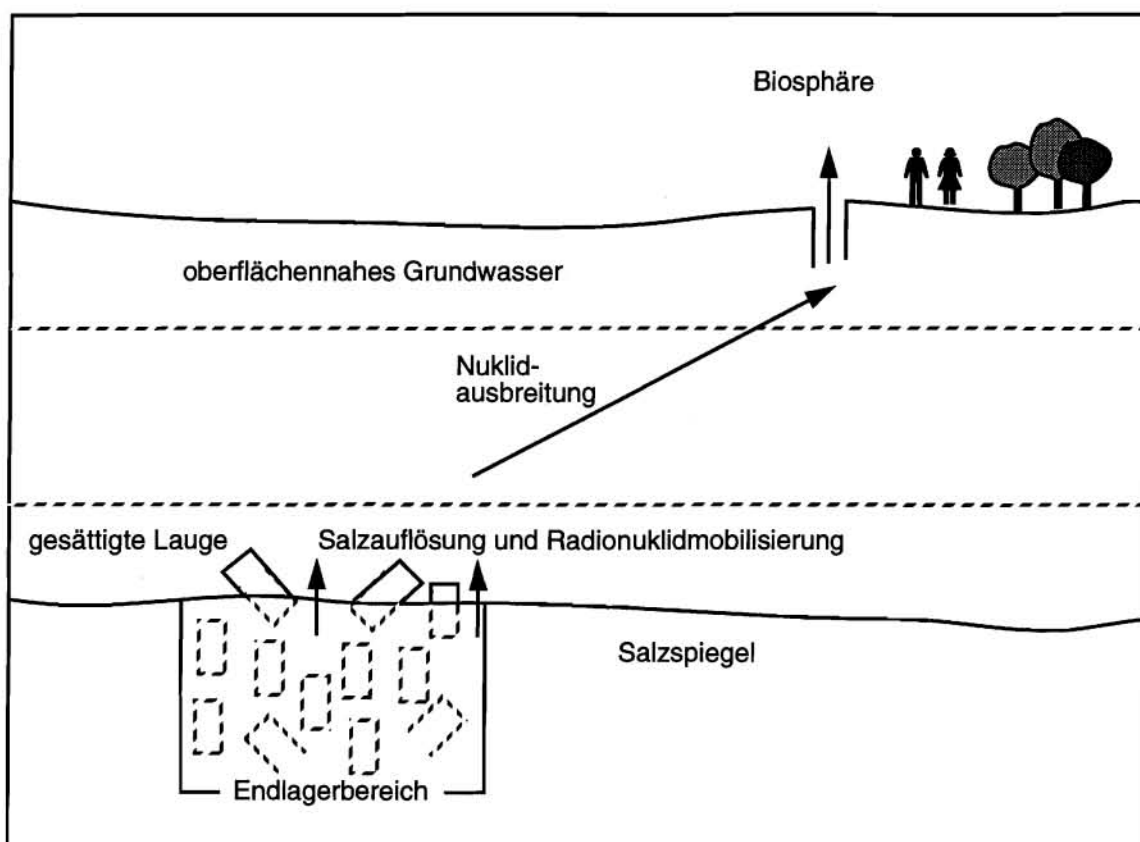


Abbildung 44: Schematische Darstellung des Subrosionsszenarios.

In der Abbildung 44 ist das Subrosionsszenarios und die Nuklidausbreitung durch das Deckgebirge schematisch dargestellt. Ist H die Höhe des Salzstockes über dem Endlagerbereich und s die Subrosionsrate, so ist nach der Zeit t_f das Salz über dem Endlager abgetragen und die Freisetzung von Nukliden beginnt,

$$t_f = \frac{H}{s}. \quad (65)$$

Der Bezugspunkt für die Zeitrechnung ($t = 0$ Jahre) ist der Zeitpunkt der Einlagerung der radioaktiven Abfälle. In dem sehr langen Zeitraum t_f bis zum Beginn der Freisetzung ist das Inventar entsprechend dem radioaktiven Zerfall abgeklungen. Daher genügt es, vom ursprünglichen Inventar nur die langlebigen Nuklide und die Tochternuklide in den Zerfallsreihen zu berücksichtigen.

Der Einlagerungsbereich mit dem radioaktiven Abfall wird durch eine Höhe H_E charakterisiert. Die Zeit bis zum Abtrag dieses Bereiches durch Subrosion ist

$$t_s = \frac{H_E}{s}. \quad (66)$$

Es wird angenommen, daß die Zeit t_s zum Abtrag des Endlagerbereichs groß gegenüber der Laufzeit $t_{L,i}$ der Radionuklide im Grundwasser ist,

$$t_s > t_{L,i} = t_L R_{f,i}, \quad (67)$$

wobei t_L die Laufzeit des Grundwassers im Deckgebirge und $R_{f,i}$ der Retardationsfaktor des i-ten Nuklids sind (siehe Kapitel 7).

Unter diesen Voraussetzungen ist die Verdünnung durch longitudinale Dispersion vernachlässigbar, so daß nur Verdünnungseffekte durch transversale Dispersion und durch Zufluß von unkontaminierten Frischwässern auftreten können.

In einiger Entfernung vom Grubengebäude ist eine homogene Nuklidverteilung aufgrund der Diffusion und Dispersion anzunehmen. Ferner stehen die Nuklidkonzentrationen in einem festen Verhältnis zur Salzkonzentration des Grundwassers, da eine gleichmäßige Verteilung des radioaktiven Inventars und damit eine kongruente Vermischung mit dem Salz im Einlagerungsfeld angenommen wurde. Die spezifische Aktivität $a_i(t_f)$ pro Kilogramm Salz zur Zeit der Freisetzung ergibt sich somit zu

$$a_i(t_f) = \frac{A_i(t_f)}{m_S}, \quad (68)$$

wobei m_S die Masse des Salzstocks im Bereich des ehemaligen Endlagers ist. Diese Salzmasse wird aus dem Volumen des Einlagerungsfeldes und der Dichte des Salzgesteins berechnet.

Die Verdünnung der Nuklidkonzentrationen im Deckgebirge erfolgt entsprechend der Verdünnung der gesättigten Salzlauge während des Transportes im Grundwasser zwischen dem Salzstock und dem Wasserentnahmeort. Es wird angenommen, daß das entnommene Wasser Trinkwasserqualität hat und auch zur Bewässerung der Felder und für die Fischwirtschaft benutzt wird.

Bei Vernachlässigung des radioaktiven Zerfalls während des Transportes der Nuklide durch das Deckgebirge ergibt sich die Radionuklidkonzentration $c_i(t_f)$ am Wasserentnahmeort für jedes Nuklid i aus dem Produkt von spezifischem Inventar $a_i(t_f)$ mit der Salzkonzentration im Trinkwasser c_S

$$c_i(t_f) = a_i(t_f) c_S \quad (69)$$

Die Dosisbelastungen werden wie bei den anderen Szenarien mit Hilfe des Moduls EXPOS berechnet. Übergabegröße an das Modul EXPOS ist die in Gleichung 69 berechnete Radionuklidkonzentration am Wasserentnahmeort.

5 Modellierung der physikalischen und chemischen Effekte

Innerhalb des Moduls REPOS wird im Rahmen einer Konsequenzanalyse für ein vorgegebenes Szenario die Freisetzung von Radionukliden aus einem Endlager berechnet. Die Rechnung wird orts- und zeitdiskret durchgeführt. Für die Ortsdiskretisierung wird das Endlager in Segmente unterteilt, so daß die Variablen in Teilbereichen (Verschluß und versetzter Bereich) eines Segments als räumlich konstant bzw. als für den Teilbereich repräsentativ angesehen werden können. Nach einem Eindringen von Lauge in Einlagerungsorte und der Mobilisierung von Nukliden aus den Abfallgebänden erfolgt der Transport der Nuklide einerseits durch Diffusion, andererseits mit der Lauge durch Advektion und Konvektion von den Abfallgebänden durch die verschiedenen Segmente in Richtung Geosphäre.

Die Verknüpfung der Segmente und die Beschreibung der Segmentmodelle sind in den Kapiteln 2 und 4 behandelt worden. Im vorliegenden Kapitel werden die physikalischen und chemischen Effekte beschrieben, die für die Vorgänge in den Segmenten und insbesondere für den Transport der Radionuklide wichtig sind.

Die Berechnung der einzelnen Effekte wird in jeweils einem separaten Unterprogramm durchgeführt. Diese Unterprogramme werden mit Ausnahme der für die Laugendruck- und Laugenstromberechnung von den Segmentmodellen aufgerufen. Laugendrucke und Laugenströme werden für alle Segmente zugleich außerhalb der Segmentmodelle berechnet. Die folgenden Effektmodelle stehen zur Verfügung:

- Temperatur und Temperaturgradienten im Grubengebäude,
- Konvergenz des Salzgesteines,
- Permeabilität und Widerstand von Verschlüssen, Dämmen und Versatz,
- Laugendruck und Laugenströme,
- Gasproduktion,
- Austausch von Lauge und Bilanzierung von gelösten Stoffen - Nuklidtransport,
- Nuklidtransport in Segmenten mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration.
- Ausfällung und Sorption,
- Dispersion,
- Radioaktiver Zerfall und Nuklidbilanzierung.

Für ein Endlager mit mehrsöhliger Einlagerung ist es nützlich ein Referenzniveau zu definieren, das sich in der Teufe x_r unter der Oberfläche befindet. Die Referenzteufe x_r wird so festgelegt, daß alle standortspezifischen Daten für diese Teufe angegeben werden, z.B. der Gebirgsdruck p_G , die Gebirgstemperatur T_G sowie die mittlere Dichte des Salzgesteins, die mittlere Dichte der Lauge usw.

Die unterschiedliche Teufe, in der sich die einzelnen Segmente befinden können, wird durch die Angabe des vertikalen Abstandes jedes Segments vom Referenzniveau berücksichtigt. Die Eingangswerte der physikalischen Parameter für die Effektprogramme, z.B. die Gebirgstemperatur, der Gebirgsdruck, der hydrostatische Druck der im Störfall eindringenden Lauge und die Referenzkonvergenzrate (siehe Kapitel 5.2.1), werden für dieses Referenzniveau angegeben.

Die lokalen Werte dieser Parameter werden unter Verwendung des segmentspezifischen Abstandes vom Referenzniveau berechnet. Für physikalische Größen, z.B. die Konvergenzrate und die Diffusionskonstante, die als Funktionen des Drucks bzw. der Temperatur gegeben sind, ergibt sich die Teufenabhängigkeit aus der funktionalen Abhängigkeit von Temperatur und Druck direkt. Für andere Parameter, z.B. die Dichte des Salzgesteins und die Dichte der Lauge, werden über die vertikale Ausdehnung des Endlagers gemittelte Werte verwendet.

Die Temperaturverteilung im Endlager hat einen Einfluß auf eine Reihe von Effekten. Daher wird die Bestimmung der Temperatur vor den anderen Effekten in Kapitel 5.1 behandelt.

In einem Salzstock sorgt die Kriechfähigkeit des Salzes dafür, daß im Laufe der Zeit die Resthohlräume im verfüllten Endlager verkleinert werden. Auf die Transportvorgänge im Grubengebäude wirkt sich diese Konvergenz des Salzgesteins auf zweifache Weise aus: Zum einen ist die Konvergenz durch das Auspressen eingedrungener Lauge aus Resthohlräumen direkte Ursache für einen Laugentransport. Zum anderen werden durch den Konvergenzprozeß die Strömungswiderstände der einzelnen Teilbereiche des Grubengebäudes vergrößert, was den Laugenstrom durch diese Teilbereiche behindert. Die Konvergenz des Salzgesteins und die daraus resultierende Verkleinerung der Hohlräume im Endlager werden im Kapitel 5.2 beschrieben.

Die Laugenströme werden durch die Permeabilität von Verschlüssen, Dämmen und Versatz und durch die im Grubengebäude herrschenden Druckverhältnisse bestimmt. Die Permeabilität und die Strömungswiderstände von Verschlüssen, Dämmen und Versatzmaterial werden in Kapitel 5.3 behandelt.

Die Berechnung der Laugendrucke im Endlager und der daraus resultierenden advektiven Laugenströme wird in Kapitel 5.4 beschrieben. Bei einem Grubengebäude mit mehreren Sohlen wird dabei die Teufenabhängigkeit des Laugendruckes berücksichtigt.

Einen weiteren Beitrag zur Laugenbewegung im Endlager können konvektive Laugenströme (Austauschströme) liefern. Diese Konvektionsströmungen können durch einer Reihe verschiedener Antriebsmechanismen verursacht werden, z.B. durch einen großräumigen Dichtegradienten in der Lauge oder durch Gas, welches durch mit Lauge gefüllte Segmente strömt. Der Dichtegradient der Lauge kann zum einen durch einen Temperaturgradienten zum anderen durch einen Konzentrationsgradienten von in der Lauge gelösten Substanzen verursacht werden. Das Gas kann bei der Korrosion von Metallteilen des eingelagerten Abfalls entstehen oder durch Radiolyse gebildet werden. Die Gasproduktion aus der Korrosion und der Radiolyse wird im Kapitel 5.5 beschrieben. Der durch die genannten Ursachen bewirkte konvektive Laugentransport wird im Kapitel 5.6 beschrieben.

Trifft magnesiumhaltige Lauge auf Zement der Abfallmatrix oder der Behälter, so wird durch Zementkorrosion Magnesium verbraucht. Eine Bilanz der Magnesiummasse in einem Einlage-segment berücksichtigt diesen Magnesiumverbrauch und Anteile von Magnesium, die mit der Lauge in das Segment hinein- und heraustransportiert werden. Die Modellierung des Magnesiumtransportes ist gleich der des Transportes anderer in der Lauge gelöster Substanzen, die für einen Dichtegradienten verantwortlich sind. Daher werden beide Vorgänge gemeinsam im Kapitel 5.6.2 beschrieben.

Die Laugenbewegungen im Endlager sind letztendlich verantwortlich für eine mögliche Radionuklidfreisetzung. Der advective Laugenstrom führt immer dann zu einem Radionuklidtransport, wenn die Lauge kontaminiert ist, während die Konvektionsströmungen nur dann einen Beitrag zum Radionuklidtransport liefern, wenn zugleich ein Gradient in der Radionuklidkonzentration vorhanden ist.

In den Kapiteln 5.7.1 und 5.7.2 wird die Berechnung eines möglichen Nuklidstroms dargestellt, der mit den beschriebenen konvektiven Laugenbewegungen einhergehen kann. Über den mit einem Transport von Lauge verknüpften Nuklidtransport hinaus wird der Transport von Nukliden durch Diffusion wie in Kapitel 5.7.3 beschrieben berechnet. Den Hauptbeitrag zum Nuklidtransport liefert im allgemeinen jedoch der advective Laugenstrom. Sein Beitrag zum Nuklidstrom wird im Kapitel 5.7.4 behandelt. Die Überlagerung aller Nuklidströme erfordert eine gesonderte Behandlung, welche in Kapitel 5.7.5 dargestellt ist.

In Kapitel 5.8 wird die Berechnung des Radionuklidtransports in Segmenten mit ortsabhängiger Nuklidkonzentration dargestellt. In diesem Fall wird der Gesamtnuklidstrom nach einem anderen Verfahren berechnet als in den restlichen Segmentmodellen.

Alle bisher genannten Transportmechanismen wirken nur auf in der Lauge gelöste Nuklide. Ein Teil der Nuklide fällt bei Überschreiten der Löslichkeitsgrenze aus. Diese ausgefällten Radionuklide werden nicht transportiert. Die Sorption von Radionukliden an Korrosionsprodukten der Gebinde, am Versatz und am umgebenden Gestein kann eine weitere Reduktion des mobilen Anteils der Radionuklide bewirken. Löslichkeits- und Sorptionseffekte werden im Kapitel 5.9 dargestellt.

Allen Transportvorgängen der Radionuklide überlagert ist der radioaktive Zerfall. Während das Aktivitätsinventar von Spaltprodukten stetig reduziert wird, können die Nuklide in Zerfallsketten einerseits in ihre Tochternuklide zerfallen, werden andererseits aber auch von ihren Mutternukliden aufgebaut. Die Differentialgleichungen, die den radioaktiven Zerfall beschreiben, sind analytisch gelöst worden. Die Aktivität eines Nuklids zu einer Zeit $t + \Delta t$ bestimmt sich danach aus seiner Aktivität zur Zeit t und der Aktivität seiner Mutternuklide zur Zeit t und $t + \Delta t$. Die Modellierung des radioaktiven Zerfalls ist in Kapitel 5.10 beschrieben.

5.1 Temperatur und Temperaturgradienten im Grubengebäude

Das Nuklidinventar eines Endlagers erzeugt durch radioaktiven α -, β - oder γ - Zerfall Wärme, die sich von den Einlagerungsorten in die Umgebung ausbreitet. Dabei steigt die Temperatur im Endlager über die Gebirgstemperatur. In Einlagerungsorten mit hochaktiven Abfällen wird die Anzahl der Gebinde so begrenzt, daß eine vorgegebene Maximaltemperatur im Gebirge eingehalten wird. Die Temperatur an verschiedenen Stellen des Grubengebäudes beeinflußt die folgenden physikalischen und chemischen Effekte:

- Konvergenz der Segmente,
- Gasproduktion in den Segmenten,
- Diffusion von Nukliden in den Segmenten,

- Mobilisierung aus verglasten Abfallgebinden.

Der Einfluß der Temperatur auf diese Effekte wird in den entsprechenden Kapiteln im Detail behandelt. Eine mögliche Änderung der Temperatur durch eventuell zugetretene Lauge wird nicht berücksichtigt.

Die Temperaturverteilung im Endlager ist eine Funktion des Ortes und der Zeit. Innerhalb der Teilbereiche eines Segmentes (Verschluß oder versetzter Hohlraum) sind im Rahmen der Ortsdiskretisierung repräsentative Temperaturen anzusetzen, die im gesamten Teilbereich gültig sind (siehe z.B. Abbildung 45). Die Auswahl des Ortes innerhalb eines Segmentes zur Bestimmung der für den Teilbereich repräsentativen Temperatur geschieht unter diesen Gesichtspunkten, wobei gegebenenfalls konservative Überlegungen in diese Festlegung einfließen.

Die durch die Abfälle verursachten Temperaturerhöhungen an ausgewählten Stellen eines vorgegebenen Grubengebäudes werden für beliebige Anordnungen der Abfallgebände mit Hilfe spezieller Rechenprogramme berechnet (siehe beispielsweise [20]). Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind als Eingabedateien mit vorgegebener Struktur (siehe Kapitel 8.2) für eine REPOS-Rechnung aufzubereiten. Zu Beginn eines REPOS-Rechenlaufes werden allen Segmenten und Abfallgebinden die entsprechenden Temperaturdaten aus dieser Datei zugeordnet.

Ein Beispiel eines typischen Zeitverlaufs der Temperatur für verschiedene Stellen in einem HAW-Bohrloch ist in Abbildung 45 dargestellt [4]. Die Punkte 1 bis 3 kennzeichnen die ausgewählten, repräsentativen Orte des Bohrloches mit unterschiedlichen Temperaturen. Die dargestellten Temperaturverläufe zeigen die höchsten Temperaturen für den Punkt 1 auf der Bohrlochachse inmitten der Gebindesäule. Etwas kälter ist der Punkt 2 auf dem Bohrlochmantel. Deutlich niedriger ist dann die Temperatur innerhalb des Verschlusses (3). Aufgrund der Zeit, welche die Wärme zur Ausbreitung von der unmittelbaren Umgebung des Inventars zum Verschluß hin benötigt, erreicht der im Verschlußbereich liegende Punkt 3 sein Temperaturmaximum später als die Punkte 1 und 2.

Ein Beispiel einer räumlichen Verteilung der Temperatur in der Richtstrecke entlang eines Bohrlochfeldes für unterschiedliche Zeitpunkte ist in Abbildung 46 dargestellt [4]. Die Temperatur ist in der Mitte der Strecke am größten und fällt an den Enden des Bohrlochfeldes nach beiden Seiten ab. Die Folge der dargestellten Funktionsverläufe zeigt ein Anwachsen der Temperatur mit fortschreitender Zeit. Nach Erreichen eines Maximums fällt die Temperatur als Funktion der Zeit wieder ab. Dies ist in der Abbildung nicht mehr dargestellt.

Bei mehrsöhligem Grubengebäude wird der Wert der Gebirgstemperatur in unterschiedlichen Teufen benötigt. Man wählt dazu ein Koordinatensystem mit Ursprung auf der Erdoberfläche und x-Richtung nach oben. Die Temperatur in einer beliebigen Teufe x errechnet sich dann aus der Temperatur in einer Referenzteufe x_r gemäß:

$$T_G(x) = (T_G(x_r) - (x - x_r)) \nabla T_x . \quad (70)$$

Die verwendeten Größen sind:

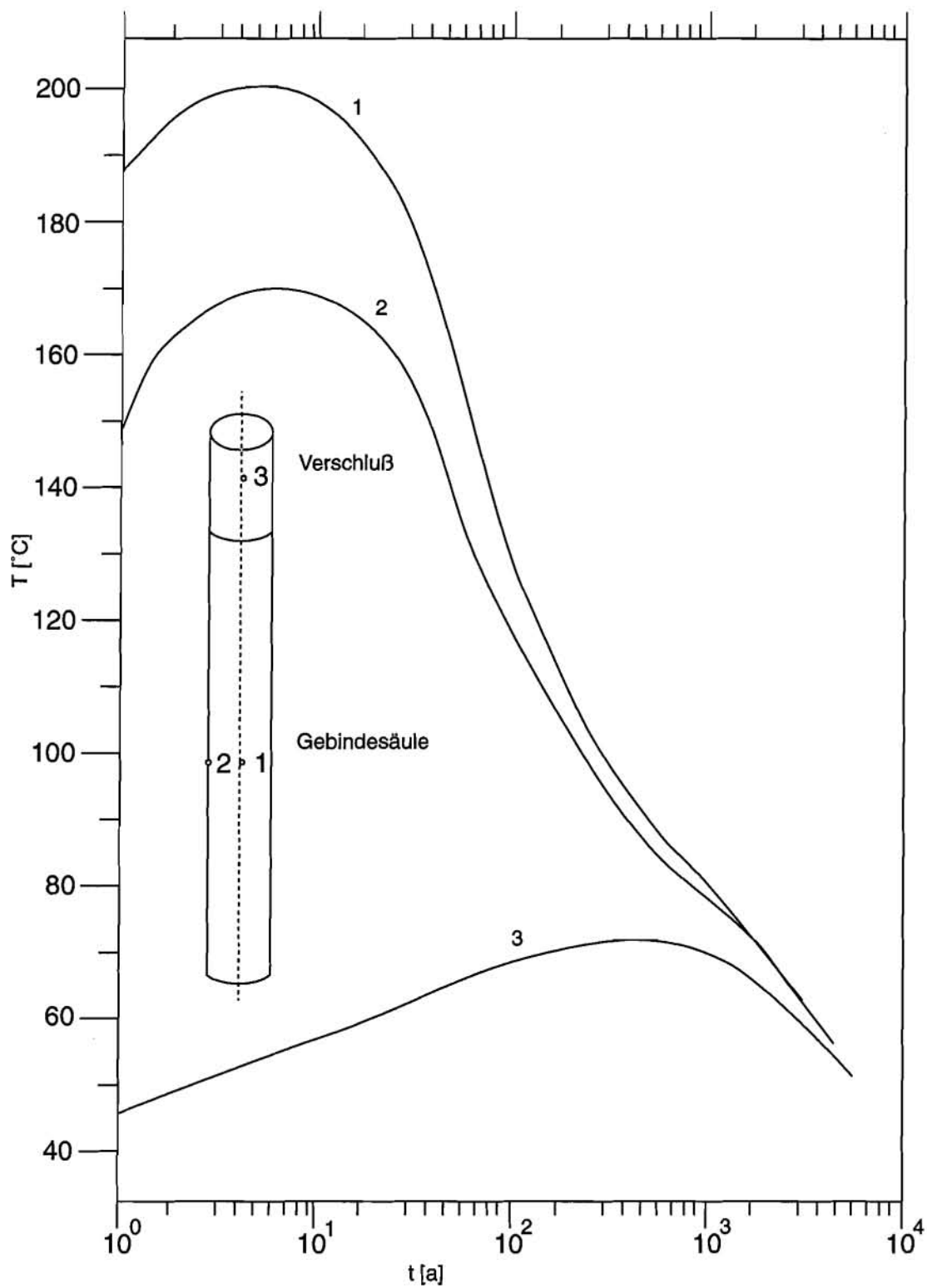


Abbildung 45: Zeitliche Temperaturverläufe für verschiedene Stellen in einem Bohrloch mit hochaktivem Abfall.

- 1: Bohrlochachse (Mobilisierung)
- 2: Bohrlochmantel (Konvergenz des Bohrlochinhalts)
- 3: Bohrlochverschlußachse, Mitte (Verschlußkonvergenz)

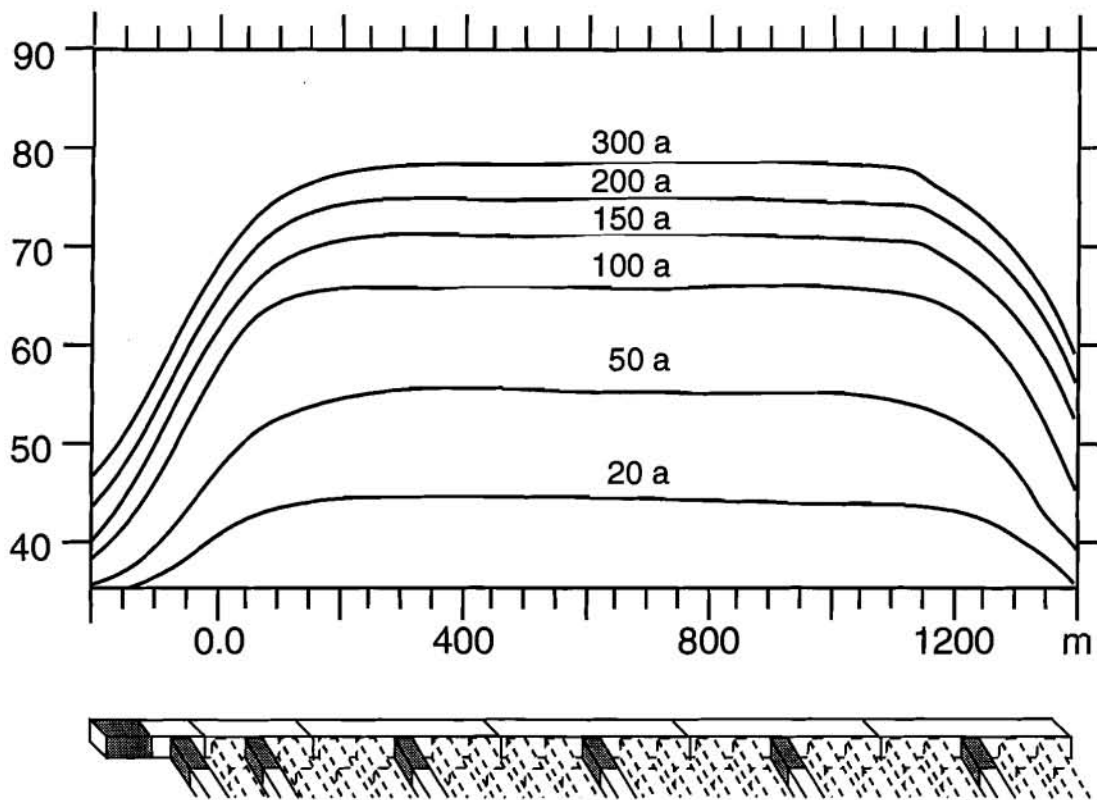


Abbildung 46: Räumlicher Temperaturverlauf entlang einer Richtstrecke des Bohrlochfeldes mit hochaktivem Abfall für unterschiedliche Zeiten.

$T_G(x_r)$: Gebirgstemperatur in der Referenzteufe x_r ,

$T_G(x)$: Gebirgstemperatur in der Teufe x ,

∇T_x : geothermischer Temperaturgradient.

Zur Modellierung von thermisch induzierten Konvektionsbewegungen der Lauge werden Temperaturgradienten benötigt. Der Temperaturgradient verursacht einen Dichtegradienten in der Lauge, der seinerseits einen Laugenstrom induziert. Zur Berechnung des Temperaturgradienten wählt man zwei beliebige Punkte im Grubengebäude und gibt deren Abstand vor. Der Gradient der Temperatur errechnet sich dann aus dem Quotienten der Temperaturdifferenz zwischen den beiden Punkten und dem Abstand.

5.2 Die Konvergenz von Salzgestein

Salzgestein ist unter äußerem Druck plastisch verformbar und hat damit die Fähigkeit, in vorhandene Hohlräume zu kriechen. Dieser Prozeß wird mit Konvergenz des Salzgesteins bezeichnet. Der Konvergenzprozeß führt bei einem Endlager im Salz zu einer fortschreitenden Verkleinerung

der Resthohlräume in den versetzten Strecken und Einlagerungsorten und deren Verschlüssen, sofern diese kompaktierbar sind. In Hinblick auf die Konsequenzanalyse eines Szenarios für die eventuelle Freisetzung von Radionukliden aus dem Endlager sind die folgenden unterschiedlichen Auswirkungen der Konvergenz von Bedeutung:

- Der Konvergenzprozeß führt zu einer Verkleinerung der Resthohlräume und zu einer Vergrößerung der Strömungswiderstände von Verschlüssen und Versatzmaterial. Durch die Verkleinerung der Resthohlräume wird die Laugenmenge, die in unmittelbaren Kontakt zum eingelagerten Abfall kommen kann, deutlich begrenzt. Durch die Vergrößerung der Strömungswiderstände wird der Laugenzufluß in Einlagerungsorte zunehmend behindert.
- Der Konvergenzprozeß kann das Hohlraumvolumen und damit die Porosität des Versatzmaterials oder der Verschlüsse in Teilbereichen des Endlagers soweit reduzieren, daß diese für eindringende Lauge undurchlässig werden. Hierdurch kann eine ursprünglich vorhandene Wegsamkeit durch die Strecken, die den Laugenzutrittsort mit den Einlagerungsorten verbinden, unterbrochen werden. Auch das Hohlraumvolumen in den Einlagerungsorten selbst kann soweit reduziert werden, daß ein Eindringen von Lauge unmöglich geworden ist. Eine Freisetzung von Radionukliden als Konsequenz eines Laugenzutritts wird in beiden Fällen verhindert.
- Hat die Lauge die Einlagerungsorte erreicht und sind Radionuklide aus den Gebinden freigesetzt worden, bevor die Wegsamkeiten durch Konvergenz verschlossen sind, so führt die Verkleinerung der Hohlraumvolumina zu einem Auspressen von kontaminierter Lauge. Die Konvergenz ist in diesem Fall der wesentliche Antriebsmechanismus für eine Radionuklidfreisetzung.

Die beiden letztgenannten Fälle können in verschiedenen Teilbereichen eines Endlagers gleichzeitig auftreten. So können z.B. in einem Teil des Endlagers einige Segmente undurchlässig geworden sein, in anderen Teilen kann z.B. eingedrungene Lauge wieder ausgepreßt werden, ohne daß sie die Einlagerungsorte erreicht hat, oder nur ein Teil der Einlagerungsorte ist mit Lauge gefüllt worden, so daß auch nur ein Bruchteil des eingelagerten Inventar freigesetzt werden kann.

Der Konvergenzprozeß kann also einerseits das Einlagerungsinventar eines Endlagers gegen die Biosphäre abschirmen und andererseits im Gegenteil eine Nuklidfreisetzung unterstützen. Welcher dieser Fälle eintritt, hängt vom Szenario, vom Standort und von der Auslegung des Endlagers ab und muß daher jeweils gesondert untersucht werden.

In der mathematischen Beschreibung der Konvergenz wird angenommen, daß die Verminderung des Volumens $dV(t)/dt$ zu jeder Zeit proportional zu dem zu dieser Zeit vorliegenden Volumen $V(t)$ ist,

$$\frac{d}{dt}V(t) = -K(p, \phi, T)V(t) . \quad (71)$$

Die Größe $K(p, \phi, T)$ gibt die relative Volumenänderung an und wird mit Konvergenzrate bezeichnet. Sie ist im allgemeinen eine Funktion der zeitlich veränderlichen Größen Laugendruck p , Porosität ϕ und Temperatur T und ist somit implizit zeitabhängig. Eine explizite Zeitabhängigkeit der Konvergenzrate wird nicht betrachtet. Die Abhängigkeit der Konvergenzrate von den Variablen p , ϕ und T wird im folgenden Kapitel im einzelnen beschrieben. Außerdem hängt die Konvergenzrate von den standortspezifischen Parametern Gebirgsdruck p_G und Gebirgstemperatur T_G in der Endlagertiefe ab. Diese Abhängigkeit wird hier nicht explizit mit angegeben, jedoch erscheint sie in der funktionalen Abhängigkeit der Konvergenzrate vom Laugendruck bzw. von der Temperatur.

5.2.1 Die Konvergenzrate

Sowohl der Laugendruck p , als auch die Porosität ϕ und die Temperatur T nehmen in den einzelnen Segmenten des Endlagers unterschiedliche Werte an. Eine räumliche Variation des Laugendrucks innerhalb eines Segments wird nicht betrachtet. Die Größen ϕ und T können jedoch in den Teilbereichen Verschuß und versetzter Bereich eines Segmentes unterschiedliche Werte annehmen. Daher nimmt auch die Konvergenzrate hier unterschiedliche Werte an, d.h. sie ist innerhalb einer Einlagerungssohle implizit ortsabhängig und wird für jeden Teilbereich eines Segments berechnet.

Für mehrsöhlige Grubengebäude müssen bei der Bestimmung des Laugendrucks p und der Temperatur T sowie beim Gebirgsdruck p_G und der Gebirgstemperatur T_G die unterschiedlichen Teufen x berücksichtigt werden, in denen sich die einzelnen Segmente des Endlagers befinden. Daher ist auch die Konvergenzrate teufenabhängig.

In [21] wurde gezeigt, daß die Konvergenzrate für Salzgrus als Produkt von Funktionen geschrieben werden kann, die jeweils nur vom Druck p , der Porosität ϕ bzw. der Temperatur T abhängen,

$$K(p, \phi, T) = K_r f_r f_1(p(x, t)) f_2(\phi(t)) f_3(T(x, t)) . \quad (72)$$

Der Faktor K_r wird mit Referenzkonvergenzrate bezeichnet. An dieser Stelle genügt es zunächst festzuhalten, daß die Konvergenzrate K den Wert K_r annimmt, wenn die anderen Faktoren f_r , f_1 , f_2 und f_3 in der Gleichung 72 alle den Wert 1 annehmen. Die genaue Bedeutung der Größe K_r ergibt sich aus der Diskussion der Faktoren f_1 , f_2 , f_3 und f_r .

Die Funktion $f_1(p(x, t))$ beschreibt die Abhängigkeit der Konvergenzrate von einem Laugendruck im Porenraum und hat die Form [21]

$$f_1(p(x, t)) = \left(\frac{p_G(x) - p(x, t)}{p_G(x_r)} \right)^m . \quad (73)$$

Die Konvergenzrate ist demnach abhängig von der Differenz zwischen dem Gebirgsdruck $p_G(x)$ und dem Laugendruck $p(x,t)$ in der Teufe x , in der sich das jeweilige Segment befindet. Im Nenner wurde der Gebirgsdruck $p_G(x_r)$ in der Referenztiefe x_r anstelle des Gebirgsdrucks $p_G(x)$ eingeführt. Die Teufenabhängigkeit der Konvergenzrate über den Gebirgsdruck ist damit in die Funktion f_1 hineingenommen. Hierdurch ist es möglich, die Referenzkonvergenzrate K_r auf die Referenztiefe x_r zu beziehen und so für das gesamte Endlager einheitlich festzulegen. Der Exponent m folgt aus dem Stoffgesetz zur Beschreibung sekundären Kriechens von Steinsalz.

Die Berechnung des Laugendruckes $p(x)$ unter Berücksichtigung der Teufenabhängigkeit ist ein relativ umfangreiches Unterfangen und ist gesondert in Kapitel 5.4 dargestellt. Die Abbildung 47 zeigt als Beispiel die Abhängigkeit der Konvergenzrate vom Laugendruck für jeweils unterschiedliche Werte des Gebirgsdrucks p_G .

Die Abhängigkeit der Konvergenzrate in einem versetzten Hohlraum von der Porosität des Versatzmaterials berücksichtigt den Effekt, daß der Konvergenz für kleiner werdende Porosität ein wachsender Widerstand entgegengesetzt wird. Für die Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Porosität ($f_2(\phi)$) wurde in [21] der folgende Ansatz abgeleitet:

$$f_2(\phi) = \phi \left(1 - \frac{\phi}{\phi_r}\right) \left(\left(1 - \frac{\phi}{\phi_r}\right)^2 + \left(\phi \left(1 - \frac{\phi}{\phi_r}\right)\right)^{1/m} \right)^{-m} \quad \text{für } (\phi < \phi_r) \quad . \quad (74)$$

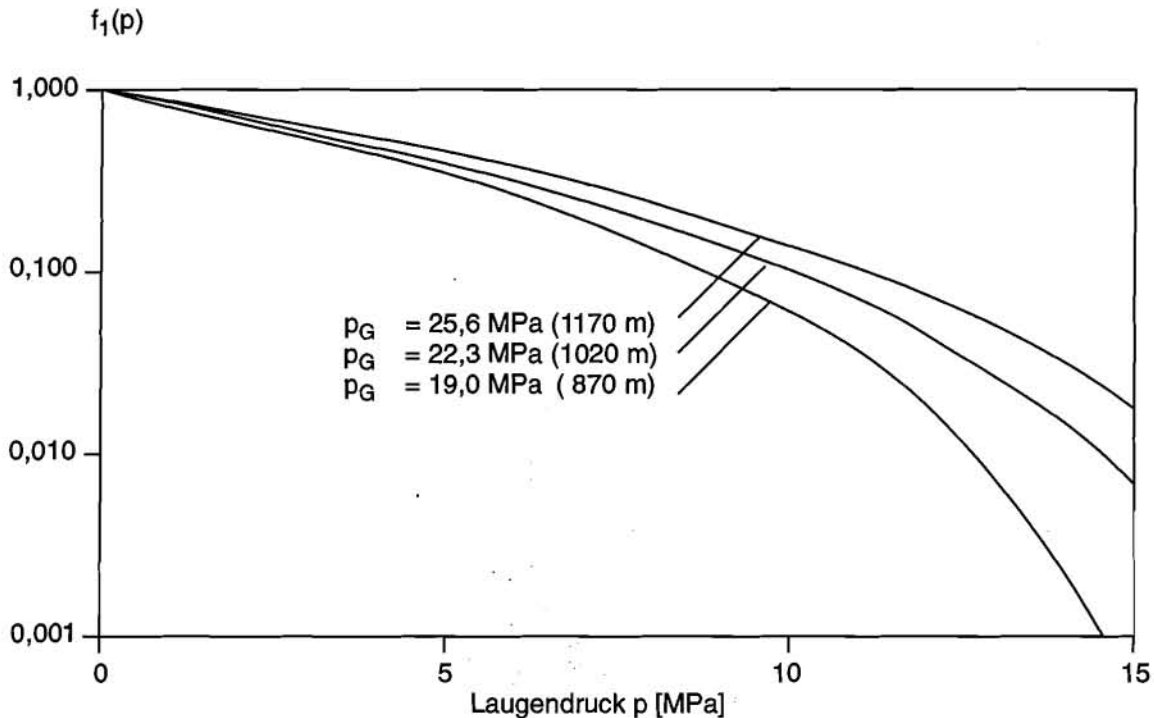


Abbildung 47: Verlauf des druckabhängigen Anteils der Konvergenzrate f_1 für unterschiedliche Werte des Gebirgsdrucks p_G .

Die Herleitung dieser Beziehung verwendet ebenfalls das Stoffgesetz für sekundäres Kriechen, daher ist der Exponent m identisch mit dem in Gleichung 73. Die Größe ϕ_r wird mit Referenzporosität bezeichnet. Sie kennzeichnet die Porosität, bei der eine Stützwirkung des Versatzes einsetzt. Daher gilt neben der Beziehung 74

$$f_2(\phi) = 1 \quad \text{für } \phi \geq \phi_r .$$

Die Referenzporosität ist eine universelle Größe und hat daher im gesamten Grubengebäude den gleichen Wert. In der Abbildung 48 ist die Funktion $f_2(\phi)$ dargestellt.

Mit abnehmender Porosität erhöht sich die Stützwirkung des Versatzes kontinuierlich. Dies wird durch eine mit kleiner werdendem ϕ monoton fallende Funktion f_2 wiedergegeben.

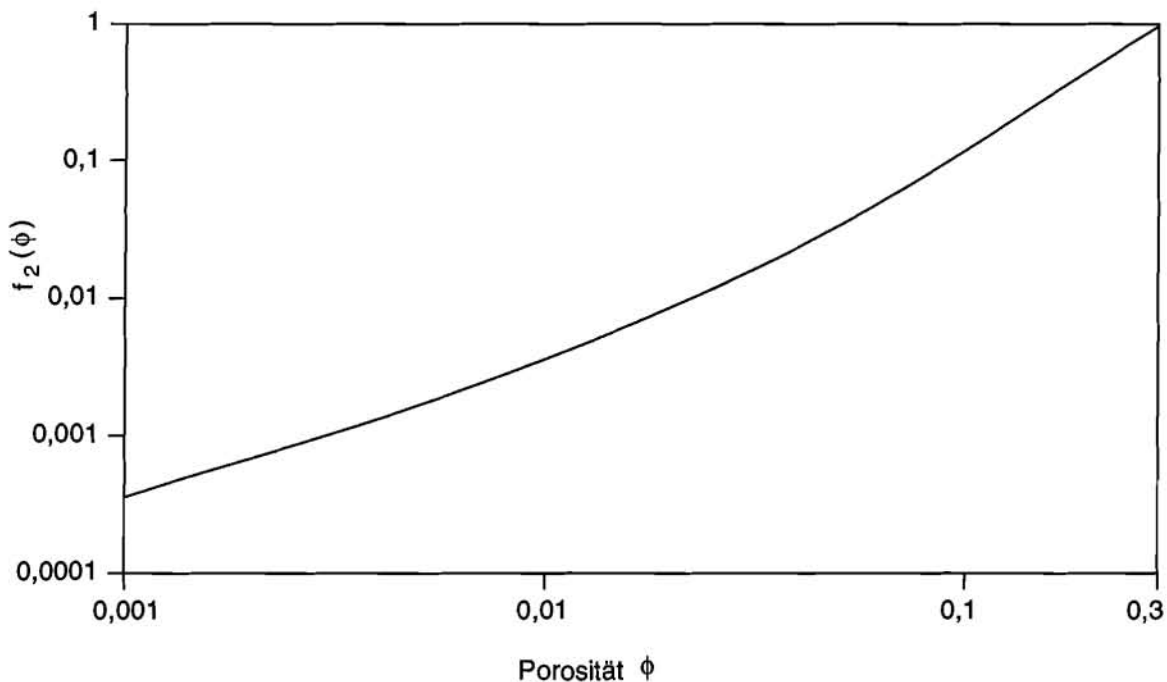


Abbildung 48: Verlauf des porositätsabhängigen Anteils der Konvergenzrate f_2 bei einer Referenzporosität von 0,3.

Die Funktion $f_3(T)$ in Gleichung 72 trägt der Tatsache Rechnung, daß mit höherer Temperatur die Kriechgeschwindigkeit des Salzes anwächst, was zu einer schnelleren Konvergenz der Hohlräume führt [22]:

$$f_3(T) = \frac{1}{(1+a)} \left[\exp \left[\frac{Q_1}{R} \left(\frac{1}{T_G} - \frac{1}{T} \right) \right] + a \cdot \exp \left[\frac{Q_2}{R} \left(\frac{1}{T_G} - \frac{1}{T} \right) \right] \right] , \quad (75)$$

wobei Q_1 und Q_2 zwei unterschiedliche Aktivierungsenergien für das sekundäre Kriechen und R die Gaskonstante sind. Die Temperatur T in der Gleichung 75 ist sowohl orts- als auch zeitabhängig. Diese Abhängigkeit wurde im Kapitel 5.1 beschrieben. Die Größe T_G ist die Gebirgstemperatur in der Teufe x , in der sich der konvergierende Hohlraum befindet. Sie ist mit der Gebirgstemperatur $T_G(x_r)$ in der Referenzteufe durch die in Kapitel 5.1 angegebene Beziehung 70 verknüpft.

Die zwei Summanden in Gleichung 75 beschreiben verschiedene Mechanismen sekundären Kriechens von Salz [23], was sich in unterschiedlichen Aktivierungsenergien Q_1 und Q_2 ausdrückt, wobei o.E.d.A. $Q_1 < Q_2$ angesetzt wurde. Für Temperaturen T , die kleiner sind als eine bestimmte Temperatur $T_{\bar{u}}$ (z.B. $T_{\bar{u}} = 373$ K), dominiert in der Temperaturabhängigkeit der Konvergenzrate der erste Summand in der Gleichung 75, während der zweite Summand für $T > T_{\bar{u}}$ überwiegt. Der Parameter a wurde so bestimmt, daß beide Summanden für $T = T_{\bar{u}}$ den gleichen Wert haben. Für $T = T_G$ nimmt die Funktion f_3 den Wert 1 an.

Eine Darstellung der Abhängigkeit $f_3(T)$ zeigt Abbildung 49 [4], wobei eine Gebirgstemperatur T_G von 310 K zugrunde gelegt wurde. Der Temperaturbereich entspricht dem, der in einem Endlager mit hochaktiven Abfällen zu erwarten ist. Der Anstieg der Kurve f_3 mit wachsender Temperatur wird zunächst durch den ersten Summanden in der Gleichung 75 bestimmt. Für hohe Temperaturen dominiert der zweite Summand den Funktionsverlauf. Die Abbildung 49 macht deutlich, daß die Konvergenzrate empfindlich von der Temperatur abhängt.

Die Beziehung 74 für die Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Porosität wurde für einen mit Salzgrus versetzten Hohlraum hergeleitet. Für die Volumenverringerung von Hohlräumen (Einlagerungsorten), die zusätzlich oder ausschließlich Abfallgebände enthalten, sowie für die Kompak-

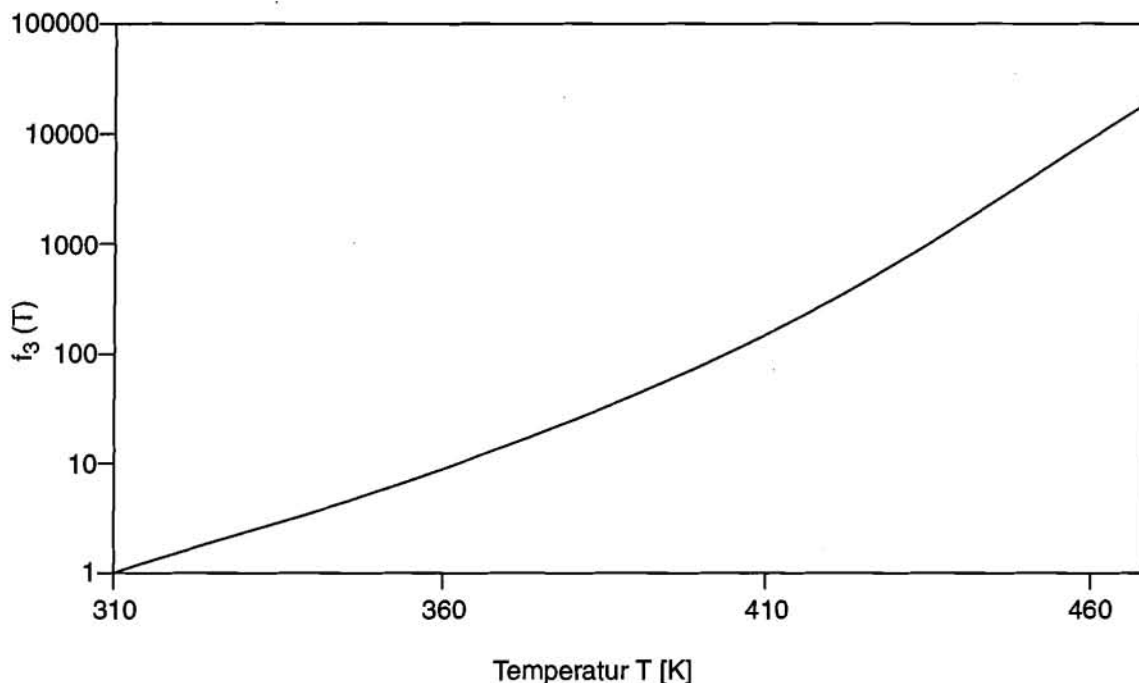


Abbildung 49: Verlauf des temperaturabhängigen Anteils der Konvergenzrate $f_3(T)$.

tierung von Hohlräumen in den Gebinden selbst wird die Konvergenzrate ebenfalls nach der Beziehung 72 berechnet. Dem hier im allgemeinen jedoch verzögert ablaufenden Kompaktierungsprozeß durch die zusätzliche Stützwirkung der Behälter und der Abfallmatrix wird pauschal durch einen geeigneten Reduktionsfaktor f_r Rechnung getragen.

Falls außer vom Versatzmaterial keine zusätzliche Stützwirkung vorliegt, ist $f_r = 1$, andernfalls ist f_r kleiner als 1. Die Konvergenzreduktion wird im allgemeinen auch davon abhängen, ob in den betreffenden Teilbereich bereits Lauge eingedrungen ist (naß) oder nicht (trocken). Ein Kontakt der Abfallgebinde mit Lauge hat einen Festigkeitsverlust der Gebinde zur Folge, was sich in einem größeren f_r -Wert ausdrückt. Die Tabelle 6 zeigt als Beispiel einige im Modul REPOS verwendete Reduktionsfaktoren f_r . Der Übergang von einem Wert des Reduktionsfaktor zum anderen erfolgt kontinuierlich, wie im Kapitel 4.2 beschrieben.

Teilbereich	trocken	naß
HAW - Kokillen	0	0,01
Pollux	0	0,1
Dämme	0	0
Verschlüsse	1	1

Tabelle 6: Beispiele für Konvergenzreduktionsfaktoren f_r für trockene und nasse Umgebungsbedingungen.

Die Bedeutung der eingangs erwähnten Referenzkonvergenzrate K_r läßt sich nach dem bisher gesagten erläutern. Der Wert von K_r gibt die Konvergenzrate unter Standardbedingungen in der Referenzteufe ($x = x_r$) wieder. Diese sind dadurch gekennzeichnet, daß keine Temperaturerhöhung vorhanden ist und vom Inhalt des betrachteten Hohlraums keinerlei Stützwirkung ausgeübt wird. Also gilt:

- es gibt keinen Laugendruck ($f_1 = 1$),
- die Porosität ist größer oder gleich der Referenzporosität ($f_2 = 1$),
- die Temperatur ist die des Gebirges ($f_3 = 1$),
- eventuell vorhandene Behälter üben keine Stützwirkung aus ($f_r = 1$).

Unter diesen Bedingungen kann das Gestein frei konvergieren. Die Referenzkonvergenzrate ist eine Konstante; alle Abhängigkeiten, auch diejenige von der Teufe, sind in die jeweiligen Faktoren f_1 , f_2 und f_3 hineingenommen.

5.2.2 Auswirkungen der Konvergenz

Die Konvergenz des Salzgesteines führt zu einer Reduktion der Hohlraumvolumina mit der im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Rate. Zur Berechnung des Volumens eines beliebigen Hohlraumes als Funktion der Zeit wird die Differentialgleichung 71 in eine Differenzengleichung umgeschrieben:

$$V(t + \Delta t) = V(t) (1 - K(t) \Delta t) . \quad (76)$$

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

Die Gleichung 76 kann in der angegebenen Form direkt für die Berechnung des gesamten Volumens eines Hohlraumes verwendet werden. Bei einem versetzten Hohlraum wird zusätzlich das Porenvolumen benötigt als der Anteil des gesamten Volumens, der Lauge aufnehmen kann. Bei der Volumenänderung eines versetzten Hohlraumes kann sich nur das Volumen der Poren, nicht aber das des Feststoffes ändern, daher gilt:

$$V_P(t + \Delta t) - V_P(t) = V(t + \Delta t) - V(t) , \quad (77)$$

d.h. die Änderung des Porenvolumens ist gleich der Änderung des gesamten Volumens. Hieraus ergibt sich mit Gleichung 76:

$$V_P(t + \Delta t) = V_P(t) - V(t) K(t) \Delta t . \quad (78)$$

Als weitere geometrische Größe wird die Porosität, z.B. für die Bestimmung der Konvergenzrate, benötigt (siehe Gleichung 72). Die aktuelle Porosität erhält man unmittelbar mit der Definition der Porosität ϕ als Verhältnis von Porenvolumen zu Gesamtvolumen:

$$\phi(t + \Delta t) = \frac{V_P(t + \Delta t)}{V(t + \Delta t)} . \quad (79)$$

Abbildung 50 zeigt den zeitlichen Verlauf der Porosität in Bereichen eines Endlagers mit unterschiedlichen Temperaturen. Von den dargestellten Beispielen weist der Verschuß eines Bohrlochs im Zentrum eines Einlagerungsfeldes mit wärmeproduzierenden Abfällen die höchste Temperatur auf (ca. 120 °C). Die Porosität nimmt hier sehr schnell ab. Deutlich niedrigere

Temperaturen (ca. 60 °C) haben die Bohrlochverschlüsse im äußeren Bereich des Einlagerungsfeldes, was sich in einer langsameren Abnahme der Porosität widerspiegelt. In der verfüllten Strecke herrscht Gebirgstemperatur. Hier erreicht die Porosität erst nach 1000 Jahren den Wert 0,001.

Zur Berechnung der Laugenbewegungen durch Austauscheffekte (siehe Kapitel 5.6) wird die Höhe und Breite eines Segmentes als Funktion der Zeit benötigt. Man erhält diese Werte aus der Kenntnis des Volumens, wenn man annimmt, daß die Höhe H und die Breite B eines Segmentes in einem Zeitschritt um denselben Betrag abnehmen:

$$H(t + \Delta t) - H(t) = B(t + \Delta t) - B(t) . \quad (80)$$

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

$$A(t + \Delta t) = \frac{V(t + \Delta t)}{L} . \quad (81)$$

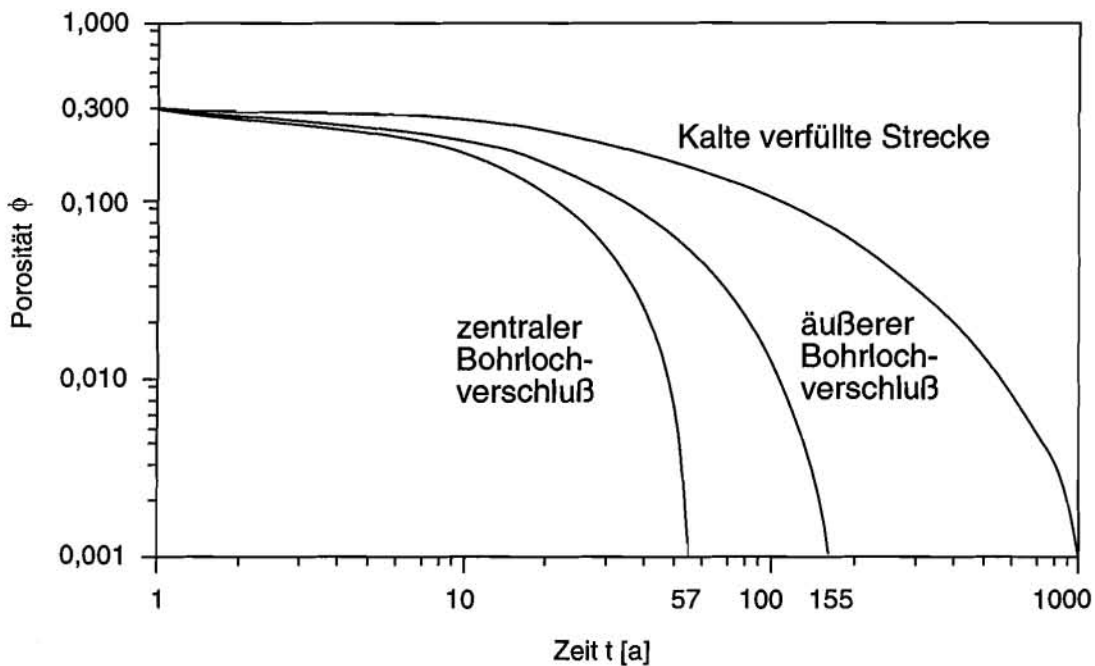


Abbildung 50: Zeitverläufe der Porositäten in Teilbereichen des Endlagers mit unterschiedlichen Temperaturen.

Wird die Gleichung 80 nach $H(t + \Delta t)$ aufgelöst und $B(t + \Delta t)$ durch den Querschnitt $A(t + \Delta t)$ ausgedrückt,

$$B(t + \Delta t) = \frac{A(t + \Delta t)}{H(t + \Delta t)}, \quad (82)$$

so ergibt sich für Gleichung 80:

$$[H(t + \Delta t)]^2 = H(t + \Delta t) [H(t) - B(t)] + A(t + \Delta t). \quad (83)$$

Eine Lösung dieser Gleichung ist:

$$H(t + \Delta t) = \frac{1}{2} [H(t) - B(t)] + \left[\frac{1}{4} [H(t) - B(t)]^2 + A(t + \Delta t) \right]^{1/2}. \quad (84)$$

Die Lösung mit dem negativen Vorzeichen vor der Wurzel führt zu negativem H und wird daher nicht berücksichtigt.

Ganz analog zur Herleitung von Gleichung 84 für die Höhe kann man die Breite eines Segmentes ermitteln. Es ergibt sich:

$$B(t + \Delta t) = \frac{1}{2} [B(t) - H(t)] + \left[\frac{1}{4} [H(t) - B(t)]^2 + A(t + \Delta t) \right]^{1/2}. \quad (85)$$

Bohrlöcher haben eine zylindrische Geometrie und sind damit mit den Größen Höhe und Breite nicht beschreibbar. Die für die Konvergenz eines Bohrloches relevante Größe ist der Radius, d.h. die Bohrlochkonvergenz ist bestimmt durch die Änderung des Zylinderradius:

$$R(t + \Delta t) = \sqrt{\frac{A(t + \Delta t)}{\pi}}. \quad (86)$$

Hierbei wird wieder angenommen, daß sich nur die Querschnittsfläche A ändert, die Länge L jedoch konstant bleibt. Den Querschnitt A erhält man aus Gleichung 81.

Die Gleichungen 76 bis 86 enthalten alle Informationen über die von der Konvergenz beeinflussten zeitlich veränderlichen geometrischen Größen, die entweder von den Segmentmodellen oder für Austauscheffekte benötigt werden.

5.3 Permeabilität und Widerstand von Verschlüssen, Dämmen und Versatz

Alle Teilbereiche des verfüllten Grubengebäudes werden zur Modellierung des Laugentransportes als poröses Medium betrachtet. Um die Laugenströme explizit bestimmen zu können, müssen die Widerstände der Segmente bekannt sein. Die Widerstände von Verschlüssen und Versatz sind wegen der Querschnittsänderung und der Porositätsänderung durch Konvergenz des umgebenden Gesteines zeitlich veränderlich. Es wird angenommen, daß Dämme nicht konvergieren und folglich einen konstanten Widerstand haben.

Der Strömungswiderstand ergibt sich aus den geometrischen Abmessungen und der Permeabilität eines Segmentes. Zur Berechnung der Permeabilität aus der Porosität wird das in Kapitel 5.3.1 beschriebene Modell verwendet. Aus der Kenntnis der Beziehung zwischen Permeabilität und Porosität sowie der geometrischen Abmessungen kann der Widerstand eines Segmentes entsprechend den Ausführungen in Kapitel 5.3.2 berechnet werden.

Außer dem Strömungswiderstand der Segmente eines Grubengebäudes wird in REPOS für ein spezielles Szenario (siehe Kapitel 4.5.2) der Verschlusswiderstand einer Kaverne modelliert. Die diesbezüglichen Ansätze werden im Kapitel 5.3.3 erläutert.

5.3.1 Permeabilität von Versatzmaterial

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

Es gibt eine Reihe von Experimenten, die den Zusammenhang von Permeabilität und Porosität für Salzgrus-Proben untersucht haben [21]. Die Ergebnisse dieser Messungen legen es nahe, folgenden Ansatz für die Permeabilität k als Funktion der Porosität zu wählen:

$$k = f_p c \phi^q . \quad (87)$$

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

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

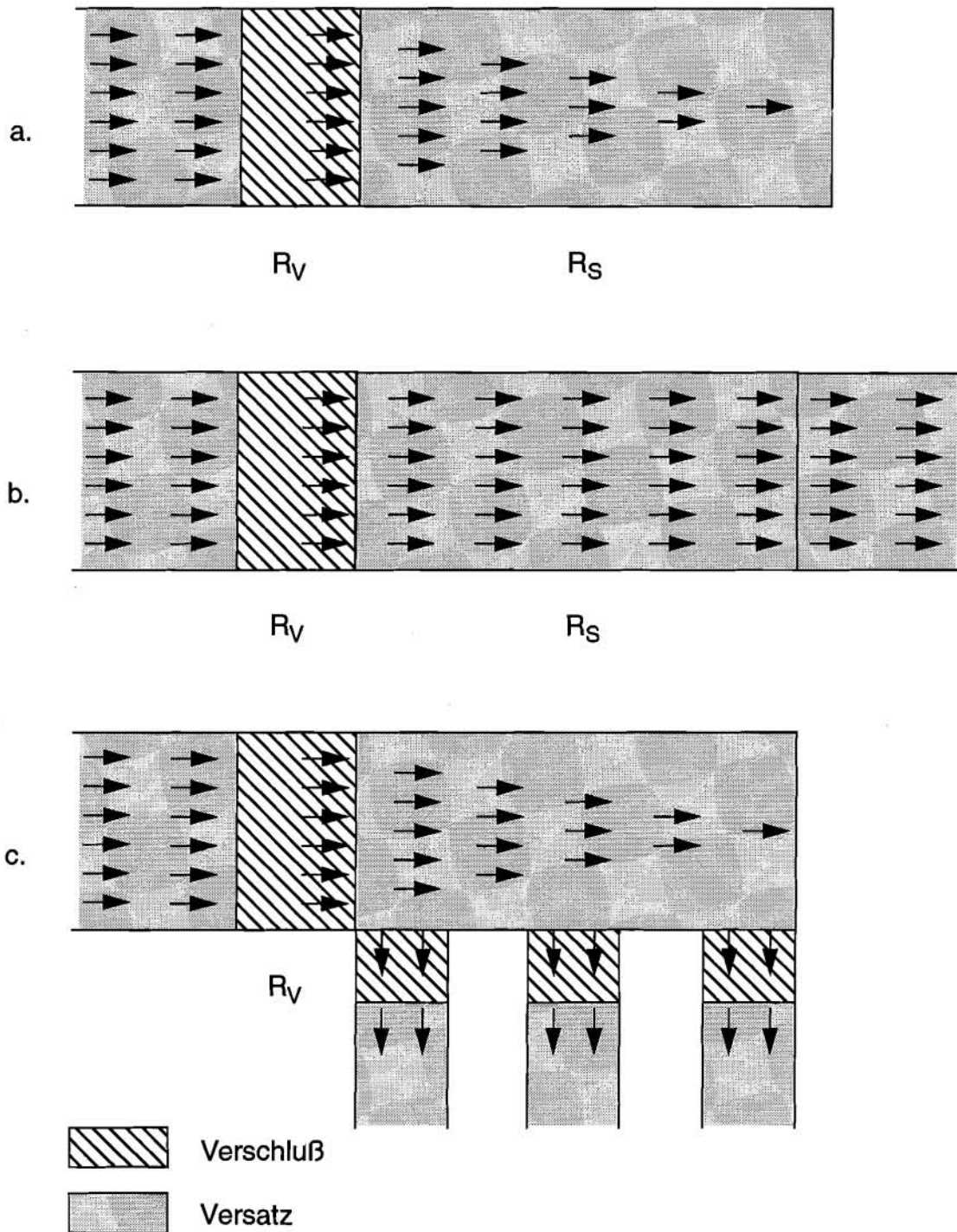


Abbildung 51: Darstellung des Laugenstromes und des Versatzwiderstandes des Segmentes j:
 a. Zuflußphase,
 b. Durchströmungsphase,
 c. Durchströmungsphase mit symmetrisch verteilten Ausgängen entlang des Segmentes.

5.3.2 Strömungswiderstand von Verschlüssen, Dämmen und versetzten Strecken

Die Strömungswiderstände R von Dämmen, Verschlüssen und Versatz lassen sich als Funktion der Permeabilität k wie folgt darstellen:

$$R = \frac{\mu L}{Ak}, \quad (88)$$

wobei μ die dynamische Viskosität, L die Länge und A den Querschnitt von Verschuß, Damm oder versetztem Hohlraum bedeuten. Der Widerstand ist also sowohl von rein geometrischen Größen (L , A , k), als auch von dynamischen Eigenschaften der Lauge abhängig (μ).

In der Zuflußphase für ein Segment (siehe Abbildung 51: a) erfährt die Lauge im Mittel nur die Hälfte des Versatzwiderstandes, da sie im Mittel nur die Hälfte des Segmentes passiert, bis das Segment aufgefüllt ist. In der Durchströmungs- und Auspreßphase (siehe Abbildung 51: b, c) erfährt die durch das Segment strömende Lauge den vollen Widerstand des Versatzes, falls sich der innere Ausgang am Ende der Strecke befindet. Sie erfährt die Hälfte des Widerstandes, falls innere Ausgänge symmetrisch entlang der Strecke verteilt sind. Da i.a. beide Fälle zugleich vorliegen, wird unter konservativen Aspekten immer mit dem halben Versatzwiderstand gerechnet.

5.3.3 Verschußwiderstand einer Kaverne

Im Segmentmodell CATOP1 für das Speichervolumen einer ausgesolten Kaverne (siehe Kapitel 4.5.2) wird die Berechnung des Laugendruckes und der Laugenströme in genau der gleichen Weise durchgeführt wie in den anderen Segmentmodellen für ein Endlager im Salz. In allen diesen Segmenten wird ein Strömungswiderstand bestimmt, der dann bei der Berechnung des Laugendruckes Verwendung findet.

Die Berechnung eines Kavernenverschlusses geht davon aus, daß der Laugendruck in der Kaverne einen maximalen Wert p_{\max} nicht überschreitet. Dieser ergibt sich aus folgenden Überlegungen: Die Lauge übt wegen der Gebirgskonvergenz nach vollständigem Füllen der Kaverne von innen einen wachsenden Druck auf den Kavernenverschluß aus, bis sich schließlich bei einem Maximaldruck p_{\max} der Verschluß öffnet und Lauge nach außen gelangen kann. Bei einer inkompressiblen Flüssigkeit wird dieser Druck momentan erreicht. Es wird weiter angenommen, daß dieser Zustand stabil ist, d.h. daß der maximale Laugendruck konstant bleibt und der geöffnete Verschluß zu einem Ausströmen von Lauge führt. Zur Realisierung dieser Randbedingung wird die Berechnung des Verschußwiderstandes der Kaverne als Funktion der dort herrschenden Verhältnisse von Laugen- und Gebirgsdruck bestimmt.

Aus der in Kapitel 5.4 hergeleiteten Beziehung zwischen Laugendruck und Strömungswiderstand wird der Widerstand so berechnet, daß der Druck den maximalen Wert beibehält. Unter

Vernachlässigung der Tiefenabhängigkeit reduziert sich die Gleichung 111 für eine Serie hintereinander angeordneter Segmente auf

$$\beta_i \left(1 - \frac{p_i}{p_G} \right)^m + R_i^{-1} (p_{i+1} - p_i) + R_{i-1}^{-1} (p_{i-1} - p_i) = 0. \quad (89)$$

Dabei bedeuten:

- β_i : Druckunabhängiger Anteil der Konvergenzrate,
- p_i : Laugendruck im Segment i,
- $p_{i\pm 1}$: Laugendruck im äußeren/inneren Segment bezüglich i,
- p_G : Gebirgsdruck,
- R_i : Widerstand des Verschlusses von Segment i,
- R_{i-1} : Widerstand des inneren Segmentes,
- m : Exponent der Beziehung zwischen Konvergenzrate und Laugendruck (siehe Gleichung 73).

Die Beziehung 89 wird im folgenden benutzt, um einen Ausdruck für den Leitwert R^{-1} zu finden, der den Laugendruck auf dem gewünschten festen Wert p_{\max} hält. Um Gleichung 89 auf das Speichervolumen einer Kaverne anzuwenden, setzt man den Druck p_i im Segment gleich dem Maximaldruck p_{\max} . Außerdem ist der Druck des äußeren Segmentes p_{i+1} mit dem festen hydrostatischen Druck p_H in der Referenzteufe zu identifizieren,

$$p_i = p_{\max}, \quad (90)$$

$$p_{i+1} = p_H. \quad (91)$$

Werden die Beziehungen 90 und 91 in 89 eingesetzt und die Gleichung nach R_i^{-1} aufgelöst, so ergibt sich

$$R_i^{-1} = \frac{\beta_i \left(1 - \frac{p_{\max}}{p_G} \right)^m + R_{i-1}^{-1} (p_{i-1} - p_{\max})}{p_{\max} - p_H}. \quad (92)$$

Der Laugendruck p_{i-1} des inneren Segmentes kann mit den Gleichungen 97 und 106 ersetzt werden durch den Laugenstrom $\dot{V}_{L,1}$, der durch die Konvergenz des Sumpfes erzeugt wird,

$$\dot{V}_{L,1} = \dot{V}^{in} = R_{i-1}^{-1} (p_{i-1} - p_{max}) \cdot \quad (93)$$

Wird diese Beziehung in Gleichung 92 eingesetzt, so ergibt sich

$$R_i^{-1} = \frac{\beta_i \left(1 - \frac{p_{max}}{p_G} \right)^m + \dot{V}_{L,1}}{p_{max} - p_H} \cdot \quad (94)$$

Alle Größen auf der rechten Seite von Gleichung 94 sind bekannt, so daß man damit den Leitwert R_i^{-1} des Kavernenverschlusses bestimmen kann.

5.4 Berechnung des Laugendrucks und der Laugenströme

Bestandteil einer Szenarienbeschreibung ist die Festlegung eines möglichen Laugenzutritts in das Endlager mit radioaktiven Abfällen. Dieser kann in den zur Verfügung stehenden Modellen auf verschiedene Weisen geschehen:

- eine Laugenmenge aus einem unbegrenzten Reservoir dringt durch eine Wegsamkeit zwischen Grundwasserleiter und Endlager, z.B. den Hauptanhydrit, in das Endlager ein und gelangt eventuell bis in die Einlagerungsorte,
- eine begrenzte Laugenmenge tritt aus einem Laugeneinschluß im umgebenden Gestein in ein Segment des Endlagers, möglicherweise direkt in einen Einlagerungsort, ein und verbreitet sich von dort aus über weitere benachbarte Segmente,
- ein Segment wird spontan mit einer bestimmten Laugenmenge gefüllt.

Die beiden letztgenannten Zutrittsmechanismen können an mehreren Stellen gleichzeitig auftreten. Der spontane Laugenzutritt beschreibt z.B. das Fluten einer Speicherkaverne nach Ende der Nutzung, wobei der zeitliche Ablauf des Flutvorganges wegen seiner im Vergleich zur Szenariendauer sehr kurzen Zeit nicht modelliert zu werden braucht.

Für jedes Segment, für das Laugendruck und Laugenströme relevant sind, gibt es eine Reihe von Phasen (Zuständen des Segments), die bei der Berechnung dieser Größen zu unterscheiden sind:

- die Trockenphase, in der das Segment keine Lauge enthält,
- die Zuflußphase, in der Lauge in das Segment eindringt und dieses noch nicht vollständig aufgefüllt ist,

- die Durchströmungsphase und die Auspreßphase, in denen das Segment mit Lauge aufgefüllt ist und durchflossen wird,
- die "Endphase", in welcher der Verschluß oder der Versatz des Segments die Endporosität erreicht haben.

In der Zuflußphase kann die Lauge entweder von einem äußeren Nachbarsegment, d.h. aus Richtung des Wurzelsegments her, oder von einem oder mehreren inneren Nachbarsegmenten her eindringen. Die Durchströmungs- und die Auspreßphase unterscheiden sich in bezug auf die Druck- und Stromberechnung nur durch die Richtung des Laugenstromes.

Der atmosphärische Druck in einem Segment ist vernachlässigbar gegenüber den auftretenden hydrostatischen und hydrodynamischen Drücken. Außerdem ist der hydrostatische Druck in einem nur zum Teil mit Lauge gefüllten Segment ebenfalls vernachlässigbar, solange die vertikale Ausdehnung des Segments klein ist (siehe Kapitel 5.4.1). Daher wird der Druck p in einem Segment, das keine Lauge enthält oder nicht vollständig mit Lauge gefüllt ist, auf $p = 0$ gesetzt.

