

Das eindimensio-
nale Transport-
programm
CHET1 unter
Berücksichtigung
der Sorption nach
dem K_d -Konzept



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

**Das eindimensio-
nale Transport-
programm
CHET1 unter
Berücksichtigung
der Sorption nach
dem K_d -Konzept**

T. Kühle, F. Zude, L. Lührmann

**Braunschweig
März 1996**



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

Institut für Tieflagerung

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 modelimäßige 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 Einzelnuklide, 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 Nuklide 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 Nuklide 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 Eintagerungsstrecken 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 Laugemengen 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 Größräumigkeit 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	Einleitung	1
2	Physikalische und numerische Grundlagen	2
2.1	Beschreibung des Transports	2
2.1.1	Transportmechanismen	3
2.1.2	Rückhaltungsmechanismus	5
2.1.3	Quellen und Senken	5
2.2	Transportgleichung	6
2.3	Lösung der Transportgleichung	7
2.3.1	Verwendete Lösungsmethode	7
2.3.2	Behandlung von Unstetigkeitsstellen	9
2.3.3	Lösungsalgorithmus	10
2.3.4	Algorithmus für die Randblöcke und den Quellblock	12
2.3.5	Berechnung des Zerfalls	13
2.3.6	Numerische Probleme	13
2.3.7	Korrektur für die numerische Dispersion	15
3	Ablauf einer Transportrechnung	16
3.1	Eingabe und Überprüfung der Eingangsdaten	16
3.2	Vorbereitung der Rechnung	19
3.2.1	Ortsdiskretisierung	19
3.2.2	Berechnung von Retardationsfaktoren	20
3.2.3	Aufteilung der Nuklide in Nuklidketten	21
3.2.4	Zeitschrittweitenberechnung	21
3.3	Transportrechnung	22
3.3.1	Bestimmung der Einstromrate	22
3.3.2	Bestimmung der Konzentration zum neuen Zeitpunkt	23
3.3.3	Ausgabe auf Datenfiles	23
3.4	Protokoll des Rechenlaufs	24
4	Verifizierung	25
4.1	Testreihe 1: Vergleich mit der analytischen Lösung	25
4.1.1	Analytische Lösungen	26
4.1.2	Ausgewählte Beispiele	26
4.1.3	Beispiel 1: Vergleich der analytischen Lösungen untereinander	27
4.1.4	Beispiel 2: Rechnungen ohne Korrektur der numerischen Dispersion	28
4.1.5	Beispiel 3: Rechnungen mit einer Quelle, die nicht am Rand des Modellgebiets liegt	29
4.1.6	Beispiel 4: Rechnungen mit Korrektur der numerischen Dispersion	30
4.2	Testreihe 2: Vergleich für einen realistischen Fall	31
4.2.1	Stufe 1: δ -Impuls als Nuklidquelle	33
4.2.2	Stufe 2: Variation der Diskretisierung	33
4.2.3	Stufe 3: Aufbau von Tochternukliden	34

4.2.4	Stufe 4: Realistischer Freisetzungsvorlauf	36
4.2.5	Stufe 5: Berücksichtigung nicht gerechneter Mutternuklide	36
4.3	Testreihe 3: Vergleich für ein heterogenes Modellgebiet	37
4.3.1	Beschreibung des Modells	37
4.3.2	Beispiel 1: Rechnung für I-129	38
4.3.3	Beispiel 2: Rechnung für U-235	38
5	Benutzerhinweise	40
5.1	Zeitdiskretisierung	40
5.2	Wahl der Gitter-Pecletzahl	40
5.3	Korrektur für die numerische Dispersion	43
5.4	Ausgabe von kumulierten Mengen	43
6	Literaturverzeichnis	44
	Anhang 1: Beschreibung der COMMON Blöcke	46
	Anhang 2: Bestimmung der Maxima der analytischen Lösungen	64
	1. Maximum von Lösung 2:	64
	2. Maximum von Lösung 3:	64
	Abbildungsverzeichnis	67
	Tabellenverzeichnis	69

1 Einleitung

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 kann nun das Deckgebirge durch einen eindimensionalen Transportweg mit konstantem Volumenstrom, veränderlichem Querschnitt und variablen Materialeigenschaften repräsentiert werden.

Für die Modellierung eines solchen eindimensionalen Radionuklidtransports ist das Rechenprogramm CHET entwickelt 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 Rückhaltung,
- 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 als Modul zum Einbau in das Programmpaket EMOS [1] konzipiert. EMOS ist ein Prognoseprogramm, das die Vorgänge in den Teilsystemen Grubengebäude, Deckgebirge und Biosphäre nacheinander behandelt und als Endergebnis die resultierende Individualdosis liefert. Dementsprechend werden die in REPOS berechneten Freisetzungsraten als Nuklideingangs-

ströme verwendet. Die Zeitverläufe der Konzentrationen am Beobachtungsort werden zur Weiterverarbeitung an EXPOS übergeben.

CHET wird in mehreren Stufen entwickelt. Es wird angestrebt, mit CHET eine sehr variable Modellierung der Rückhaltung zu ermöglichen, ein flexibles und leistungsfähiges numerisches Verfahren zur Verfügung zu stellen und Übersichtlichkeit sowie Ausbaubarkeit zu gewährleisten. Im folgenden ist die Entwicklungsstufe CHET1 beschrieben, in der ein explizites Differenzenverfahren angewendet wird und ein lineares Sorptionskonzept (K_d -Konzept) zur Beschreibung der Schadstoffrückhaltung eingesetzt wird.

In diesem Bericht werden zuerst die physikalischen Grundlagen behandelt, die den Radionuklidtransport im Deckgebirge bestimmen und daher auch Grundlage des vorliegenden Programms sind.

Anschließend wird der Ablauf einer Transportrechnung mit dem Programm CHET1 beschrieben. Dabei wird besonders auf Einzelheiten der Realisierung und auf die Funktion von verschiedenen automatisch arbeitenden Voreinstellungen und Korrekturen eingegangen.

Im darauf folgenden Kapitel werden die Arbeiten zur Verifizierung des vorliegenden Rechenprogramms beschrieben.

In einem abschließenden Kapitel werden dem Benutzer Anleitungen und Hinweise zur sinnvollen Anwendung des Rechenprogramms gegeben.

Eine vollständige Input-Beschreibung findet sich in Kapitel 8 des Berichtes über das Programmpaket EMOS, Version 5 [1]. Die weiterentwickelte Version CHET2 wird in einem anderen Abschlußbericht dieses Vorhabens beschrieben [2].

2 Physikalische und numerische Grundlagen

Im folgenden werden zuerst die beim Transport wirksamen Effekte erläutert und die eindimensionale Transportgleichung aufgestellt. Anschließend wird der in CHET1 verwendete Lösungsalgorithmus einschließlich der Realisierung der Randbedingungen beschrieben. Weiterhin wird auf die Konvergenz des gewählten Lösungsverfahrens eingegangen.

2.1 Beschreibung des Transports

In diesem Unterkapitel werden die Effekte erläutert, die beim Transport von Radionukliden durch ein gesättigtes 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.

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:

$$u = \frac{\dot{V}}{nA} \quad (1)$$

- u Abstandsgeschwindigkeit des Fluids [m/a],
 $\dot{V}$ Volumenstrom [m³/a],
 n Porosität,
 A Querschnittsfläche des Aquifers senkrecht zum Transportweg [m²].

In die Berechnung der Abstandsgeschwindigkeit geht die Porosität n ein, die als Anteil des Porenraums 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 [3]. 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** [3].

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.

$$D_h = \alpha u, \quad (2)$$

D_h hydraulischer Dispersionskoeffizient [m^2/a],
 α longitudinale Dispersionslänge [m].

Die Gültigkeit des Fickschen Ansatzes wird durch zahlreiche Säulenversuche als praktikabel bestätigt [3].

Die Bestimmung der Dispersionslänge stellt in großräumigen geologischen Systemen ein noch nicht gelöstes Problem dar [4]. 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:

$$D = D_m + \alpha u. \quad (3)$$

2.1.2 Rückhaltungsmechanismus

In CHET1 wird zur Beschreibung der Rückhaltung das K_d -Konzept verwendet. Dies 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:

$$K_d = \frac{c_{ad}}{c} \quad (4)$$

c_{ad} Konzentration des am Gestein adsorbierten Radionuklids [Bq/kg],

c Konzentration des Radionuklids in Lösung [Bq/m³].

Der mobile Anteil a eines Radionuklids steht mit dem K_d -Wert in folgender Beziehung:

$$a = \frac{1}{1 + \frac{1-n}{n} \rho K_d} \quad (5)$$

a mobiler Anteil eines Radionuklids,

ρ Gesteinsdichte [kg/m³],

n Porosität.

Der mobile Anteil entspricht genau dem reziproken Retardationsfaktor R , der die Verzögerung eines Radionuklids gegenüber dem Fluid beschreibt [3]:

$$R = \frac{u}{u_{RN}} = 1 + \frac{1-n}{n} \rho K_d \quad (6)$$

u_{RN} Abstandsgeschwindigkeit des Radionuklids [m/a].

2.1.3 Quellen und Senken

Als Quellen bzw. Senken werden alle Effekte außer den Transportmechanismen selbst und dem Rückhaltermechanismus 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.

2.2 Transportgleichung

Zur allgemeinen Herleitung der Transportgleichung siehe [3], [5] und [6]. Für CHET1 wurde die in [3] 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 [3] ergänzt. Die eindimensionale Transportgleichung lautet dann:

$$\frac{\partial}{\partial t}(nAR_k c_k) = \frac{\partial}{\partial x} \left(nAD \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (nAuc_k) + \sigma_k A - \lambda_k nA \left(R_k c_k - \sum_{k'} R_{k'} c_{k'} \right), \quad (7)$$

Speicherung Dispersion Advektion Quelle radioaktiver Zerfall

t	Zeit [a],
x	Ortskoordinate [m],
$c_k(x,t)$	Konzentration des Radionuklids k in Lösung [Bq/m ³],
$n(x)$	Porosität,
$A(x)$	Querschnittsfläche des Aquifers senkrecht zum Transportweg [m ²],
$R_k(x)$	Retardationsfaktor des Radionuklids k ,
$D(x)$	Dispersionskonstante nach [3] [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 .

Die Transportgleichung (7) ist formal eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung vom parabolisch-hyperbolischen Typ mit den unabhängigen Variablen x und t . Eine detaillierte Klassifizierung [3], [7] 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 [8]). Dies läßt sich mathematisch so ausdrücken:

$$\left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x=L} = 0, \quad (8)$$

L Gesamtlänge des Transportwegs [m].

2.3 Lösung der Transportgleichung

Die Transportgleichung wird nach der Methode der Finiten Differenzen gelöst. Im folgenden wird dieses Lösungsverfahren zunächst kurz erläutert. Anschließend wird der Lösungsalgorithmus aufgestellt. Zum Schluß wird auf einige numerische Probleme eingegangen.

2.3.1 Verwendete Lösungsmethode

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 [7]. Die zur Lösung der Differentialgleichung aufgestellte Differenzengleichung ist konsistent, wenn der Fehler, der bei der Approximation der Differentialoperatoren durch Differenzenquotienten unter Vernach-

lössung 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 exakte Lösung der zugehörigen Differentialgleichung konvergiert [7], [9]. Bei parabolischen Differentialgleichungen sind Stabilität und Konsistenz notwendige und hinreichende Bedingungen für Konvergenz [7].

Im Falle von CHET1 wurde für die Zeitdiskretisierung 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 2.3.6 genannt werden, ist dieser Lösungsalgorithmus stabil.

Zur Lösung der Transportgleichung (7) 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 n_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 1 zeigt einen Ausschnitt aus der Unterteilung des Transportweges mit einer Zuordnung der Parameter sowie die Flüsse, die zur Konzentrationsveränderung in einem beliebigen Block i führen.

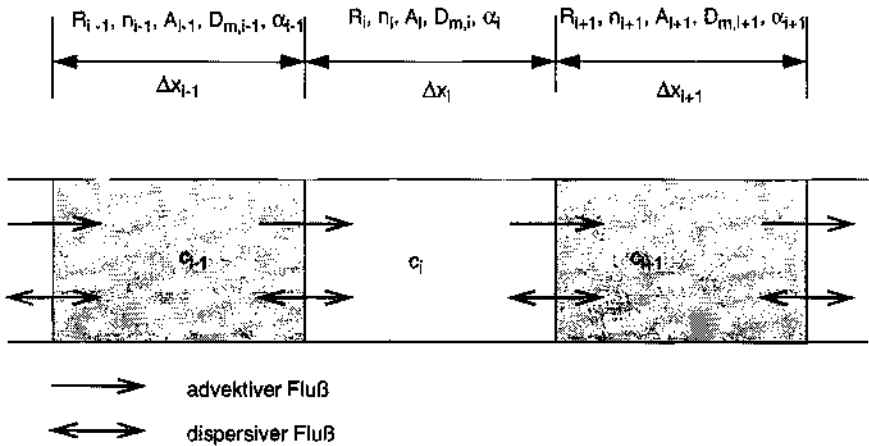


Abbildung 1: Ausschnitt aus dem Transportweg mit Zuordnung der Parameter

Folgende Hilfsgrößen finden bei der Lösung der Transportgleichung Verwendung:

- Porenvolumen: $V_i = n_i A_i \Delta x_i$,
- Abstand zwischen zwei benachbarten Blockmittelpunkten: $\Delta x_i = \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2}$.

2.3.2 Behandlung von Unstetigkeitsstellen

Im letzten Kapitel wurden die Parameter in den Blöcken definiert. Wird eine zentrale Differenz zum Ersetzen der zweiten Ableitung in (7) verwendet, so muß die Größe des Parameters nAD an der Blockgrenze bekannt sein [10].