In der Durchströmungs- und Auspreßphase existiert zwischen einem Segment und seinen Nachbarsegmenten ein Druckgefälle, wodurch ein Laugenstrom erzwungen wird. In der Durchströmungsphase reicht das Druckgefälle vom hydrostatischen Druck am Zutrittsort der Lauge bis zum Laugendruck $p = 0$ in den noch nicht gefüllten Segmenten. In der Auspreßphase wird der Druckgradient durch die Konvergenz der mit Lauge gefüllten Hohlräume erzeugt.

Hat ein Segment die Endporosität erreicht, so wird für dieses Segment die Berechnung von Laugendruck und Laugenstrom nicht mehr durchgeführt.

Für die Diskussion der Laugenströme ist es nützlich, die folgenden Begriffe einzuführen:

- Ausgang eines Segments ist immer die Seite, die dem Wurzelsegment zugewandt ist,
- Eingang eines Segments sind alle anderen Verbindungen zu Nachbarsegmenten.

Diese Bezeichnungsweise lehnt sich an die Strömungsrichtung der kontaminierten Lauge an, die im allgemeinen von den Einlagerungsorten zum Wurzelsegment gerichtet ist (Ausnahmen sind z.B. im Kapitel 4.4.2 erwähnt). Auf dieselbe Weise wird im folgenden auch das Vorzeichen der Laugenströme definiert:

- Ströme, die zum Wurzelsegment fließen, sind positiv,
- Ströme, die vom Wurzelsegment herkommen, sind negativ.

Außerdem wird für ein Segment i und seine Nachbarsegmente die folgende Bezeichnungsweise eingeführt (siehe Abbildung 52):

- Größen, die sich auf das Segment i beziehen, erhalten den Index i
- Größen, die sich auf ein relativ zu i äußeres, benachbartes Segment beziehen, erhalten den Index $k(i)$,
- Größen, die sich auf die relativ zu i inneren, benachbarten Segmente beziehen, erhalten den Index $j(i)$.

Bei einem Grubengebäude mit mehrsöhliger Einlagerung ist es erforderlich die unterschiedliche Teufe x zu berücksichtigen, in der sich die einzelnen Segmente befinden können. Das Vorzeichen von x ist so definiert, daß für alle Segmente $x < 0$ gilt und $x = 0$ die Erdoberfläche ist.

Für die Berücksichtigung der Teufenabhängigkeit ist es nützlich, ein Referenzniveau in der Teufe x_r zu definieren und alle Größen auf dieses Niveau zu beziehen. Ein einfaches Beispiel einer Segmentstruktur ist in der Abbildung 52 skizziert. Die Teufe der einzelnen Segmente wird dem Programm durch Angabe des vertikalen Abstandes Δ jedes Segmentes von der Referenztiefe mitgeteilt. Gebirgsdruck, Laugendruck und Temperatur sind im folgenden immer Funktionen der Teufe x . Für die Dichte des Salzgesteins und die Dichte der Lauge werden für alle Segmente die gleichen über die vertikale Ausdehnung des Grubengebäudes gemittelten Werte verwendet.

In jedem mit Lauge gefüllten Segment, das der Konvergenz unterliegt, gibt es zwei Anteile zur Laugenbewegung: ein Anteil, der in ein Segment hineinfließt und dieses auf der anderen Seite wieder verläßt, der zweite Anteil der Laugenbewegung kommt aus dem Segment selbst, indem durch die Verkleinerung des Hohlraumvolumens Lauge herausgepreßt wird. Dieser zweite Anteil der Laugenbewegung wird im folgenden Konvergenzstrom genannt. Er ergibt sich direkt aus der Gleichung 71 aus Kapitel 5.2, welche die Volumenverkleinerung durch Konvergenz beschreibt,

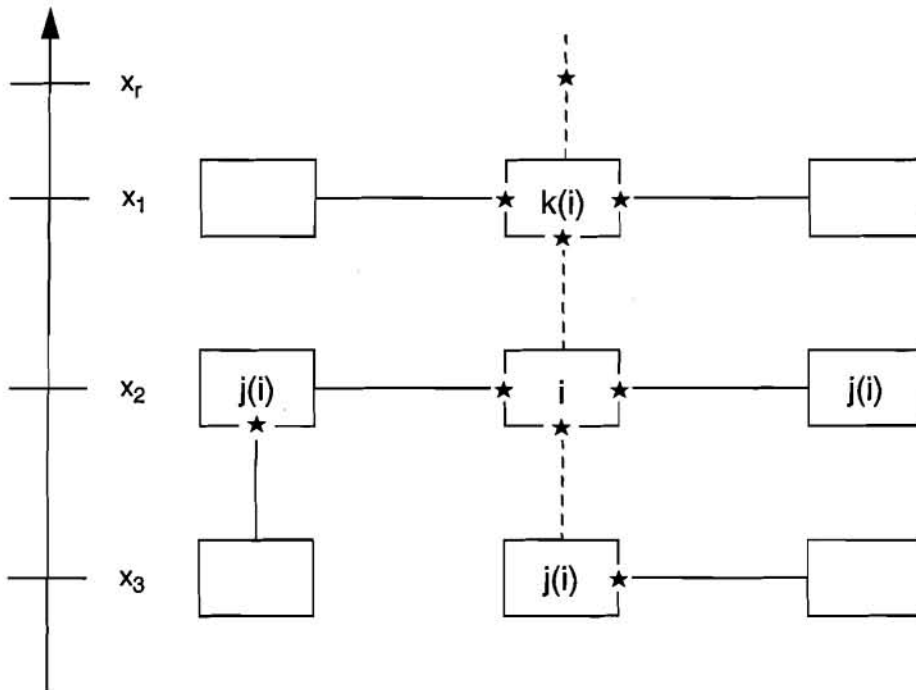


Abbildung 52: Beispiel einer Segmentstruktur.

Die Größe $k(i)$ bezeichnet das äußere Nachbarsegment eines herausgegriffenen Segments i , während die inneren Nachbarsegmente mit $j(i)$ bezeichnet sind. Die Skalierung x_1 , x_2 und x_3 deutet die unterschiedliche Teufe der Segmente an. Mit \star sind die Stellen markiert, an denen die Laugenströme berechnet werden (siehe Kapitel 5.4.3).

$$\dot{V}_i^c = -\frac{d}{dt}V_i = K(p_i, \phi_i, T_i) V_i, \quad (95)$$

wobei die Abhängigkeit der Konvergenzrate K vom Druck p , der Porosität ϕ und der Temperatur T in den Gleichungen 72 bis 75 im Kapitel 5.2.1 gegeben ist.

Für die Laugenbewegung in einem Segment i gilt die folgende Bilanzgleichung,

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = \dot{V}_i^c + \dot{V}_i^{\text{in}}, \quad (96)$$

d.h. der Laugenstrom am Ausgang (ex) des Segments i ergibt sich aus der Summe von Eingangs-Laugenstrom (in) und Konvergenzstrom (c). Der Eingangs-Laugenstrom ist im allgemeinen eine Summe von Laugenströmen, die von mehreren inneren Nachbarsegmenten kommen,

$$\dot{V}_i^{\text{in}} = \sum_{j(i)} \dot{V}_{j(i)}^{\text{ex}}, \quad (97)$$

wobei die Tatsache benutzt wurde, daß die ins Segment i einmündenden Laugenströme zugleich Ausgangs-Laugenströme der Nachbarsegmente $j(i)$ sind.

Für ein mit Versatzmaterial gefülltes und gegebenenfalls mit einem Verschuß versehenes Segment gilt das Darcy-Gesetz für die Strömung durch ein poröses Medium für den stationären Zustand in folgender Form

$$\dot{V} = \frac{kA}{\mu} \nabla p, \quad (98)$$

wobei k die Permeabilität, A die Querschnittsfläche des durchströmten Bereichs, μ die dynamische Viskosität und ∇p der Druckgradient sind.

Mit Hilfe der Beziehungen 95 bis 98 werden in den folgenden Kapiteln Gleichungen für die Druck- und die Stromberechnung in den Segmenten hergeleitet.

5.4.1 Druckberechnung im vertikal ausgedehnten Grubengebäude

Grundlegende Gleichung zur Druckberechnung ist die Strombilanz am Ausgang eines Segments,

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = \dot{V}_i^{\text{c}} + \sum_{j(i)} \dot{V}_{j(i)}^{\text{ex}}, \quad (99)$$

die sich aus den Gleichungen 96 und 97 ergibt.

Für die folgende Herleitung eines Gleichungssystem für die Berechnung der Laugendrucke und die nachfolgenden Diskussionen ist es nützlich, die der Modellierung der Segmente zugrunde liegenden Annahmen zusammenzustellen und zu ergänzen:

- Jedes Segment besitzt einen Strömungswiderstand R und einen Hohlraum V_p , der das gesamte Porenvolumen des Segments repräsentiert, welches Lauge aufnehmen kann.
- Der gesamte Strömungswiderstand wird jeweils am Ausgang eines Segments lokalisiert gedacht. Dieser gedachte Widerstand soll kein Volumen besitzen, das Lauge aufnehmen kann. Entsprechend soll der Hohlraum V_p keinen Strömungswiderstand besitzen. Aufgrund dieser Modellannahme erfährt die Lauge, die vom äußeren Segment kommt oder zum äußeren Segment fließt, stets den gesamten Strömungswiderstand des betrachteten Segments, während die Lauge, die von oder zu den inneren Nachbarsegmenten strömt, nur den entsprechenden Widerstand der inneren Nachbarsegmente erfährt.
- Der gesamte Strömungswiderstand eines Segments wird mit den in Kapitel 5.3.2 angegebenen Gleichungen berechnet, wobei neben dem gesamten Verschlusswiderstand stets nur der halbe Versatzwiderstand eines Segmentes berücksichtigt wird.
- Für die Behinderung der Konvergenz des Verschlusses durch den Laugendruck wird der Mittelwert zwischen dem Druck $p_k(x_k)$ im äußeren Segment k und dem Druck $p_i(x_i)$ im betrachteten Segment i genommen. Für die Behinderung der Konvergenz im Versatzbereich wird der lokale Laugendruck $p_i(x_i)$ verwendet.
- Der Anstieg des Laugendrucks während der Zuflußphase wird vernachlässigt. Bei Endlagern mit mehrsöhliger Einlagerung wird die vertikale Ausdehnung der Segmente in soweit berücksichtigt, daß nach dem Fluten des Segments der Laugendruck momentan auf den hydrostatischen Druck steigt, welcher der vertikalen Ausdehnung des Segments entspricht.
- Der Druckgradient in der Darcy-Gleichung wird ersetzt durch die Differenz der hydrodynamischen Drücke in benachbarten Segmenten dividiert durch die Länge des Strömungswiderstandes, über den der Druckabfall erfolgt.

Die Bilanzierung der Ströme entsprechend der Gleichung 99 erfolgt für das jeweils betrachtete Segment. Der Ausgang eines Segments ist auch bei einem mehrsöhligen Endlager zugleich einer der Eingänge des äußeren Nachbarsegments. Er befindet sich also stets in der Teufe des äußeren Nachbarsegments. Ein solches Segment wird also erst dann als vollständig geflutet bezeichnet, wenn die Lauge das äußere Nachbarsegment erreichen kann.

Um eine Gleichung für den Laugendruck in einem Segment i zu erhalten, werden im folgenden alle in der Bilanzgleichung 99 vorkommenden Ströme als Funktionen des Laugendrucke geschrieben. Hierbei ist es nützlich zunächst die Drücke in den Nachbarsegmenten auf das Niveau des betrachteten Segments zu beziehen.

Für den Konvergenzstrom ergibt sich nach Abspalten des vom Laugendruck abhängenden Faktors in der Konvergenzrate (Gleichungen 72 und 73 in Kapitel 5.2.1) aus der Gleichung 95,

$$\dot{V}_i^c = \beta(V_i, \phi_i, T_i; t) \left(\frac{p_G(x_i) - p_i(x_i)}{p_G(x_r)} \right)^m, \quad (100)$$

wobei $p_G(x_i)$ der Gebirgsdruck in der Teufe x_i des Segments i und $p_G(x_r)$ der Gebirgsdruck in der Referenzteufe x_r sind. Die Größe β ist durch

$$\beta_i = \beta(V_i, \phi_i, T_i; t) = K_r f_r f_2(\phi_i) f_3(T(x_i)) V_i \quad (101)$$

definiert, wobei das Volumen V_i , die Porosität ϕ_i und die Temperatur T_i jeweils Funktionen der Zeit t sind.

Der lokale Gebirgsdruck $p_G(x_i)$ läßt sich aus dem Referenz-Gebirgsdruck berechnen,

$$p_G(x_i) = p_G(x_r) - (x_i - x_r) \rho_S g, \quad (102)$$

wobei ρ_S die mittlere Salzgesteinsdichte und g die Erdbeschleunigung sind. Bezeichnet man den vertikalen Abstand eines Segments i vom Referenzniveau mit

$$\Delta_i = x_i - x_r, \quad (103)$$

so folgt für den Konvergenzstrom:

$$\dot{V}_i^c = \beta(V_i, \phi_i, T_i; t) \left(1 - \frac{p_i x_i + \Delta_i \rho_S g}{p_G x_r} \right)^m. \quad (104)$$

Mit dieser Gleichung kann der Konvergenzstrom aus dem Segment i als Funktion des dort herrschenden Laugendruckes $p_i(x_i)$ und durch den Abstand Δ_i des Segments vom Referenzniveau

dargestellt werden. Für den Laugen Ausgangsstrom in der Bilanzgleichung 99 ergibt sich unter Verwendung des Darcy-Gesetzes (Gleichung 98) entsprechend:

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} (p_i(x_i) - p_{k(i)}(x_i)), \quad (105)$$

wobei die Gleichung 88 aus Kapitel 5.3.2 für den Strömungswiderstand eines Segments verwendet wurde.

Für die inneren Nachbarsegmente ergibt sich entsprechend:

$$\dot{V}_{j(i)}^{\text{ex}} = R_{j(i)}^{-1} (p_{j(i)}(x_i) - p_i(x_i)), \quad (106)$$

wobei alle Drücke auf die gleiche Tiefe x_i bezogen sind. Der Zusammenhang zwischen dem auf die Tiefe x_i bezogenen Laugendruck $p_{k(i)}(x_i)$ bzw. $p_{j(i)}(x_i)$ und dem tatsächlichen Laugendruck im Segment k bzw. j ist durch die Beziehungen

$$p_{k(i)}(x_i) = p_{k(i)} + (x_{k(i)} - x_i) \rho_L g \quad (107)$$

und

$$p_{j(i)}(x_i) = p_{j(i)} + (x_{j(i)} - x_i) \rho_L g \quad (108)$$

gegeben, wobei ρ_L die mittlere Laugendichte ist.

In den Gleichungen 107 und 108 und im folgenden wird zur Vereinfachung der Darstellung die Abhängigkeit des Laugendrucks von der Tiefe nicht mehr explizit angegeben, da es sich immer um den lokalen Laugendruck handeln wird, d.h. es ist

$$p_l = p_l(x_l), \quad l = i, j(i) \text{ bzw. } k(i). \quad (109)$$

Für den Gebirgsdruck in der Referenzteufe wird abkürzend

$$p_G^r = p_G(x_r) \quad (110)$$

eingeführt.

Mit den Beziehungen 104 bis 108 folgt aus der Bilanzgleichung 99 direkt

$$\beta_i \left(1 - (p_i + \Delta_i \rho_S g) / \rho_G^r \right)^m + R_i^{-1} (p_{k(i)} - (p_i + \Delta_i \rho_L g - \Delta_{k(i)} \rho_L g)) + \sum_{j(i)} R_{j(i)}^{-1} (p_{j(i)} + \Delta_{j(i)} \rho_L g - \Delta_i \rho_L g - p_i) = 0 \quad (111)$$

wobei in Hinblick auf die folgende Diskussion der Randbedingungen die Terme mit Δ_i und Δ_k bzw. Δ_j und Δ_i bereits geeignet zusammengefaßt worden sind.

Für jedes mit Lauge gefüllte Segment wird eine Gleichung in der Form 111 aufgestellt, wodurch sich ein nichtlineares Gleichungssystem zur gleichzeitigen Berechnung der Laugendrücke in allen gefluteten Segmenten ergibt. Im folgenden wird daher stets von dem Gleichungssystem 111 gesprochen. In diesem Gleichungssystem treten Fälle auf, bei denen Nachbarsegmente $k(i)$ oder $j(i)$ noch nicht mit Lauge gefüllt sind, beziehungsweise nicht mehr mit Lauge gefüllt werden können, da Verschuß oder Versatz die Endporosität erreicht haben (siehe Einleitung zu Kapitel 5). Für diese Fälle werden im folgenden Abschnitt Randbedingungen eingeführt und diskutiert.

5.4.2 Diskussion der Randbedingungen

Mit den im vorhergehenden Kapitel zusammengestellten Modellannahmen ergibt sich für die Diskussion der Randbedingungen das folgende Bild:

- Zwei benachbarte Segmente lassen sich schematisch wie in der Abbildung 53 darstellen. Der Strömungswiderstand ist am Ausgang des Segments i lokalisiert, d.h. zwischen Segment i und Segment $k(i)$, und besitzt laut Voraussetzung kein Volumen, das Lauge aufnehmen kann. Daher kann er z.B. wie in der Abbildung 53 angegeben dargestellt werden.
- Bei einem einsöhligen Endlager ist die vertikale Ausdehnung des Hohlraums vernachlässigbar.
- Bei einem mehrsöhligen Endlager gilt die eventuell grobe Näherung, daß der Druckanstieg während des Vollaufens vernachlässigt wird. Nach dem Vollaufen steigt der Laugendruck im Segment momentan auf den hydrostatischen Druck, welcher der Laugensäule bis zum äußeren Nachbarsegment entspricht.

Bei der Diskussion der Randbedingungen ist es nützlich, zwischen den folgenden Zuständen zu unterscheiden, die ein Segment annehmen kann.

- K: In einem Segment im Zustand K werden weder Laugendruck noch Laugenströme berechnet. Ein solches Segment kann z.B. ein Abfallgebinde sein oder ein Segment, wie es durch die Modelle VQUELLE2 oder SUBROS (siehe Kapitel 4.5.1 bzw. 4.5.3) beschrieben ist. Segmente dieser Art dürfen in dem Gleichungssystem 111 nicht vorkommen.
- L: Das Segment ist leer oder nicht vollständig mit Lauge gefüllt. Segmente in diesem Zustand treten im Gleichungssystem 120 nur als Nachbarn (mit Indizes k oder j) bereits gefüllter Segmente auf.
- V: Das Segment ist gerade mit Lauge aufgefüllt worden und geht im nächsten Zeitschritt in die Durchströmungs- oder Auspreßphase über. Für dieses Segment findet eine Vorausberechnung des Laugendruckes nach der unten hergeleiteten Gleichung 130 statt.
- D: Das Segment ist in der Durchströmungsphase, die Summe der Laugenströme zu den inneren Segmenten ist < 0 , d.h. nach innen gerichtet. Einzelne Laugenströme von inneren Segmenten können schon > 0 sein.
- A: Das Segment ist in der Auspreßphase, die Summe der Laugenströme zu den inneren Segmenten ist > 0 , d.h. nach außen gerichtet. Einzelne Laugenströme zu inneren Segmenten können noch < 0 sein.
- B: Ein Segment im Zustand B repräsentiert einen Laugeneinschluß, der zu einem vorgewählten Zeitpunkt einen begrenzten Laugenzufluß in das äußere Nachbarsegment bewirkt (siehe Kapitel 4.4.1). Zu diesem Zeitpunkt geht das Segment in den Zustand V über. Es findet dann eine Druckvorausberechnung nach Gleichung 130 statt.

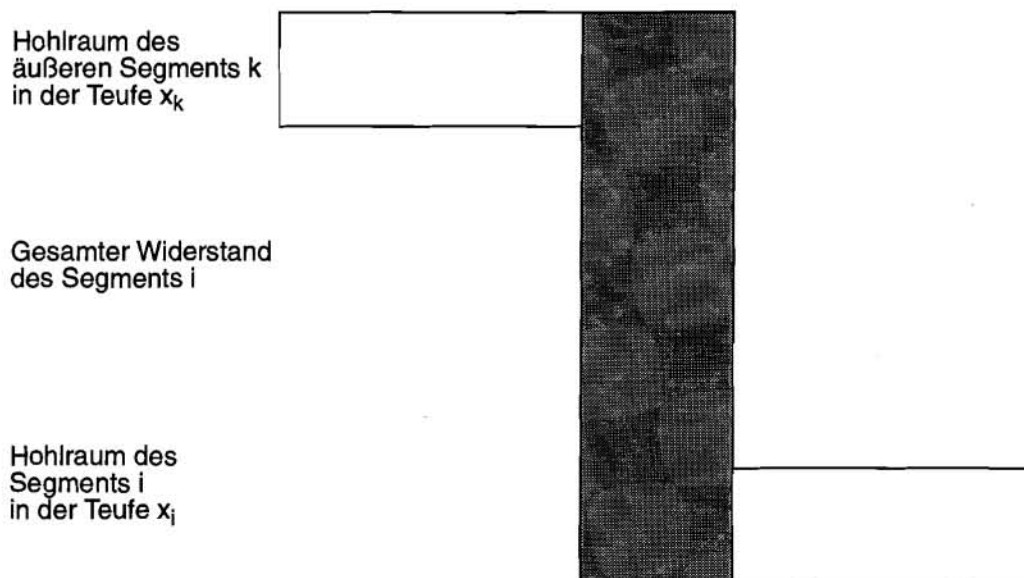


Abbildung 53: Schematische Darstellung zweier benachbarter Segmente.

E: Ein Segment im Zustand E hat die Endporosität erreicht. Alle inneren Segmente werden ebenfalls auf den Zustand E gesetzt. Alle Segmente im Zustand E werden in den weiteren Rechnungen als nicht vorhanden betrachtet. Der Leitwert R^{-1} jedes dieser Segmente wird auf 0 und der Laugendruck auf den lokalen Gebirgsdruck gesetzt.

Mit Ausnahme der Segmente im Zustand K können alle Segmente im Laufe der Zeit alle Zustände L oder B bis E durchlaufen.

In der folgenden Diskussion der Randbedingungen wird vorausgesetzt, daß das Segment mit der Nummer i vollständig mit Lauge gefüllt ist und sich im Zustand V, D oder A befindet. Für jedes dieser Segmente ist eine Gleichung in der Form 111 aufgestellt worden und alle Gleichungen zusammen bilden ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem zur Druckberechnung.

Segmente, die nicht vollständig gefüllt sind, haben den Laugendruck $p = 0$ (entsprechend obiger Voraussetzungen) und nehmen nicht direkt an der Druckberechnung teil. Sie erscheinen aber als äußeres (k) oder inneres (j) Nachbarsegment zu einem bereits gefüllten Segment in einigen der Gleichungen des Systems und machen daher die Festlegung von Randbedingungen für das Gleichungssystem 111 erforderlich.

Für die Festlegung dieser Randbedingungen werden die folgenden fünf Fälle unterschieden:

1. Eines oder mehrere innere Segmente $j(i)$ sind im Zustand B oder E.

Diese Segmente nehmen nicht an der Druckberechnung nach Gleichung 111 teil. Ihr jeweiliger Leitwert R^{-1} ist 0, so daß sie auch nicht über die Randbedingungen an die Gleichung 111 gekoppelt sind. Der Laugendruck in den Segmenten ist gleich dem lokalen Gebirgsdruck.

2. Irgendein inneres Segment $j(i)$ oder auch mehrere sind im Zustand L. Das betrachtete Segment j ist weiter unten angeordnet (siehe Abbildung 54), d.h. befindet sich in größerer Tiefe als Segment i , daher ist

$$\Delta_i - \Delta_j > 0. \quad (112)$$

Der Laugendruck im Segment j ist $p_j = 0$. Der Laugenstrom in das Segment j ist nur bestimmt durch den Druck im Segment i und durch den Leitwert R_j^{-1} des Segments j ,

$$\dot{V}_{j(i)}^{\text{ex}} = -\left(R_j^{-1} p_i\right) \leq 0. \quad (113)$$

3. Irgendein inneres Segment $j(i)$ oder auch mehrere sind im Zustand L. Das betrachtete Segment befindet sich auf der gleichen Ebene im Grubengebäude wie Segment i oder ist weiter oben angeordnet (siehe Abbildung 55), d.h.

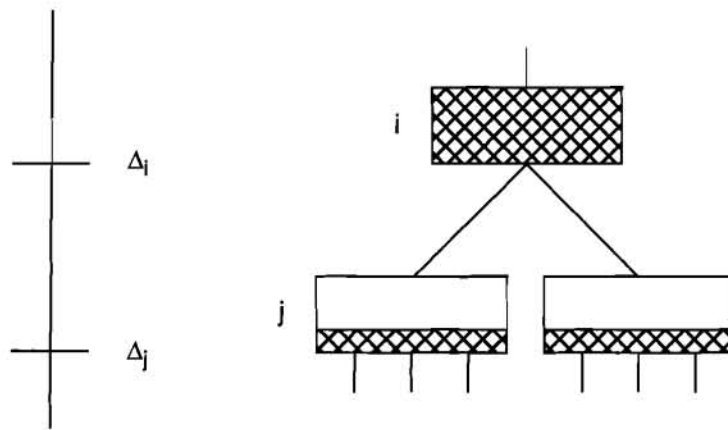


Abbildung 54: Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 2.
Das Segment i ist vollständig mit Lauge gefüllt, die Segmente j befinden sich in der Zuflußphase.

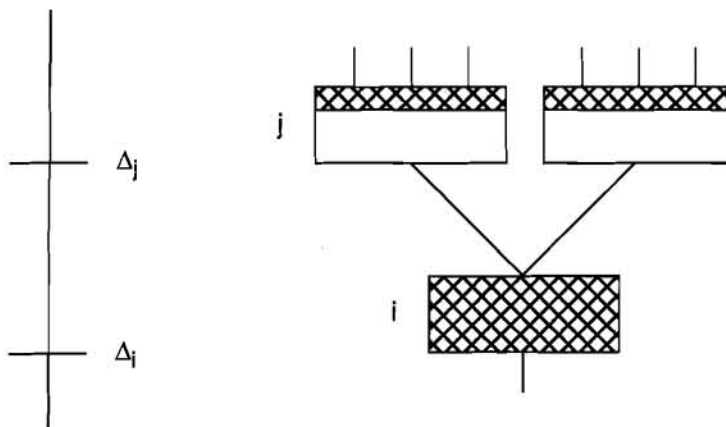


Abbildung 55: Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 3.

$$\Delta_i - \Delta_j \leq 0. \quad (114)$$

Der Laugendruck im Segment j ist $p_j = 0$. Um einen Laugenstrom in den Hohlraum des höher gelegenen Segments j zu erreichen muß der Laugendruck im Segment i die Bedingung

$$p_i \geq (\Delta_j - \Delta_i) \rho_L g > 0 \quad (115)$$

erfüllen, wobei ρ_L die mittlere Dichte der Lauge ist. Während das Segment mit Lauge aufgefüllt wird, wächst der Gegendruck am Übergang von Segment i nach j mit zunehmender Laugensäule an, bis er den Wert $(\Delta_j - \Delta_i) \rho_L g$ erreicht hat. Nach Voraussetzung (s.o.) geschieht dies innerhalb eines Zeitschritts. Der Laugenstrom aus Segment i nach j ist daher gegeben durch

$$\dot{V}_{j(i)}^{\text{ex}} = -R_j^{-1} (p_i + (\Delta_i - \Delta_j) \rho_L g) \leq 0 \quad (116)$$

Beide Beziehungen für den Laugenstrom (113 und 116) lassen sich zusammenfassen, wenn man die Größe Δ_{ij} wie folgt definiert:

$$\Delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } \Delta_i - \Delta_j > 0 \\ \Delta_i - \Delta_j & \text{für } \Delta_i - \Delta_j \leq 0 \end{cases} \quad (117)$$

Da nach Voraussetzung $p_j = 0$ ist, läßt sich der Laugenstrom in das Segment j damit schreiben als

$$\dot{V}_{j(i)}^{\text{ex}} = R_j^{-1} (p_j - p_i - \Delta_{ij} \rho_L g) \quad (118)$$

4. Ein äußeres Nachbarsegment $k(i)$ ist im Zustand L. Dieses Segment befindet sich auf der gleichen Ebene im Grubengebäude wie Segment i oder ist weiter oben angeordnet (siehe Abbildung 56), d.h.

$$\Delta_i - \Delta_k \leq 0 \quad (119)$$

Der Laugendruck im Segment k ist $p_k = 0$. Um einen Laugenstrom in den Hohlraum des höher gelegenen Segments k zu erreichen, muß der Laugendruck im Segment i die Bedingung

$$p_i \geq (\Delta_k - \Delta_i) \rho_L g > 0 \quad (120)$$

erfüllen. Mit Modellannahmen aus Kapitel 5.4.1 ist diese Bedingung immer erfüllt, wenn Segment i vollständig mit Lauge gefüllt ist.

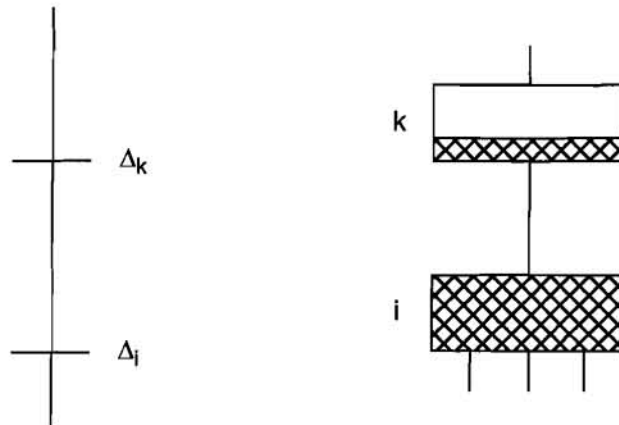


Abbildung 56: Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 4.

Der Laugenstrom aus Segment i nach k wird bestimmt durch die Druckdifferenz am Übergang ins Segment k. Er ist somit gegeben durch

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} (p_i + (\Delta_i - \Delta_k) \rho_L g) \geq 0. \quad (121)$$

5. Ein äußeres Nachbarsegment $k(i)$ ist im Zustand L. Dieses Segment ist weiter unten angeordnet als Segment i (siehe Abbildung 57), d.h.

$$\Delta_i - \Delta_k > 0. \quad (122)$$

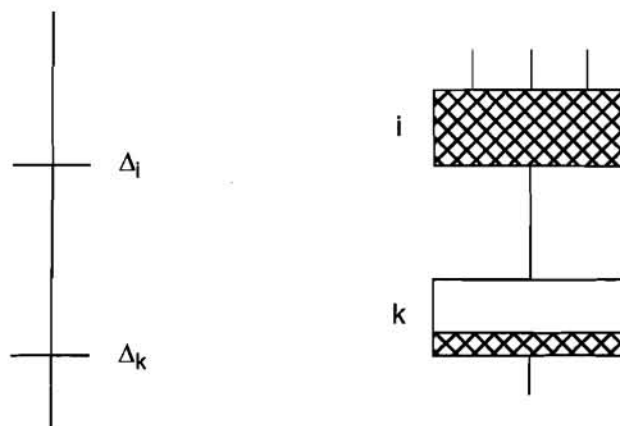


Abbildung 57: Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 5.

Der Laugendruck im Segment k ist $p_k = 0$. Der Laugenstrom in das Segment k ist nur bestimmt durch den Druck im Segment i und durch den Leitwert des Segments i (R_i^{-1})

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} p_i > 0 . \quad (123)$$

Beide Beziehungen für den Laugenstrom 121 und 123 lassen sich zusammenfassen, wenn man die Größe Δ_{ik} wie folgt definiert:

$$\Delta_{ik} = \begin{cases} 0 & \text{für } \Delta_i - \Delta_k > 0 \\ \Delta_i - \Delta_k & \text{für } \Delta_i - \Delta_k < 0 \end{cases} . \quad (124)$$

Da nach Voraussetzung $p_k = 0$ ist, läßt sich der Laugenstrom in das Segment k damit schreiben als

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = -R_i^{-1} \left(p_k - p_i - \left(\Delta_{ij} \rho_L g \right) \right) . \quad (125)$$

Im folgenden wird eine Vorbelegung der Größe Δ_{ik} für alle Segmente eingeführt, so daß die Segmente die Randbedingungen erfüllen, wenn sie im Gleichungssystem als irgend ein Segment k, i oder j vorkommen.

Hierzu wird die folgende Definition vorgenommen:

- Sei l die Nummer eines beliebigen Segments und m die Nummer des zu l benachbarten äußeren Segments (wegen der Baumstruktur gibt es immer nur ein äußeres Segment!), dann wird zu jedem Zeitschritt die Größe Δ_{lm} wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \Delta_{lm} &= 0 && \text{falls das Segment l im Zustand L ist} \\ &&& \text{und } (\Delta_l - \Delta_m \leq 0) \text{ gilt,} \\ \Delta_{lm} &= 0 && \text{falls das Segment m im Zustand L ist} \\ &&& \text{und } (\Delta_l - \Delta_m \geq 0) \text{ gilt,} \\ \Delta_{lm} &= \Delta_l - \Delta_m && \text{sonst.} \end{aligned} \quad (126)$$

Zur Verifikation des Ansatzes 126 wird die folgende Kontrolle durchgeführt:

Das Gleichungssystem 111 sei für alle gefluteten Segmente aufgestellt. Kommt das Segment l nicht im Gleichungssystem 111 vor (weder als i , noch als k , noch als j), so wird die Größe Δ_{lm} nicht benötigt, d.h. Δ_{lm} kann beliebig definiert sein,

Kommt das Segment l in einer der Gleichungen 111 vor, so gibt es folgende Möglichkeiten:

- $l = k, \Rightarrow m$ kommt dann nicht vor und damit kann Δ_{lm} beliebig sein,

- $l = i, \Rightarrow m = k$:

Ist k vollständig geflutet, so gilt Gleichung 111 ohne Einschränkung, andernfalls ist das Segment k im Zustand L und die Bedingungen 124 für Fall 4 und 5 sind erfüllt.

- $l = j, \Rightarrow m = i$:

Ist j vollständig geflutet, so gilt Gleichung 111 ohne Einschränkung, andernfalls ist das Segment j im Zustand L und die Bedingungen 117 für Fall 2 und 3 sind erfüllt.

Die Gleichung 111 läßt sich mit der Definition für Δ_{ik} schreiben als

$$\beta_i \left(1 - (p_i + \Delta_i \rho_S g) / p_G^r \right)^m + R_i^{-1} \left(p_k - (p_i + \Delta_{ik} \rho_L g) \right) + \sum_j R_j^{-1} (p_j - \Delta_{ij} \rho_L g - p_i) = 0 \quad (127)$$

Diese Gleichung gilt für alle mit Lauge gefüllten Segmente, auch wenn die Nachbarsegmente nicht vollständig mit Lauge gefüllt sind. Die Randbedingungen sind automatisch erfüllt, wenn für alle Segmente die obigen Anfangsbelegungen 126 durchgeführt worden sind.

Für jedes mit Lauge gefüllte Segment wird eine Gleichung der Form 127 aufgestellt. Das sich ergebende nichtlineare Gleichungssystem wird im Programm DRUCK2 zu jedem Zeitschritt mit Hilfe des Newton-Verfahrens iterativ gelöst, wobei die Laugendrucke p aus dem vorherigen Zeitschritt als Startwerte dienen. Eine besondere Behandlung ist für solche Segmente erforderlich, die gerade mit Lauge aufgefüllt wurden (Zustand V), da der Laugendruck vom vorherigen Zeitschritt $p = 0$ ist. Für ein solches Segment wird der Laugendruck mit Hilfe der im folgenden abgeleiteten Gleichung vorausberechnet.

Im Zeitpunkt des Vollaufens ist der Laugenstrom, der in das Segment von einem äußeren bzw. inneren Segment hereinfließt, genau gleich dem Laugenstrom, der aus dem Segment in ein inneres bzw. äußeres Segment hinausfließt. Es gibt noch keinen zusätzlichen Laugenstrom durch Konvergenz, d.h.

$$\dot{V}_i^{ex} = \sum_j \dot{V}_{j(i)}^{ex}, \quad (128)$$

bzw. mit den Gleichungen 125 und 118 gilt

$$-R_i^{-1} (p_k - p_i - \Delta_{ik} \rho_L g) = \sum_j R_j^{-1} (p_j - p_i - \Delta_{ij} \rho_L g) . \quad (129)$$

Aufgelöst nach p_i erhält man hieraus

$$p_i = \left[R_i^{-1} (p_k - \Delta_{ik} \rho_L g) + \sum_j R_j^{-1} (p_j - \Delta_{ij} \rho_L g) \right] \cdot \left[R_i^{-1} + \sum_j R_j^{-1} \right]^{-1} , \quad (130)$$

wobei die obigen Randbedingungen gelten. Der vorausberechnete Wert dient als Startwert in der iterativen Druckberechnung.

5.4.3 Berechnung der Laugenströme

Laugenströme in unvollständig gefüllte Segmente wurden bereits im vorangehenden Kapitel im Zusammenhang mit den Randbedingungen diskutiert. Im folgenden werden universell verwendbare Gleichungen für die Laugenströme hergeleitet. Diese werden im folgenden für alle Segmente angewendet, die sich im Zustand L, V, D, A oder B befinden. Obwohl ein Segment im Zustand L eventuell noch keine Lauge enthält und eventuell auch noch keine Lauge zufließt, wird ein Laugenstrom aus dem folgenden Grund trotzdem immer berechnet:

- Die Abarbeitung der Segmente im Programm REPOS erfolgt immer von innen nach außen. Angenommen ein äußeres Segment k wird zu einem bestimmten Zeitpunkt gerade mit Lauge gefüllt, d.h. der Zustand des Segments k ist V, so hat das innere Nachbarsegment i noch den Zustand L für leer, da bei der Abarbeitung dieses Segments i das Segment k noch nicht gefüllt war. Die für alle Segmente zugleich durchgeführte Druckberechnung ergibt einen Druckanstieg im vollen Segment k , folglich muß auch die Stromberechnung bereits einen Laugenzufluß nach i ergeben.

Bei der Aufstellung der Gleichungen für die Laugenströme sind wieder eine Reihe von Fällen zu unterscheiden, die im Anschluß diskutiert werden (bzgl. Zustand der Segmente siehe Kapitel 5.4.2).

Leere und durch einen spontanen Laugenzutritt unvollständig gefüllte Segmente werden genauso behandelt, wie Segmente bei denen ein Laugenzufluß erfolgt. Weiterhin werden alle vollständig gefüllten Segmente gleich behandelt. Daher werden bei der Aufstellung der Gleichungen für die Laugenströme zunächst zwei Gruppen von Segmenten unterschieden:

- leere oder unvollständig gefüllte Segmente, d.h. Segmente im Zustand L,
- vollständig mit Lauge gefüllte Segmente, d.h. Segmente im Zustand V, D, A oder B.

Für den Druckaufbau während der Flutung wurde vorausgesetzt, daß der Druck "momentan" auf den der Laugensäule steigt. Die Laugenströme von einem Segment in ein Nachbarsegment werden nach dem Darcy-Gesetz durch den Druckgradienten bestimmt.

Für einen Zufluß von außen gilt:

- Ist ein Segment leer oder nur teilweise gefüllt, so ist der Laugendruck im Hohlraum des Segments null. Ist das Segment tiefer (oder gleich tief) angeordnet als das äußere Nachbarsegment, so fehlt eine Laugensäule zum äußeren Segment. Ist das Segment höher angeordnet, so gilt nach Voraussetzung für die Druckberechnung, daß beim Laugenzufluß in den Hohlraum bereits ein Gegendruck der Laugensäule vorhanden ist.

Für einen Zufluß von innen gilt:

- Ist ein inneres, tiefer gelegenes Segment gefüllt, so muß der Laugendruck in dem inneren Segment mindestens gleich dem Druck durch das Gewicht der Laugensäule sein, damit ein Zufluß in das äußere Segment stattfinden kann.

Bei der Berechnung der Laugenströme wird immer vorausgesetzt, daß die Verbindung zweier Segmente d.h. der in Abbildung 53 dargestellte Widerstand, zum inneren Segment gehört. Die Stromberechnung erfolgt an den in der Abbildung 52 mit ★ gekennzeichneten Punkten. Dies gilt auch dann, wenn das innere Segment eventuell höher angeordnet ist als das äußere. Der Druckgradient am Punkt ★ bestimmt sich damit aus dem Laugendruck im Hohlraum des betreffenden Segments, der dann je nach Anordnung der Segmente um das Gewicht der Laugensäule vermindert oder erhöht wird, und dem Laugendruck im Hohlraum des äußeren Nachbarsegments.

Im folgenden werden zunächst die allgemeinen Stromgleichungen nach dem Darcy-Gesetz aufgestellt und die für die Randbedingungen bei der Druckberechnung definierte Größe Δ_{ik} eingeführt. Anschließend werden die einzelnen Fälle unterschiedlicher Anordnung der Nachbarsegmente diskutiert.

Unter der Annahme, daß sowohl das Segment i als auch seine Nachbarsegmente mit Lauge gefüllt sind, ist der Strom vom äußeren Nachbarsegment k(i) in das Segment i bzw. aus dem Segment i zum äußeren Segment k gegeben durch

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} ((p_i + (\Delta_i - \Delta_k) \rho_L g) - p_k), \quad (131)$$

wobei ex für von außen oder nach außen steht. Der Strom vom Segment i in die inneren Nachbarsegmente j(i) bzw. von den inneren Segmenten j = j(i) zum Segment i ist gegeben durch

$$\dot{V}_i^{\text{in}} = \sum_j \dot{V}_i = \sum_j R_j^{-1} ([p_j + (\Delta_j - \Delta_i) \rho_L g] - p_i), \quad (132)$$

wobei $\underline{\Delta}$ für nach innen oder von innen steht. Der Konvergenzstrom des Segments i ist gegeben durch

$$\dot{V}_i^c = \dot{V}_i^{\text{ex}} - \dot{V}_i^{\text{in}}. \quad (133)$$

Im folgenden wird verifiziert, daß mit der Vorbelegung von Δ_{ik} , wie sie für die Druckberechnung in 126 gewählt wurde, alle möglichen Fälle für die Laugenströme richtig wiedergegeben werden. Hierbei genügt es, den Laugenstrom von oder nach dem äußeren Nachbarsegment zu diskutieren.

Setzt man Δ_{ik} in die Gleichungen 131 und 132 ein, so folgt

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} ([p_i + \Delta_{ik}\rho_L g] - p_k), \quad (134)$$

und

$$\dot{V}_i^{\text{in}} = \sum_j \dot{V}_j^{\text{ex}} = \sum_j R_j^{-1} ([p_j + \Delta_{ji}\rho_L g] - p_i). \quad (135)$$

In der Gleichung 134 sind die folgende Fälle zu unterscheiden:

- 1: Segment k und Segment i sind im Zustand V, D oder A,
- 2: Segment k ist im Zustand V, D oder A, Segment i ist im Zustand L,
- 3: Segment k ist im Zustand L, Segment i ist im Zustand V, D oder A,
- 4: Segment k und Segment i sind im Zustand L.

In jedem dieser Fälle kann Segment k höher (a) oder tiefer (b) als Segment i angeordnet sein. Sind beide Segmente in der gleichen Tiefe, so ist $\Delta_{ik} \equiv 0$ und eine Fallunterscheidung bzgl. des Zustands entfällt.

1a: Nach Definition 126 ist

$$\Delta_{ik} = \Delta_i - \Delta_k < 0.$$

Gleichung 134 stimmt mit Gleichung 131 überein.

1b: Nach Definition 126 ist

$$\Delta_{ik} = \Delta_i - \Delta_k > 0.$$

Gleichung 134 stimmt mit Gleichung 131 überein.

2a: Nach Definition 126 ist

$$\Delta_{ik} = 0$$

und außerdem

$$p_i = 0.$$

Gleichung 134 vereinfacht sich zu

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = -R_i^{-1} p_k < 0.$$

2b: Nach Definition 126 ist

$$\Delta_{ik} = \Delta_i - \Delta_k > 0$$

und außerdem

$$p_i = 0.$$

Gleichung 134 vereinfacht sich zu

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} (\Delta_{ik} \rho_L g - p_k) \leq 0, \quad \text{da} \quad p_k \geq \Delta_{ik} \rho_L g > 0,$$

d.h. aufgrund des Gegendrucks durch das Gewicht der Laugensäule wird der Laugenstrom durch einen verkleinerten Druckgradienten bestimmt.

3a: Nach Definition 126 ist

$$\Delta_{ik} = \Delta_i - \Delta_k < 0$$

und außerdem

$$p_k = 0.$$

Gleichung 134 vereinfacht sich zu

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} (p_i + \Delta_{ik} \rho_L g) \geq 0, \quad \text{da} \quad p_i \geq -\Delta_{ik} \rho_L g$$

d.h. der Druckgradient ergibt sich aus dem um einen dem Gewicht der Laugensäule entsprechenden Betrag verminderten Druck am Punkt ★.

3b: Nach Definition 126 ist

$$\Delta_{ik} = 0$$

und außerdem

$$p_k = 0.$$

Gleichung 134 vereinfacht sich zu

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = R_i^{-1} p_i \geq 0.$$

d.h. der Strom wird allein durch den Druck im Segment i bestimmt.

4: Nach Definition 126 ist in beiden Fällen a und b

$$\Delta_{ik} = 0$$

und außerdem

$$p_k = 0,$$

$$p_i = 0.$$

Gleichung 134 vereinfacht sich zu

$$\dot{V}_i^{\text{ex}} = 0.$$

Aus den vorausgehenden Betrachtungen folgt, daß mit der Definition 126 für alle Anordnungen der Segmente und alle Zustände, für die eine Druck- und Stromberechnung erfolgt, der Laugenstrom mit Hilfe der Gleichungen 134 und 135 zu berechnen ist.

In der Gleichung 133 für den Konvergenzstrom sind die folgenden Fälle zu unterscheiden:

- Für Segmente im Zustand L existiert kein konvergenzbedingter Laugenstrom, d.h. $\dot{V}_i^c = 0$.
- Für Segmente im Zustand V, D oder A berechnet sich der Konvergenzstrom nach Gleichung 133.

Neben den bisher diskutierten Fällen gibt es noch zwei Spezialfälle, und zwar: ein betrachtetes Segment befindet sich im Zustand B oder E.

In beiden Fällen erfolgt keine Stromberechnung. Findet ein begrenzter Laugenzutritt statt, so geht das Segment, das den Laugeneinschluß repräsentiert, in den Zustand V über. Die Stromberechnung erfolgt dann wie oben angegeben. Segmente im Zustand E sind vom Gleichungssystem für die Druckberechnung abgekoppelt. Für diese Segmente werden außer dem radioaktiven Zerfall für eine eventuelle Kontrollrechnung (siehe Kapitel 2.3.3.2 und Einleitung zu Kapitel 5) keine Berechnungen mehr durchgeführt.

5.5 Gasproduktion

Eingelagerte Abfallgebinde haben i.a. als Behältermaterial oder im Abfall Bestandteile aus Metall. Nach einem Laugenzutritt in einen Einlagerungsort sind zunächst die Behälter und später auch die evtl. im Abfall enthaltenen Metallteile der Korrosion ausgesetzt. Der Korrosionsprozeß ist mit einer Wasserstoffgasproduktion verbunden. Die in Kapitel 5.5.1 beschriebene Gasproduktion durch Korrosion wird in den Mobilisierungsmodellen gerechnet (siehe Kapitel 3) und die berechneten Gasströme an die zugehörigen Segmentmodelle der Einlagerungsorte weitergegeben.

Der radioaktive Zerfall von eingelagerten Nukliden setzt Energie in Form von Strahlung frei, welche die umgebende Lauge radiolytisch zersetzt. Dabei entstehen Wasserstoff und Sauerstoff. Die Gasproduktion durch Radiolyse wird in Kapitel 5.5.2 beschrieben. Die Berechnung der Gasproduktion durch Radiolyse erfolgt für das nichtmobilisierte Nuklidinventar in den Mobilisierungsmodellen und ansonsten in den Segmentmodellen.

Die Gasproduktion durch Korrosion und Radiolyse wird nur für vollständig mit Lauge gefüllte Segmente gerechnet. Eine Gasproduktion in erst teilweise mit Lauge gefüllten Segmenten führt zu keinem Laugenaustausch und ist damit für den Aktivitätstransport ohne Bedeutung.

5.5.1 Gasproduktion durch Korrosion

Kommen die metallischen Bestandteile von Abfallgebinden mit Lauge in Kontakt, so werden diese korrodiert. Bei diesem Prozeß entsteht Wasserstoffgas. Eine Korrosion durch eventuell vorhandene Restfeuchte im umgebenden Gestein wird vernachlässigt. Der Beginn der Korrosion ist dann der Zeitpunkt des Laugenzutrittes t_L in das entsprechende Segment. Es wird ab diesem Zeitpunkt eine linear in der Zeit abnehmende Korrosionsrate angenommen:

$$\dot{m}(t) = \begin{cases} \dot{m}_0 \left(1 - \frac{t-t_L}{t_K} \right) & \text{falls } t_L \leq t \leq t_L + t_K \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (136)$$

Die Bedeutung der verwendeten Größen ist:

t_L : Beginn der Korrosion, bzw. Zutrittszeitpunkt von Lauge,

t_K : Dauer der Korrosion,

\dot{m}_0 : Anfangskorrosionsrate ($\dot{m}_0 = \dot{m}(t = t_L)$).

Die Dauer der Korrosion wird aus der zu Beginn vorliegenden Metallmasse $m_0 = m(t=t_L)$ und der Anfangskorrosionsrate berechnet, so daß zum Zeitpunkt $t_L + t_K$ alle Metallteile korrodiert sind,

$$t_K = 2 \frac{m_0}{\dot{m}_0}. \quad (137)$$

Die Abbildung 58 zeigt die Korrosionsrate und die korrodierte Metallmasse als Funktion der Zeit. Die korrodierte Metallmasse erhält man als Integral über die Korrosionsrate. Da die Rate linear von der Zeit abhängt (siehe Gleichung 137), ergibt sich für die Masse eine quadratische Zeitabhängigkeit.

Das pro Zeit produzierte Korrosionsgasvolumen \dot{V}_G ist proportional zur Korrosionsrate $\dot{m}(t)$

$$\dot{V}_G = f_K(T, p) \dot{m}(t) . \quad (138)$$

Der Faktor $f_K(T, p)$ beschreibt in vereinfachter Form, wie sich das Volumen des gebildeten Gases entsprechend den Temperatur- und Druckverhältnissen einstellt. Er lässt sich durch folgende Temperatur- und Druckabhängigkeit beschreiben:

$$f_K(T, p) = c_K \frac{T}{p} \quad (139)$$

wobei c_K eine Konstante ist, die das Gasvolumen für die aktuellen Werte von Druck und Temperatur bestimmt. Die Konstante c_K ist auf die Temperatur T_0 und den Druck p_0 normiert.

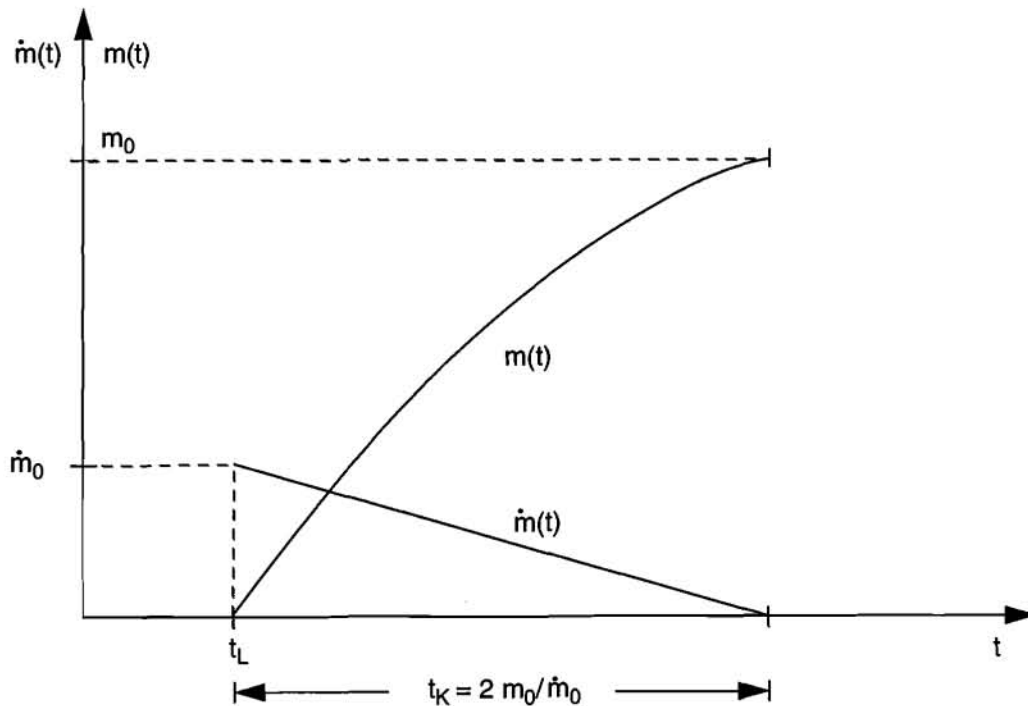


Abbildung 58: Korrosionsrate und korrodierte Metallmasse als Funktion der Zeit. Die verwendeten Größen sind:

- $\dot{m}(t)$: Korrosionsrate zur Zeit t ,
- \dot{m}_0 : Anfangskorrosionsrate,
- $m(t)$: korrodierte Metallmasse zur Zeit t ,
- m_0 : eingelagerte Metallmasse,
- t_K : Dauer der Korrosion.

t_L : Zeitpunkt des Laugenzutrittes in den Einlagerungsort

Die Gasproduktion wird für jedes Abfallgebäude so lange gerechnet, bis alle Metallbestandteile korrodiert sind, oder bis das Gebäude durch Erreichen der Endporosität abgetrennt wurde, so daß keine Nuklide mehr aus dem Gebäude ins Deckgebirge gelangen können.

5.5.2 Gasproduktion durch Radiolyse

Der Zerfall der Radionuklide setzt Energie in Form von Strahlung frei, welche die umgebende Lauge radiolytisch zersetzt. Dabei bilden sich gasförmiger Wasserstoff und Sauerstoff. Eine Reihe von Effekten sind mit der Gasproduktion gekoppelt, können aber aufgrund ihrer Komplexität nicht berücksichtigt werden:

- Verbrauch von Sauerstoff zur Oxidation von Chlorid-Ionen und eventuell von Metallteilen,
- Verbleib eines Teiles des produzierten Gases in der Lauge,
- Rekombination in der Gasphase,
- Diffusion eines Teiles des Gases in das umgebende Gestein.

Alle diese Effekte haben die gemeinsame Eigenschaft, die Gasproduktion zu vermindern. Im Rahmen einer konservativen Modellierung können sie daher vernachlässigt werden.

Die Menge des erzeugten Radiolysegases hängt von der Energie ab, die in Form ionisierender Strahlen bei dem Zerfall der Nuklide frei wird. Im folgenden soll das so erzeugte Gasvolumen aus der in einem Segment vorliegenden Aktivität bestimmt werden. Dazu wird zunächst die mit dem radioaktiven Zerfall verknüpfte Energiefreisetzung \dot{Q} über Konversionsfaktoren $h_{Q,i}$ berechnet:

$$\dot{Q}^{\alpha} = \sum_{i}^{(\alpha)} A_i h_{Q,i} \quad (\text{Summe über alle Nuklide mit } \alpha\text{-Zerfall}), \quad (140)$$

$$\dot{Q}^{\beta,\gamma} = \sum_{i}^{(\beta,\gamma)} A_i h_{Q,i} \quad (\text{Summe über alle Nuklide mit } \beta, \gamma\text{-Zerfall}). \quad (141)$$

Die Nuklidsumme ist dabei jeweils auf diejenigen i Nuklide reduziert, die α -Strahlung, bzw. β -, γ -Strahlung emittieren. Es hat sich gezeigt, daß ein Energiebetrag durch α -Strahlung zu einer höheren Gasproduktion führen kann, als derselbe Energiebetrag durch β - oder γ -Strahlung. Dies ist der Grund für die Aufteilung der Nuklidsumme in α - und β -, γ -Strahler.

Zur Umrechnung der \dot{Q}^{α} und $\dot{Q}^{\beta,\gamma}$ in Gasproduktionsraten \dot{V}_G führt man G-Faktoren ein, welche die Anzahl der Gasmoleküle angeben, die pro Energieeinheit absorbierter Strahlung entstehen. Aufgrund des höheren Energietransfers sind die G-Faktoren bei α -Strahlung deutlich größer als bei β -, γ -Strahlung.

Zur Bestimmung der Gasproduktionsrate werden zwei unterschiedliche Vorgehensweisen gewählt, die beide zu einer konservativen Abschätzung führen:

1. Die gesamte freiwerdende Strahlung trägt zur Gasproduktion bei, wobei die Energie nur von der Lauge aufgenommen wird. Man verwendet in diesem Fall G-Faktoren, die für reine Lauge gelten und nicht für das vorliegende Lauge-Versatzgemisch.
2. Die Eigenschaften des porösen Mediums werden explizit berücksichtigt. Man nimmt an, daß ein Teil der Strahlung in der Lauge und der Rest von dem Versatz absorbiert wird. Durch Energietransfer trägt ein Teil der im Versatz absorbierten Strahlung zur radiolytischen Zersetzung der umgebenden Lauge bei.

Im ersten Fall ergibt sich folgende Gasproduktionsrate [21]:

$$\dot{V}_{G1} = f_R(T, p) [G^\alpha \dot{Q}^\alpha + G^{\beta, \gamma} \dot{Q}^{\beta, \gamma}], \quad (142)$$

wobei

$$f_R(T, p) = c_R \frac{T}{p} \quad (143)$$

die Temperatur- und Druckabhängigkeit der Gasproduktion berücksichtigt. Hierbei sind T die Temperatur, p der Druck und c_R eine Konstante, welche die Gasvolumina für die aktuellen Wert von T und p bestimmt.

Die in Gleichung 142 berechnete Gasproduktionsrate beruht auf der konservativen Annahme, daß die produzierte Strahlung vollständig in der Lauge absorbiert wird. Diese Annahme führt insbesondere bei kleinen Porositäten zu einer erheblichen Überschätzung der Gasproduktion. In der zweiten Näherung wird daher berücksichtigt, daß nur ein Teil der Strahlung in der Lauge, der Rest aber im Festkörper absorbiert wird.

Der Anteil der Strahlung, der in der Lauge absorbiert wird, ist näherungsweise durch das Verhältnis der Laugenmasse zur Gesamtmasse gegeben. Der Anteil der vom Festkörper aufgenommenen Strahlungsenergie ist dann der Rest, von dem durch Energietransfer ein Teil wieder zur radiolytischen Zersetzung der Lauge beiträgt. Die Gasproduktion wird damit aus dem Anteil der direkt absorbierten Strahlung und demjenigen aus dem Energietransfer verursacht.

Würde man die aus dem ersten Fall verwendeten G-Faktoren auch für den Energietransfer anwenden, so wäre die Gasproduktionsrate zu gering. Es werden daher sogenannte Transfer-G-Faktoren G_{trans} verwendet, die einen höheren Wert als die normalen G-Faktoren aufweisen. Sie werden experimentell ermittelt [21]. Es ergibt sich damit eine zweite konservative Abschätzung der Gasproduktionsrate:

$$\dot{V}_{G2} = f_R(T, p) q(\phi, \delta\rho) G_{\text{Trans}}(\dot{Q}^\alpha + \dot{Q}^{\beta, \gamma}). \quad (144)$$

Dabei ist q der Quotient aus der Masse der Lauge m_L und der Gesamtmasse m_{ges} . Er läßt sich als Funktion der Porosität ϕ und des Verhältnisses $\delta\rho$ von spezifischer Dichte der Lauge ρ_L und Versatzmaterial ρ_S ausdrücken. Aus

$$\delta\rho = \frac{\rho_L}{\rho_S} \quad (145)$$

ergibt sich:

$$q(\phi, \delta\rho) = \frac{m_L}{m_{\text{ges}}} = \frac{\phi\delta\rho}{1 - \phi(1 - \delta\rho)}. \quad (146)$$

Im Unterschied zur ersten konservativen Abschätzung 142 ist in Gleichung 144 die Abhängigkeit der Gasproduktion von der Porosität durch Gleichung 146 berücksichtigt. Die Gleichung 144 gilt insbesondere für kleine Werte der Porosität, also für den Fall, daß viel Versatz vorliegt.

Die Funktion $f_R(T,p)$ in Gleichung 144 berücksichtigt die Temperatur- und Druckabhängigkeit der Produktionsrate und berechnet sich nach Gleichung 143.

Da die Gleichungen 142 und 144 beide konservative Abschätzungen darstellen, ist

$$\dot{V}_G^L = \min(\dot{V}_{G1}, \dot{V}_{G2}) \quad (147)$$

sicher die bessere der beiden Abschätzungen.

Alle bisherigen Betrachtungen zur Radiolysegasproduktion beziehen sich auf Materialien, die von Lauge durchdrungen sind oder für die ein Durchdringen mit Lauge nicht ausgeschlossen werden kann. Diese sind Versatzmaterialien und die Matrix der zementierten Abfälle. Für diese ist eine Abschirmung des Materials bezüglich der Bestrahlung der Lauge auszuschließen. Für verglaste Abfälle kann ein Durchdringen mit Lauge ausgeschlossen werden, so daß die Abschirmwirkung berücksichtigt werden kann.

Die Abschirmung der Lauge durch die Glasmatrix kann durch geometrische Überlegungen abgeschätzt werden. Die Abschirmung wird nur für das nicht mobilisierte Inventar betrachtet, also die Strahlung, die innerhalb der Glasmatrix erzeugt wird. Von dem gesamten Inventar im Abfallgebinde werden die Nuklide mit α -Strahlung vernachlässigt, da α -Strahlen wegen ihrer geringen

Reichweite in Feststoffen nahezu vollständig abgeschirmt werden. Der Beitrag der oberflächennahen α -Strahlung kann gegen die in der Lauge vorhandene, mobilisierte Aktivität vernachlässigt werden.

Die Gasproduktionsrate aus dem im Abfall vorhandene Inventar wird wie folgt berechnet:

$$\dot{V}_G^A = f_R(T, p) G^{\beta, \gamma} d V_L \dot{Q}_A^{\beta, \gamma}. \quad (148)$$

Dabei ist d die in einer Volumeneinheit Lauge pro Leistungseinheit Inventar absorbierte Leistung und V_L das aktuelle Laugenvolumen in einem HAW-Bohrloch pro Gebinde. Die Funktion $f_R(T, p)$ ist wiederum durch Gleichung 143 gegeben. Die Energiefreisetzung $\dot{Q}_A^{\beta, \gamma}$ im Abfall wird gemäß Gleichung 142 berechnet.

Die gesamte Gasproduktion in einem Einlagerungsort mit verglastem Abfall ergibt sich schließlich als Summe aus der Gasproduktion durch bereits mobilisierte Nuklide (siehe Gleichung 147) und durch Nuklide, die abgeschirmt in der Glasmatrix vorliegen (siehe Gleichung 148) zu

$$\dot{V}_G = \dot{V}_G^L + \dot{V}_G^A. \quad (149)$$

Ist die gesamte Glasmatrix aufgelöst, so sind alle Nuklide mobilisiert und die Radiolysegasproduktion nur noch durch das mobilisierte Inventar bestimmt. Die Gasproduktionsrate \dot{V}_G^A wird dann Null.

5.6 Modellierung von Austauscheffekten

Im Kapitel 5.4 wurde beschrieben, wie ein im Grubengebäude vorhandener Gradient des Laugendrucks zu einem Laugenstrom durch die Segmente des Grubengebäudes führt. Während der Zufluß- und Durchströmungsphase wird dieser Laugenstrom im wesentlichen durch den außen anliegenden hydrostatischen Druck angetrieben, während der Auspreßphase wird er durch die Verkleinerung der Hohlräume aufgrund der Konvergenz des umgebenden Gesteins erzwungen.

Eine andere Möglichkeit des Laugentransportes ist die sogenannte freie Konvektion, bei der Lauge innerhalb des Segmentsystems zirkuliert. Antriebsmechanismen für diese Laugenzirkulation können sein:

- ein Dichtegradient in der Lauge,
- Bewegung von Gasblasen im Porenraum.

Dichtegradienten in der Lauge werden einerseits durch unterschiedliche Temperaturen in Teilbereichen des Grubengebäudes hervorgerufen, andererseits durch die Auflösung der zementierten

Abfallgebinde, die zu Konzentrationsänderungen von gelösten Substanzen führen kann. Gasblasen können aus der Korrosion von Metallteilen und der Radiolyse der Lauge herrühren.

Die Bestimmung der Laugenbewegungen durch freie Konvektion, den sogenannten Austauscheffekten, dient ausschließlich der Berechnung des Radionuklidtransports, der in Kapitel 5.7 beschrieben wird. Für alle durch Austauscheffekte hervorgerufenen Laugenbewegungen gilt, daß ihr Beitrag zum Laugenstrom, integriert über den Streckenquerschnitt, verschwindet. Daher kann ein resultierender Radionuklidtransport durch Austauscheffekte nur stattfinden, wenn ein Gradient in der Nuklidkonzentration vorhanden ist.

Bisher durchgeführte Anwendungsrechnungen haben gezeigt, daß der Beitrag der Austauscheffekte zum Laugenstrom im allgemeinen klein ist gegenüber dem Laugenstrom aufgrund eines Druckgradienten. Da es jedoch unter ungünstigen Bedingungen Fälle geben kann, wo dies nicht mehr gilt, werden die Austauscheffekte in jeder Rechnung berücksichtigt und ihr Beitrag zum Nuklidtransport bestimmt.

In allen Einlagerungsorten wird angenommen, daß die mobilisierten Radionuklide homogen in der Lauge verteilt sind. Daher brauchen hier Austauscheffekte nur über den jeweiligen Verschluß oder Stopfen berechnet zu werden. In einem Bohrlochstopfen kann die Berechnung der Austauschströme aufgrund von Dichtegradienten entfallen, da analytische und numerische Stabilitätsuntersuchungen [21] gezeigt haben, daß hier ein eventuell vorhandener vertikaler Dichtegradient nicht stark genug ist, die Schwelle für das Einsetzen einer Konvektionsströmung zu überwinden. In den Verbindungsstrecken wird der Laugenaustausch jeweils über den versetzten Hohlraum und, soweit vorhanden, den Verschluß oder Damm berechnet.

5.6.1 Konvektiver Laugenaustausch aufgrund eines Dichtegradienten

Dichteunterschiede in der Lauge können durch Inhomogenitäten in der chemischen Zusammensetzung gelösten Steinsalzes, durch Korrosionsprodukte der Behälter oder der Abfallmatrix, durch die gelösten Radionuklide selbst und nicht zuletzt durch Temperaturunterschiede hervorgerufen werden.

Wie bereits erwähnt ist der konvektive Laugenaustausch stets in Hinblick auf eine mögliche Radionuklidfreisetzung zu betrachten. Inhomogenitäten in der Zusammensetzung der Lauge sind im allgemeinen auf Teilbereiche des Grubengebäudes begrenzt, d.h es wird sich kein weitreichender Dichtegradient aufbauen. Daher wird es auch keinen großräumigen Laugenaustausch geben. Inhomogenitäten in der Zusammensetzung der Lauge spielen daher für eine Radionuklidfreisetzung keine Rolle.

Die Konzentration der gelösten Radionuklide wird im allgemeinen klein sein, so daß hierdurch hervorgerufene Dichteunterschiede der Lauge vernachlässigt werden können.

Wesentliche Dichteunterschiede durch Korrosion der Abfallmatrix wird man im allgemeinen nur erhalten, wenn zementierte Abfälle eingelagert werden. Die Korrosion der Zementgebinde führt zunächst in den Einlagerungsorten zu einer Konzentrationsänderung der gelösten Substanzen

und zu einer Änderung der Dichte der Lauge. Mit dem Laugenstrom, der aus diesen Segmenten herauskommt, baut sich ein Dichtegradient entlang benachbarter Strecken auf. Die Ausbreitung dieses Dichtegradients durch das Grubengebäude wird in Kapitel 5.6.2 beschrieben.

Ausgehend von den eingelagerten wärmeproduzierenden Abfällen erstreckt sich ein Temperaturgefälle durch das Grubengebäude. Die Temperaturgradienten werden, wie in Kapitel 5.1 beschrieben, aus den Temperaturen an bestimmten Punkten des Grubengebäudes und deren Abstand ermittelt.

Im folgenden werden die beiden wesentlichen Austauscheffekte, die durch den Dichteunterschied aufgrund der Konzentrationsänderung gelöster Substanzen und durch den Dichtegradient aufgrund eines Temperaturgradienten verursacht werden, näher betrachtet.

Zur Berechnung des konvektiven Laugenstromes wird von den folgenden Gleichungen für ein homogenes poröses Medium ausgegangen:

- von der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = -\nabla(\rho\dot{u}), \quad (150)$$

- der Darcy-Gleichung

$$\dot{u} = -\frac{k}{\rho\nu}(\nabla p + \rho\dot{g}) \quad (151)$$

- und der Zustandsgleichung, welche die Beiträge der Dichteänderung durch Temperaturerhöhung und durch Konzentrationsänderungen gelöster Substanzen enthält,

$$\rho = \rho_0([1 - \beta(T - T_G)] + \delta\rho_C). \quad (152)$$

In den Gleichungen 150 bis 152 wurden die folgenden Symbole benutzt:

- ϕ : Porosität,
- ρ : Dichte der Lauge,
- \dot{u} : Darcy-Geschwindigkeit,
- k : Permeabilität,
- ν : kinematische Zähigkeit,
- p : Laugendruck,
- g : Erdbeschleunigung,
- β : thermischer Ausdehnungskoeffizient,

- T : Temperatur,
 T_G : Gebirgstemperatur in der Referenztiefe,
 ρ_0 : Dichte der Lauge bei Gebirgstemperatur und verschwindendem $\delta\rho_C$,
 $\delta\rho_C$: Änderung der Dichte aufgrund der Konzentrationsänderung von in der Lauge gelösten Substanzen.

Das aus den Gleichungen 150 bis 152 bestehende Gleichungssystem wird im folgenden für eine stationäre Strömung in einer horizontalen porösen Schicht der Höhe H und der Länge L , wie sie in der Abbildung 59 dargestellt ist, gelöst. Für die Dichte ρ wird die sogenannte Boussinesq-Näherung verwendet, bei welcher die Dichte ρ gleich dem konstanten Wert ρ_0 gesetzt wird, außer in dem Auftriebsterm in der Gleichung 151. Weiterhin werden die Größen ϕ und k als in dem betrachteten Bereich räumlich konstant angesehen.

In der zweidimensionalen Betrachtung besteht der Geschwindigkeitsvektor aus zwei Komponenten,

$$\vec{u} = (u_1, u_2), \quad (153)$$

wobei u_1 in x_1 -Richtung und u_2 in x_2 -Richtung zeigt. Mit der Bedingung $H/L \ll 1$ wird sich näherungsweise eine vollausgebildete Strömung einstellen, d.h. u_1 und u_2 hängen nicht von der x_1 -Koordinate ab. Mit diesen Vereinfachungen nimmt die Gleichung 151 die Form an:

$$\frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0. \quad (154)$$

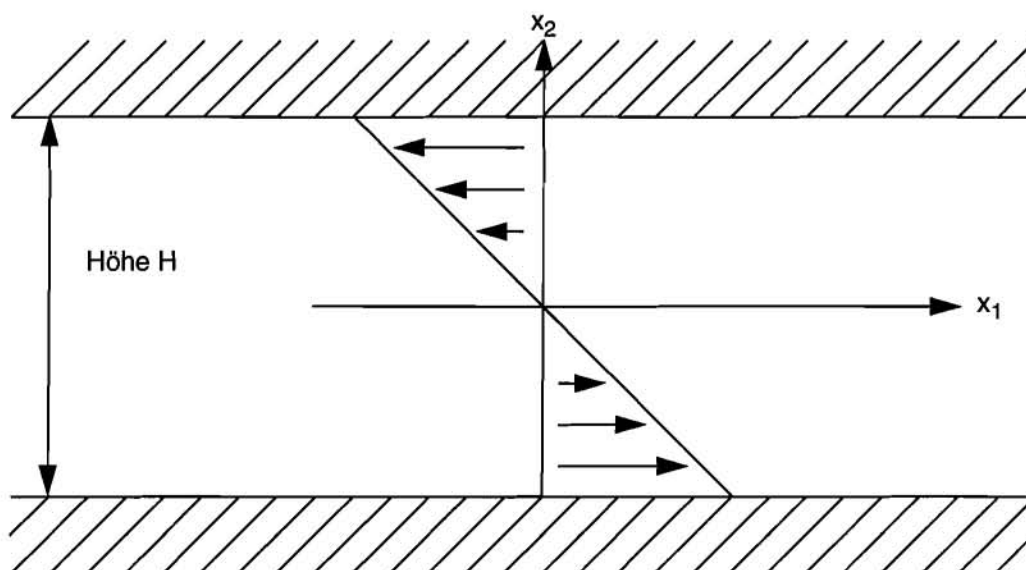


Abbildung 59: Geschwindigkeitsfeld der durch Dichtegradienten erzeugten Laugenströmung.