Im folgenden wird ein Massenfluß, beschrieben durch eine Variable P (z.B. nAD), an einer Blockgrenze g zwischen zwei aufeinanderfolgenden Blöcken $i-1$ und i betrachtet [4]. Aus der Kontinuitätsbedingung folgt, daß die dispersiven Flüsse rechts und links der Grenze g gleich sind:

$$P_{i-1} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g = P_i \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_i^g. \quad (9)$$

Der Satz von Taylor liefert:

$$c_g - c_{i-1} = \frac{\Delta x_{i-1}}{2} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g + \dots \quad (10)$$

$$c_i - c_g = \frac{\Delta x_i}{2} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_i^g + \dots \quad (11)$$

Wird (9) in (11) eingesetzt und zu (10) addiert, so ergibt sich:

$$c_i - c_{i-1} = \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g \left[\frac{\Delta x_i P_{i-1}}{2 P_i} + \frac{\Delta x_{i-1}}{2} \right]. \quad (12)$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g = \frac{2 (c_i - c_{i-1}) P_i}{\Delta x_i P_{i-1} + \Delta x_{i-1} P_i}. \quad (13)$$

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 (9):

$$P_i \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_i^g = \bar{P} \frac{c_i - c_{i-1}}{\frac{1}{2} \Delta x_{i-1} + \frac{1}{2} \Delta x_i} = P_{i-1} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1}^g \quad (14)$$

Durch Einsetzen von (13) in (14) wird ein Mittelwert für den an der Blockgrenze gültigen Parameter $\bar{P}$ erhalten:

$$\bar{P} = \frac{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) P_{i-1} P_i}{\Delta x_i P_{i-1} + \Delta x_{i-1} P_i} \quad (15)$$

Dieser Mittelwert entspricht einem gewichteten harmonischen Mittel, dessen allgemeine Definition für eine beliebige Größe a lautet:

$$\frac{\Delta x_i}{a} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x_{i-1}}{a_{i-1}} + \frac{\Delta x_i}{a_i} \right) \quad (16)$$

Wird das Verfahren auf den dispersiven Massenfluß angewendet, so folgt:

$$\overline{(nAD)}_i = \frac{n_{i-1} A_{i-1} D_{i-1} + n_i A_i D_i (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)}{n_{i-1} A_{i-1} D_{i-1} \Delta x_i + n_i A_i D_i \Delta x_{i-1}} \quad (17)$$

2.3.3 Lösungsalgorithmus

Die eindimensionale Transportgleichung (7) 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.

Für die zeitliche Ableitung wird eine Vorwärtsdifferenz eingesetzt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (nARc) = n_i A_i R_i \frac{c_i(t + \Delta t) - c_i(t)}{\Delta t} \quad (18)$$

Die Ortsableitungen werden zum Zeitpunkt t betrachtet. Dadurch erhält man ein explizites Lösungsverfahren.

Die erste Ortsableitung wird durch eine Rückwärtsdifferenz ersetzt ("up-wind" Schema):

$$\frac{\partial}{\partial x}(nAuc) = \dot{V} \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x_i} \quad (19)$$

Für die zweite Ortsableitung wird eine zentrale Differenz eingesetzt:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(nAD \frac{\partial c}{\partial x} \right) = (\overline{nAD})_{i+1} \frac{c_{i+1}(t) - c_i(t)}{\Delta x_{i+1} \Delta x_i} - (\overline{nAD})_i \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x_i \Delta x_i} \quad (20)$$

Durch Einsetzen von (18), (19) und (20) in (7) 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:

$$\begin{aligned} c_i(t + \Delta t) = c_i(t) + & \left[\left(1 + \frac{(\overline{nAD})_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) c_{i-1} \right. \\ & + \left(-1 - \frac{(\overline{nAD})_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} - \frac{(\overline{nAD})_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) c_i \\ & \left. + \left(\frac{(\overline{nAD})_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} \right) c_{i+1} \right] \frac{\dot{V} \Delta t}{V_i R_i(t + \Delta t)} \end{aligned} \quad (21)$$

Zur Vereinfachung der Gleichung werden folgende Hilfsgrößen eingeführt:

$$\begin{aligned} H_{1,i} &= \left(1 + \frac{(\overline{nAD})_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) \frac{\dot{V}}{V_i}, \\ H_{2,i} &= \left(-1 - \frac{(\overline{nAD})_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} - \frac{(\overline{nAD})_i}{\dot{V} \Delta x_i} \right) \frac{\dot{V}}{V_i}, \\ H_{3,i} &= \frac{(\overline{nAD})_{i+1}}{\dot{V} \Delta x_{i+1}} \frac{\dot{V}}{V_i}. \end{aligned} \quad (22)$$

In jedem Zeitschritt wird nach (21) für jeden Block die Konzentration $c_i(t + \Delta t)$ aus den bekannten Konzentrationen $c_i(t)$ berechnet.

Die Anfangsbedingung für die Rechnung lautet:

$$c_i(t=0) = 0 \quad \text{für alle } i.$$

2.3.4 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 (21) zu:

$$c_1(t+\Delta t) = c_1(t) + \left[\left(-1 - \frac{(\overline{nAD})_2}{V\Delta x_2} \right) c_1(t) + \left(\frac{(\overline{nAD})_2}{V\Delta x_2} \right) c_2(t) \right] \frac{V\Delta t}{V_1 R_1} \quad (23)$$

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 (8) läßt sich die Konzentration $c_{n+1}(t)$ wie folgt berechnen:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{c_{n+1}(t) - c_n(t)}{\Delta x_{n+1} \Delta x_n} - \frac{c_n(t) - c_{n-1}(t)}{\Delta x_n \Delta x_n} = 0, \quad (24)$$

Da $\Delta x_{n+1} = \Delta x_n$, folgt:

$$c_{n+1}(t) = 2c_n(t) - c_{n-1}(t). \quad (25)$$

Durch Einsetzen von (25) in (21) ergibt sich die Konzentration im letzten Block $c_n(t+\Delta t)$ zu:

$$c_n(t+\Delta t) = c_n(t) + (c_{n-1}(t) - c_n(t)) \frac{V\Delta t}{V_n R_n}. \quad (26)$$

Ein Radionuklideintrag findet in einem beliebigen Block statt und wird während eines Zeitschritts als konstant angenommen. Damit ergibt sich für den entsprechenden Term der Transportgleichung (7):

$$\sigma A = \frac{q(t)}{\Delta x_1}, \quad (27)$$

$q(t)$ Radionuklideinstromrate [Bq/a].

Zur Konzentration in dem Block, in dem der Radionuklideintrag angenommen wird, muß somit $\frac{q(t)}{V_l R_l} \Delta t$ addiert werden.

2.3.5 Berechnung des Zerfalls

Die Änderung $Z_i(c_{i,k}(t), c_{i,k'}(t), \Delta t)$ der Konzentration in einem Block durch den radioaktiven Zerfall wird für einen Zeitschritt Δt analytisch berechnet [1]:

$$\begin{aligned} Z_i(c_i(t), c_{i,k'}(t), \Delta t) = & -c_i(t) + c_i(t) e^{-\lambda_k \Delta t} \\ & + \sum_j \frac{k' R_{i,j}}{R_l} \left(c_{i,j}(t + \Delta t) - c_{i,j}(t) e^{-\lambda_k \Delta t} \right) \frac{\lambda_k}{\lambda_k - \lambda_j} \\ & + \sum_{j=1}^{k''} \sum_l \frac{k'' R_{i,l}}{R_l} \left(c_{i,l}(t + \Delta t) - c_{i,l}(t) e^{-\lambda_k \Delta t} \right) \frac{\lambda_k}{\lambda_k - \lambda_l} \frac{\lambda_l}{\lambda_j - \lambda_k} + \dots \end{aligned} \quad (28)$$

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 berechnet:

$$c_i(t + \Delta t) = c_i(t + \Delta t) + Z_i(c_i(t + \Delta t), c_{i,k'}(t + \Delta t), \Delta t) \quad (29)$$

wobei $c_i(t + \Delta t)$ die Konzentration bezeichnet, die man nach Abschluß der Transportberechnung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ erhält.

2.3.6 Numerische Probleme

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.

Zur Betrachtung von numerischen Instabilitäten wird der einfachste denkbare Fall betrachtet:

- α, n, A, D_m, u, R konstant,
- $\Delta x_i = \Delta x_l = \Delta x_{i+1} = \Delta x$,
- $c_{i+1}(t) = c_{i-1}(t) = 0$ für $t = t_0$,
- $c_i(t) = 1$ für $t = t_0$.

Der Lösungsalgorithmus läßt sich darstellen durch:

$$R \frac{c_i(t + \Delta t) - c_i(t)}{\Delta t} = -u \frac{c_i(t) - c_{i-1}(t)}{\Delta x} + D \frac{c_{i-1}(t) - 2c_i(t) + c_{i+1}(t)}{(\Delta x)^2}. \quad (30)$$

Während des Zeitschritts Δt wird nun im Block i die Konzentration durch Advektion und Dispersion verringert. Aus der Forderung, daß nach dem Zeitschritt die Konzentration nicht negativ werden darf, ergibt sich folgende Bedingung:

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2 R}{2D + u \Delta x}. \quad (31)$$

Dies ist eine notwendige Bedingung für die Stabilität der numerischen Lösung. Somit ist eine obere Schranke für die Anwendung der Differenzengleichung (21) gegeben.

Diese Bedingung enthält auch das **Courantkriterium** [11], das sich ergibt, wenn man den dispersiven Term vernachlässigt, also nur den advektiven Transport betrachtet:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x R}{u}. \quad (32)$$

Weiterhin ist in (31) das **Neumannkriterium** [11] enthalten, bei dem nur der disperse bzw. diffusive Nuklidtransport betrachtet wird:

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2D} R. \quad (33)$$

Das Neumannkriterium fordert, daß während eines Zeitschrittes die dispersiven Massenflüsse den Konzentrationsgradienten nicht umkehren können.

Beim Ersetzen der partiellen Ableitungen durch Differenzenquotienten entstehen Fehler, die mit dem größten Glied der abgebrochenen Taylorentwicklung charakterisiert werden. In der vereinfachten Transportgleichung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} + D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (34)$$

treten als wesentliche Fehler Ausdrücke der Form

$$\frac{1}{2}u\Delta x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \text{und} \quad -\frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \quad (35)$$

auf. Bei der rein advektiven Transportgleichung geht der zweite Term in $-\frac{1}{2}u^2\Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ über. Die damit entstehenden Ausdrücke

$$\frac{1}{2}u\Delta x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \text{und} \quad -\frac{1}{2}u^2\Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (36)$$

werden als **numerische Dispersion** aus der Ortsdiskretisierung und der Zeiddiskretisierung bezeichnet [3], [5], [12].

Die numerische Dispersion aus der Zeiddiskretisierung 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 **Gitterpecletzahl** hilfreich [3], [5], [6], [13]:

$$Pe = \frac{u\Delta x}{D} = \frac{\Delta x}{\alpha}. \quad (37)$$

Sie gibt das Verhältnis von Advektion zu Dispersion wieder. Eine Gitterpecletzahl von zwei bedeutet, daß die numerische Dispersion aus der Ortsdiskretisierung genau die gleiche Größe wie die physikalische Dispersion hat.

2.3.7 Korrektur für die numerische Dispersion

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 (35) beschriebene numerische Dispersion auf. Zu ihrer Unterdrückung wird die im Job-Input-File gegebene, gewünschte Dispersionslänge so korrigiert [4] [14], daß sich insgesamt die richtige Dispersion ergibt:

$$\alpha_{j,k}^K = \alpha_j^J - \frac{1}{2} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{u}{R_k} \Delta t, \quad (38)$$

$\alpha_{j,k}^K$ korrigierte Dispersionslänge,
 α_j^J im Job-Input-File angegebene Dispersionslänge.

3 Ablauf einer Transportrechnung

Das Rechenprogramm CHET1 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 2 graphisch dargestellt. Im folgenden werden die einzelnen Arbeitsschritte der beiden Programmteile näher erläutert.

3.1 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 CHET1 wird unterschieden zwischen Daten zur Steuerung des Rechenlaufs, die sich im Input-Datenfile(JIF)-Teilbereich für CHET1 befinden, und Daten zur Charakterisierung des Transportweges, die in insgesamt drei Datenfiles zusammengestellt sind. Sowohl das Job-Input-File als auch die Datenfiles sind in Kapitel 8 des EMOS-Berichts [1] ausführlich beschrieben.

Aus dem Input-Datenfile werden zuerst die Daten zur Steuerung des Rechenlaufes eingelesen: die Pfadnamen der Datenfiles, 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.

Das File DACH enthält die Daten zur Charakterisierung und Unterteilung des Transportweges. Hierzu gehören:

- die Gesamtlänge des Modellgebiets,
- die Transportzeit durch das Modellgebiet.

Darüberhinaus enthält das File 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.

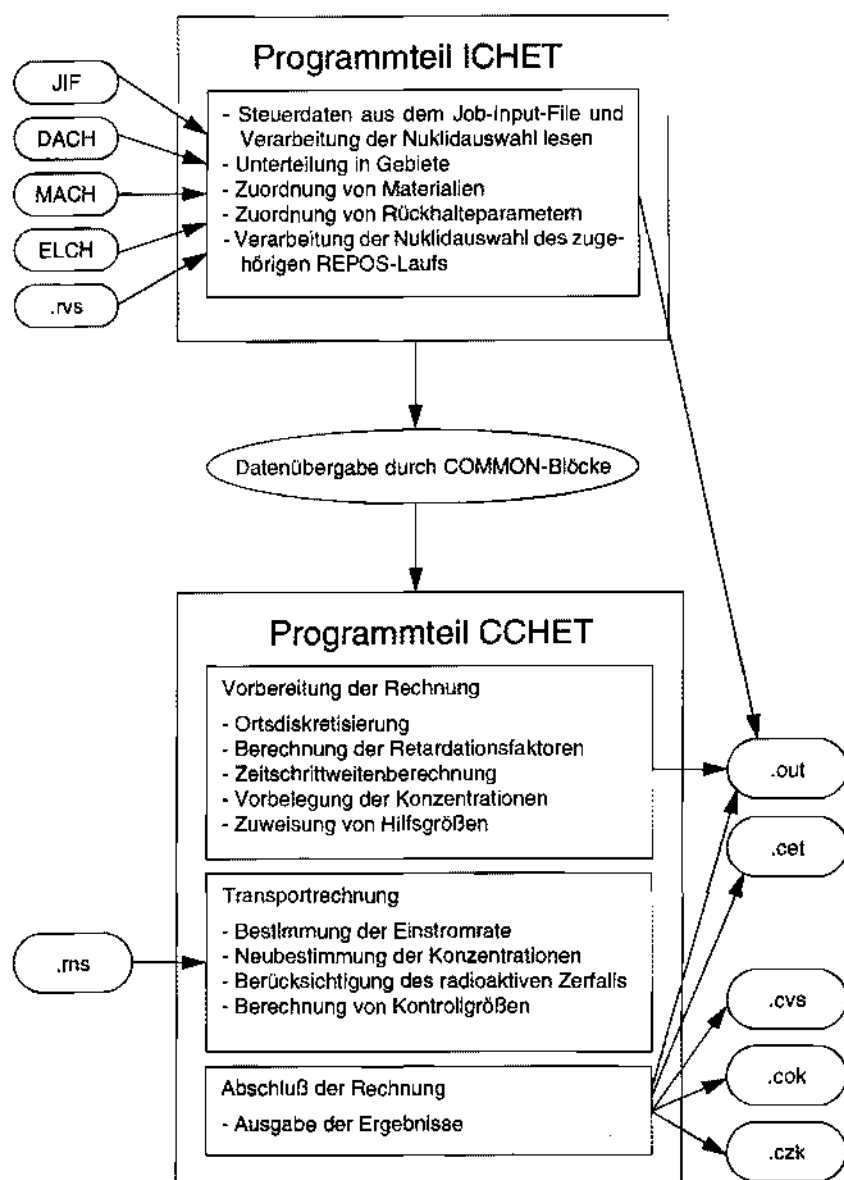


Abbildung 2: Fließschema einer Transportrechnung

Das File MACH enthält die Daten zur Charakterisierung der Materialien. Im einzelnen sind das

- die Porosität,
- die Dispersionslänge,
- der Diffusionskoeffizient,
- die Gesteinsdichte,
- die Zuordnung von Rückhalteparametern.

Im File MACH müssen mindestens alle Materialien aufgeführt sein, auf die im File DACH verwiesen wird.

Das File ELCH enthält mindestens die elementspezifischen Rückhalteparameter (K_d -Werte) für alle in CHET1 verwendeten Nuklide und alle im File DACH aufgeführten Materialien. Dieses File ist analog zum Datenfile ELDA aufgebaut, das die für das Modul REPOS benötigten element-spezifischen Daten enthält.

Die Schnittstelle zu dem Modul REPOS, in dem die Radionuklidfreisetzung aus dem Grubengebäude berechnet wird, bilden die REPOS-Ausgabefiles .rvs und .rms. Aus dem .rvs-File 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 Nuklid Auswahl und zur Zuordnung zu den Nukliden von CHET1 benötigt. Im .rms-File sind die Freisetzungsraten für alle in .rvs beschriebenen Segmente und die in REPOS gerechneten Zeitpunkte abgelegt.

Der Teilbereich des Job-Input-Files für CHET1 und die Datenfiles werden in Kapitel 8 [1] detailliert beschrieben.

Die Überprüfung und Verarbeitung der Nuklid Auswahl für CHET1 wird ebenfalls innerhalb von ICHET durchgeführt. In CHET1 dürfen nur Nuklide aufgenommen werden, mit denen bereits in REPOS gerechnet wurde. Durch die Setzung des Schalters NNC = 99999 werden alle in REPOS verwendeten Nuklide ausgewählt.

Die im Input-Datenfile angegebenen Nuklidnamen, bestehend aus Elementname und Massenzahl, werden daraufhin kontrolliert, daß sie in der Nuklidatenbasis NUDA (siehe Kapitel 8 [1]) 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 im File 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 CHET1 geschrieben.

Freisetzungsraten von Nukliden, die in REPOS, nicht jedoch in CHET1 gerechnet werden, können bei entsprechender Schalterstellung (INSUMC, siehe Kapitel 8 [1]) auf die Freisetzungsraten

ten der jeweiligen Tochter aufaddiert werden. Physikalisch bedeutet das einen sofortigen Zerfall in die Tochter.

Neben der Überprüfung der Nuklid Auswahl 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 Programmauf gestoppt.

3.2 Vorbereitung der Rechnung

Der Ablauf einer Transportrechnung mit dem Programmteil CCHET ist in Abbildung 2 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 Übergabefiles und der Ausgabefiles, die Vorbelegung der Konzentration und die Berechnung der für die Lösung der Transportgleichung benötigten Konstanten.

3.2.1 Ortsdiskretisierung

Im Datenfile 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 Gitterpeletzahl Pe (vgl. (37)) berechnet wird.

Wie bereits in Kap. 2.3.6 angedeutet, erlaubt die Gitterpeletzahl Aussagen über die Größe der numerischen Dispersion aus der Ortsdiskretisierung im Vergleich zur physikalischen. Die numerische Dispersion wird erst vernachlässigbar, wenn die Gitterpeletzahl klein ist. Dies bedeutet eine sehr feine Diskretisierung, die jedoch die Rechenzeit erhöht. Der Benutzer hat die Möglichkeit, im Input-Datenfile eine Gitterpeletzahl auszuwählen, da der vertretbare Rechenaufwand und der durch die numerische Dispersion zu erwartende Fehler problem- bzw. anwendungsspezifisch sind. Anhand dieser vorgegebenen Gitterpeletzahl wird die gebietsspezifische maximale Blocklänge $\Delta x_{\max,j}$ wie folgt berechnet:

$$\Delta x_{\max,j} = P \alpha_j^J, \quad (39)$$

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:

$$N_j = \text{INT} \left(\frac{L_j}{\Delta x_{\max,j}} \right) + 1, \quad (40)$$

L Länge des Transportwegs,
 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 :

$$\Delta x_j = \frac{L_j}{N_j}. \quad (41)$$

Die Gesamtblockzahl N ist die Summe der Anzahl der Blöcke über alle Gebiete:

$$N = \sum_j N_j. \quad (42)$$

3.2.2 Berechnung von Retardationsfaktoren

Die im Datenfile ELCH enthaltenen K_d -Werte werden in ICHET element- und materialspezifisch eingelesen. Zur Vorbereitung der Rechnung werden die K_d -Werte entsprechend (4) in Retardationsfaktoren R umgerechnet (vgl. Kapitel 2.1.2):

$$R_{j,e} = 1 + \frac{1 - n_j}{n_j} \rho K_{d,j,e}. \quad (43)$$

e Elementindex

und den jeweiligen Elementen und Blöcken zugeordnet.

3.2.3 Aufteilung der Nuklide in Nuklidketten

Da die günstigste Zeitschrittweite nuklidspezifisch, d. h. vom Retardationsfaktor abhängig ist, erfolgt die Abarbeitung des zeit- und nuklidabhängigen Problems so weit wie möglich nuklidweise. Nuklidketten müssen jedoch, da die Nuklide sich durch den radioaktiven Zerfall gegenseitig beeinflussen, in einer Zeitschleife gemeinsam gerechnet werden. Die Gesamtzahl der in CHET zu rechnenden Nuklide wird also in zusammenhängende Nuklidketten aufgeteilt. Zur Vereinfachung der Sprechweise werden hier auch Einzelnuklide als Nuklidketten bezeichnet.

3.2.4 Zeitschrittweitenberechnung

Die Zeitschrittweite für die Nuklidketten wird vor Beginn der Rechnung mit Hilfe des in Kapitel 2.3.6 beschriebenen Stabilitätskriteriums für das verwendete numerische Verfahren berechnet. Durch das Stabilitätskriterium wird eine obere Grenze für die Zeitschrittweite vorgegeben, so daß ein oszillierendes Verhalten beim Lösung der Transportgleichung verhindert wird.

Entsprechend (31) lautet die notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für die Zeitschrittweite:

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2 R}{2D + u\Delta x}. \quad (44)$$

Daraus erhält man unter Verwendung eines Minimums der Retardationsfaktoren eine nuklidketten- und gebietsspezifische maximale Schrittweite $\Delta t_{\max,i,j}$:

$$\Delta t_{\max,i,j} = \frac{(\Delta x)^2 A_j n_j R_{\min,i}}{2D_m A_j n_j + 2\alpha_j \bar{V} + \Delta x_j \bar{V}}, \quad (45)$$

e Elementindex.

$R_{\min,i}$ ist hier für jede Nuklidkette der minimale Retardationsfaktor für alle Gebiete und alle Nuklide der Kette.

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 Input-Datei beliebig voreingestellt werden kann:

$$\Delta t_i = f_{\text{DTRED}} \min_j \Delta t_{\max,i,j}. \quad (46)$$

Dieser Reduktionsfaktor ermöglicht ein Verkleinern der Zeitschrittweite über das notwendige Stabilitätskriterium (44) hinaus.

3.3 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 Input-Datenfile 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 Input-Datenfile festgelegten Zeitpunkte für die zeitabhängige Ausgabe die Nuklidkonzentrationen an den Beobachtungsstellen abgespeichert. Diese Konzentrationen werden am Ende des Rechenlaufs in das File .czk geschrieben.

In jedem Rechenlauf wird ein Protokollfile (.out, siehe Kapitel 3.4) erstellt, das einen auswählbaren Teil der Eingabedaten und wichtige berechnete Größen enthält und somit zur Kontrolle des Rechenlaufs dient.

3.3.1 Bestimmung der Einstromrate

Die Freisetzungsraten für alle in REPOS gerechneten Nuklide sind im REPOS-Ausgabefile .rns zeitabhängig abgelegt. Die Zeitdiskretisierung im File .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:

$$q(t) = \frac{1}{\Delta t} \left((t_1 - t) q(t_0) + \sum_{i=1}^{N-1} (t_{i+1} - t_i) q(t_i) + (t + \Delta t - t_N) q(t_N) \right). \quad (47)$$

Bei entsprechender Schalterstellung werden die Freisetzungsraten von Müttern k' , die nicht in der Nuklidauswahl von CHET1 enthalten sind, auf die Freisetzungsraten der entsprechenden Töchter k aufaddiert auf der Basis der Teilchenenerhaltung:

$$q_{k, \text{ges}}(t) = \lambda_k \left[\frac{q_k(t)}{\lambda_k} + \sum_{k'} \frac{q_{k'}(t)}{\lambda_{k'}} \right], \quad (48)$$

- λ Zerfallskonstante,
- k index für die Tochter,
- k' Index für die Mütter.

3.3.2 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 (21) vorgenommen. Die Konzentration im ersten Block wird nach (23) berechnet, während für den letzten Block (26) 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

$$Q_k(t) = \sum_{\Delta t} q_k(t) , \quad (49)$$

- die zum ausgewählten Zeitpunkt t vorhandene Menge eines Nuklids im Transportweg

$$M_k(t) = \sum_{i=1}^n (c_{i,k}(t) V_i R_{i,k}) , \quad (50)$$

- der bis zum ausgewählten Zeitpunkt t kumulierte Austrag aus dem Transportweg, d.h. der kumulierte Aktivitätsstrom aus dem letzten Block n :

$$S_k(t) = \sum_{\Delta t} (\Delta t V_n (H_{3,n-1,k} c_{n-1,k} - H_{3,n-1,k} c_{n,k} - H_{2,n,k} c_{n,k})) . \quad (51)$$

In den Aktivitätsstrom gehen hier sowohl der advective als auch der dispersive Ausstrom aus dem letzten Block ein.

3.3.3 Ausgabe auf Datenfiles

Die Ergebnisse der Rechnung, d.h. die Konzentrationen, werden zeit- bzw. ortsabhängig auf Ausgabefiles abgelegt. Hierfür werden im Input-Datenfile 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 Ausgabefiles erstellt:

- File .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.
- File .czk:
Zeitpunkt und zugehörige Nuklidkonzentrationen aller CHET - Nuklide für maximal elf Beobachtungsstellen
Im Job-Input-File 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.
- File .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 Ausgabefiles entsprechen in ihrer Struktur den REPOS - und EXPOS- Ausgabefiles und sind somit zur Bearbeitung mit einem entsprechenden Postprozessor zur Plotausgabe bzw. zur Tabellenerstellung geeignet. Gleichzeitig dienen .cvs und .czk zur Informationsübergabe an EXPOS. Die Datenfiles sind in Kapitel 8 [1] ausführlich beschrieben.

3.4 Protokoll des Rechenlaufs

In jedem Rechenlauf wird ein formatiertes Protokollfile erstellt, das einen auswählbaren Teil der Eingabedaten und wichtige Zwischenergebnisse enthält und somit zur Kontrolle des Rechenlaufs dient.

Im Kopf des Protokollfiles stehen Daten zur Kennzeichnung des Rechenlaufs, das Datum sowie die Pfadnamen und Namen der Datenfiles. Weiterhin werden die Eingangsdaten bei entsprechender Schalterstellung in tabellarischer Form ausgegeben. Die Bedeutung dieser Schalter ist in der Beschreibung des Job-Input-Files aufgelistet.

Anschließend folgen für die Rechnung vorbereitete Größen:

- Beschreibung der verwendeten Diskretisierung,
- Schrittweiten und die Retardationsfaktoren aller 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.

4 Verifizierung

Zur Verifizierung des Programms CHET1 wurden drei Testreihen durchgeführt:

- Vergleich der numerischen Lösungen von CHET1 mit einer analytischen Lösung für ein einfaches homogenes Modellgebiet und einem δ -Impuls als Nuklidquelle.
- Vergleich der numerischen Lösungen von CHET1 mit denen des Programms TROUGH [15] für einen realistischen Fall mit linearer Sorption unter Einschluß des radioaktiven Zerfalls. Das Programm TROUGH ist ein eindimensionales Transportprogramm, das früher im Programmpaket EMOS zur Modellierung des Geosphärentransports verwendet wurde.
- Vergleich der numerischen Lösungen von CHET1 mit denen des Programms SWIFT [16] für ein heterogenes Modellgebiet. Das Programm SWIFT ist ein mehrdimensionales Transportprogramm, das nach der Methode der Finiten Elemente arbeitet.

4.1 Testreihe 1: Vergleich mit der analytischen Lösung

Es wird ein sehr einfacher Fall betrachtet:

- homogenes Modellgebiet,
- nur ein Radionuklid,
- keine Rückhaltung,
- keine Diffusion,
- kein radioaktiver Zerfall,
- δ -Impuls als Radionuklidquelle.