Die Integration dieser Gleichung unter der Bedingung $u_2 = 0$ auf dem Rand ($x_2 = +H/2$ und $x_2 = -H/2$) liefert

$$u_2 \equiv 0. \quad (155)$$

Mit diesem Zwischenergebnis folgt aus Gleichung 151

$$\frac{v}{k} u_1 + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_1} = 0 \quad (156)$$

und

$$\frac{\rho}{\rho_0} g + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_2} = 0. \quad (157)$$

Differenziert man Gleichung 156 nach x_2 und Gleichung 157 nach x_1 , so folgt schließlich die Differentialgleichung

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_2} = -\frac{gk}{\rho_0 v} \frac{\partial p}{\partial x_1}. \quad (158)$$

Aus der Bedingung, daß \bar{u} über den gesamten Querschnitt integriert verschwindet, folgt, daß $\delta\rho/\delta x_1$ unabhängig von x_2 ist,

$$u_1(x_2) = \frac{\partial u_1}{\partial x_2} x_2 = -\frac{gk}{\rho_0 v} \frac{\partial p}{\partial x_1} x_2. \quad (159)$$

Mit Hilfe der Zustandsgleichung 152 erhält man aus Gleichung 159

$$u_1(x_2) = \frac{gk}{v} \left[-\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \delta\rho_C}{\partial x_1} + \beta \frac{\partial T}{\partial x_1} \right] x_2. \quad (160)$$

Das sich hieraus ergebende Strömungsprofil ist in der Abbildung 59 für einen beliebigen Dichtegradienten dargestellt.

Aus der Strömungsgeschwindigkeit läßt sich der Austauschstrom der Lauge aufgrund der Dichteunterschiede berechnen. Der Betrag des Laugenaustauschstromes $\dot{V}_{T,C}$ (Index T für die Dichteunterschiede durch Temperaturgradient, Index C für die Dichteunterschiede durch die Konzentrationsunterschiede gelöster Substanzen) ergibt sich durch Integration des Strömungsfeldes über die obere oder untere Hälfte des Querschnitts der Schicht:

$$\dot{V}_{T,C} = B \left| \int_0^{H/2} u_1(x_2) dx_2 \right|. \quad (161)$$

Hierbei bezeichnet B die Breite der Schicht (Strecke) und $u_1(x_2)$ die Geschwindigkeitskomponente in x_1 -Richtung nach Gleichung 160. Entsprechend der räumlichen Diskretisierung des Grubengebäudes in Segmente, können die Gradienten durch finite Differenzen ersetzt werden. Hierbei werden Temperaturen und Dichteänderungen aufgrund der Konzentrationsänderung gelöster Substanzen an bestimmten Punkten in den Segmenten bestimmt. Die Differenzen der ermittelten Werte werden mit ΔT bzw. $\Delta \rho_C$ und der Abstand zwischen den Punkten mit ΔL bezeichnet. Hiermit erhält man:

$$\dot{V}_{T,C} = \frac{gk\beta}{8\nu} H^2 B \frac{\Delta T}{\Delta L} - \frac{gk}{8\mu} H^2 B \frac{\Delta \rho_C}{\Delta L} = \dot{V}_{L,T} + \dot{V}_{L,C} . \quad (162)$$

Der Parameter μ ist die dynamische Viskosität, alle anderen Parameter haben dieselbe Bedeutung wie in den vorhergehenden Gleichungen. Die Dichteänderung $\Delta \rho_C$ ist mit der Konzentrationsänderung ΔC über die Gleichung

$$\Delta \rho_C = \alpha \rho_0 \Delta C \quad (163)$$

verknüpft. Der Parameter α ist der Ausdehnungskoeffizient durch Konzentrationsänderungen.

Der gesamte Laugenaustauschstrom in Gleichung 162 läßt sich in zwei Teile zerlegen, den Austauschstrom durch Temperaturgradienten ($\dot{V}_{L,T}$) und den Austauschstrom durch Konzentrationsgradienten von in der Lauge gelösten Substanzen ($\dot{V}_{L,C}$).

Zusammenfassend ergibt sich aus der obigen Ableitung, daß unter den getroffenen Annahmen die Laugenaustauschströme durch Temperaturgradienten und Konzentrationsgradienten addiert werden können. Sie lassen sich als ein gesamter Austauschstrom von Lauge darstellen, der durch einen Dichtegradienten verursacht wird. Um aus den Laugenaustauschströmen einen Aktivitätsstrom berechnen zu können (siehe Kapitel 5.7.1) muß zusätzlich die konservative Annahme gemacht werden, daß beide Prozesse in dieselbe Richtung wirken und daß die Absolutwerte der Austauschströme addiert werden können.

5.6.2 Bilanzierung von gelösten Stoffen in Lauge

Die Auflösung des Zementes in einigen Einlagerungsorten führt wegen der Konzentrationsänderungen der gelösten Substanzen zu Dichteänderungen der Lauge. Die unterschiedliche Dichte der Lauge in benachbarten Segmenten führt dann über die dazwischenliegenden Dämme oder Verschlüsse zu einer Konvektionsströmung (siehe vorhergehendes Kapitel 5.6.1), die sowohl einen Transport von Nukliden als auch einen Transport von für die Dichteänderung verantwortlichen Substanzen bewirkt.

In Zusammenhang mit dem Mobilisierungsmodell MOBZ7 (siehe Kapitel 3.3.2) ist es außerdem notwendig, das für die Zementkorrosion benötigte Magnesium der Lauge zu bilanzieren. Beide Effekte, die Bilanz des Magnesiums und die Bilanz der für die Dichteänderung verantwortlichen Substanzen, werden unabhängig voneinander berechnet, aber mit dem gleichen, im folgenden beschriebenen Verfahren behandelt.

Für Einlagerungsorte mit zementierten Gebinden wird angenommen, daß die Dichte der Lauge durch die Auflösung des Zementes eine aufgeprägte Änderung erfährt, die sich wegen der großen Masse eingelagerten Zementes zeitlich nicht ändert. Als Folge des konvektiven Laugen-transportes werden sich im Laufe der Zeit die in der Lauge gelösten Substanzen in alle Segmente ohne zementierte Gebinde ausbreiten, so daß sich die Dichteänderungen der Lauge von den Einlagerungsorten her ausbreiten, bis im Endstadium eine annähernd gleiche Konzentration gelöster Substanzen und damit eine gleiche Dichte im gesamten Grubengebäude entsteht.

Zur Beschreibung des Transports gelöster Stoffe und der dadurch verursachten Dichteänderungen in einem Segment wird eine beliebige Substanz U mit der Masse m_U betrachtet. Der Dichteunterschied in der Lauge zweier benachbarter Segmente läßt sich dann über die Konzentrationsdifferenz der Substanz U in der Lauge dieser Segmente berechnen.

Der Transport der Substanz U wird durch einen erzwungenen Volumenstrom $\dot{V}_{L,K}$ und durch einen Austauschvolumenstrom $\dot{V}_{L,A}$ (siehe Kapitel 5.7.3) verursacht

$$\dot{m}_U = \begin{cases} \dot{V}_{L,K}c_U + \dot{V}_{L,A}(c_U - c_{U,ex}) & \text{für } \dot{V}_{L,K} \geq 0 \\ \dot{V}_{L,K}c_{U,ex} + \dot{V}_{L,A}(c_U - c_{U,ex}) & \text{für } \dot{V}_{L,K} \leq 0 \end{cases} \quad (164)$$

Hierbei wurden die folgenden Größen verwendet:

- \dot{m}_U : Massenstrom der Substanz U,
- c_U : Massenkonzentration der Substanz U,
- $c_{U,ex}$: Konzentration im äußeren Segment).

Der erzwungene Laugenstrom bewirkt einen Transport der Substanz U zwischen dem betrachteten Segment und dem äußeren Segment je nach Strömungsrichtung der Lauge.

Die Änderung der gelösten Masse der Substanz U in einem Segment über einen Zeitschritt Δt ergibt sich aus der Differenz von einströmender Masse aus den inneren Segmenten ($m_{U,e}$) und ausströmender Masse ($m_{U,a}$):

$$\Delta m_U(t) = (\dot{m}_{U,a}(t) - \dot{m}_{U,e}(t)) \Delta t. \quad (165)$$

Die neue Konzentration c_U der gelösten Substanz U ergibt sich aus Gleichung 165 als Quotient aus der Summe von alter Masse m_U und Massenänderung Δm_U , dividiert durch das Volumen der Lauge V_L :

$$c_U(t + \Delta t) = \frac{m_U(t) + \Delta m_U(t)}{V_L(t + \Delta t)}. \quad (166)$$

Die Bilanzierung des Magnesiums in Lauge wird ähnlich wie die Bilanzierung der Masse der Substanz U, aber nur für Einlagerungsorte im Zusammenhang mit dem Mobilisierungsmodell MOBZ7 durchgeführt. Analog zu Gleichung 164 ergibt sich eine Massenstrombilanz aus den durch Druckgradienten und Austauscheffekten erzeugten Laugenströmen:

$$\dot{m}_{Mg} = \begin{cases} \dot{V}_{L,K} c_{Mg} + \dot{V}_{L,A} (c_{Mg} - c_{Mg,ex}) & \text{für } \dot{V}_{L,K} \geq 0 \\ \dot{V}_{L,K} c_{Mg,ex} + \dot{V}_{L,A} (c_{Mg} - c_{Mg,ex}) & \text{für } \dot{V}_{L,K} < 0 \end{cases} \quad (167)$$

Hier bezeichnet c_{Mg} die Konzentration von Magnesium im betrachteten Segment und $c_{Mg,ex}$ diejenige im äußeren Segment.

Außer den Massenströmen durch erzwungene Laugenbewegung und durch Austauscheffekte ist für die Magnesiumbilanz die Masse des im aktuellen Zeitschritt zur Korrosion der Zementgebäude verbrauchten Magnesiums zu berücksichtigen. Sie berechnet sich aus:

$$\dot{m}_{Mg,Kor}(t) = -f_Z \dot{m}_Z(t). \quad (168)$$

Dabei bedeuten:

- $\dot{m}_{Mg,Kor}$: Zeitliche Änderung der Magnesiummasse, verursacht durch die Korrosion von Zement,
- f_Z : Proportionalitätsfaktor, der die Umrechnung von Zementmasse in Magnesiummasse enthält,

$\dot{m}_Z(t)$: Zeitliche Änderung der Zementmasse (siehe Kapitel 3.3.2).

Die gesamte Änderung der Magnesiummasse in einem Einlagerungsort über einen Zeitschritt Δt ergibt sich aus der Differenz der durch Zementkorrosion verursachten Abnahme der Magnesiummasse und dem Massenstrom durch erzwungene Laugenbewegung und Austauscheffekte:

$$\Delta m_{Mg}(t) = (\dot{m}_{Mg}(t) - \dot{m}_{Mg, Kor}(t)) \Delta t. \quad (169)$$

Die neue Magnesiumkonzentration c_{Mg} am Ende des Zeitschrittes Δt in einem Einlagerungsort ergibt sich aus der Summe der alten Magnesiummasse m_{Mg} und der Massenänderung Δm_{Mg} , dividiert durch das Volumen der Lauge V_L :

$$c_{Mg}(t + \Delta t) = \frac{m_{Mg}(t) + \Delta m_{Mg}(t)}{V_L(t + \Delta t)}. \quad (170)$$

Die Bilanzierung der Magnesiummasse erfolgt nur in den Segmenten, die einen Einlagerungsort mit zementierten Gebinden beschreiben und in Zusammenhang mit dem Mobilisierungsmodell MOBZ7 verwendet werden. Zur Vereinfachung wird angenommen, daß die Magnesiumkonzentration in allen äußeren Segmenten konstant bleibt.

5.6.3 Austausch durch Gastransport

Das durch Korrosion und Radiolyse entstandene Gas (siehe Kapitel 5.5) strömt durch das Grubengebäude von den Einlagerungsorten in Richtung Austrittsort und induziert dabei einen Laugenstrom. In [21] wurde ein Modell vorgestellt, welches die Berechnung des Laugenstromes aus dem Gasstrom ermöglicht. Es wurde angenommen, daß in horizontalen Segmenten das Gas an der Oberkante entlangströmen und dabei einen Teil der Lauge mit sich ziehen kann. Die mit dem Gas strömende Lauge wird durch eine Komponente ausgeglichen, die in die entgegengesetzte Richtung strömt. Dadurch kann eine weitreichende Konvektionszelle in der Lauge induziert werden.

Der gasinduzierte Laugenstrom hängt von der Neigung ψ des betrachteten Segmentes ab. Für absolut waagerechte Segmente wird eine Entmischung des Gases und der Lauge stattfinden und damit kein Austauschstrom verursacht. Der induzierte Laugenstrom wird durch das folgende halbempirische Gesetz beschrieben [21]:

$$\dot{V}_{L, G} = f_G \sqrt{k} \sin(\psi) \dot{V}_G. \quad (171)$$

Dabei sind:

- $\dot{V}_{L,G}$: Volumenstrom der Lauge, durch Gasstrom verursacht,
- f_G : Faktor,
- ψ : Winkel gegen die Horizontale,
- k : Permeabilität,
- \dot{V}_G : Gasstrom.

Für ein Bohrloch ist $\psi = 90$ Grad und für alle Strecken 0 Grad. Die verschwindende Neigung der Strecken würde zu keinem Laugenstrom führen. Aufgrund von Abweichungen während der Auf-fahrung des Grubengebäudes und wegen thermisch bedingter Verformungen während der Nachbetriebsphase kann jedoch angenommen werden, daß ein leichtes Gefälle vorliegt, welches zu 2 Grad unterstellt wird. Daraus resultiert dann auch ein Austauschstrom in Strecken. Eine typische Darstellung des Laugenstromes in einer Strecke zeigt Abbildung 60.

5.7 Nuklidtransport

Die in der Lauge gelösten Radionuklide können im Grubengebäude durch drei unterschiedliche Effekte transportiert werden. Diese sind die Laugenaustauschvorgänge, der Laugentransport durch Druckgradienten und die Diffusion. Der von diesen drei Ursachen hervorgerufene Nuklidtransport wird in den folgenden Unterkapiteln erläutert, wobei die Austauschvorgänge separat für die beiden treibenden Kräfte des Dichtegradienten und des Gastransports beschrieben werden. Abschließend wird die Überlagerung der Effekte zur Berechnung des gesamten Aktivitätsstroms dargestellt.

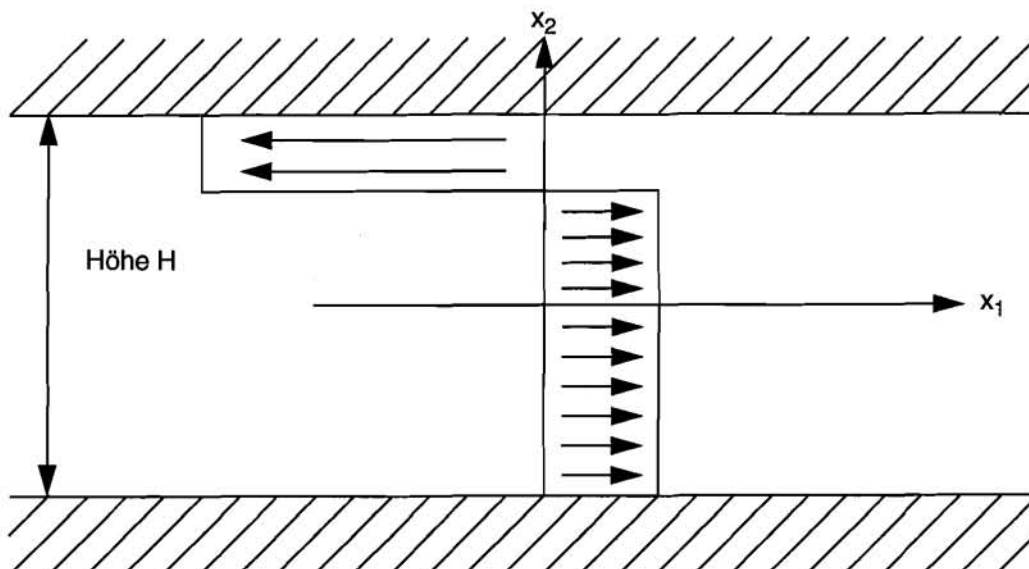


Abbildung 60: Geschwindigkeitsfeld einer durch konstanten Gasstrom induzierten Laugenströmung. Der Laugenstrom an der Oberkante wird durch den in dieselbe Richtung zeigenden Gasstrom verursacht.

Zur Berechnung der durch Austauscheffekte verursachten Nuklidströme wird in den folgenden Kapiteln zunächst die Transportgleichung unter vereinfachenden mathematischen Annahmen gelöst. Dann wird durch Integration über die durchströmte Fläche der aus den einzelnen Austauschereffekten resultierende Aktivitätsstrom berechnet. Der diffusive Nuklidtransport findet aufgrund von unterschiedlichen Konzentrationen der Nuklide in Nachbarsegmenten statt, die unter anderem von den Aktivitätsströmen durch Austauschereffekte hervorgerufen werden.

5.7.1 Durch Dichtegradienten induzierter Nuklidtransport

In Kapitel 5.6.1 wurde der Austauschvolumenstrom berechnet, der durch Dichteunterschiede in der Lauge verursacht wird. Die Dichteunterschiede sind Folge von Temperaturgradienten oder Folge von Konzentrationsunterschieden gelöster Substanzen. Der durch diesen Laugenaustausch verursachte Nuklidtransport wird im folgenden berechnet.

Zur Berechnung des Nuklidtransportes ist zunächst die Laugengeschwindigkeit \vec{u} aus den Volumenströmen der Gleichungen 150 bis 152 zu ermitteln. Anschließend ist die Transportgleichung zur Bestimmung der Nuklidkonzentration C zu lösen:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi C) = \nabla (D_h \nabla (\phi C)) - \nabla (C \vec{u}) . \quad (172)$$

Die Variablen in Gleichung 172 haben die folgende Bedeutung:

- D_h : hydrodynamische Dispersion,
- ϕ : Porosität,
- \vec{u} : Geschwindigkeitsvektor der Laugenströmung (Darcy-Geschwindigkeit).

Unter der Annahme einer zweidimensionalen Strömung mit einer konstanten Dispersion D_h und einer konstanten Porosität ϕ läßt sich Gleichung 172 umschreiben als:

$$u_1 \frac{\partial C}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial C}{\partial x_2} = \phi D_h \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2} \right) . \quad (173)$$

Wie in Kapitel 5.6.1 gezeigt wurde, ist bei einer voll ausgebildeten Strömung die Komponente von \vec{u} in x_2 -Richtung $u_2 \equiv 0$. Unter der weiteren Annahme eines konstanten Konzentrationsgradienten in x_1 -Richtung,

$$\frac{\partial C}{\partial x_1} = \text{const} \quad (174)$$

folgt:

$$u_1 \frac{\partial C}{\partial x_1} = \phi D_h \frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2}. \quad (175)$$

Mit der Beziehung $u_1(x_2) = (\partial u_1 / \partial x_2) x_2$ aus Kapitel 5.6.1 ergibt sich hieraus:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x_2^2} = F x_2, \quad (176)$$

mit

$$F = \frac{1}{\phi D_h} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \frac{\partial C}{\partial x_1} = \text{konstant}. \quad (177)$$

Unter Berücksichtigung der Randbedingung

$$\frac{\partial C}{\partial x_2} (x_2 = H/2) = \frac{\partial C}{\partial x_2} (x_2 = -H/2) = 0 \quad (178)$$

ergibt sich die Konzentration der Nuklide durch Integration von Gleichung 176:

$$\frac{\partial C}{\partial x_2} = F \left(\frac{x_2^2}{2} - \frac{H^2}{8} \right). \quad (179)$$

Hieraus folgt unter Berücksichtigung des konstanten Konzentrationsgradienten in x_1 -Richtung (siehe Gleichung 174) durch weitere Integration:

$$C(x_1, x_2) = C_1(x_1) + C_2(x_2) = C_0 + \frac{\partial C}{\partial x_1} x_1 + F \left(\frac{1}{6} x_2^3 - \frac{H^2}{8} x_2 \right). \quad (180)$$

Die Variable C_0 bezeichnet die Konzentration im Koordinatenursprung, $C_0 \equiv C(0, 0)$. Die Größen $C_1(x_1)$ und $C_2(x_2)$ sind so definiert, daß sie jeweils die Komponente der Konzentration angeben, die nur von x_1 oder x_2 abhängt. Abbildung 61 zeigt einige Linien gleicher Konzentration, d.h. mit $C(x_1, x_2) = \text{const.}$

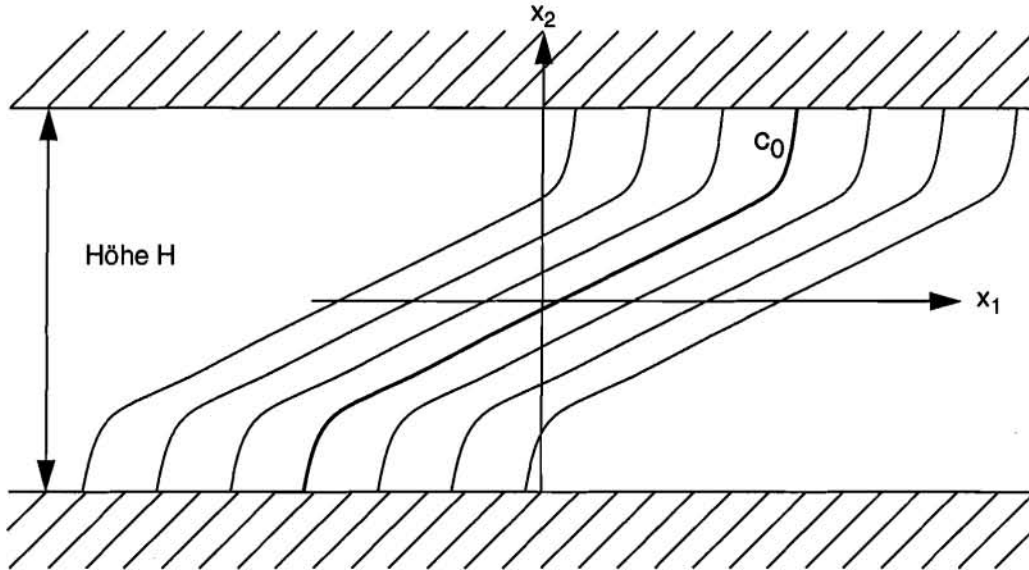


Abbildung 61: Linien gleicher Konzentration für den Nuklidtransport durch Temperaturgradienten bei voll ausgebildeter Strömung und konstantem Konzentrationsgradienten in x_1 -Richtung.

Der Aktivitätsstrom $\dot{A}_{T,C}$, der durch den gesamten Laugenaustausch als Folge der Dichteänderung der Lauge (Index T: Aktivitätsstrom durch Temperaturgradient, Index C: Aktivitätsstrom durch Konzentrationsunterschiede gelöster Substanzen) hervorgerufen wird, ergibt sich für die durch den Querschnitt $H \cdot B$ strömende Lauge als

$$\dot{A}_{T,C} = B \int_{-H/2}^{H/2} u_1(x_2) C(x_1, x_2) dx_2, \quad (181)$$

bzw.

$$\dot{A}_{T,C} = BC_1(x_1) \int_{-H/2}^{H/2} u_1(x_2) dx_2 + B \int_{-H/2}^{H/2} u_1(x_2) C_2(x_2) dx_2. \quad (182)$$

Der erste Term in Gleichung 182 mit der Komponente $C_1(x_1)$ verschwindet, weil $u_1(x_2)$ eine antisymmetrische Funktion ist. Setzt man $u_1(x_2) = (\partial u_1 / \partial x_2) x_2$ aus Gleichung 159 (siehe Kapitel 5.6) und $C_2(x_2)$ aus Gleichung 180 in Gleichung 182 ein, so ergibt sich:

$$\dot{A}_{T,C} = \frac{FBH^5 \partial u_1}{120 \partial x_2}. \quad (183)$$

Mit Hilfe dieser Beziehung läßt sich der Aktivitätsstrom mit der uniaxialen Strömung $\dot{V}_{T,C}$ aus Gleichung 162 in Kapitel 5.6.1 beschreiben:

$$\dot{A}_{T,C} = -\frac{8H}{15B\phi D_h} \frac{\partial C}{\partial x_1} \dot{V}_{T,C}^2. \quad (184)$$

Hierbei gibt $\dot{V}_{T,C}$ den durch Temperaturgradienten und durch Konzentrationsunterschiede gelöster Substanzen hervorgerufenen Laugenaustauschstrom an.

5.7.2 Durch Gastransport induzierter Nuklidtransport

Zur Bestimmung des durch Gastransport induzierten Aktivitätstransportes wird dieselbe Geometrie der Laugenströmung wie in Kapitel 5.7.1 angenommen. Es handelt sich um eine horizontale Schicht der Höhe H und der Länge L mit der Bedingung, daß $H/L \gg 1$ ist. Durch die Gasströmung wird am oberen Bereich der Schicht bei $x_2 = H/2$ ein Laugenstrom induziert (siehe Abbildung 60 in Kapitel 5.6.3). Da der über den gesamten Querschnitt eines Segmentes gemittelte Austauschstrom Null ist, folgt, daß die mit dem Gasstrom mitgeführte Lauge über den restlichen Querschnitt (zwischen $x_2 = -H/2$ und $x_2 < H/2$) zurückfließen muß. Zur Vereinfachung der folgenden Rechnungen wird angenommen, daß die Strömung eindimensional in Bezug auf die Projektion in die x_1 - x_2 -Ebene ist. Daraus ergibt sich $\hat{u} = \text{konstant} = (u_1, 0, 0)$ (siehe Gleichungen 153 bis 156 in Kapitel 5.6).

Die Integration der Transportgleichung 175 liefert mit der Randbedingung

$$\frac{\partial C}{\partial x_2}(x_2 = -H/2) = 0: \quad (185)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x_2} = \frac{u_1}{\phi D_h} \frac{\partial C}{\partial x_1} \left(x_2 + \frac{H}{2} \right). \quad (186)$$

Die Nuklidkonzentration ergibt sich hieraus durch Integration als:

$$C(x_1, x_2) = C_1(x_1) + C_2(x_2) = C_0 + \frac{\partial C}{\partial x_1} x_1 + \frac{u_1}{2\phi D_h} \left(\left(x_2 + \frac{H}{2} \right)^2 - H^2 \right), \quad (187)$$

wobei $C_0 = C(0, H/2)$ ist. In Abbildung 62 sind einige Linien gleicher Konzentration $C(x_1, x_2) = \text{const.}$ dargestellt.

Der durch den Gasstrom induzierte Laugenaustausch bewirkt einen Aktivitätsstrom, der sich in der folgenden Weise berechnen läßt. Ist HB die senkrecht zur x_1 -Achse stehende Querschnittsfläche, durch welche die Lauge strömt, so gilt:

$$\dot{A}_G = B \int_{-H/2}^{H/2} u_1 C(x_1, x_2) dx_2. \quad (188)$$

Diese Gleichung läßt sich in zwei Teile aufspalten, den am oberen Rand bei $x_2 = H/2$ strömenden Anteil und den über die größere Querschnittsfläche zurückströmenden Anteil:

$$\dot{A}_G = B \int_{-H/2}^{H/2 - \epsilon} u_1 C(x_1, x_2) dx_2 + B \int_{H/2 - \epsilon}^{H/2} u_1 C(x_1, x_2) dx_2. \quad (189)$$

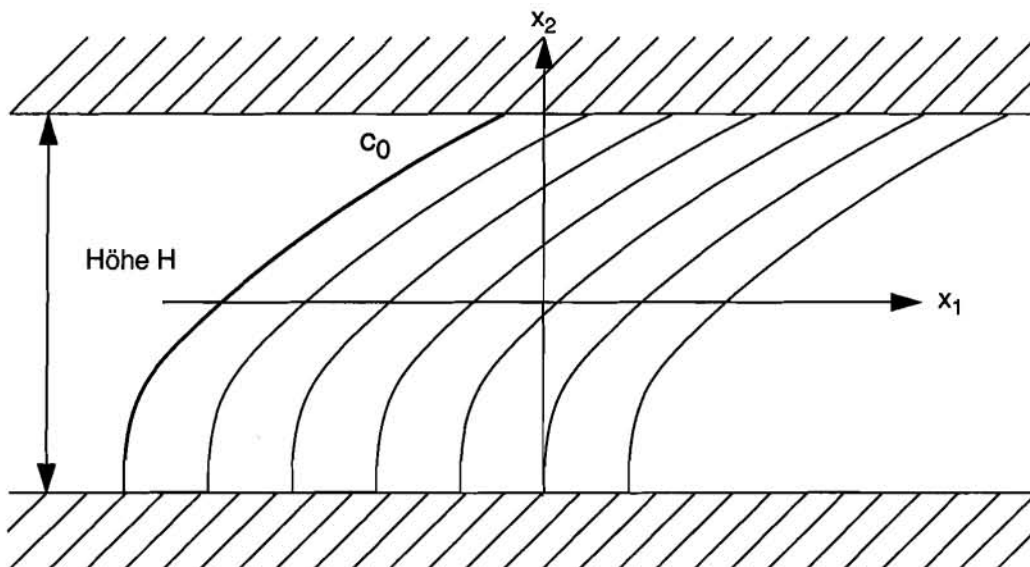


Abbildung 62: Linien gleicher Konzentration für den durch Gastransport induzierten Nuklidtransport bei konstantem Konzentrationsgradient in x_1 -Richtung.

Wird in dieser Gleichung der in Kapitel 5.6 betrachtete Volumenstrom,

$$\dot{V}_{L,G} = \begin{cases} BH - \varepsilon u_1 & \text{für } -H/2 < x_2 \leq H/2 - \varepsilon \\ B\varepsilon u_1 & \text{für } H/2 - \varepsilon < x_2 \leq H/2 \end{cases} \quad (190)$$

eingeführt, so folgt mit der Annahme, daß die Randschicht ε vernachlässigbar klein ist:

$$\dot{A}_G = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{H - \varepsilon} \int_{-H/2}^{(H/2 - \varepsilon)} \dot{V}_{L,G} C(x_1, x_2) dx_2 - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int_{H/2 - \varepsilon}^{H/2} \dot{V}_{L,G} C(x_1, x_2) dx_2. \quad (191)$$

Führt man die Integration aus, indem für die Konzentration $C(x_1, x_2)$ die Gleichung 187 eingesetzt wird, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Randbedingungen:

$$\dot{A}_G = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{H - \varepsilon} \int_{-H/2}^{H/2 - \varepsilon} \dot{V}_{L,G} (C_1(x_1) + C_2(x_2)) dx_2 - \dot{V}_{L,G} C_1(x_1) \quad (192)$$

$$\dot{A}_G = \dot{V}_{L,G} \cdot \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{H - \varepsilon} \int_{-H/2}^{H/2 - \varepsilon} C_2(x_2) dx_2 \quad (193)$$

Wird in dieser Gleichung $C_2(x_2)$ durch den zweiten Term von Gleichung 187 ersetzt und u_1 ein zweites Mal durch den Laugenstrom $\dot{V}_{L,G}$ ersetzt, so erhält man schließlich:

$$\dot{A}_G = \frac{\dot{V}_{L,G}}{2H\phi D_h} \frac{\dot{V}_{L,G}}{BH} \frac{\partial C}{\partial x_1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{3} x_2^3 + \frac{H}{2} x_2^2 - \frac{3}{4} H^2 x_2 \right]_{-H/2}^{H/2 - \varepsilon} \quad (194)$$

$$\dot{A}_G = \frac{\dot{V}_{L,G}^2}{2BH^2\phi D_h} \frac{\partial C}{\partial x_1} \left[\frac{2}{3} H \right]^3 = -\frac{H}{3B\phi D_h} \frac{\partial C}{\partial x_1} \dot{V}_{L,G}^2. \quad (195)$$

Der Aktivitätsstrom hängt zwar nicht explizit von den Koordinaten x_1 und x_2 ab, es stellt sich jedoch die Frage, ob ein durch Gastransport vermittelter Laugenstrom entlang der Begrenzungsflächen eines vertikalen Bohrloches noch angenommen werden kann. In [21] wird gezeigt, daß der daraus resultierende Aktivitätsstrom eine Überabschätzung bedeutet und damit eine konser-

vative Näherung darstellt. Die Höhe und Breite in Gleichung 195 ist für Bohrlöcher durch den Radius und entsprechende Modifizierung der Gleichung zu ersetzen.

Den gesamten durch konvektive Austauschprozesse induzierten Aktivitätsstrom (siehe Kapitel 5.7.5) erhält man durch Addieren der beiden Ströme aus den Gleichungen 183 und 195.

5.7.3 Durch Druckgradienten induzierter Nuklidtransport

Ein wesentlicher Beitrag für den Nuklidtransport ist derjenige über die erzwungene Laugenbewegung als Folge der Gebirgskonvergenz (siehe Kapitel 5.2), bzw. eines Druckgradienten. Der Aktivitätsstrom eines Nuklids durch eine erzwungene Laugenbewegung ergibt sich als Produkt von Laugenstrom und Konzentration des Nuklids in dem Segment, aus dem der Laugenstrom kommt:

$$\dot{A}_K = \begin{cases} \dot{V}_{L,K} C & \text{für } \dot{V}_{L,K} \geq 0 \\ \dot{V}_{L,K} C_{ex} & \text{für } \dot{V}_{L,K} < 0 \end{cases} \quad (196)$$

$\dot{V}_{L,K}$ ist der erzwungene Laugenstrom, C die Nuklidkonzentration und C_{ex} die Nuklidkonzentration im äußeren Segment.

5.7.4 Nuklidtransport durch Diffusion

Die in den Einlagerungsorten mobilisierten Nuklide breiten sich mit der Laugenströmung durch Konvergenz und durch Austauscheffekte über das gesamte Grubengebäude aus. Außerdem findet ein diffuser Nuklidtransport statt, der durch vorhandene Konzentrationsgradienten der Nuklide angetrieben wird. Dabei wird ein über einen Zeitschritt konstanter Konzentrationsgradient angenommen.

Wenn A den Querschnitt eines Segmentes, Dammes oder Verschlusses bezeichnet und ϕ die Porosität ist, so ist $A\phi$ der effektive Querschnitt. Der durch Diffusion induzierte Aktivitätsstrom ist dann gegeben durch:

$$\dot{A}_D = -D(T) A\phi \frac{\partial C}{\partial x_1}. \quad (197)$$

Dabei ist $\partial C / \partial x_1$ der Konzentrationsgradient und $D(T)$ der temperaturabhängige Diffusionskoeffizient, der explizit die folgende Form hat:

$$D(T) = D(T_G) \exp\left(\frac{Q}{R}\left(\frac{1}{T_G} - \frac{1}{T}\right)\right). \quad (198)$$

Die verwendeten Parameter sind:

T_G : Gebirgstemperatur,

Q : Aktivierungsenergie für diffusive Prozesse,

R : Gaskonstante,

$D(T_G)$: Molekularer Diffusionskoeffizient bei lokaler Gebirgstemperatur.

Zu Vergleichszwecken werden in REPOS Austauschvolumenströme für verschiedene Ursachen betrachtet. Um in diesen Vergleich auch den Diffusionsprozeß einschließen zu können, wird hierfür ein fiktiver Volumenstrom nach folgender Gleichung berechnet:

$$\dot{V}_{L,D} = \frac{D(T) A \phi}{\Delta L}. \quad (199)$$

Die Größe ΔL gibt hierbei die effektive Länge an, mit der sich aus einer Konzentrationsdifferenz der wirksame Konzentrationsgradient $\Delta C / \Delta L$ ergibt.

5.7.5 Gesamtnuklidstrom

Der gesamte Nuklidtransport ergibt sich durch Superposition aller vorher diskutierten Prozesse (Transport durch erzwungene Laugenbewegung, konvektive Austauschprozesse und Diffusion). Diese Prozesse sind sehr verschieden voneinander, so daß eine analytische Behandlung der Überlagerung nicht möglich ist. Da Austauschprozesse im allgemeinen von geringerer Bedeutung für den Nuklidtransport sind, ergibt sich eine einfache Näherung für den gesamten Nuklidtransport, indem die Einzelbeiträge zum Aktivitätsstrom aufsummiert werden.

Durch die Summation der Aktivitätsströme aus Austauschprozessen und aus den erzwungenen Laugenbewegungen wird der Gesamtstrom überschätzt. Diese Vorgehensweise ist konservativ in Bezug auf die Nuklidfreisetzung. Bei den Austauschprozessen alleine dominiert im allgemeinen ein Prozeß die anderen, so daß die Summation eine recht gute Näherung darstellt:

$$\dot{A}_A = \dot{A}_D + \dot{A}_{T,C} + \dot{A}_G. \quad (200)$$

Dabei sind \dot{A}_D , $\dot{A}_{T,C}$ und \dot{A}_G die in den vorigen Kapiteln berechneten Aktivitätsströme durch Diffusion, Dichtegradienten und Gasaustausch.

Bei der Betrachtung von konvektiven Laugenströmen durch Austauscheffekte (Dichtegradienten und Gasaustausch) ergibt sich als Überlagerung folgender Gesamt-Aktivitätsstrom (siehe Gleichungen 184 und 194):

$$\dot{A}_G + \dot{A}_{T,C} = -\frac{H}{B\phi D_h} \frac{\partial C}{\partial x_1} \left(\frac{1}{3} \dot{V}_{L,G}^2 + \frac{8}{15} (\dot{V}_{L,T} + \dot{V}_{L,C})^2 \right). \quad (201)$$

Die in dieser Gleichung verwendete hydrodynamische Dispersion D_h ist die Summe aus mechanischer Dispersion und molekularer Diffusion. Da die Geschwindigkeitsabhängigkeit der mechanischen Dispersion nicht in Betracht gezogen werden konnte, muß D_h durch eine Konstante approximiert werden. Dies wird durch Vernachlässigung der mechanischen Dispersion getan, so daß sich $D_h = D$ ergibt. Der Aktivitätstransport nach Gleichung 202 wird dadurch in konservativer Weise überschätzt.

Ein Segment besteht im allgemeinen aus einem versetzten Hohlraum und einem Verschuß oder Damm (siehe Kapitel 4). Austauschprozesse können sowohl über den Versatz als auch über den Verschuß oder Damm auftreten. Für beide Anteile wird im Modul REPOS ein Aktivitätsstrom nach Gleichung 200 berechnet:

$$\dot{A}_{A,S} = \dot{A}_{D,S} + \dot{A}_{T,C,S} + \dot{A}_{G,S}, \quad (202)$$

$$\dot{A}_{A,V} = \dot{A}_{D,V} + \dot{A}_{T,C,V} + \dot{A}_{G,V}. \quad (203)$$

Der Index S bezieht sich hier auf den Versatz, der Index V auf den Verschuß oder Damm. Als gesamter Aktivitätsstrom durch Austauschprozesse wird das Minimum der beiden Einzelanteile verwendet:

$$\dot{A}_A = \min(\dot{A}_{A,S}, \dot{A}_{A,V}). \quad (204)$$

Der gesamte Aktivitätsstrom aus einem Segment ergibt sich durch Summation dieses Aktivitätsstromes aus den Austauschprozessen und dem Aktivitätsstrom durch erzwungene Laugenbewegungen (siehe Gleichung 196):

$$\dot{A} = \dot{A}_K + \dot{A}_A. \quad (205)$$

Bei allen Gleichungen in diesem Kapitel wurde vorausgesetzt, daß es sich bei dem Aktivitätsstrom jeweils um den Strom für ein Nuklid handelt. Da die Gesamtheit der Nuklide von Interesse ist, müssen die entsprechenden Gleichungen für alle Nuklide angewendet werden.

5.8 Nuklidtransport in Segmenten mit ortsabhängiger Nuklidkonzentration

In Segmentmodellen, in denen eine ortsabhängige Radionuklidkonzentration berücksichtigt wird (Modell STOVOK2), wird anstelle der in den Kapiteln 5.7 und 5.9 beschriebenen Einzelmodellierung verschiedener Transport- und Sorptionseffekte eine eindimensionale Transportrechnung durchgeführt, in der die Effekte Advektion, Dispersion, Diffusion und lineare Sorption nach dem K_d -Konzept integriert sind. Konvektiver Austausch und Ausfällung werden nicht berücksichtigt.

In den Gleichungen dieses Abschnitts werden die Variablen wie folgt bezeichnet:

t	Zeit
ϕ	Porosität
A	Querschnittsfläche des Segmentes
V	Volumen eines Blocks
R	Retardationsfaktor
c	Nuklidkonzentration
u	Abstandsgeschwindigkeit
D_m	molekularer Diffusionskoeffizient
α	longitudinale Dispersionslänge
λ	Zerfallskonstante
σ	volumenbezogener Quellterm
k	Nuklidindex
k'	Index für Mutternuklide

Damit ergibt sich die Transportgleichung

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\phi A R_k c_k) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi A (D_m + \alpha u) \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\phi A u c_k) \\
 &\quad \text{Dispersionsterm} \quad \text{Advektionsterm} \\
 + \sigma_k A &\quad - \lambda_k \phi A \left(R_k c_k - \sum_{k'} R_{k'} c_{k'} \right) \\
 \text{Radionuklideintrag} &\quad \text{Zerfallsterm}
 \end{aligned} \tag{206}$$

Zur numerischen Lösung dieser Gleichung wird ein explizites Finite-Differenzen-Verfahren verwendet, indem die Zeitableitung durch eine Vorwärtsdifferenz, die erste Ortsableitung durch eine Rückwärtsdifferenz und die zweite Ortsableitung durch eine zentrale Differenz ersetzt wird. Zum Zweck der Ortsdiskretisierung wird das gesamte Segment in eine frei wählbare Zahl n_B von Blöcken gleicher Länge Δx unterteilt. Die Abstandsgeschwindigkeit u ist durch die Druck- und Stromberechnung vorgegeben, sie hängt mit dem Laugenstrom S nach der Beziehung

$$u = \frac{S}{\phi A} \quad (207)$$

zusammen. Der Strom S_i vom i -ten in den $i+1$ -ten Block ergibt sich durch lineare Interpolation zwischen Eingangs- und Ausgangsstrom (S_i bzw. S_{i+1}):

$$S_i = S_{i+1} + i \frac{S_{i+1} - S_i}{n_B}. \quad (208)$$

Damit erhält man als Lösungsalgorithmus für alle Blöcke außer den Randblöcken:

$$\begin{aligned} c_i(t + \Delta t) = c_i(t) + \frac{\Delta t}{VR} & \left[\left(\frac{\phi a D_m}{\Delta x} + \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta x} \right) S_{i-1} \right) c_{i-1}(t) \right. \\ & - \left(\frac{2\phi a D_m}{\Delta x} + \frac{\alpha}{\Delta x} S_{i-1} + \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta x} \right) S_i \right) c_i(t) \\ & \left. + \left(\frac{\phi a D_m}{\Delta x} + \frac{\alpha}{\Delta x} S_i \right) c_{i+1}(t) \right] \end{aligned} \quad (209)$$

für den Fall der positiven, also vom Eingang zum Ausgang gerichteten Durchströmung, bzw.:

$$\begin{aligned} c_i(t + \Delta t) = c_i(t) + \frac{\Delta t}{VR} & \left[\left(\frac{\phi a D_m}{\Delta x} - \frac{\alpha}{\Delta x} S_{i-1} \right) c_{i-1}(t) \right. \\ & - \left(\frac{2\phi a D_m}{\Delta x} - \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta x} \right) S_{i-1} - \frac{\alpha}{\Delta x} S_i \right) c_i(t) \\ & \left. + \left(\frac{\phi a D_m}{\Delta x} - \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta x} \right) S_i \right) c_{i+1}(t) \right] \end{aligned} \quad (210)$$

im Fall der negativen Durchströmung. Der radioaktive Zerfall ist dabei weggelassen, da er an anderer Stelle berücksichtigt wird.

Als Randbedingung für den Einstromrand wird der Nuklidstrom N_1 aus dem vorherigen Segment verwendet. Dieser wird als Quellrate im ersten Block betrachtet. Damit ist der Algorithmus für den ersten Block

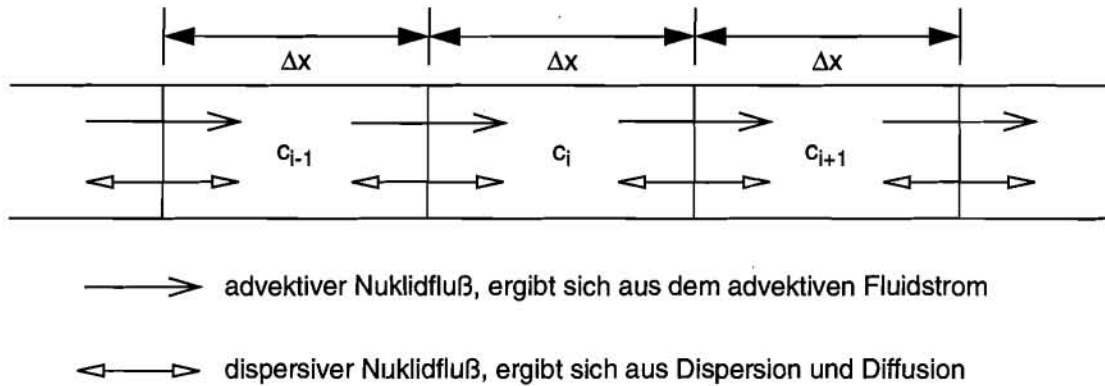


Abbildung 63: Ausschnitt aus dem Segment mit Zuordnung der Flüsse

$$c_1(t + \Delta t) = c_1(t) + \frac{\Delta t}{VR} \left[- \left(\frac{\phi AD_m}{\Delta x} + \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta x} \right) S_1 \right) c_1(t) + \left(\frac{\phi AD_m}{\Delta x} + \frac{\alpha}{\Delta x} S_1 \right) c_2(t) + N_1 \right] \quad (211)$$

bzw.

$$c_1(t + \Delta t) = c_1(t) + \frac{\Delta t}{VR} \left[- \left(\frac{\phi AD_m}{\Delta x} - \frac{\alpha}{\Delta x} S_1 \right) c_1(t) + \left(\frac{\phi AD_m}{\Delta x} - \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta x} \right) S_1 \right) c_2(t) + N_1 \right] \quad (212)$$

Als Randbedingung für den Ausstromrand wird eine konstante Nuklidkonzentration außerhalb des Modellgebietes angenommen. Dafür wird die Konzentration des Eingangsblocks des nächsten Segmentes verwendet.

Die Zeitschrittweite Δt bei der Transportrechnung im Segment entspricht zunächst der allgemeinen REPOS-Schrittweite, die im Bedarfsfall segmentintern automatisch in mehrere Schritte unterteilt wird. Die Transportrechnung innerhalb des Segments beeinflusst nicht die allgemeine Schrittweite.

Die Zeitdiskretisierung innerhalb des Segments erfolgt aufgrund der Stabilitätskriterien nach Courant und Neumann (vgl. Kapitel 6.3.5). Die maximale interne Zeitschrittweite ist dann

$$(\Delta t)_{\max} = \frac{V_L R}{\frac{2\phi A D_m}{L_B} + \left(2\frac{\alpha}{\Delta x} + 1\right) S_0} \quad (213)$$

Sie kann noch durch den global vorzugebenden Parameter f_{DTRED} variiert werden. Hieraus wird die Anzahl der internen Zeitschritte sowie die interne Zeitschrittweite berechnet:

$$n_t = \left(\text{INT} \left(\frac{\Delta T}{(\Delta t)_{\max} f_{\text{DTRED}}} \right) + 1 \right), \quad \Delta t = \frac{\Delta T}{n_t} \quad (214)$$

ΔT : REPOS- Zeitschrittweite.

Der radioaktive Zerfall wird nur für die allgemeine REPOS-Zeitschrittweite gerechnet, und zwar für jeden Block gemäß Kapitel 5.10.

5.9 Ausfällung und Sorption

Für den in Kapitel 5.7 berechneten Aktivitätsstrom sind nur die in der Lauge gelösten Nuklide relevant. Werden Löslichkeitsgrenzen überschritten, so fällt ein Teil der Nuklide aus und trägt nicht zum Aktivitätstransport bei. Der Wert der Löslichkeitsgrenze hängt zum einen von der chemischen Form des betreffenden chemischen Elements und zum anderen von den chemischen und physikalischen Randbedingungen in dem betrachteten Segment ab.

Es wird vorausgesetzt, daß sich alle Isotope eines Elementes chemisch ähnlich verhalten, so daß die ausgefällten Nuklide dasselbe Isotopenverhältnis haben wie die gelösten. Der Anteil $a_{L,i}$ der für den Transport zur Verfügung stehenden, gelösten Nuklide ist dann:

$$a_{L,i} = \frac{V_L L_{e(i)}}{I_{e(i)}} \quad (215)$$

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

Wenn in einem Segment die Löslichkeitsgrenzen überschritten werden, sind in allen Gleichungen des Kapitels 5, in denen Nuklidkonzentrationen vorkommen, die aus Gleichung 215 berechneten Konzentrationen gelöster Nuklide zu verwenden.

Neben der Ausfällung von Nukliden durch Überschreiten der Löslichkeitsgrenzen kann der Aktivitätstransport durch Sorption herabgesetzt werden. Dieser Effekt beschreibt die Adsorption der

Nuklide an den Oberflächen der angrenzenden Festkörper, dem sogenannten Sorbens. Quantitativ wird die Sorption im Modul REPOS durch den Verteilungskoeffizienten K_d beschrieben, der das Verhältnis der Konzentration des Nuklids am Sorbens c_{Ad} zur Konzentration des Nuklids in der Lösung c_L angibt:

$$K_d = \frac{c_{Ad}}{c_L}. \quad (216)$$

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

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

$$a_{L,i} = \frac{1}{1 + \frac{m_S}{V_L} K_d}. \quad (217)$$

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

Da in einem Segment im allgemeinen Ausfällung und Sorption gleichzeitig stattfinden können, muß der gelöste Anteil durch Kombination der Gleichungen 215 und 217 berechnet werden. Die Löslichkeitsgrenze $L_{e(i)}$ aus Gleichung 215 wird hierzu um den Anteil, der durch Sorption maximal am Transport gehindert werden kann, erhöht:

$$L'_{e(i)} = L_{e(i)} \left(1 + \frac{K_d m_S}{V_L} \right). \quad (218)$$

Wird in dem betrachteten Segment diese Löslichkeitsgrenze überschritten, so fällt der überschüssige Anteil der Nuklide aus. Mit dem nach Berücksichtigung der Löslichkeitsgrenzen in Lösung verbliebenen Inventar wird dann nach Gleichung 215 der Anteil berechnet, der nach Berücksichtigung der Sorption in der Lösung verbleibt.

5.10 Radioaktiver Zerfall und Nuklidbilanzierung

Die zur Bilanzierung des Aktivitätsinventars unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Aktivitätsströme und des radioaktiven Zerfalls benötigte Gleichung wird im Modul REPOS näherungsweise in zwei Schritten gelöst:

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

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

Voraussetzung des im folgenden beschriebenen Verfahrens ist, daß nur solche Zerfälle auftreten, bei denen zu jedem Mutternuklid höchstens eine Tochter existiert, umgekehrt aber zu einem Tochternuklid mehrere Mutternuklide existieren können. Man erhält unter diesen Annahmen eine Baumstruktur des Zerfalles, die in Abbildung 64 dargestellt ist.

Die Differentialgleichung für die Aktivität des i -ten Nuklids hat entsprechend der Abbildung 64 zwei Anteile:

$$\dot{A}_i = \frac{dA_i}{dt} = \lambda_i \left(\sum_j A_j - A_i \right). \quad (219)$$

Die zeitliche Änderung der Aktivität dA_i/dt ist also proportional zur Aktivität A_i des Nuklids selbst und zur Summe der Aktivitäten der Mutternuklide $\sum A_j$. Die Zerfallsrate λ_i ist hierbei die Proportionalitätskonstante.

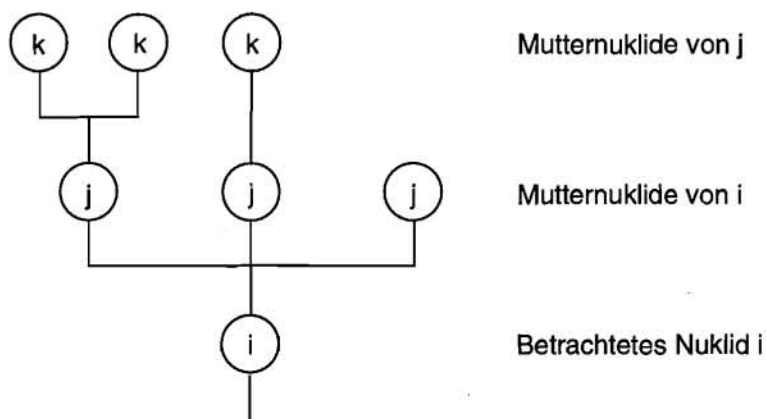


Abbildung 64: Schematische Darstellung der im Modul REPOS berücksichtigten Baumstruktur von Zerfallsketten.

Mit dem Ansatz

$$A_i(t) = f_i(t) e^{-\lambda_i t}, \quad (220)$$

mit $A_i(0) = A_{i,0} = f_i(0)$,

erhält man die Lösung der Differentialgleichung 219 in der Form

$$A_i(t) = A_{i,0} e^{-\lambda_i t} + \lambda_i e^{-\lambda_i t} \sum_j \int_0^t A_j(t') e^{\lambda_i t'} dt'. \quad (221)$$

Für ein bekanntes Anfangsinventar $A_{i,0}$ läßt sich aus Gleichung 221 zu beliebigen Zeiten das Aktivitätsinventar des i -ten Nuklids bestimmen.

Ist j das Anfangsnuklid der Zerfallskette, so steht in Gleichung 221 nur das erste Glied, das die Aktivität $A_j(t)$ beschreibt. Durch sukzessives Einsetzen in Gleichung 221 können dann die Aktivitäten der Tochternuklide i berechnet werden.

Die Gleichung 221 kann also rekursiv gelöst werden und läßt sich ausgeschrieben darstellen als:

$$\begin{aligned} A_i(t) = & A_{i,0} \cdot e^{-\lambda_i \cdot t} + \\ & \sum_j A_j(t) - A_{j,0} \cdot e^{-\lambda_j \cdot t} \cdot \frac{\lambda_j}{\lambda_i - \lambda_j} + \\ & \sum_j \sum_k A_k(t) - A_{k,0} \cdot e^{-\lambda_k \cdot t} \cdot \frac{\lambda_k}{\lambda_j - \lambda_k} \cdot \frac{\lambda_j}{\lambda_j - \lambda_i} + \\ & \sum_j \sum_k \sum_l \sum_{anf} A_{anf}(t) - A_{anf,0} \cdot \frac{\lambda_{anf}}{\lambda_l - \lambda_{anf}} \cdot \frac{\lambda_l}{\lambda_j - \lambda_l} \cdot \frac{\lambda_j}{\lambda_k - \lambda_j} \cdot \frac{\lambda_k}{\lambda_k - \lambda_i} \cdots \frac{\lambda_{anf-1}}{\lambda_{anf-1} - \lambda_i} \end{aligned} \quad (222)$$

In dieser Gleichung wurden die folgenden Größen verwendet:

- $\lambda_{i,j,k,\dots}$: Zerfallsrate für das i,j,k,\dots -te Nuklid,
- $A_{i,0}, A_{j,0}, \dots$: Anfangsaktivität des i,j,\dots -ten Nuklids,
- $A_{anf}(t)$: Aktivität des ersten Nuklids in der Zerfallsreihe,
- $A_{anf,0}$: Anfangsaktivität des ersten Nuklids in der Zerfallsreihe.

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

$$A_i^{\text{neu}}(t + \Delta t) = A_i^{\text{alt}}(t + \Delta t) + (\dot{A}_{i,e}(t) - \dot{A}_{i,a}(t)) \Delta t. \quad (223)$$

Dabei beschreibt A_i^{alt} das Nuklidinventar nach dem radioaktiven Zerfall über die Zeitdauer Δt und A_i^{neu} das Inventar nach Berücksichtigung der Aktivitätsströme. Beide Werte gelten für das Ende des Zeitschrittes, während die Aktivitätsströme auf den Beginn des Zeitschrittes bezogen sind. Die Indizes e und a bei den Aktivitätsströmen kennzeichnen den ein- und ausströmenden Anteil für das betrachtete Segment. Bei Abfallgebinden ist der Eingangs-Aktivitätsstrom nicht vorhanden.

6 Das Modul CHET

6.1 Aufgabenbeschreibung

Bei Langzeitsicherheitsanalysen von Endlagern in tiefen geologischen Formationen wird für relevante Szenarien die Schädigung des Menschen infolge einer Freisetzung von Radionukliden abgeschätzt. Bei der Ausbreitung der Radionuklide vom Endlager zum Menschen werden drei voneinander unabhängige Teilsysteme betrachtet, das Grubengebäude, das Deckgebirge und die Biosphäre.

Im Deckgebirge werden die Radionuklide mit dem Grundwasserfluß transportiert. Vor der Berechnung des Radionuklidtransports wird daher eine Grundwasserrechnung durchgeführt, die das dreidimensionale Geschwindigkeitsfeld der Grundwasserströmung liefert. In einigen Fällen lassen sich mit Hilfe von Particle-Tracking bevorzugte Ausbreitungspfade definieren, so daß die Schadstoffmigration durch das Deckgebirge durch einen eindimensionalen Transportweg mit konstantem Volumenstrom, veränderlichem Querschnitt und variablen Materialeigenschaften modelliert werden kann.

Für die Simulation eines solchen eindimensionalen Radionuklidtransports ist das Rechenprogramm CHET mit den Entwicklungsstufen CHET1 [24] und CHET2 [25] konzipiert worden. CHET steht für eine Verknüpfung von chemischen Effekten, die eine Radionuklidrückhaltung bewirken, mit Transport.

In CHET wird der eindimensionale Transport von Radionukliden in einem porösen, fluidgesättigten Medium berechnet. Folgende Effekte werden in CHET betrachtet:

- advektiver Transport im zeitlich konstanten Volumenstrom,
- diffusiver Transport,
- dispersiver Transport,
- elementspezifische Schadstoffrückhaltung,
- zeitabhängiger nuklidspezifischer Eingangsstrom,
- radioaktiver Zerfall unter Berücksichtigung von Radionuklidketten.

Zu- und Abflüsse senkrecht zum Transportweg werden weder für das Fluid noch für Radionuklide behandelt.

Der Transportweg durch das Deckgebirge 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.

Die Lösung der Transportgleichung erfolgt nach der Methode der Finiten Differenzen. Innerhalb von CHET wird für alle Gebiete unter Berücksichtigung einer wählbaren Gitter-Pecletzahl eine Ortsdiskretisierung durchgeführt. Die Zeitdiskretisierung wird über die Stabilitätskriterien des Lösungsalgorithmus unter Einbeziehung der Rückhaltung gesteuert.

CHET ist bei der Entwicklung als Modul zum Einbau in das vorliegende Programmpaket EMOS konzipiert worden. Wie bereits in der Einleitung dargestellt, ist EMOS ein Prognoseprogramm, das die Vorgänge in den Teilsystemen Grubengebäude, Deckgebirge und Biosphäre nacheinander behandelt und als Endergebnis die resultierende Individualdosis liefert. Im Modul REPOS wird die Freisetzung von Radionukliden aus dem Endlager berechnet. Dementsprechend werden die in REPOS berechneten Freisetzungsraten als Nuklideingangsströme von CHET verwendet. Die Zeitverläufe der Konzentrationen an einem auswählbaren Ort werden zur Weiterverarbeitung an das Biosphärenmodul EXPOS übergeben.

Im folgenden werden beide Entwicklungsstufen von CHET beschrieben. CHET2 ist eine Weiterentwicklung von CHET1 und berücksichtigt neben dem physikalischen Transport (Advektion, Dispersion, Diffusion) eine elementspezifische Rückhaltung unter Verwendung von Henry-, Langmuir- und Freundlich-Isothermen. Aufgrund der modularen Programmstruktur von CHET2 ist der Einbau weiterer Sorptionsisothermen ohne Schwierigkeiten möglich.

Arbeiten zur Verifizierung der Rechenprogramme CHET1 und CHET2 werden in den bereits zitierten Berichten dargestellt. Desweiteren werden dort die qualitativen Auswirkungen bei Verwendung konzentrationsabhängiger Sorption erläutert und die Berechnung des Zerfalls innerhalb von Zerfallsreihen überprüft sowie Anwendungsrechnungen unter Verwendung linearer und nichtlinearer Sorptionsansätze vorgestellt.

Während im Verifikationsbericht zu CHET1 [24] vor allem die Korrektheit der Algorithmen in bezug auf die Modellierung von Advektion, Dispersion und Diffusion gezeigt wurde, wird im Bericht zu CHET2 [25] im wesentlichen auf die nichtlineare Sorption und ihre numerische Modellierung eingegangen und die korrekte Behandlung des Zerfalls innerhalb von Zerfallsreihen überprüft.

In diesem Bericht werden zuerst in Kapitel 6.2 die physikalischen Grundlagen behandelt, die den Radionuklidtransport im Deckgebirge bestimmen und daher die Grundlage des vorliegenden Programms sind. Anschließend werden die dem Programm CHET zugrundeliegenden numerischen Algorithmen beschrieben. Dabei wird besonders auf Einzelheiten der Realisierung und auf die Funktion von verschiedenen automatisch arbeitenden Voreinstellungen und Korrekturen eingegangen. Anhand eines Ablaufdiagramms wird die iterative Kopplung zwischen der Transport- und der Sorptionsberechnung veranschaulicht. Im darauffolgenden Abschnitt wird der Ablauf einer Transportrechnung mit CHET dargelegt.

Eine vollständige Input-Beschreibung findet sich in Kapitel 8. Die Beschreibung der COMMON-Blöcke für die Versionen CHET1 und CHET2 ist jeweils im Anhang der Berichte [24] und [25] enthalten.

6.2 Physikalische Grundlagen und mathematische Formulierung

Im folgenden Kapitel werden zuerst die beim Transport wirksamen Effekte erläutert. Danach werden die Rückhaltemechanismen und ihre funktionale Beschreibung dargelegt. Anschließend wird die eindimensionale Transportgleichung einschließlich ihrer Randbedingungen aufgestellt.

6.2.1 Beschreibung des Transports

In diesem Unterkapitel werden die Effekte erläutert, die beim Transport von Radionukliden durch ein poröses Medium eine Rolle spielen. Dabei muß das Strömungsfeld des Fluids vorgegeben sein. Es wird vorausgesetzt, daß die Radionuklide in so geringer Konzentration vorliegen, daß sie die Bewegung des Fluids nicht beeinflussen.

Es werden zuerst die eigentlichen Transportmechanismen besprochen. Danach wird der Rückhalte­mechanismus definiert, der eine Verzögerung von Radionukliden gegenüber dem Fluid bewirkt. Zum Schluß werden Quellen und Senken behandelt.

6.2.1.1 Transportmechanismen

Für den Transport im engeren Sinne sind drei Effekte verantwortlich:

- Advektion,
- molekulare Diffusion,
- hydraulische Dispersion.

Die **Advektion** behandelt den Transport von Radionukliden mit der mittleren Geschwindigkeit des Fluids. Unter mittlerer Geschwindigkeit ist hier die Mittelung über die lokalen Geschwindigkeiten im flüssigkeitsgefüllten Porenvolumen zu verstehen. Sie wird Abstandsgeschwindigkeit genannt.

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

$$u = \frac{\dot{V}}{\phi A}, \quad (224)$$

- u Abstandsgeschwindigkeit des Fluids [m/a],
- \dot{V} Volumenstrom [m^3/a],
- ϕ Porosität,
- A Querschnittsfläche des Aquifers senkrecht zum Transportweg [m^2].

In die Berechnung der Abstandsgeschwindigkeit geht die Porosität ϕ ein, die als Anteil des mobilen Porenwassers am Gesamtvolumen definiert ist. Der Anteil der in natürlichen Aquiferen vorhandenen "dead-end-Poren" wird vernachlässigt, da angenommen wird, daß er besonders in Porenleitern gering ist [26]. Ein Unterschied zwischen Porosität und effektiver Porosität wird also nicht gemacht. Auch der Effekt der Matrixdiffusion bleibt damit unberücksichtigt.

Die **molekulare Diffusion** wird durch das Ficksche Gesetz beschrieben, das besagt, daß die Stromdichte proportional zum Gradienten der Konzentration ist. Die Proportionalitätskonstante ist die molekulare Diffusionskonstante D_m .

Innerhalb eines Porenraums, d.h. im mikroskopischen Bereich, existieren für ein Radionuklid nur zwei grundlegende Transportmechanismen: die advective 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** [26].

Im physikalischen Sinn beschreibt die hydraulische Dispersion die Tatsache, daß die einzelnen Radionuklide 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. Die Größe der hydraulischen Dispersion ist immer abhängig von der Genauigkeit, mit der die Grundwasserbewegung dargestellt wird.

Von korngerüstbedingter Dispersion oder **Mikrodispersion** spricht man, wenn berücksichtigt wird, daß die Strömung in der Mitte der Porenkanäle schneller ist als an deren Rand und daß die Wege des Fluids um einzelne Körner des porösen Materials herum führen. Von **Makrodispersion** dagegen spricht man, wenn zusätzliche Inhomogenitäten im Strömungsfeld durch die hydraulische Dispersion berücksichtigt werden müssen, weil sie durch explizite Modellierung nicht dargestellt sind. Solche zusätzlichen Inhomogenitäten entstehen z. B. durch horizontale Schichtungen des porösen Materials oder Linsen von undurchlässigem Material. Die Makrodispersion überwiegt in natürlichen geologischen Systemen normalerweise die Mikrodispersion um mehrere Größenordnungen.

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 α und Abstandsgeschwindigkeit des Fluids dargestellt werden.

$$D_h = \alpha u, \quad (225)$$

D_h hydraulischer Dispersionskoeffizient [m^2/a],
 α longitudinale Dispersionslänge [m].

Die Gültigkeit des Fickschen Ansatzes wird durch zahlreiche Säulenversuche als praktikabel bestätigt [26].

Die Bestimmung der Dispersionslänge stellt in großräumigen geologischen Systemen ein noch nicht gelöstes Problem dar [27]. Eine Ursache hierfür liegt in der in Experimenten beobachteten Abhängigkeit der Dispersionslänge von der zurückgelegten Strecke.

Im folgenden wird Dispersion als Oberbegriff für hydraulische Dispersion und Diffusion verwendet. Damit gilt:

$$D = D_m + \alpha u . \quad (226)$$

6.2.1.2 Rückhaltemechanismen

Bringt man eine unbelastete Festkörperoberfläche in Kontakt mit schadstoffhaltigem Fluid, so wird die Schadstoffkonzentration in der unmittelbaren Umgebung der Oberfläche zunehmen. Dieser Vorgang wird mit der Zeit langsamer, bis sich stationäre Verhältnisse einstellen.

Die Anlagerung 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:

$$c_{ad} = f(c) . \quad (227)$$

In CHET2 wird zur Beschreibung der Rückhaltemechanismen angenommen, daß sich das Adsorptionsgleichgewicht sehr schnell einstellt. D.h. die adsorbierte Konzentration läßt sich in Abhängigkeit von der gelösten Konzentration mit Hilfe der Adsorptionsisotherme gemäß Gleichung 227 berechnen.

Die in CHET2 implementierten Sorptionsansätze beschränken sich auf die drei am häufigsten verwendeten Adsorptionsisothermen:

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

a) Henry-Isotherme

Die Henry-Isotherme beschreibt das Verhältnis von im Fluid gelöster Konzentration und an der Matrix sorbierter Stoffmenge durch einen linearen Zusammenhang. Dieser Ansatz wird in CHET1 verwendet und als K_d -Konzept bezeichnet. Es basiert auf der Annahme, daß bei geringen Elementkonzentrationen und Vorliegen eines Gleichgewichts das Verhältnis zwischen der

Konzentration des am Gestein adsorbierten Radionuklids und der in Lösung vorliegenden Radionuklidkonzentration konstant, d.h. unabhängig von der Konzentration ist. Dieses Verhältnis wird als K_d -Wert bezeichnet. Es gilt:

$$c_{ad} = K_d c \quad (228)$$

mit

c_{ad} Konzentration des am Gestein adsorbierten Radionuklids [Bq/kg],

c Konzentration des Radionuklids in Lösung [Bq/m³].

b) Langmuir-Isotherme

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

$$c_{ad} = \frac{K_L c}{1 + \frac{K_L}{\kappa} c} \quad (229)$$

mit

K_L Bindungsaffinität [m³/kg],

κ Beladungskapazität [mol/kg].

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 κ , 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 .

c) Freundlich-Isotherme

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

$$c_{ad} = k_1 \left(\frac{c}{[c]} \right)^{k_2} \quad (230)$$

mit der Stoffkonstanten k_1 [m^3/kg] und dem Exponenten k_2 . $[c]$ bezeichnet die Maßeinheit von c , so daß die Basis zum Exponenten k_2 in Gleichung 230 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 k_2 ist in den meisten Fällen kleiner oder gleich eins. Er stellt ein Maß für die Nichtlinearität der Isotherme dar. Für $k_2 = 1$ geht die Isotherme in eine Gerade (Henry-Isotherme) über, deren Steigung durch den Parameter k_1 bestimmt wird.

d) Vergleich der Isothermen

In Abbildung 65 sind die sorbierten Konzentrationen bei Berücksichtigung der Sorption mittels Langmuir- bzw. Freundlich-Isotherme aufgetragen. Die verwendeten Parameter sind in Tabelle 7 aufgelistet.

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

$$a = \frac{m_L}{m_L + m_{ad}} = \frac{\phi c}{\phi c + (1 - \phi) \rho f(c)}, \quad (231)$$

- a mobiler Anteil eines Radionuklids,
- ρ Gesteinsdichte,
- ϕ Porosität,
- m_L gelöste Nuklidmasse,
- m_{ad} sorbierte Nuklidmasse.

Bei Verwendung der Henry-Isotherme (K_d -Konzept) läßt sich dieser Ausdruck folgendermaßen schreiben:

$$a = \frac{1}{1 + \frac{1 - \phi}{\phi} \rho K_d}, \quad (232)$$

Der mobile Anteil entspricht genau dem reziproken Retardationsfaktor R , der die Verzögerung eines Radionuklids gegenüber dem Fluid beschreibt [26]:

$$R = \frac{u}{u_{RN}} = 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho \frac{f(c)}{c}, \quad (233)$$

u_{RN} Abstandsgeschwindigkeit des Radionuklids [m/a].

Bei Verwendung der Henry-Isotherme (K_d -Konzept) läßt sich dieser Ausdruck folgendermaßen schreiben:

$$R = \frac{u}{u_{RN}} = 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho K_d, \quad (234)$$

Betrachtet man die Konzentrationsabhängigkeit des Retardationsfaktors, so unterscheiden sich die Kurvenverläufe für Langmuir- und Freundlich-Isothermen wie in Abbildung 66 dargestellt. Als Sorptionsparameter wurden die in Tabelle 7 angegebenen Werte verwendet. Der Einfluß der einzelnen Sorptionskonstanten ist wie folgt: Bei der Langmuir-Isotherme verläuft der Retardationsfaktor für sehr kleine Konzentrationen c gegen einen Grenzwert, der durch K_L bestimmt wird, für sehr hohe Konzentrationen c gegen den Wert 1. Eine Variation von K_L bewirkt eine Verschiebung des Maximalwertes von R bei kleinen Konzentrationen. Eine Variation von κ bewirkt eine Parallelverschiebung der Kurve entlang der Abszisse.

Bei der Freundlich-Isotherme nähert sich der Retardationsfaktor bei hohen Konzentrationen ebenfalls dem Grenzwert $R = 1$ an, hat aber einen qualitativ anderen Verlauf als bei der Langmuir-Isotherme. Die Kurve beschreibt eine Potenzfunktion mit negativem Exponenten, d. h. bei sehr geringen Konzentrationen strebt der Retardationsfaktor gegen unendlich.