Es werden in den meisten Beispielen jeweils eine analytische Lösung und mehrere numerische Lösungen verglichen.

4.1.1 Analytische Lösungen

Für die Überprüfung von numerischen Rechnungen kommen drei analytische Lösungen in Betracht, die sich in den Anfangs- bzw. Randbedingungen unterscheiden:

Lösung 1

Es existiert der gesamte Ortsraum, wobei die Lösungen im Unendlichen gegen null gehen. Als Anfangsbedingung wird ein ortsabhängiger δ -Impuls verwendet ([8], Formel 6.18):

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi\alpha t}} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha t}\right). \quad (52)$$

Die hier verwendeten Randbedingungen treffen am ehesten die Verhältnisse, die bei einem punktförmigen Eindringen eines Schadstoffes in die Geosphäre gegeben sind.

Lösung 2

Es existiert nur ein Halbraum, als Randbedingung für den advektiven Nuklidstrom wird ein zeitabhängiger δ -Impuls verwendet ([8], Formel 6.46):

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi\alpha t}} \frac{x}{ut} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha t}\right). \quad (53)$$

Lösung 3

Es existiert nur ein Halbraum. Es wird eine Randbedingung 3. Art verwendet, die einen zeitabhängigen δ -Impuls als Gesamtstrom bedeutet und einer Bilanzbedingung entspricht ([8], Formel 6.72):

$$c(x, t) = c_0 \left[\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha t}} \exp\left(-\frac{x-ut^2}{4\alpha t}\right) - \frac{1}{2\alpha} e^{x/ut} \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4\alpha t}}\right) \right]. \quad (54)$$

Die hier verwendeten Randbedingungen werden in CHET1 realisiert, wobei der Einstrom naturgemäß nicht bei $t=0$ und $x=0$ sondern im ersten Block und im ersten Zeitschritt erfolgt.

4.1.2 Ausgewählte Beispiele

Zum Vergleich von numerischen mit den entsprechenden analytischen Lösungen wurde ein sehr einfaches Modell ausgewählt. Es handelt sich um eine Röhre von 100 m Länge und 1 m² Quer-

schnittsfläche, die von einem Volumenstrom von $1 \text{ m}^3/\text{a}$ durchströmt wird. Die Porosität soll 1 sein. Diffusion, Rückhaltung und radioaktiver Zerfall bleiben unberücksichtigt. Als Quelle wird ein δ -Impuls verwendet, der eine Radionuklidmenge von $1,0 \text{ Bq}$ repräsentiert.

Die Dispersionslänge wird in den ersten drei Beispielen auf 1 m festgelegt während sie im vierten Beispiel auf $0,1 \text{ m}$ herabgesetzt wird.

Der Radionuklideintrag in das Modellgebiet findet im dritten Beispiel in 5 m Entfernung vom linken Modellrand statt, in allen anderen Beispielen erfolgt er direkt am linken Modellrand.

Die Diskretisierung bezüglich des Ortes und der Zeit ist variabel und wird für jedes einzelne Beispiel näher spezifiziert.

Ausgewertet bzw. aufgetragen wird in allen Beispielen die Ortsabhängigkeit der Konzentration nach einer Zeit von 75 Jahren .

4.1.3 Beispiel 1: Vergleich der analytischen Lösungen untereinander

In Abbildung 3 sind die drei in Kapitel 4.1.1 dargestellten analytischen Lösungen für einen konstanten Zeitpunkt ($t = 75 \text{ a}$) dargestellt. Weiterhin ist die numerische Lösung für dieses Beispiel

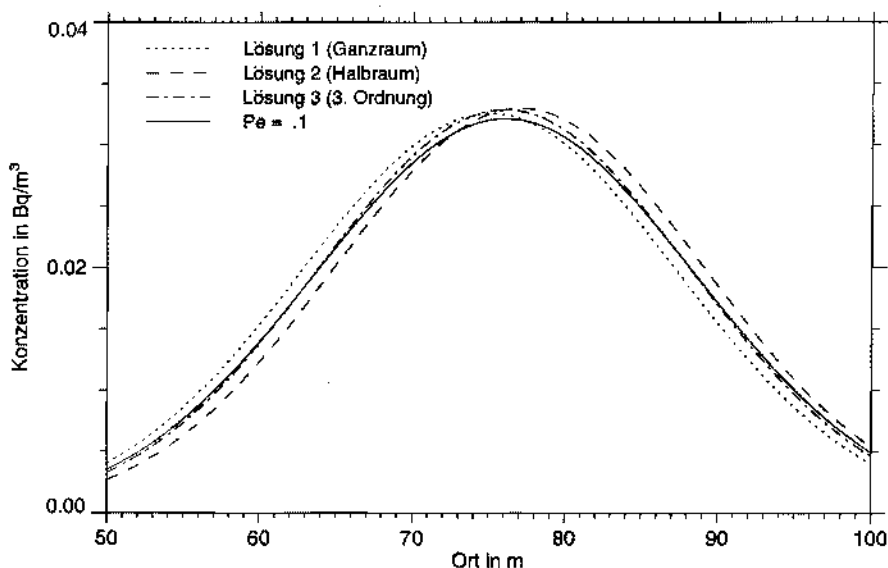


Abbildung 3: Ortsabhängigkeit der Konzentration für eine numerische und drei analytische Lösungen. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen $0,9$. Die in Kapitel 2.3.7 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.

mit relativ feiner Diskretisierung eingezeichnet. Der Parameter f_{DTRED} war für die numerische Lösung auf 0,9 festgelegt.

Die analytischen Lösungen unterscheiden sich in der Lage ihres Maximums. Diese Unterschiede sind aus den Randbedingungen erklärbar. Eine Abschätzung zur Lage der Maxima findet sich im Anhang.

Die numerische Lösung stimmt wie erwartet mit Lösung 3 sehr gut überein. Auch Lösung 1, die physikalisch am befriedigendsten ist, wird noch gut wiedergegeben. Wie man aus der Lage des Maximums (siehe Anhang) erkennt, trifft dies um so besser zu, je länger der Transportweg im Verhältnis zur Dispersionslänge ist.

4.1.4 Beispiel 2: Rechnungen ohne Korrektur der numerischen Dispersion

In Abbildung 4 sind die dritte analytische Lösung und vier numerische Lösungen mit unterschiedlicher Ortsdiskretisierung ($Pe = 0,3$, $Pe = 0,1$, $Pe = 0,03$, $Pe = 0,01$) dargestellt. Die in Kapitel 2.3.7 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.

Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 0,9. Bei weiteren Rechnungen stellte sich heraus, daß er in der Testreihe 1 praktisch keinen Einfluß auf das Ergebnis hat.

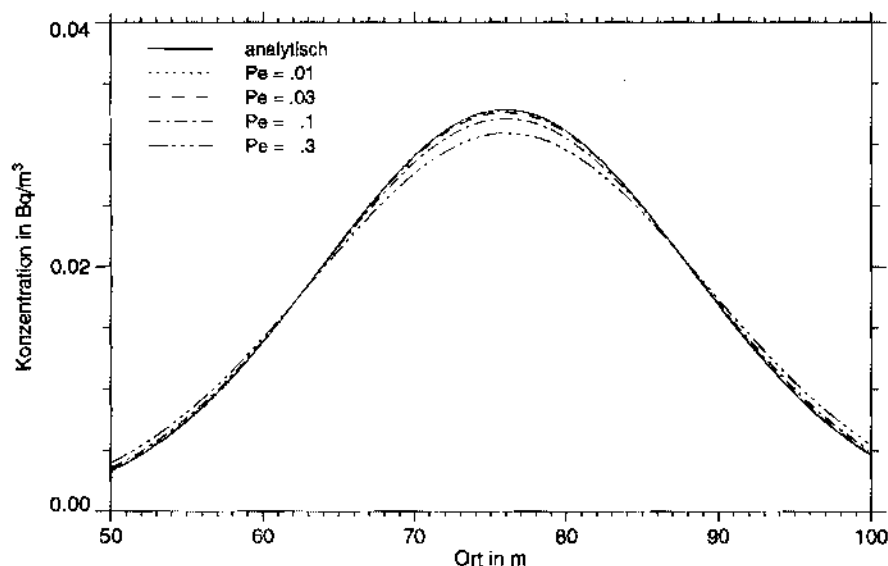


Abbildung 4: Ortsabhängigkeit der Konzentration für die analytische Lösung und vier numerische Lösungen. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 0,9. Die in Kapitel 2.3.6 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.

Man erkennt, daß sich die numerische Lösung mit zunehmender Verfeinerung der Diskretisierung sich der analytischen Lösung immer mehr annähert. Dieses Ergebnis entspricht den Erwartungen.

4.1.5 Beispiel 3: Rechnungen mit einer Quelle, die nicht am Rand des Modellgebiets liegt

In Abbildung 5 sind numerische Lösungen mit unterschiedlicher Diskretisierung mit der analytischen Lösung verglichen. Der Eintrittspunkt in das Modellgebiet lag einheitlich bei 5% des Gesamtweges. Als analytische Lösung wurde Lösung 1 verwendet, die aufgrund der verwendeten Randbedingung eine Nuklidausbreitung auch entgegen der Transportrichtung des Fluids zuläßt und somit eine sehr realistische Beschreibung der natürlichen Verhältnisse darstellt.

Man erkennt, daß sich in diesen Fall die numerischen Lösungen bei zunehmender Verbesserung der Diskretisierung der veränderten analytischen Lösung annähern.

Wenn man es also für eine Rechnung für notwendig hält, daß der ganze Ortsraum zur Verfügung steht (entsprechend der analytischen Lösung 1), so läßt sich dieser Fall auch simulieren, indem

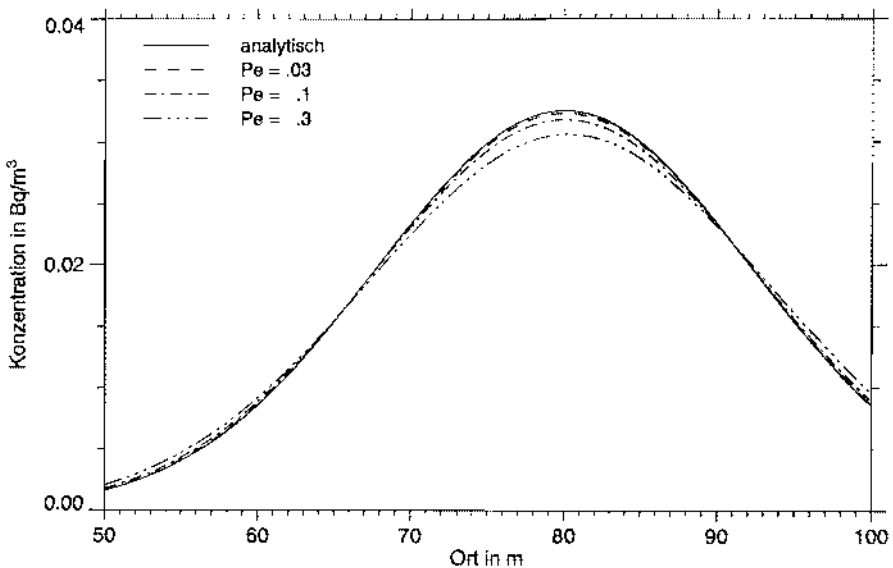


Abbildung 5: Ortsabhängigkeit der Konzentration für die analytische Lösung und drei numerische Lösungen, wobei die Nuklidquelle nicht am Rand des Modellgebiets liegt. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 0,9. Die in Kapitel 2.3.7 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.

man die Eintrittsstelle für die Radionuklide in einer geeigneten Entfernung vom linken Rand wählt.

4.1.6 Beispiel 4: Rechnungen mit Korrektur der numerischen Dispersion

Verwendet man bei den Rechnungen die in Kapitel 2.3.7 beschriebene Korrektur der numerischen Dispersion, so reicht eine wesentlich größere Ortsdiskretisierung aus. Durch die in Kapitel 3.2.4 beschriebene automatische Zeitschrittweitenberechnung ergibt sich dadurch auch eine größere Zeitdiskretisierung und damit eine erhebliche Rechenzeiterparnis.

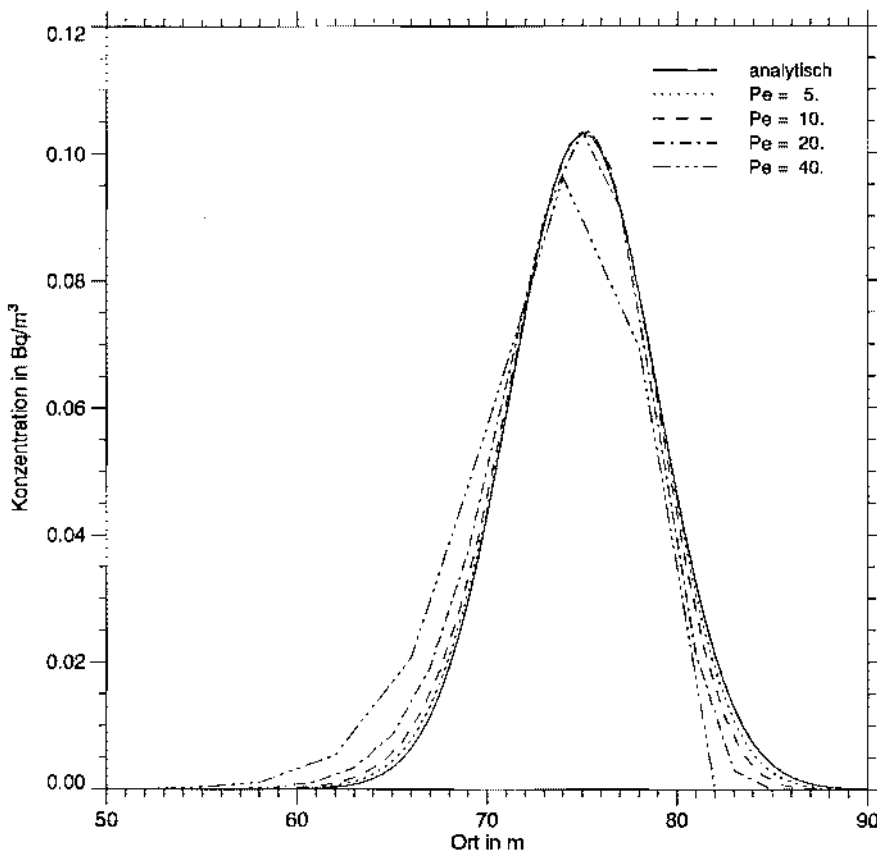


Abbildung 6: Ortsabhängigkeit der Konzentration für eine analytische und vier numerische Lösungen. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 1,0. Die in Kapitel 2.3.6 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde durchgeführt.

In Abbildung 6 sind für eine Dispersionslänge von 0,1 m die analytische Lösung sowie vier numerische Lösungen mit unterschiedlicher Ortsdiskretisierung ($Pe = 5$, $Pe = 10$, $Pe = 20$ und $Pe = 40$) aufgetragen. Der Faktor f_{DTRFD} war in allen Fällen 1,0.

Die Abbildung zeigt, daß bei einer Pecletzahl von 10 das Maximum der analytischen Lösung noch sehr gut wiedergegeben wird. Somit können bei gewissen Anwendungen auch noch Rechnungen mit höheren Pecletzahlen sinnvoll sein.

4.2 Testreihe 2: Vergleich für einen realistischen Fall

In dieser Testreihe wird die Referenz-Rechnung, die für das Projekt PACOMA [17] durchgeführt wurde, für einen Vergleich herangezogen.

Das Deckgebirge für die PACOMA-Ausbreitungsrechnungen wurde als Strömungskanal mit homogenem Material und konstantem Querschnitt modelliert. Der Strömungskanal hatte einen Querschnitt von 36 900 m² und eine Porosität von 0,2. Die Abstandsgeschwindigkeit des Fluids lag bei 6,5 m/a. Das Modellgebiet hatte eine Länge von 9 394 m. Da die Übergabestelle an EXPOS bei 98% des Modellgebiets modelliert wurde, ergab sich ein Transportweg von 9 206 m. Es wurde eine Dispersionslänge von 65 m verwendet. Die verwendeten Halbwertszeiten und K_d -Werte für die einzelnen Radionuklide können Tabelle 1 entnommen werden. Für die PACOMA-Rechnungen wurde das Programm TROUGH verwendet.

Nuklid	HWZ in a	K_d in m ³ /kg	Nuklid	HWZ in a	K_d in m ³ /kg	Nuklid	HWZ in a	K_d in m ³ /kg
C-14	5.733E03	5.E-3	Pu-240	6.542E03	1.E-0	U-234	2.447E05	2.E-3
Ni-59	8.000E04	1.E-2	U-236	2.343E07	2.E-3	Th-230	7.705E04	3.E-1
Se-79	6.500E04	3.E-4	Th-232	1.406E10	3.E-1	Ra-226	1.601E03	9.E-4
Zr-93	1.531E06	1.E-1	Np-237	2.141E06	3.E-2	Am-243	7.385E03	1.E-0
Nb-94	2.031E04	1.E-1	U-233	1.586E05	2.E-3	Pu-239	2.408E04	1.E-0
Tc-99	2.132E05	7.E-3	Th-229	7.344E03	3.E-1	U-235	7.043E08	2.E-3
I-129	1.571E07	5.E-4	Pu-242	3.872E05	1.E-0	Pa-231	3.279E04	1.E-0
Cs-135	2.301E06	1.E-3	U-238	4.471E09	2.E-3			

Tabelle 1: Halbwertszeiten und K_d -Werte der in Testreihe 2 berücksichtigten Radionuklide

Der Vergleich findet in 5 Stufen statt, die im folgenden näher beschrieben sind.

Nuklid	TROUGH-Lösung		CHET1-Lösung		analytische Lösung		numerische Lösung / analytische Lösung			
	$t_{\max}$ in a	$c_{\max}$ in Bq/m ³	$t_{\max}$ in a	$c_{\max}$ in Bq/m ³	$t_{\max}$ in a	$c_{\max}$ in Bq/m ³	t_{TR}/t_{an}	c_{TR}/c_{an}	t_{CH}/t_{an}	c_{CH}/c_{an}
Se- 79	6.343E+03	8.685E-05	6.325E+03	8.697E-05	6.325E+03	8.680E-05	1.003	1.001	1.000	1.002
I-129	9.093E+03	6.140E-05	9.115E+03	6.151E-05	9.122E+03	6.140E-05	0.997	1.000	0.999	1.002
Cs-135	1.604E+04	3.335E-05	1.609E+04	3.341E-05	1.610E+04	3.335E-05	0.996	1.000	0.999	1.002
U-238	2.999E+04	1.755E-05	3.015E+04	1.751E-05	3.012E+04	1.755E-05	0.996	1.000	1.001	0.998
C- 14	6.434E+04	2.192E-09	6.485E+04	2.093E-09	6.469E+04	2.097E-09	0.995	1.045	1.002	1.003
Tc- 99	9.904E+04	3.768E-06	9.938E+04	3.771E-06	9.950E+04	3.763E-06	0.995	1.001	0.999	1.002
Ni- 59	1.389E+05	1.092E-06	1.392E+05	1.089E-06	1.395E+05	1.086E-06	0.996	1.006	0.998	1.003
Np-237	4.185E+05	1.069E-06	4.219E+05	1.063E-06	4.208E+05	1.069E-06	0.995	1.000	1.003	0.994
Zr- 93	1.380E+06	1.965E-07	1.385E+06	1.965E-07	1.386E+06	1.960E-07	0.996	1.003	0.999	1.003
Nb- 94	8.610E+05	3.982E-23	9.519E+05	9.158E-24	9.148E+05	1.529E-23	0.941	2.604	1.041	0.599
Th-232	5.715E+04	5.338E-11	4.209E+06	1.221E-07	4.193E+06	1.228E-07	0.014	0.000	1.004	0.994
Pu-242	1.041E+07	1.858E-17	1.049E+07	1.540E-17	1.070E+07	1.393E-17	0.973	1.334	0.980	1.106

Tabelle 2: Vergleich der Lösungen der Programme TROUGH und CHET1 mit der analytischen Lösung. Angegeben sind für die Nuklide, die keinen nennenswerten Aufbau durch radioaktiven Zerfall erleiden, die Ankunftszeiten und die Höhen der Maxima Ende des Ausbreitungsweges. Zur besseren Überschaubarkeit sind zusätzlich die numerischen Werte auf die analytischen bezogen eingetragen.

4.2.1 Stufe 1: δ -Impuls als Nuklidquelle

In einer ersten Stufe wird statt der realistischen Nuklidfreisetzung ein δ -Impuls als Radionuklidfreisetzung verwendet. Der δ -Impuls repräsentiert für jedes Radionuklid eine zugegebene Menge von 7 380 Bq. Das entspricht 1 Bq pro m^2 Querschnittsfläche des Modellgebiets. Für die Spalt- und Aktivierungsprodukte und einige Kettennuklide, die keine Mütter haben, werden die Lösungen von TROUGH und CHET1 mit der analytischen Lösung verglichen. Die Ortsdiskretisierung bei CHET1 wird dabei der bei TROUGH verwendeten angeglichen. Dies bedeutet eine Gitter-Pecletzahl von 1,54. Der Zeitschrittmultiplikationsfaktor f_{DTRED} wurde auf 0,9 festgelegt. Damit ergibt sich durch die in Kapitel 3.2.4 beschriebene Automatik eine Schrittweite zwischen 24 a und 6000 a für die einzelnen Nuklide bzw. Nuklidketten. Die TROUGH-Rechnung dagegen wurde mit einer konstanten Schrittweite von 50 a durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 2 gegenübergestellt.

Man erkennt für beide Transportprogramme bei fast allen Radionukliden eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Transportsimulationen und der analytischen Lösung. Abweichungen ergeben sich nur in zwei Fällen:

- Bei Th-232 ist die Lösung, die das Programm TROUGH liefert, völlig falsch. Es wird vermutet, daß das Programm, das mit 32-bit-Werten arbeitet, bei manchen Parameterkombinationen (sehr hohe K_d -Werte und sehr hohe Halbwertszeiten) versagt.
- Relativ starke Abweichungen ergeben sich für beide Programme bei den Radionukliden Nb-94 und Pu-242. Dieses sind Nuklide, die während ihrer Transportzeit sehr stark zerfallen. Die Abweichungen sind bei TROUGH größer als bei CHET1. Die beiden Nuklide sind für Sicherheitsanalysen unwichtig, da sie, wie schon gesagt, während der Laufzeit im Deckgebirge bereits so weit zerfallen sind, daß sie in der Biosphäre keine Bedeutung mehr haben. Eine genauere Untersuchung der Verhältnisse erfolgt in der nächsten Stufe dieser Verifikationsreihe.

4.2.2 Stufe 2: Variation der Diskretisierung

In einer zweiten Stufe wird zur Untersuchung der Konvergenz des Rechenverfahrens auch bei den oben festgestellten Problemnukliden die Diskretisierung variiert. Die Ortsdiskretisierung wird durch die Gitter-Pecletzahlen von 3,08, 1,54, 0,77 und 0,375 festgelegt. Die Zeitdiskretisierung ergibt sich durch den konstanten Faktor f_{DTRED} von 0,9 und die in Kapitel 3.2.4 beschriebene Zeitschrittweitenautomatik. Es werden die Ergebnisse der CHET1-Rechnungen mit den verschiedenen Diskretisierungen mit der analytischen Lösung verglichen (Tabelle 3).

Man erkennt, daß sich auch hier die Ergebnisse mit zunehmender Verfeinerung der Diskretisierung verbessern. Man sieht, daß auch bei einer Pecletzahl von 3,08 die Ergebnisse durchaus noch als gut brauchbar zu bezeichnen sind. Nur bei den Radionukliden wie Nb-94 und Pu-242, die während der Laufzeit so stark zerfallen, daß sie schließlich unbedeutend sind, ergeben sich Abweichungen in der Höhe des Maximums von mehr als 2,5%.

Nuklid	$t_{\max}(\text{CHET1}) / t_{\max}(\text{analytisch})$				$c_{\max}(\text{CHET1}) / c_{\max}(\text{analytisch})$			
	Pe = 3,08	Pe = 1,54	Pe = 0,77	Pe = 0,385	Pe = 3,08	Pe = 1,54	Pe = 0,77	Pe = 0,385
Se-79	0.998	1.000	1.000	1.000	1.002	1.002	1.001	1.001
I-129	0.997	0.999	1.000	1.000	1.002	1.002	1.001	1.000
Cs-135	0.997	0.999	1.001	1.000	1.002	1.002	1.001	1.000
U-238	1.010	1.001	0.999	0.999	0.983	0.998	1.000	1.000
C-14	1.003	1.002	1.000	1.000	0.984	0.998	1.000	1.000
Tc-99	1.001	0.999	1.000	0.999	1.002	1.002	1.001	1.000
Ni-59	1.001	0.998	1.001	0.999	1.002	1.003	1.001	1.001
Np-237	1.014	1.003	1.000	0.999	0.977	0.994	0.998	1.000
Zr-93	1.006	0.999	0.999	1.000	1.002	1.003	1.002	1.001
Nb-94	1.083	1.040	1.014	1.005	0.339	0.599	0.823	0.939
Th-232	1.016	1.004	1.001	1.000	0.979	0.994	0.998	1.000
Pu-242	0.923	0.980	0.995	0.999	1.574	1.106	1.024	1.005

Tabelle 3: Abhängigkeit der Ergebnisse der numerischen Simulation von der Diskretisierung. Angegeben sind die Ankunftszeiten und Höhen der Maxima bezogen auf die Werte der analytischen Rechnung

4.2.3 Stufe 3: Aufbau von Tochternukliden

In der dritten Stufe wird beim radioaktiven Zerfall nun auch der Aufbau von Tochternukliden überprüft. Dazu werden die beiden Rechenläufe mit CHET1 und TROUGH für einen δ -Impuls als Radionuklidquelle, die schon für Stufe 1 dieser Verifikationsreihe verwendet wurden, in Hinblick auf die Zerfallsreihen ausgewertet. Im oberen Teil von Tabelle 4 werden die Ankunftszeiten und die Höhen der zeitlichen Maxima verglichen.