Isotherme	κ [mol/g]	K_L [l/g]	k_1 [l/g]	k_2 [-]
La1	$2.0 \cdot 10^{-12}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$		
La2	$1.0 \cdot 10^{-12}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$		
La3	$2.0 \cdot 10^{-12}$	$3.0 \cdot 10^{-2}$		
Fr1			$8.48 \cdot 10^{-4}$	0.9
Fr2			$7.1 \cdot 10^{-5}$	0.8
Fr3			$3.53 \cdot 10^{-9}$	0.4

Tabelle 7: Parameter für Abbildungen 65 und 66

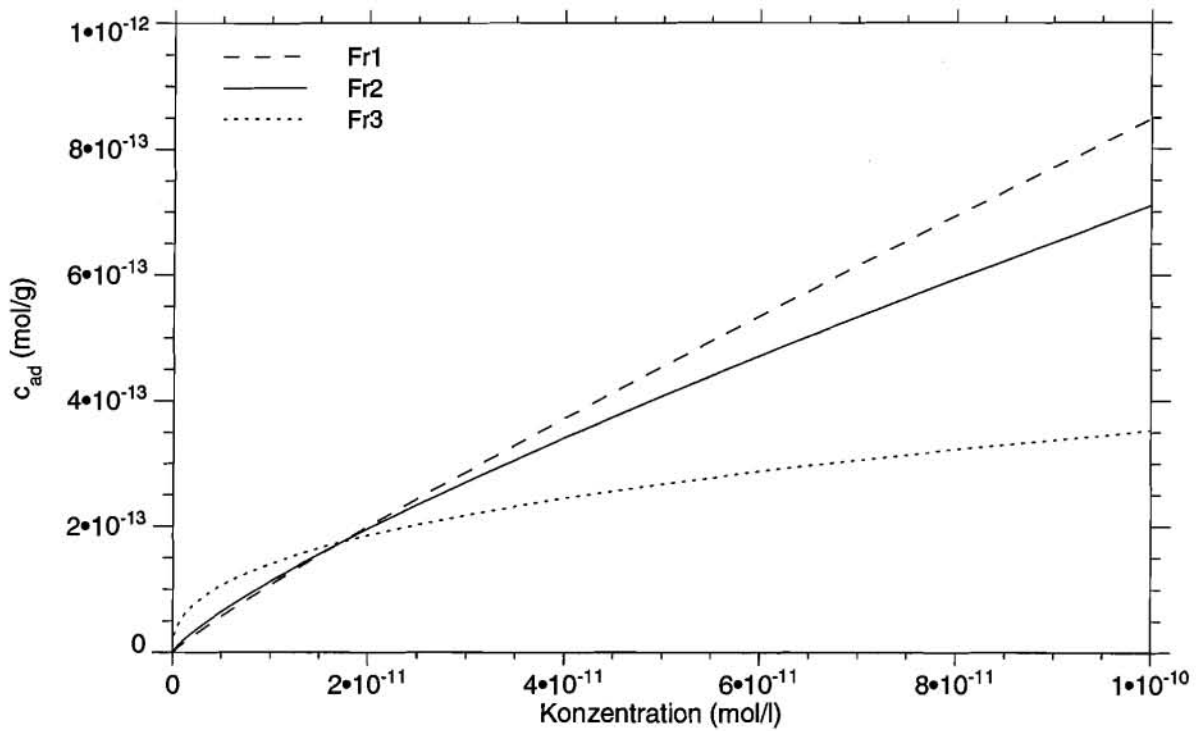
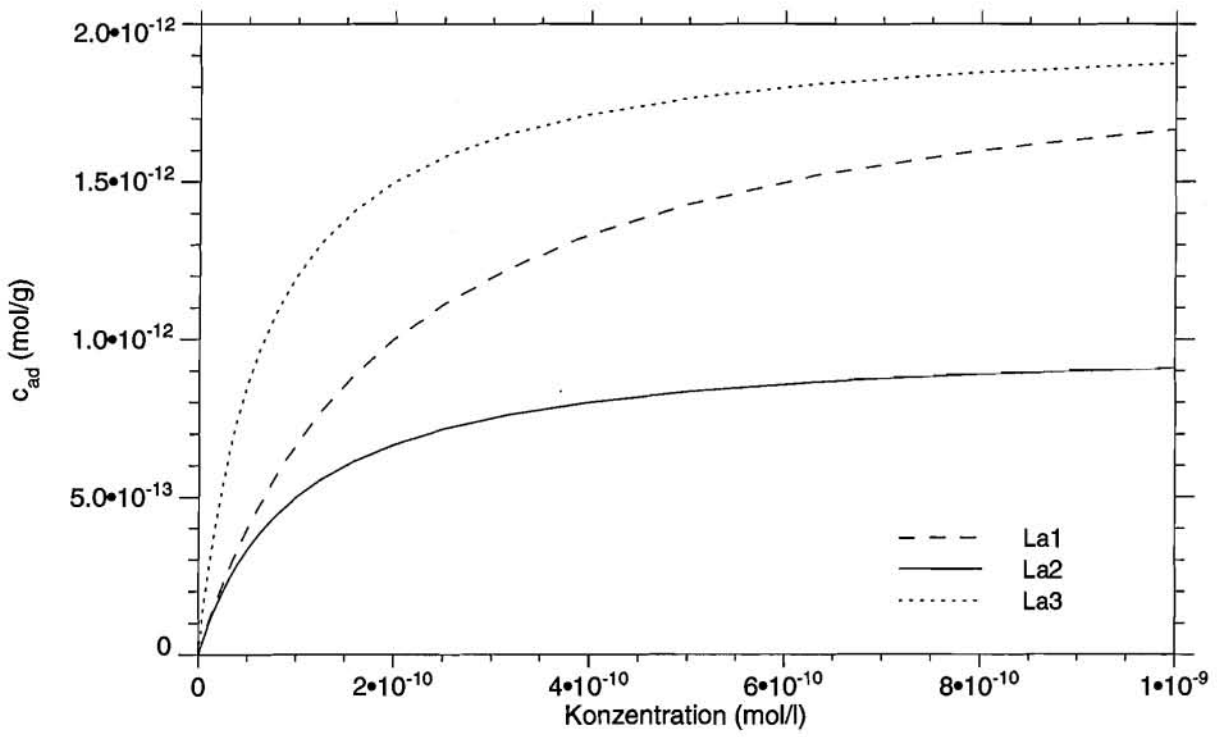


Abbildung 65: Vergleich zwischen Langmuir- (oben) und Freundlich-Isothermen (unten)

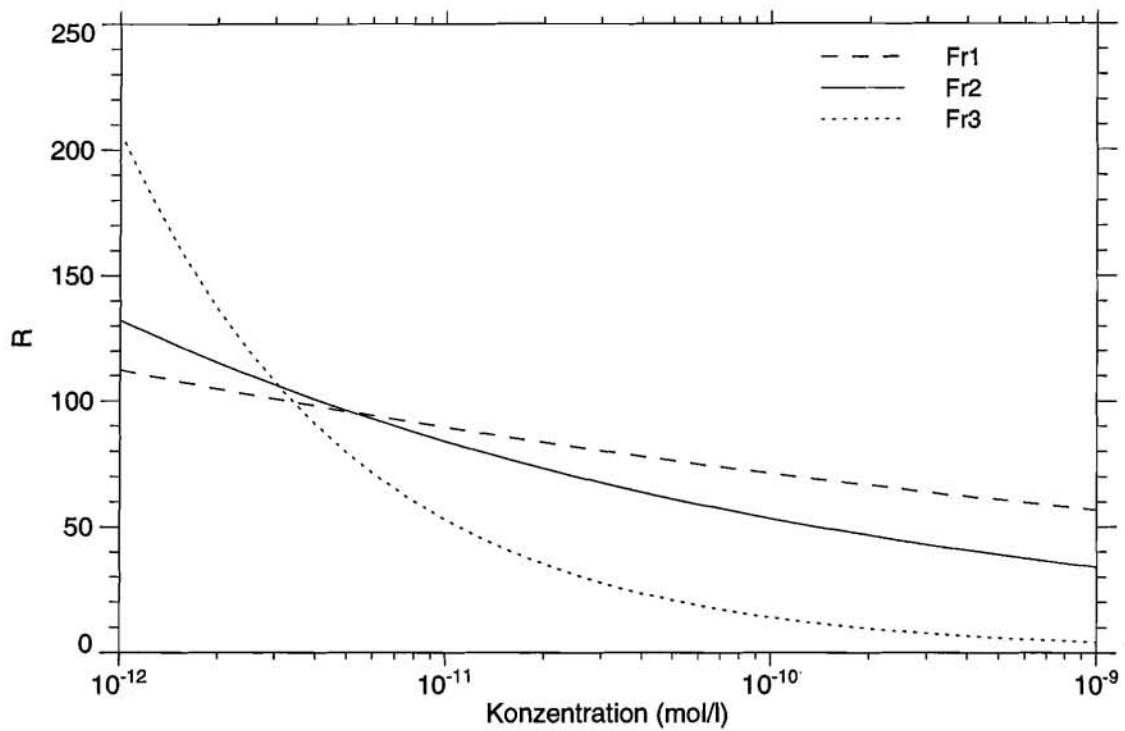
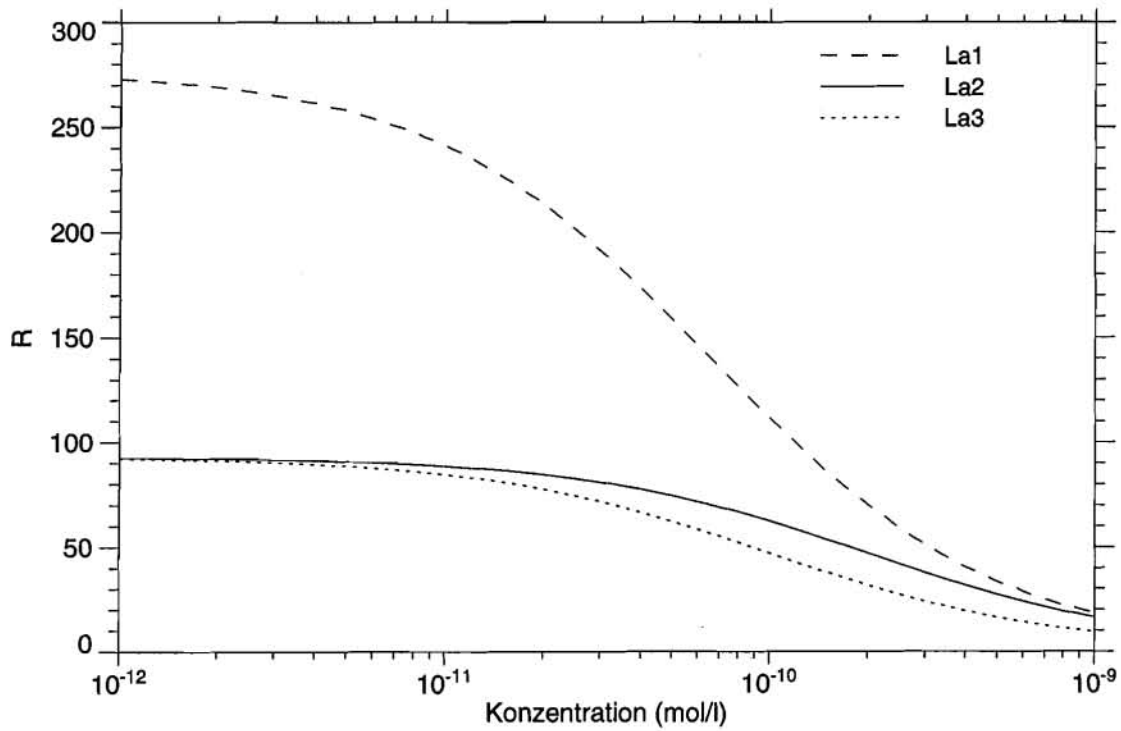


Abbildung 66: Retardationsfaktoren in Abhängigkeit der Schadstoffkonzentration für Sorption nach Langmuir (oben) und Freundlich (unten)

6.2.1.3 Quellen und Senken

Als Quellen bzw. Senken werden alle Effekte außer den Transportmechanismen selbst und dem Rückhaltemechanismus bezeichnet, welche die Radionuklidkonzentration an einer beliebigen Stelle des Transportwegs verändern. Da aufgrund der Aufgabenstellung Zu- und Abflüsse des Fluids senkrecht zum Transportweg nicht zugelassen sind und auch chemische Reaktionen nicht berücksichtigt werden, kommen hier nur in Betracht:

- Radionuklideintrag in den Transportweg,
- radioaktiver Zerfall.

Ein Radionuklideintrag in den Transportweg, z. B. ein Zustrom von Radionukliden aus einem Endlager, wird in einem beliebigen Block zugelassen. In der Transportgleichung wird er durch einen volumenbezogenen Quellterm σ realisiert.

Der radioaktive Zerfall des betrachteten Radionuklids wird als Senke, der Aufbau aus zerfallenden Müttern als Quelle modelliert. Dabei darf ein Radionuklid zwar mehrere Mütter, aber nur eine Tochter haben.

6.2.2 Transportgleichung

Zur allgemeinen Herleitung der Transportgleichung siehe [26], [28] und [29]. Für CHET wurde die in [26] beschriebene Formulierung der eindimensionalen Transportgleichung zugrundegelegt. In diesem Ansatz wird zusätzlich der radioaktive Zerfall einschließlich Zerfallsketten berücksichtigt, der Term, der Zu- und Abflüsse senkrecht zum Transportweg beschreibt, dagegen weggelassen. Ein Retardationsfaktor R wird entsprechend [26] ergänzt. Die eindimensionale Transportgleichung lautet dann:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi A c_k) + \frac{\partial}{\partial t}((1-\phi) \rho A c_{ad,k}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi A (D_m + \alpha u) \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \phi A u c_k + \sigma_k A - \lambda_k A \left(\phi c_k + (1-\phi) \rho c_{ad,k} - \sum_{k'} (\phi c_{k'} + (1-\phi) \rho c_{ad,k'}) \right). \quad (235)$$

$c_k(x,t)$	Konzentration des Radionuklids k in Lösung [Bq/m ³],
$\phi(x)$	Porosität,
$A(x)$	Querschnittsfläche des Aquifers senkrecht zum Transportweg [m ²],
$R_k(x)$	Retardationsfaktor des Radionuklids k ,
$D(x)$	Dispersionskonstante nach Gleichung 226 [m ² /a],
$u(x)$	Abstandsgeschwindigkeit des Fluids [m/a],
$\sigma_k(x,t)$	volumenbezogener Quellterm des Radionuklids k [Bq m ⁻³ a ⁻¹],
λ_k	Zerfallskonstante des Radionuklids k [a ⁻¹],
k	Nuklidindex,
k'	Index für die Mütter des Nuklids k .

Unter Verwendung elementspezifischer Gleichgewichtssorption läßt sich die adsorbierte Konzentration $c_{ad,k}$ entsprechend Gleichung 227 mit Hilfe der Isotherme schreiben:

$$c_{ad,k} = \frac{c_k}{c_{e(k)}} f(c_{e(k)}), \quad (236)$$

wobei $c_{e(k)}$ die gelöste Gesamtkonzentration des Elements bezeichnet, dem das k-te Radionuklid angehört.

Der elementspezifische Retardationsfaktor R_k für das k-te Nuklid wird entsprechend Gleichung 233 definiert durch:

$$R_k = 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho \frac{f(c_{e(k)})}{c_{e(k)}}. \quad (237)$$

Unter Verwendung des Retardationsfaktors R_k kann die Transportgleichung 235 geschrieben werden als:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi A R_k c_k) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi A D \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\phi A u c_k) + \sigma_k A - \lambda_k \phi A \left(R_k c_k - \sum_{k'} R_{k'} c_{k'} \right), \quad (238)$$

Speicherung Dispersion Advektion Quelle radioaktiver Zerfall

Die Transportgleichung 238 ist für konzentrationsunabhängige Retardationsfaktoren R_k formal eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung vom parabolisch-hyperbolischen Typ mit den unabhängigen Variablen x und t . Eine detaillierte Klassifizierung [26], [30] 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.

Als Randbedingung für den Einstromrand wird Undurchlässigkeit für Radionuklide angenommen. Dies ist für den advektiven Transport exakt. Für den dispersiven Transport stellt es eine Näherung dar. Sie wurde gewählt, weil ein Abtransport von Radionukliden durch diesen Rand zu Schwierigkeiten bei der Bilanzierung führen würde. Ist der advektive Transport dominierend, so ist diese Vernachlässigung gerechtfertigt. Wenn man Beispiele behandeln will, bei denen der diffusive Transport überwiegt, so läßt sich das realisieren, indem man die Nuklidquelle in einen Block legt, der weit genug von Einstromrand entfernt ist.

Die Randbedingung für den Ausstromrand wird so gewählt, daß ein advektiver Abfluß der Radionuklide stattfindet, während der dispersive Fluß räumlich konstant ist (Transmissionsrandbedingung, siehe [31]). Dies läßt sich mathematisch so ausdrücken:

$$\left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x = L_{\text{Transport}}} = 0, \quad (239)$$

$L_{\text{Transport}}$ Gesamtlänge des Transportwegs [m].

6.3 Numerische Modellierung

Im vorliegenden Kapitel werden die Algorithmen zur numerischen Lösung des Transportproblems beschrieben. Im ersten Abschnitt wird das verwendete Diskretisierungsverfahren vorgestellt. Danach wird die Berechnung der Sorption und das Iterationsverfahren zur Behandlung der gekoppelten Transport- und Sorptionsprozesse dargelegt. Daraufhin wird die Berechnung des radioaktiven Zerfalls beschrieben. In einem abschließenden Abschnitt werden die numerischen Schwierigkeiten aufgrund von Instabilitäten und numerischer Dispersion sowie die sich daraus ergebenden Konsequenzen für die Zeit- und Ortsdiskretisierung erläutert.

6.3.1 Diskretisierungsverfahren

Die Transportgleichung wird nach der Methode der Finiten Differenzen gelöst. Im folgenden wird dieses Lösungsverfahren zunächst kurz erläutert. Anschließend wird der Lösungsalgorithmus aufgestellt.

Zur numerischen Lösung der obigen partiellen Differentialgleichung wird das Lösungsgebiet in eine endliche Zahl von Blöcken unterteilt. An jedem Blockrand oder an jedem Blockmittelpunkt werden die partiellen Ableitungen in der Differentialgleichung durch Differenzenquotienten ersetzt. Diese bestehen aus einer Taylor-Entwicklung, die im Falle einer Vorwärts- bzw. einer Rückwärtsdifferenz nach dem ersten Glied, im Falle einer zentralen Differenz nach dem zweiten Glied abgebrochen wird. Der dabei entstehende Fehler ist durch den ersten und größten Term der abgebrochenen Serie charakterisiert.

Die Ableitungen in einer partiellen Differentialgleichung können beliebig durch die unterschiedlichen Differenzenquotienten ersetzt werden, wobei allerdings nicht jede Kombination zu einer stabilen Lösung führt. Ein Algorithmus wird als stabil bezeichnet, wenn sich Störungen oder Diskretisierungsfehler nicht mit fortschreitender Zeit aufschaukeln. Die Wahl der Differenzen hat u.a. auch Einfluß auf die Komplexität und die Genauigkeit des Lösungsalgorithmus [30]. Die zur Lösung der Differentialgleichung aufgestellte Differenzengleichung ist konsistent, wenn der Fehler, der bei der Approximation der Differentialoperatoren durch Differenzenquotienten unter Vernachlässigung der höheren Glieder der Taylor-Entwicklung entsteht, bei örtlicher und zeitlicher Verfeinerung gegen null geht. 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 ex-

akte Lösung der zugehörigen Differentialgleichung konvergiert [30], [32]. Bei parabolischen Differentialgleichungen sind Stabilität und Konsistenz notwendige und hinreichende Bedingungen für die Konvergenz [30].

Für die Zeitdiskretisierung wurde das explizite Verfahren (Vorwärtsdifferenz) ausgewählt. Der Advektionsterm wurde durch eine Rückwärtsdifferenz und der Dispersionsterm durch eine zentrale Differenz approximiert. Unter den Bedingungen, die in Kapitel 6.3.5 genannt werden, ist dieser Lösungsalgorithmus stabil.

Zur Lösung der Transportgleichung 235 wird der Transportweg der Radionuklide in n Blöcke unterschiedlicher Länge Δx_i unterteilt, deren Mittelpunkten Konzentrationen c_i zugeordnet werden. Innerhalb eines Blockes i sind die vorgegebenen Parameter, der Querschnitt A_i , die Porosität ϕ_i , die Diffusionskonstante $D_{m,i}$, die Dispersionslänge α_i und der Retardationsfaktor R_i konstant. Der Volumenstrom \dot{V} ist über den gesamten Transportweg konstant.

Abbildung 67 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.

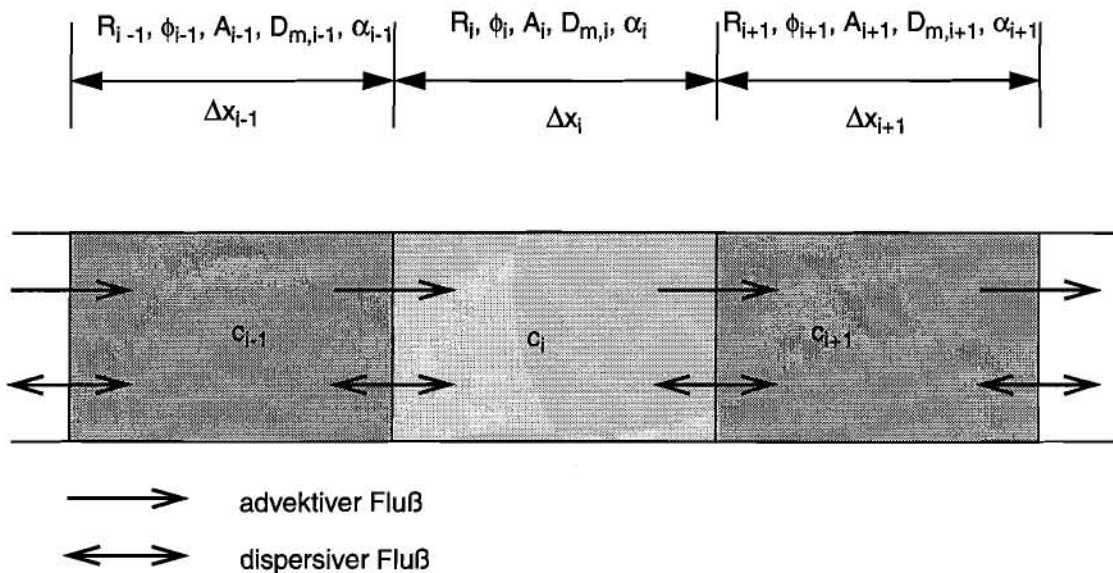


Abbildung 67: Ausschnitt aus dem Transportweg mit Zuordnung der Parameter

Folgende Hilfsgrößen finden bei der Lösung der Transportgleichung Verwendung:

- Porenvolumen: $V_i = \phi_i A_i \Delta x_i$,
- Abstand zwischen zwei benachbarten Blockmittelpunkten: $\Delta x_i = \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2}$.

6.3.1.1 Behandlung von Unstetigkeiten

Im letzten Kapitel wurden die Parameter in den Blöcken definiert. Wird eine zentrale Differenz zum Ersetzen der zweiten Ableitung in Gleichung 238 verwendet, so muß die Größe des Parameters $\phi A(D_m + \alpha u)$ an der Blockgrenze bekannt sein [33].

Im folgenden wird ein Massenfluß, beschrieben durch eine Variable P (z.B. $\phi A D_m$), an einer Blockgrenze g zwischen zwei aufeinanderfolgenden Blöcken i-1 und i betrachtet [27]. Aus der Kontinuitätsbedingung folgt, daß die dispersiven Flüsse rechts und links der Grenze g gleich sind:

$$P_{i-1} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g = P_i \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_i^g \quad (240)$$

Der Satz von Taylor liefert:

$$c_g - c_{i-1} = \frac{\Delta x_{i-1}}{2} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g + \dots \quad (241)$$

$$c_i - c_g = \frac{\Delta x_i}{2} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_i^g + \dots \quad (242)$$

Wird (240) in (242) eingesetzt und zu (241) addiert, so ergibt sich:

$$c_i - c_{i-1} = \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g \left[\frac{\Delta x_i P_{i-1}}{2 P_i} + \frac{\Delta x_{i-1}}{2} \right] \quad (243)$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g = \frac{2 (c_i - c_{i-1}) P_i}{\Delta x_i P_{i-1} + \Delta x_{i-1} P_i} \quad (244)$$

Der Massenfluß an der Grenze g läßt sich durch eine zentrale Differenz beschreiben, wobei der an der Grenze gültige Parameter mit \bar{P} bezeichnet wird. Dieser Fluß entspricht Gleichung 240:

$$P_i \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_i^g = \bar{P} \frac{c_i - c_{i-1}}{\frac{1}{2} \Delta x_{i-1} + \frac{1}{2} \Delta x_i} = P_{i-1} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g \quad (245)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 244 in Gleichung 245 wird ein Mittelwert für den an der Blockgrenze gültigen Parameter \bar{P} erhalten:

$$\bar{P} = \frac{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) P_{i-1} P_i}{\Delta x_i P_{i-1} + \Delta x_{i-1} P_i} \quad (246)$$

Dieser Mittelwert entspricht einem gewichteten harmonischen Mittel, dessen allgemeine Definition für eine beliebige Größe \bar{a} lautet:

$$\frac{\Delta x_i}{\bar{a}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x_{i-1}}{a_{i-1}} + \frac{\Delta x_i}{a_i} \right) \quad (247)$$

Wird für den dispersiven Massenfluß ein dem Fickschen Gesetz analoger Ansatz verwendet, so folgt:

$$P \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) = \phi A \alpha u \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (248)$$

Da der Volumenstrom konstant ist, ergibt sich für die Dispersionslänge:

$$\alpha_i = \frac{\alpha_{i-1} \alpha_i (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)}{\alpha_{i-1} \Delta x_i + \alpha_i \Delta x_{i-1}} \quad (249)$$

Für den diffusiven Massenfluß erhält man analog das gewichtete harmonische Mittel von $(\phi A D_m)$ an der Blockgrenze zwischen $i-1$ und i , das im folgenden mit $\overline{\phi A D_{mi}}$ bezeichnet wird:

$$\overline{\phi A D_{mi}} = \frac{\phi_{i-1} A_{i-1} D_{m_{i-1}} \phi_i A_i D_{m_i} (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)}{\phi_{i-1} A_{i-1} D_{m_{i-1}} \Delta x_i + \phi_i A_i D_{m_i} \Delta x_{i-1}} \quad (250)$$

6.3.1.2 Lösungsalgorithmus

Die eindimensionale Transportgleichung 238 wird für einen Zeitpunkt t und einen Block i explizit in der Zeit, rückwärtig für die Advektion und zentral für die Dispersion gelöst. Der Nuklidindex k ist im folgenden der Einfachheit halber weggelassen.

Die zeitliche Ableitung wird durch eine Vorwärtsdifferenz approximiert:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi ARc) = \phi_i A_i \frac{R_i(t + \Delta t) c_i(t + \Delta t) - R_i(t) c_i(t)}{\Delta t} . \quad (251)$$

Die Ortsableitungen werden zum Zeitpunkt t betrachtet. Dadurch erhält man ein explizites Lösungsverfahren.

Die erste Ortsableitung wird durch eine Rückwärtsdifferenz ersetzt ("up-wind" Schema):

$$\frac{\partial}{\partial x}(\phi Auc) = \dot{V} \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x_i} . \quad (252)$$

Für die zweite Ortsableitung wird eine zentrale Differenz eingesetzt:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\phi AD \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \overline{(\phi AD)}_{i+1} \frac{c_{i+1}(t) - c_i(t)}{\Delta x_{i+1} \Delta x_i} - \overline{(\phi AD)}_i \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x_i \Delta x_i} . \quad (253)$$

Durch Einsetzen von (251), (252) und (253) in Gleichung 238 erhält man einen Lösungsalgorithmus für die eindimensionale Transportgleichung, der für alle Blöcke außer den beiden Randblöcken sowie dem Quellblock und für alle Zeitpunkte t gilt:

$$\begin{aligned} c_i(t + \Delta t) = & \frac{R_i(t)}{R_i(t + \Delta t)} c_i(t) + \left[\left(1 + \frac{\overline{(\phi AD)}_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) c_{i-1} \right. \\ & + \left(-1 - \frac{\overline{(\phi AD)}_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} - \frac{\overline{(\phi AD)}_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) c_i \\ & \left. + \left(\frac{\overline{(\phi AD)}_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} \right) c_{i+1} \right] \frac{\dot{V} \Delta t}{V_i R_i(t + \Delta t)} . \end{aligned} \quad (254)$$

Zur Vereinfachung der Gleichung werden folgende Hilfsgrößen eingeführt:

$$\begin{aligned}
H_{1,i} &= \left(1 + \frac{(\overline{\phi AD})_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) \frac{\dot{V}}{V_i}, \\
H_{2,i} &= \left(-1 - \frac{(\overline{\phi AD})_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} - \frac{(\overline{\phi AD})_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) \frac{\dot{V}}{V_i}, \\
H_{3,i} &= \frac{(\overline{\phi AD})_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} \frac{\dot{V}}{V_i}.
\end{aligned} \tag{255}$$

In jedem Zeitschritt wird nach Gleichung 254 für jeden Block die Konzentration $c_i(t+\Delta t)$ aus den bekannten Konzentrationen $c_i(t)$ berechnet.

Die Anfangsbedingung für die Rechnung lautet:

$$c_i(t=0) = 0 \quad \text{für alle } i.$$

6.3.1.3 Algorithmus für die Randblöcke und den Quellblock

Die Bedingung für den Einstromrand wird erfüllt, in dem ein zusätzlicher Block vor dem ersten Block und somit außerhalb des Transportwegs postuliert wird, der dieselbe Blocklänge wie der erste Block, Δx_1 , besitzt. In diesem Block wird sowohl die Radionuklidkonzentration null gesetzt als auch die Dispersionslänge α und die molekulare Diffusionskonstante D_m .

Die Konzentration im ersten Block $c_1(t+\Delta t)$ ergibt sich unter diesen Bedingungen aus Gleichung 254 zu:

$$\begin{aligned}
c_1(t+\Delta t) &= \frac{R_1(t)}{R_1(t+\Delta t)} c_1(t) \\
&+ \left[\left(-1 - \frac{(\overline{\phi AD})_2}{\dot{V} \Delta x_2} \right) c_1(t) + \left(\frac{(\overline{\phi AD})_2}{\dot{V} \Delta x_2} \right) c_2(t) \right] \frac{\dot{V} \Delta t}{V_1 R_1(t+\Delta t)}.
\end{aligned} \tag{256}$$

Zur Bestimmung der Konzentration $c_n(t)$ im letzten Block n wird ein zusätzlicher Block $n+1$ angenommen, der dieselbe Blocklänge und dieselben Parameter aufweisen soll wie der Block $n-1$. Aus der Randbedingung 239 läßt sich die Konzentration $c_{n+1}(t)$ wie folgt berechnen:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\phi AD \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \frac{(\overline{\phi AD})_n}{\Delta x_{n+1}} \frac{c_{n+1}(t) - c_n(t)}{\Delta x_n} - \frac{(\overline{\phi AD})_n}{\Delta x_n} \frac{c_n(t) - c_{n-1}(t)}{\Delta x_n} = 0. \tag{257}$$

Da $\Delta x_{n+1} = \Delta x_n$, folgt:

$$c_{n+1}(t) = 2c_n(t) - c_{n-1}(t) . \quad (258)$$

Durch Einsetzen von (258) in (254) ergibt sich die Konzentration im letzten Block $c_n(t+\Delta t)$ zu:

$$c_n(t+\Delta t) = \frac{R_n(t)c_n(t)}{R_n(t+\Delta t)} + (c_{n-1}(t) - c_n(t)) \frac{\dot{V}\Delta t}{V_n R_n(t+\Delta t)} . \quad (259)$$

Ein Radionuklideintrag findet in genau einem, beliebig vorgebbaren Block statt und wird während eines Zeitschritts als konstant angenommen. Damit ergibt sich für den entsprechenden Term der Transportgleichung 238:

$$\sigma A = \frac{q(t)}{\Delta x_i} , \quad (260)$$

$q(t)$ Radionuklideinstromrate [Bq/a].

Zur Konzentration in dem Block, in dem der Radionuklideintrag angenommen wird, muß somit

$\frac{q(t)}{V_i R_i(t+\Delta t)} \Delta t$ addiert werden.

6.3.2 Berechnung der Rückhaltung

Die Verwendung nichtlinearer Gleichgewichtssorption erfordert die Berechnung der Rückhalteparameter zu jedem Zeitschritt. Die einzelnen Rückhaltewerte sind elementspezifisch und hängen von der Summe der Konzentrationen der zu den jeweiligen Elementen gehörenden Nuklide ab. Entsprechend Gleichung 237 ergeben sich die Rückhaltewerte zu:

$$R_e(t) = 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho \frac{f(c_e(t))}{c_e(t)} \quad (261)$$

mit

$$c_e(t) = \sum_{k \in e} c_k(t) , \quad (262)$$

wobei $k \in e$ bedeutet, daß das k -te Nuklid zum Element e gehört.

Bei Verwendung einer Freundlich-Isotherme strebt R_{θ} für sehr niedrige Konzentrationen gegen unendlich. Um dieses Verhalten bezüglich der Numerik in den Griff zu bekommen, wird für Konzentrationen c_{θ} kleiner als ε_{\min} der Rückhalteparameter durch die Vorschrift angenähert:

$$R_{\theta}(t) = 1 + \frac{1-\phi}{\phi} \rho k_1 \varepsilon_{\min}^{k_2-1} \quad (263)$$

ε_{\min} ist dabei ein vorzugebender, sehr niedriger Konzentrationswert.

6.3.3 Kopplung zwischen Transport und Sorption

Die Transportberechnung der Konzentrationen und die Berechnung der elementspezifischen Rückhaltefaktoren sind miteinander gekoppelt, d.h. eine Veränderung der Rückhaltefaktoren verändert den Transport der Konzentrationen und umgekehrt. Bei Verwendung einer Henry-Isotherme sind die Rückhalteparameter unabhängig von der Konzentration. Demzufolge ist in CHET1 keine Kopplung von Transport und Sorption zu berücksichtigen.

Die nichtlinearen Abhängigkeiten werden in CHET2 mittels einer Fixpunkt-Iteration behandelt. Ein Iterationsschritt besteht aus der Berechnung des Transports und der Sorptionswerte. Die hierbei ermittelten Konzentrations- bzw. Rückhaltewerte werden danach im darauffolgenden Iterationsschritt verwendet. Das Verfahren wird abgebrochen, falls die Konzentrationsänderungen von einer Iterierten zur anderen unterhalb einer vorzugebenden Schranke liegen.

Die Zeitschrittweite für die Berechnung des Transports unterliegt den Schrittweitenkriterien (278) und (281). Werden die Zeitschrittweitenkriterien innerhalb der Fixpunktiteration aufgrund der sich verändernden Konzentrationen und Rückhaltewerte überschritten, so wird die Zeitschrittweite solange halbiert, bis sie diese Kriterien erfüllt. Entsprechend der kleineren Schrittweiten vervielfacht sich die Anzahl der Transport- und Sorptionsberechnungen.

In Abbildung 68 ist das hier beschriebene Verfahren zur Transportberechnung unter Verwendung nichtlinearer Gleichgewichtssorption dargestellt.

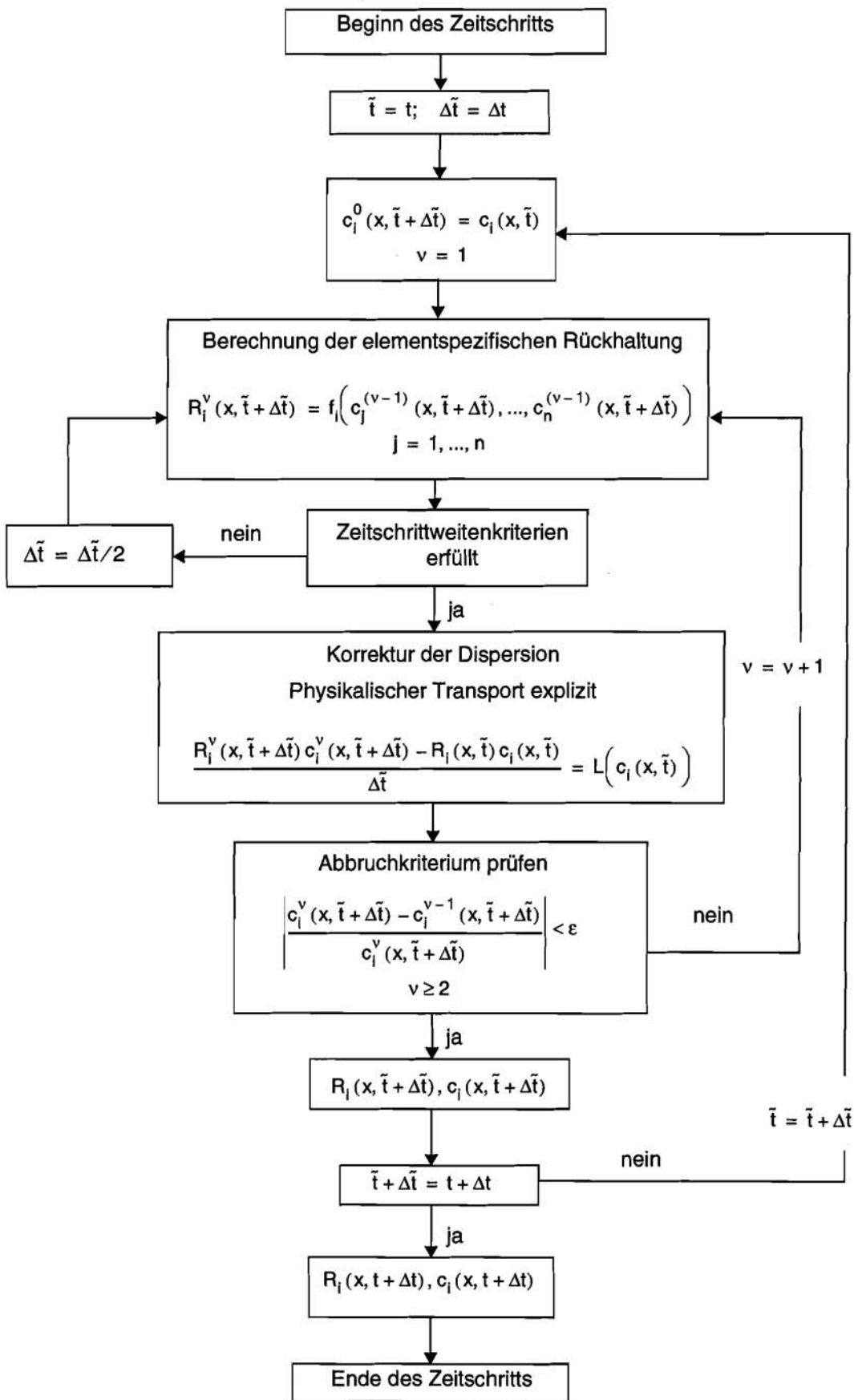


Abbildung 68: Iterationsschema der Kopplung von Sorption und Transport in CHET2

6.3.4 Berechnung des Zerfalls

Die Änderung der Gesamtkonzentration $R_i(t + \Delta t) c_i(t + \Delta t)$ in einem Block i , welche durch den radioaktiven Zerfall hervorgerufen wird, kann für einen Zeitschritt Δt analytisch berechnet werden [14]:

$$\begin{aligned}
 R_i(t + \Delta t) c_i(t + \Delta t) &= R_i(t) c_i(t) e^{-\lambda_k \Delta t} \\
 &+ \sum_j^{k'} \left(R_{i,j}(t + \Delta t) c_{i,j}(t + \Delta t) - R_{i,j}(t) c_{i,j}(t) e^{-\lambda_k \Delta t} \right) \frac{\lambda_k}{\lambda_k - \lambda_j} \\
 &+ \sum_j^{k'k''} \sum_l \left(R_{i,j,l}(t + \Delta t) c_{i,j,l}(t + \Delta t) - R_{i,j,l}(t) c_{i,j,l}(t) e^{-\lambda_k \Delta t} \right) \frac{\lambda_k}{\lambda_k - \lambda_l} \frac{\lambda_l}{\lambda_l - \lambda_k} + \dots \\
 &= Z_i(R_i(t) c_i(t), R_{i,k'}(t) c_{i,k'}(t), \dots, \Delta t), \quad (264)
 \end{aligned}$$

k' Mütter des Nuklids k ,

k'' Großmütter des Nuklids k .

Im Anschluß an die Transportberechnung wird am Ende eines jeden Zeitschrittes die Konzentrationsänderung durch den radioaktiven Zerfall mit Hilfe von Gleichung 264 berechnet durch:

$$c_i(t + \Delta t) = Z_i(R_i(t + \Delta t) c_i(t + \Delta t), R_{i,k'}(t + \Delta t) c_{i,k'}(t + \Delta t), \dots, \Delta t) / R_i(t + \Delta t), \quad (265)$$

wobei $c_i(t + \Delta t)$ die Konzentration bezeichnet, die man nach Abschluß der Transportberechnung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ erhält.

6.3.5 Diskretisierung von Zeit und Ort

Durch das Ersetzen der partiellen Ableitungen durch Differenzenquotienten entstehen Fehler unterschiedlicher Art, die eine Instabilität der Lösung bewirken können oder zu einer Abweichung der numerischen Lösung von der exakten Lösung der Differentialgleichung führen.

6.3.5.1 Ortsdiskretisierung

In der Eingabedatei DACH wird das Deckgebirge, durch das die Ausbreitung von Radionukliden gerechnet werden soll, charakterisiert. Der Transportweg wird in Gebiete mit einheitlichem Material und konstantem Querschnitt unterteilt. Dazu wird die Gesamtlänge des Modellgebiets angegeben und die relativen Längen der einzelnen Gebiete vorgegeben.

Für die numerische Berechnung wird eine Unterteilung der einzelnen Gebiete in Blöcke vorgenommen, wobei die Blockgröße gebietsspezifisch unter Verwendung einer vorgegebenen oberen Grenze für die Gitter-Pecletzahl Pe (vgl. Gleichung 285) berechnet wird.

Wie in Kap. 6.3.5.3 erläutert wird, erlaubt die Gitter-Pecletzahl Aussagen über die Größe der numerischen Dispersion aus der Ortsdiskretisierung im Vergleich zur physikalischen. Die numerische Dispersion wird erst vernachlässigbar, wenn die Gitter-Pecletzahl klein ist. Dies bedeutet eine sehr feine Diskretisierung, die jedoch die Rechenzeit erhöht. Der Benutzer hat die Möglichkeit, im JIF eine Gitter-Pecletzahl auszuwählen, da der vertretbare Rechenaufwand und der durch die numerische Dispersion zu erwartende Fehler problem- bzw. anwendungsspezifisch sind. An Hand dieser vorgegebenen Gitter-Pecletzahl wird die gebietsspezifische maximale Blocklänge $\Delta x_{\max,j}$ wie folgt berechnet:

$$\Delta x_{\max,j} = Pe \alpha_j^J, \quad (266)$$

j Gebietsindex.

Jedes Gebiet wird in eine möglichst geringe Anzahl gleichlanger Blöcke unterteilt, deren Länge kleiner oder gleich der gebietsspezifischen maximalen Blocklänge ist. Die Anzahl der Blöcke N_j in einem Gebiet j berechnet sich nach:

$$N_j = \text{INT} \left(\frac{L_{\text{Transport}j}}{\Delta x_{\max,j}} \right) + 1, \quad (267)$$

l_j relative Länge des Gebiets j .

Die Division der Länge eines Gebiets durch die Anzahl der Blöcke in diesem Gebiet ergibt die tatsächlich verwendete gebietsspezifische Blocklänge Δx_j :

$$\Delta x_j = \frac{L_{\text{Transport}j}}{N_j}. \quad (268)$$

Die Gesamtblockzahl N ist die Summe der Anzahl der Blöcke über alle Gebiete:

$$N = \sum_j N_j. \quad (269)$$

6.3.5.2 Stabilitätskriterien

Stabilitätsuntersuchungen liegen im allgemeinen nur für lineare Differentialgleichungen vor. Dennoch sollen mit Hilfe physikalischer Überlegungen auch für den nichtlinearen Fall Stabilitätskriterien hergeleitet werden. Es wird ein Modellgebiet mit homogenen Parametern und einer äquidistanten Ortsdiskretisierung betrachtet. D.h.:

- α, n, A, D_m, u konstant,
- $\Delta x_j = \Delta x_i = \Delta x_{i+1} = \Delta x$.

Der Lösungsalgorithmus läßt sich darstellen durch:

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{R_i(t)}{R_i(t + \Delta t)} c_i(t) + \frac{\Delta t}{R_i(t + \Delta t)} \left[-u \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x} + D \frac{c_{i-1}(t) - 2c_i(t) + c_{i+1}(t)}{(\Delta x)^2} \right]. \quad (270)$$

Es wird der Fall des rein advektiven Zuflusses aus der linken Nachbarzelle betrachtet. Während eines Zeitschritts Δt darf die Konzentration im Block i nicht die Konzentration aus dem Zuflußblock $i-1$ übersteigen. Aus dieser Forderung ergibt sich die Bedingung:

$$\Delta t \leq \frac{c_{i-1}(t) - \frac{R_i(t)}{R_i(t + \Delta t)} c_i(t)}{c_{i-1}(t) - c_i(t)} \frac{\Delta x}{u} R_i(t + \Delta t). \quad (271)$$

Dies ist eine notwendige Bedingung für die Stabilität der numerischen Lösung. Somit ist eine obere Schranke für die Anwendung der Differenzgleichung 254 gegeben.

Für zeitlich konstante bzw. nahezu konstante Retardationsfaktoren R_i entspricht das Zeitschritt-kriterium (271) dem sogenannten **Courantkriterium** [34] welches ein notwendiges Stabilitätskriterium für lineare Transportgleichungen darstellt:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x R}{u}. \quad (272)$$

Unter der Annahme einer geringeren Konzentration in den Nachbarzellen fordert man, daß sich innerhalb eines Zeitschrittes die Konzentrationsgradienten aufgrund des dispersiven Flusses nicht umkehren dürfen. Daraus ergibt sich mit $c_{i-1}(t) = c_{i+1}(t)$:

$$\Delta t \leq \frac{\frac{R_i(t)}{R_i(t+\Delta t)} c_i(t) - c_{i-1}(t)}{c_i(t) - c_{i-1}(t)} \frac{(\Delta x)^2}{2D} R_i(t+\Delta t) . \quad (273)$$

Für zeitlich konstante bzw. nahezu konstante Retardationsfaktoren R_i entspricht das Zeitschritt-kriterium (273) dem **Neumannkriterium** [34]:

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2D} R . \quad (274)$$

Eine Kombination der Zeitschrittkriterien (271) und (273) liefert die Schranke:

$$\Delta t \leq \frac{c_{i-1}(t) - \frac{R_i(t)}{R_i(t+\Delta t)} c_i(t)}{c_{i-1}(t) - c_i(t)} \frac{(\Delta x)^2}{u\Delta x + 2D} R_i(t+\Delta t) . \quad (275)$$

Dabei muß Δt mindestens so klein gewählt werden, daß gilt:

$$\operatorname{sgn} \left(c_{i-1}(t) - \frac{R_i(t)}{R_i(t+\Delta t)} c_i(t) \right) = \operatorname{sgn} (c_{i-1}(t) - c_i(t)) . \quad (276)$$

Die Kriterien (275) und (276) verlangen eine Abschätzung der R_i -Werte zum Zeitpunkt $t+\Delta t$. Als erste Näherung wird angenommen, daß $R_i(t+\Delta t)$ ungefähr gleich $R_i(t)$ ist. Die R_i -Werte sind nichtlinear von der Konzentration abhängig. Daher kann die obige Abschätzung auf zu große Zeitschrittweiten führen. Zur Überprüfung, inwieweit die vorgegebene Zeitschrittweite hinreichend klein gewählt wurde, wird in CHET2 folgende Strategie angewandt:

Die Kriterien (275) und (276) sind unter der Voraussetzung $c_{i-1}(t) = c_{i+1}(t)$ äquivalent damit, daß sich die Konzentrationsgradienten im i -ten Block während eines Zeitschrittes nicht umkehren können, d.h.:

$$\operatorname{sgn} (c_{i-1}(t) - c_i(t)) = \operatorname{sgn} (c_{i-1}(t) - c_i(t+\Delta t)) . \quad (277)$$

Ein derartiges Kriterium ist notwendig zur Verhinderung von Oszillationen. Dieses Kriterium wird dermaßen abgeschwächt, daß Oszillationen in einem wohldefinierten Maße akzeptiert werden, d.h.:

$$\operatorname{sgn}(c_{i-1}(t) - c_i(t)) = \operatorname{sgn}\left(\frac{c_{i-1}(t) - c_i(t + \Delta t)}{\max(c_i(t + \Delta t), 10^{-30})} + \varepsilon_{\text{rel}} \operatorname{sgn}(c_{i-1}(t) - c_i(t))\right). \quad (278)$$

ε_{rel} ist dabei ein Maß, inwieweit Schwingungen relativ zu den vorhandenen Konzentrationswerten stattfinden dürfen. Als Standardwert wird hierbei $\varepsilon_{\text{rel}} = 10^{-3}$ gesetzt. Mit der anfangs gewählten Zeitschrittweite werden mit Hilfe einer Fixpunktiteration die Werte für $c_i(t + \Delta t)$ und $R_i(t + \Delta t)$ bestimmt. Zeigt sich dabei, daß Kriterium (278) nicht erfüllt ist, so wird die Zeitschrittweite halbiert. Diese Vorgehensweise wird solange wiederholt, bis die Zeitschrittweite so klein ist, daß die dazugehörigen Werte $c_i(t + \Delta t)$ und $R_i(t + \Delta t)$ das Stabilitätskriterium (278) erfüllen.

Durch das Stabilitätskriterium wird eine obere Grenze für die Zeitschrittweite vorgegeben, so daß ein oszillierendes Verhalten der Lösung der Transportgleichung verhindert wird. Da die günstigste Zeitschrittweite konzentrationsabhängig ist, erfolgt die Abarbeitung des zeit- und nuklidabhängigen Problems so weit wie möglich nuklidweise. Zerfallsreihen müssen jedoch, da die Nuklide sich durch den radioaktiven Zerfall gegenseitig beeinflussen, in einer Zeitschleife gemeinsam gerechnet werden. Desweiteren müssen Nuklide, welche dem gleichen Element angehören, aufgrund der konzentrationsabhängigen, elementspezifischen Rückhalteparameter in einem Zeitschritt bearbeitet werden. Die Gesamtzahl der in CHET zu rechnenden Nuklide wird entsprechend ihrer Abhängigkeiten durch Zerfall und Sorption in zusammenhängende Nuklidketten aufgeteilt. Zur Vereinfachung der Sprechweise werden hier auch Einzelnuclide als Nuklidketten bezeichnet.

Die Ungleichung (275) liefert einen sinnvollen Startwert für die Zeitschrittweite unter der Voraussetzung einer nur geringfügigen Zeitabhängigkeit der R_i -Werte. Hat man eine Approximation R_{approx} für die R_i -Werte, so erhält man unter Verwendung eines Minimums der approximierten Retardationsfaktoren eine nuklidketten- und gebietsspezifische maximale Schrittweite $\Delta t_{\text{max},l,j}$:

$$\Delta t_{\text{max},l,j} = \frac{(\Delta x)^2 A_j \phi_j R_{\text{approx},l}}{2D_m A_j \phi_j + 2\alpha_j V + \Delta x_j V}, \quad (279)$$

- l Nuklidkettenindex,
- j Gebietsindex.

$R_{\text{approx},l}$ ist hier für jede Nuklidkette der minimale abgeschätzte Retardationsfaktor für alle Gebiete und alle Nuklide der Kette. Als Näherung für die Retardationsfaktoren wird in CHET2 davon ausgegangen, daß man sich in niedrigen Konzentrationsbereichen befindet. Dann kann $R_{\text{approx},l}$ für Langmuir-Isothermen als der Rückhaltewert gewählt werden, der sich für Konzentrationen nahe bei Null einstellt. Für Freundlich-Isothermen kann $R_{\text{approx},l}$ als eine approximierte untere Grenze der Retardationswerte bestimmt werden, die sich bei den zu erwartenden Konzentrationswerten einstellen.

Die Schrittweite Δt_i für jede Nuklidkette ergibt sich aus dem Minimum der gebietsspezifischen maximalen Schrittweiten $\Delta t_{\max,i,j}$ multipliziert mit dem Reduktionsfaktor f_{DTRED} , der im JIF (siehe Kapitel 8) beliebig voreingestellt werden kann:

$$\Delta t_i = f_{\text{DTRED}} \min_j \Delta t_{\max,i,j} \quad (280)$$

Ergibt sich nun im Laufe der Transportrechnung, daß

$$\Delta t_i > f_{\text{DTRED}} \min_j \frac{(\Delta x)^2 A_j n_j R_{\min,i}}{2D_m A_j \phi_j + 2\alpha_j \dot{V} + \Delta x_j \dot{V}}, \quad (281)$$

so wird Δt_i solange halbiert bis Kriterium (281) erfüllt ist. Dabei bezeichnet $R_{\min,i}$ den minimalen Retardationsfaktor für alle Gebiete und alle Nuklide der Kette I. Bei schwacher Konzentrationsabhängigkeit der Retardationswerte kann Kriterium (279) bzw. (281) bereits eine im Sinne des Stabilitätskriteriums (278) genügend kleine Zeitschrittweite darstellen.

6.3.5.3 Korrektur der numerischen Dispersion

Beim Ersetzen der partiellen Ableitungen durch Differenzenquotienten entstehen Fehler, die mit dem größten Glied der abgebrochenen Taylorentwicklung charakterisiert werden. In der vereinfachten Transportgleichung mit konstantem Rückhaltewert R

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - (u/R) \frac{\partial c}{\partial x} + (D/R) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (282)$$

treten als wesentliche Fehler Ausdrücke der Form

$$\frac{1}{2} (u/R) \Delta x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \text{und} \quad -\frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \quad (283)$$

auf. Bei der rein advektiven Transportgleichung geht der zweite Term in $-\frac{1}{2} (u/R)^2 \Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ über. Die damit entstehenden Ausdrücke

$$\frac{1}{2} (u/R) \Delta x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \text{und} \quad -\frac{1}{2} (u/R)^2 \Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (284)$$

werden als **numerische Dispersion** aus der Ortsdiskretisierung und der Zeitdiskretisierung bezeichnet [26], [28], [35].

Die numerische Dispersion aus der Zeitdiskretisierung ist bei Einhaltung des Courantkriteriums immer kleiner oder gleich der numerischen Dispersion aus der Ortsdiskretisierung. Da sie das entgegengesetzte Vorzeichen hat, verringert sich der Betrag der gesamten numerischen Dispersion dadurch.

Zur Abschätzung der numerischen Dispersion ist die **Gitter-Pecletzahl** hilfreich [26], [28], [29], [36]:

$$Pe = \frac{u \Delta x}{D} = \frac{\Delta x}{\alpha} \quad (285)$$

Sie gibt das Verhältnis von Advektion zu Dispersion wieder. Eine Gitter-Pecletzahl von zwei bedeutet, daß die numerische Dispersion aus der Ortsdiskretisierung genau die gleiche Größe wie die physikalische Dispersion hat.

Der Diskretisierungsfehler niedrigster Ordnung bei der Lösung der Transportgleichung entsteht durch die Approximation der Ableitungen erster Ordnung. Bei dem beschriebenen Differenzenverfahren tritt somit als führender Fehler die in Gleichung 284 beschriebene numerische Dispersion auf. Zu ihrer Unterdrückung wird die im Job-Input-File gegebene, gewünschte Dispersionslänge so korrigiert [27], [37], daß sich insgesamt die richtige Dispersion ergibt:

$$\alpha_{j,k}^K = \alpha_j^J - \frac{1}{2} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{u}{R_k} \Delta t, \quad (286)$$

wobei $\alpha_{j,k}^K$ die korrigierten und α_j^J die im Job-Input-File angegebenen Dispersionslängen bezeichnen.

Die bisherigen Abschätzungen bezüglich der numerischen Dispersion gelten nur für lineare Transportgleichungen, d.h. der Berücksichtigung der Sorption nach dem K_d -Konzept. Bei der Verwendung nichtlinearer Sorptionskonzepte werden die Aussagen bezüglich der Korrektur der numerischen Dispersion als Näherungen interpretiert und in gleicher Form verwendet. Die Korrektur der numerischen Dispersion ist dabei zeitabhängig aufgrund der konzentrations- und somit zeitabhängigen Rückhaltewerte.

6.4 Ablauf einer Transportrechnung

Das Rechenprogramm CHET besteht aus dem Programmteil ICHET, das zur Eingabe und Überprüfung der Daten dient, und dem Programmteil CCHET, mit dem die eigentliche Transportrechnung durchgeführt wird. Die für eine gesamte Simulation notwendigen Schritte sind in Abbildung 69 graphisch dargestellt. Im folgenden werden die einzelnen Arbeitsschritte der beiden Programmteile näher erläutert.

6.4.1 Eingabe und Überprüfung der Eingangsdaten

Das Einlesen der für die Rechnung notwendigen Daten findet ebenso wie Plausibilitätsüberprüfungen in dem Programmteil ICHET statt.

In der Datenbereitstellung für CHET wird unterschieden zwischen Daten zur Steuerung des Rechenlaufs, die sich im JIF-Teilbereich für CHET befinden, und Daten zur Charakterisierung des Transportproblems, die in insgesamt drei Datenfiles zusammengestellt sind. Sowohl die Job-Input-Datei als auch die Eingabedateien sind in Kapitel 8 ausführlich beschrieben.

Aus dem JIF werden zuerst die Daten zur Steuerung des Rechenlaufes eingelesen: die Pfadnamen der Eingabedateien, die zur Rechnung ausgewählten Nuklide, Parameter zur Steuerung des Rechenlaufs, Parameter zur Steuerung der Ausgabe von Eingabedaten und Ergebnissen sowie die Änderungsdaten für die Dateien.

Die Datei DACH enthält die Daten zur Charakterisierung und Unterteilung des Transportwegs. Hierzu gehören:

- die Gesamtlänge des Modellgebiets,
- die Transportzeit durch das Modellgebiet.

Darüberhinaus enthält die Datei die notwendigen Informationen zur Unterteilung des Transportwegs in Gebiete gleicher Materialbelegung und gleichen Querschnitts. Hierzu gehört für jedes Gebiet:

- die relative Länge,
- der Querschnitt,
- die Zuordnung von Materialdaten.

Die Datei MACH enthält die Daten zur Charakterisierung der Materialien. Im einzelnen sind das

- die Porosität,
- die Dispersionslänge,
- der Diffusionskoeffizient,
- die Gesteinsdichte,
- die Zuordnung von Rückhalteparametern.

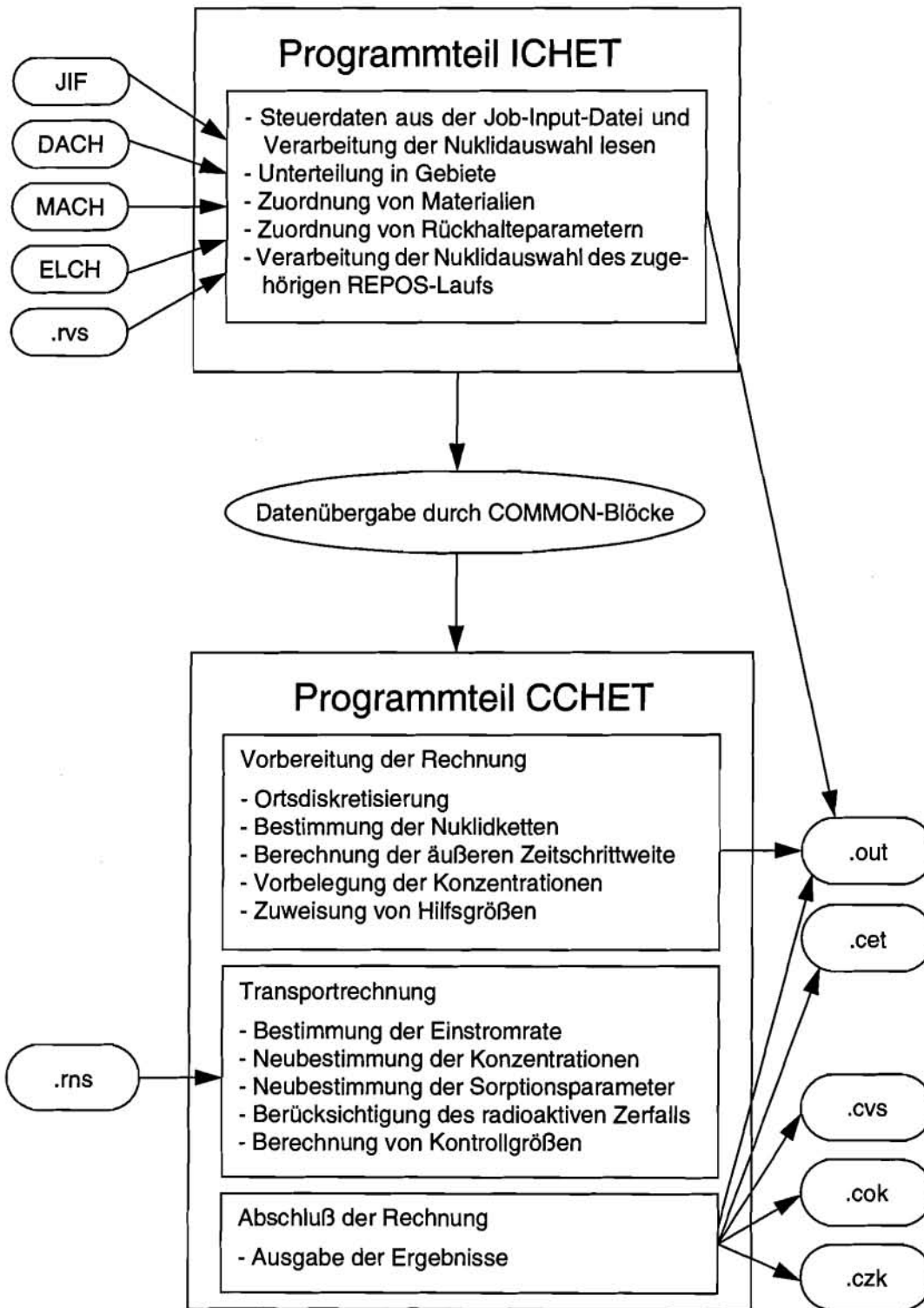


Abbildung 69: Fließschema einer Transportrechnung mit CHET2

In der Datei MACH müssen mindestens alle Materialien aufgeführt sein, auf die in der Datei DACH verwiesen wird.

Die Datei ELCH enthält mindestens die elementspezifischen Sorptionsparameter für alle in CHET verwendeten Elemente und alle in der Datei DACH aufgeführten Materialien. Diese Datei ist analog zur Eingabedatei ELDA aufgebaut, welche die für das Modul REPOS benötigten elementspezifischen Daten enthält.

Die Schnittstelle zu dem Modul REPOS, in dem die Radionuklidfreisetzung aus dem Grubengebäude berechnet wird, bilden die REPOS-Ausgabedateien rvs und rns. Aus der rvs-Datei werden die Anzahl der zusätzlich zur Schnittstelle für die Plotausgabe ausgewählten Segmente, der Name des als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählten Segments, die Anzahl der in REPOS gerechneten Nuklide, die Nuklidnamen und Massenzahlen sowie die Tochteradressen eingelesen. Die Namen der in REPOS berücksichtigten Radionuklide werden zur Überprüfung der Nuklidwahl und zur Zuordnung zu den Nukliden von CHET benötigt. In der rns-Datei sind die Freisetzungsraten für alle in der rvs-Datei beschriebenen Segmente und die in REPOS gerechneten Zeitpunkte abgelegt.

Der Teilbereich der Job-Input-Datei für CHET und die Eingabedateien werden in Kapitel 8 detailliert beschrieben.

Die Überprüfung und Verarbeitung der Nuklidwahl für CHET wird ebenfalls innerhalb von ICHET durchgeführt. In CHET dürfen nur Nuklide aufgenommen werden, mit denen bereits in REPOS gerechnet wurde. Durch die Eingabe des Schalters NNC = 99999 werden alle in REPOS verwendeten Nuklide ausgewählt.

Die im JIF angegebenen Nuklidnamen, bestehend aus Elementname und Massenzahl, werden daraufhin kontrolliert, daß sie in der Nukliddatenbasis NUDA (siehe Kapitel 8) enthalten sind, daß sie in REPOS gerechnet wurden und daß kein Nuklid doppelt benannt wird. Weiterhin wird kontrolliert, ob für alle ausgewählten Nuklide die elementspezifischen Daten in der Matrix in der Datei ELCH vorhanden sind.

Nach der Überprüfung der ausgewählten Nuklide werden die Nuklide nach der in NUDA vorgegebenen Reihenfolge geordnet, die nuklidspezifischen Daten aus NUDA herausgesucht und in die Nuklidmatrix von CHET geschrieben.

Freisetzungsraten von Nukliden, die in REPOS, nicht jedoch in CHET gerechnet werden, können bei entsprechender Schalterstellung (INSUMC, siehe Kapitel 8) auf die Freisetzungsraten der jeweiligen Tochter aufaddiert werden. Physikalisch bedeutet das einen sofortigen Zerfall in die Tochter.

Neben der Überprüfung der Nuklidwahl findet innerhalb von ICHET beim Einlesen der Eingabedaten eine Plausibilitätsprüfung statt, bei der die Gültigkeitsbereiche der Eingangsdaten, die Dimensionierung von eingelesenen und für die Rechnung benötigten Parametern und die Vollständigkeit der Datenbasis kontrolliert werden. Im Fehlerfall wird eine Fehlermeldung ausgegeben und der Programmablauf gestoppt.

6.4.2 Vorbereitung der Rechnung

Der Ablauf einer Transportrechnung mit dem Programmteil CCHET ist in Abbildung 69 schematisch dargestellt. Er gliedert sich in einen Teil, in dem die Rechnung vorbereitet wird, einen weiteren, in dem die zeitabhängige Konzentration aller Nuklide in allen Blöcken entsprechend dem Lösungsalgorithmus berechnet wird und schließlich einen Teil, in dem die Ergebnisse ausgegeben werden.

Im Teil, der die Vorbereitung der Rechnung beinhaltet, erfolgt zuerst die Diskretisierung des Transportwegs in Blöcke und die Berechnung der Retardationsfaktoren, anschließend die Aufteilung der Nuklide in Nuklidketten und die Zeitschrittweitenberechnung sowie zum Schluß das Öffnen der Übergabedateien und der Ausgabedateien, die Vorbelegung der Konzentration und die Berechnung der für die Lösung der Transportgleichung benötigten Konstanten.

6.4.3 Transportrechnung

Die Transportrechnung beginnt mit dem Zeitpunkt der ersten Freisetzung von Radionukliden aus dem Grubengebäude. Bezugszeitpunkt für alle Zeitangaben ist das Ende der Betriebsphase.

Die Transportrechnung wird nuklidkettenweise abgearbeitet. Für jede Nuklidkette wird in einer Zeitschleife der Zeitverlauf der Konzentration in allen Blöcken für alle Nuklide berechnet. Jede dieser Zeitschleifen wird abgebrochen, wenn der im JIF angegebene Endzeitpunkt überschritten oder die Konzentration jedes Nuklids der Kette auf einen vorwählbaren Bruchteil seines Maximalwertes abgefallen ist.

Innerhalb der Zeitschleifen werden beim Erreichen der im JIF festgelegten Zeitpunkte für die zeitabhängige Ausgabe die Nuklidkonzentrationen an den Beobachtungsstellen abgespeichert. Diese Konzentrationen werden am Ende des Rechenlaufs in die Datei czk geschrieben.

In jedem Rechenlauf wird eine Protokolldatei (mit der Erweiterung out, siehe Kapitel 6.4.4) erstellt, die einen auswählbaren Teil der Eingabedaten und wichtige berechnete Größen enthält und somit zur Kontrolle des Rechenlaufs dient.

6.4.3.1 Bestimmung der Einstromrate

Die Freisetzungsraten für alle in REPOS gerechneten Nuklide sind in der REPOS-Ausgabedatei rns zeitabhängig abgelegt. Die Zeitdiskretisierung in der Datei rns richtet sich nach den Zeitschritten in REPOS. Zur Bestimmung der im CHET-Intervall von t bis $t+\Delta t$ gültigen Freisetzungsrates $q(t)$ werden die REPOS-Freisetzungsraten zu den aufeinanderfolgenden REPOS-Zeitpunkten t_1 bis t_N , die im Intervall von t bis $t+\Delta t$ liegen, kumuliert:

$$q(t) = \frac{1}{\Delta t} \left((t_1 - t) q(t_0) + \sum_{i=1}^{N-1} (t_{i+1} - t_i) q(t_i) + (t + \Delta t - t_N) q(t_N) \right). \quad (287)$$

Bei entsprechender Schalterstellung werden die Freisetzungsraten von Müttern k' , die nicht in der Nuklidwahl von CHET enthalten sind, auf die Freisetzungsraten der entsprechenden Töchter k aufaddiert auf der Basis der Teilchenerhaltung:

$$q_{k, \text{ges}}(t) = \lambda_k \left[\frac{q_k(t)}{\lambda_k} + \sum_{k'} \frac{q_{k'}(t)}{\lambda_{k'}} \right], \quad (288)$$

- λ Zerfallskonstante,
- k Index für die Tochter,
- k' Index für die Mütter.

6.4.3.2 Bestimmung der Konzentration zum neuen Zeitpunkt

Mit den Freisetzungsraten $q(t)$ wird nun die zur Zeit $t+\Delta t$ vorliegende Konzentration bestimmt, d.h. eine Bilanzierung über die Ein- und Austräge in einem Block im Zeitraum Δt entsprechend Gleichung 254 vorgenommen. Die Konzentration im ersten Block wird nach Gleichung 256 berechnet, während für den letzten Block Gleichung 259 gilt. In diesem Lösungsansatz sind die Rückhaltung und der radioaktive Zerfall bereits berücksichtigt.

Zu Kontrollzwecken werden zu den für die Ausgabe ausgewählten Zeitpunkten für alle Nuklide folgende Größen berechnet:

- der bis zum ausgewählten Zeitpunkt t kumulierte Einstrom in den Transportweg

$$Q_k(t) = \sum_{\Delta t} q_k(t), \quad (289)$$

- die zum ausgewählten Zeitpunkt t vorhandene Menge eines Nuklids im Transportweg

$$M_k(t) = \sum_{i=1}^n (c_{i,k}(t) V_i R_{i,k}), \quad (290)$$

- der bis zum ausgewählten Zeitpunkt t kumulierte Austrag aus dem Transportweg, d.h. der kumulierte Aktivitätsstrom aus dem letzten Block n :

$$S_k(t) = \sum_{\Delta t} (\Delta t V_n (H_{3,n-1,k} c_{n-1,k} - H_{3,n-1,k} c_{n,k} - H_{2,n,k} c_{n,k})). \quad (291)$$

In den Aktivitätsstrom gehen hier sowohl der advective als auch der dispersive Ausstrom aus dem letzten Block ein.

6.4.3.3 Dateiausgabe

Die Ergebnisse der Rechnung, d.h. die Konzentrationen, werden zeit- bzw.ortsabhängig auf Ausgabedateien abgelegt. Hierfür werden im JIF die Übergabestelle an EXPOS sowie maximal zehn weitere Beobachtungsstellen durch Angabe des Längenanteils am Gesamtgebiet festgelegt bzw. maximal zehn Beobachtungszeitpunkte angegeben. Insgesamt werden während eines Rechenlaufs folgende drei Ausgabedateien erstellt:

- Datei cvs:
Anzahl der ausgewählten Beobachtungsstellen für die zeitabhängige Ausgabe, deren Orte, Anzahl der Beobachtungszeitpunkte für die ortsabhängige Ausgabe, diese Zeitpunkte, Anzahl und Namen der gerechneten Nuklide.
- Datei czk:
Zeitpunkt und zugehörige Nuklidkonzentrationen aller CHET - Nuklide für maximal elf Beobachtungsstellen
In der Job-Input-Datei kann ausgewählt werden, zu welchen Zeitpunkten die Ausgabe beginnt und endet und wieviele Zeitpunkte pro Dekade ausgegeben werden. Die Konzentration an der ausgewählten Beobachtungsstelle wird durch lineare Interpolation aus den Konzentrationen an den nächstgelegenen Blockmittelpunkten errechnet.
- Datei cok:
Ortsangabe in Meter und zugehörige Nuklidkonzentrationen aller CHET-Nuklide für maximal zehn Beobachtungszeitpunkte. Die Radionuklidkonzentrationen jedes Blockes werden auf den ausgewählten Zeitpunkt interpoliert. Die cok-Datei wird nur bei entsprechender Schalterstellung IOOC erzeugt, siehe Beschreibung der Job-Input-Datei in Kapitel 8.

Die Ausgabedateien entsprechen in ihrer Struktur den REPOS - und EXPOS- Ausgabedateien und sind somit zur Bearbeitung mit einem entsprechenden Postprozessor zur Plotausgabe bzw. zur Tabellenerstellung geeignet. Gleichzeitig dienen die Dateien cvs und czk zur Informationsübergabe an EXPOS. Die Ausgabedateien sind in Kapitel 8 ausführlich beschrieben.