Man erkennt eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Rechenläufen. Abweichungen ergeben sich für einige Radionuklide:

- Bei Th-232 ist, wie schon bekannt, das Ergebnis der TROUGH-Rechnung nicht verwertbar.
- Bei Pu-242 ist das Ergebnis bei der gewählten Pecietzahl noch nicht ausreichend genau, da das Nuklid während der Laufzeit sehr stark zerfällt. Dieser Effekt wurde bereits in Stufe 2 dieser Verifikationsreihe untersucht.
- Bei Ra-226 ist das Ergebnis der TROUGH-Rechnung für diesen Vergleich nicht verwertbar. Der zeitliche Verlauf der Konzentration hat zwei Maxima, von denen aufgrund der

	TROUGH-Rechnung		CHET1-Rechnung		TROUGH / CHET1	
	$t_{\max}$	$C_{\max}$	$t_{\max}$	$C_{\max}$	$t_{\max}$	$C_{\max}$
δ-Impuls als Radionuklid-Quelle						
Pu-240						
U-236	2.999E+04	1.754E-05	3.003E+04	1.757E-05	0.999	0.998
Th-232	5.715E+04	5.338E-14	4.207E+06	1.221E-07	0.014	0.000
Np-237	4.185E+05	1.069E-06	4.217E+05	1.063E-06	0.992	1.006
U-233	2.999E+04	1.575E-05	3.003E+04	1.576E-05	0.999	0.999
Th-229	3.464E+04	5.203E-08	3.467E+04	5.176E-08	0.999	1.005
Pu-242	1.041E+07	1.858E-17	1.049E+07	1.559E-17	0.992	1.192
U-238	2.999E+04	1.755E-05	3.013E+04	1.751E-05	0.995	1.002
U-234	2.999E+04	1.755E-05	3.013E+04	1.751E-05	0.995	1.002
Th-230	3.889E+04	8.897E-09	3.914E+04	8.854E-09	0.994	1.005
Ra-226	1.499E+04	2.298E-07	3.747E+04	2.787E-06	0.400	0.082
Am-243						
PU-239						
U-235	2.999E+04	1.755E-05	3.003E+04	1.758E-05	0.999	0.998
Pa-231	3.739E+04	5.700E-09	3.760E+04	5.670E-09	0.994	1.005
Realistische Freisetzung aus einem Grubengebäude als Radionuklid-Quelle						
Pu-240						
U-236	3.874E+04	1.292E-03	3.899E+04	1.291E-03	0.994	1.001
Th-232	1.039E+06	3.259E-11	4.695E+06	1.005E-09	0.221	0.032
Np-237	4.517E+05	1.286E-03	4.552E+05	1.296E-03	0.992	0.992
U-233	3.457E+05	1.312E-03	3.492E+05	1.327E-03	0.990	0.989
Th-229	3.541E+05	9.166E-03	3.568E+05	9.270E-06	0.992	0.989
Pu-242	1.054E+07	3.919E-14	1.062E+07	3.399E-14	0.992	1.153
U-238	3.869E+04	1.261E-03	3.897E+04	1.262E-03	0.993	0.999
U-234	3.854E+04	8.256E-03	3.885E+04	8.258E-03	0.992	1.000
Th-230	8.614E+04	1.058E-05	8.632E+04	1.071E-05	0.998	0.988
Ra-226	8.374E+04	3.388E-03	8.398E+04	3.418E-03	0.997	0.991
Am-243						
Pu-239						
U-235	3.874E+04	6.720E-05	3.899E+04	6.714E-05	0.994	1.001
Pa-231	4.719E+04	4.635E-08	6.764E+04	4.690E-08	0.698	0.988

Tabelle 4: Vergleich zwischen einer TROUGH-Rechnung und einer CHET1-Rechnung für die Radionuklide in den Zerfallsreihen. Angegeben sind die Ankunftszeiten und die Höhen der Maxima am Ende des Ausbreitungsweges sowie jeweils der Quotient aus den Ergebnissen beider Rechnungen. Bei den Feldern, die leer geblieben sind, erreichen die Radionuklide wegen des radioaktiven Zerfalls die Biosphäre nicht.

Programmierung bei TROUGH das erste, das aber das niedrigere ist, ausgegeben wird. Dieser Sachverhalt wurde anhand einer Auftragung des TROUGH-Ergebnisses überprüft.

- Auch bei Pu-231 wird im Falle der realistischen Freisetzung ein Fehler in der Maximumsuche des Programms TROUGH vermutet.

4.2.4 Stufe 4: Realistischer Freisetzungsverlauf

In der vierten Stufe erfolgt der Übergang der Radionuklidquelle von einem δ -Impuls zu einem realistischen Zeitverlauf der Radionuklidfreisetzung, wie er im vorhergehenden Modul REPOS berechnet wird. Damit wird der Mechanismus des Programms überprüft, welches das Lesen der Freisetzungsraten aus dem Übergabefile und die Aufbereitung dieser Daten übernimmt. Im unteren Teil von Tabelle 4 sind die gleichen Werte wie in Stufe 3 für Rechenläufe mit realistischem Freisetzungsverlauf angegeben.

Bis auf die bereits in der vorigen Stufe beschriebenen Abweichungen fällt auch hier der Vergleich zwischen TROUGH und CHET1 befriedigend aus.

4.2.5 Stufe 5: Berücksichtigung nicht gerechneter Mutternuklide

Die fünfte Stufe dieser Verifikationsreihe soll schließlich zeigen, daß das in Kapitel 3.3.1 beschriebene Aufaddieren von in der CHET1-Rechnung nicht berücksichtigten Mutternukliden wie gewünscht funktioniert. Exemplarisch sind in Tabelle 5 für die Nuklide Pu-240 und U-236 aus der

δ -Impuls als Radionuklid-Quelle						
	TROUGH-Rechnung		CHET1-Rechnung		TROUGH / CHET1	
	$t_{\max}$	$C_{\max}$	$t_{\max}$	$C_{\max}$	$t_{\max}$	$C_{\max}$
Pu-240						
U-236	3.219E+04	4.309E-08	3.236E+04	4.306E-05	0.995	1.001

Tabelle 5: Vergleich zwischen TROUGH und CHET1-Rechnung bei Aufaddieren von in der Deckgebirgsrechnung nicht berücksichtigten Mutternukliden. Pu-240 erreicht wegen des radioaktiven Zerfalls die Biosphäre nicht.

Thorium-Zerfallsreihe bei einem δ -Impuls als Nuklidquelle die Ankunftszeiten und Höhen der Maxima sowie die relativen Werte eingetragen. Die Quelldaten für die Nuklide Cm-248, Pu-244 und Cm-244, die in REPOS gerechnet sind, aber nicht in CHET1, werden bei Pu-240 addiert und erhöhen durch den radioaktiven Zerfall das Maximum von U-236. Man sieht, daß die Höhe des Maximums für U-236 gegenüber der Rechnung ohne Aufaddieren der Mütter (Tabelle 4 oberer

Teil) um etwa den Faktor 2,5 angewachsen ist. Der Anstieg wird von beiden Programmen gleich berechnet.

4.3 Testreihe 3: Vergleich für ein heterogenes Modellgebiet

Für den Vergleich werden Rechnungen, die für die Langzeitsicherheitsanalyse des Endlagers KONRAD [18] durchgeführt wurden, herangezogen. Es wurde das Rechenprogramm SWIFT verwendet. Für die Vergleichsrechnungen wurden die Radionuklide I-129 und U-235 ausgewählt.

4.3.1 Beschreibung des Modells

Das Modellgebiet hat eine Länge von 39 000 m. Der Querschnitt ist über die gesamte Länge des Modellgebiets konstant und liegt bei 675 000 m². Die Porosität für den Bereich zwischen 0 und

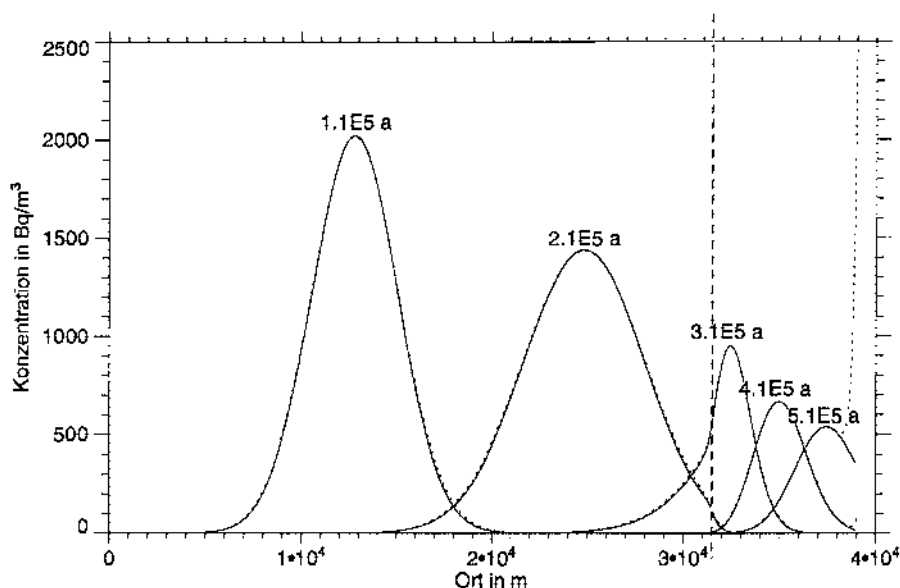


Abbildung 7: Ortsabhängigkeit der Konzentration für I-129. Die Ergebnisse des Programms CHET1 sind durchgezogen dargestellt, die Ergebnisse des Programms SWIFT dagegen gepunktet. Aufgetragen sind die Konzentrationen für fünf Zeitpunkte. Der Wechsel der Porosität liegt bei 31 500 m. Die Rechnung mit CHET1 wurden mit Korrektur der numerischen Dispersion und einer Gitter-Pecletzahl von 0.753 durchgeführt. Bei SWIFT ist eine Gitter-Pecletzahl von 0.075 notwendig, um die erforderliche Genauigkeit zu erreichen.

31 500 m liegt bei 0,02, der Rest des Modellgebiets hat eine Porosität von 0,1. Die Durchströmungsrate beträgt $1\,620\text{ m}^3/\text{a}$. Die Gesteinsdichte ist auf $2\,600\text{ kg/m}^3$ festgelegt. Es wurde eine longitudinale Dispersionslänge von 200 m angenommen. Der Diffusionskoeffizient hat einen Wert von $3,15 \cdot 10^{-4}\text{ m}^2/\text{a}$.

4.3.2 Beispiel 1: Rechnung für I-129

Als Quelle wird eine Gesamtmenge von $1,567 \cdot 10^{11}\text{ Bq}$ gleichmäßig über einen Zeitraum von 10 000 a in den ersten Block zugegeben. Es wird keine Rückhaltung angenommen.

In Abbildung 7 sind die Ortsabhängigkeiten der Konzentrationen für fünf verschiedene Zeitpunkte aufgetragen. Die Kurven sind an der Übergangsstelle zwischen niedriger und höherer Porosität wie zu erwarten etwas gegenüber einer Gauß-Kurve deformiert. Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Rechnungen mit SWIFT und den Rechnungen mit CHET1. Das fehlerhafte Ansteigen der Kurven beim Programm SWIFT ist auf die ungünstige Randbedingung zurückzuführen, die in SWIFT verwendet wird.

4.3.3 Beispiel 2: Rechnung für U-235

Die Quelle für U-235 ist nach Tabelle 6 in fünf Zeitbereiche mit jeweils konstanter Quellrate aufgeteilt. Die Zugabe erfolgt im ersten Block des Modellgebiets.

Zeitbereich	Quellrate
0 a - 1.E4 a	8.796E+6 Bq/a
1.E4 a - 1.E5 a	1.666E+6 Bq/a
1.E5 a - 3.E5 a	2.514E+4 Bq/a
3.E5 a - 1.E6 a	1.710E+1 Bq/a
1.E6 a - 1.E7 a	1.009E-4 Bq/a

Tabelle 6: Zeitabhängigkeit der Quellrate für U-235

In diesem Beispiel wird das Modellgebiet in drei unterschiedliche Gebiete aufgeteilt, deren K_d -Werte und Porositäten in Tabelle 7 dargestellt sind. Die anderen Eigenschaften des Ausbreitungsmodells bleiben unverändert.

Die Ergebnisse dieser Beispielsrechnung sind in Abbildung 8 aufgetragen. Auch in diesem Beispiel erkennt man eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den CHET1- und den SWIFT-Ergebnissen und eine Abweichung von einer Gauß-Kurve an der Übergangsstelle zwischen den homogenen Bereichen des Modellgebiets. Wie im vorigen Beispiel kommt es auch hier bei den

Bereich	K_d -Wert	Porosität
0 m - 6900 m	$0.163\text{E-}3 \text{ m}^3/\text{kg}$	0.02
6900 m - 31500 m	$0.245\text{E-}3 \text{ m}^3/\text{kg}$	0.02
31500 m - 39000 m	$2.600\text{E-}3 \text{ m}^3/\text{kg}$	0.10

Tabelle 7: K_d -Werte für Uran und Porositäten

Rechnungen mit dem Programm SWIFT zu einem fehlerhaften Ansteigen der Konzentrationen am Ende des Modellgebietes.

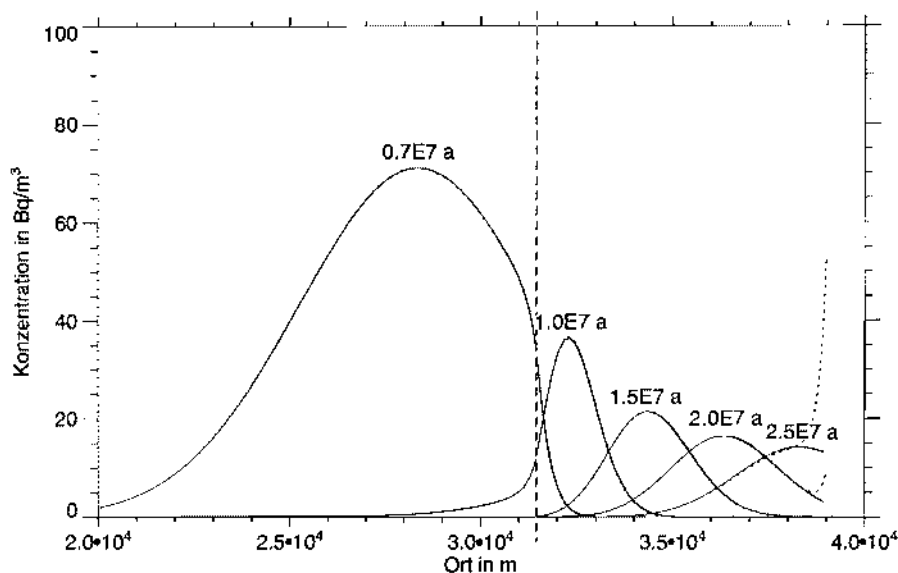


Abbildung 8: Ortsabhängigkeit der Konzentration für U-235. Die Ergebnisse des Programms CHET1 sind durchgezogen dargestellt, die Ergebnisse des Programms SWIFT dagegen gepunktet. Aufgetragen sind die Konzentrationen für fünf Zeitpunkte. Der Wechsel der Porosität liegt bei 31 500 m. Der K_d -Wert ändert sich bei 6 900 m und bei 31 500 m. Die Rechnung mit CHET1 wurde mit Korrektur der numerischen Dispersion und einer Gitter-Pecletzahl von 0.753 durchgeführt. Bei SWIFT ist eine Gitter-Pecletzahl von 0.0075 notwendig, um die erforderliche Genauigkeit zu erreichen.

5 Benutzerhinweise

In diesem Kapitel werden dem Benutzer Hinweise zur praktischen Anwendung des Programms CHET1 gegeben.

5.1 Zeitdiskretisierung

Das Programm ist mit einer automatischen Zeitschrittsteuerung ausgestattet. Sie ist in den Kapiteln 2.3.6 und 3.2.4 beschrieben. Zusätzlich steht nur noch der Parameter f_{DTRED} zur Verfügung, der angibt, mit welchem Faktor die von der Automatik berechnete Schrittweite multipliziert wird. Die sinnvolle Wahl dieses Parameters hängt davon ab, ob für den Rechenlauf eine Korrektur für die numerische Dispersion durchgeführt wird.

In Abbildung 9 sind für Rechnungen ohne Korrektur der numerischen Dispersion die Lösungen bei unterschiedlicher Zeitdiskretisierung ausschnittsweise dargestellt. Man erkennt, daß bei Annäherung an $f_{DTRED} = 1,0$ die Lösung instabil zu werden beginnt. Man kann also, um eine kurze Rechenzeit zu erreichen bis fast an die automatisch aus den Stabilitätskriterien berechnete Zeitschrittweite herangehen.

In gleicher Weise sind in Abbildung 10 Lösungen mit Korrektur der numerischen Dispersion dargestellt. Die Abbildung zeigt, daß eine Instabilität erst ab $f_{DTRED} = 1,07$ zu erkennen ist. Dies ist dadurch zu erklären, daß zur Berechnung der Zeitschrittweite nach der Vorschrift in Kapitel 3.2.4 die im Input-Datenfile angegebene gewünschte Dispersionslänge verwendet wird. Das Programm verwendet jedoch die in Kapitel 2.3.7 beschriebene korrigierte Dispersionslänge. Die sinnvolle Wahl von f_{DTRED} hängt bei Anwendung der Korrektur für die numerische Dispersion vom speziellen Problem ab.

5.2 Wahl der Gitter-Pecletzahl

Der wichtigste Parameter, der für die Einstellung einer angemessenen Diskretisierung zur Verfügung steht ist die Gitter-Pecletzahl, da sie zum einen wesentlich die Genauigkeit der Rechnung beeinflusst und zum anderen einen entscheidenden Einfluß auf die benötigte Rechenzeit hat. Das Beispiel in Kapitel 4.1.6 zeigt, daß ohne den radioaktiven Zerfall bei Gitter-Pecletzahlen bis zu 10 das Ergebnis noch sehr genau ist.

Bei den Beispielen mit radioaktivem Zerfall in Kapitel 4.2.2 erkennt man, daß bei einer Gitter-Pecletzahl unter 3 die Ergebnisse für eine Sicherheitsanalyse noch sehr gut liegen. Die richtige Wahl der Gitter-Pecletzahl hängt also stark von dem vorliegenden Problem und der geforderten Genauigkeit ab.

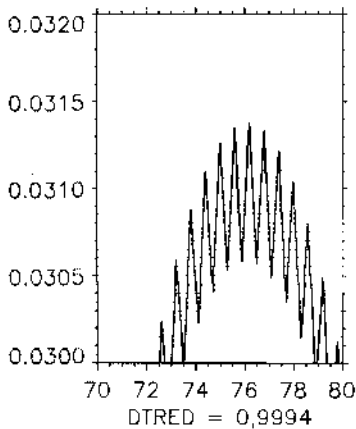
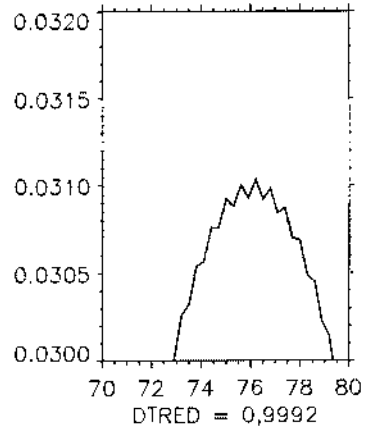
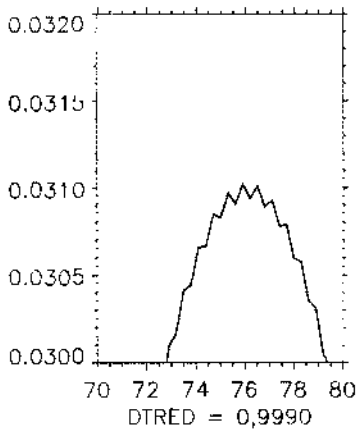
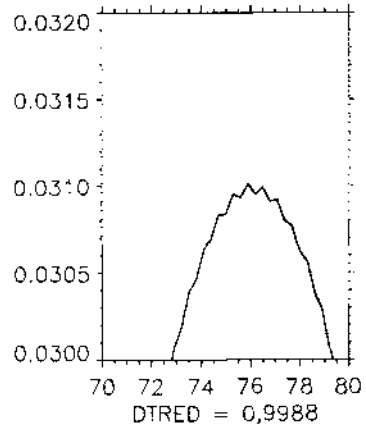
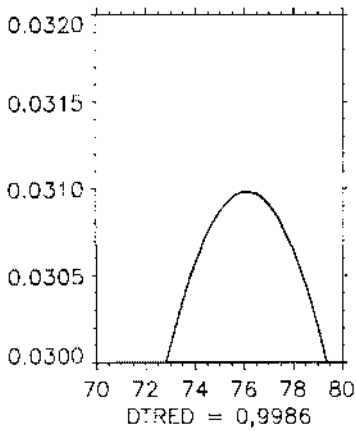


Abbildung 9: Numerische Lösung ohne Korrektur der numerischen Dispersion in Abhängigkeit von der Zeitdiskretisierung. Aufgetragen ist in jeder Kurve die Konzentration in Bq/m^3 gegen den Ort in m nach einer Zeit von 75 Jahren. Variiert wurde der Faktor f_{DTRED} , der nach Kapitel 3.2.4 die Zeitschrittweite festlegt. Für die Rechnungen wurde eine Gitter-Pecletzahl von 0,3 verwendet.

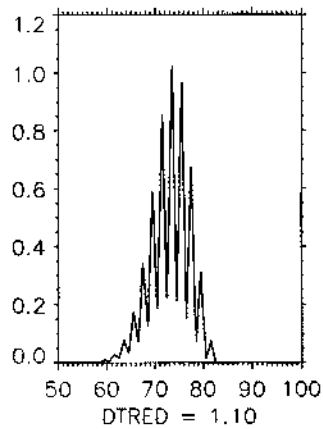
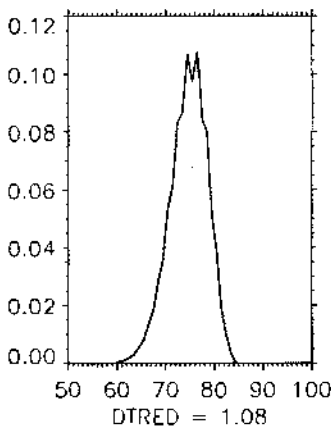
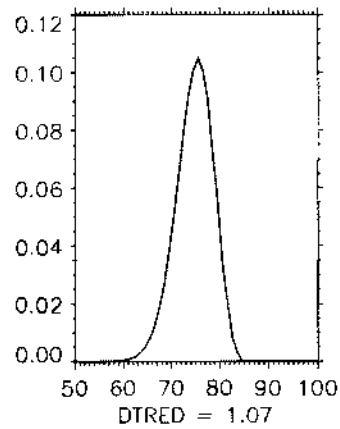
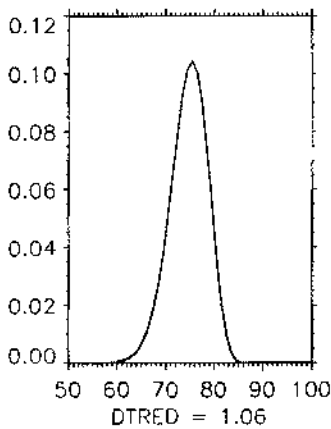


Abbildung 10: Numerische Lösung mit Korrektur der numerischen Dispersion in Abhängigkeit von der Zeitdiskretisierung. Aufgetragen ist in jeder Kurve die Konzentration in Bq/m^3 gegen den Ort in m nach einer Zeit von 75 Jahren. Variiert wurde der Faktor f_{DTRED} , der nach Kapitel 3.2.4 die Zeitschrittweite festlegt. Für die Rechnungen wurde eine Gitter-Pecletzahl von 10,0 verwendet.

5.3 Korrektur für die numerische Dispersion

CHET1 ist mit einer Korrektur für die numerische Dispersion versehen. Sie wird in Kapitel 2.3.7 erläutert. Ihre Durchführung kann im Input-Datenfile an- bzw. abgeschaltet werden. Wie in Kapitel 4.1.6 erläutert, bringt diese Korrektur auch noch bei ungewöhnlich hohen Gitter-Pecletzahlen sehr genaue Ergebnisse. Sie erlaubt somit eine gröbere Ortsdiskretisierung und damit automatisch auch entsprechend große Zeitschritte.

Bei Peclet-Zahlen, die größer als 2,0 sind, können sich bei zu niedriger Wahl des Faktors f_{DTRED} negative Werte für die korrigierte Dispersionslänge ergeben. Dies hat allerdings keine nachteiligen Auswirkungen.

5.4 Ausgabe von kumulierten Mengen

Im .out-File jedes Rechenlaufs werden bei entsprechender Schalterstellung im Input-Datenfile für jeden Beobachtungszeitpunkt (zu dem die Ortsabhängigkeit der Konzentration in das .cok-File ausgegeben wird) für jedes Radionuklid angegeben:

- Kumulierter Einstrom in das Modellgebiet bis zu diesem Zeitpunkt,
- Kumulierter Ausstrom aus dem Modellgebiet bis zu diesem Zeitpunkt,
- Aktuelle im gesamten Modellgebiet vorhandene Menge des Radionuklids,
- Relative Differenz zwischen Einstrom einerseits und Gesamtmenge und Ausstrom andererseits.

Diese Angaben dienen der Überprüfung der Werte für die Radionuklidquelle und zur Kontrolle des Rechenprogramms. Die relative Differenz sollte in der Gegend des numerischen Fehlers des Rechners liegen, wenn das Radionuklid nicht dem radioaktiven Zerfall unterliegt bzw. aus Mutternukliden aufgebaut wird.

6 Literaturverzeichnis

- [1] R. Storck, D. Buhmann, R.-P. Hirsekorn, T. Kühle, L. Lührmann: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Bericht GRS-122, Braunschweig (1996).
- [2] 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).
- [3] W. Kinzelbach: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien (1987).
- [4] G. de Marsily: Quantitative Hydrology. Academic Press, Inc., San Diego (1986).
- [5] J. Bear, A. Verruijt: Modeling Groundwater Flow and Pollution. Theory and Applications of Transport in Porous Media. D. Reidel Publishing Company (1987).
- [6] J. Bear: Hydraulics of Groundwater. McGraw-Hill Book Company (1979)
- [7] L. Lapidus, G.F. Pinder: Numerical Solution of Partial Differential Equation in Science and Engineering. John Wiley & Sons, New York (1982).
- [8] F. Häfner, D. Sames, H.-D. Voigt: Wärme- und Stofftransport, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest, 1992.
- [9] D. Marsat: Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen. B.I.-Wissenschaftsverlag, Bibliographisches Institut, Mannheim (1976).
- [10] P.S. Huyakorn, G.F. Pinder: Computational Methods in Subsurface Flow. Academic Press, Inc., Orlando (1983).
- [11] W. Kinzelbach: Groundwater Modelling. Developments in Water Science 25, Elsevier Science Publishers, Amsterdam (1986).
- [12] J.J. Fried: Groundwater Pollution. Developments in Water Science 4, Elsevier Science Publishers, Amsterdam (1975).
- [13] R.A. Greenkorn: Flow Phenomena in porous Media. Energy, Power and Environment, Marcel Dekker Inc., New York (1983).
- [14] Chaudari, N. M.: An improved numerical technique for solving multidimensional miscible displacement equations. Soc. Pet. Eng. J., 11(3), S. 277 - 284 (1971).
- [15] J. Gilby, R.J. Hopkirk: TROUGH-1d-Transport of Radioactive Outflows in Underground Hydrology. User's Handbook an Theoretical Description, Zürich 1985.

- [16] SWIFT: The INTERA Simulator for Waste Injection, Flow and Transport: User's Manual for SWIFT, Version TUB/PTC, Release 3.82, 634D-01G-02, Revised for 634D-01C-02A on February 1986. INTERA Environmental Consultants, Inc., Houston, Texas 1982.
- [17] 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.
- [18] H. Illi: Langzeitsicherheit des Endlagers KONRAD. 13. Tagung Radioaktiver Abfall - Langzeitsicherheitsnachweis bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle. Haus der Technik, Essen, 31. Oktober 1989.
- [19] M. Abramowitz, I. A. Stegun: Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, Inc, New York, 1972.

Anhang 1: Beschreibung der COMMON Blöcke

Im folgenden sind die COMMON-Blöcke zusammen mit einer Inhaltsbeschreibung nach dem 3. Buchstaben alphabetisch geordnet aufgelistet. Alle Namen der COMMON-Blöcke bestehen, entsprechend der Vereinbarung für REPOS, EXPOS und Statistikrechnungen, aus 4 Buchstaben:

Der erste Buchstabe ist immer ein W, als Kennzeichen für einen COMMON-Block.

Der zweite Buchstabe ist ein C, wenn es sich um einen COMMON-Block mit CHARACTER-Variablen handelt bzw. ein Z, wenn der COMMON-Block REAL Variablen enthält.

Der 3. Buchstabe charakterisiert den Inhalt des Commonblocks:

- B blockspezifische Größen,
- E elementspezifische Daten,
- G gebietsspezifische Daten,
- H Hilfsvariablen,
- K kumulierte Größen,
- M materialspezifische Daten,
- N nuklidspezifische Daten,
- O Variablen zur Steuerung des Outputs,
- R REPOS Größen,
- V verschiedenes,
- Z zeitabhängige Variablen.

Als vierter Buchstabe steht ein C zur Kennzeichnung der Zugehörigkeit zu CHET.

Für die Namensgebung der Variablen gilt folgende Regelung:

erster Buchstabe:

- C Charactervariable,
- I Schalter oder Nummer,
- K Laufindex bis N,
- L Dimensionierungsparameter,
- N maximale Integerzahl,
- R Realgröße,

zweiter Buchstabe entsprechend der Zugehörigkeit zum COMMON-Block,

dritter Buchstabe:

- C Konzentration,
- X Längenangabe,

letzter Buchstabe:

- C CHET-spezifische Variable (bei Charakter und Integervariablen),
- ORT ortsabhängiger Output,
- ZEI zeitabhängiger Output.