6.4.4 Protokoll des Rechenlaufs

In jedem Rechenlauf wird eine formatierte Protokolldatei mit der Erweiterung out erstellt, die einen auswählbaren Teil der Eingabedaten und wichtige Zwischenergebnisse enthält und somit zur Kontrolle des Rechenlaufs dient.

Im Kopf der Protokolldatei stehen Daten zur Kennzeichnung des Rechenlaufs, das Datum sowie die Pfadnamen und Namen der Ausgabedateien. Weiterhin werden die Eingangsdaten bei ent-

sprechender Schalterstellung in tabellarischer Form ausgegeben. Die Bedeutung dieser Schalter ist in der Beschreibung der Job-Input-Datei aufgelistet.

Anschließend folgen für die Rechnung vorbereitete Größen:

- Beschreibung der verwendeten Diskretisierung,
- Schrittweiten und Retardationsfaktoren (K_d -Konzept) der Nuklide,
- Dispersionslängen mit und ohne Korrektur.

Nach der zeitabhängigen Rechnung werden ausgegeben:

- Endzeitpunkte der Rechnung für die einzelnen Nuklide,
- Zeitpunkt des Endes der Freisetzung aus dem Grubengebäude,
- Kumulierter Eintrag in den Transportweg,
- Menge im Transportweg,
- Kumulierter Austrag aus dem Transportweg,
- Tabelle mit den Maximalwerten der Konzentrationen an der Übergabestelle zu EXPOS.

Tritt während der Abarbeitung ein Fehler auf, so erscheint im Protokoll eine Fehlermeldung, bevor der Lauf gestoppt wird. Die wichtigsten Endergebnisse aus dem CHET-Rechenlauf werden bei entsprechender Schalterstellung IOOC in die Datei mit der Erweiterung cet abgespeichert, die zur Tabellenausgabe mit dem Postprozessor EmosPrint benötigt wird. Eine Beschreibung dieser Datei wird in Kapitel 8.3.7.2 gegeben.

7 Das Modul EXPOS

7.1 Aufgabenbeschreibung des Moduls EXPOS

Basierend auf den Ergebnissen einer Ausbreitungsrechnung sowie einer separaten Biosphärenmodellierung werden im Modul EXPOS Dosisbelastungen berechnet. Diese werden für Individuen und für Kollektive jeweils als Funktion der Zeit ermittelt. Derzeit betrachtete Individuen sind Erwachsene und Kleinkinder, die sich unter anderem durch ihre Verzehrsgewohnheiten unterscheiden.

Separat zu der vorausgehenden Ausbreitungsrechnung gibt es im Modul EXPOS eine eigene NuklidAuswahl und eine eigene Auswahl möglicher Wasserentnahmestellen im Ausbreitungsweg durch das Deckgebirge. Diese beiden Auswahlen müssen jedoch mit denjenigen der Ausbreitungsrechnung verträglich sein. Gegenüber der NuklidAuswahl für die Ausbreitungsrechnung mit CHET können in EXPOS zusätzliche kurzlebige Tochternuklide berücksichtigt werden. Deren Aktivitätskonzentration wird unter Annahme von Aktivitätsgleichgewichten und Sorptionsgleichgewichten am Entnahmeort aus der Aktivitätskonzentration ihrer Mütter bestimmt.

Als Ergebnisse eines EXPOS-Rechenlaufes werden letztendlich nuklidspezifische maximale Dosisbelastungen und die Zeitpunkte ihres Auftretens sowie die nuklidspezifischen Kollektivdosen ermittelt. Neben den Angaben für Einzelnuklide werden auch die Summenwerte für alle Nuklide sowie ausgewählte Teilsommen errechnet. Alle diese Ergebnisse werden in tabellarischer Form ausgegeben. Daneben werden eine Reihe von Ausgabedateien erzeugt, in denen die zeitabhängigen Dosisbelastungen abgelegt werden. Von dort aus können sie für die graphische Ausgabe oder die Ausgabe auf dem Drucker abgerufen werden. Die graphische Ausgabe der Zeitverläufe der Dosisbelastungen erfolgt unter Anwendung des Postprozessors EmosPlot, die tabellarische Ausgabe mit dem Postprozessor EmosPrint.

7.2 Ermittlung der Dosiskonversionsfaktoren

Die zentralen Eingangsgrößen für EXPOS zur Berechnung von Individualdosen sind die Dosiskonversionsfaktoren. Diese werden in einer separaten Biosphärenmodellierung, bzw. an Hand von gesetzlichen Vorschriften für normierte Grundwasserkontaminationen ermittelt. Wegen des linearen Verhaltens der Biosphäre können dann in EXPOS beliebige Grundwasserkontaminationen in der Einheit Bq/m^3 in Dosisbelastungen der Einheit Sv/a umgerechnet werden. Die sich ergebenden Dosisbelastungen sind dann als effektive Folgeäquivalentdosen zu verstehen. Das Adjektiv effektiv bezieht sich hierbei darauf, daß Belastungen von Einzelorganen auf die Gesamtbelastung des Individuums umgerechnet werden. Unter Folgedosis verbirgt sich die Tatsache, daß die Folgen der Aktivitätsaufnahme eines Jahres auch in den nachfolgenden fünfzig Jahren berücksichtigt werden.

Die Ermittlung der Dosiskonversionsfaktoren kann auf der Basis detaillierter Modellrechnungen [38] oder unter Verwendung einfacher Berechnungsvorschriften [2] erfolgen. In beiden Fällen werden zunächst die verschiedenen Pfade betrachtet, auf denen Radionuklide aus dem konta-

minierte Grundwasser in den Menschen gelangen können. Solche Expositionspfade sind zur Veranschaulichung in Abbildung 70 dargestellt. Die aufgenommenen Aktivitätsmengen werden wesentlich von den Verzehrsgewohnheiten des betrachteten Individuums bestimmt. Die Verzehrsgewohnheiten eines Erwachsenen aus einer kritischen Bevölkerungsgruppe sind in der genannten Abbildung entsprechend [38] eingetragen.

Nach Bestimmung der aufgenommenen Aktivitätsmenge läßt sich die resultierende Dosisbelastung unter Verwendung von Dosisfaktoren ermitteln. Diese geben die Dosisbelastung in Sv pro aufgenommene Aktivitätsmenge in Bq an. Sie werden auf der Basis von Modellen und biokinetischen Daten für Erwachsene und Kleinkinder aus [39] berechnet und zum Beispiel aus [40] entnommen. Geht man bei den Aufnahmemengen von den jährlichen Werten aus, so ergibt sich eine entsprechende Dosisbelastung in Sv/a.

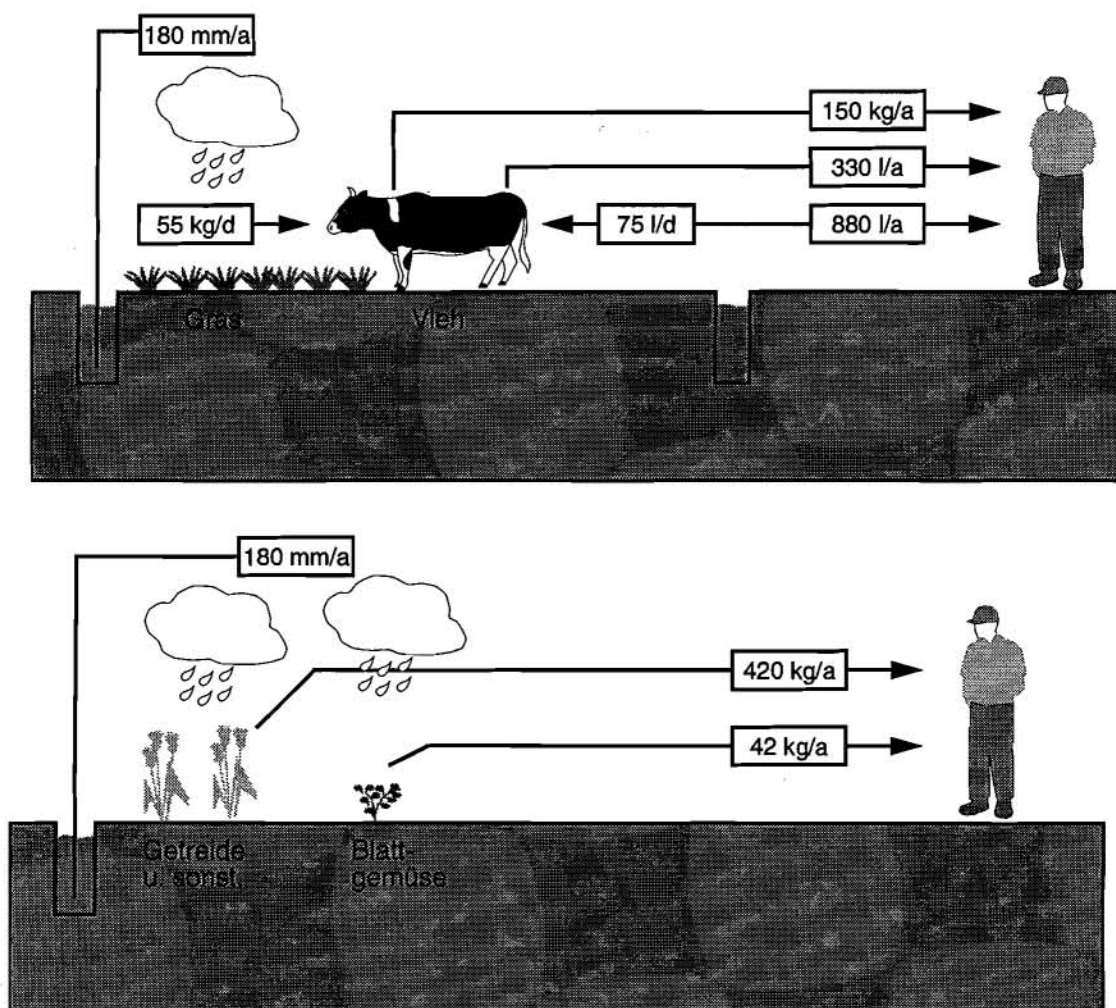


Abbildung 70: Expositionspfade in der Biosphäre.

7.3 Berechnung der Strahlenexposition

7.3.1 Berechnung der Individualdosis

Die Dosisberechnungen werden für vorgegebene Orte in der Geosphäre durchgeführt. Bei einer eindimensionalen Ausbreitungsrechnung sind diese durch Koordinatenpunkte x entlang des Ausbreitungsweges charakterisiert und werden im folgenden als Entnahmestellen des Grundwassers bezeichnet. Falls mehrere Entnahmestellen betrachtet werden, so sind diese als alternative Schnittstellen zwischen Geosphäre und Biosphäre und nicht als gleichzeitige Entnahmestellen zu verstehen.

Ausgehend von der Aktivitätskonzentration $C_{A,i}(x,t)$ des Nuklids i im Grundwasser an der Entnahmestelle x zum Zeitpunkt t und den Dosiskonversionsfaktoren $F_{D,i}$ ergeben sich die Dosisbelastungen für zukünftige Individuen durch einfache Multiplikation. Da sich die Dosiskonversionsfaktoren von Erwachsenen (E) und Kleinkindern (K) unterscheiden, ergeben sich dementsprechend spezifische Dosisbelastungen:

$$D_{E,i}(x,t) = C_{A,i}(x,t) F_{D,i,E} \quad (292)$$

$$D_{K,i}(x,t) = C_{A,i}(x,t) F_{D,i,K} \quad (293)$$

In EXPOS können Radionuklide als Zerfallsprodukte berücksichtigt werden, die in den Ausbreitungsrechnungen nicht enthalten waren. Diese Tochternuklide werden bei ausreichend kurzen Halbwertszeiten kein eigenes Wanderungsverhalten im Deckgebirge zeigen, sondern an jedem Ort im Aktivitätsgleichgewicht zum Mutternuklid vorliegen.

Dieses Aktivitätsgleichgewicht bezieht sich auf die gesamte am Ort vorhandene Aktivitätsmenge, also den gelösten und den sorbierten Anteil. Für die Dosisberechnungen sind aber nur die gelösten Konzentrationen von Interesse. Ist die gelöste Aktivitätskonzentration des Mutternuklids j bekannt, so ergibt sich die gelöste Aktivitätskonzentration des Tochternuklids i zu

$$C_{A,i}(x,t) = \frac{R_{f,j}(x)}{R_{f,i}(x)} C_{A,j}(x,t) \quad (294)$$

Hierbei geben die Retardationsfaktoren R_f das Verhältnis von Gesamtmenge zu gelöster Menge eines Radionuklids an. Sie errechnen sich aus den Verteilungskoeffizienten der Sorption $K_{d,i}(x)$ zu

$$R_{f,i}(x) = \left(1 + \frac{1 - \phi(x)}{\phi(x)}\right) K_{d,i}(x) \rho^S(x), \quad (295)$$

wobei $\phi(x)$ die Porosität des Gesteins und $\rho^S(x)$ die Gesteinsdichte sind. Alle Größen, die sich auf das Umfeld der Wasserentnahmestelle x beziehen, sind entsprechend den verwendeten Daten für diesen Ort in der Ausbreitungsrechnung auch für die Berechnung der Strahlenexposition vorzugeben. Dies ist durch kompatible Eingabe der Daten für CHET und EXPOS sicherzustellen.

7.3.2 Berechnung von Kollektivdosen

Die Berechnung von Kollektivdosen wird auf der Basis von zwei unterschiedlichen Modellvorstellungen durchgeführt. Die erste Vorstellung geht davon aus, daß nicht ein einzelnes Individuum, sondern eine konstante Population P dem gleichen kontaminierten Grundwasser ausgesetzt ist. Die Kollektivdosis ergibt sich dann als Integral vom Zeitpunkt des Freisetzungsbegins t_F bis zum betrachteten Zeitpunkt t zu

$$K_{1,i}(x, t) = \int_{t_F}^t (P_E D_{E,i}(x, t') + P_K D_{K,i}(x, t')) dt', \quad (296)$$

wobei die Gesamtpopulation sich aus der Zahl der Erwachsenen P_E und der Zahl der Kleinkinder P_K zusammensetzt. Dieses Integral wird in EXPOS durch die zeitdiskrete Summation über den gleichen Zeitbereich approximiert.

Die zweite Modellvorstellung zur Berechnung von Kollektivdosen geht davon aus, daß ein konstanter Anteil a_S des Aktivitätsstroms $\dot{A}_i(x, t)$ an der Schnittstelle zwischen Geosphäre und Biosphäre bis in die Menschen gelangt. Für die Aufteilung des Aktivitätsstromes auf Erwachsene und Kleinkinder werden die bereits eingeführten Zahlen von Erwachsenen und Kleinkindern, bezogen auf die Gesamtpopulation, verwendet. Die Kollektivdosis ergibt sich dann als Integral vom Zeitpunkt des Freisetzungsbegins t_F bis zum betrachteten Zeitpunkt t zu

$$K_{2,i}(x, t) = \left(\int_{t_F}^t a_S \right) \dot{A}_i(x, t') \frac{P_E H_{D,E} + P_K H_{D,K}}{P_E + P_K} dt'. \quad (297)$$

Hierbei sind H_D die Dosisfaktoren, die auch bei der Ermittlung der Dosiskonversionsfaktoren Verwendung finden. Die Lösung dieses Integrals erfolgt wiederum durch eine zeitdiskrete Summation.

7.3.3 Zeitdiskretisierung

Die Berechnung der Individualdosen wird für diejenigen Zeitpunkte durchgeführt, für die eine Ergebnisausgabe in der Ausbreitungsrechnung erfolgt ist. Die Zeitpunkte für die berechneten Dosismaxima sowie die Dosismaxima selbst unterliegen somit den Fehlerschranken, die durch die Ergebnisausgabe der Ausbreitungsrechnung vorgegeben sind. Zur Reduzierung der Datenmenge kann die Ausgabe der Zeitverläufe der Dosiswerte auf eine Teilmenge der berechneten Zeitschritte begrenzt werden.

Bei einer statistischen Sicherheitsanalyse sind Ergebnisse einer Dosisberechnung bei jedem betrachteten Spiel jeweils für die gleichen Zeitpunkte erforderlich. Da diese Zeitpunkte einheitlich für alle Spiele vorgegeben werden, werden die Dosisbelastungen für diese Zeitpunkte durch lineare Interpolation ermittelt.

7.4 Datenversorgung

Die für die Dosisberechnung erforderlichen Eingangsdaten für EXPOS werden über Eingabedateien aus der Bibliothek sowie über das Job-Input-File zugeführt. Die benötigten Bibliotheksdateien werden im Job-Input-File spezifiziert und enthalten Dosisfaktoren sowie Dosiskonversionsfaktoren für Erwachsene und Kleinkinder (DOEX) und Sorptionsdaten für die Wasserentnahmestellen (ELEX). Eine weitere Bibliotheksdatei mit den nuklidspezifischen Zerfallsdaten wird bereits bei Aufruf des Programms EMOS für alle Module zur Verfügung gestellt.

Für zwei weitere Eingabedateien ist ebenfalls im Job-Input-File der Name anzugeben, sofern die EXPOS-Rechnung ohne unmittelbar vorhergehende Ausbreitungsrechnung durchgeführt wird. Diese Eingabedateien werden nicht der Datenbibliothek entnommen und enthalten die Aktivitätskonzentrationen bzw. die Aktivitätsströme in Abhängigkeit von der Zeit als Ergebnis der Ausbreitungsrechnung. Der Vorspann dieser Dateien enthält jeweils charakteristische Daten zur Ausbreitungsrechnung, wie etwa die berücksichtigten Radionuklide und die betrachteten Wasserentnahmestellen.

Inhalt des Job-Input-Files sind auch Steuerparameter für den Ablauf der Rechnung und die Ausgabe der Ergebnisse. Für die Druck- und Plotausgabe sind insbesondere die zu betrachtenden Zeitabstände zu charakterisieren. Dies erfolgt durch Angabe eines Vielfaches für die Zeitschritte. Da der statistische Postprozessor fest vorgegebene Zeitpunkte erfordert, sind diese im Fall einer statistischen Rechnung ebenfalls anzugeben.

Die notwendigen Eingangsdateien für EXPOS sind in Abbildung 71 dargestellt.

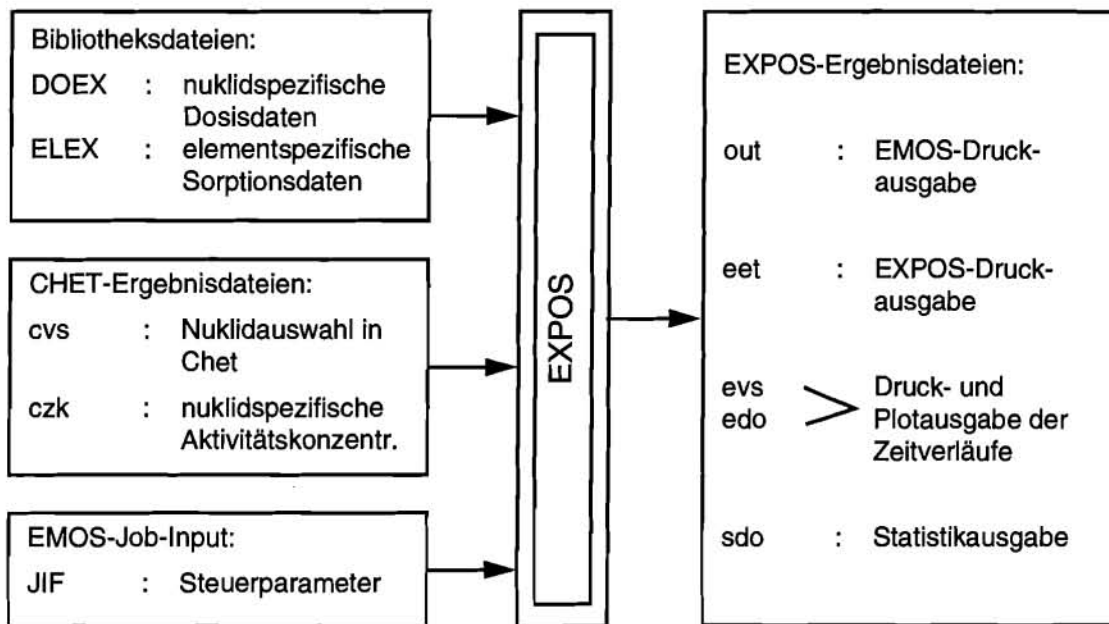


Abbildung 71: Eingabe- und Ausgabedateien des Moduls EXPOS.

7.4.1 Nuklidauswahl

Für die Ermittlung der Dosisbelastungen sind die zu berücksichtigenden Radionuklide vom Anwender des Programms vorzugeben. Hierbei können nur solche Nuklide betrachtet werden, die entweder selbst in der Ausbreitungsrechnung enthalten sind, oder deren Mutternuklide in der Ausbreitungsrechnung berücksichtigt wurden. Die vorgegebene Nuklidauswahl für die Dosisberechnung wird dahingehend überprüft, ob sie die obige Bedingung erfüllt.

Die Liste der Nuklide, für die eine Ausgabe erfolgen soll, kann um symbolische Nuklidnamen erweitert werden. Diese werden mit einem Elementnamen SD sowie einer fortlaufenden Numerierung gebildet und bezeichnen Summen über Dosisbeiträge ausgewählter Nuklide. Diese Auswahl von Teilmengen der betrachteten Nuklide, z.B. einer Zerfallsreihe sind im Job-Input-File zu definieren. Grundsätzlich wird ein symbolisches Nuklid SD-999 betrachtet, das die Summendosis über alle betrachteten Nuklide darstellt.

7.4.2 Auswahl möglicher Wasserentnahmestellen

Die möglichen Wasserentnahmestellen, für die Dosisberechnungen durchgeführt werden sollen, sind im Job-Input-File festzulegen. Diese werden durch Angabe einer Zellennummer der ortsdiskreten Ausbreitungsrechnung definiert. Für die Dosisberechnung können ebenso wie für die Ausbreitungsrechnung maximal 10 Wasserentnahmestellen ausgewählt werden. In EXPOS können natürlich nur solche Wasserentnahmestellen bearbeitet werden, für die in der Ausbreitungs-

rechnung eine Ausgabe erfolgt ist. Bei einer statistischen Analyse wird die Dosisberechnung auf die erste ausgewählte Wasserentnahmestelle beschränkt.

Für jede Wasserentnahmestelle sind gesteinspezifische Kenndaten, wie etwa Porositäten und Gesteinsdichten, entweder direkt im Job-Input-File anzugeben oder durch einen Bezug zu einer Spalte in einer Bibliotheksdatei festzulegen. Letzteres ist für die Sorptionsdaten in der element-spezifischen Bibliotheksdatei der Fall. In ähnlicher Weise erfolgt der Bezug zu Dosiskonversionsfaktoren und Dosisfaktoren in der nuklidspezifischen Bibliotheksdatei.

7.5 Ergebnisdarstellung

Die Ergebnisse der Dosisberechnungen werden in Übersichtstabellen sowie ausführlich als Zeitreihen dargestellt. Die Übersichtstabellen werden in die Standard-Ausgabedatei von EMOS mit der Erweiterung out geschrieben. Die zeitabhängigen Daten werden für die Druckausgabe und die Plotausgabe in Dateien abgelegt. Dabei enthält die Datei mit der Erweiterung evs die ausgewählten Wasserentnahmestellen und die Nuklidwahl (siehe Abbildung 71). Die zeitabhängigen Daten können für die Plotausgabe mit dem Postprozessor EmosPlot und für die Druckausgabe mit dem Postprozessor EmosPrint weiterverarbeitet werden.

Die Übersichtstabellen enthalten für jede Wasserentnahmestelle die maximalen nuklidspezifischen Dosisbeiträge sowie die Zeitpunkte ihres Auftretens. Die Dosisbeiträge werden separat für Erwachsene und Kleinkinder sowie für beide Arten der Kollektivdosisberechnung angegeben. Zur Ausgabe der Endtabellen mit dem Postprozessor EmosPrint werden die erforderlichen Daten zusätzlich in die Datei mit der Erweiterung eet geschrieben.

Bei einer statistischen Sicherheitsanalyse werden für die vorgegebenen Zeitpunkte bei jedem Spiel die berechneten Dosisbelastungen der Einzelnuclide und der symbolischen Nuclide für die erste ausgewählte Wasserentnahmestelle in einer formatierten Datei mit der Erweiterung sdo abgelegt.

8 Ein- und Ausgabebeschreibung für das Programm EMOS

8.1 Das Job-Input-File

8.1.1 Überblick

Das Job-Input-File (JIF) dient der Steuerung des gesamten Ablaufs des Programms EMOS. Mit ihm werden alle Eingaben für ein bestimmtes zu lösendes Problem an das Programm übergeben bzw. Eingabedateien ausgewählt, von denen Daten vom Programm gelesen werden. Entsprechend der modularen Struktur des Programms ist das Job-Input-File unterteilt in zunächst einen modulunabhängigen (übergeordneten) Bereich, gefolgt von Eingabebereichen für das Modul REPOS für das Grubengebäude, für das Deckgebirgsmodul CHET und das Biosphärenmodul EXPOS, sowie in einen Teil STATISTIK für probabilistische Rechnungen.

Jeder dieser Bereiche gliedert sich in einen Teilbereich zur Auswahl der im Kapitel 8.2 beschriebenen Dateien, einen Bereich zur Steuerung von Kontrollausgaben der Eingabedaten und (mit Ausnahme des modulunabhängigen Teils) einen Bereich zur Auswahl der Ergebnisausgabe und der Darstellungsart der Ergebnisse sowie einen Bereich zur Steuerung des Rechenlaufs.

Das Job-Input-File kann mit einem Texteditor erstellt werden oder mit Hilfe des Präprozessors EmosRun. Bei Verwendung des Präprozessors sind alle im folgenden beschriebenen Optionen im JIF verwendbar, d.h. auch die nachträgliche Änderung von einzelnen Daten in bestimmten Eingabedatenfiles, mit Ausnahme der Strukturdaten. Der Präprozessor kann darüberhinaus dazu verwendet werden, einige der Eingabedatenfiles zu erstellen oder zu ändern.

Die beiden ersten Zeilen des JIF dienen der Identifizierung eines Rechenlaufs durch Angabe des Benutzernamens und einer Kommentarzeile. Nach Aufruf des Programms EMOS5 werden zuerst diese beiden Zeilen gelesen und zusammen mit Datum und Uhrzeit vom Programm in die Ausgabedatei mit der Erweiterung out und einige andere Ergebnisdateien übertragen.

Danach wird der modulunabhängige Teil des JIF gelesen. Er beginnt mit dem Kennwort MODUNAD und endet mit der Kennung *****. Dieser Teil enthält Angaben über die zu rechnenden Module sowie den Namen der nuklidspezifischen Datenbasis, die für das zu lösende Problem gültig ist. Detaillierte Angaben über die einzelnen anzugebenden Größen sind im Kapitel 8.1.2 Teil A zusammengefaßt. Eine Beschreibung der (NUDA-) Datei mit der nuklidspezifischen Datenbasis wird im Kapitel 8.2.1 gegeben.

Mit dem Kennwort REPOS beginnt der REPOS-spezifische Teil des JIF. Er enthält zunächst eine Zeile mit einem Kommentar zum verwendeten Grubengebäude und die Namen der Dateien, welche die Datenversorgung des Moduls sicherstellen. Über diese Datenversorgung werden folgende Daten bereitgestellt:

- globale Daten (siehe Kapitel 8.2.2.1, GODA-Datei),
- elementspezifische Daten (siehe Kapitel 8.2.2.2, ELDA-Datei),
- Strukturdaten für die Verknüpfung der Gebinde und der einzelnen Segmente (siehe Kapitel 8.2.2.3, SUDA-Datei),

- Gebinde- und Segmentdaten (siehe Kapitel 8.2.2.4, BADA-Datei),
- Angaben über Abfallmixturen (siehe Kapitel 8.2.2.5, AMDA-Datei),
- Inventare und Abfalldaten (siehe Kapitel 8.2.2.6, ABDA-Datei),
- Daten für die Temperaturverläufe im Grubengebäude (siehe Kapitel 8.2.2.7, TEDA-Datei).

Einige dieser Eingabedaten können nach dem Einlesen aus der entsprechenden Datei durch direkte Eingabe im Job-Input-File am Ende des REPOS-Bereichs (s.u.) für den betreffenden Rechenlauf geändert werden. Dies betrifft die globalen und die elementspezifischen Daten, die Strukturdaten, sowie die gebinde- und segmentspezifischen Daten. Bei Verwendung des Präprozessors EmosRun können die Strukturdaten im JIF nicht verändert werden.

Der folgende Bereich des JIF ermöglicht eine Auswahl der in REPOS zu rechnenden Nuklide als Teilmenge der in der NUDA-Datei aufgelisteten Nuklide.

Neben den Angaben zur Bereitstellung von Eingabedaten und der Nuklidenauswahl werden im JIF hauptsächlich Steuerparameter für die Datenausgabe festgelegt. Über diese Parameter wird ausgewählt, welche Informationen für die Ausgabe bestimmt sind und evtl. in welcher Form die Ausgabe erfolgen soll. Hierzu gehören sowohl Kontrollausgaben der Eingangsdaten und der Inhalte der Dateien als auch Druck- und Plotausgabe von Zwischen- und Endergebnissen, sowie die Ausgabe von Freisetzungsraten zur Weiterverarbeitung im Deckgebirgsmodul.

Es folgt ein Bereich mit Angaben zur Steuerung der Zeitschrittweiten während der Rechnung und Parametern zur Steuerung des Szenarienablaufs. Abgeschlossen wird der REPOS-Bereich mit der Angabe von Größen zu speziellen Segmentmodellen und individuellen Parametern, die hauptsächlich der Programmentwicklung dienen.

Wahlweise können im Anschluß, wie oben erwähnt, einige der über Dateien eingegebenen Größen jeweils für einen Rechenlauf geändert werden. Die Reihenfolge der Änderungen ist fest vorgegeben (vgl. detaillierte Beschreibung des JIF, Zeilen 33 ff). Bei Änderung der Struktur im JIF müssen alle Strukturdaten in der gleichen Form wie in der SUDA-Datei angegeben werden. Globale und elementspezifische Daten können einzeln überschrieben werden. Bei Änderung einiger (BADA-) Daten eines oder mehrerer Segmente bzw. Gebinde muß jeweils ein vollständiger Datensatz der betreffenden Segmente bzw. Gebinde angegeben werden.

Der REPOS-Bereich endet mit der Kennung *****. Detaillierte Angaben über die einzelnen anzugebenden Größen sind im Kapitel 8.1.2 Teil B und C zusammengestellt.

Ähnlich wie der REPOS-Bereich sind auch die folgenden Bereiche für das Deckgebirgsmodul CHET und das Biosphärenmodul EXPOS aufgebaut.

Mit dem Kennwort CHET beginnt der deckgebirgsspezifische Teil des JIF. Er enthält zunächst eine Kommentarzeile zum verwendeten Geosphären-Modell und die Namen der Dateien, welche die Datenversorgung des Moduls sicherstellen. Über diese Datenversorgung werden folgende Daten bereitgestellt:

- die deckgebirgsspezifischen Daten (DACH-Datei),
- die materialspezifischen Daten (MACH-Datei),

- die elementspezifischen Daten (ELCH-Datei).

Wird der EMOS-Rechenlauf ohne das Modul REPOS durchgeführt, so sind auch die Namen der beiden Dateien mit den Übergabegrößen zwischen REPOS und CHET anzugeben.

Danach schließt sich die Auswahl der in CHET zu rechnenden Nuklide an. Sie sind eine Teilmenge der in REPOS gerechneten Nuklide. Weiterhin werden hier die Daten zur Steuerung des Rechenlaufs und der Ausgabe festgelegt. Wie im Modul REPOS können auch individuelle Parameter und anschließend noch elementspezifische und materialspezifische Größen, die aus den Dateien gelesen werden, gezielt für einen Rechenlauf verändert werden.

Der CHET-Bereich endet mit der Kennung *****. Detaillierte Angaben über die einzelnen anzugebenden Größen sind im Kapitel 8.1.2 Teil D und E zusammengestellt.

Mit dem Kennwort EXPOS beginnt der biosphärenspezifische Teil des JIF. Er enthält zunächst eine Kommentarzeile über das verwendete Biosphären-Modell und die Namen der Dateien, welche die Datenversorgung des Moduls sicherstellen. Über diese Datenversorgung werden folgende Daten bereitgestellt:

- Namen der Nuklide und deren Aktivitätskonzentrationen am Wasserentnahmeort (cvs- und czk-Dateien) aus dem CHET-Rechenlauf,
- elementspezifische Daten (K_d -Werte am Wasserentnahmeort) (siehe Kapitel 8.2.4.1, ELEX-Datei),
- Dosiskonversionsfaktoren und Dosisfaktoren (siehe Kapitel 8.2.4.2, DOEX-Datei).

Der folgende Bereich des JIF ermöglicht eine Auswahl der Nuklide, für die in EXPOS Dosiswerte berechnet werden sollen, als Teilmenge der in der NUDA-Datei aufgelisteten Nuklide. Danach können Teilsummen der Dosiswerte ausgewählter Nuklide definiert werden (siehe Kapitel 8.1.2, Teil F, der detaillierten JIF-Beschreibung unter Kennung ****SD-I00).

Weitere Eingabegrößen sind Parameter zur Auswahl der K_d -Werte sowie die Porosität und die Gesteinsdichte an der Wasserentnahmestelle. Es folgen Steuerparameter für die Datenausgabe. Hierzu gehören Kontrollausgaben der Eingangsdaten und der Inhalte der Dateien. Weitere Parameter bestimmen, für welche Personengruppen Dosen berechnet werden und welche Dosiskonversionsfaktoren für z.B. Erwachsene und Kleinkinder und evtl. weitere Personengruppen und welche Dosisfaktoren zur Berechnung von Kollektivdosen aus der DOEX-Datei entnommen werden. Abschließend folgen Faktoren zur Berechnung von Kollektivdosen, Parameter zur Steuerung der Tabellenausgabe von Dosismaxima und Kollektivdosen sowie individuelle Parameter zur Programmentwicklung.

Wie im Modul REPOS können auch elementspezifische Größen, die aus den Dateien gelesen werden, gezielt für einen Rechenlauf verändert werden.

Der EXPOS-Bereich endet mit der Kennung *****. Detaillierte Angaben über die einzelnen anzugebenden Größen sind im Kapitel 8.1.2 Teil F und G zusammengestellt.

Mit dem Kennwort STATISTIK beginnt der Teilbereich des JIF, der ausschließlich für eine probabilistische Rechnung erforderlich ist.

Er enthält zunächst eine Kommentarzeile zur Charakterisierung und Identifizierung des Rechenlaufs. Es folgt die Eingabe der Namen der STDA-Datei und der STAV-Datei. Diese Dateien enthalten die Namen der unabhängigen Variablen, für die Zufallswerte ermittelt werden sollen (siehe Beschreibung der Statistikdatei, Kapitel 8.2.5) und die Angaben zu den abhängig variierten Parametern (siehe Beschreibung der Datei mit den abhängigen Variablen in Kapitel 8.2.6). Es folgen Parameter zur Steuerung der probabilistischen Rechnung, gefolgt von Parametern, die der Stichprobennahme sowie der Kontrollausgabe von Eingangsdaten und der Stichproben dienen. Abgeschlossen wird der Teil H mit Angaben über Zeitbereiche für die Datenausgabe für die statistische Auswertung der Ergebnisse.

Der STATISTIK-Bereich endet mit der Kennung *****. Detaillierte Angaben über die einzelnen anzugebenden Größen sind im Kapitel 8.1.2 Teil H zusammengefaßt.

Das gesamte Job-Input-File wird mit dem Kennwort STOP abgeschlossen.

8.1.2 Detaillierte Beschreibung des Job-Input-Files

Die folgende Beschreibung dient als Anleitung zur Erstellung eines Job-Input-Files. Falls nur einzelne Module REPOS, CHET oder EXPOS gerechnet werden sollen, sind die Teilbereiche des JIF für die anderen Module überflüssig und können fortgelassen werden. Für eine deterministische Rechnung kann der Teil STATISTIK entfallen. Eine statistische Rechnung kann einzeln (in diesem Fall wird nur die Stichprobenauswahl durchgeführt) oder in jeder sinnvollen Kombination mit den Modulen REPOS, CHET und EXPOS durchgeführt werden. Die Zeilen 1 und 2 des Job-Input-Files, der modulunabhängige Teil und das Ende-Kennwort STOP (im Format A10, rechtsbündig) müssen in jedem Fall angegeben werden. Bei Verwendung des Präprozessors EmosRun werden stets alle Teilbereiche erstellt und müssen bei Aufruf des Präprozessors auch existieren.

Im folgenden wird eine detaillierte, zeilenweise Beschreibung des Job-Input-Files einschließlich der Formatangaben gegeben. Die Zeilennumerierung bezieht sich auf ein Job-Input-File, bei dem keine Fortsetzungszeilen vorkommen. Bei zusätzlichen Fortsetzungszeilen (z.B. bei der Nuklidauswahl) verschieben sich die Zeilennummern entsprechend.

Die 1. und die 2. Zeile sind Kommentarzeilen und dienen der Identifizierung des Rechenlaufs.

1. Zeile: Benutzername im Format A10.

2. Zeile: Kommentar zur Charakterisierung und Identifizierung eines Rechenlaufs im Format A80. Von diesem String werden die ersten 20 Zeichen zur Charakterisierung von Statistik-Plots verwendet.

A: Modulunabhängiger Teilbereich (MODUNAD)

Die Zeilen 3 bis 6 gehören zum modulunabhängigen Bereich des JIF.

3. Zeile: Kennwort MODUNAD im Format A10 rechtsbündig.
4. Zeile: Kennung *****IMO, gefolgt von 10 Integer-Steuerparametern (Schaltern), Format A10, 10I5, mit der folgenden Bedeutung:

IMO(1)	: beliebiger Wert (I5), da z.Z. ohne Bedeutung,
IMO(2)	: Schalter für den Ausdruck der nuklidspezifischen Daten,
IMO(3)	: Schalter für die Durchführung einer probabilistischen Rechnung,
IMO(4)	: Schalter für die Durchführung einer Freisetzungsrechnung aus dem Grubengebäude (Modul REPOS),
IMO(5)	: Schalter für die Durchführung einer Deckgebirgsrechnung (Modul CHET),
IMO(6)	: Schalter für die Berechnung der Dosisbelastung (Modul EXPOS),
IMO(7)- IMO(10)	: beliebige Werte (I5), da z.Z. ohne Bedeutung.

Die Schalter IMO(2) bis IMO(6) können mit 0 oder $\neq 0$ belegt werden. Bei Belegung $\neq 0$ wird die beschriebene Funktion ausgeführt.

5. Zeile: Kennung **CMO_NUDA, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der NUDA-Datei mit den nuklidspezifischen Daten, Format A10, A60.
6. Zeile: Kennung ***** für das Ende des modulunabhängigen Bereichs des JIF, Format A10.

B: Teilbereich für das Modul REPOS

Die Zeilen 7 bis 37 gehören zum REPOS-Bereich des JIF. Alle Segment- und Nuklidnamen sind innerhalb ihres jeweiligen Formats rechtsbündig einzugeben. Soll eine Freisetzungsrechnung aus dem Grubengebäude erfolgen (IMO(4) $\neq 0$), so müssen das Kennwort REPOS (Zeile 7) und alle Kennungen, die mit einem * beginnen, einschließlich der zugehörigen Ende-Kennung ***** (Zeile 37), in der vorgeschriebenen Reihenfolge im JIF vorhanden sein. Falls keine Freisetzungsrechnung erfolgen soll (IMO(4) = 0), kann der Bereich des JIF zwischen den Kennwörtern REPOS und ***** entfallen.

7. Zeile: Kennwort REPOS, rechtsbündig Format A10.
8. Zeile: Kommentar zur Charakterisierung und Identifizierung des REPOS-Bereichs des JIF, Format A80.

Die Zeilen 9 bis 15 dienen der Auswahl der Eingabedateien für REPOS. Mit Ausnahme der Zeilen für die Dateinamen mit den Strukturdaten, den Abfallmixturen und den Temperaturdaten muß

nach jeder Kennung der Name einer Datei stehen, auch wenn die entsprechenden Daten als Änderungsdaten im JIF (s.u. Zeile 33.1ff) vollständig angegeben werden.

9. Zeile: Kennung ****CRE_GODA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der GODA-Datei mit den globalen Daten, Format A10, A60.
10. Zeile: Kennung ****CRE_ELDA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der ELDA-Datei mit den elementspezifischen Daten, Format A10, A60.
11. Zeile: Kennung ****CRE_SUDA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der SUDA-Datei mit den Strukturdaten, Format A10, A60.
Bleibt die Zeile nach der Kennung leer, so müssen die Strukturdaten im JIF (s.u. *******SUDA**) angegeben werden.
12. Zeile: Kennung ****CRE_BADA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der BADA-Datei mit den Gebinde- und Segmentdaten, Format A10, A60.
13. Zeile: Kennung ****CRE_AMDA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der AMDA-Datei mit den Abfallmixturen, Format A10, A60.
Falls keine Abfallmixturen benötigt werden, bleibt die Zeile nach der Kennung leer.
14. Zeile: Kennung ****CRE_ABDA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der ABDA-Datei mit den Nuklidinventaren und den Abfalldaten, Format A10, A60.
15. Zeile: Kennung ****CRE_TEDA**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der TEDA-Datei mit den Daten für die Temperaturverläufe im Grubengebäude, Format A10, A60.
Bleibt die Zeile nach der Kennung leer, werden alle Temperaturen im Grubengebäude auf den Wert der lokalen Gebirgstemperatur gesetzt.

Die Zeilen 16 und 17 ff sind für die Nuklidauswahl des Moduls REPOS bestimmt.

16. Zeile: Kennung *******NNY...**, gefolgt von zwei Integer-Größen NNY und ISWSUM, Format A10, 2I5, mit folgender Bedeutung:

NNY : Anzahl der für die Berechnung der Freisetzung aus dem Grubengebäude ausgewählten Nuklide, $1 \leq \text{NNY} \leq \text{NNZ}$, mit $\text{NNZ} = \text{Anzahl der Nuklide in der nuklidspezifischen Datenbasis}$ (NNY = 99999 bedeutet: alle Nuklide sind ausgewählt),

ISWSUM : Schalter für das Aufsummieren der Inventare der bei der Nuklidauswahl nicht berücksichtigten Mutternuklide auf die Inventare der jeweiligen Tochternuklide. Bei $\text{ISWSUM} \neq 0$ wird die Summation durchgeführt.

17. Zeile: Kennung *****CNY-INY**, gefolgt von den Elementsymbolen und Nukleonenzahlen der für eine Freisetzungsberechnung ausgewählten Nuklide, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3), evtl. erforderliche Fortsetzungszeilen, Format 10X, 6(4X,A2,1X,I3). Falls alle Nuklide ausgewählt wurden (d.h., NNY = NNZ oder NNY = 99999), kann die Zeile nach der Kennung leer bleiben oder beliebige Nuklide enthalten; evtl. vorhandene Fortsetzungszeilen werden überlesen. Zwischen dem Namen eines Nuklids und der Nukleonenzahl kann statt eines Leerzeichens auch ein beliebiges Zeichen, z.B. ein Bindestrich '-' stehen.

Die Zeilen 18 bis 21 enthalten jeweils nach der Kennung die Namen von maximal LNZR = 6 (siehe Parameterdatei) Nukliden, die zu einer Nuklidreihe gehören sollen. Die Anzahl der Nuklide einer Reihe wird beim Einlesen ermittelt, wobei als Ende-Kennung eine Nukleonenzahl von 0 oder ein leerer String gilt. Für diese so bestimmten Nuklidreihen werden Massensummen berechnet.

18. Zeile: Kennung *******CNTHR**, gefolgt von den Namen der ausgewählten Nuklide der Thorium-Reihe, für die Massensummen berechnet werden sollen, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3).

19. Zeile: Kennung *******CNNPR**, gefolgt von den Namen der ausgewählten Nuklide der Neptunium-Reihe, für die Massensummen berechnet werden sollen, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3).

20. Zeile: Kennung *******CNUR**, gefolgt von den Namen der ausgewählten Nuklide der Uran-Reihe, für die Massensummen berechnet werden sollen, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3).

21. Zeile: Kennung *******CNAMR**, gefolgt von den Namen der ausgewählten Nuklide der Americium-Reihe, für die Massensummen berechnet werden sollen, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3).

Zeile 22 enthält den Namen des Segments, das die Schnittstelle zum Deckgebirge repräsentiert. Für dieses Segment werden Freisetzungsraten an das Deckgebirgsmodul übergeben. Außerdem wird dieses Segment bei der Berechnung von Freisetzungsmengen von Radionukliden und Laugenmengen besonders behandelt.

22. Zeile: Kennung *******CNAZEF**, gefolgt vom Namen eines Segments, Format 2A10.

Die Zeile 23 enthält Parameter zur Steuerung der Kontrollausgabe der Eingangsdaten.

23. Zeile: Kennung *******IIN**, gefolgt von 12 Steuerparametern für den Kontrollausdruck der Eingangsdaten, Format A10, 12I5, mit folgender Bedeutung:

IIN(1)	:	Schalter für den Ausdruck der globalen Daten
= 1	:	Ausdruck der Bibliotheksdaten,
= 2	:	Ausdruck der Änderungsdaten (s.u.: Kennung *****GODA),
= 3	:	Ausdruck der Bibliotheks- und Änderungsdaten,

- sonst : kein Ausdruck,
- IIN(2) : Schalter für den Ausdruck der elementspezifischen Daten
 = 1 : Ausdruck der Bibliotheksdaten,
 = 2 : Ausdruck der Änderungsdaten (s.u.: Kennung *****ELDA),
 = 3 : Ausdruck der Bibliotheks- und Änderungsdaten,
 sonst : kein Ausdruck,
- IIN(3) : Schalter für den Ausdruck der Strukturdaten
 ≠ 0 : Ausdruck der Daten,
 = 0 : kein Ausdruck der Daten,
- IIN(4) : Schalter für den Ausdruck der Gebinde- und Segmentdaten
 = 1 : Ausdruck der Bibliotheksdaten,
 = 2 : Ausdruck der Änderungsdaten (s.u.: Kennung *****BADA),
 = 3 : Ausdruck der Bibliotheks- und Änderungsdaten,
 sonst : kein Ausdruck,
- IIN(5) : Schalter für den Ausdruck der Abfallmixturen
 ≠ 0 : Ausdruck der Daten,
 = 0 : kein Ausdruck der Daten,
- IIN(6) : Schalter für den Ausdruck der Abfalldaten
 = 1 : Ausdruck der Daten für die Nuklide in der nuklidspezifischen Datenbasis,
 = 2 : Ausdruck der Daten für die in Zeile 17ff ausgewählten Nuklide,
 = 3 : Ausdruck der Daten für die Nuklide in der nuklidspezifischen Datenbasis und die ausgewählten Nuklide,
 sonst : kein Ausdruck,
- IIN(7) : Schalter für den Ausdruck der Inventare der REPOS-Nuklide in den Gebinden bzw. Segmenten, die in den Zeilen 26 und 27 (s.u.) für die Ausgabe ausgewählt wurden,
 = 1 : Ausdruck der Inventare der Segmente / Gebinde in Bq,
 = 2 : Ausdruck der Inventare der Segmente / Gebinde in kg,
 = 3 : Ausdruck der Inventare der Segmente / Gebinde in Bq und kg,
 sonst : kein Ausdruck,
- IIN(8) : Schalter für den Kontrollausdruck von bestimmten Nuklid-, Struktur-, Segment und Gebindevariablen zu Testzwecken
 ≠ 0 : Ausdruck der Daten,
 = 0 : kein Ausdruck der Daten,
- IIN(9) : Schalter für den Kontrollausdruck der Steuerparameter des REPOS-Bereichs des Job-Input-Files
 ≠ 0 : Ausdruck der Daten,
 = 0 : kein Ausdruck der Daten,

- IIN(10) : Schalter für den Ausdruck der nuklidspezifischen Daten der für die Rechnung mit REPOS ausgewählten Nuklide
 $\neq 0$: Ausdruck der Daten,
 $= 0$: kein Ausdruck der Daten,
- IIN(11) : Schalter für die Kontrollausgabe der Zuordnung von Nukliden und Elementen
 $\neq 0$: Ausdruck der Nuklide, Elemente und deren Position in der Datei,
 $= 0$: kein Ausdruck der Größen,
- IIN(12) : Schalter für den Ausdruck der Temperaturdaten
 $\neq 0$: Ausdruck der Daten,
 $= 0$: kein Ausdruck der Daten.

Die Zeilen 24 und 25 dienen der Auswahl von Ergebnissen, deren Zeitverläufe zum einen an das Deckgebirgsmodul CHET übergeben und zum anderen mit Hilfe der Postprozessoren EmosPlot und EmosPrint graphisch und tabellarisch ausgegeben werden sollen. Die Ergebnisse werden formatiert auf Ausgabedateien geschrieben.

24.Zeile: Kennung *****IOR, gefolgt von 2 Parametern IOOR und NOSR für die Steuerung der Ausgabe der Ergebnisse in die Übergabedateien zur graphischen Darstellung und zur Tabellenausgabe von Zeitverläufen bzw. zur Weiterverarbeitung der Nuklidangangsströme im Modul CHET, Format A10, 2I5.
 Wird im Anschluß an das Modul REPOS eine CHET-Rechnung durchgeführt, so müssen die erforderlichen Nuklidströme für das Segment CNAZEF durch Auswahl von IOOR=1 in die Datei mit der Erweiterung rns abgespeichert werden.

- IOOR : Schalter zur Steuerung der Ausgabe in Dateien
 $= 0$: keine Ausgabe in Dateien
 ≥ 1 : Ausgabe von Nuklidströmen in die rns-Datei,
 ≥ 2 : zusätzliche Ausgabe von sonstigen Strömen in die rss-Datei, von zeitabhängigen Variablen in die rzv-Datei und von Zeitschrittsteuergrößen in die rad-Datei,
 ≥ 3 : zusätzliche Ausgabe des aktuellen Inventars und der Nukliddatensätze in die rnd-Datei,
- NOSR : Schalter für die Auswahl der Segmente und Gebinde, für die zusätzlich zum ausgewählten Segment CNAZEF eine Ausgabe der Ergebnisse in Dateien erfolgen soll,
 $= -1$: Ausgabe für alle NBY Segmente und Gebinde,
 $= 0$: Ausgabe für kein Segment oder Gebinde,
 > 0 : Ausgabe für NOSR (maximal NBY, siehe BADA-Dateibeschreibung, Kapitel 8.2.2.4) ausgewählte Segmente bzw. Gebinde, deren Namen nach der Kennung *****CBPL (Zeile 25) angegeben sind.

25.Zeile: Kennung *****CBPL,

falls NOSR > 0: gefolgt von mindestens NOSR Namen der Segmente / Gebinde, für die eine Ausgabe von Ergebnissen in Dateien entsprechend den Werten des Parameters IOOR erfolgen soll, in beliebiger Reihenfolge, Format A10, 6A10

mit evtl. erforderlichen beliebig vielen Fortsetzungszeilen, Format 10X, 6A10.

Die Angabe von mehr als NOSR Namen ist erlaubt, die Ergebnisausgabe erfolgt jedoch nur für die ersten NOSR ausgewählten Gebinde bzw. Segmente.

Falls NOSR ≤ 0 ist, werden evtl. folgende Namen von Segmenten / Gebinden überlesen. Die Kennung muß jedoch immer angegeben werden.

Die Zeilen 26 bis 29 legen den Umfang der Ausgabe von Ergebnissen in die Datei mit der Erweiterung out fest, wobei der Parameter ISO (Zeile 29) zugleich die Durchführung einer Kontrollrechnung für die Inventare in allen Gebinden und Segmenten steuert.

26.Zeile: Kennung *****IDR, gefolgt von 2 Parametern IDOR und NDSR für die Steuerung der Druckausgabe von Eingangsdaten und Ergebnissen in Tabellen, Format A10, 2I5.

IDOR : Schalter zur Steuerung der Ausgabe von Tabellen
= 0 : keine Ausgabe von Tabellen,
= 1 : Ausgabe von Tabellen entsprechend den Parametern ITA in die Datei *.out,
= 2 : Ausgabe von Tabellen weitgehend entsprechend den Parametern ITA in die Datei *.ret,
= 3 : Ausgabe von Tabellen entsprechend den Parametern ITA in die Dateien *.out und *.ret.

NDSR : Schalter für die Auswahl der Segmente und Gebinde, für die eine Ausgabe der Ergebnisse in Tabellen erfolgen soll,
= -1 : Ausgabe für alle NBY Segmente und Gebinde (nur für die Ausgabe der Eingabedaten),
= 0 : Ausgabe für kein Segment oder Gebinde,
> 0 : Ausgabe für NDSR (maximal NBY, siehe BADA-Dateibeschreibung, Kapitel 8.2.2.4) ausgewählte Segmente bzw. Gebinde, deren Namen nach der Kennung *****CBDR (Zeile 27) angegeben sind.

27.Zeile: Kennung *****CBDR,

falls NDSR ≥ 0: gefolgt von mindestens NDSR Namen der Segmente / Gebinde, für die eine Tabellenausgabe von Ergebnissen entsprechend den Werten der Parameter ITA(1) bis ITA(12) erfolgen soll, in beliebiger Reihenfolge,

Format A10, 6A10,

mit evtl. erforderlichen beliebig vielen Fortsetzungszeilen,

Format 10X, 6A10.

Die Angabe von mehr als NSDR Namen ist erlaubt, der Ausdruck der Ergebnisse erfolgt jedoch nur für die ersten NSDR ausgewählten Segmente bzw. Gebinde.

Falls NSDR = -1 ist, werden evtl. folgende Namen von Segmenten / Gebinden überlesen.

28. Zeile: Kennung *****ITA, gefolgt von 12 Parametern, Format A10, 12I5.

Diese Parameter dienen der Steuerung der Ausgabe von Ergebnissen in Tabellenform in die Datei mit der Erweiterung out am Ende der Freisetzungsberechnung mit dem Modul REPOS. Der Schalter ITA(6) wird verwendet zur Ausgabe in die Datei mit der Erweiterung ret, wobei die anderen Schalterstellungen von ITA berücksichtigt werden. Die ret-Datei wird mit dem Postprozessor EmosPrint weiterbearbeitet. Die Schalter haben im einzelnen die folgende Bedeutung:

- ITA(1) : Schalter für den Ausdruck der freigesetzten Aktivität RKNY für alle REPOS-Nuklide in Bq für alle NSDR ausgewählten Gebinde und Segmente
≠ 0 : Ausgabe der freigesetzten Aktivität,
= 0 : keine Ausgabe,
- ITA(2) : Schalter für den Ausdruck der freigesetzten Masse und der Massensummen in kg für alle REPOS-Nuklide für alle NSDR ausgewählten Gebinde und Segmente
≠ 0 : Ausgabe der freigesetzten Massen,
= 0 : keine Ausgabe,
- ITA(3) : Schalter für den Ausdruck von Freisetzungstabellen
≠ 0 : Ausgabe der Freisetzung bezogen auf das eingelagerte Inventar aller REPOS-Nuklide für alle NSDR ausgewählten Gebinde und Segmente,
= 0 : keine Ausgabe,
- ITA(4) : Schalter für den Ausdruck von Freisetzungstabellen
≠ 0 : Ausgabe der Freisetzungsmengen in Bq und kg sowie der Freisetzung bezogen auf das eingelagerte Inventar für alle Nuklide für das gesamte Grubengebäude und alle Einlagerungsorte,
= 0 : keine Ausgabe.
- ITA(5) : zur Zeit ohne Bedeutung
- ITA(6) : zur Zeit ohne Bedeutung
- ITA(7) : zur Zeit ohne Bedeutung
- ITA(8) : Schalter für die Ausgabe der Chronik aller Gebinde und Segmente
≠ 0 : Ausdruck der Daten,

= 0 : kein Ausdruck der Daten.

In der Chronik werden u.a. für Gebinde die Zeitpunkte von Beginn und Ende der Mobilisierung, für Segmente die Zeitpunkte von Beginn und Ende eines Laugenzutritts, sowie der Zeitpunkt des Erreichens der Endporosität in Einlagerungsorten bzw. sonstigen Segmenten aufgeführt.

- ITA(9) : Schalter für die Ausgabe einer Tabelle mit den Zeitpunkten des Erreichens von Löslichkeitsgrenzen für alle Elemente in allen Segmenten
≠ 0 : Ausgabe der Tabelle,
= 0 : keine Ausgabe,
- ITA(10) : Schalter für die Ausgabe einer Tabelle mit den maximalen Elementkonzentrationen für alle Elemente in allen Segmenten
≠ 0 : Ausgabe der Tabelle,
= 0 : keine Ausgabe,
- ITA(11) : Schalter für die Ausgabe einer Tabelle mit den maximalen Nuklidkonzentrationen für alle Nuklide aus der Datenbasis
≠ 0 : Ausgabe der Tabelle,
= 0 : keine Ausgabe,
- ITA(12) : Schalter für die Ausgabe einer Tabelle mit Daten zur Laugenbewegung im gesamten Endlager, im ausgewählten Segment CNA-ZEF, in allen Einlagerungsorten und in den Laugeneinschlüssen
≠ 0 : Ausgabe der Tabelle,
= 0 : keine Ausgabe.

29.Zeile: Kennung *****ISO, gefolgt von einem Parameter für die Kontrollrechnung (Bilanzierung) des Inventars aller Segmente und des freigesetzten Inventars,
Format A10, I5.

Dieser Parameter hat die folgende Bedeutung:

- ISO > 0 : Bilanzierung des Inventars und Ausgabe der Ergebnisse der Kontrollrechnung zu jedem ISO-ten Zeitpunkt. In allen Gebinden und Segmenten wird in diesem Fall der radioaktive Zerfall bis Szenariende weiter berechnet,
= 0 : keine Kontrollrechnung.

Die Zeilen 30 bis 33 enthalten Parameter zur Steuerung der zeitabhängigen Rechnung. Alle Zeitpunkte und Zeitintervalle werden in Jahren angegeben.

30.Zeile: Kennung *NSTEPM..., gefolgt von den Werten der Parameter NSTEPM und NTDEK,
Format A10, 2I5.

Der Parameter NSTEPM legt die Anzahl der Zeitschritte fest, für die zu Beginn der zeitabhängigen Rechnung eine konstante Zeitschrittweite DT0 (Zeile 32) eingehalten wer-

den soll. Der Parameter NTDEK gibt an, wieviele Zeitpunkte pro Dekade für $t > 1$ a gewählt werden, zu denen Werte in die Ergebnisdateien abgespeichert werden. Falls NTDEK = 0, so werden alle Werte abgespeichert.

31.Zeile: Kennung *****EPSI...**, gefolgt von den Werten der Parameter EPSI, FDTK, FDTG, ANTKM, ENULL, DTST, FREL, EPSPL, Format A10, 6E10.0, /, 10X, 2E10.0

Diese Parameter dienen der Zeitschrittsteuerung im Modul REPOS, die im Kapitel 2.3.3.3 der Programmdokumentation beschrieben ist. Die Parameter EPSI, FDTK und FDTG bestimmen die Grenzen eines Intervalls der relativen Stromänderungen (Nuklid- und Laugenströme) sowie Verkleinerungs- (FDTK) bzw. Vergrößerungsfaktoren (FDTG) für die Zeitschrittweite bei Über- bzw. Unterschreiten der Intervallgrenzen. Der Parameter ANTKM gibt eine Schranke an, unterhalb der die Nuklide mit einem bezogen auf die kumulierte Freisetzung kleinen Aktivitätsstrom von der Zeitschrittsteuerung ausgeschlossen werden. Der Parameter ENULL beschreibt eine effektive Null für Nuklidströme, der Parameter DTST einen Faktor zur Zeitschrittsteuerung durch Diffusion im Segmentmodell stovok1, der Parameter FREL einen Faktor zur Zeitschrittweitensteuerung bei der Konvergenz und der Parameter EPSPL die Genauigkeitsschranke für den Laugendruck in einem Segment.

32.Zeile: Kennung ******DT0...**, gefolgt von Werten der Parameter DT0, DT1, DT2 und FDTRED, Format A10, 4E10.0, mit folgender Bedeutung bei der Zeitschrittsteuerung:

DT0	: Anfangsschrittweite zu Beginn der Rechnung,
DT1	: Schrittweite nach Ansteuerung eines vorbestimmten Zeitpunktes TNE,
DT2	: Minimalwert der maximalen Schrittweite DTM,
FDTRED	: Faktor zur Zeitschrittweitenberechnung im Segmentmodell stovok1

33.Zeile: Kennung *******TL...**, gefolgt von den Werten der Parameter TL, DASZ0, TB und TZ, Format A10, 4E10.0, mit folgender Bedeutung (Zeitnullpunkt ist das Ende der Betriebsphase):

TL	: Zeitpunkt des Lösungs- bzw. Laugenzutritts ins äußerste Segment (Wurzelsegment),
DASZ0	: vorgegebene Dauer des Szenarios,
TB	: Dauer der Betriebsphase,
TZ	: Globale Zwischenlagerzeit für alle berücksichtigten Abfälle (die abfallspezifische Zwischenlagerzeit steht in der ABDA-Datei).

Ist $TL \leq -TB$, so findet der Lösungszutritt ins äußerste Segment zu Beginn der Rechnung bei $-TB$ statt. Die Größen DASZ0, TB und TZ müssen in jedem Fall Werte ≥ 0 haben.

34. Zeile: Kennung *****ORTOR gefolgt von dem Wert des Parameters ORTOR,
 Format A10, I5.
 Dieser Parameter gibt die Anzahl der Zeitpunkte an, für welche die ortsabhängige Konzentration in dem speziellen REPOS-Segment stovok1 (ervsok1) ausgegeben werden soll. Ist ORTOR=0, so muß die folgende Zeile entfallen.
35. Zeile: Zeitpunkte, zu denen die ortsabhängige Konzentration ausgegeben werden soll, siehe vorhergehende Zeile,
 Format 10X, 6E10.0.
36. Zeile: Kennung *****INDR gefolgt von den Werten der Parameter RIND(1..6),
 Format A10, 6E10.0
 gefolgt von einer Fortsetzungszeile für die Werte der Parameter RIND(7..12),
 Format 10X, 6E10.0.
 Die Parameter RIND sind individuell verwendbar und dienen hauptsächlich der Programmentwicklung, z.B. um Variationsfaktoren einzugeben. Für normale EMOS-Rechenläufe werden diese Parameter nicht benötigt.
37. Zeile: Kennung ***** für das Ende des JIF-Bereichs für das Modul REPOS,
 Format A10.

C. Ergänzung zum Teilbereich REPOS

Sollen für einen Rechenlauf einige der globalen Daten, einige der elementspezifischen Daten einiger Elemente, die vollständigen Strukturdaten oder die Datensätze einiger Gebinde oder Segmente, die aus den entsprechenden Dateien übernommen worden sind, geändert werden, so kann dies durch Angabe der Änderungsdaten unter den folgenden Kennungen geschehen. Die folgenden Teile des JIF werden dann zwischen der Zeile 36 und der Ende-Kennung in Zeile 37 eingefügt. Zur Verdeutlichung werden die folgenden Zeilen mit 36.1, 36.2 usw. numeriert. Die Zeilennummerierung setzt weiter voraus, daß in jedem Fall eine der möglichen Änderungen erfolgt.

Die Reihenfolge der Änderungsdatenblöcke ist fest vorgeschrieben, d.h. wenn globale Daten geändert werden sollen, so muß dies als erstes erfolgen, danach können Elementdaten usw. geändert werden. Die vorgeschriebene Reihenfolge ergibt sich aus der Reihenfolge der folgenden Beschreibungen.

Zeile 36.1: Kennung *****GODA, Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen der globalen Daten ein. Es können beliebig viele der bereits vorgegebenen Daten durch Eingabe neuer Werte geändert werden. Die Reihenfolge der Änderungen ist beliebig.

Zeile 36.2: Ein String aus zehn Leerzeichen, Nummer KGY und neuer Wert RGY eines globalen Datums, Format A10, I5, E10.0.

Falls mehr als ein globales Datum geändert werden soll, müssen entsprechend viele Fortsetzungszeilen eingefügt werden, Format A10, I5, E10.0.

Das Ende der Eingabe von Änderungsdaten wird vom Programm durch Lesen einer neuen Kennung ermittelt.

Soll keines der globalen Daten geändert werden, fallen die Zeilen 36.2 ff fort, die Zeile 36.1 kann trotzdem angegeben werden.

Falls die elementspezifischen Daten einiger Elemente im JIF geändert werden sollen, so müssen folgende Angaben gemacht werden:

Zeile 36.3: Kennung *****ELDA Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen einzelner elementspezifischer Daten eines Elements ein. Es können beliebig viele der bereits vorgegebenen Daten durch Eingabe neuer Werte geändert werden. Die Reihenfolge der Daten ist beliebig.

Zeile 36.4: Ein String aus zehn Leerzeichen, Name CEY eines Elements, Positionsnummer KREY (Spaltennummer der Matrix mit den elementspezifischen Daten) des Änderungswertes und neuer Wert REY eines elementspezifischen Datums, Format A10, (3X,A2), I5, E10.0.

Falls mehr als ein elementspezifisches Datum geändert werden soll, müssen entsprechend viele Fortsetzungszeilen eingefügt werden,

Format A10, (3X,A2), I5, E10.0.

Das Ende der Eingabe von Änderungsdaten wird vom Programm durch Lesen einer neuen Kennung ermittelt.

Soll keines der elementspezifischen Daten geändert werden, fallen die Zeilen 36.4 ff fort, die Zeile 36.3 kann trotzdem angegeben werden.

Falls die Strukturdaten im JIF eingegeben oder geändert werden sollen, so müssen folgende Angaben gemacht werden:

Zeile 36.5: Kennung *****SUDA, Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen der Strukturdaten ein. Fehlt in der Zeile 11 des JIF der Pfadname der (SUDA-) Datei mit den Strukturdaten, so müssen nach der Kennung *****SUDA die Strukturdaten angegeben werden, andernfalls erfolgt ein Programmabbruch. Enthält die Zeile 11 des JIF einen Pfadnamen für die SUDA-Datei, so dürfen die dort angegebenen Strukturdaten im folgenden nicht geändert werden. Es sind also entweder alle Strukturdaten in der Datei oder im JIF vollständig anzugeben. Das Format der Eingabe im JIF ist identisch mit dem der SUDA-Datei (SUDA-Dateibeschreibung, Kapitel 8.2.2.3).

Zeile 36.6 und
folgende: Strukturdaten im Format der SUDA-Datei.

Das Ende der Eingabe der Strukturdaten wird vom Programm durch Lesen einer neuen Kennung ermittelt.

Erfolgt die Eingabe der Struktur über die SUDA-Datei, fallen die Zeilen 36.6 ff mit den Strukturdaten fort und die Zeile 36.5 muß weggelassen werden.

Falls die Segment- oder Gebindedaten im JIF geändert werden sollen, so müssen folgende Angaben gemacht werden:

Zeile 36.7: Kennung *****BADA, Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen der Segment- und / oder Gebindedaten ein. Geändert werden können die jeweils vollständigen Datensätze beliebig vieler Segmente oder Gebinde, sofern sie in der BADA-Datei bereits angegeben sind (siehe BADA-Dateibeschriftung, Kapitel 8.2.2.4). Die Reihenfolge bezüglich der Segmente und Gebinde ist beliebig. Das Format der Eingabe ist identisch mit dem der BADA-Datei (Kapitel 8.2.2.4).

Zeile 36.8 und

folgende: Segment- und / oder Gebindedaten im Format der BADA-Datei.

Das Ende der Eingabe der Segment- und Gebindedaten wird vom Programm durch Lesen der Ende-Kennung ***** (Zeile 37) ermittelt.

Sollen keine Segment- oder Gebindedaten geändert werden, fallen die Zeilen 36.8ff mit den Segment- und Gebindedaten fort, die Zeile 36.7 kann trotzdem angegeben werden.

D: Teilbereich für das Modul CHET

Die Zeilen 38 bis 56 gehören zum CHET-Bereich des JIF. Soll eine Ausbreitungsrechnung (d.h. IMO(5) ≠ 0 in Zeile 4) erfolgen, so müssen das Kennwort CHET (Zeile 38) und alle Kennungen, die mit * beginnen, einschließlich der zugehörigen Ende-Kennung ***** (Zeile 56), in der vorgeschriebenen Reihenfolge im JIF vorhanden sein. Falls keine Ausbreitungsrechnung erfolgen soll (d.h. IMO(5) = 0 in Zeile 4), kann der Bereich des JIF zwischen den Kennungen CHET und ***** entfallen.

38.Zeile: Kennwort CHET im Format A10 rechtsbündig.

39.Zeile: Kommentar zur Charakterisierung und Identifizierung einer Ausbreitungsrechnung,
Format A80.

Die Zeilen 40 bis 44 enthalten die vollständigen Dateinamen der Dateien mit den Eingabedaten für CHET.

40.Zeile: Kennung *CVCH_DACH, gefolgt von dem vollständigen Namen der DACH-Datei mit den Parametern zur Unterteilung des Deckgebirges, Format A10, A60.

41. Zeile: Kennung *CVCH_MACH, gefolgt von dem vollständigen Namen der MACH-Datei mit den materialspezifischen Daten, Format A10, A60.

42. Zeile: Kennung *CVCH_ELCH, gefolgt von dem vollständigen Namen der ELCH-Datei mit den elementspezifischen Daten, Format A10, A60.

43. Zeile: Kennung **CVCH_RVS, gefolgt vom dem vollständigen Namen der rvs-Datei mit der Vorspanndatei einer älteren REPOS-Rechnung, Format A10, A60.

44. Zeile: Kennung **CVCH_RNS, gefolgt vom vollständigen Namen der rns-Datei mit den Nuklidfreisetzungen aus einer älteren REPOS-Rechnung, Format A10, A60.

Die rvs-Datei und die rns-Datei sollten zu dem gleichen REPOS-Lauf gehören. Wird im gleichen EMOS-Lauf ein REPOS-Rechenlauf durchgeführt, so werden die Dateinamen in der 43. und 44. Zeile überlesen.

Die Zeilen 45 und 46 ff dienen der NuklidAuswahl des Moduls CHET.

45. Zeile: Kennung ****NNC..., gefolgt von zwei Integer-Größen NNC und INSUMC, Format A10, 2I5,

mit folgender Bedeutung:

NNC : Anzahl der für die Transportrechnung ausgewählten Nuklide, $1 \leq \text{NNC} \leq \text{NNY}$ mit $\text{NNY} =$ Anzahl der in REPOS gerechneten Nuklide (NNC = 99999 bedeutet: alle Nuklide aus REPOS sind ausgewählt),

INSUMC : Schalter für das Aufsummieren der Freisetzungsraten der bei der NuklidAuswahl nicht berücksichtigten Mutternuklide auf die Freisetzungsraten der jeweiligen Tochternuklide.
Bei $\text{INSUMC} \neq 0$ wird die Summation durchgeführt.

46. Zeile: Kennung ***CNC-INC, gefolgt von den Elementsymbolen und Nukleonenzahlen der für eine Ausbreitungsrechnung ausgewählten Nuklide, Format A10,6(4X,A2,1X,I3),
evtl. erforderliche Fortsetzungszeilen, Format 10X,6(4X,A2,1X,I3).

Die Nuklidnamen können in beliebiger Reihenfolge angegeben werden. Wenn mehr als NNC Nuklide aufgeführt sind, werden diese sowie auch evtl. vorhandene Fortsetzungszeilen überlesen.

Falls alle Nuklide, die in REPOS gerechnet werden, ausgewählt wurden (d.h. $\text{NNC} = 99999$) kann die Zeile nach der Kennung leer bleiben oder beliebige Nuklide enthalten; evtl. vorhandene Fortsetzungszeilen werden überlesen.

Die Zeilen 47 und 48 enthalten Parameter zur Spezifizierung des Rechenlaufs.

47. Zeile: Kennung ****ITDEKC, gefolgt von den Parametern ITDEK und IVPEKOR, Format A10, 2I5.

ITDEK : Zahl der Zeitschritte pro Dekade für die Ausgabe in die Datei czk.

IVPEKOR : Schalter zur Festlegung, ob eine Korrektur der Dispersionslänge zur Verbesserung des Ergebnisses durchgeführt werden soll. Bei IVPEKOR = 1 wird die Korrektur durchgeführt.

48.Zeile: Kennung **DTRED..., gefolgt von den Parametern RTDTRED, RVPE, RVINQUEL, RTANF, RTEND, RTABBR, Format A10, 6E10.0.

RTDTRED : (0 < RTDTRED ≤ 1.) Multiplikationsfaktor bei der Zeitschrittsteuerung, der angibt, wie fein die Zeitschrittsteuerung arbeiten soll.

RVPE : (0 < RVPE ≤ 2.) Maximale Gitterpeletzahl, zur Berechnung der Ortsdiskretisierung benutzt.

RVINQUEL : Relativer Ort der Quelle, an dem die aus dem Grubengebäude freigesetzten Radionuklide in das Deckgebirge eingespeist werden.

RTANF : Zeitpunkt, an dem die zeitabhängige Ergebnisausgabe in die Datei czk beginnt.

RTEND : Zeitpunkt in Jahren, an dem die Transportrechnung beendet wird. Die Zeitangabe bezieht sich auf das Ende der Betriebsphase.

RTABBR : Abbruchkriterium. Wenn alle Nuklide einer Kette ausgehend vom Maximum unter diesen Faktor abgesunken sind, so wird die Rechnung für diese Kette abgebrochen.

Die Zeile 49 enthält Parameter zur Steuerung der Kontrollausgabe der Eingangsdaten.

49.Zeile: Kennung *****IOIC, gefolgt von 6 Steuerparametern für den Kontrollausdruck der Eingangsdaten, Format A10, 6I5, mit folgender Bedeutung:

IOIC(1) : Schalter für den Ausdruck der DACH-Datei zur Unterteilung des Transportweges

= 0 : kein Ausdruck,

≠ 0 : Ausdruck der Daten,

IOIC(2) : Schalter für den Ausdruck der deckgebirgsspezifischen Daten der MACH-Datei

= 1 : Ausdruck der Bibliotheksdaten,

= 2 : Ausdruck der Änderungsdaten (s. u. Kennung *****MACH),

= 3 : Ausdruck der Bibliotheksdaten und der Änderungsdaten,

sonst : keine Ausgabe,

IOIC(3) : Schalter für den Ausdruck der elementspezifischen Daten der ELCH-Datei

= 1 : Ausdruck der Bibliotheksdaten,

- = 2 : Ausdruck der Änderungsdaten (s. u. Kennung *****ELCH),
 - = 3 : Ausdruck der Bibliotheksdaten und der Änderungsdaten,
 - sonst : keine Ausgabe,
- IOIC(4) : Schalter für den Kontrollausdruck der Eingabedaten für den CHET-Bereich im Job-Input-File
- = 0 : kein Ausdruck,
 - ≠ 0 : Ausdruck der Daten,
- IOIC(5) : Schalter für den Ausdruck der nuklidspezifischen Daten der für die Rechnung ausgewählten Nuklide
- = 0 : kein Ausdruck,
 - ≠ 0 : Ausdruck der nuklidspezifischen Daten der ausgewählten Nuklide,
- IOIC(6) : Schalter für den Ausdruck der in REPOS gerechneten Nuklide und Anzahl der in die Datei mit der Erweiterung rns aufgenommenen Segmente
- = 0 : kein Ausdruck,
 - ≠ 0 : Ausdruck der REPOS-Nuklide und Segmentanzahl in die rns-Datei.

Die Zeile 50 enthält den Steuerparameter zur Ausgabe der Ergebnisse. Die Ausgabe der zeitabhängigen Radionuklidkonzentrationen erfolgt unabhängig davon defaultmäßig in die Datei mit der Erweiterung czk. Diese Datei kann zum einen an das Biosphärenmodul EXPOS übergeben und zum anderen mit Hilfe des Programms EmosPlot graphisch ausgewertet werden. Eine Ausgabe zeitabhängiger Größen aus dem Modul CHET ist mit dem Postprozessor EmosPrint nicht möglich.

50.Zeile: Kennung *****IOOC, gefolgt von einem Parameter für die Steuerung der Ausgabe der Ergebnisse der Radionuklidkonzentration an den in Zeile 51 angegebenen Beobachtungsstellen, Format A10, I5.

- IOOC : Schalter zur Ausgabe der Ortsabhängigkeit der Radionuklidkonzentration auf eine Datei mit der Erweiterung cok sowie von Kontrollausgaben auf die Dateien mit den Erweiterungen out und cet.
- = 1 : Ausgabe der ortsabhängigen Radionuklidkonzentrationen (cok),
 - = 2 : Ausgabe von Kontrollen in die Datei mit der Erweiterung out,
 - = 3 : Ausgabe von Kontrollen in die Datei mit der Erweiterung cet,
 - = 4 : Ausgabe in die Datei cok und von Kontrollen in die Dateien out und cet, d.h. Ausgabe aller möglichen Optionen,
 - = 5 : Ausgabe in die Datei cok und von Kontrollen in die Datei out,
 - = 6 : Ausgabe in die Datei cok und von Kontrollen in die Datei cet,
 - = 7 : Ausgabe von Kontrollen in die Dateien out und cet,
 - sonst : keine Ausgabe.

Die Zeilen 51 und 52 enthalten Parameter zur Festlegung von Beobachtungsstellen für die Ausgabe der Zeitabhängigkeit der Radionuklidkonzentration.

51.Zeile: Kennung ****ZEITOC, gefolgt von Werten der Parameter ROXEXP und NOZEI,
Format A10, E10.0, I5.

ROXEXP : Längenanteil im Modellgebiet der für die Übergabe an EXPOS
ausgewählten Beobachtungsstelle. Die Gesamtlänge des Modell-
gebiets ist gleich 1 gesetzt. Wenn ROXEXP so gewählt ist, daß
die Beobachtungsstelle für die Übergabe an EXPOS hinter dem
letzten Blockmittelpunkt liegt, so wird als Beobachtungsstelle der
letzte Blockmittelpunkt verwendet. Wenn ROXEXP so gewählt ist,
daß die Beobachtungsstelle für die Übergabe an EXPOS vor dem
ersten Blockmittelpunkt liegt, so wird als Beobachtungsstelle der
erste Blockmittelpunkt verwendet.

NOZEI : Anzahl der weiteren Beobachtungsstellen (\leq LOZEI (z.Z.10)).

52.Zeile: Parameter ROXZEI mit Angaben zum Längenanteil im Gesamtgebiet für die NOZEI
ausgewählten Beobachtungsstellen, Format 10X, 6E10.0,
falls NOZEI > 6 entsprechend viele Fortsetzungszeilen. Wenn NOZEI = 0 ist, entfällt
diese Zeile.

Die Zeilen 53 und 54 enthalten Parameter zur Steuerung der Zeitpunkte der Ausgabe der Orts-
abhängigkeit der Radionuklidkonzentration auf die Datei cok an den ausgewählten Beobach-
tungsstellen.

53.Zeile: Kennung ****ORTOC, gefolgt vom Wert des Parameters NOORT, der die Anzahl
der Zeitpunkte (\leq LOORT (z.Z.10)), für welche die Ausgabe erfolgen soll, festlegt,
Format A10, I5.

54.Zeile: Parameter ROORT mit der Angabe der NOORT Zeitpunkte in Jahren bezogen auf das
Ende der Betriebsphase, Format 10X, 6E10.0
falls NOORT > 6 entsprechend viele Fortsetzungszeilen. Wenn NOORT = 0 ist, entfällt
diese Zeile.

55.Zeile: Kennung ****INDC gefolgt von den Real-Werten der Parameter CIND(1..6),
Format A10, 6E10.0
gefolgt von einer Fortsetzungszeile für die Real-Werte der Parameter CIND(7..12),
Format 10X, 6E10.0.

Die Parameter CIND sind individuell verwendbar und dienen hauptsächlich der
Programmentwicklung, z.B. um Variationsfaktoren einzugeben. Die ersten drei Werte
sind Variationsparameter, die für lokale Parametervariationen und Monte-Carlo-Rech-
nungen verwendbar sind. Für sie sollte bei deterministischen Rechnungen der Wert 1.0
eingesetzt werden.

RVVDM : Faktor, mit dem die Diffusionskoeffizienten aller Materialien multi-
pliziert werden. (=CIND(1))

- RVVALPHA : Faktor, mit dem die Dispersionslängen aller Materialien multipliziert werden. (=CIND(2))
- RVVDUENN : Faktor, mit dem sowohl die Querschnitte aller Gebiete als auch der Volumenstrom multipliziert werden. Im Prinzip variiert dieser Faktor bei konstanter Fluidlaufzeit die Verdünnung durch den Grundwasserstrom. (=CIND(3))

56.Zeile: Kennung ***** für das Ende des JIF Bereichs des Moduls CHET,
Format A10.

E: Ergänzungen zum Teilbereich CHET

Als Ergänzung zum Teilbereich CHET können Änderungsdaten für die MACH-Datei und die ELCH-Datei nach der Zeile 55 vor der Endekennung eingefügt werden.

Zeile 55.1: Kennung *****MACH, Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen der deckgebirgsspezifischen Daten ein. Für ein angegebenes Material können die deckgebirgsspezifischen Daten verändert werden. Dabei müssen alle Daten eines Materials angegeben werden. Es können beliebig viele Materialien, auch mehrfach, verändert werden, wobei die Reihenfolge der Materialien beliebig ist.

Zeile 55.2: Ein String aus 10 Leerzeichen, Nummer der Reihe in der Matrix der Deckgebirgsdaten, d.h. die zu ändernde Materialnummer KMC, gefolgt von den neuen Werten RMALPHAJ(KMC), RMDM(KMC), RMPOROS(KMC), RMRHO(KMC), und IMEC(KMC). Format 10X,I5,4E10.0,I5.

Falls mehr als eine Materialeigenschaft geändert werden soll, müssen entsprechend viele Fortsetzungszeilen eingefügt werden, Format 10X,I5,4E10.0,I5.

Falls die elementspezifischen Daten einiger Elemente im JIF geändert werden sollen, so müssen folgende Angaben gemacht werden:

Zeile 55.3: Kennung *****ELCH, Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen einzelner elementspezifischer Daten eines Elements für die Transportrechnung ein. Es können beliebig viele der bereits vorgegebenen Daten durch Eingabe neuer Werte geändert werden. Die Reihenfolge der Daten ist beliebig.

Zeile 55.4: Ein String aus 10 Leerzeichen, Name CEC eines Elements, Positionsnummer KERC (Spaltennummer der Matrix mit den elementspezifischen Daten) des Änderungswertes und neuer Wert REC des elementspezifischen Datums,
Format 10X (3X,A2), I5, E10.0.

Falls mehr als ein Wert geändert werden soll, müssen entsprechend viele Fortsetzungszeilen eingefügt werden, Format A10, (3X,A2), I5, E10.0.

F: Teilbereich für das Modul EXPOS

Die Zeilen 57 bis 75 gehören zum EXPOS-Bereich des JIF. Soll eine Berechnung von Dosisverläufen, kumulierten Dosen und Maximaldosen (d.h. IMO(6) \neq 0 in Zeile 4) erfolgen, so müssen das Kennwort EXPOS (Zeile 57) und alle Kennungen, die mit * beginnen, einschließlich der zugehörigen Ende-Kennung ***** (Zeile 75), in der vorgeschriebenen Reihenfolge im JIF vorhanden sein. Falls keine Dosisberechnung erfolgen soll (d.h. IMO(6) = 0 in Zeile 4), kann der Bereich des JIF zwischen den Kennungen EXPOS und ***** entfallen.

Das Modul EXPOS kann sowohl im Anschluß an einen Rechenlauf des Moduls CHET als auch unabhängig hiervon gerechnet werden. Im letzteren Fall müssen in den Zeilen 59 und 60 die Namen der Dateien mit den Erweiterungen cvs und czk angegeben werden, in denen die Deckgebirgsnuklide und die Zeitverläufe der Nuklidkonzentrationen stehen. Alle Angaben zur Nuklidauswahl müssen zu den im Deckgebirgsmodul CHET berechneten Größen passen.

Alle Nuklidnamen, die im JIF angegeben werden, sind innerhalb ihres jeweiligen Formats rechtsbündig einzugeben.

57.Zeile: Kennwort EXPOS, rechtsbündig Format A10.

58.Zeile: Kommentar zur Charakterisierung und Identifizierung des EXPOS-Bereichs des JIF, Format A80.

Die Zeilen 59 bis 62 dienen der Auswahl der Eingabedateien für das Modul EXPOS.

59.Zeile: Kennung ***CEX_CVS, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der cvs-Datei mit u.a. den Namen der Deckgebirgsnuklide, Format A10, A60.
Wird innerhalb desselben EMOS-Rechenlaufs das Modul CHET gerechnet, so kann die Zeile nach der Kennung leer bleiben oder anstelle des Pfadnamens einen beliebiger Ausdruck im passenden Format enthalten.

60.Zeile: Kennung ***CEX_CZK, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der czk-Datei mit u.a. den Nuklidkonzentrationen an der Schnittstelle zur Biosphäre, Format A10, A60.

Die czk-Datei sollte in jedem Fall zu der cvs-Datei passen. Wird innerhalb desselben EMOS-Rechenlaufs das Modul CHET gerechnet, so kann die Zeile nach der Kennung leer bleiben oder anstelle des Pfadnamens einen beliebiger Ausdruck im passenden Format enthalten.

61.Zeile: Kennung **CEX_ELEX, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der (ELEX-) Datei mit den elementspezifischen Daten (K_d - oder R_f -Werten) am Wasserentnahmeort, Format A10, A60.

62.Zeile: Kennung ****CEX_DOEX**, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der (DOEX-) Datei mit den Dosiskonversionsfaktoren und Dosisfaktoren für die betrachteten Personengruppen z.B. Erwachsene und Kleinkinder, Format A10, A60.

Die Zeilen 63 bis 66f sind für die NuklidAuswahl und die Definition von Teilsummen (zwecks Summenbildung der Dosisverläufe bestimmter Nuklide) in EXPOS bestimmt.

63.Zeile: Kennung *******NNE**, gefolgt von der Anzahl NNE der für eine EXPOS-Rechnung ausgewählten Nuklide, Format A10, I5.

64.Zeile: Kennung *****CNE-INE**, gefolgt von den Elementsymbolen und Nukleonenzahlen der für eine EXPOS-Rechnung ausgewählten Nuklide, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3), falls NNE > 6 ist, entsprechend viele Fortsetzungszeilen, Format 10X, 6(4X,A2,1X,I3). Es müssen mindestens NNE ≥ 0 Nuklidnamen angegeben werden. Bei Angabe von mehr als NNE Namen werden die zusätzlichen Namen überlesen.

65.Zeile: Kennung *******NSE**, gefolgt von maximal LSE (siehe Parameterdatei) Integer-Größen NSE, JSE(1), ..., JSE(NSE), Format A10, 12I5, evtl. erforderliche Fortsetzungszeilen für JSE, Format 15X, 11I5, mit folgender Bedeutung:

NSE : Anzahl der Teilsummen ≤ LSE - 1 (siehe Parameterdatei). Die Bedeutung von Teilsummen ist in Zeile 66 beschrieben,
JSE(K) : Anzahl der Nuklide, über welche die K-te Teilsumme gebildet wird.

66.Zeile: Kennung ******SD-I00**, gefolgt von den JSE(1) Elementsymbolen und den Nukleonenzahlen der Nuklide, über welche die 1. Teilsumme gebildet wird, Format A10, 6(4X,A2,1X,I3), falls JSE(1) > 6 ist, entsprechend viele Fortsetzungszeilen, Format 10X, 6(4X,A2,1X,I3).

Werden mehr als eine Teilsumme definiert, so müssen entsprechend viele Zeilen im gleichen Format wie Zeile 66 eingeschoben werden. Für NSE = 0 werden die Zeilen mit der Kennung ******SD-I00** überlesen.

Die obigen Angaben erlauben die Berechnung der Summe über die Dosisverläufe der einzelnen Nuklide. Unabhängig von der Definition der Teilsummen werden programmintern immer folgende Summendosen berechnet:

SD-0: die Summe der Dosisraten über alle in EXPOS gerechneten Nuklide,
SD-1: die Summe der Dosisraten über alle in EXPOS gerechneten Spaltprodukte,
SD-2: die Summe der Dosisraten über alle in EXPOS gerechneten Actiniden.

Die Zeile 67 enthält Angaben bzgl. der Schnittstelle zur Biosphäre.

67.Zeile: Kennung *******KD...**, gefolgt von drei Parametern IKDE, RPHIE und RRHOE, Format A10, I10, 2E10.3, mit der folgenden Bedeutung:

IKDE	> 0	: Nummer der Spalte der ELEX-Datei, welche die zugehörigen K_d -Werte an der Schnittstelle zur Biosphäre enthält,
	< 0	: IKDEI = Nummer der Spalte der ELEX-Datei, welche die zugehörigen R_f -Werte enthält,
	= 0	: nicht erlaubt,
RPHIE		: Porosität des Gesteins an der Schnittstelle zur Biosphäre,
RRHOE		: Dichte des Gesteins an der Schnittstelle zur Biosphäre.

Die beiden letzteren Werte werden benötigt, um die Retardationsfaktoren (R_f -Werte) zu berechnen, mit deren Hilfe über das Aktivitätsgleichgewicht die Konzentrationen von in CHET nicht berücksichtigten Mutternukliden bestimmt werden.

Die Angaben in Zeile 68 steuern die Ausgabe von Eingangsdaten.

68.Zeile: Kennung *****IIE, gefolgt von z.Z. 7 Steuerparametern für den Kontrollausdruck der Eingangsdaten, Format A10, 1215,
mit folgender Bedeutung:

IIE(1)		: Schalter für den Ausdruck der Angaben im EXPOS-Teil des JIF
	≠ 0	: Ausdruck der Daten,
	= 0	: kein Ausdruck der Daten,
IIE(2)		: Schalter für den Ausdruck der Nuklide, über welche die Teilsummen gebildet werden
	≠ 0	: Ausdruck der Nuklide,
	= 0	: kein Ausdruck der Nuklide,
IIE(3)		: Schalter für den Ausdruck der CHET-Vorspanndatei
	≠ 0	: Ausdruck der Datei,
	= 0	: kein Ausdruck der Datei,
IIE(4)		: Schalter für den Kontrollausdruck der Zuordnung von EXPOS- und CHET-Nukliden
	≠ 0	: Ausdruck der EXPOS- und CHET-Nuklide,
	= 0	: kein Ausdruck der Nuklide,
IIE(5)		: Schalter für den Kontrollausdruck der elementspezifischen Daten
	= 1	: Ausdruck der Bibliotheksdaten,
	= 2	: Ausdruck der Änderungsdaten (s. u. Kennung *****ELEX),
	= 3	: Ausdruck der Bibliotheksdaten und der Änderungsdaten,
	sonst	: keine Ausgabe,
IIE(6)		: Schalter für den Kontrollausdruck der Zuordnung von Nukliden und Elementen sowie deren Position in der Datei
	≠ 0	: Ausdruck der Größen,
	= 0	: kein Ausdruck der Größen,
IIE(7)		: Schalter für den Kontrollausdruck der Dosisdaten

- ≠ 0 : Ausdruck der Daten,
- = 0 : kein Ausdruck der Daten.

Die Zeilen 69 bis 73 enthalten Angaben zur Ergebnisdarstellung und zur Berechnung der Individualdosen und Kollektivdosen.

69.Zeile: Kennung *****IOE, gefolgt von 2 Parametern für die Steuerung der Ausgabe der Ergebnisse in die Übergabedatei zur graphischen Darstellung und zur Tabellenerzeugung von Dosisverläufen,

Format A10, 2I5,

mit folgender Bedeutung:

- IOOE : Schalter zur Steuerung der Ausgabe in Dateien
- = 1 : Ausgabe der Dosisraten in die Datei mit der Erweiterung edo,
- = 2 : Ausgabe von Endtabellen in die Datei mit der Erweiterung out,
- = 3 : Ausgabe von Endtabellen in die Datei mit der Erweiterung eet,
- = 4 : Ausgabe in die Datei edo und von Endtabellen in die Dateien out und eet, d.h. Ausgabe aller möglichen Optionen,
- = 5 : Ausgabe in die Datei edo und von Endtabellen in die Datei out,
- = 6 : Ausgabe in die Datei edo und von Endtabellen in die Datei eet,
- = 7 : Ausgabe von Endtabellen in die Dateien out und eet,
- sonst : keine Ausgabe.

Bei der Ausgabe in die Datei mit der Erweiterung out wird zusätzlich der Parameter IDME ausgewertet, siehe Zeile 73.

- NBPE : Anzahl der Personengruppen (maximal LBPE/2, vgl. Parameterdatei), für welche die Individualdosis berechnet werden soll und die bei der Bestimmung der Kollektivdosis berücksichtigt werden (Bezeichnungen der Personengruppen s. Zeile 70, Auswahl der Dosiskonversionsfaktoren und Dosisfaktoren erfolgt in Zeile 71).

70.Zeile: Kennung *****CBPE, gefolgt von den mindestens NBPE Bezeichnungen der Personengruppen, Format A10, 6A10,
 evtl. erforderliche beliebig viele Fortsetzungszeilen, Format 10X, 6A10.
 Die Angabe von mehr als NBPE Namen ist erlaubt, die Ergebnisausgabe erfolgt jedoch nur für die ersten NBPE ausgewählten Personengruppen.

71.Zeile: Kennung *****IDK, gefolgt von mindestens 2-NBPE Parametern, Format A10, 12I5,

mit folgender Bedeutung:

- IDK(1) : Spaltennummer der Dosisdatei, in der die Dosiskonversionsfaktoren der 1. Personengruppe stehen,
- IDK(2) : Spaltennummer der Dosisdatei, in der die Dosisfaktoren der 1. Personengruppe stehen,

...

IDK(2·NBPE-1) : Spaltennummer der Dosisdatei, in der die Dosiskonversionsfaktoren der NBPE-ten Personengruppe stehen,

IDK(2·NBPE) : Spaltennummer der Dosisdatei, in der die Dosisfaktoren der NBPE-ten Personengruppe stehen.

72.Zeile: Kennung *****RKOLL, gefolgt von genau NBPE + 1 Größen,

Format A10, 6E10.0,

evtl. erforderliche beliebig viele Fortsetzungszeilen

Format 10X, 6E10.0,

mit folgender Bedeutung:

RKOLL(1) bis

RKOLL(NBPE) : Anzahlen von betroffenen Personen je Personengruppe für die Berechnung von Kollektivdosen,

RKOLL(NBPE+1) : Anteil des entnommenen Grundwassers für die Berechnung der Kollektivdosen aus den Aktivitätsströmen.

73.Zeile: Kennung *****IDM, gefolgt von einem Parameter IDME,

Format A10, I5,

mit folgender Bedeutung:

IDME = 1 : eine Tabelle mit den maximalen Individualdosen wird erzeugt,

= 2 : je eine Tabelle mit den maximalen Individualdosen und den Kollektivdosen wird erzeugt,

= 0 : es wird keine Tabelle erzeugt.

Die Erzeugung von Tabellen wird generell über den Schalter IOOE gesteuert, siehe Zeile 69. Der Schalter IDME wirkt sich nur auf die Tabellenausgabe in die Datei *.out aus.

74.Zeile: Kennung *****INDE gefolgt von den Werten der Parameter EIND(1..6),

Format A10, 6E10.0

gefolgt von einer Fortsetzungszeile für die Werte der Parameter EIND(7..12),

Format 10X, 6E10.0.

Die Parameter EIND sind individuell verwendbar und dienen hauptsächlich der Programmentwicklung, z.B. um Variationsfaktoren einzugeben. Für normale EMOS-Rechenläufe werden diese Parameter nicht benötigt.

75.Zeile: Kennung ***** für das Ende des JIF-Bereichs für das Modul EXPOS,

Format A10.

G: Ergänzungen zum Teilbereich EXPOS

Als Ergänzung zum Teilbereich EXPOS können Änderungsdaten für die ELEX-Datei nach der Zeile 74 vor der Endekennung eingefügt werden.

Zeile 74.1: Kennung *****ELEX, Format A10.

Diese Kennung leitet die Änderungen einzelner elementspezifischer Daten eines Elements für die Dosisberechnung ein. Es können beliebig viele der bereits vorgegebenen Daten durch Eingabe neuer Werte geändert werden. Die Reihenfolge der Daten ist beliebig.

Zeile 74.2: Ein String aus 10 Leerzeichen, Name CEE eines Elements, Positionsnummer KREE (Spaltennummer der Matrix mit den elementspezifischen Daten) des Änderungswertes und neuer Wert REE des elementspezifischen Datums, Format 10X (3X,A2), I5, E10.0.

Falls mehr als ein Wert geändert werden soll, müssen entsprechend viele Fortsetzungszeilen eingefügt werden, Format A10, (3X,A2), I5, E10.0.

H: Teilbereich für eine probabilistische Rechnung (STATISTIK)

Mit dem Kennwort STATISTIK wird der Teilbereich des Job-Input-Files für die Steuerung einer probabilistischen Rechnung (d.h. $IMO(3) \neq 0$ in Zeile 4) eingeleitet. In den Zeilen 76 bis 84 werden Größen eingegeben, die ausschließlich für einen Statistik-Rechenlauf benötigt werden.

Ergebnisse, die für eine statistische Auswertung benötigt werden, werden in den Dateien mit den Erweiterungen sko, spl, svb und sdo abgelegt. Um den Umfang der Ausgabedatei mit der Erweiterung out möglichst klein zu halten, sollten im Fall eines Statistik-Rechenlaufs die Schalter für die Ergebnisausgabe in den Teilbereichen REPOS, CHET und EXPOS auf die Stellung 0 (keine Ausgabe) gesetzt werden.

Wird nur eine deterministische Rechnung (d.h. $IMO(3) = 0$ in Zeile 4) durchgeführt, kann der Teilbereich STATISTIK entfallen.

Für einen Statistik-Rechenlauf sind im einzelnen die folgenden Eingaben erforderlich:

76.Zeile: Kennwort STATISTIK, rechtsbündig Format A10.

77.Zeile: Kommentar zur Charakterisierung und Identifizierung des Statistik-Rechenlaufs, Format 10X, 7A10.

78.Zeile: Kennung **CST_STDA, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der STDA-Datei mit den Statistikdaten, Format A10, A60.

79.Zeile: Kennung **CST_STAV, gefolgt von dem vollständigen Pfadnamen der STAV-Datei mit den Daten zu den abhängigen Variablen, Format A10, A60.

80. Zeile: Kennung *****ISES, gefolgt von 7 Integer-Eingangsdaten,

Format A10, 7I10,

mit folgender Bedeutung:

ISES(1) : Parameter für die Auswahl der zu rechnenden Simulationen
≥ 1 : Nummer der ersten zu rechnenden Simulation,
< 1 : ist nicht erlaubt,

ISES(2) : Parameter für die Auswahl der zu rechnenden Simulationen
≥ 1 : Nummer der letzten zu rechnenden Simulation,
< 1 : ist nicht erlaubt.

Wenn das Programm SAMPLE aufgerufen wird (Zeile 81: ISSS(6) = 1), legt der Schalter ISES(2) zugleich den Stichprobenumfang fest.

ISES(3) : Parameter für Benutzervorgaben zur Korrelation
> 0 : Anzahl der Benutzervorgaben,
= 0 : es gibt keine Benutzervorgaben,
< 0 : ist nicht erlaubt,

ISES(4) : Keim der Zufallszahlenerzeugung,

ISES(5)-
ISES(7) : beliebige Werte, da z.Z. ohne Bedeutung.

81. Zeile: Kennung *****ISSS, gefolgt von 14 Integer-Steuerparametern (Schaltern),

Format A10, 14I5,

mit folgender Bedeutung:

ISSS(1) : Schalter zur Kontrollausgabe der Zeitintervalle und Zeitpunkte der
Statistikausgabe für das Postprocessing
≠ 0 : Ausgabe der Zeiten,
= 0 : keine Ausgabe,

ISSS(2) : Schalter für die Art der Stichprobennahme
= 1 : zufällige Stichprobennahme,
≠ 1 : Stichprobennahme nach dem Latin-Hypercube-Verfahren,

ISSS(3) : Schalter für die Kontrollausgabe aller Eingabedaten
= 1 : Ausgabe erfolgt,
≠ 1 : keine Ausgabe,

ISSS(4) : Schalter für die Ausgabe je einer Matrix mit den Stichprobenwerten
und ihren Rängen
= 1 : Ausgabe erfolgt,
≠ 1 : keine Ausgabe,

ISSS(5) : Schalter für die Ausgabe einer Korrelationsmatrix für Stichprobenwerte
und ihre Ränge

	= 1	: Ausgabe erfolgt,
	≠ 1	: keine Ausgabe,
ISSS(6)		: Schalter für die Erzeugung der Stichprobenmatrix
	= 1	: das Programm SAMPLE zur Erzeugung einer Stichprobenmatrix wird aufgerufen,
	≠ 1	: es wird keine (neue) Stichprobenmatrix aufgestellt,
ISSS(7)		: Schalter für die Kontrollausgabe der abhängigen Variablen
	= 1	: die Kontrollausgabe wird durchgeführt,
	≠ 1	: es wird keine Kontrollausgabe durchgeführt,
ISSS(8)- ISSS(14)		: beliebige Werte, da z.Z. ohne Bedeutung.

82.Zeile: Kennung *INTERVALL, gefolgt von maximal 6 Intervallgrenzen RINTGR für die Berechnung der Zeitpunkte für die Ausgabe der Ergebnisse einer probabilistischen Rechnung, Format A10, 6E10.0.

83.Zeile: Kennung ***TEILUNG, gefolgt von maximal 5 Größen IINTGR für die äquidistante Unterteilung der in Zeile 82 angegebenen Zeitintervalle, Format A10, 5I5.

84.Zeile: Kennung ***** für das Ende des JIF-Bereichs STATISTIK, Format A10.

85.Zeile: Kennwort STOP, rechtsbündig Format A10.
Mit diesem Kennwort wird das Ende des Job-Input-Files gekennzeichnet.

8.2 Beschreibung der Dateien mit den Eingabedaten aller Module

Die Eingabe größerer Datenmengen in das Programm EMOS, Version 5, erfolgt über Dateien aus einer Datenbibliothek, die in einer Subdirectory von EMOS (v500/runs) angelegt ist. Alle Eingabedaten werden mit entsprechenden Lese- und Aufbereitungsprogrammen, getrennt für die einzelnen Module des Programms, vor der Durchführung der eigentlichen Rechnung eingelesen und abgespeichert.

Neben den Dateien mit Eingabedaten, die in der Bibliothek abgelegt sind, gibt es weitere Dateien, die den Datentransfer zwischen den Modulen sicherstellen. Hierzu gehören eine Datei mit den Freisetzungsraten aus dem Grubengebäude zur Übergabe dieser Daten an das Deckgebirgsmodul CHET sowie eine Datei mit den Aktivitätskonzentrationen an den Wasserentnahmestellen am Ende des Ausbreitungsweges zur Übergabe dieser Daten an das Biosphärenmodul EXPOS. Diese Dateien werden vom Programm erstellt und dienen als Eingabedateien für den Rechenlauf, in dem sie erstellt werden, oder für einen späteren Rechenlauf einzelner Module.

Im modulunabhängigen Teil von EMOS werden vom Programm IMODUNAD die für alle Module gemeinsamen Nuklid-Daten aus der nuklidspezifischen Datenbasis (NUDA-Datei) gelesen. Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.1 gegeben.

Für das Modul REPOS werden im Programm IREPOS von entsprechenden Lese- und Aufbereitungsprogrammen die folgenden Daten aus Dateien gelesen:

- a. Globale Segment- und Gebindedaten aus der GODA-Datei, z.B.
 - physikalische und chemische Konstanten,
 - allgemein verwendete Anfangswerte,
 - Faktoren für die Variation von Parametern oder Gruppen von Parametern.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.1 gegeben.

- b. Elementspezifische Daten aus der ELDA-Datei, z.B.
 - Löslichkeitsgrenzen für alle in der nuklidspezifischen Datenbasis vorkommenden Elemente für evtl. jeweils unterschiedliches chemisches Milieu,
 - K_d -Werte für einzelne Bereich des Grubengebäudes.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.2 gegeben.

- c. Strukturdaten aus der SUDA-Datei, d.h.
 - Daten, welche die Verknüpfung der einzelnen Gebinde und Segmente festlegen.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.3 gegeben.

- d. Gebinde- und Segmentdaten aus der BADA-Datei, d.h. jeweils
 - Name eines Gebindes bzw. Segments und des zugehörigen Modells,
 - Name des eingelagerten Abfalls oder einer Abfallmixture,
 - weitere Daten, die das Gebinde bzw. Segment charakterisieren.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.4 gegeben.

- e. Angaben über Abfallmixturen aus der AMDA-Datei, d.h.
 - Daten, die angeben, wieviele verschiedene Abfälle zu jeweils einer Abfallmixture zusammengefaßt werden.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.5 gegeben.

- f. Abfalldaten aus der ABDA-Datei, d.h. für jedes unterschiedliche Abfallgebinde
 - Gebindedaten wie Matrixmasse, Behältermasse, Gebinde- und Hohlraumvolumina,
 - Zwischenlagerzeit für das betreffende Gebinde,
 - Daten, die angeben, welche Inventare (in Bq) von welchen Nukliden in einem einzelnen Abfallgebinde vorhanden sind.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.6 gegeben.

- g. Temperaturdaten aus der TEDA-Datei, mit denen im Programm TEMP4 Temperaturverläufe an ausgewählten Stellen (Stützstellen) im Grubengebäude berechnet werden, d.h.
- Zeitpunkte, zu denen Temperaturwerte vorliegen,
 - Temperaturwerte an den Stützstellen für alle Zeitpunkte.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.2.7 gegeben.

Durch Eingaben im Job-Input-File (JIF) können die folgenden Daten für einen bestimmten Rechenlauf geändert werden (siehe Job-Input-Beschreibung, Kapitel 8.1):

- beliebig viele einzelne globale Daten,
- beliebig viele einzelne elementspezifische Daten,
- die vollständigen Strukturdaten,
- jeweils ein vollständiger Satz von Gebinde- oder Segmentdaten beliebig vieler einzelner Gebinde bzw. Segmente.

Für das Deckgebirgsmodul CHET werden im Programm ICHET von entsprechenden Lese- und Aufbereitungsprogrammen die folgenden Daten aus Dateien gelesen:

- a. Deckgebirgsdaten aus der DACH-Datei, z.B.
- Anzahl der Zonen und der Zellen pro Zone,
 - für jede Zone Angaben zu den Randbedingungen,
 - Geometriedaten der Zellen,
 - Durchflußraten und Dichten des Fluids,
 - Daten zur Bestimmung der Rückhaltefaktoren aus K_d -Werten,
 - Angaben über den Transportweg.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.3.1 gegeben.

- b. Elementspezifische Daten aus der ELCH-Datei, d.h.
- K_d -Werte für alle zu berücksichtigenden Elemente für alle Zonen des Deckgebirgspfades oder
 - R_f -Werte für alle zu berücksichtigenden Elemente für alle Zonen des Deckgebirgspfades.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.3.2 gegeben.

- c. Allgemeine Daten aus der Vorspanndatei, z.B.
- Anzahl und Namen der Nuklide, für die Freisetzungsraten berechnet wurden,
 - Name der ausgewählten Segmente

Die rvs-Datei wird im Modul REPOS erzeugt und enthält Zusatzinformationen zu den Freisetzungsraten, die in (d) beschrieben werden. Eine detaillierte Beschreibung wird im Kapitel 8.3.3.1 gegeben.

- d. Zeitpunkte und Freisetzungsraten aus dem Grubengebäude aus der rns-Datei.

Die rns-Datei wird immer vom Modul REPOS erstellt. Sie wird nicht in der Datenbibliothek abgelegt, sondern in der Output-Directory gehalten. Die rns-Datei kann aus demselben EMOS-Rechenlauf stammen, wenn beide Module REPOS und CHET nacheinander abgearbeitet werden, oder in einem früherem Rechenlauf erzeugt worden sein (vgl. Bedeutung der Schalter IMO(4) und IMO(5) in Zeile 4 des Job-Input-Files und Teil D der Job-Input-Beschreibung). Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei erfolgt in Kapitel 8.3.3.2.

Für das Biosphärenmodul EXPOS werden im Programm IEXPOS von entsprechenden Lese- und Aufbereitungsprogrammen die folgenden Daten aus Dateien gelesen:

- a. Elementspezifische Daten aus der ELEX-Datei, d.h.
- K_d -Werte der Elemente zur Berechnung von Rückhaltefaktoren.

Diese Werte werden benötigt, um die Aktivitätskonzentrationen von den kurzlebigen Tochternukliden über das Aktivitätsgleichgewicht zu berechnen, die in der Deckgebirgsrechnung nicht berücksichtigt wurden.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.4.1 gegeben.

- b. Nuklidspezifische Daten aus der DOEX-Datei, z.B.
- Dosisumrechnungsfaktoren für Erwachsene und Kleinkinder zur Umrechnung von Bq/l in Sv/a,
 - Dosisfaktoren zur Umrechnung von Bq in Sv.

Eine detaillierte Beschreibung dieser Datei wird im Kapitel 8.2.4.2 gegeben.

- c. Zeitverläufe der Aktivitätskonzentrationen an ausgewählten Wasserentnahmestellen aus der czk-Datei mit
- Nuklid und Zellenauswahl der Deckgebirgsrechnung,
 - Zeitpunkte des Beginns der Nuklidfreisetzung ins Grundwasser,
 - Aktivitätskonzentrationen in ausgewählten Zellen des Ausbreitungsweges zu ausgewählten Zeiten.

Die czk-Datei wird formatiert vom Modul CHET erstellt. Sie wird nicht in der Datenbibliothek abgelegt, sondern in der Output-Directory gehalten. Die czk-Datei kann aus demselben EMOS-Rechenlauf stammen, wenn beide Module CHET und EXPOS nacheinander abgearbeitet werden, oder in einem früherem Rechenlauf erzeugt worden sein (vgl. Bedeutung der Schalter IMO(5) und IMO(6) in Zeile 4 des Job-Input-Files und Teil E der Job-Input-Beschreibung). Die czk-Datei wird in Kapitel 8.3.4.2 beschrieben.

Für eine probabilistische Rechnung werden mit dem Programm ISTAT aus der Statistik-Datei (STDA-Datei) Informationen über die Parameter einer EMOS-Rechnung übernommen und verarbeitet, die als Zufallsvariablen behandelt werden sollen. Für jeden dieser Parameter werden in einer oder mehreren Zeilen Angaben zu seiner Wahrscheinlichkeitsverteilung gemacht. Am

Ende der Datei nach der Kennung *****KORR***** können Angaben zu evtl. bestehenden Korrelationen zwischen einzelnen Zufallsvariablen gemacht werden.

Eine detaillierte Beschreibung der STDA-Datei wird im Kapitel 8.2.5 gegeben.

Weiterhin werden bei einer probabilistischen Rechnung die aktuellen Werte aller unabhängigen Variablen für alle Simulationen in einer Stichprobenmatrix abgelegt. Diese Matrix ist in der spl-Datei gespeichert, die in Kapitel 8.3.6.1 detailliert beschrieben wird.

Veränderungen des Inhaltes einzelner Dateien dürfen grundsätzlich nur unter Berücksichtigung des jeweils vorgeschriebenen Eingabeformates vorgenommen werden. Aus diesem Grunde wird in den nachfolgenden Unterkapiteln eine detaillierte Eingabebeschreibung vorgelegt. Darin enthalten sind:

- Variablenname bzw. Feldelement, dem ein Wert bei einem EMOS-Rechenlauf zugewiesen werden soll,
- Format der Dateneingabe,
- textliche Erläuterung der Variablen.

Die Abarbeitung einer jeden Datei erfolgt zeilenweise.

8.2.1 Die nuklidspezifische Datenbasis

Die nuklidspezifische Datenbasis (in der NUDA-Datei) soll alle für eine Sicherheitsanalyse relevanten Nuklide enthalten. Die für eine Anwendungsrechnung im Einzelfall hiervon zu berücksichtigenden Nuklide werden mit Hilfe der Nuklidauswahl im Job-Input-File (siehe JIF-Beschreibung) ausgewählt.

Die nuklidspezifischen Daten sind ausschließlich solche Daten, die für ein Nuklid charakteristisch sind. In der Datei sind alle Nuklide zu Nuklidgruppen (Spalt- und Aktivierungsprodukte, Am-, Th-, Np-, und U- Zerfallsreihe) zusammengefaßt. Innerhalb der Gruppe der Spalt- und Aktivierungsprodukte sind die Nuklide aufsteigend nach Massenzahlen sortiert. Innerhalb der Zerfallsreihen ist die Reihenfolge durch die Zerfallskette bedingt.

Im einzelnen werden folgende Angaben gemacht:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der nuklidspezifischen Datei:

Kommentar Format *

2. Zeile: Aufteilung der Nuklide auf die Gruppe der Spalt- und Aktivierungsprodukte und die Zerfallsreihen:

NNRZ(K), K=1, ..., 5 Format 5I5

mit folgender Bedeutung:

NNRZ(1) : Anzahl der Spaltprodukte,

NNRZ(2) : Anzahl der Nuklide in der Th-Reihe,

NNRZ(3) : Anzahl der Nuklide in der Np-Reihe,

NNRZ(4) : Anzahl der Nuklide in der U -Reihe,
NNRZ(5) : Anzahl der Nuklide in der Am-Reihe.

Die Gesamtzahl der eingetragenen Nuklide ergibt sich aus $NNZ = NNRZ(1) + \dots + NNRZ(5)$. Hierbei muß gelten $NNZ \leq LNZ$, wobei LNZ in der Parameterdatei (siehe COMMON-Block Beschreibung) festgelegt ist.

3. Zeile: bis (NNZ+2)-te Zeile:

In jeder Zeile die folgenden Angaben zu jedem Nuklid:

Laufende Nummer (wird überlesen),	Format I5, 4X,
CNZ(KNZ,1), -, INZ(KNZ,1),	Format A2, A1, I3,
INZ(KNZ,2), INZ(KNZ,3),	Format 2I5,
RNZ(KNZ,1), RNZ(KNZ,3), RNZ(KNZ,4), RNZ(KNZ,6)	Format 4E10.3

mit folgender Bedeutung:

CNZ(KNZ,1) : Name des Nuklids,
INZ(KNZ,1) : Massenzahl,
INZ(KNZ,2) : Angaben zu den Zerfallsreihen
= 0 : Tochter des Nuklids existiert nicht oder wird nicht betrachtet,
> 0 : Zeilenabstand des Nuklids zu seiner Tochter in der NUDA-Datei,
INZ(KNZ,3) : Zerfallstyp (alpha, beta, gamma)
= 0 : beta und/oder gamma,
= 1 : alpha,
RNZ(KNZ,1) : Halbwertszeit des Nuklids [a],
RNZ(KNZ,3) : z.Z. nicht belegt,
RNZ(KNZ,4) : Wärmekonversionsfaktor [W/Bq],
RNZ(KNZ,6) : z.Z. nicht belegt.

8.2.2 Dateien mit den Eingabedaten für das Modul Repos

8.2.2.1 Die globalen Daten

Die GODA-Datei enthält physikalische und chemische Konstanten, Anfangswerte von einigen zeitlich veränderlichen Größen sowie Faktoren für die Variation von Parametern oder Gruppen von Parametern, die in mehreren Abfallgebinde- oder Segmentmodellen und Effektunterprogrammen verwendet werden. Außerdem enthält die Datei einige global verwendete Referenzwerte wie z.B. die Gebirgstemperatur, den Gebirgsdruck und die Referenzporosität.

Der Zugriff auf die Daten erfolgt im Programm über ihre Plazierung in dem Feld RGY, in das die Daten aus der GODA-Datei eingelesen werden. Daher ist die Reihenfolge der Größen in der GODA-Datei fest vorgeschrieben.

Im einzelnen sollen folgende Angaben gemacht werden:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Datei mit den globalen Daten:

Kommentar	Format *
-----------	----------

2. und folgende Zeilen bis EOF (End of File):

KGY, RGY(KGY), CGTEXT(KGY)	Format I5, E10.0, A60
----------------------------	-----------------------

mit folgender Bedeutung:

KGY : laufende Nummer KGY = 1, ..., NGY,

RGY(KGY) : Wert des jeweiligen globalen Datums,

CGTEXT(KGY) : textliche Erklärung des globalen Datums.

Die aktuelle Anzahl NGY der globalen Daten wird beim Einlesen der Daten ermittelt. Die Nummern KGY müssen bis NGY fortlaufend sein. Es darf keine Nummer ausgelassen werden, auch dann nicht, wenn das zugehörige Datum z.Z. nicht verwendet wird. Die Anzahl NGY darf den Maximalwert LGY, der in der Parameterdatei angegeben wird, nicht überschreiten.

Die textliche Erläuterung sollte eindeutig sein und den Namen der lokalen Variablen enthalten, welcher der Wert im Mobilisierungs-, Segment- oder Effektprogramm zugewiesen wird.

An beliebiger Stelle in der Datei können Kommentarzeilen eingefügt werden. Diese beginnen jeweils mit der Kennung 'KOM: ' (KOM: im Format A10 linksbündig) und werden vom Programm überlesen.

Die Werte einzelner globaler Daten RGY können für einen bestimmten Rechenlauf (z.B. für eine Parametervariation) im Job-Input-File geändert werden (siehe JIF-Beschreibung unter der Kennung *****GODA).

Im folgenden werden die Plazierung und die textliche Erläuterung der Daten aufgeführt, die z.Z. verwendet werden. Die Werte der globalen Daten sind im allgemeinen problemspezifisch und werden deshalb hier nicht angegeben. Die globalen Daten sind in der Datei zu Themenblöcken zusammengefaßt, die jeweils von einer Kommentarzeile eingeleitet werden.

KGY	CGTEXT(KGZ)	
allgemeine Daten		
1	Erdbeschleunigung	G
2	Gaskonstante	R
3	mittlere Dichte des Salzgesteins	RHOS

4	mittlere Dichte der Lauge	RHOL
5	dynamische Zähigkeit (Lauge)	RMUE
6	Gebirgstemperatur in der Referenztiefe	TEMPO
7	geothermischer Temperaturgradient	-
8	hydrostatischer Druck in der Referenztiefe	PHYD
9	Gebirgsdruck in der Referenztiefe	PG
10	nicht benutzt	-
11	nicht benutzt	-
12	nicht benutzt	-
13	nicht benutzt	-
14	nicht benutzt	-
15	nicht benutzt	-
16	nicht benutzt	-
17	nicht benutzt	-
18	nicht benutzt	-
19	nicht benutzt	-
20	nicht benutzt	-

Daten zum Konvergenzansatz

21	Referenzkonvergenzrate	KREF
22	Referenzporosität	PHIRO
23	Aktivierungsenergie (Salz) / Gaskonstante	QR
24	Parameter in Temperaturabhängigkeit der Konvergenz	-
25	Druckexponent (Konvergenz)	EXPO
26	Konvergenzreduktion (Bohrlochverschluß)	FRV
27	Konvergenzreduktion (Streckenverschluß)	FRV
28	Konvergenzreduktion (Rolloch)	FRV
29	Konvergenzreduktion (Kammer)	FRV
30	nicht benutzt	-
31	nicht benutzt	-
32	nicht benutzt	-
33	nicht benutzt	-
34	nicht benutzt	-
35	nicht benutzt	-
36	nicht benutzt	-
37	nicht benutzt	-
38	nicht benutzt	-
39	nicht benutzt	-
40	nicht benutzt	-

Daten zur Permeabilität und Porosität

41	Permeabilität / Porosität	F09
42	Exponent in Permeabilitäts-Porositätsbeziehung	EXPO
43	Anfangsporosität (begrenzter Laugenzutritt)	PHILO
44	Anfangsporosität (Streckenversatz)	PHISO

45	Anfangsporosität (Kammerversatz)	PHIK0
46	Anfangsporosität (Kammerverschluß)	PHIV0
47	Anfangsporosität (Verschluß, Bohrloch)	PHIV0
48	Endporosität	PHIE
49	Dampporosität	PHID0
50	Dampppermeabilität	PERD
51	Permeabilität der Schachtverfüllung	PERD0
52	Permeabilitätserhöhung in der Zuflußphase	FPERM
53	Permeabilität des DYWIDAG-Materials	PERS0
54	nicht benutzt	-
55	nicht benutzt	-
56	nicht benutzt	-
57	nicht benutzt	-
58	nicht benutzt	-
59	nicht benutzt	-
60	nicht benutzt	-

Daten zu Austauschströmen

61	Laugentransport / Gastransport (Funktion(Per))	F04NEU
62	Laugentransport / Gastransport (Verschluß)	F04V
63	Laugentransport / Gastransport (Pfropfen)	F04P
64	Laugentransport / Konzentrationsdifferenz	F05
65	Laugentransport / Temperaturdifferenz	F07
66	Diffusionskoeffizient	D
67	Aktivierungsenergie / Gaskonstante für Diffusion	QRD
68	Austauschstrom durch Diffusion: ein/aus	-
69	Dispersionslänge in versetzten Bereichen	ALFA
70	Geschwindigkeit, therm. Konvektion in offenen Strecken	-
71	Temperaturgradient, therm. Konvektion in versetzten Str.	-
72	nicht benutzt	-
73	nicht benutzt	-
74	nicht benutzt	-
75	nicht benutzt	-
76	nicht benutzt	-
77	nicht benutzt	-
78	nicht benutzt	-
79	nicht benutzt	-
80	nicht benutzt	-

Daten zur Gasproduktion

81	Korrosionsgasvolumen / Metallmasse	VGK
82	Molekel / 100 eV α -Energie	F02A
83	Molekel / 100 eV β -, γ -Energie	F02B
84	Transfer-G-Faktor (Radiolyse)	GTRANS
85	Dichte der Lauge / Dichte des Feststoffs	QRHO

86	Anteil der absorbierten γ -Strahlung	F02V
87	Proportionalitätskonstante bei Radiolysegasproduktion	RC1
88	nicht benutzt	-
89	nicht benutzt	-
90	nicht benutzt	-

Daten zur Bilanzierung gelöster Stoffe

91	aufgeprägter Dichteunterschied der Lauge im Einl.ort	DZK
92	Magnesiumkonzentration in Q-Lauge (Anfangswert)	CMG
93	Umrechnungsfaktor Zementmasse \rightarrow Magnesiummasse	FZMG
94	nicht benutzt	-
95	nicht benutzt	-
96	nicht benutzt	-
97	nicht benutzt	-
98	nicht benutzt	-
99	nicht benutzt	-
100	nicht benutzt	-

Daten zu Mobilisierungsansätzen

101	Mobilisierungsrate zementierter Abfälle	RK
102	nicht benutzt	-
103	Mobilisierungsrate LWR-Brennelemente Bereich 1	RMOB1
104	Mobilisierungsrate LWR-Brennelemente Bereich 2	RMOB2
105	Mobilisierungsrate LWR-Brennelemente Bereich 3	RMOB3
106	Mobilisierungsrate HTR-Brennelemente Bereich 1	RMOB1
107	Mobilisierungsrate HTR-Brennelemente Bereich 2	RMOB2
108	Mobilisierungsrate HTR-Brennelemente Bereich 3	RMOB3
109	nicht benutzt	-
110	Reaktionsrate Glasmatrix [kg/a/m ²]	RJ
111	Aktivierungsenergie Glasmatrix [kJ/mol]	Q
112	nicht benutzt	-
113	nicht benutzt	-
114	nicht benutzt	-
115	nicht benutzt	-
116	nicht benutzt	-
117	nicht benutzt	-
118	nicht benutzt	-
119	nicht benutzt	-
120	nicht benutzt	-

Daten zum Behälterausfall (Lebensdauern, etc.)

121	nicht benutzt	-
122	nicht benutzt	-
123	nicht benutzt	-
124	nicht benutzt	-

125	nicht benutzt	-
126	nicht benutzt	-
127	nicht benutzt	-
128	nicht benutzt	-
129	nicht benutzt	-
130	nicht benutzt	-
sonstige Daten		
131	maximaler Laugendruck in der Kaverne	PMAX
132	Maximale Zeitschrittweite bei offenem Firstspalt	-
133	Reduktionsfaktor für Leitwert offener Bereiche	RRED
134	nicht benutzt	-
135	nicht benutzt	-
136	nicht benutzt	-
137	nicht benutzt	-
138	nicht benutzt	-
139	nicht benutzt	-
140	nicht benutzt	-

8.2.2.2 Die elementspezifischen Daten

Die ELDA-Datei mit den elementspezifischen Daten enthält für alle in der nuklidspezifischen Datenbasis vorkommenden Elemente Angaben, die für die Elemente charakteristisch sind, z.B. Löslichkeitsgrenzen [mol/l] für unterschiedliches chemisches Milieu, K_d -Werte [m³/kg] für einzelne Bereiche des Grubengebäudes, elementspezifische Mobilisierungsdauer [a] und/oder verschiedene elementspezifische Inventaranteile (vgl. Mobilisierungsmodelle MOBH1 und MOBL1). Letztere müssen in benachbarten Spalten der Matrix REY mit den elementspezifischen Daten stehen.

Die Charakter-Strings CETEXT in den Zeilen 3ff der folgenden Beschreibung geben für jede der NREY Spalten an, um welches elementspezifische Datum es sich jeweils handelt. Die elementspezifischen Datensätze werden im Programm durch Angabe der Spaltennummern KREY = 1, ..., NREY der ELDA-Datei in den Mobilisierungs- und Segmentmodellen ausgewählt (siehe Bedeutung von IBEY(14,KBY) bis IBEY(17,KBY) in der BADA-Dateibeschreibung, Kapitel 8.2.2.4).

Die Zeilennumerierung bezieht sich auf eine ELDA-Datei, bei der keine Fortsetzungszeilen vorkommen. Bei zusätzlichen Fortsetzungszeilen (siehe Zeilen 3, 4 und folgende) verschieben sich die Zeilennummern entsprechend.

Im einzelnen hat die Datei folgenden Inhalt:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der elementspezifischen Datei:

Kommentar

Format A80.

Vorzeichen für die negative Achsenrichtung. In den folgenden Spalten stehen in jeder Zeile die an das betreffende Segment angehängten weiteren Segmente oder Gebinde in beliebiger Reihenfolge. Hieraus ergibt sich, daß der Name eines Gebindes niemals in der ersten Spalte stehen kann.

Die Zeilen der Matrix müssen so geordnet sein, daß die weiter innen liegenden Segmente (bezogen auf das Mittelfeld bzw. äußerste Segment) immer vor den weiter außen liegenden stehen. Bei Segmenten, die auf der gleichen Ebene in der Struktur stehen, d.h. in der Struktur gleich weit vom Mittelfeld entfernt sind, ist die Reihenfolge beliebig.

Im einzelnen hat die Datei folgenden Inhalt:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Struktur-Datei:

Kommentar	Format *.
-----------	-----------

2. Zeile: Name eines Segments, Ausrichtung eines Segments und maximal LISY-2 = 7 Namen der hieran angehängten inneren Segmente oder Gebinde:

Segmentname CSY(1,1), Ausrichtung des Segments, Segment- oder Gebindenamen CSY(2,1), ..., CSY(LISY-1,1)	Format A10, I4,1X, 7A10.
--	--------------------------

Folgezeilen sind in der SUDA-Datei nicht möglich, d.h. es können nicht mehr als 7 Segmente oder Gebinde an einem Segment angehängt werden.

3. Zeile: und folgende Zeilen bis EOF (End of File) für jedes weitere Segment:
CSY(1,KSY), CSY(2,KSY), ..., CSY(LISY-1,KSY) entsprechend Zeile 2.

Die Anzahl der Zeilen ist gleich der Anzahl der Segmente in der Struktur. Sie darf den in der Parameterdatei angegebenen Wert LSY nicht überschreiten. Die maximale Anzahl der verschiedenen Segmente und Gebinde wird durch LBY in der Parameterdatei festgelegt.

Die Anzahl der an ein Segment angehängten Segmente oder Gebinde wird im Programm aus der Anzahl der Namen ermittelt und in die erste Spalte einer Matrix ISY (Strukturmatrix) geschrieben. Diese Anzahl darf den Wert LISY-2 nicht überschreiten, d.h. die Anzahl der Spalten der Matrix CSY ist maximal LISY-1 = 8. Der Parameter LISY hat den Wert 9 und wird in der Parameterdatei angegeben. Er dient der Dimensionierung der Strukturmatrix ISY, die ab der zweiten Spalte die Nummern der in CSY angegebenen Segmente und Gebinde enthält. Diese Nummern werden vom Programm aus der Anordnung der Segmente und Gebinde in der BADA-Datei ermittelt.

Zur Erklärung der Struktur und zur Gestaltung der Strukturdatei können beliebig viele Kommentarzeilen eingefügt werden. Jede dieser Zeilen muß durch die Kennung 'KOM: ' (KOM: im Format A10 linksbündig) eingeleitet werden. Wegen der Angabe der geometrischen Ausrichtung in der 2. Spalte einer Strukturzeile sind nach der Kennung 5 Leerzeichen einzufügen, d.h. Kennung und Kommentar müssen in das Format A10,5X,7A10 passen.

Die vollständigen Strukturdaten der SUDA-Datei können für einen bestimmten Rechenlauf, falls erwünscht (z.B. zur Variation der Struktur), auch direkt im Job-Input-File unter der Kennung *****SUDA angegeben werden. Die Änderung einzelner Zeilen der SUDA-Datei durch Angabe im Job-Input-File ist nicht möglich.

8.2.2.4 Die Gebinde- und Segmentdaten

Die BADA-Datei sichert für jeden Teilbereich des Grubengebäudes die Versorgung der zugehörigen Modellprogramme mit gebinde- und segmentspezifischen Eingangsdaten. Zu diesen gehören, neben der Verknüpfung von Gebinden und Segmenten des Grubengebäudes mit den passenden Modellen, die Namen der eingelagerten Abfälle bzw. Abfallmixturen, Steuerparameter und Anfangswerte von Variablen.

Die Reihenfolge der Gebinde und Segmente in der Datei richtet sich nach der Reihenfolge in der Strukturmatrix (vgl. Beschreibung der SUDA-Datei, Kapitel 8.2.2.3), d.h. Gebinde stehen stets vor den zugehörigen Einlagerungsorten (Bohrlöcher, Kammern, Einlagerungsstrecken), diese wiederum vor den Strecken, usw.

Letztes Segment in der BADA-Datei ist immer zugleich das äußerste Segment des Grubengebäudes (z.B. das Mittelfeld). Dieses Segment erhält im Programm die Nummer NBY, wobei NBY die aktuelle Gesamtzahl der Segmente ist.

Vollkommen gleichartige Gebinde oder Segmente des Grubengebäudes, z.B. mehrere Bohrlöcher oder mehrere parallele Strecken, können zu einem Gebinde bzw. Segment zusammengefaßt werden. Diese kombinierten Gebinde bzw. Segmente treten in der Struktur unter einem gemeinsamen Namen nur einmal auf. Die Anzahl der zusammengefaßten Gebinde bzw. Segmente wird durch den Multiplikationsfaktor IBKY(1,KBY) (siehe Zeile 2) angegeben.

Im einzelnen enthält die BADA-Datei folgende Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Datei mit den gebinde- und segmentspezifischen Daten:

Kommentar

Format *.

Die in den Zeilen 2 und 3 anzugebenden Größen haben für Gebinde und Segmente zum Teil unterschiedliche Bedeutung. Daher werden sie im folgenden für Gebinde und Segmente getrennt erläutert.

Die zweite Komponente der folgenden Matrizen bezeichnet die jeweilige Gebinde- bzw. Segmentnummer. Zur Vereinfachung wird stets eine 1 für das erste Segment oder Gebinde verwendet.

I. Gebinde:

2. Zeile: Allgemeine Angaben zum Gebinde:

Vier Charakter-Strings CBNY(1,1) bis CBNY(4,1),
und zwei Integer, IBKY(3,1), IBKY(4,1), Format 4A10, 2I10

mit folgender Bedeutung:

- CBNY(1,1) : Name des Gebindes,
- CBNY(2,1) : Name des Mobilisierungsmodells für das Gebinde,
- CBNY(3,1) : Name eines Abfalls aus der ABDA-Datei oder einer Abfallmischung
aus der AMDA-Datei,
- CBNY(4,1) : Name eines anderen Gebindes, von dem die Eingangsvektoren
IBEY und RBEY (siehe Zeilen 4 bis 6ff) übernommen werden kön-
nen. Dies ist nur möglich, wenn alle Komponenten von IBEY und
von RBEY jeweils mit denen des anderen Gebindes übereinstim-
men. Der Datensatz des anderen Gebindes kann an beliebiger
Stelle in der BADA-Datei stehen.
- IBKY(3,1) : Anzahl der Behälter mit gleichen Einzelabfällen oder Gesamtzahl
der Behälter mit Abfallmischungen,
- IBKY(4,1) : = 1, wenn es sich um Einzelabfälle handelt, d.h. unter CBNY(3,1)
ist der Name eines Einzelabfalls aus der ABDA-Datei mit den ab-
fallspezifischen Daten (Kapitel 8.2.2.6) angegeben,
> 1, Anzahl verschiedener Einzelabfälle, die zu einer Mischung zu-
sammengefaßt werden, d.h. unter CBNY(3,1) ist der Name einer
Abfallmischung angegeben. Die Mischungsanordnung ist in der Datei für
die Abfallmischungen festgelegt (vgl. AMDA-Datei-Beschreibung, Ka-
pitel 8.2.2.5).

3. Zeile: Allgemeine Zeitangaben zum Gebinde:

RBTY(1,1) und RBTY(2,1) Format 10X, 2E12.5

mit folgender Bedeutung:

- RBTY(1,1) : Einlagerungszeitpunkt des Gebindes bezogen auf das Ende der
Betriebsphase = Zeitnullpunkt,
- RBTY(2,1) : bei Gebinden z.Z. ohne Bedeutung.

Die Größe RBTY(1,1) wirkt in den Mobilisierungsmodellprogrammen als Schalter für die Abarbeitung und dient außerdem als zeitlicher Bezugspunkt (siehe Kapitel 3.1.1).

II. Segmente:

2. Zeile: Allgemeine Angaben zum Segment:

Vier Charakter-Strings, CBNY(1,1) bis CBNY(4,1),
und zwei Integer, IBKY(3,1), IBKY(4,1) Format 4A10, 2I10

mit folgender Bedeutung:

- CBNY(1,1) : Name des Segments,
CBNY(2,1) : Name des zugehörigen Segmentmodells,
CBNY(3,1) : bei Segmenten ohne Bedeutung,
CBNY(4,1) : Name eines anderen Segments, von dem die Eingangsvektoren
IBEY und RBEY (siehe Zeilen 4 bis 6ff) übernommen werden können.
Dies ist nur möglich, wenn alle Komponenten von IBEY und
von RBEY jeweils mit denen des anderen Segments übereinstimmen.
Der Datensatz des anderen Segments kann an beliebiger
Stelle in der BADA-Datei stehen.
- IBKY(3,1) : Anzahl der Teilsegmente, die zu dem Segment CBNY(1,1) zusammen-
gefaßt worden sind,
IBKY(4,1) : bei Segmenten ohne Bedeutung.

3. Zeile: Allgemeine Zeitangaben zum Segment:

RBTY(1,1) und RBTY(2,1) Format 10X, 2E12.5

mit folgender Bedeutung:

- RBTY(1,1) : Einlagerungszeitpunkt der Gebinde bei Einlagerungsorten, Zeit-
punkt des Abwurfs des Feldesteils (Verfüllen des Hohlraums) bei
sonstigen Segmenten. Der Zeitpunkt ist bezogen auf das Ende
der Betriebsphase = Zeitnullpunkt.
- RBTY(2,1) : Zeitpunkt eines segmentspezifischen Ereignisses, z.B. spontaner
Laugenzutritt bzw. Durchbruch eines Laugeneinschlusses. Der
Zeitpunkt ist bezogen auf das Ende der Betriebsphase = Zeitnull-
punkt.

Die Größen RBTY(1,1) und RBTY(2,1) wirken in den Segmentmodellprogrammen als
Schalter (siehe Kapitel 4.1.2). Der Schalter RBTY(2,1) ist nur wirksam, wenn
RBTY(2,1) > RBTY(1,1) ist. Im Segmentmodell LEALG1 wird programmintern
RBTY(1,KBY) auf den Wert des äußeren Nachbarsegments gesetzt.

ANHANG zu Kapitel 8.2.2.4:

Im folgenden bedeutet KBY immer die Nummer eines Segments oder Gebindes. Die Belegung der Komponenten von IBEY (Integer-Eingangsdaten) und RBEY (Real-Eingangsdaten) ist zum Teil für alle Segmente oder Gebinde gleich, zum Teil aber unterschiedlich.

1. Komponentenbelegung des Datenvektors IBEY für alle zur Zeit vorhandenen Mobilisierungsmodelle:

Die Komponentenbelegung von IBEY(1,KBY) bis IBEY(5,KBY) und von IBEY(17,KBY) ist für alle Mobilisierungsmodelle gleich:

IBEY(1,KBY)	: Anzahl der für das Modell erforderlichen Komponenten von RBEY. Der Wert von IBEY(1,KBY) wird in jedem Mobilisierungsmodell überprüft. Falsche Wertangabe führt zum Programmabbruch.
IBEY(2,KBY)	: Anzahl auszugebender zeitschrittrelevanter Ströme (RUZY)
IBEY(3,KBY)	: Anzahl auszugebender sonstiger Übergabegrößen (RUSY),
IBEY(4,KBY)	: Anzahl auszugebender Druckausgabe-Größen (RUDY),
IBEY(5,KBY)	: Anzahl auszugebender zeitlich veränderlicher physikalischer Größen (RBPY),
IBEY(17,KBY)	: Schalter für die Auswahl der Behälterausfallfunktion, =1 : Gleichverteilung, =2 : Exponentialverteilung, =3 : Normalverteilung der Ausfallwahrscheinlichkeit. Die Angabe anderer Werte führt zu einem Programmabbruch.

Zum Teil unterschiedliche Bedeutung haben die im folgenden für jedes Mobilisierungsmodell einzeln aufgeführten Komponenten. Alle weiteren nicht angegebenen Komponenten von IBEY werden zur Zeit nicht benutzt. Ihnen können beliebige Integerwerte passenden Formats zugewiesen werden.

MOBG5S : Mobilisierungsmodell für HAW:

IBEY(6,KBY) : Nummer für den Temperaturverlauf der Mobilisierung.

MOBH1S : Mobilisierungsmodell für HTR-Brennelemente mit elementunabhängigen Mobilisierungsraten:

IBEY(16,KBY) : Nummer der ersten von 4 benachbarten Spalten der Matrix REY der ELDA-Datei, welche die elementspezifischen Inventaranteile zur Mobilisierung enthalten (siehe Kapitel 3.4).

MOBL1S : Mobilisierungsmodell für LWR-Brennelemente mit elementunabhängigen Mobilisierungsraten:

IBEY(16,KBY) : Nummer der ersten von 3 benachbarten Spalten der Matrix REY der ELDA-Datei, welche die elementspezifischen Inventaranteile zur Mobilisierung enthalten (siehe Kapitel 3.5).

MOBZ6S : Mobilisierungsmodell für zementierte Abfallgebinde mit wahlweise elementspezifischer Mobilisierung:

IBEY(16,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, welche die elementspezifischen Mobilisierungsdauern enthält, = 0, wenn elementunabhängige Mobilisierung gewählt wird.

MOBZ7S : Mobilisierungsmodell für zementierte Abfallgebinde bei begrenzten Laugenmengen:

IBEY(16,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, welche die elementspezifischen Mobilisierungsdauern für die Mobilisierung durch Diffusion enthält.

2. Komponentenbelegung des Datenvektors RBEY für alle zur Zeit vorhandenen Mobilisierungsmodelle:

Die Komponentenbelegung von RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY) und RBEY(6,KBY) ist für alle Mobilisierungsmodelle gleich:

RBEY(1,KBY) : Mittlere Behälterstandzeit [a],

RBEY(2,KBY) : Streubreite des Behälterausfalls [a],

RBEY(3,KBY) : Anfangskorrosionsrate [kg/a].

Zum Teil unterschiedliche Bedeutung haben die im folgenden für jedes Mobilisierungsmodell einzeln aufgeführten Komponenten. Die Anzahl der anzugebenden fortlaufenden Größen ist durch

den Wert von IBEY(1,KBY) festgelegt. Den hiervon nicht benutzten Komponenten von RBEY können beliebige Real-Werte passenden Formats zugewiesen werden.

MOBG5S : Mobilisierungsmodell für HAW:

RBEY(4,KBY) : effektive Oberfläche der Glasmatrix [m²],

RBEY(5,KBY) : Tiefenabstand des zugehörigen Segments
zur Referenztiefe [m].

MOBH1S : Mobilisierungsmodell für HTR-Brennelemente mit elementunabhängigen Mobilisierungsraten:

Es sind keine weiteren Angaben erforderlich.

MOBL1S : Mobilisierungsmodell für LWR-Brennelemente mit elementunabhängigen Mobilisierungsraten:

Es sind keine weiteren Angaben erforderlich.

MOBZ6S : Mobilisierungsmodell für zementierte Abfallgebinde mit wahlweise elementspezifischer Mobilisierung:

RBEY(4,KBY) : Mobilisierungsrate [a⁻¹],
falls elementunabhängige Mobilisierung gewählt wird.

MOBZ7S : Mobilisierungsmodell für zementierte Abfallgebinde bei begrenzten Laugenmengen:

Es sind keine weiteren Angaben erforderlich.

3. Komponentenbelegung des Datenvektors IBEY für alle zur Zeit vorhandenen Segmentmodelle:

Die Komponentenbelegung von IBEY(1,KBY) bis IBEY(13,KBY) ist, sofern diese Größen in den Segmentmodellen angesprochen werden, für alle Segmentmodelle gleich. Unterschiedliche Komponentenbelegung gibt es nur für die Größen IBEY(14,KBY) bis IBEY(19,KBY). Die Komponente IBEY(19,KBY) wird nur in dem Segmentmodell STOVOK2 verwendet.

Im folgenden wird zunächst die Belegung der Komponenten IBEY(1,KBY) bis IBEY(13,KBY) beschrieben. Danach folgt eine Auflistung der in den einzelnen Segmenten unbedingt anzugebenden Komponenten sowie die Beschreibung der Größen IBEY(14,KBY) bis IBEY(17,KBY). Die Komponenten IBEY(18,KBY) bis IBEY(24,KBY) werden zur Zeit nicht benutzt, mit Ausnahme des Segmentmodells STOVOK2. Allen nicht benötigten Komponenten von IBEY können beliebige Integerwerte passenden Formats zugewiesen werden.

- IBEY(1,KBY) : Anzahl der für das Modell erforderlichen Komponenten von RBEY. Der Wert von IBEY(1,KBY) wird in jedem Segmentmodell überprüft. Falsche Wertangabe führt zum Programmabbruch.
- IBEY(2,KBY) : Anzahl auszugebender zeitschrittrelevanter Ströme (RUZY),
- IBEY(3,KBY) : Anzahl auszugebender sonstiger Übergabegrößen (RUSY),
- IBEY(4,KBY) : Anzahl auszugebender Druckausgabe-Größen (RUDY),
- IBEY(5,KBY) : Anzahl auszugebender zeitlich veränderlicher physikalischer Größen (RBPY),
- IBEY(6,KBY) : Nummer für den Temperaturverlauf im Versatz,
- IBEY(7,KBY) : Nummer für den Temperaturverlauf im Verschluß,
- IBEY(8,KBY) : 1. Nummer für den Temperaturgradienten im Versatz,
- IBEY(9,KBY) : 2. Nummer für den Temperaturgradienten im Versatz,
- IBEY(10,KBY) : 1. Nummer für den Temperaturgradienten im Verschluß,
- IBEY(11,KBY) : 2. Nummer für den Temperaturgradienten im Verschluß,
- IBEY(12,KBY) : Anzahl paralleler Strecken,
- IBEY(13,KBY) : Anzahl paralleler Verschlüsse bzw. Dämme.

BOALG1S : Verallgemeinertes Bohrlochmodell für HAW, MAW (ohne Mg-bedingte Zementauflösung), HTR-, und LWR-Brennelemente:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY), IBEY(7,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

- IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,
- IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

BOMAW1S : MAW-Bohrlochmodell mit Berücksichtigung begrenzter Laugenmengen zur Zementauflösung:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY), IBEY(16,KBY), IBEY(17,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen für Ausfällung in alkalischer Lösung stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte für Sorption in alkalischer Umgebung stehen,

IBEY(16,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen für Ausfällung in neutraler Lösung stehen,

IBEY(17,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte für Sorption in neutraler Umgebung stehen.

CABOT1S : Segmentmodell für einen Kavemensumpf:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

CATOP1S : Modell für den Speicherraum einer Kaverne:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

ESALG1S : Modell für eine Strecke mit Verschuß zur Einlagerung von Pollux-Behältern mit HAW-Kokillen, HTR- und LWR-Brennelementen:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(10,KBY), IBEY(11,KBY), IBEY(12,KBY), IBEY(13,KBY), IBEY(14,KBY),
IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

ESMAW1S : Modell für eine Strecke mit Verschuß zur Einlagerung von Großbehältern mit MAW-Abfällen mit Berücksichtigung begrenzter Laugenmengen zur Zementauflösung:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(10,KBY), IBEY(11,KBY), IBEY(12,KBY), IBEY(13,KBY), IBEY(14,KBY),
IBEY(15,KBY), IBEY(16,KBY), IBEY(17,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen für Ausfällung in alkalischer Lösung stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte für Sorption in alkalischer Umgebung stehen,

IBEY(16,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen für Ausfällung in neutraler Lösung stehen,

IBEY(17,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte für Sorption in neutraler Umgebung stehen.

KAMAW1S : Kammermodell mit Verschlüssen zur Einlagerung von MAW:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(10,KBY), IBEY(11,KBY), IBEY(13,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

LEALG1S : Modell für einen Laugeneinschluß (poröser Hohlraum) mit einem fiktiven konstanten Strömungswiderstand:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY).

STDAM1S : Modell für eine Strecke mit Damm und einem konvergierenden Zusatzvolumen:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(8,KBY), IBEY(9,KBY), IBEY(10,KBY), IBEY(11,KBY), IBEY(12,KBY),
IBEY(13,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

STMIF1S : Modell für das Mittelfeld eines Grubengebäudes mit konvergierendem Zusatzvolumen und Dämmen und einem (evtl.) Laugenzufluß von außen:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(12,KBY), IBEY(13,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

STOVE1S : Modell für ein Streckensegment ohne Verschuß mit einem konvergierenden Zusatzvolumen:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(8,KBY), IBEY(9,KBY), IBEY(12,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

STOVOK1S : Modell für eine Strecke ohne Verschuß mit ortsabhängiger Nuklidkonzentration:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(12,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY), IBEY(19,KBY)

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

IBEY(19,KBY) : Anzahl der Kompartments, in welche die Strecke zur Ortsdiskretisierung aufgeteilt wird.

STVER1S : Universelles Modell für eine Strecke mit Verschuß und einem konvergierenden Zusatzvolumen:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(6,KBY),
IBEY(7,KBY), IBEY(8,KBY), IBEY(9,KBY), IBEY(10,KBY), IBEY(11,KBY), IBEY(12,KBY),
IBEY(13,KBY), IBEY(14,KBY), IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die K_d -Werte stehen.

SUBROS : Einfaches Modell des Salzstocks für ein Subrosionsszenario:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY).

VQUELLE2 : Einfaches Segmentmodell für ein durchströmtes Grubengebäude:

Angaben sind erforderlich für:

IBEY(1,KBY), IBEY(2,KBY), IBEY(3,KBY), IBEY(4,KBY), IBEY(5,KBY), IBEY(14,KBY),
IBEY(15,KBY),

IBEY(14,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die
elementspezifischen Löslichkeitsgrenzen stehen,

IBEY(15,KBY) : Nummer der Spalte der Matrix REY der ELDA-Datei, in der die
K_d-Werte stehen.

4. Komponentenbelegung des Datenvektors **RBEY** für alle zur Zeit vorhandenen Segmentmodelle:

Die Komponentenbelegung von RBEY(7,KBY) bis RBEY(15,KBY) ist, sofern diese Größen in
den Segmentmodellen angesprochen werden, für alle Segmentmodelle gleich. Zum Teil unter-
schiedliche Bedeutung haben nur die Größen RBEY(1,KBY) bis RBEY(6,KBY).

Die Anzahl der anzugebenden fortlaufenden Größen ist durch den Wert von IBEY(1,KBY) fest-
gelegt. Den hiervon nicht benutzten Komponenten von RBEY können beliebige Real-Werte pas-
senden Formats zugewiesen werden.

Im folgenden wird zunächst die Belegung der Komponenten RBEY(7,KBY) bis RBEY(15,KBY)
beschrieben. Danach folgt eine Auflistung der in den einzelnen Segmenten unbedingt anzuge-
benden Komponenten sowie die Beschreibung der Größen RBEY(1,KBY) bis RBEY(6,KBY).

RBEY(7,KBY) : konvergierendes Zusatzvolumen [m³],

RBEY(8,KBY) : Volumen RBE(8) eines spontanen begrenzten
Laugenzutritts [m³],

RBEY(9,KBY) : Masse des sorbierenden Materials [kg],

RBEY(10,KBY) : Entfernung der Stützstellen zur Berechnung
des Temperaturgradienten im Versatz [m],

RBEY(11,KBY) : Entfernung der Stützstellen zur Berechnung
des Temperaturgradienten im Verschluß [m],

RBEY(12,KBY)	: fiktives Restvolumen der Kaverne	[m ³],
RBEY(13,KBY)	: Reduktionsfaktor für die Konvergenz (im Abfallbereich) vor Laugenzutritt,	
RBEY(14,KBY)	: Reduktionsfaktor für die Konvergenz (im Abfallbereich) nach Laugenzutritt,	
RBEY(15,KBY)	: Tiefenabstand DX des Segmentes zur Referenztiefe	[m].

BOALG1S : Verallgemeinertes Bohrlochmodell für HAW, MAW (ohne Mg-bedingte Zementauflösung), HTR- und LWR-Brennelemente:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(6,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY),
RBEY(13,KBY), RBEY(14,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Radius des Bohrlochs (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge des Bohrlochs (ohne Stopfen)	[m],
RBEY(4,KBY)	: Radius des Bohrlochstopfens (Anfangswert)	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Bohrlochstopfens	[m].

BOMAW1S : MAW-Bohrlochmodell mit Berücksichtigung begrenzter Laugemengen zur Zementauflösung:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(6,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(13,KBY),
RBEY(14,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Radius des Bohrlochs (Anfangswert)	m],
RBEY(3,KBY)	: Länge des Bohrlochs (ohne Stopfen)	[m],
RBEY(4,KBY)	: Radius des Bohrlochstopfens (Anfangswert)	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Bohrlochstopfens	[m].

CABOT1S : Segmentmodell für einen Kavernensumpf:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(14,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY) : Radius des Kavernensumpfes (Anfangswert) [m],

RBEY(3,KBY) : Höhe des Kavernensumpfes [m].

CATOP1S : Modell für den Speicherraum einer Kaverne:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(12,KBY), RBEY(13,KBY), RBEY(14,KBY)
RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY) : Radius der Kaverne (Anfangswert) [m],

RBEY(3,KBY) : Höhe der Kaverne [m].

ESALG1S : Modell für eine Strecke mit Verschuß zur Einlagerung von Pollux-Behältern mit
HAW-Kokillen, HTR- und LWR-Brennelementen:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(5,KBY),RBEY(6,KBY),
RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(11,KBY), RBEY(13,KBY),RBEY(14,KBY),
RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY) : Höhe der Strecke (Anfangswert) [m],

RBEY(2,KBY) : Breite der Strecke (Anfangswert) [m],

RBEY(3,KBY) : Länge der Strecke (ohne Verschuß) [m],

RBEY(4,KBY) : Höhe des Verschlusses (Anfangswert) [m],

RBEY(5,KBY) : Breite des Verschlusses (Anfangswert) [m],

RBEY(6,KBY) : Länge des Verschlusses [m].

ESMAW1S : Modell für eine Strecke mit Verschuß zur Einlagerung von Großbehältern mit
MAW-Abfällen mit Berücksichtigung begrenzter Laugenmengen zur Zementauf-
lösung:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(5,KBY), RBEY(6,KBY),
RBEY(8,KBY), RBEY(11,KBY), RBEY(13,KBY), RBEY(14,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Höhe der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(2,KBY)	: Breite der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge der Strecke (ohne Verschuß)	[m],
RBEY(4,KBY)	: Höhe des Verschlusses (Anfangswert)	[m],
RBEY(5,KBY)	: Breite des Verschlusses (Anfangswert)	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Verschlusses	[m].

KAMAW1S : Kammermodell mit Verschlüssen zur Einlagerung von MAW:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(5,KBY), RBEY(6,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY),
RBEY(11,KBY), RBEY(13,KBY), RBEY(14,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Anfangsvolumen der Kammer	[m ³],
RBEY(4,KBY)	: Höhe des Verschlusses (Anfangswert)	[m],
RBEY(5,KBY)	: Breite des Verschlusses (Anfangswert)	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Verschlusses	[m].

LEALG1S : Modell für einen Laugeneinschluß (poröser Hohlraum) mit einem fiktiven konstanten Strömungswiderstand:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(13,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: gesamtes Porenvolumen des Laugeneinschlusses (Anfangswert)	[m ³],
RBEY(2,KBY)	: inverser Strömungswiderstand (Leitwert)	[m ³ /a/MPa].

STDAM1S : Modell für eine Strecke mit Damm und mit einem konvergierenden Zusatzvolumen:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(5,KBY), RBEY(6,KBY),
RBEY(7,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(10,KBY), RBEY(11,KBY), RBEY(15,KBY)

RBEY(1,KBY)	: Höhe der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(2,KBY)	: Breite der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge der Strecke (ohne Damm)	[m],
RBEY(4,KBY)	: Höhe des Dammes	[m],
RBEY(5,KBY)	: Breite des Dammes	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Dammes	[m].

STMIF1S : Modell für das Mittelfeld eines Grubengebäudes mit konvergierendem Zusatzvolumen und Dämmen und einem (evtl.) Laugenzufluß von außen:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(5,KBY), RBEY(6,KBY), RBEY(7,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Höhe der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(2,KBY)	: Breite der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge der Strecke (ohne Damm)	[m],
RBEY(4,KBY)	: Höhe des Dammes	[m],
RBEY(5,KBY)	: Breite des Dammes	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Dammes	[m].

STOVE1S : Modell für ein Streckensegment ohne Verschuß mit einem konvergierenden Zusatzvolumen:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(7,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(10,KBY), RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Höhe der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(2,KBY)	: Breite der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge der Strecke	[m].

STOVOK1S : Modell für eine Strecke ohne Verschuß mit ortsabhängiger Nuklidkonzentration:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(15,KBY), RBEY(17,KBY)

RBEY(1,KBY)	: Höhe der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(2,KBY)	: Breite der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge der Strecke	[m],
RBEY(17,KBY)	: Anfangsporosität des Versatzes	[-].

STVER1S : Universelles Modell für eine Strecke mit Verschuß und mit einem konvergierenden Zusatzvolumen:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY), RBEY(4,KBY), RBEY(5,KBY), RBEY(6,KBY),
RBEY(7,KBY), RBEY(8,KBY), RBEY(9,KBY), RBEY(10,KBY), RBEY(11,KBY),
RBEY(15,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Höhe der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(2,KBY)	: Breite der Strecke (Anfangswert)	[m],
RBEY(3,KBY)	: Länge der Strecke (ohne Verschuß)	[m],
RBEY(4,KBY)	: Höhe des Verschlusses (Anfangswert)	[m],
RBEY(5,KBY)	: Breite des Verschlusses (Anfangswert)	[m],
RBEY(6,KBY)	: Länge des Verschlusses	[m].

SUBROS : Einfaches Modell des Salzstocks für ein Subrosionsszenario:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Salzmasse	[kg],
RBEY(2,KBY)	: Salzkonzentration	[kg/l].

VQUELLE2 : Einfaches Segmentmodell für ein durchströmtes Grubengebäude:

Angaben sind erforderlich für:

RBEY(1,KBY), RBEY(2,KBY), RBEY(3,KBY),

RBEY(1,KBY)	: Anfangslaugenvolumen	[m ³],
RBEY(2,KBY)	: Masse des sorbierenden Materials	[kg],
RBEY(3,KBY)	: kontaminierter Lösungsstrom	[m ³ /a].

8.2.2.5 Angaben über Abfallmixturen

Die Zusammenstellung einer Abfallmischung ermöglicht es, eine Vielzahl unterschiedlicher Abfälle in einem Einlagerungsort in Gebinde zusammenzufassen, die dasselbe Modell zur Mobilisierung der Nuklide benutzen. Hierdurch kann die Anzahl der Gebinde in der Struktur reduziert werden.

Die AMDA-Datei enthält Daten, die angeben, welche und wieviele verschiedene Abfälle zu jeweils einer Abfallmischung zusammengefaßt werden. Alle Abfallmixturen erhalten eigene Namen, die sich von den in der ABDA-Datei bereits angegebenen Namen der Einzelabfälle unterscheiden müssen.

Im einzelnen müssen folgende Angaben gemacht werden:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Datei:

Kommentar	Format *.
-----------	-----------

2. Zeile: Allgemeine Daten der ersten Abfallmischung:

CNMX(1), RMGX(1), IMAX(1)	Format A10, F10.0, I5
---------------------------	-----------------------

mit folgender Bedeutung:

CNMX(1) : Name der 1. Abfallmischung,

RMGX(1) : Gesamtzahl der Gebinde in der Mischung,

IMAX(1) : Anzahl verschiedener Einzelabfälle in der Mischung.

Die Gesamtzahl der Gebinde RMGX(1) (hier im F-Format) muß mit der zugehörigen Anzahl der Behälter IBKY(3,KBY) (im I-Format) in der BADA-Datei übereinstimmen. Hierbei ist KBY die Nummer des Abfallgebindes in der BADA-Datei, bei dem CNMX(1) als Name der Abfallmischung auftritt.

Die Anzahl IMAX(1) darf den Wert LMEX, der in der Parameterdatei angegeben wird, nicht überschreiten.

3. Zeile: Weitere Daten zur 1. Abfallmischung, welche die Zusammensetzung der Mischung definieren:

für jeden der IMAX(1) Einzelabfälle in der Mischung

CMEX(1,1), RMEX(1,1), ...,
CMEX(IMAX(1),1), RMEX(IMAX(1),1) Format 10X,3(A10,F10.0)

mit folgender Bedeutung:

CMEX(KMEX,1) : Namen der Einzelabfälle,

RMEX(KMEX,1) : jeweilige Anzahl der Einzelabfälle mit dem Namen
CMEX(KMEX,1).

Falls IMAX(1) > 3 ist,
entsprechend viele Fortsetzungszeilen Format 10X,3(A10,F10.0).

Die Summe der Anzahlen RMEX(KMEX,1) von KMEX = 1 bis IMAX(1) muß mit der
Gesamtzahl RMGX(1) übereinstimmen.

4. und folgende Zeilen bis EOF (End of File) für jede weitere Abfallmischung:

Abfallmischungsdaten entsprechend den in den Zeilen 2 und 3 angegebenen Bedeutungen
im vorgeschriebenen Format.

Die Gesamtzahl NMX der Abfallmischungen wird durch Abzählen aller benötigten, d.h. aller in der
zugehörigen BADA-Datei unter CBNY(3,KBY) angegebenen Abfallmischungen ermittelt. Die maxi-
mal zulässige Anzahl der Abfallmischungen wird durch die Bedingung $NMX \leq LMX$ festgelegt, wobei
der Parameter LMX in der Parameterdatei angegeben wird.

Nicht benötigte Abfallmischungen können angegeben werden. Sie werden bei der Ermittlung der
Gesamtzahl NMX nicht mitgezählt. Es erscheint in der Ausgabedatei mit der Erweiterung out die
Meldung "Abfallmischung 'Name der Mischung' ist nicht erforderlich".

8.2.2.6 Die Abfalldaten

Die ABDA-Datei mit den Abfalldaten enthält Angaben zum Aktivitätsinventar für alle in der nuklid-
spezifischen Datenbasis vorkommenden Nuklide eines Abfallgebundes. Hinzu kommen weitere
Daten, die für ein Abfallgebunde charakteristisch sind. Hierzu gehören die Matrixmasse (Glas,
Zement oder Bitumen), die Behältermasse bzw. die Metallmasse, das Gebindevolumen, das
konvergierende und evtl. das nicht konvergierende Hohlraumvolumen im Behälter. Weiterhin
wird die abfallspezifische Zwischenlagerzeit angegeben.

Aktivitätsinventare, Abfallgebindedaten und Zwischenlagerzeit bilden jeweils einen Satz von Da-
ten, der für jeden eingelagerten Einzelabfall und für alle Abfälle, die zu Mischungen zusamme-
gestellt werden, angegeben werden muß. Zusätzliche Datensätze für nicht berücksichtigte Abfälle
sind erlaubt. In diesen Fall wird eine Meldung "Einzelabfall 'Abfallname' ist nicht erforderlich" in
die Ausgabedatei mit der Erweiterung out geschrieben.

Die Zeilennumerierung der folgenden Beschreibung bezieht sich auf eine ABDA-Datei mit genau
5 Gebindedaten. Fortsetzungszeilen für die Aktivitätsinventare werden nicht numeriert.

10. Zeile: Zwischenlagerzeit:

RAZX

Format 10X, 1PE12.4.

11. Zeile: Genau NNZ Aktivitätsinventare RBIX für alle Nuklide in der nuklidspezifischen Datenbasis:

Name des Nuklids, Nukleonenzahl und Inventar, d.h.

CNX(1), INX(1), RBIX(1), ... CNX(NNZ), INX(NNZ), RBIX(NNZ)

Format 4(3X, A2, '-', 1X, 1PE10.3).

Angegeben wird das Aktivitätsinventar in Bq pro Gebinde zum Zeitpunkt der Herstellung. Bei einer vernachlässigten Zwischenlagerzeit ist dies der Zeitpunkt der Einlagerung. Die Reihenfolge der Nuklide ist beliebig.

12. Zeile: und folgende Zeilen bis EOF (End of File):

für jeden weiteren Abfallbindetyp einen Satz von Abfalldaten wie in den Zeilen 9 bis 10.

8.2.2.7 Die Temperaturdaten

Die TEDA-Datei enthält Tabellen mit Temperaturwerten an ausgewählten räumlichen und zeitlichen Stützstellen. Diese diskreten Temperaturwerte werden nicht im Rahmen des Programmpakets EMOS berechnet, sondern müssen mit geeigneten anderen Programmen ermittelt werden.

Bei Aufruf des Programmes TEMP4 in den Modellprogrammen für Abfallgebände und Segmente werden durch lineare Interpolation zwischen den zeitlichen Stützstellen Temperaturwerte zu beliebigen Zeitpunkten ermittelt. Diese Temperaturwerte werden an die Mobilisierungsmodelle, die Segmentmodelle und die Effekmodelle weitergereicht.

Die Temperaturdatei gliedert sich in zwei Teile. Der erste Teil enthält die Zeitpunkte, zu denen Temperaturdaten vorliegen. Hierbei beziehen sich alle Zeitangaben, abweichend von der in REPOS verwendeten Zeitskala, auf den Beginn der Betriebsphase. Der zweite Teil enthält für jeden räumlichen Stützpunkt einen Block mit Temperaturwerten zu jedem der obigen Zeitpunkte.

Die folgende Zeilennummerierung bezieht sich auf eine TEDA-Datei, in der keine Fortsetzungszeilen vorkommen. Bei i.a. erforderlichen Fortsetzungszeilen verschieben sich die Zeilennummern entsprechend.

Im einzelnen müssen folgende Angaben gemacht werden:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Temperaturdaten (z.B. Bezeichnung des Grubengebäudes):

Kommentar

Format A60.

2. Zeile: Aktuelle Anzahl der Zeitpunkte:

NTZY

Format I5.

Die maximal zulässige Anzahl der Zeitpunkte wird durch den Parameter LTZY in der Parameterdatei festgelegt.

3. Zeile: Genau NTZY Zeitpunkte [a], zu denen Temperaturwerte vorliegen:

RTZY(KTZY), KTZY = 1, ... ,NTZY

Format 5X, 6F10.2,

falls NTZY > 6 ist,

entsprechend viele Fortsetzungszeilen

Format 5X, 6F10.2.

4. Zeile: Kommentarzeile zur Beschreibung der räumlichen Stützstelle (z.B. Bezeichnung des Teilbereichs des Grubengebäudes):

Kommentar

Format A60.

5. Zeile: fortlaufende Nummer KTSY der räumlichen Stützstelle und genau NTZY Temperaturwerte RTTY [K]:

KTSY, RTTY(KTZY,1), KTZY = 1, ... ,NTZY

Format I5, 6F10.2,

falls NTZY > 6 ist,

entsprechend viele Fortsetzungszeilen

Format 5X, 6F10.2.

6. Zeile: und folgende Zeilen bis EOF (End of File):

für jede weitere räumliche Stützstelle KTSY, RTTY(KTZY,1), KTZY = 1, ... ,NTZY wie in Zeile 5 und den Fortsetzungszeilen.

Die aktuelle Anzahl der räumlichen Stützstellen NTSY wird beim Einlesen der Datenblöcke durch Abzählen (KTSY) festgestellt. Die maximal erlaubte Anzahl der räumlichen Stützstellen wird durch LTSY in der Parameterdatei festgelegt.

Die Auswahl der Temperaturdatensätze zur Berechnung der Temperaturverläufe für die einzelnen Abfallgebinde und Segmente mit Hilfe des Programms TEMP4 geschieht durch Angabe einer Nummer KTSY in der BADA-Datei (siehe Bedeutung von IBEY(6,KBY) bzw. IBEY(7,KBY) in der BADA-Dateibeschreibung, Kapitel 8.2.2.4). Die Berechnung eines Temperaturgradienten mit dem Programm TEMP4 wird gesteuert durch Angabe der Nummern KTSY von jeweils zwei Temperaturdatensätzen (siehe Bedeutung von IBEY(8,KBY) und IBEY(9,KBY) bzw. IBEY(10,KBY) und IBEY(11,KBY) in der BADA-Dateibeschreibung).

8.2.3 Beschreibung der Dateien mit Eingangsdaten für das Modul CHET

Die Eingabedaten für eine Transportrechnung sind in 3 Dateien zusammengestellt, deren jeweiliger vollständiger Dateiname in den Zeilen 40 bis 42 des Job-Input-Teilbereichs von CHET

angegeben werden. Die als CHET2-Variablen ausgewiesenen Parameter werden nicht für die Rechnung mit dem Modul CHET1 benötigt.

8.2.3.1 Beschreibung des Transportweges

Die DACH-Datei enthält die Parameter zur Unterteilung und Charakterisierung des Transportweges. Die Gesamtlänge des Transportweges sowie die vom Fluid benötigte Transportzeit durch das Modellgebiet werden mit Hilfe von Strömungsberechnungen ermittelt und vorgegeben.

Der Transportweg wird in Gebiete mit einheitlichem Material und konstantem Querschnitt unterteilt. Die Gebiete werden fortlaufend durchnummeriert und ihre Länge relativ zur Gesamtlänge des Modellgebietes angegeben. Es werden maximal LGC Gebiete eingelesen. Der Parameter LGC wird in der Parameterdatei eingegeben. Die letzte eingegebene Gebietsnummer entspricht der Gesamtzahl der Gebiete. Die Summe aller Gebietsanteile wird daraufhin überprüft, daß sie eins ergibt. Jedem Gebiet wird ein Querschnitt sowie eine Nummer zur Charakterisierung des Materials zugeordnet. Die einzelnen Materialdaten enthält die Datei MACH.

Der Volumenstrom \dot{V} wird in CHET als konstant in Zeit und Ort angenommen. Er ist dabei aufgrund der Beziehung 224 eindeutig durch die Transportzeit des Fluids sowie die gebiets- und materialspezifischen Größen des Querschnitts, der Länge und der Porosität definiert.

Für das Modul CHET2 werden in der MACH-Datei zusätzlich die Daten des Trichters, der zur Berücksichtigung der Querdispersion eingeführt wurde, angegeben. Desweiteren wird das Abbruchkriterium für die Iteration zwischen Sorption- und Transportberechnung festgelegt.

Im einzelnen sind folgende Angaben zu machen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Datei zur Beschreibung des Transportweges, Format A80
2. Zeile: RVXGES, RVTRANS, RVAA, RVAT, RVABC, Format 5E10.0

RVXGES	:	Länge des Modellgebietes	[m],
RVTRANS	:	Transportzeit des Fluids durch das Modellgebiet	[a].
RVAA	:	Anteil an der Querschnittsfläche des Quellblocks, in welcher der Schadstoff enthalten ist. Die damit verbundenen höheren Konzentrationen, werden bei der Sorptionsberechnung verwendet (CHET2).	
RVAT	:	Abstand (relativ zum Transportweg) vom Ort der Quelle, ab dem der Querschnitt für die Berechnung der Sorption gleich dem des Transportweges gesetzt wird. Dazwischen wird der Querschnitt linear interpoliert. (CHET2)	
RVABC	:	Faktor, der angibt, bei welcher relativen Änderung der Konzentration die Fixpunktiteration zwischen Sorptions- und Transportberechnung abgebrochen wird. (CHET2)	

3. Zeile: KGC, CGNAME(KGC), RGXREL(KGC), RGA(KGC), IGMC(KGC),
 Format I5, A30, 2E10.0, I5

KGC : fortlaufende Nummer KGC eines Gebietes mit einheitlichem materialgleichem Querschnitt,
 CGNAME : Bezeichnung des Gebietes,
 RGXREL : Anteil am Gesamtgebiet [-],
 RGA : Querschnitt des Gebietes [m²],
 IGMC : Zeilennummer in der Matrix der Deckgebirgsdaten in der MACH-Datei zur Zuordnung von materialspezifischen Daten.

4. Zeile: und folgende Zeilen bis EOF (End of File) für jedes weitere Gebiet eine Fortsetzungszeile, wie in Zeile 3.

8.2.3.2 Materialspezifische Daten

Die MACH-Datei enthält für verschiedene Materialien die deckgebirgsspezifische Daten. Jedes Material wird durch eine Nummer und eine Bezeichnung identifiziert. Die Materialdaten enthalten im einzelnen die Porosität, die Dispersionslänge, den Diffusionskoeffizient, die Gesteinsdichte sowie die Zuordnung von Rückhalteparametern. Als erstes wird dabei eine Spaltennummer definiert, in der in der ELCH-Datei der K_d -Wert (CHET1) abgelegt ist. Das Modul CHET2 verwendet diesen Wert zur Bestimmung der äußeren Zeitschrittweite. Zur Bestimmung der Sorptionsparameter wird in CHET2 für jedes Material eine weitere Zeile eingefügt. Diese Zeile enthält dann die Spaltennummern der ELCH-Datei, mit denen sowohl die Sorptionskonstanten als auch das Sorptionskonzept zugeordnet werden können.

Im einzelnen liegen die Daten in der Form vor:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der materialspezifischen Datei:

Kommentar Format A80.

2. Zeile: KMC, CMNAME(KMC), RMALPHAJ(KMC), RMDM(KMC), RMPOROS(KMC),
 RMRHO(KMC), IMEC(KMC),
 Format I5, A30, 4E10.0, I5

KMC : laufende Nummer. Ein Material wird mit dieser Nummer angesprochen,
 CMNAME : Bezeichnung des Materials,
 RMALPHAJ : Dispersionslänge [m],
 RMDM : molekulare Diffusionskonstante [m²/a],
 RMPOROS : Porosität,
 RMRHO : Gesteinsdichte [kg/m³],
 IMEC : Spaltennummer in der Matrix REC der ELCH-Datei zur Zuordnung von K_d -Werten.

3. Zeile: IMAKC, IMSC Format 2I5 (CHET2)

- IMAKC : Spaltennummer in der ELCH-Datei zur Zuordnung der beiden Sorptionskonstanten bei Verwendung nichtlinearer Sorption (Langmuir: K_L , κ ; Freundlich: k_1 , k_2). Die Konstanten stehen in Spalte IMAKC und IMAKC+1. (CHET2)
- IMSC : Konstante zur Zuordnung des Sorptionskonzeptes. Sie definiert die verwendete Sorptionsisotherme (K_d : -1; Freundlich: -2; Langmuir: -3). (CHET2)

4. Zeile: und folgende Zeilen: bis EOF (End of File) für jedes weitere Material weitere Fortsetzungszeilen, wie in den Zeilen 2 und 3.

Es werden maximal LMC Materialien eingelesen. Der Parameter LMC wird in der Parameterdatei eingegeben.

8.2.3.3 Elementspezifische Daten

Die ELCH-Datei enthält die elementsspezifischer Deckgebirgsdaten. Für das Modul CHET2 muß eine der Spalten die Festlegung des Sorptionskonzeptes enthalten. Ansonsten werden die zur Berechnung der Rückhaltung benötigten Sorptionsdaten für die zur Zeit implementierten Isothermen nach Henry, Freundlich und Langmuir notiert.

Die in der ELCH-Datei bestimmten Parameter werden in der Matrix REC abgespeichert. Jedem Element ist dabei eine Zeile innerhalb der Matrix zugeordnet, deren Spalten dann die zu diesem Element zugehörigen Daten enthalten.

Im einzelnen gliedert sich die ELCH-Datei in:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der elementsspezifischen Datei:
Format A80

2. Zeile: Aktuelle Anzahl der elementsspezifischen Daten pro Element:

NERC, Format I5

3. Zeile: Kurze Beschreibung des Inhalts der folgenden NERC Spalten der Matrix REC:

CENAMEC(KERC), KERC = 1,NERC, Format A60,

falls NERC > 1, entsprechend viele Fortsetzungszeilen, Format A60

4. Zeile: Elementname CEC(1) und NERC elementsspezifische Daten REC(1,KERC):

CEC(1), REC(1,1), ... , REC(1,NERC) Format 8X,A2,6E10.0,

falls NERC > 6, entsprechend viele Fortsetzungszeilen, Format 10X, 6E10.0

5. Zeile: und folgende Zeile bis EOF (End of File) für jedes weitere Element

CEC(NEC), REC(NEC,1), ... , REC(NEC,NERC) wie in Zeile 4.

Die Parameter LEC wird in der Parameterdatei eingegeben.

8.2.4 Dateien mit den Eingabedaten für das Modul Expos

8.2.4.1 Die elementspezifischen Daten für das Biosphärenmodul

Die ELEX-Datei mit den elementspezifischen Daten enthält für alle dosisrelevanten Nuklide die K_d -Werte an den Wasserentnahmestellen. Diese Größen werden zusammen mit den im Job-Input-File in den Zeilen 73 und 74 anzugebenden Porositäten und Gesteinsdichten der als Wasserentnahmestellen ausgewählten Zellen des Deckgebirges dazu benutzt, Rückhaltefaktoren (R_f -Werte) zu berechnen. Mit Hilfe dieser R_f -Werte können bei angenommenem Aktivitätsgleichgewicht Konzentrationen der in der Deckgebirgsrechnung nicht berücksichtigten kurzlebigen Radionuklide aus den Aktivitätskonzentrationen der Mutternuklide berechnet werden.

Die elementspezifischen Daten für das Biosphärenmodul EXPOS sind i.a. identisch mit den Daten der entsprechenden Zellen, die vom Deckgebirgsmodul CHET eingelesen werden. Diese Übereinstimmung ist jedoch nicht zwingend vorgeschrieben.

Die Charakter-Strings CEETEX in den Zeilen 3ff der folgenden Beschreibung sollen für jede der NREE Spalten angeben, um welches elementspezifische Datum (K_d -Wert) für welche Wasserentnahmestelle es sich jeweils handelt. Die elementspezifischen Datensätze werden im Job-Input-File in Zeile 67 durch Angabe der Spaltennummern IKDE = 1, ..., NREE der ELEX-Datei für jede vorgesehene Wasserentnahmestelle ausgewählt.

Die Zeilennummerierung bezieht sich auf eine ELEX-Datei, bei der keine Fortsetzungszeilen vorkommen. Bei zusätzlichen Fortsetzungszeilen (siehe Zeilen 3, 4 und folgende) verschieben sich die Zeilennummern entsprechend.

Im einzelnen hat die Datei folgenden Inhalt:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der elementspezifischen Datei:

Kommentar Format A80.

2. Zeile: Aktuelle Anzahl der elementspezifischen Daten pro Element:

NREE Format I5.

Die maximal zulässige Anzahl der elementspezifischen Datensätze wird durch den Parameter LREE in der Parameterdatei festgelegt.

3. Zeile: Kurze Beschreibung des Inhalts in den folgenden NREE Spalten der Matrix REE:

CEETEX(KREE), KREE=1, ... ,NREE Format A60,

falls NREE > 1, entsprechend viele Fortsetzungszeilen, Format A60.

4. Zeile: Elementname CEE(1) und NREE elementspezifische Daten (K_d -Werte [m^3/kg])
REE(1,KREE):

CEE(1), REE(1,1), ... , REE(1,NREE) Format 8X,A2, 6E10.0,

falls NREE > 6, entsprechend viele Fortsetzungszeilen Format 10X, 6E10.0.

5. Zeile: und folgende Zeilen bis EOF (End of File) für jedes weitere Element:

CEE(KEE), REE(KEE,1), ... , REE(KEE,NREE) wie in Zeile 4.

Die maximal erlaubte Anzahl der Elemente wird durch den Parameter LEE in der Parameterdatei festgelegt.

8.2.4.2 Die Dosisdaten

Die DOEX-Datei enthält für alle in der Biosphäre relevanten Nuklide Faktoren zur Berechnung von Individual- oder Kollektivdosen. Die im Einzelfall hiervon zu berücksichtigenden Nuklide werden mit Hilfe der Nuklidauswahl im Job-Input-File (Zeilen 63 bis 66, Teil F des Job-Input-Files) ausgewählt. Daten der nicht berücksichtigten Nuklide werden vom Programm nicht weiter verarbeitet. Daher können auch nicht dosisrelevante Nuklide in der DOEX-Datei aufgeführt werden. Die gesamte Anzahl darf den Wert LNZ aus der Parameterdatei nicht überschreiten.

Die Individualdosen werden durch Multiplikation mit den Dosiskonversionsfaktoren aus den Aktivitätskonzentrationen an den Wasserentnahmestellen bestimmt. Die Kollektivdosen können auf zweierlei Weise bestimmt werden, zum einen aus den Individualdosen, wenn die Anzahl der betroffenen Personen bekannt ist, zum anderen mit Hilfe der Dosis-Faktoren aus den Aktivitätsströmen am Ende des Ausbreitungsweges.

Im einzelnen werden in der DOEX-Datei folgende Angaben gemacht:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Beschreibung der Inhalts der Datei:

Kommentar Format *.

2. Zeile: Anzahl der unterschiedlichen Faktoren zur Dosisberechnung (Anzahl der Spalten mit Dosiskonversions- oder Dosisfaktoren):

NZAHL Format I5.

Die Anzahl wird durch den Dimensionierungsparameter LREE in der Parameterdatei auf $NZAHL \leq LREE$ beschränkt.

3. Zeile: Textliche Erläuterung der Faktoren zur Dosisberechnung:

Kommentar Format A40.

Falls NZAHL > 1 ist, folgen für jeden der weiteren Faktoren entsprechend viele Fortsetzungszeilen im gleichen Format.

4. Zeile: und folgende Zeilen bis EOF (End of File):

für jedes dosisrelevante Nuklid eine Zeile mit folgenden Angaben:

CEN(K), IEN(K), Format 4X, A2, 1X, I3,

RDKF(1,K) bis RDKF(NZAHL,K) Format 5E12.5

mit folgender Bedeutung:

CEN(K) : Elementsymbol des K-ten Nuklids,

IEN(K) : Nukleonenzahl des K-ten Nuklids,

RDKF(I,K) : Dosisfaktoren oder Dosiskonversionsfaktoren für Erwachsene oder Kleinkinder entsprechend der textlichen Erläuterung in Zeile 3ff.

Falls NZAHL > 5 ist, für jedes Nuklid entsprechend viele Fortsetzungszeilen mit

RDKF(5,K) bis RDKF(NZAHL,K) Format 10X, 5E12.5.

Die Einheit der Dosiskonversionsfaktoren ist (Sv/a)/(Bq/l), die der Dosisfaktoren Sv/Bq.

Von den NZAHL möglichen Faktoren werden im Programm EXPOS maximal 4 benutzt, die mit Hilfe der Parameter IDK(1) bis IDK(4) ausgewählt werden. Werden die Parameter IDK(1), IDK(2), IDK(3) oder IDK(4) im Job-Input-File, Zeile 71, auf $\neq 0$ gesetzt, so greift das Programm auf die Größen RDFK(IDK(1),K), RDFK(IDK(2),K), RDFK(IDK(3),K) bzw. RDFK(IDK(4),K) zu.

8.2.5 Die Statistik-Daten für eine probabilistische Rechnung

Die STDA-Datei mit den Statistik-Daten enthält Informationen über die Parameter einer EMOS-Rechnung, die als Zufallsvariablen behandelt werden sollen. Für jeden dieser Parameter werden in einer oder mehreren Zeilen Angaben zu seiner Wahrscheinlichkeitsverteilung gemacht. Am Ende der Datei nach der Kennung *****KORR***** können Angaben zu evtl. bestehenden Korrelationen zwischen einzelnen Zufallsvariablen angefügt werden. Während einer probabilistischen Rechnung wird eine Kopie dieser Datei in das Verzeichnis mit den Rechenergebnissen abgelegt. Diese Kopie erhält die Erweiterung sda und wird für den Statistik-Postprozessor Emos-Statist benötigt.

Die erste Zeile der Datei ist für einen Kommentar zur Beschreibung der Datei oder ihrer Anwendung vorgesehen. Diese Zeile wird nicht in das Programm EMOS eingelesen; ihr Inhalt ist also für das Programm ohne Bedeutung. Nach der Kommentarzeile folgen mindestens 14 Zeilen, die ausschließlich die Namen der z.Z. 14 Variablen oder Felder aus dem Programm EMOS enthal-

ten, die als Zufallsvariablen vorgesehen sind. Nach einer Zeile mit dem Variablen- bzw. Feldnamen werden eine oder mehrere Fortsetzungszeilen mit Angaben über die statistische Verteilung der betreffenden Größe eingefügt (s.u.). Fehlen diese Fortsetzungszeilen, so wird die betreffende Variable in dem Rechenlauf, für den die Datei verwendet wird, nicht als Zufallsvariable behandelt.

Die zur Zeit vorgesehenen Zufallsvariablen sind:

TL	: der Zeitpunkt eines Zutritts von Wässern in ein Grubengebäude,
TZ	: die Dauer der globalen Zwischenlagerung,
RBEY	: die segment- und gebindespezifischen Eingangsdaten,
RBTY	: die segment- und gebindespezifischen Zeitpunkte,
RGY	: die globalen Segment- und Abfallgebindedaten,
REY	: die elementspezifischen Daten,
RNY	: die nuklidspezifischen Daten,
REC	: die elementspezifischen Daten für das Deckgebirge (K_d -Werte),
RVXGES	: die Länge des Modellgebietes für das Deckgebirge,
RVTRANS	: die Fluidlaufzeit durch das Deckgebirge vom Eintrittspunkt bis zum Übergabepunkt,
RVVDM	: der Variationsfaktor für alle Diffusionskoeffizienten im Deckgebirge,
RVVALPHA	: der Variationsfaktor für alle Dispersionslängen im Deckgebirge,
RVVDUENN	: der Variationsfaktor für die Verdünnung im Deckgebirge,
RNE	: die nuklidspezifischen Daten in EXPOS.

Zusätzlich können im ersten Teil der Datei, d.h. bis zum Beginn der Angaben zur Korrelation, an beliebigen Stellen Kommentarzeilen eingefügt werden. Diese Zeilen müssen mit der Kennung 'KOM: ' (im Format A10, linksbündig) beginnen und enthalten eine Beschreibung der Parameter, zu denen in den jeweils folgenden Zeilen Angaben gemacht werden. Der Text nach der Kennung wird für den Statistik-Postprozessor eingelesen (Format A50) und zur Beschriftung der Abbildungen verwendet. Daher sollte zu jeder Variablen eine Kommentarzeile eingegeben werden.

Im zweiten Teil der Statistik-Datei können nach der Kennung ***KORR*** Angaben zur Korrelation unter den Zufallsvariablen angeschlossen werden.

Bei der Numerierung der im folgenden beschriebenen Zeilen sind Fortsetzungszeilen und Kommentarzeilen nicht mitgezählt.

Im einzelnen hat die Datei folgenden Inhalt:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung der Statistik-Datei:

Kommentar	Format *
-----------	----------

2. Zeile: Variablenname der ersten vorgesehenen Zufallsvariablen:

TL	Format A10 rechtsbündig.
----	--------------------------

Soll diese Größe als Zufallsvariable behandelt werden, so folgt mindestens eine Fortsetzungszeile mit folgenden Angaben zur Wahrscheinlichkeitsverteilung der Variablen:

IVPS(1,I),IVPS(2,I),IVTS(I), Format A10, 3I5,

RVCS(1,I), ... ,RVCS(4,I) Format 4E10.3.

Hierbei zählt I die Zufallsvariablen, die zu dem betreffenden Variablennamen gehören, d.h. bei Skalaren ist I=1, bei Feldern gibt I die Anzahl der Komponenten an, die als Zufallsvariablen behandelt werden.

Die ersten beiden Integer-Werte IVPS(1,I) und IVPS(2,I) beschreiben die Position des Parameters in dem zugehörigen Feld. Falls das Feld eindimensional ist, wird IVPS(2,I) = 0 gesetzt; falls es sich um eine skalare Größe handelt, werden beide Integer-Werte auf 0 gesetzt.

Die dritte Integerzahl IVTS(I) kennzeichnet den Verteilungstyp der Zufallsvariablen. Dabei entsprechen die Zahlen den folgenden Verteilungstypen:

- 1 : Beta-Verteilung,
- 2 : Normal-Verteilung,
- 3 : Lognormal-Verteilung (Logarithmen zur Basis e),
- 4 : Gleichförmige Verteilung,
- 5 : Logarithmisch gleichförmige Verteilung,
- 6 : Histogramm-Verteilung,
- 7 : Histogramm-Verteilung auf logarithmischer Basis (zur Basis 10),
- 8 : Dreiecks-Verteilung.

Die bis zu vier folgenden REAL-Zahlen legen die Verteilung numerisch fest. Ausnahmen sind die Verteilungstypen 6 und 7, bei denen zusätzliche Eingabezeilen erforderlich sind. Die Bedeutung der REAL-Zahlen ist bei den verschiedenen Verteilungstypen unterschiedlich und wird im folgenden erläutert. Eine detaillierte Beschreibung ist in [9] gegeben.

Bei der Beta-Verteilung (1) sind 4 REAL-Zahlen anzugeben. Die ersten beiden sind die Intervallgrenzen der Verteilung, während die zweiten beiden die Formparameter p und q der Verteilung sind.

Für Verteilungstypen 2 bis 5 sind jeweils zwei REAL-Zahlen anzugeben. Bei Verteilungstyp 2 bzw. 3 sind es die 0,001- und 0.999-Quantile der Normal- bzw. Lognormalverteilung. Bei den Verteilungstypen 4 und 5 sind dies die Intervallgrenzen der gleichförmigen bzw. logarithmisch gleichförmigen Verteilung.

Für die Verteilungstypen 6 und 7 ist lediglich eine Zahl anzugeben, und zwar die Anzahl NHS(I) der Intervalle, aus denen das Histogramm besteht. Diese Integerzahl ist als REAL-Zahl einzugeben, um formale Gleichheit mit den anderen Verteilungstypen herzustellen. Für die Verteilungstypen 6 und 7 sind pro Variable zwei weitere Zeilen (Zusatzzeilen) mit folgendem Aussehen einzugeben:

1. Zusatzzeile:

IVHS(1,I), ... , IVHS(NHS(I),I)

Format 10X, 7I10.

Die erste Zusatzzeile enthält die absoluten Häufigkeiten der Intervalle, aus denen das Histogramm besteht. Die Summe der Angaben in dieser Zeile muß der Anzahl der beabsichtigten Simulationen entsprechen.

2. Zusatzzeile:

RVHS(1,I), ..., RVHS(NHS(I)+1,I)

Format 10X, 7E10.0.

Die zweite Zeile enthält die Grenzen der Intervalle des Histogramms.

Bei der Dreiecksverteilung (8) sind 3 REAL-Zahlen anzugeben. Die erste und die dritte Angabe sind die Intervallgrenzen der Verteilung, während die zweite Angabe die x-Koordinate der Spitze des Dreiecks ist.

3. Zeile: und folgende Zeilen bis zur Kennung *****KORR*****:

für jede weitere vorgesehene Zufallsvariable Angaben wie in Zeile 2.

Der erste Teil der Statistikdatei muß mit der Kennung *****KORR***** abgeschlossen werden. Enthält eine Zeile außer der ersten weder einen der oben angegebenen Variablennamen noch die Kennung 'KOM: ' oder die Kennung *****KORR*****, so erfolgt bei Einlesen der Datei ein Programmabbruch.

Die Angaben zur Korrelation unter den Zufallsvariablen folgen in den Zeilen nach der Kennung *****KORR*****. Die Anzahl der Benutzervorgaben zur Korrelation ist durch den Parameter ISES(3) festgelegt, der im Job-Input-File in der Zeile 80 angegeben wird. Ist ISES(3) > 0 so müssen entsprechend viele Angaben erfolgen.

1. und folgende Zeilen nach der Kennung *****KORR*****:

IVKS(1,1),IVKS(2,1), RVKS(1), ... , IVKS(1,ISES(3)),IVKS(2,ISES(3)),

RVKS(ISES(3))

Format10X3(2I5,E10.0).

Dabei bezeichnen die beiden Integerangaben die Nummern der Zufallsvariablen, zwischen denen eine Korrelation besteht, und RVKS(I) den Korrelationskoeffizienten. Ist ISES(3) > 3, so folgen entsprechend viele Fortsetzungszeilen im gleichen Format.

Wurden Angaben über Korrelationen angefügt, so muß die Datei mit der Kennung ********* abgeschlossen werden, andernfalls erfolgt bei Einlesen der Datei ein Programmabbruch.

8.2.6 Die Daten zu den abhängigen Variablen einer Statistikrechnung

Die STAV-Datei enthält alle Angaben, die für die Zuweisung von Werten an abhängige Variable notwendig sind. In der vorliegenden Version werden nur abhängige Variable aus den Matrizen RBEY, REY und REC verarbeitet.

Die Reihenfolge der Kennwörter in der Datei ist beliebig. Es werden so lange Kennwörter gelesen, bis das Ende der Datei erreicht ist. Zeilen mit der Kennung 'KOM: ' (im Format A10, linksbündig) werden als Kommentare überlesen und sind daher im folgenden nicht mit angegeben.

Aufbau der STAV-Datei im einzelnen:

1. Zeile: Kommentar zum Inhalt der Datei Format A80
2. Zeile: 1. Kennung ' REY' zur Kennzeichnung, daß im folgenden Angaben zu elementspezifischen Daten aus Repos eingegeben werden sollen, Format A10.
3. Zeile: 3 Nummern von Spalten aus der Matrix REY, aus denen die folgenden Angaben entnommen werden: 1.) Spalte, deren Werte in EMOS aktuell verwendet werden (zu Beginn = deterministische Werte), 2.) Spalte mit den unteren Grenzwerten, 3.) Spalte mit den oberen Grenzwerten, Format 3(I5).
Nach diesen Werten ist bis zum Ende der Zeile ein Kommentarstring erlaubt, dieser wird nicht eingelesen.
4. Zeile: Name des abhängigen Elements und Name des unabhängig variierten Elements, Format 2(A5) rechtsbündig.
5. Zeile: und ff bis zur Kennung *****: wie in Zeile 4 je eine Zeile für jedes abhängige Element, Format 2(A5).
6. Zeile: und folgende: wie Zeile 2 bis 5, falls die Kennung ' REY' noch einmal auftritt.
7. Zeile: 2. Kennung ' REC' zur Kennzeichnung, daß im folgenden Angaben zu elementspezifischen Daten aus Chet eingegeben werden sollen, Format A10.
8. Zeile: 3 Nummern von Spalten aus der Matrix REC, aus denen die folgenden Angaben entnommen werden: 1.) Spalte, deren Werte in EMOS aktuell verwendet werden (zu Beginn = deterministische Werte), 2.) Spalte mit den unteren Grenzwerten, 3.) Spalte mit den oberen Grenzwerten, Format 3(I5).
Nach diesen Werten ist bis zum Ende der Zeile ein Kommentarstring erlaubt, dieser wird nicht eingelesen.
9. Zeile: Name des abhängigen Elements und Name des unabhängig variierten Elements, Format 2(A5) rechtsbündig.
10. Zeile: und ff bis zur Kennung *****: wie in Zeile 9 je eine Zeile für jedes abhängige Element, Format 2(A5).

11. Zeile: und folgende: wie Zeile 7 bis 10, falls die Kennung ' REC' noch einmal auftritt.
12. Zeile: 3. Kennung ' RBEY' zur Kennzeichnung, daß im folgenden Angaben zu segment- und gebindespezifischen Daten aus Repos eingegeben werden sollen,
Format A10.
13. Zeile: Nummer der ersten Spalte von RBEY, Name des unabhängigen Segments oder Gebindes, Anzahl der abhängigen Segmente oder Gebinde, Format I5,A10,I5.
14. Zeile: Namen der abhängigen Segmente oder Gebinde. Falls mehr als 7 Namen einzugeben sind, entsprechend viele Fortsetzungszeilen, Format 10X,7(A10).
15. Zeile: und folgende bis zur Kennung *****: wie in den Zeilen 13 und 14 für die übrigen unabhängigen Variablen RBEY.

8.3 Die Dateien mit den Ergebnissen einer EMOS-Rechnung

8.3.1 Überblick über die Ergebnisdateien von EMOS

Im folgenden sind alle Dateien aufgeführt, die vom Programm EMOS in der Version 5 erzeugt und mit Ergebnissen eines Rechenlaufs beschrieben werden. Im Kapitel 8.3.2 wird der Inhalt der Untermenge von Dateien erläutert, die für die Erzeugung von Abbildungen und Tabellen mit Zeit- und Ortsverläufe von z.B. Strömen und Konzentrationen verwendet werden. Alle Dateien werden formatiert beschrieben, um eine problemlose Übergabe von einem Rechner auf einen anderen zu gewährleisten.

Die Auswertung der Ergebnisse und anschließende Darstellung in Abbildungen und Tabellen wird mit Hilfe der Postprozessoren EmosPlot und EmosPrint durchgeführt. Alle im folgenden Kapitel beschriebenen Dateien und deren Inhalte richten sich nach den Anforderungen der Bild-erzeugung mit EmosPlot. Jedoch werden einige dieser Dateien auch für die Druckausgabe von Zwischenergebnissen mit dem Postprozessor EmosPrint verwendet. In den Modulen REPOS, CHET und EXPOS wird jeweils zusätzlich eine spezielle Datei zur Erzeugung von Endtabellen mit dem Postprozessor EmosPrint erzeugt.

Die meisten Ergebnisse, wie kumulierte Freisetzung, Zeitpunkte des Erreichens von Löslichkeitsgrenzen, die Chronik der Segmente und Abfallgebände, Dosismaxima usw. werden wie bisher in Tabellenform in der Datei mit der Erweiterung out ausgegeben. Desgleichen werden Kontrollausgaben der Eingangsdaten, Kontrollausgaben der Inventare und Fehlermeldungen aus dem Hilfsprogramm HRSTOP ebenfalls in die out-Datei ausgegeben.

In den Ergebnisdateien einer probabilistischen Rechnung werden Kontrollinformationen zu den einzelnen Simulationen, die Dosisraten für jede Simulation und die Stichprobenmatrix abgelegt. Diese Dateien werden mit dem Postprozessor für die Statistikauswertung (EmosStatist) bearbeitet und in Kapitel 8.3.6 beschrieben.

Eine graphische Darstellung der zu den einzelnen Modulen von EMOS gehörenden Ein- und Ausgabedateien ist in der Abbildung 72 gegeben. Die Eingabedateien sind in Kapitel 8.2 ausführlich beschrieben. Die Ausgabedateien erhalten jeweils den Namen des Rechenlaufs und

Erweiterung	Inhaltsbeschreibung
rvs	Vorspann mit allgemeinen Daten: Namen der ausgewählten Segmente und Gebinde, in REPOS gerechnete Nuklide, Parameter zur Interpretation der folgenden REPOS-Ausgabedateien
rns	Nuklidaustragsströme aller REPOS-Nuklide für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Segment und weitere maximal 10 Segmente
rss	sonstige Ströme und Leitwerte für maximal 10 Segmente
rzv	sonstige zeitlich veränderliche Variablen für maximal 10 Segmente
rnd	aktuelles Nuklidinventar und maximal 9 segment- oder abfallspezifische Nuklidatensätze für alle REPOS-Nuklide für maximal 10 Segmente
rad	Zeitpunkte, Zeitschritte und Zeitschrittsteuergrößen
rok	Ortsangaben der Blöcke, Konzentrationen aller gerechneten Nuklide in allen Blöcken für maximal 9 Beobachtungszeitpunkte
ret	Endtabellen für die Bearbeitung mit EmosPrint
out	Kontrollausgaben der Eingangsdaten, Fehlermeldungen und Endtabellen

Tabelle 8: Ausgabedateien von REPOS.

Erweiterung	Inhaltsbeschreibung
cvs	Vorspann mit allgemeinen Daten: Namen der ausgewählten Beobachtungsstellen und Beobachtungszeitpunkte, Volumenstrom, in CHET gerechnete Nuklide, Steuerparameter für die folgenden CHET-Ausgabedateien
czk	Nuklidkonzentrationen aller CHET-Nuklide für die insgesamt maximal 11 Beobachtungsstellen für alle Zeitpunkte
cok	Ortsangaben der Blöcke, Nuklidkonzentrationen aller CHET-Nuklide für maximal 10 Beobachtungszeitpunkte für alle berechneten Orte des Ausbreitungspfad
cet	Endtabellen für die Bearbeitung mit EmosPrint
out	Kontrollausgaben der Eingangsdaten, Fehlermeldungen und Endtabellen

Tabelle 9: Die Ausgabedateien von CHET.

eine mit einem Punkt abgetrennte, aus 3 Buchstaben bestehende Erweiterung, die in etwa den Inhalt der Dateien benennt. Eine Übersicht des Inhalts der Ausgabedateien von REPOS ist in Tabelle 8 angegeben, Tabelle 9 enthält die Ausgabedateien von CHET, Tabelle 9 die von EXPOS und Tabelle 11 die Ausgabedateien des Statistikteils. Eine ausführliche Inhaltsbeschreibung der

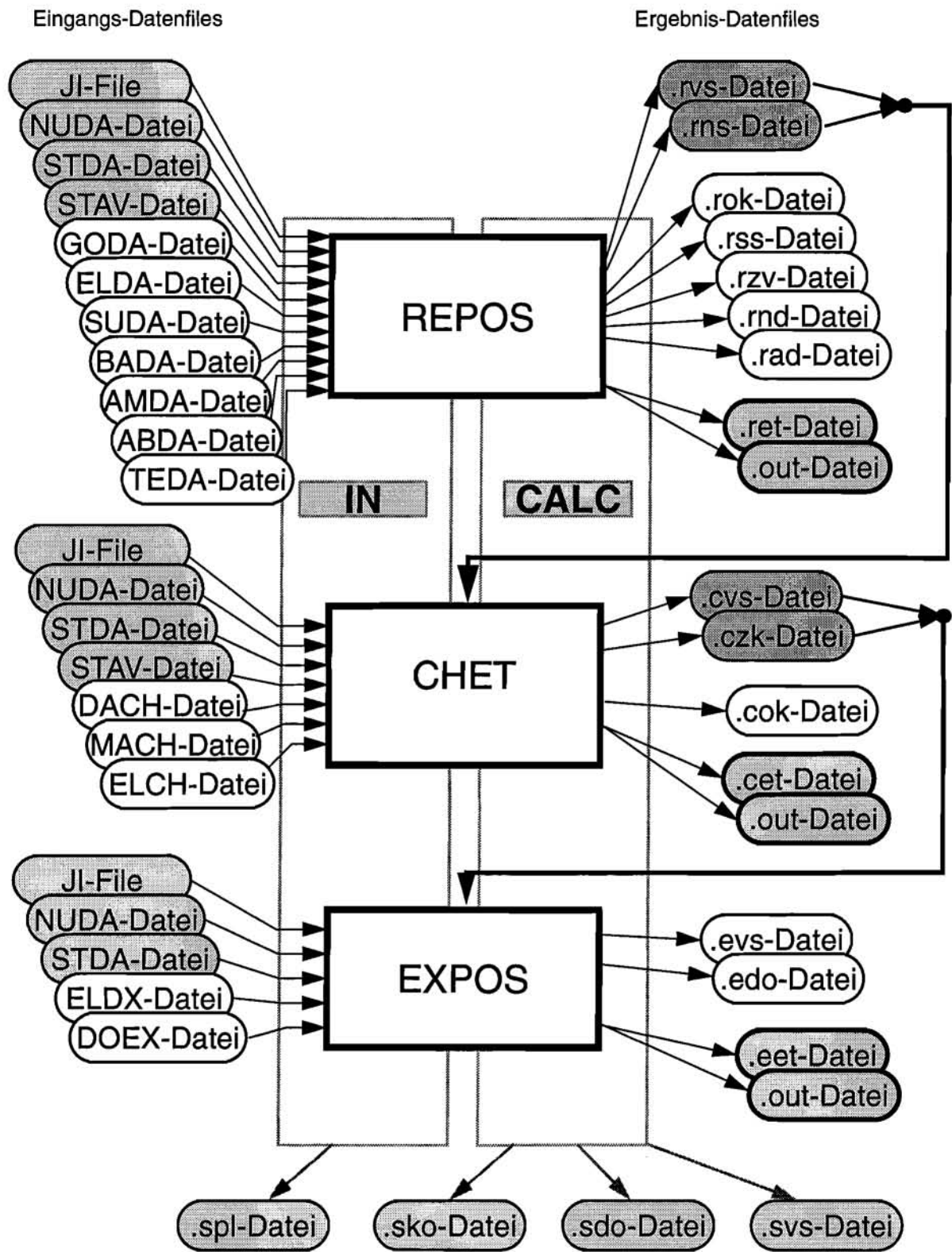


Abbildung 72: Ein- und Ausgabedateien von EMOS.

Erweiterung	Inhaltsbeschreibung
evs	allgemeine Daten: In EXPOS gerechnete Nuklide, Steuerparameter zur Interpretation der folgenden EXPOS-Ausgabedateien
edo	Dosisbelastung der Erwachsenen und anderen Personengruppen für alle EXPOS-Nuklide
eet	Endtabellen für die Bearbeitung mit EmosPrint
out	Kontrollausgaben der Eingangsdaten, Fehlermeldungen und Endtabellen

Tabelle 10: Die Ausgabedateien von EXPOS.

Erweiterung	Inhaltsbeschreibung
svs	Vorspann mit allgemeinen Daten: wie evs, jedoch zusätzliche Angaben zur Statistik, z.B. Anzahl der Simulationen.
sdo	wie edo, jedoch für jede gerechnete Simulation ein Datensatz
spl	Stichprobenmatrix mit den aktuellen Werten aller Parameter für jede Simulation.
sko	Kontrolldatei mit Angaben über die Rechenzeit und Angabe, ob eine Freisetzung für die Simulation erfolgte oder nicht.
out	Kontrollausgaben der Eingangsdaten, Fehlermeldungen und Endtabellen

Tabelle 11: Die Ausgabedateien für eine probabilistische Rechnung.

zur Plotterzeugung und teilweise zur Tabellenerzeugung verwendeten Dateien erfolgt im Kapitel 8.3.2.

Mit Hilfe der unterlegt dargestellten Ausgabedateien rvs und rns in Abbildung 72 wird die Übergabe der Rechenergebnisse von REPOS nach CHET und mit den Dateien cvs und czk die Übergabe der Rechenergebnisse von CHET nach EXPOS bewerkstelligt. Ferner sind die beiden Teile von EMOS (IN und CALC) angedeutet, in denen zum einen der Input verarbeitet und zum anderen die eigentliche Rechnung durchgeführt wird. Der Programmteil SAMPLE, in dem die Stichproben gezogen und verarbeitet werden, ist in der Abbildung nicht aufgeführt. Er ist zwischen den beiden Teilen IN und CALC angeordnet und erzeugt die oben erwähnte Stichprobendatei mit der Erweiterung spl.

8.3.2 Ausgabedateien zur Erzeugung von Abbildungen und Tabellen mit zeitabhängigen Zwischenergebnissen

Im folgenden ist der Inhalt der Dateien zusammengestellt, die der Plot- und Druckausgabe dienen. Eine wesentliche Änderung gegenüber den früheren Ausgabedateien in EMOS4 ist, daß jede Datei formatiert geschrieben wird und zusätzlich die Zeitpunkte TN enthält, zu denen die je-

weiligen Daten ausgegeben werden. Außerdem werden die Daten immer für alle im jeweiligen Modul gerechneten Nuklide ausgegeben. Eine spezielle NuklidAuswahl für die Datenausgabe entfällt somit. Zur Verringerung der Anzahl erzeugter Dateien werden außerdem Dateien mit vergleichbarem Inhalt zusammengefaßt. Diese neuen Dateien erhalten zur besseren Unterscheidung von den Ergebnisdateien von EMOS4 jeweils neue Namen.

Anstelle der Freisetzungsraten in der bisherigen fri-Datei wird in der Datei rns (REPOS-Nuklid-Ausgangsströme) für jedes in REPOS gerechnete Nuklid der Nuklidstrom RUNY aus dem als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählten Segment CNAZEF ausgegeben. Diese Größen und die zugehörigen Zeitpunkte TN werden vom Programm CHET aus der Datei rns gelesen. Der weitere Inhalt der rns-Datei besteht aus dem der bisherigen run-Datei, das die NuklidAusgangsströme der maximal 10 ausgewählten Segmente enthält. Selbstverständlich können die NuklidAusgangsströme des Segments CNAZEF wie die der anderen zur Ausgabe ausgewählten Segmente geplottet bzw. ausgedruckt werden. Die Ausgabe der Größen RUNY des Segments CNAZEF in die Datei rns erfolgt immer bei entsprechender Wahl des Schalters IOOR=1, auch wenn in der Job-Input-Datei keine weiteren Segmente bzw. Gebinde für die Ausgabe ausgewählt werden. Der bisherige Parameter ISO(1) entfällt somit.

Die bisherigen ruz- und rus-Dateien werden zur Ergebnisdatei rss (REPOS sonstige Ströme) zusammengefaßt. Ferner beinhaltet die Datei mit der Erweiterung rzv (REPOS zeitabhängige Variable) den Inhalt der früheren rud- und rbp-Dateien.

Die Ausgabe der Dateien rkn, rkz und rks mit den kumulierten Größen entfällt. Falls erforderlich, wird die Kumulierung im Postprozessor EmosPlot oder EmosPrint durchgeführt.

Die rbi-Datei mit den aktuellen Inventaren und die Ergebnisdateien mit den Erweiterungen rn1 bis rnL ($L \leq 5$) werden zu der neuen rnd-Datei (REPOS Nuklidatensätze) zusammengefaßt.

Die Datei mit der Erweiterung rad (REPOS allgemeine Zeitschritt-Steuerdaten), welche früher nur die Zeitpunkte TN enthielt, hat nun die gleiche Bedeutung wie die anderen Ergebnisdateien. Im Unterschied zu den anderen Plotdateien werden die Daten in der neuen rad-Datei hauptsächlich zur Erzeugung von Tabellen mit Zwischenergebnissen verwendet, wie sie bisher für jeden Zeitschritt in der Datei out als Kopf der Ergebnisausgabe (Zeitschrittsteuerung, Zeitschrittnummer und Länge, Zeitschrittsteuergrößen, usw.) erscheinen. Die gedruckte Ausgabe dieser Daten wird von dem Postprozessor EmosPrint übernommen.

Jede Ausgabe-Dateigruppe besteht aus einer Vorspanndatei rvs, cvs, evs oder svs zur Kennzeichnung des Inhalts der nachfolgenden Ergebnisdateien und einer oder mehreren Ergebnisdateien, wobei jede Datei sowohl die Daten der x-Achse einer Abbildung (Zeit oder Ort) als auch die der y-Achse (z.B. Ströme oder Konzentrationen) enthält.

Zur Begrenzung der Datenausgabe werden die Parameter IOOR für REPOS, IOOC für CHET und IOOE für EXPOS verwendet, welche die folgenden Ausgabe-Optionen steuern:

Option 1:

IOO* = 1: es werden nur die Übergabedateien mit den Erweiterungen rvs und rns, cvs und czk sowie evs und edo und im Fall einer deterministischen Rechnung in REPOS die out-Datei angelegt und beschrieben,

Option 2:

IOO* = 2: In REPOS werden zusätzlich die Dateien mit den Erweiterungen rss, rzv und rad angelegt und beschrieben, in CHET und EXPOS werden alle Ergebnisse nur in die Datei mit der Erweiterung out geschrieben,

Option 3:

IOO* = 3: In REPOS wird zusätzlich auch die Datei mit der Erweiterung rnd angelegt und beschrieben, in CHET und EXPOS werden alle Ergebnisse nur in die Dateien mit den Endungen cet und eet geschrieben.

Die Optionen 4 bis 7 gelten nur für CHET und EXPOS, da in REPOS die Druckausgabe über einen eigenen Schalter (IDOR) gesteuert wird.

Option 4:

IOO* = 4: In CHET und EXPOS werden die Ergebnisse in alle Dateien mit den Endungen out, cok, cet, edo und eet geschrieben, d.h. Ausgabe aller möglichen Optionen,

Option 5:

IOO* = 5: In CHET und EXPOS werden die Ergebnisse in alle Dateien mit den Endungen out, cok und edo geschrieben,

Option 6:

IOO* = 6: In CHET und EXPOS werden die Ergebnisse in alle Dateien mit den Endungen cok, cet, edo und eet geschrieben,

Option 7:

IOO* = 7: In CHET und EXPOS werden die Ergebnisse in alle Dateien mit den Endungen out, cet und eet geschrieben.

Jede der im folgenden beschriebenen Dateien enthält in den ersten beiden Zeilen die Größen

CTEXTI	Kommentarzeile aus dem JIF
CDATPL	Datum des Programmlaufs
CTIMPL	Zeit des Programmlaufs

zur Charakterisierung und Identifizierung zusammengehöriger Ausgabedateien eines Rechenlaufs.

8.3.3 Ausgabedateien von REPOS

Der weitere Inhalt der Ausgabedateien von REPOS ist im folgenden tabellarisch dargestellt. Die Informationen werden für alle in REPOS gerechneten Nuklide für alle Zeitpunkte TN ausgegeben.

8.3.3.1 Die Vorspanndatei für die REPOS-Ausgabe (.rvs)

Die Vorspanndatei der REPOS-Ausgabe hat die Erweiterung rvs und enthält die Steuerdaten zur Interpretation der Ausgabedateien. Sie enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Anzahl der inklusive des Wurzelsegments CNAZEF zur Ausgabe ausgewählten Segmente/Gebinde (= 1 + NOSR). Diese Anzahl ist auf ≤ 10 begrenzt. Format I10.
4. Zeile: Name des als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählten Segments CNAZEF und die Namen der NOSR ausgewählten Segmente/Gebinde, eventuell mit einer Fortsetzungszeile, Format 8(A10).
5. Zeile: Anzahl der in REPOS gerechneten Nuklide NNY, Format I10.
6. Zeile: Namen aller in REPOS gerechneten Nuklide (Elementname und Massenzahl) und die relative Adresse INY(2) des jeweiligen Tochternuklids. Eventuell erforderliche Fortsetzungszeilen, Format 8(2X,A2,1X,I3,I2).
7. Zeile: für das erste Segment/Gebinde: Anzahl ausgegebener sonstiger Ströme (Komponenten von RUZY und RUSY), Format I10.
8. Zeile: Für das erste Segment/Gebinde: Namen der in Zeile 7 angegebenen Anzahl sonstiger Ströme. Eventuell mit erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(A10).
9. Zeile: Für das erste Segment/Gebinde: Anzahl ausgegebener zeitabhängiger Variablen (Komponenten von RUDY und RBPY), Format I10.
10. Zeile: Für das erste Segment/Gebinde: Namen bzw. Positionsbezeichnungen der in Zeile 9 angegebenen Anzahl zeitabhängiger Variablen. Eventuell mit erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(A10).

Die Zeilen 7 bis 10 wiederholen sich für jedes ausgewählte Segment/Gebinde bis zum Ende der Datei, bzw. bis zum Kennwort, nach dem Angaben für Segmente mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration erfolgen.

11. Zeile: Kennwort %%ROK, Format A5 (linksbündig).
Dieses Kennwort leitet einen Bereich von Daten ein, der für die Weiterverarbeitung der Daten aus der rok-Datei mit EmosPlot benötigt wird, siehe Abschnitt 8.3.3.7.
12. Zeile: Anzahl der ortsabhängigen Segmente, Format I10.
13. Zeile: Namen der ortsabhängigen Segmente, Format 8A10.
Falls mehr als 8 Segmente ausgewählt wurden, 1 Fortsetzungszeile im gleichen Format.
14. Zeile: Blockzahlen der ortsabhängigen Segmente, Format 8(I10).
Falls mehr als 8 Segmente ausgewählt wurden, 1 Fortsetzungszeile im gleichen Format.
15. Zeile: Anzahl der Ausgabezeitpunkte, Format I10.
16. Zeile: Ausgabezeitpunkte, Format 8(1PE10.3).
Falls mehr als 8 Ausgabezeitpunkte ausgewählt wurden, erforderliche Fortsetzungszeilen im gleichen Format.

8.3.3.2 Die Datei mit den Nuklidausgangsströmen der Segmente (.rns)

Die Nuklidausgangsströme sind für alle in der Vorspanndatei (siehe Kapitel 8.3.3.1) angegebenen Radionuklide und Segmente in der Datei mit der Erweiterung rns abgelegt. Diese Datei enthält für jeden Zeitschritt die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Ende des aktuellen Zeitschritts TN, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Nuklidströme für alle in REPOS gerechneten Nuklide für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Wurzelsegment CNAZEF, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).
5. Zeile: Nuklidströme für alle in REPOS gerechneten Nuklide für alle neben dem Wurzelsegment in der Vorspanndatei angegebenen Segmente/Gebinde. Für jedes Segment/Gebinde eine Zeile, eventuell jeweils mit Fortsetzungszeilen. Format 8(1PE10.3)

Die Zeilen 3 bis 5 wiederholen sich für jeden in REPOS gerechneten Zeitpunkt bis zum Ende der Datei.

8.3.3.3 Die Datei mit den sonstigen Strömen aller ausgewählten Segmente und Gebinde (.rss)

Die Datei mit der Erweiterung rss enthält alle sonstigen Strömen (neben den Nuklidströmen) für alle in der Vorspanndatei angegebenen Segmente/Gebinde und Komponenten. Sie enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Ende des aktuellen Zeitschritts, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Zeitschrittrelevanter Strom (RUZY) und sonstige Ströme (RUSY) gemäß der in der Vorspanndatei (siehe Kapitel 8.3.3.1) in Zeile 7 angegebenen Anzahl für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Wurzelsegment CNAZEF, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).
5. Zeile: Zeitschrittrelevanter Strom (RUZY) und sonstige Ströme (RUSY) gemäß der in der Vorspanndatei (siehe Kapitel 8.3.3.1) in Zeile 7 angegebenen Anzahl für alle neben dem Wurzelsegment in der Vorspanndatei angegebenen Segmente/Gebinde. Für jedes Segment/Gebinde eine Zeile, eventuell jeweils mit Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).

Die Zeilen 3 bis 5 wiederholen sich für alle in REPOS gerechneten Zeitpunkte bis zum Ende der Datei.

8.3.3.4 Die Datei mit den weiteren zeitabhängigen Ausgabegrößen (.rzv)

Die Datei mit der Erweiterung rzv enthält alle sonstigen zeitabhängigen Variablen, wie beispielsweise segmentspezifische physikalische Parameter. Sie enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Ende des aktuellen Zeitschritts, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Zeitabhängige Variable (RUDY und RBPY) gemäß der in der Vorspanndatei (siehe Kapitel 8.3.3.1) in Zeile 9 angegebenen Anzahl für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Wurzelsegment CNAZEF, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).

5. Zeile: Zeitabhängige Variable (RUDY und RBPY) gemäß der in der Vorspanndatei (siehe Kapitel 8.3.3.1) in Zeile 9 angegebenen Anzahl für alle neben dem Wurzelsegment in der Vorspanndatei angegebenen Segmente/Gebinde. Für jedes Segment/Gebinde eine Zeile, eventuell jeweils mit Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).

Die Zeilen 3 bis 5 wiederholen sich für alle in REPOS gerechneten Zeitpunkte bis zum Ende der Datei.

8.3.3.5 Die Datei mit den aktuellen Nuklidinventaren und sonstigen Nuklid- daten (.rnd)

Das bei jedem Zeitschritt aktuelle Nuklidinventar und die maximal fünf sonstigen Nuklidatensätze werden in der Datei mit der Erweiterung rnd gespeichert. Die Datei enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Ende des aktuellen Zeitschritts, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Aktuelles Nuklidinventar (RBIY) aller in REPOS gerechneten Nuklide für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Wurzelsegment CNAZEF, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).
5. Zeile: und 4 folgende Zeilen: wie Zeile 4, aber jeweils einer von fünf weiteren Nuklidatensätzen (RBNY) aller in REPOS gerechneten Nuklide für das als Schnittstelle zum Deckgebirge ausgewählte Wurzelsegment CNAZEF, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).
6. Zeile: und folgende Zeilen: wie bei Zeilen 4 und 5 beschrieben das aktuelle Nuklidinventar (RBIY) und fünf weitere Nuklidatensätze (RBNY) für alle neben dem Wurzelsegment in der Vorspanndatei angegebenen Segmente/Gebinde. Für jedes Segment/Gebinde 6 Datenblöcke bestehend aus dem aktuellen Nuklidinventar und den fünf weiteren Nuklidatensätzen jeweils für alle in REPOS gerechneten Nuklide, Format 8(1PE10.3).

Die Zeilen 3 bis 6 wiederholen sich für alle in REPOS gerechneten Zeitpunkte bis zum Ende der Datei.

8.3.3.6 Die Datei mit den Steuergrößen für die Zeitschrittweite (.rad)

Die Datei mit der Erweiterung rad enthält die Steuergrößen, welche die Zeitschrittweite beeinflussen. Sie kann nicht für eine Plotausgabe verwendet werden, sondern dient der Erstellung von Tabellen mit Hilfe des Postprozessors EmosPrint. Die Datei enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Ende des aktuellen Zeitschritts, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Nummer des aktuellen Zeitschritts, aktuelle Zeitschrittweite und relative Stromänderung (EPS) zur Schrittweitensteuerung, Format I10, 2(1PE10.3).
5. Zeile: Angabe, ob die Steuerung über EPS erfolgt ist oder nicht, Name des Segments oder Gebindes, das EPS gesetzt hat, Name des Effekts, der EPS gesetzt hat, Nummer des Stroms, bzw. Nuklids, das EPS gesetzt hat, Maximalwert der aktuellen Zeitschrittweite, entspricht DTM zum Drucken, Angabe, ob die Steuerung über DTM erfolgt ist oder nicht, Name des Segments oder Abfallgebindes, das DTM gesetzt hat, entspricht CBDTM zum Drucken, Name des Effekts, der DTM gesetzt hat, entspricht CEDTM zum Drucken, Format 3(A10),I10,1PE10.3,3(A10)
6. Zeile: Segment- und gebindespezifisch festgelegter Zeitpunkt, entspricht TNE zum Drucken, Angabe, ob die Steuerung über TNE erfolgt ist oder nicht, Name des Segments oder Abfallgebindes, das TNE gesetzt hat, entspricht CBTNE zum Drucken, Name des Effekts, der TNE gesetzt hat, entspricht CETNE zum Drucken, segment- und gebindespezifisch festgelegter Zeitpunkt = TNV zum Drucken, Angabe, ob die Steuerung über TNV erfolgt ist oder nicht, Name des Segments oder Abfallgebindes, das TNV gesetzt hat, entspricht CBTNV zum Drucken, Name des Effekts, der TNV gesetzt hat, entspricht CETNV zum Drucken, Format 2(1PE10.3, 3(A10)).

Die Zeilen 3 bis 6 werden für jeden in REPOS gerechneten Zeitpunkt wiederholt bis zum Ende der Datei.

8.3.3.7 Die Datei mit den Konzentrationsprofilen in Segmenten mit ortsabhängiger Radionuklidkonzentration (.rok)

Die Nuklidinventare aller Blöcke der ortsabhängigen Segmente werden, gemeinsam mit den zugehörigen Ortsangaben, für maximal neun Beobachtungszeitpunkte in der Datei mit der Erweiterung rok abgelegt. Diese Datei besitzt folgende Struktur:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufs. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.

- | | |
|--|--------------------|
| 2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, | Format 2(A10). |
| 3. Zeile: 1. Ausgabezeitpunkt, | Format 1PE10.3. |
| 4. Zeile: Ortskoordinate des Mittelpunkts vom 1. Block des 1. ortsabhängigen Segments, bezogen auf den Segmentanfang, | Format 1PE10.3. |
| 5. Zeile: Konzentrationen aller gerechneten Nuklide im 1. Block des 1. ortsabhängigen Segments,
Falls mehr als 8 Radionuklide ausgewählt wurden, erforderliche Fortsetzungszeilen im gleichen Format. | Format 8(1PE10.3). |
- Für alle weiteren Blöcke des 1. ortsabhängigen Segments werden die Zeilen 4 und 5 wiederholt, incl. erforderlicher Fortsetzungszeilen.
6. Zeile: und folgende: Wiederholung der letzten beiden Zeilen für alle ortsabhängigen Segmente. (Ortskoordinate, Konzentrationen).

Die Zeilen 3 bis 5 wiederholen sich für alle weiteren Ausgabezeitpunkte bis zum Ende der Datei.

8.3.4 Ausgabedateien von CHET

Die Ausgabe von CHET erfolgt in zwei Ausgabedateien mit einer gemeinsamen Vorspanndatei cvs. Die Ausgabedatei mit der Erweiterung czk gibt die Zeitabhängigkeit der Konzentrationen an der für die Datenübergabe an EXPOS ausgewählten Beobachtungsstelle und an maximal 10 weiteren Beobachtungsstellen wieder. Die Datei mit der Erweiterung cok enthält für maximal 10 ausgewählte Zeitpunkte die Ortsabhängigkeit der Konzentrationen.

Die Konzentrationen werden für alle in CHET gerechneten Nuklide ausgegeben. Im Falle der Zeitabhängigkeit werden die Ausgabezeitpunkte herausgeschrieben, die durch die entsprechenden Parameter im JIF definiert sind. Dabei wird auf die Beobachtungsstellen interpoliert. Bei der Ausgabe der Ortsabhängigkeit werden die Konzentrationen an allen Blockmittelpunkten interpoliert auf die Beobachtungszeitpunkte ausgegeben.

Die zur Berechnung der Kollektivdosis benötigten Ströme werden in EXPOS aus den Konzentrationen und dem Volumenstrom berechnet.

8.3.4.1 Die Vorspanndatei für die CHET-Ausgabe (.cvs)

Die Vorspanndatei der CHET-Ausgabe hat die Erweiterung cvs und enthält die Steuerdaten zur Interpretation der Ausgabedateien. Sie enthält im einzelnen die folgenden Größen:

- | | |
|--|-------------|
| 1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, | Format A80. |
|--|-------------|

2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Anzahl der inklusive der Übergabestelle zu EXPOS ausgewählten Beobachtungsstellen. Diese Anzahl ist auf 11 begrenzt, Format I10.
4. Zeile: Ort der Übergabestelle zu EXPOS und Orte der weiteren Beobachtungsstellen, eventuell mit einer Fortsetzungszeile, Format 8(1PE10.3).
5. Zeile: Anzahl der ausgewählten Beobachtungszeitpunkte. Diese Anzahl ist auf 10 begrenzt, Format I10.
6. Zeile: Beobachtungszeitpunkte, Format 8(1PE10.3).
7. Zeile: Anzahl der in CHET gerechneten Nuklide, Format I10.
8. Zeile: Namen aller in CHET gerechneten Nuklide (Elementname und Massenzahl) und die relative Adresse des jeweiligen Tochternuklids. Eventuell erforderliche Fortsetzungszeilen, Format 8(2X,A2,1X,I3,I2).

8.3.4.2 Die Datei mit der Zeitabhängigkeit der Nuklidkonzentration (.czk)

Die czk-Datei enthält nach den Kommentarzeilen und dem Volumenstrom, der durch das Modellgebiet fließt, für jeden Ausgabezeitpunkt folgende Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Volumenstrom durch das Ausbreitungsgebiet, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Ausgabezeitpunkt, für den die Nuklidkonzentration gilt, Format 1PE10.3.
5. Zeile: Nuklidkonzentrationen für alle Nuklide an der Übergabestelle zu EXPOS und den weiteren Beobachtungsstellen, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen. Format 8(1PE10.3).

Die Zeilen 4 bis 5 wiederholen sich für jeden Ausgabezeitpunkt bis zum Ende der Datei. Die Ausgabezeitpunkte werden durch die Parameter RTANF, RTEND und ITDEK im JIF festgelegt.

8.3.4.3 Die Datei mit der Ortsabhängigkeit der Nuklidkonzentration (.cok)

Die Datei mit der Erweiterung cok enthält nach den Kommentarzeilen für jeden Beobachtungszeitpunkt folgende Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Absolute Ortsangabe für alle Blockmittelpunkte, Format 8(1PE10.3).
4. Zeile: Nuklidkonzentrationen für alle Nuklide und alle Zeitpunkte an den Blockmittelpunkten, interpoliert auf die entsprechenden Beobachtungszeitpunkte, eventuell mit den erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).

Die Zeilen 3 bis 4 wiederholen sich für jeden Beobachtungszeitpunkt bis zum Ende der Datei.

8.3.5 Ausgabedateien von EXPOS

Aus den Aktivitätskonzentrationen in der als Schnittstelle zur Biosphäre ausgewählten Beobachtungsstelle werden die Dosisbelastungen für mehrere auszuwählende Personengruppen berechnet. Diese Dosisbelastungen werden für alle in EXPOS gerechneten Zeitpunkte gemeinsam in der Datei mit der Erweiterung `edo` abgelegt. Die Ausgabe aus dem Modul EXPOS besteht damit nur aus der Vorspanndatei und der Datei mit den Dosisbelastungen. Eventuell berechnete Kollektivdosen werden in die Datei mit der Erweiterung `out` geschrieben.

8.3.5.1 Die Vorspanndatei für die EXPOS-Ausgabe (.evs)

Die Vorspanndatei der EXPOS-Ausgabe hat die Erweiterung `evs` und enthält die Steuerdaten zur Interpretation der Ausgabedateien. Sie enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Anzahl der zur Ausgabe ausgewählten Personengruppen Format I10.
4. Zeile: Namen der ausgewählten Personengruppen, Format 8(A10).
5. Zeile: Anzahl der in EXPOS gerechneten Nuklide NNE, Format I10.
6. Zeile: Namen aller in EXPOS gerechneten Nuklide (Elementname und Massenzahl) mit relativer Adresse INTE des jeweiligen Tochternuklids und Namen der Summendosis und der symbolischen Nuklide mit Angabe der Anzahl Nuklide, aus denen sich die Summen jeweils zusammensetzen. Die symbolischen Nuklide werden mit dem Namen des ersten Nuklids in der Kette bezeichnet mit vorangestelltem '+'-Zeichen. Eventuell erforderliche Fortsetzungszeilen, Format 8(1X,A1,A2,1X,I3,I2).

8.3.5.2 Die Ausgabedatei mit den Dosisraten (.edo)

In der Datei mit der Erweiterung edo sind die Dosisbelastungen aller in EXPOS ausgewählten Personengruppen gespeichert. Die Datei enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Ende des aktuellen Zeitschritts, Format 1PE10.3.
4. Zeile: Dosisbelastung für die erste in Zeile 3 der Vorspanndatei ausgewählte Personengruppe. Dosiswerte aller Radionuklide und aller symbolischen Nuklide mit eventuell erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).
5. Zeile: und folgende: Dosisbelastung für die n-te in Zeile 3 der Vorspanndatei ausgewählte Personengruppe. Dosiswerte aller Radionuklide und aller symbolischen Nuklide mit eventuell erforderlichen Fortsetzungszeilen, Format 8(1PE10.3).

Die Zeilen 3 bis 5 werden für jeden in EXPOS gerechneten Zeitpunkt wiederholt bis zum Ende der Datei.

8.3.6 Ausgabedateien des Statistikeils

In einer probabilistischen EMOS-Rechnung wird für jede Simulation eine Stichprobe der aktuellen Werte der unabhängigen Parameter gezogen und in der Stichprobendatei mit der Erweiterung spl abgelegt. Die Dosiswerte jeder Simulation mit einer Radionuklidfreisetzung werden in der Ausgabedatei mit der Erweiterung sdo gespeichert. Die Kontrolldatei mit der Erweiterung sko enthält Zusatzinformationen über jede Simulation, u.a. die Angabe, ob die aktuelle Simulation zu einer Freisetzung geführt hat oder nicht, sowie Angaben zu Start und Ende der jeweiligen Simulation.

8.3.6.1 Die Vorspanndatei der probabilistischen Rechnung (.svs)

Die Vorspanndatei mit der Erweiterung svs enthält die Steuerdaten für den Statistik-Postprozessor. Sie enthält im einzelnen die folgenden Größen:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Anzahl ausgewählter Personengruppen (immer = 1), Format I10.

8.3.6.3 Die Ergebnisdatei der probabilistischen Rechnung mit den Dosiswerten für alle Simulationen (.sdo)

Die sdo-Datei enthält für alle Simulationen mit einer Radionuklidfreisetzung die Dosiswerte für die ausgewählte Personengruppe und für alle in EXPOS gerechneten Radionuklide zu allen bei der probabilistischen Rechnung ausgewählten Zeitpunkten. Die sdo-Datei wird mit Hilfe des Statistik-Postprozessors EmosStatist ausgewertet, der an anderer Stelle beschrieben wird. Die ausgewählten Zeitpunkte sind im JIF in den Zeilen 82 und 83 angegeben, siehe Kapitel 8.1.2.

Die Struktur der sdo-Datei besteht aus Blöcken mit den Dosiswerten für jede Simulation mit einer Radionuklidfreisetzung. Im einzelnen:

Für die erste Simulation mit einer Radionuklidfreisetzung:

1. Zeile: Nummer der Simulation und aktueller Zeitpunkt, Format I5,E15.5.
2. Zeile: Für den ersten ausgewählten Zeitpunkt die Dosiswerte für die NNE in EXPOS gerechneten Radionuklide, die Summendosis und die NSE Teilsummen von Radionukliden, Format 8E10.3.

Falls $NNE + NSE + 1 > 8$ entsprechend viele Fortsetzungszeilen im Format 8E10.3. Die Anzahl der zu rechnenden Radionuklide und der Teilsummen wird im EXPOS-Teil des JIF in den Zeilen 63 und 65 angegeben.

3. Zeile: und folgende: Für alle weiteren ausgewählten Zeitpunkte jeweils ein Datensatz wie in den Zeilen 1 und 2 mit Angabe der Nummer der Simulation, dem aktuellen Zeitpunkt und den Dosiswerten.

Für alle weiteren Simulationen mit einer Radionuklidfreisetzung ein Block von Daten entsprechend den Zeilen 1 bis 3 für die erste Simulation mit einer Radionuklidfreisetzung.

Bei allen Simulationen ohne eine Radionuklidfreisetzung werden keine Daten in die sdo-Datei abgespeichert.

8.3.6.4 Die Ergebnisdatei der probabilistischen Rechnung mit den Summendosen (.sdm)

Diese Datei mit der Erweiterung sdm wird für die Postprozessoren EmosStatist und EmosStudy benötigt, damit die Erzeugung von Abbildungen und Tabellen schneller abläuft. Sie wird nicht von EMOS, sondern von den Postprozessoren erzeugt. In dieser Datei werden nur die Summendosen für jede Simulation mit Radionuklidfreisetzung und die jeweilige maximale Summendosis abgespeichert.

Die Datei mit den Summendosen hat folgende Struktur:

1. Zeile: Datum und Uhrzeit des Beginns der EMOS-Rechnung Format 2A10.

2. Zeile: Anzahl der Simulationen mit einer Radionuklidfreisetzung,
Format I12.
3. Zeile: Nummern der Simulationen mit einer Radionuklidfreisetzung, mit eventuell erforderlichen Fortsetzungszeilen,
Format 9I8.
4. Zeile: Kennung "Zeitpunkte",
Format A10.
5. Zeile: Zeitpunkte, an denen die Summendosen während eines EMOS-Rechenlaufs in der Datei mit der Erweiterung sdo abgelegt werden,
Format 4F16.2.

Bei mehr als 4 Zeitpunkten erforderliche Fortsetzungszeilen im gleichen Format.
6. Zeile: Kennung "Dosen", die den Beginn der Datenblöcke mit den Summendosen einleitet,
Format A5.
7. Zeile: Für die erste Simulation mit einer Radionuklidfreisetzung: für jeden in Zeile 5 angegebenen Zeitpunkt die Summendosis,
Format 4E16.8.

Bei mehr als 4 Zeitpunkten erforderliche Fortsetzungszeilen im gleichen Format.
8. Zeile: Kennung "Maximum",
Format A7.
9. Zeile: Die maximale Summendosis für die aktuelle Simulation, Format E16.8.
10. Zeile: und folgende: für jede Simulation mit einer Radionuklidfreisetzung ein Block entsprechend den Zeilen 7 bis 9 für die erste Simulation mit Freisetzung.
11. Zeile: Kennung ***ENDE,
Format A7.
Diese Kennung muß in der letzten Zeile der Datei stehen.

8.3.6.5 Die Kontrolldatei der probabilistischen Rechnung (.sko)

Die Kontrolldatei mit der Erweiterung sko wird bei jedem Rechenlauf, auch bei deterministischen Rechnungen, angelegt. Sie enthält für jede Simulation, bzw. für einen einzelnen deterministischen Rechenlauf, Angaben über den Beginn und das Ende der Rechnung sowie eine Angabe, ob es zu einer Radionuklidfreisetzung gekommen ist oder nicht. Die Kontrolldatei wird bei der Weiterverarbeitung im Statistik-Postprozessor EmosStatist verwendet.

Die Kontrolldatei besteht aus einem Datei-Header mit den Überschriften und einer Ausgabezeile für jeden Rechenlauf.

1. Zeile: 1. Kommentarzeile mit der Überschrift der folgenden Tabelle,
Format A80.
2. Zeile: 2. Kommentarzeile mit der Überschrift der folgenden Tabelle,
Format A80.

3. Zeile: Leerzeile zur Abtrennung der Überschrift von der Tabelle.
4. Zeile: und folgende: für jeden Rechenlauf, d.h. bei probabilistischen Rechnungen für jede Simulation, eine Zeile mit folgenden Angaben:

Nummer der Simulation, Datum und Zeit des Beginns der Simulation, verbrauchte CPU-Zeit für die Module REPOS, CHET und EXPOS (jeweils in Minuten), Zeit des Endes der Simulation, Kommentar mit Angabe, ob es eine Freisetzung gegeben hat oder nicht, Nummer der aktuell gerechneten Simulation (eventuell neu gezählt nach einem Neustart des Programms) und Anzahl der Simulationen mit einer Nuklidfreisetzung (evtl. bezogen auf einen Neustart des Programms).

Format I5, 1X, 2(A10), 3(A9), A10, A4, 1X, 2(I5, 1X).

Die Kontrolldatei wird bei Beginn eines Rechenlaufs geöffnet und Ergebnisse an vorhandene Daten angefügt. Das bedeutet, daß bei deterministischen Rechnungen, die immer unter demselben Namen gestartet werden, die Kontrolldatei immer größer wird.

8.3.7 Ausgabe von Endtabellen

In Abhängigkeit von den Schalterstellungen IDOR, IOOC und IOOE werden neben der Standard-Ausgabedatei mit der Erweiterung out in den Modulen REPOS, CHET und EXPOS die Dateien mit den Erweiterungen ret, cet und eet angelegt, in welcher in sequentieller Form Daten für die Erzeugung von Endtabellen mit Hilfe des Postprozessors EmosPrint abgelegt werden. Eine Beschreibung der Datei out ist nicht notwendig, da die erforderlichen Erläuterungen direkt mit in die Datei ausgegeben werden. Die Schalter IDOR, IOOC und IOOE werden in den Zeilen 26, 50 und 69 der JIF-Beschreibung des jeweiligen Moduls erläutert. Im folgenden werden die Übergabedateien für EmosPrint beschrieben.

8.3.7.1 Endtabellen für REPOS (.ret)

Die Datei mit der Erweiterung ret enthält alle Informationen eines Rechenlaufes, die zur Erzeugung von Endtabellen mit dem Postprozessor EmosPrint erforderlich sind. Je nach Schalterstellung ITA (siehe Zeile 28 der JIF-Beschreibung für den Teil REPOS) können einzelne Teilbereiche zwischen 2 Kennwörtern entfallen. Im folgenden ist die vollständige Struktur einer ret-Datei aufgelistet, wobei diese Tabellen erzeugt werden können:

- Freisetzung in Bq oder kg,
- freigesetzte Massensummen,
- relative Freisetzungen,
- Freisetzungs-Übersicht,
- Chroniken der Abfallgebinde und Segmente,
- Laugenbewegungen im Grubengebäude,
- Zeitpunkte des Erreichens von Löslichkeitsgrenzen.

Diese Tabellen werden zusätzlich in der Datei mit der Erweiterung out gespeichert, falls der Schalter IDOR entsprechend gewählt wird, siehe Zeile 26 der JIF-Beschreibung für das Modul REPOS.

Die Datei mit der Erweiterung ret hat im einzelnen folgenden Aufbau:

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).
3. Zeile: Dauer des Szenarios DASZ, Zeitpunkt des Laugenzutritts TL, Zeitpunkt des Beginns der Freisetzung ZFA, Beginn des Auspressens von Lauge aus dem Grubengebäude, Beginn des Auspressens von Lauge aus dem ausgewählten Segment INAZEF, Ende des aktuellen Zeitschritts TN, Format 6(E12.4).
4. Zeile: Dauer der Betriebsphase -TB, Anzahl der Segmente und Abfallgebinde NBY, Anzahl der Nuklide NNY, Anzahl der Elemente, Anzahl der zur Druckausgabe vorgesehenen Segmente und Gebinde NDSR, Name des ausgewählten Segments CNAZEF, Format E12.4, 4(I6), A12.
5. Zeile: Anzahl der Spaltprodukte und der Nuklide in den 4 Zerfallsketten, NNR(1...5), Format 5(I5).
6. Zeile: Kennung "Freisetzung in Bq und kg", Format A24.
7. Zeile: Segmentname, Format A10.
8. Zeile: Name des Nuklids, Massenzahl des Nuklids, Freisetzung in Bq, Freisetzung in kg, Format A5,I5,2(E12.4).

Entsprechend viele Fortsetzungszeilen für jedes Nuklid.

9. Zeile: Freigesetzte Massensumme der 1. Nuklidreihe (nicht für die Spaltprodukte), Namen der Nuklide dieser Nuklidreihe und Massenzahlen, Format E12.4, 5(A5,I5).

3 Fortsetzungszeilen für die 2. bis 4. Nuklidreihe.

Für jedes ausgewählte Segment oder Abfallgebinde einen Fortsetzungsblock wie in den Zeilen 7 bis 9.

10. Zeile: Kommentar "Freisetzung bezogen auf eingelagertes Inventar", Format A46.
11. Zeile: und ff: jeweils ein Block für jedes ausgewählte Segment und jedes Nuklid analog den Zeilen 7 bis 9.
12. Zeile: Kommentar "Freisetzungs-Übersicht", Format A22.

13. Zeile: Name des Nuklids, Massenzahl des Nuklids, eingelagertes Inventar in Bq und kg, freigesetzte Inventare in Bq und kg für das Wurzelsegment, freigesetzte Inventare in Bq und kg für alle Einlagerungsorte, relative Freisetzung für das Wurzelsegment und für die Einlagerungsorte, Format A5,I5,8(E12.4).

Für jedes Nuklid eine Fortsetzungszeile.

14. Zeile: Kennung "Chronik der Gebinde", Format A19.

15. Zeile: Name des Gebindes, Meldung, Beginn der Mobilisierung, Ende der Mobilisierung, Zeitpunkt des Abbruchs der Mobilisierung, Format A10,2X,A13,3(E12.4).

Für jedes Gebinde eine Fortsetzungszeile.

16. Zeile: Kennung "Chronik der Segmente", Format A20.

17. Zeile: Name des Segments, Kontakt zur Geosphäre Ja/Nein, Meldung, Beginn des Laugenzuflusses, Ende des Laugenzuflusses, Zeitpunkt des Erreichens der Endporosität, Beginn des Auspressens aus dem Segment, von oben zugeflossene Laugenmenge, nach oben abgeflossene Laugenmenge, von unten zugeflossene Laugenmenge, nach unten abgeflossene Laugenmenge, Format 3A10,8(E12.4).

Für jedes Segment eine Fortsetzungszeile.

18. Zeile: Kennung "Laugenbewegungen"

19. Zeile: Für die Bereiche "Gesamt", "Mittelfeld", "Einlagerungsorte" und "Laugeneinschlüsse" je eine Zeile mit dem Namen des Bereichs, von oben zugeflossene Laugenmenge, von unten zugeflossene Laugenmenge, nach oben abgeflossene Laugenmenge, Bilanz der zu- und abgeflossenen Laugenmengen, aktuelles Laugenvolumen VL, Porenvolumen am Ende der Betriebsphase, Format A10,6(E12.4).

8.3.7.2 Endtabellen für CHET (.cet)

Die Datei mit der Erweiterung cet enthält alle erforderlichen Daten zur Erzeugung von Endtabellen mit allgemeinen Daten des Chet-Rechenlaufs, den Daten zu den einzelnen Gebieten und den maximalen Konzentrationen. Diese Tabellen können mit dem Postprozessor EmosPrint erzeugt werden.

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen, Format A80.

2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs, Format 2(A10).

3. Zeile: Nummer des Blocks mit der Quelle IVINQUEL, Anzahl der Gebiete NGC, Anzahl der Nuklide NNC, Anzahl der Elemente NEC, Anzahl der Materialien NMC,
Format 5I5.
4. Zeile: Volumenstrom RVVS, Transportzeit des Fluids RVTRANS, Gitterpeckelzahl RVPE, Freisetzungsrates in den ersten Block RVINQUEL, Gesamtlänge des Transportwegs RVXGES,
Format 5E15.7.
5. Zeile: Variationsfaktor der Dispersionslänge RVVALPHA, Variationsfaktor der Diffusion RVVDM, Variationsfaktor des Querschnitts (Verdünnung) RVVDUENN, Zeitpunkt des Endes der Freisetzung RTENDFR,
Format 4E15.7.
6. Zeile: Kennung "Gebiete",
Format A7.
7. Zeile: Nummer des Gebiets, Zahl der Blöcke im Gebiet IGBC, Name des Gebiets CGNAMEC,
Format 2I5,5X,A30.
8. Zeile: Blocklänge in m, Anteil des Gebietes am Transportweg, Querschnitt des Gebiets RGA,
Format 3E15.7.
9. Zeile: effektive Porosität RMPOROS, Dispersionslänge RMALPHAJ, Gesteinsdichte RMRHO, Diffusionskonstante RMDM,
Format 4E15.7.
10. Zeile: Für jedes Element eine Zeile mit den folgenden Angaben: Name des Elements, K_d -Wert und R_f -Wert,
Format A5,2E15.7.

Für jedes weitere Gebiet Fortsetzungszeilen entsprechend den Angaben in den Zeilen 7 bis 10.
11. Zeile: Kennung "Maximale Konzentrationen",
Format A24.
12. Zeile: Name des Nuklids, Massenzahl des Nuklids, Zeitpunkt des Auftretens des Maximums, Maximale Konzentration in Bq/m^3 , maximale Konzentration in mol/l,
Format A5,I5,3E15.7.

Für jedes Nuklid eine Fortsetzungszeile mit diesem Format.

8.3.7.3 Endtabellen für EXPOS (.eet)

Die Datei mit der Erweiterung eet enthält die erforderlichen Daten zur Erzeugung der Endtabellen mit den Dosismaxima und den Kollektivdosen für Einzelnuklide und für Nuklidsummen. Die Anzahl der ausgewählten Personengruppen ist aus der Datei mit der Erweiterung evs zu entnehmen.

1. Zeile: Kommentarzeile zur Charakterisierung des Rechenlaufes. Diese Zeile wird aus der ersten Zeile des Job-Input-Files übernommen,
Format A80.
2. Zeile: Datum und Zeit des Rechenlaufs,
Format 2(A10).

- 3. Zeile: Kennung "Dosismaximum", Format A12.
- 4. Zeile: Namen der ausgewählten Personengruppen, Format 1X,7A11.
- 5. Zeile: Name des Nuklids oder der Summe, Massenzahl des Nuklids oder laufende Nummer der Summe, maximal 3 Paare mit: Zeitpunkt des Auftretens der maximalen Dosisbelastung und maximale Dosisbelastung für die ausgewählte Personengruppe, Format A5,I5,6E12.3.

Für jedes Nuklid und jede Summe eine Folgezeile. Am Ende eines Blocks mit maximal drei Personengruppen wird jeweils eine Leerzeile eingefügt.

Falls mehr als 3 Personengruppen ausgewählt wurden, werden die Zeilen 5 ff wiederholt.

- 6. Zeile: Kennung "Kollektivdosen", Format A14.
- 7. Zeile: Name des Nuklids oder der Summe, Massenzahl des Nuklids oder laufende Nummer der Summe, Kollektivdosis berechnet aus Konzentrationen, Kollektivdosis berechnet aus Strömen, Format A5,I5,2E12.3.

Für jedes Nuklid eine Fortsetzungszeile bis zum Ende der Datei.

9 Literaturverzeichnis

- [1] BMI: Sicherheitskriterien für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in einem Bergwerk. GMBI 13 (1983) 220 - 224.
- [2] Allgemeine Verwaltungsvorschrift zu §45 Strahlenschutzverordnung: Ermittlung der Strahlenexposition durch die Ableitung radioaktiver Stoffe aus kerntechnischen Anlagen oder Einrichtungen (21. Februar 1990). Erschienen im Bundesanzeiger, 42. Jg., Nummer 64a (1990).
- [3] PSE: Zusammenfassender Abschlußbericht. Kapitel 4: Entwicklung eines sicherheitsanalytischen Instrumentariums für das geologische Endlager für radioaktive Abfälle in einem Salzstock. Herausgegeben von der Projektleitung. Berlin, Januar 1985.
- [4] R. Storck, J. Aschenbach, R.P. Hirsekorn, A. Nies, N. Stelte: Performance Assessment of Geological Isolation Systems for Radioactive Waste (PAGIS): Disposal in Salt Formations. EUR 11 778 EN, GSF-Bericht 23/88. Commission of the European Communities, Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München, Brussels-Luxembourg 1988.
- [5] A. Nies: Application of the Monte Carlo Method in the Performance Assessment of a Hypothetical HLW Repository in Salt. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 127 (1989) 589 - 596.
- [6] R.-P. Hirsekorn, A. Nies, H. Rausch, R. Storck: Performance Assessment of Confinements for Medium-Level and Alpha-Contaminated Waste (PACOMA): Rock Salt Option. EUR 13 634 EN, GSF-Bericht 12/91. Kommission der Europäischen Gemeinschaften, GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Brüssel-Luxemburg 1991.
- [7] D. Buhmann, A. Nies, R. Storck: Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagerkonzepten für wärmeerzeugende radioaktive Abfälle. GSF-Bericht 27/91. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1991.
- [8] D. Buhmann, J. Brenner, R. Storck: Einfluß der Auslegungstemperatur auf die Langzeitsicherheit eines Endlagers in einem Salzstock. GSF-Bericht 11/93. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1993.
- [9] R.L. Iman, M.J. Shortencarier: A FORTRAN 77 program and user's guide for the generation of Latin hypercube and random samples for use with computer models. SANDIA National Laboratories Report SAND83-2365. Albuquerque 1984.
- [10] M.D. McKay, W.J. Conover, R.J. Beckman: A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. Technometrics 21 (1979) 239 - 245.
- [11] B.W. Goodwin, J.M. Laurens, J.E. Sinclair, D.A. Galson, E. Sartori (Eds.): PSACOIN Level E Intercomparison. An International Code Intercomparison Exercise on a Hypothetical Safety Assessment Case Study for Radioactive Waste Disposal Systems. OECD/NEA, Paris, June 1989.

- [12] R.L. Iman, W.J. Conover: A distribution-free approach to inducing rank correlation among input variables. *Comm. in Statistics B11(3)*, 311 - 334, 1982.
- [13] M. Bette, T. Kühle, R.-P. Hirsekorn, A. Nies, R. Storck: EMOS. Programmpaket zur Modellierung der Radionuklidfreisetzung aus Endlagern für angenommene Szenarien. EMOS2, Version 2.1 vom 15.03.86. GSF Braunschweig, März 1986.
- [14] R. Storck, D. Buhmann, R.-P. Hirsekorn, A. Nies, H. Rausch: EMOS: Programmpaket zur Langzeitsicherheitsanalyse eines Endlagers für radioaktive Abfälle, Version 4. GSF-Bericht 32/90. GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, Braunschweig 1992.
- [15] D.J. Gilby, R.J. Hopkirk: TROUGH-1D - Transport of Radioactive Outflows in Underground Hydrology. User's Handbook and Theoretical Description, Revision 4. Zürich, Oktober 1985.
- [16] Datensatz zur Durchführung von Modellrechnungen über die Langzeitsicherheit der Endlagerung von THTR-Brennelementen. HBK-Projekt Hochtemperatur-Reaktor Brennstoff-Kreislauf. KfA Jülich, HBK-IB10/84, 1984.
- [17] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 10. Berlin, Januar 1985.
- [18] G. Rudolph, P. Vejmelka, R. Köster: Erweitertes Mobilisierungsmodell für zementierte radioaktive Abfälle. Kernforschungszentrum Karlsruhe, Primärbericht Nr. 05.01.01P18A (März 1989).
- [19] S. Hossain und P. Weber: Prediction of thermally induced flow in the sealing of boreholes containing high level nuclear waste. TU Berlin, interner Bericht, 1984.
- [20] H.J. Engelmann, E. Biurrin: Direkte Endlagerung ausgedienter Brennelemente, Systemanalyse Mischkonzept. Temperaturrechnungen für die Langzeitsicherheitsanalyse, DBE Peine, DEAB T23, Oktober 1989.
- [21] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 15. Berlin, Januar 1985.
- [22] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 16. Berlin, Januar 1985.
- [23] N. Diekman, U. Hunsche, D. Meister: *Z. dt. geol. Ges.* 137, 29 (1986).
- [24] T. Kühle, F. Zude, L. Lührmann: Das eindimensionale Transportprogramm CHET1 unter Berücksichtigung der Sorption nach dem K_d -Konzept. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Bericht GRS-124, Braunschweig (1996).
- [25] L. Lührmann, U. Noseck: Das eindimensionale Transportprogramm CHET2 unter Berücksichtigung nichtlinearer, elementspezifischer Gleichgewichtssorption. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Bericht GRS-125, Braunschweig (1996).

- [26] W. Kinzelbach: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien 1987.
- [27] G. de Marsily: Quantitative Hydrology. Academic Press, Inc., San Diego 1986.
- [28] J. Bear, A. Verruijt: Modeling Groundwater Flow and Pollution. Theory and Applications of Transport in Porous Media. D, Reidel Publishing Company 1987.
- [29] J. Bear: Hydraulics of Groundwater. McGraw-Hill Book Company 1979.
- [30] L. Lapidus, G.F. Pinder: Numerical Solution of Partial Differential Equation in Science and Engineering. John Wiley & Sons, New York 1982.
- [31] F. Häffner, D. Sames, H.-D. Voigt: Wärme- und Stofftransport, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest, 1992.
- [32] D. Marsal: Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen. B.I.-Wissenschaftsverlag, Bibliographisches Institut, Mannheim 1976.
- [33] P.S. Huyakorn, G.F. Pinder: Computational Methods in Subsurface Flow. Academic Press, Inc., Orlando 1983.
- [34] W. Kinzelbach: Groundwater Modelling. Developments in Water Science 25, Elsevier Science Publishers, Amsterdam 1986.
- [35] J.J. Fried: Groundwater Pollution. Developments in Water Science 4, Elsevier Science Publishers, Amsterdam 1975.
- [36] R.A. Greenkorn: Flow Phenomena in porous Media. Energy, Power and Environment, Marcel Dekker Inc., New York 1983.
- [37] Chaudari, N. M.: An improved numerical technique for solving multidimensional miscible displacement equations. Soc. Pet. Eng. J., 11(3), S. 277 - 284, 1971.
- [38] Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlußbericht, Fachband 19. Berlin, Januar 1985.
- [39] Report of the ICRP Committee II on Permissible Dose for Internal Radiation, ICRP Publication 2, Pergamon Press, London 1959.
- [40] Dosisfaktoren für Inhalation oder Ingestion von Radionuklidverbindungen; Institut für Strahlenhygiene des Bundesgesundheitsamtes, Heft 78. November 1985.

A.1 Zusammenstellung der Variablen

a	Konstante (bei der Konvergenzrate)
a	mobiler Anteil eines Radionuklids (Chet)
$a_i(t_f)$	spezifische Aktivität pro Masseneinheit Salz (Subrosion)
$a_{L,i}$	Anteil der gelösten Nuklide
$a_{x,e(i)}$	relative Inventaranteile des i -ten Nuklids im Bereich x , elementspezifisch beschrieben durch $e(i)$.
A	Querschnittsfläche eines Segmentes, Verschlusses oder Blocks (Chet)
A_i	Aktivität des Nuklids i A_i^{alt} = Inventar vor der Nuklidbilanzierung, A_i^{neu} = Inventar nach der Nuklidbilanzierung
$A_{i,0}$	Anfangs-Aktivität des Nuklids i
$A_{0,i}(\tau)$	hypothetisches Aktivitätsinventar von Gebinden
$\dot{A}_i(\tau)$	Aktivitätsstrom des i -ten Nuklids Index a : Ausgangsstrom, Index e : Eingangsstrom
$\dot{A}_{i,j}$	Aktivitätsstrom des i -ten Nuklids im j -ten Segment oder Gebinde
\dot{A}_A	Aktivitätsstrom durch Austauscheffekte
$\dot{A}_{A,S}$	Aktivitätsstrom durch Austauscheffekte (Versatz)
$\dot{A}_{A,V}$	Aktivitätsstrom durch Austauscheffekte (Verschluß)
\dot{A}_D	Aktivitätsstrom durch Diffusion
\dot{A}_G	Aktivitätsstrom durch Gasstrom
\dot{A}_K	Aktivitätsstrom durch Druckgradienten
$\dot{A}_{T,C}$	Aktivitätsstrom durch Temperatur- und Konzentrationsgradient
B	Breite eines Segmentes oder Verschlusses
c	Konstante in der Permeabilitätsbeziehung
c	Nuklidkonzentration in Lösung (Chet)
$c_i(t_f)$	Konzentration des Nuklids i in Lauge zur Zeit des Freisetzungsbegins (Subrosion)
c_s	Salzkonzentration

c_{Ad}	Nuklidkonzentration am Sorbens
c_K, c_R	Konstante für die Berechnung von f_K oder f_R
c_L	Nuklidkonzentration in Lösung
c_{Mg}	Magnesiumkonzentration ($c_{Mg,ex}$ = im externen Segment)
c_U	Konzentration der gelösten Substanz U $c_{U,ex}$ = Konzentration im externen Segment)
$C(x_1, x_2)$	Radionuklidkonzentration (= $C_1(x_1) + C_2(x_2)$) $C_1(x_1)$ = Anteil nur mit x_1 -Abhängigkeit $C_2(x_2)$ = Anteil nur mit x_2 -Abhängigkeit C_{ex} = Konzentration im externen Segment
ΔC	Konzentrationsdifferenz
\dot{d}	Energieabsorption pro Volumeneinheit Lauge
$D(T)$	Diffusionskoeffizient
D_h	hydraulischer Dispersionskoeffizient
D_m	molekularer Diffusionskoeffizient (C_{het})
$e(i)$	Elementnummer des Nuklids i
$f(\tau)$	Verteilungsdichte der Behälterlebensdauer (= $\dot{n}_B(\tau)$)
$f_i(\tau)$	Hilfsfunktion für den radioaktiven Zerfall
f_r	Reduktionsfaktor für die Konvergenz
f_{rel}	Obergrenze der relativen Änderung des Porenvolumens in einem Zeitschritt
f_t, f_n	minimaler (maximaler) Reduktionsfaktor für die Konvergenzrate
f_G	Proportionalitätsfaktor bei Gastransport
f_K, f_G	Verkleinerungs- und Vergrößerungsfaktor für die Zeitschrittweite
$f_K(T,p)$	Druck- und Temperaturabhängigkeit der Gasproduktion bei Korrosion
f_P	Proportionalitätsfaktor für die Permeabilität
$f_R(T,p)$	Druck- und Temperaturabhängigkeit der Gasproduktion bei Radiolyse
f_Z	Umrechnungsfaktor von Magnesiummasse in Zementmasse
f_1, f_2, f_3	Funktionen für die Einzelanteile der Konvergenzrate

F	Konstante zur Berechnung des Nuklidtransports
$F(\tau)$	Verteilungsfunktion der Behälterlebensdauer (= $n_B(\tau)$)
g	Gravitationsbeschleunigung
g_i	Dosisfaktor für das Nuklid i
$G^\alpha, G^\beta, \gamma$	G-Faktoren für α , β und γ -Zerfall
G_{Trans}	Transfer-G-Faktor
$h_{D,i}$	Dosiskonversionsfaktor für das Nuklid i
$h_{Q,i}$	Konversionsfaktor für Aktivität in Energie
H	Höhe eines Segmentes oder Verschlusses, bzw. Höhe des Salzstockes (Subrosion)
H_i	Dosis, hervorgerufen durch das Nuklid i
\dot{H}_i	Dosisrate, hervorgerufen durch das Nuklid i
H_E	Höhe des Endlagerbereichs (Subrosion)
$I_{e(i)}$	Stoffmenge der Isotope des Elementes e(i)
$j(i)$	Index für das innere Segment bzgl. i
$j(\tau)$	oberflächenbezogene Reaktionsrate bei Glasgebinden
j_r	Reaktionsrate $j(\tau)$ bei der Referenztemperatur
k	Permeabilität
$k(i)$	Index für das äußere Segment bzgl. i
k_D	Permeabilität eines Damms
$K(p, \phi, T)$	Konvergenzrate
K_d	K_d -Wert
K_r	Referenzkonvergenzrate
L	Länge eines Segmentes oder Verschlusses
ΔL	Längendifferenz zur Berechnung von Austauschereffekten
$L_{e(i)}$	Löslichkeitsgrenze des Elementes e zum Nuklid i
m	Exponent bei der Berechnung der Konvergenzrate
$m(t)$	Metallmasse

m_0	eingelagerte Metallmasse
m_{ges}	Gesamtmasse (Lauge + Gestein)
$m_G(0)$	Anfangs-Glasmasse
$M_k(t)$	zum Zeitpunkt t vorhandene Menge des Nuklids k im Transport von Chet
m_L	Laugenmasse
$m_{\text{Mg}}(t)$	Magnesiummasse
m_S	Sorbensmasse, bzw. Salzmasse (Subrosion)
m_U	Masse der gelösten Substanz U
$m_Z(\tau)$	Zementmasse zur Zeit τ
$\Delta_{\text{Mg}m}$	Änderung der Magnesiummasse durch Zementkorrosion und durch Laugentransport
$\Delta_U m$	Differenz von ein- und ausströmender Masse der gelösten Substanz U
$\dot{m}(t)$	Korrosionsrate von Metall (Gasproduktion)
\dot{m}_0	Anfangs-Korrosionsrate von Metall
\dot{m}_{Mg}	Magnesiummassenstrom
$\dot{m}_{\text{Mg,Kor}}$	Magnesiummassenstrom durch Zementkorrosion pro Zeitschritt
\dot{m}_U	Massenstrom der gelösten Substanz U Index a : ausströmend, Index e : einströmend
$\dot{m}_Z(\tau)$	Zeitliche M-Änderung der Zementmasse, (= Korrosionsrate)
$n_B(t)$	relative Anzahl ausgefallener Behälter
$N_B(t)$	Anzahl ausgefallener Behälter
$N_B(0)$	Anfangs-Gebindezahl
$\dot{n}_B(\tau)$	relative Ausfallrate der Behälter
$\dot{N}_B(\tau)$	Ausfallrate der Behälter
O_{eff}	effektive Oberfläche eines Glasgebindes
p	Laugendruck (allgemein)
P	Hilfsvariable (Chet)
$p_j(x_i)$	Druck des Segments j bezogen auf die Tiefe x_i

$p_j = p_j(x_j)$	lokaler Laugendruck im Segment j
p_{\max}	maximaler Laugendruck in der Kaverne
$p_G(x_i)$	Gebirgsdruck in der Teufe x_i
$p_G^r = p_G(x_r)$	Gebirgsdruck in der Referenztiefe
p_H	hydrostatischer Druck
∇p	Druckgradient
q	Exponent in der Porositäts- / Permeabilitätsbeziehung
$q_k(t)$	Einstromrate des Nuklids k (Chet)
$Q_k(t)$	kumulierte Einstromrate des Nuklids k
$q(\phi, \delta\rho)$	Porositäts- und Dichteabhängigkeit der Gasproduktionsrate
Q	Aktivierungsenergie für diffusive Prozesse
Q_G	Aktivierungsenergie bei der Mobilisierung aus verglasten Abfällen
Q_1, Q_2	Aktivierungsenergien bei der Temperaturabhängigkeit der Konvergenz
$\dot{Q}^\alpha, \dot{Q}^{\beta,\gamma}$	Energiefreisetzung aus α , β und γ -Zerfall
$r_{D,e(l)}$	relative diffusionsbedingte Rate
$r_K(\tau)$	relative Korrosionsrate für Zement
r_{Mx}	relative Mobilisierungsraten in den Bereichen $x = 1$ bis 3 bei LWR-Brennelementen
r_{My}	relative Mobilisierungsraten in den drei Zonen (K,P,B) bei HTR-Brennelementen
R	Gaskonstante
R	Retardationsfaktor (Chet)
$R(t)$	Radius eines Bohrloches oder Verschlusses
$R_{f,i}$	Retardationsfaktor des i-ten Nuklids
R_i	Strömungswiderstand des i-ten Segments
R_i^{-1}	inverser Strömungswiderstand (Leitwert) des i-ten Segments
s	Subrosionsrate
$S_k(t)$	kumulierter Aktivitätsstrom des Nuklids k aus dem letzten Block n in Chet
t	aktuelle Zeit

t_f	Beginn der Freisetzung (Subrosion)
t_i	äquidistante Zeitpunkte für die Deckgebirgsrechnung
t_s	Zeitdauer zum Abtragen des Endlagerbereichs (Subrosion)
t_B	Betriebsdauer des Endlagers
t_E	Einlagerungszeitpunkt
t_F	Freisetzungsbeginn aus dem Endlager (REPOS)
t_K	Dauer der Korrosion (Gasproduktion)
t_L	Zeitpunkt des Laugenzutritts, bzw. Laufzeit des Grundwassers im Deckgebirge
$t_{L,i}$	Laufzeit des i-ten Nuklids im Deckgebirge
t_N	nächster anzusteuender Zeitpunkt
$\Delta t, \Delta t_a$	aktuelle Zeitschrittweite
Δt_{max}	Vorschlag für eine maximale Zeitschrittweite
Δt_o	Obergrenze der Zeitschrittweite
Δt_u	Untergrenze der Zeitschrittweite (auch $\Delta t_{u,1}$ und $\Delta t_{u,0}$)
Δt_N	neue Zeitschrittweite
Δt	Zeitschrittweite aus relativen Stromänderungen
T	Temperatur
T_r	Referenztemperatur
$T_{\ddot{u}}$	Übergangstemperatur bei der Konvergenzrate
$T_G(x)$	Gebirgstemperatur in der Tiefe x
∇T_x	geothermischer Temperaturgradient
ΔT	Temperaturdifferenz
u	Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers
\underline{u}	Darcy-Geschwindigkeit der Lauge (Vektor)
u_1, u_2	Komponenten von u
u_{RN}	Abstandsgeschwindigkeit eines Radionuklids
V	Gesamtvolumen eines Segments

V_B	gesamtes Behältervolumen
V_G	Gesamtvolumen eines Segments
V_K	Kammervolumen
V_L	Laugenvolumen
V_P	Porenvolumen
$V_{P,B}$	Porenvolumen im Abfallgebilde (Behälter)
$V_{P,G}$	gesamtes Porenvolumen eines Segmentes
$V_{P,k}$	durch Konvergenz reduzierbares Porenvolumen
$V_{P,n}$	nicht durch Konvergenz reduzierbares Porenvolumen
$V_{P,S}$	Porenvolumen im Versatz
V_S	Versatzvolumen
\dot{V}	Volumenstrom des Grundwassers
\dot{V}_i^c	Konvergenz-Laugenstrom aus dem Segment i
\dot{V}_i^{ex}	Laugenstrom aus dem Segment i
$\dot{V}_i^{in} = \sum_j \dot{V}_{j(i)}^{ex}$	Laugenstrom in das Segment i
\dot{V}_G	Gasvolumenstrom (Index a: ausströmend, e: einströmend)
\dot{V}_G^A	Gasvolumenstrom durch Radiolyse aus Abfallgebilden
\dot{V}_G^L	Gasvolumenstrom durch Radiolyse (Minimum)
\dot{V}_L	Laugenstrom (allgemein) Index a: ausströmend, Index e: einströmend
$\dot{V}_{L,j}$	Laugenstrom im j-ten Segment
$\dot{V}_{L,A}$	Laugenstrom durch Austauscheffekte (gesamt)
$\dot{V}_{L,C}$	Laugenstrom durch Konzentrationsgradienten
$\dot{V}_{L,D}$	Laugenstrom durch Diffusion (fiktiv)
$\dot{V}_{L,G}$	Laugenstrom durch Gastransport
$\dot{V}_{L,K}$	Laugenstrom durch Druckgradienten
$\dot{V}_{L,T}$	Laugenstrom durch Temperaturgradienten

$\dot{V}_{T,C}$	Laugenstrom durch Temperatur- und Konzentrationsgradient
x_i	Tiefe des Segments i ($x < 0$)
x_r	Referenztiefe
x_1, x_2	Koordinaten für die Berechnung der Laugenströme und Nuklidströme
α	Schranke für die im Intervall Δt_a minimal freigesetzte Aktivität
α	Ausdehnungskoeffizient durch Konzentrationsänderungen
α	longitudinale Dispersionslänge (Chet)
β	thermischer Ausdehnungskoeffizient
$\beta_i(V,\phi,T)$	druckunabhängiger Anteil der Konvergenz im Segment i
$\delta\rho$	Dichteverhältnis ρ_L/ρ_S
$\delta\rho_C$	Dichteänderung durch Konzentrationsänderung gelöster Substanzen
Δ_i	vertikaler Abstand des Segments i von der Referenztiefe ($\Delta_i = x_i - x_r$)
Δ_{ij}	effektiver vertikaler Abstand der Segmente i und j mit: $\Delta_{ij} = 0$ falls $\Delta_i - \Delta_j > 0$ gilt, $\Delta_{ij} = \Delta_i - \Delta_j$ falls $\Delta_i - \Delta_j \leq 0$ gilt.
ε	infinitesimale Randschicht bei der Berechnung des Aktivitätstransportes durch Gasstrom
ε_i	relative Stromänderungen ε_u : untere Schranke ε_o : obere Schranke
λ_i	Zerfallsrate des i-ten Nuklids
μ	dynamische Viskosität
$\dot{\mu}$	Umsetzungsrate
$\dot{\mu}_e$	elementspezifische Umsetzungsrate
$\dot{\mu}_{eff}(\tau)$	relative effektive Mobilisierungsrate
$\dot{\mu}_{i,D}(\tau)$	Mobilisierungsrate für Nuklide durch Diffusion
$\dot{\mu}_K(\tau)$	Mobilisierungsrate für Nuklide durch Korrosion von Zement
ν	kinematische Viskosität
ρ	mittlere Dichte (ρ_S : Gestein, ρ_L : Lauge)

ρ_0	Anfangsdichte
σ	Standardabweichung der Behälterlebensdauer
σ	Quellterm (Chet)
τ	Zeitskala bei der Mobilisierung ($\tau = t - t_L$)
τ_B	maximale Behälterlebensdauer
$\tau_{B,i}$	vorgegebene maximale Behälterlebensdauer
τ_{Bm}	mittlere Behälterlebensdauer
τ_M	Umsetzungsdauer der Zementmatrix
$\tau_{M,e}$	elementspezifische Umsetzungsdauer der Zementmatrix
τ_{Mg}	Zeitpunkt des Verbrauchs von Magnesium
ϕ	Porosität
ϕ_r	Referenzporosität
ϕ_B	effektive Porosität der Behälter
ϕ_G	effektive Gesamtporosität im Segment
ϕ_S	Versatzporosität
$\phi_{S,K}$	effektive Porosität des Versatzes in einer Kammer
ψ	Winkel
Δx_t	Abstand zwischen zwei benachbarten Blockmittelpunkten

A.2 Glossar

ABFALLGEBINDE: Behälter mit radioaktivem Abfall.

ABFALLMATRIX: Teil des Abfallgebindes, in dem das radioaktive Inventar eingebettet ist. Die Matrix kann sowohl homogen als auch heterogen sein.

AKTIVITÄTSINVENTAR: In einem Abfallgebinde oder Segment enthaltenes Inventar an Radionukliden.

- **hypothetisches Aktivitätsinventar:** nur dem radioaktiven Zerfall unterliegendes Inventar eines Abfallgebindes ohne Abnahme durch Mobilisierungsvorgänge.

ANHYDRITSZENARIO: Szenario eines Laugenzutritts über den Hauptanhydrit in den schachtnahen Bereich des Mittelfeldes eines Bergwerkes im Steinsalz.

AUSBREITUNGSRECHNUNG: Berechnung der Nuklidausbreitung im Deckgebirge.

AUSPRESSPHASE: siehe Laugenbewegung.

AUSTAUSCHEFFEKTE: Im Grubengebäude modellierte Effekte, die zu einem Nuklidtransport führen können, der nicht von einem Druckgradienten angetrieben ist, sondern von Gastransport, Temperaturgradienten, Dichtegradienten oder Diffusion.

BEHÄLTERAUSFALL: Ausfall eines Behälters mit radioaktivem Abfall. Der Ausfall wird durch die relative Anzahl ausgefallener Behälter und die relative Ausfallrate beschrieben.

BEHÄLTERLEBENSDAUER: Unter der Behälterlebensdauer wird die Zeitdauer verstanden, nach der ein Behälter ausgefallen ist und der Lauge kein Hindernis mehr in Richtung zur Abfallmatrix bietet.

BETRIEBSPHASE: Dauer der Einlagerung radioaktiver Abfälle in einem Endlager.
Ende der Betriebsphase = Zeitpunkt, an dem die letzten Hohlräume des ehemaligen Endlagers versetzt worden sind.

DATENBIBLIOTHEK: Gesamtheit der Dateien mit den Eingangsgrößen für einen EMOS-Rechenlauf.

DIAPIRISMUS: Aufstieg eines Salzstockes infolge seiner Plastizität und der geringen Dichte des Salzgesteins.

DURCHSTRÖMUNGSPHASE: siehe Laugenbewegung.

EFFEKTE: Im Modul REPOS verwendeter Begriff für die Gesamtheit der physikalischen und chemischen Vorgänge, die im Grubengebäude ablaufen und die Nuklidfreisetzung beeinflussen.

EINLAGERUNGSZEITPUNKT: Zeitpunkt der Einlagerung des Abfalls in einem Einlagerungsort, bzw. Zeitpunkt, an dem ein Feld oder ein Teil des Feldes abgeworfen wird. Der

Bezugspunkt ist das Ende der Betriebsphase, der Einlagerungszeitpunkt also immer negativ.

ENDLAGERSYSTEM: Oberbegriff für ein System, das aus Nahbereich, Geosphäre und Biosphäre besteht, zur Berechnung der Nuklidfreisetzung, Nuklidausbreitung und Dosisbelastung.

ENDPOROSITÄT: Zustand eines Segmentes, bei dem der Versatz oder der Verschluß durch Gebirgskonvergenz so weit kompaktiert ist, daß er nur noch tote Poren enthält und für Lauge als undurchlässig angesehen werden kann.

FERNBEREICH: Gleichbedeutend mit der Geosphäre, d.h. dem Teil des Endlagersystems, in dem die Ausbreitung der Radionuklide durch das Grundwasser erfolgt.

FREISETZUNGSRECHNUNG: Berechnung der Nuklidfreisetzung aus einem Grubengebäude in das Deckgebirge mit Hilfe des Moduls REPOS.

GRUBENGEBÄUDE: Bergmännischer Begriff für ein System untertägiger, begehrbarer Hohlräume. Hier verwendet für den Nahbereich des Endlagers im tiefen Untergrund.

HAUPTKOMPONENTE: Teil des Endlagersystems (Nahbereich, Geosphäre oder Biosphäre).

HAW: Hochaktiver Abfall, meist in verglasten Form (high active waste).

JOB-INPUT-FILE: Datei mit den für einen Rechenlauf des Programmpakets EMOS notwendigen Steuerdaten.

KAVERNE: Speicherkaverne für flüssige oder gasförmige Medien, die bei der Aussolung durch Zufall ein ehemaliges Endlager mit radioaktiven Abfällen trifft und nach Ende ihrer Betriebsphase Nuklide freisetzt.

KOLLEKTIVDOSES: Dosisbelastung einer Gesamtpopulation durch kontaminiertes Wasser aus einer vorgegebenen Entnahmestelle.

KONVERGENZ: Durch den Gebirgsdruck verursachte Verformung des Gebirges und Eindringen in einen Hohlraum. Als Folge der Konvergenz können in einem Grubengebäude vorhandene Resthohlräume geschlossen werden.

LAUGENBEWEGUNG: Bei der Laugenbewegung in den Segmenten eines Grubengebäudes werden folgende Zustände unterschieden:

- **Zuflußphase:** Lauge strömt in ein leeres oder teilweise gefülltes Segment.
- **Durchströmungsphase:** Lauge strömt durch ein vollständig gefülltes Segment in ein angrenzendes Segment weiter.
- **Auspreßphase:** Lauge wird infolge der Gebirgskonvergenz aus einem Segment in angrenzende Segmente ausgepreßt. Im allgemeinen dreht sich dabei die Strömungsrichtung in Bezug auf die Durchströmungsphase um.

LAUGENNEST: Laugeneinschluß im Gebirge (Salzstock) mit einem begrenzten Volumen.

LAUGENZUTRITT: Bei Annahme eines Störfallszenarios kann Lauge in ein Endlager gelangen.

Dies kann auf folgende Weise modelliert werden:

kontinuierlicher Laugenzutritt aus dem Deckgebirge oder einem Laugennest,

spontaner Laugenzutritt: es wird angenommen, daß ein Segment spontan mit Lauge gefüllt ist (z.B. beim Kavernenszenario).

LAW: Schwachaktiver Abfall (low active waste).

MAW: Mittelaktiver Abfall (medium active waste).

MODUL: Teil des Programmpakets EMOS für eine Hauptkomponente des Endlagersystems. Als Teile gibt es die Module REPOS, CHET und EXPOS zur Beschreibung der Vorgänge im Grubengebäude, im Deckgebirge und der Biosphäre.

MONTE-CARLO-RAHMEN: Teil des Programmpakets EMOS. Bei probabilistischen Rechnungen wird das Monte-Carlo-Verfahren angewandt und EMOS für eine vorgegebene Stichprobenzahl durchlaufen. Der Monte-Carlo-Rahmen übernimmt die Zuweisung der aktuellen Werte an die unabhängigen und abhängigen Variablen.

NAHBEREICH: Diejenige Hauptkomponente des Endlagersystems, in der die radioaktiven Abfälle eingelagert sind. Für ein Endlager im Salz ist der Nahbereich mit dem Grubengebäude identisch.

NUKLIDAUSWAHL: Im Programmpaket EMOS vorhandene Möglichkeit, für ausgewählte Nuklide Daten aus einer Datenbasis mit nuklidspezifischen Daten zu übernehmen. Es kann in jedem Modul von EMOS mit einer beliebigen Teilmenge der Nuklide gerechnet werden, die in der Datenbasis vorhanden sind.

NUKLIDSPEZIFISCHE DATENBASIS: Datei in der Datenbibliothek, die für eine große Anzahl von Nukliden nuklidspezifische Daten, wie beispielsweise Halbwertszeiten und Zerfallsart enthält.

POLLUX-BEHÄLTER: Für die Einlagerung von Abfällen in Strecken vorgesehener Behältertyp, der gleichzeitig Transport- und Abschirmbehälter ist. Hauptsächlich für die Aufnahme von LWR-Brennelementen vorgesehen.

POLLUX-KOKILLE: Für die Einlagerung von LWR-Brennstäben in Bohrlöchern vorgesehene Kokille mit ähnlichen Abmessungen wie eine HAW-Kokille.

PORENVOLUMEN: siehe bei RESTHOHLRÄUME.

POROSITÄT: Definiert als Verhältnis von Porenvolumen zu Gesamtvolumen.

RESTHOHLRAUM: Nach dem Verfüllen eines Einlagerungsortes oder einer Strecke verbleibender Hohlraum im Versatz und/oder im eingelagerten Abfall.

SEGMENT: Teil eines Endlagers für die Modellierung innerhalb des Moduls REPOS. Ein Segment besteht im allgemeinen aus einem (versetzten) Hohlraum und einem Verschuß.

- **äußeres Segment:** In der Segmentstruktur eines Endlagers vor dem betrachteten Segment angeordnet, d.h. näher am Wurzelsegment als Laugenzutrittsort von der Geosphäre her. Das äußere Segment wird teilweise auch externes Segment (Index "ex" an der jeweils betrachteten Größe) genannt.
- **inneres Segment:** In der Segmentstruktur eines Grubengebäudes hinter dem betrachteten Segment angeordnet.
- **Tiefenabhängigkeit:** Bei mehrsöhligen Grubengebäuden Berücksichtigung der Teufe der einzelnen Sohlen.

SEGMENTSCHLEIFE: Rechenschleife zur Berechnung aller Ausgangsgrößen in den Segmenten und Abfallgebänden, die bei jedem Zeitschritt innerhalb der Zeitschleife von REPOS einmal durchlaufen wird.

SEGMENTSTRUKTUR: Verknüpfung der Segmente eines Endlagers, festgelegt im Struktur-Datenfile.

SORPTION: In dem vorliegenden Text für Adsorption verwendet. Die Modellierung erfolgt über das K_d -Konzept.

STÜTZWIRKUNG: Alle Effekte, die der Konvergenz des Gebirges und damit der Verkleinerung von Resthohlräumen in einem Endlager einen Widerstand entgegensetzen, z.B. durch die eingelagerten Behälter oder durch eingedrungene Lauge.

SUBROSION: Unterirdische Abtragung eines Salzstockes durch die Bewegung des Grundwassers.

VERSATZ: Füllmaterial in einem Bergwerk zum Verschließen aufgefahrener Hohlräume. In einem Bergwerk in Steinsalz dient hauptsächlich Salzgrus als Versatzmaterial.

WURZELSEGMENT: In der Segmentstruktur von REPOS an oberster Stelle angeordnetes Segment, das für den unbegrenzten Laugenzutritt die Kontaktstelle zur Geosphäre darstellt.

ZEITSCHRITTSTEUERUNG: Mechanismus zur Variation der Zeitschrittweite, um durch kleine Zeitschrittweiten eine ausreichende Rechengenauigkeit und durch möglichst große Zeitschrittweiten eine kurze Rechenzeit zu erreichen. Die Zeitschrittsteuerung in den Modulen REPOS und CHET erfolgt auf unterschiedliche Weise.

ZUFLUSSPHASE: siehe Laugenbewegung.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Einsatz von Computerprogrammen in der Langzeitsicherheitsanalyse und Bereitstellung von Eingangsdaten.	2
Abbildung 2:	Grobstruktur des Programmpakets EMOS.	5
Abbildung 3:	Programmablauf und Datenfluß bei einer deterministischen EMOS Rechnung.	8
Abbildung 4:	Programmablauf und Datenfluß bei einer Monte-Carlo-Simulation.	10
Abbildung 5:	Schematische Darstellung der Zeitachse für das Modul REPOS. t _B = Betriebsdauer des Endlagers t _L = Zeitpunkt des Laugenzutritts	18
Abbildung 6:	Mögliche Segmentstrukturen eines Grubengebäudes. Links: Baumstruktur. Rechts: Ringstruktur mit einer zusätzlichen Verbindung zwischen Segment 1 und Segment 2.	20
Abbildung 7:	Schematische Darstellung typischer Teilbereiche eines Grubengebäudes.	20
Abbildung 8:	Schematische Anordnung der Segmente und Abfallgebände in einem Grubengebäude. Die zeitliche Abarbeitung der entsprechenden Modelle erfolgt von unten nach oben (siehe Kapitel 2.3.3).	22
Abbildung 9:	Fließschema einer Freisetzungsrechnung mit dem Eingabeteil IREPOS und dem Rechenteil REPOS. Die Segmentschleife wird innerhalb der Zeitschleife bei jedem Zeitschritt einmal durchlaufen.	25
Abbildung 10:	Weitergabe von berechneten Ausgangsgrößen an benachbarte Segmente in Bezug zum zeitlichen Ablauf eines REPOS-Rechenlaufs.	29
Abbildung 11:	Schematischer Ablaufplan einer Freisetzungsrechnung mit dem Datenfluß zwischen den Modellen.	30
Abbildung 12:	Steuerung der Zeitschrittweite für kontinuierliche Prozesse.	33
Abbildung 13:	Steuerung der Zeitschrittweite unter Berücksichtigung diskontinuierlicher Prozesse.	37
Abbildung 14:	Beispiele für Behälter mit radioaktiven Abfällen. a) Kokille für LWR-Brennelemente, b) Rollsickenfaß für zementierte Abfälle, c) Pollux-Behälter für LWR-Brennelemente. Alle Maßangaben sind in mm.	46
Abbildung 15:	Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate bei gleichverteilter Lebensdauer der Behälter.	47
Abbildung 16:	Variation der maximalen Behälterlebensdauer τ_B als Funktion des Zeitpunktes des Laugenzutritts.	48
Abbildung 17:	Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate bei exponentialverteilter Lebensdauer der Behälter. τ_{Bm} : mittlere Behälterlebensdauer	49

Abbildung 18:	Anteil ausgefallener Behälter n_B und Behälterausfallrate bei normalverteilter Lebensdauer der Behälter.	50
Abbildung 19:	Temperaturverlauf und Mobilisierungsrate für verglaste Abfallgebände.	52
Abbildung 20:	Qualitativer Verlauf der Mobilisierungsrate im Mobilisierungsmodell MOBZ6 bei gleichverteilter Lebensdauer der Behälter sowie $\tau_M > \tau_B$	55
Abbildung 21:	Mobilisierungsrate in zementierten Abfallgebänden bei begrenzten Laugemengen in Modell MOBZ7.	57
Abbildung 22:	Aufbau einer HTR-Brennelementkugel.	58
Abbildung 23:	Mobilisierungszonen eines HTR-Brennelementes.	59
Abbildung 24:	Mobilisierungsraten aus den einzelnen Bereichen (1 bis 4) eines HTR-Brennelementes im Modell MOBH1.	60
Abbildung 25:	Mobilisierungsraten in den einzelnen Bereichen (1 bis 3) eines LWR-Brennelementes im Modell MOBL1.	62
Abbildung 26:	Konvergenz eines versetzten Hohlraumes und das Zusammenwirken der beteiligten Prozesse.	69
Abbildung 27:	Eingangsgrößen zur Laugendruckberechnung.	70
Abbildung 28:	Berechnung des Aktivitätsstroms, der durch konvektiven Laugenaustausch bewirkt wird.	71
Abbildung 29:	Ablaufplan eines Segmentmodells.	73
Abbildung 30:	Schematische Darstellung eines Bohrlochs mit eingelagertem Abfall und Bohrlochverschluß. Zusätzlich angedeutet ist der Laugenzutritt aus einem Laugennest im Nahbereich des Bohrlochs.	77
Abbildung 31:	Schematische Darstellung der in einem Bohrlochmodell behandelten physikalischen und chemischen Effekte.	79
Abbildung 32:	Einlagerungskammer für schwach- und mittelaktive Abfälle.	81
Abbildung 33:	Schematische Darstellung der in einem Kammermodell berücksichtigten physikalischen und chemischen Effekte.	82
Abbildung 34:	Einlagerungsstrecke für Pollux-Behälter und MAW-Großbehälter.	84
Abbildung 35:	Schematische Darstellung der in einer Einlagerungsstrecke behandelten physikalischen und chemischen Effekte.	85
Abbildung 36:	Strecke mit Verschluß, bzw. Damm und Zusatzvolumen.	91
Abbildung 37:	Schematische Darstellung der in den Modellen für Verbindungsstrecken berücksichtigten physikalischen und chemischen Effekte.	92
Abbildung 38:	Modellierung eines Laugennestes und berücksichtigte Effekte.	96
Abbildung 39:	Schematische Darstellung des Mittelfeldes eines Grubengebäudes, wobei die gesamte Infrastruktur, z.B. Werkstätten, Wendelstrecken usw., durch ein Zusatzvolumen repräsentiert wird.	97

Abbildung 40:	Schematischer Überblick der im Mittelfeld modellierten physikalischen und chemischen Effekte.	99
Abbildung 41:	Schematische Darstellung des Modellvolumens und der modellierten Effekte.	102
Abbildung 42:	Darstellung des Kavernenszenarios. Eine für Speicherzwecke gespülte Kaverne trifft auf ein ehemaliges Endlager radioaktiver Abfälle; die Abfallgebände fallen in den Sumpf der Kaverne.	103
Abbildung 43:	Schematische Darstellung der beiden Segmentmodelle für den Speicherraum und den Sumpf und der jeweils berücksichtigten Effekte.	104
Abbildung 44:	Schematische Darstellung des Subrosionsszenarios.	106
Abbildung 45:	Zeitliche Temperaturverläufe für verschiedene Stellen in einem Bohrloch mit hochaktivem Abfall. 1: Bohrlochachse (Mobilisierung) 2: Bohrlochmantel (Konvergenz des Bohrlochinhalt) 3: Bohrlochverschlußachse, Mitte (Verschlußkonvergenz)	113
Abbildung 46:	Räumlicher Temperaturverlauf entlang einer Richtstrecke des Bohrlochfeldes mit hochaktivem Abfall für unterschiedliche Zeiten.	114
Abbildung 47:	Verlauf des druckabhängigen Anteils der Konvergenzrate f_1 für unterschiedliche Werte des Gebirgsdrucks p_G	117
Abbildung 48:	Verlauf des porositätsabhängigen Anteils der Konvergenzrate f_2 bei einer Referenzporosität von 0,3.	118
Abbildung 49:	Verlauf des temperaturabhängigen Anteils der Konvergenzrate $f_3(T)$	119
Abbildung 50:	Zeitverläufe der Porositäten in Teilbereichen des Endlagers mit unterschiedlichen Temperaturen.	122
Abbildung 51:	Darstellung des Laugenstromes und des Versatzwiderstandes des Segmentes j :	125
Abbildung 52:	Beispiel einer Segmentstruktur. Die Größe $k(i)$ bezeichnet das äußere Nachbarsegment eines herausgegriffenen Segments i , während die inneren Nachbarsegmente mit $j(i)$ bezeichnet sind. Die Skallerung x_1 , x_2 und x_3 deutet die unterschiedliche Teufe der Segmente an. Mit sind die Stellen markiert, an denen die Laugenströme berechnet werden (siehe Kapitel 5.4.3).	130
Abbildung 53:	Schematische Darstellung zweier benachbarter Segmente.	136
Abbildung 54:	Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 2. Das Segment i ist vollständig mit Lauge gefüllt, die Segmente j befinden sich in der Zuflußphase.	138
Abbildung 55:	Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 3.	138
Abbildung 56:	Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 4.	140
Abbildung 57:	Beispiel einer Segmentanordnung für den Fall 5.	140

Abbildung 58:	Korrosionsrate und korrodierte Metallmasse als Funktion der Zeit. Die verwendeten Größen sind:	149
Abbildung 59:	Geschwindigkeitsfeld der durch Dichtegradienten erzeugten Laugenströmung.	156
Abbildung 60:	Geschwindigkeitsfeld einer durch konstanten Gasstrom induzierten Laugenströmung. Der Laugenstrom an der Oberkante wird durch den in dieselbe Richtung zeigenden Gasstrom verursacht.	162
Abbildung 61:	Linien gleicher Konzentration für den Nuklidtransport durch Temperaturgradienten bei voll ausgebildeter Strömung und konstantem Konzentrationsgradienten in x_1 -Richtung.	165
Abbildung 62:	Linien gleicher Konzentration für den durch Gastransport induzierten Nuklidtransport bei konstantem Konzentrationsgradient in x_1 -Richtung.	167
Abbildung 63:	Ausschnitt aus dem Segment mit Zuordnung der Flüsse	174
Abbildung 64:	Schematische Darstellung der im Modul REPOS berücksichtigten Baumstruktur von Zerfallsketten.	177
Abbildung 65:	Vergleich zwischen Langmuir- (oben) und Freundlich-Isothermen (unten)	189
Abbildung 66:	Retardationsfaktoren in Abhängigkeit der Schadstoffkonzentration für Sorption nach Langmuir (oben) und Freundlich (unten)	190
Abbildung 67:	Ausschnitt aus dem Transportweg mit Zuordnung der Parameter	194
Abbildung 68:	Iterationsschema der Kopplung von Sorption und Transport in CHET2 ...	201
Abbildung 69:	Fließschema einer Transportrechnung mit CHET2	210
Abbildung 70:	Expositionspfade in der Biosphäre.	218
Abbildung 71:	Eingabe- und Ausgabedateien des Moduls EXPOS.	222
Abbildung 72:	Ein- und Ausgabedateien von EMOS.	301

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Beispiele für den Inhalt der Eingabedateien aus der Datenbibliothek für einen REPOS-Rechenlauf. In Klammern die Namen der Dateien (siehe Kapitel 8). 26
Tabelle 3:	Modelle für Einlagerungsstrecken. 86
Tabelle 4:	Modelle für Verbindungsstrecken. 90
Tabelle 5:	Segmentmodelle für spezielle Szenarien. 101
Tabelle 6:	Beispiele für Konvergenzreduktionsfaktoren f_r für trockene und nasse Umgebungsbedingungen. 120
Tabelle 7:	Parameter für Abbildungen 65 und 66 188
Tabelle 8:	Ausgabedateien von REPOS. 300
Tabelle 9:	Die Ausgabedateien von CHET. 300
Tabelle 10:	Die Ausgabedateien von EXPOS. 302
Tabelle 11:	Die Ausgabedateien für eine probabilistische Rechnung. 302

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

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

Forschungsinstitute
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de