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZBC/

Inhalt : Blockspezifische Rechen­daten
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CBLOCK, CCHET, CINIT, CNEU, CRF, CSOLV

Variablenliste : RBX(NBC),RBRF(LBC,LNC),RBCA(LBC,LNC),
RBCN(LBC,LNC), IBGC(LBC), NBC

Bedeutung der Variablen :

RBX(KBC) : relative Länge des Abstands Nullpunkt bis Blockmittelpunkt des Blockes KBC

RBRF(KBC,KNC) : Retardationsfaktor

RBCA(KBC,KNC) : totale Aktivitätskonzentration zur Zeit TA

RBCN(KBC,KNC) : totale Aktivitätskonzentration zur Zeit TN

IBGC(KBC) : Nummer des Gebietes, in dem sich der Block befindet

NBC : Gesamtzahl der Blöcke

Beschreibung des COMMON-Blocks /WCEC/

Inhalt : CHARACTER-Variablen für elementspezifische Daten (CHET)

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: ICHET

Variablenliste : CEC(LNC), CENAMEC(LERC)

Bedeutung der Variablen :

CEC(KEC) : Elementname

CENAMEC(KERC) : Beschreibung des Inhalts der KERC-ten Spalte der Matrix mit
den elementspezifischen Daten REC

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZEC/

Inhalt : Elementspezifische Daten (CHET)

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: ICHET

Variablenliste : NEC, NERC, REC(LNC, LERC)

Bedeutung der Variablen :

NEC : aktuelle Anzahl von Elementen

NERC : aktuelle Anzahl von elementspezifischen Daten pro Element,
d.h. Anzahl verschiedener Materialien

REC(KEC, KERC) : elementspezifische Daten, z.B. K_d -Wert für jedes Element KEC

Beschreibung des COMMON-Blocks /WCGC/

Inhalt : CHARAKTER-Variablen für gebietsspezifische Daten
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: DACHIN

Variablenliste : CGNAMEC(LGC)

Bedeutung der Variablen :

CGNAMEC(KGC) : Beschreibung der Gebiete

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZGC/

Inhalt : gebietsspezifische Daten
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CBLOCK, DACHIN

Variablenliste : IGBC(LGC), IGMC(LGC), RGA(LGC), RGDX(LGC),
RGXREL(LGC), NGC

Bedeutung der Variablen :

IGBC(KGC) : Zahl der Blöcke im Gebiet
IGMC(KGC) : Spaltennummer in der Matrix der materialspezifischen Daten
RGA(KGC) : Querschnitt der Gebiete
RGDX(KGC) : Blocklänge in m
RGXREL(KGC) : Anteil des Gebietes am Transportweg
NGC : Zahl der Gebiete

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZHC/

Inhalt : Hilfsgrößen

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CHILF

Variablenliste : RHV(LBC), RH1(LBC,LNC), RH2(LBC,LNC), RH3(LBC,LNC)

Bedeutung der Variablen :

RHV(KBC) : Porenvolumen

RH1(KBC,LNC) : Konstante zur Lösung des Gleichungssystems

RH2(KBC,LNC) : Konstante zur Lösung des Gleichungssystems

RH3(KBC,LNC) : Konstante zur Lösung des Gleichungssystems

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZKC/

Inhalt : kumulierte Größen

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CINIT, CKUM

Variablenliste : RKM(LNC,LOORT), RKQ(LNC,LOORT), RKS(LNC,LOORT),
RKD(LNC,LOORT), RKTMAX(KNC), RKCMAK(KNC)

Bedeutung der Variablen :

RKM(KNC,KOORT) : kumulierte Menge im Transportweg

RKQ(KNC,KOORT) : kumulierter Eintrag in den Transportweg

RKS(KNC,KOORT) : kumulierter Austrag

RKD(KNC,KOORT) : relative Differenz zwischen kumuliertem Ein- und Austrag

RKTMAX(KNC) : Zeit des Konzentrationsmaximums an der Beobachtungsstelle

RKCMAK(KNC) : Konzentrationsmaximum an der Beobachtungsstelle

Beschreibung des COMMON-Blocks /WCMC/

Inhalt : CHARACTER-Variablen der materialspezifischen Daten

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: MACHIN

Variablenliste : CMNAMEC(LMC)

Bedeutung der Variablen :

CMNAMEC(KMC) : Bezeichnung der Materialien

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZMC/

Inhalt : materialspezifische Daten
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CPEKOR, MACHIN

Variablenliste : IMEC(LMC), RMALPHAJ(LMC), RMALPHAK(LMC,LNC),
RMDM(LMC), RMPOROS(LMC), RMRHO(LMC), NMC

Bedeutung der Variablen :

IMEC(KMC) : Spaltennummer in der Matrix REC der elementspezifischen Daten

RMALPHAJ(KMC) : Dispersionslänge aus dem Job-Input-File

RMALPHAK(KMC,KNC): korrigierte Dispersionslänge

RMDM(KMC) : Diffusionskonstante

RMPOROS(KMC) : effektive Porosität

RMRHO(KMC) : Gesteinsdichte

NMC : Zahl der Materialien

Beschreibung des COMMON-Blocks /WCNC/

Inhalt : CHARACTER-Variablen der nuklidspezifischen Daten (CHET)

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: JICHIN2

Variablenliste : CNC(LNC)

Bedeutung der Variablen :

CNC(KNC) : Elementnamen der Nuklide

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZNC/

Inhalt : Nuklidspezifische Daten (CHET)
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CEXP, CINIRAZ, CRF, ICHET, JICHIN2

Variablenliste : RNC(LNC), RNGC(LNC,LNC), RNHEXPC(LNC), INC(LNC), IN-
TC(LNC), INEC(LNC), INSUMC, INKRNC(LNC,0:LNC),
NNANZC, NNC, NNRC(5)

Bedeutung der Variablen :

RNC(KNC) : Zerfallsrate

RNGC(KNC,KNC) : Produkte, die bei der Berechnung des Zerfalls benötigt werden

RNHEXPC(KNC) : Exponentialfunktion von Zerfallskonstante mal Zeitschrittweite

INC(KNC) : Massenzahl

INTC(KNC) : Zeilenabstand des Tochternuklids in den Nuklidmatrizen

INEC(KNC) : Spaltennummer des zugehörigen Elements in den Elementmatrizen

INSUMC : Schalter für das Aufsummieren der Inventare unberücksichtigter
Mutternuklide auf das Inventar des Tochternuklids:
= 0: nicht aufsummieren
≠ 0: aufsummieren

INKRNC(KNC,KNC) : Kette von Nukliden, die in einer Zeitschleife gerechnet werden

NNANZC : Anzahl der Ketten in INKRNC

NNC : aktuelle Gesamtzahl der Nuklide

NNRC(1) : Anzahl berücksichtigter Spaltprodukte

NNRC(2) : Anzahl berücksichtigter Nuklide der Th-Reihe

NNRC(3) : Anzahl berücksichtigter Nuklide der Np-Reihe

NNRC(4) : Anzahl berücksichtigter Nuklide der U-Reihe

NNRC(5) : Anzahl berücksichtigter Nuklide der Am-Reihe

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZOC/

Inhalt : Steuergrößen für den Output

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CBAUS, CINIT, CPEKOR, CVAUS, JICHIN2

Variablenliste : ROORT(LOORT), ROOK(LNC,LOORT,LBC), ROEXP,
ROZEI(LOZEI), ROZK(LNC,LOZEI+1,LBC), NOZEI, IOEXP,
IOZEI(LOZEI), NOORT, IOIC(6), IOOC

Bedeutung der Variablen :

IOIC : Schalter für die Steuerung der Ausgabe der Eingabedaten

IOIC(1) : zur Unterteilung des Transportwegs

IOIC(2) : deckgebirgsspezifische Daten

IOIC(3) : elementspezifische Daten

IOIC(4) : Eingabedaten im Input-Datenfile

IOIC(5) : nuklidspezifische Daten

IOIC(6) : REPOS-Daten (RVSIN)

IOOC : Schalter für die Ausgabe der ortsabhängigen Radionuklidkonzentration zu vorgegebenen Zeitpunkten (.cok) und von Kontrollvariablen

Ausgabe der Zeitabhängigkeit:

NOZEI : Anzahl der zusätzlich zu EXPOS ausgewählten Beobachtungsstellen

IOEXP : Blocknummer der für EXPOS ausgewählten Beobachtungsstelle

IOZEI(KOZEI) : Blocknummer der ausgewählten Beobachtungsstellen

ROEXP : Anteil der für EXPOS ausgewählten Beobachtungsstelle

ROZEI(KOZEI) : Anteil der ausgewählten Entnahmeorte am Gesamtmodellgebiet

ROZK(KNC,KOZEI,KTC): Konzentrationen in Abhängigkeit der Zeit an ausgewählten Beobachtungsstellen

Ausgabe der Ortsabhängigkeit:

NOORT : Anzahl ausgewählter Beobachtungszeitpunkte

ROORT(KOORT) : ausgewählte Beobachtungszeitpunkte

ROOK(KNC,KOORT,KBC): Konzentrationen für alle Blöcke zu ausgewählten Beobachtungszeitpunkten

Beschreibung des COMMON-Blocks /WCRC/

Inhalt : CHARACTER-Variablen mit REPOS-Größen

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: RVSIN

Variablenliste : CRNY(LNY)

Bedeutung der Variablen :

CRNY(KRNY) : Elementnamen der REPOS Nuklide

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZRC/

Inhalt : REPOS-Größen

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CINIT, CINQUEL, NUWACH, RVSIN

Variablenliste : RRUNYA(LNY), RRUNYN(LNY), RRTA, RRTN, RRYN(LNY),
IRPL3,
NRYN, IRNY(LNY), IRNTY(LNY), IRNCHY(LNY)

Bedeutung der Variablen :

RRUNYA(KRNY) : Freisetzungsraten zum Anfang des aktuellen REPOS-Zeitschritts

RRUNYN(KRNY) : Freisetzungsraten zum Ende des aktuellen REPOS-Zeitschritts

RRTA : Anfang des aktuellen REPOS-Zeitschritts

RRTN : Ende des aktuellen REPOS-Zeitschritts

RRYN(KNY) : Zerfallskonstanten der REPOS-Nuklide

IRPL3 : Zahl der ausgewählten Segmente (einschl. Wurzelsegment)

NRYN : Zahl der Nuklide in REPOS

IRNY(KRNY) : Massenzahlen der REPOS Nuklide

IRNTY(KRNY) : Zeilenabstand des Tochternuklids in der Nuklidmatrix

IRNCHY(KRNY) : Nummer des CHET-Nuklids, dem die Freisetzung zugerechnet werden soll

Beschreibung des COMMON-Blocks /WCVC/

Inhalt : CHARACTER-Variablen für verschiedene Größen
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: JICHIN1

Variablenliste : CVCH(5)

Bedeutung der Variablen :

CVCH	:	CHARACTER-Variablen für CHET
CVCH(1)	:	Name des Datenfiles DACH
CVCH(2)	:	Name des Datenfiles MACH
CVCH(3)	:	Name des Datenfiles ELCH
CVCH(4)	:	Name des .rvs-Files mit allgemeinen Daten von REPOS
CVCH(5)	:	Name des .rns-Files mit den Nuklidfreisetzungen

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZVC/

Inhalt : verschiedene Größen in CHET

Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CQUEL, CVAUS, DACHIN, JICHIN2

Variablenliste : CIND(LCIND), IVINQUEL, IVPEKOR, RVMIN, RVPE, RVVALPHA,
RVVDM, RVVDUENN, RVTRANS, RVQUEL(LNC), RVVS, RVXGES

Bedeutung der Variablen :

CIND(KIND)	: Individuell zu verwendende Parameter in Chet
IVINQUEL	: Nummer des Blocks, in dem sich die Quelle befindet
IVPEKOR	: Schalter, ob eine Korrektur der Dispersionslänge stattfinden soll
RVVALPHA	: Variationsfaktor der Dispersionslänge
RVVDM	: Variationsfaktor der Diffusion
RVVDUENN	: Variationsfaktor des Querschnitts (Verdünnung)
RVMIN	: Minimum der Retardationsfaktoren aller Nuklide
RVPE	: Gitterpeletzahl zur Berechnung der Ortsdiskretisierung
RVQUEL(KNC)	: Freisetzungsrates in den ersten Block des Transportwegs
RVINQUEL	: relativer Ort der Quelle
RVXGES	: Gesamtlänge des Transportwegs
RVTRANS	: Transportzeit des Fluids
RVVS	: Volumenstrom

Beschreibung des COMMON-Blocks /WZZC/

Inhalt : Zeitablauf-Steuergrößen
Dokumentationsstand : 06.03.96

Programme mit schreibendem Zugriff: CINIT, CINQUEL, CNEU, CRF, CVAUS, JICHIN2

Variablenliste : NTC, RTDT(LNC), RTABBR, RTANF, RTAUS(LTC),
RTEND1(LNC), RTDT1, RTDTRED, RTEND, RTENDFR, RTA,
NTANZ, ITDEK

Bedeutung der Variablen :

RTDT(KNC)	: aktuelle Zeitschrittweite
RTDTRED	: Faktor zur Reduzierung der maximal möglichen Schrittlänge
RTENDFR	: Ende der Freisetzung aus dem Grubengebäude
RTABBR	: Faktor für Abbruchkriterium der Ausbreitungsrechnung
RTANF	: Anfangszeitpunkt der Ausgabe in .czk
RTAUS(KTC)	: Ausgabezeitpunkte in .czk
RTA	: Anfang des aktuellen CHET-Zeitschrittes
RTEND	: Zeitpunkt, an dem die CHET-Rechnung beendet wird
RTEND1(KNC)	: nuklidabhängiges Ende der Ausbreitungsrechnung
NTC	: Nummer des Zeitschrittes
NTANZ	: Anzahl der Ausgabezeitpunkte
ITDEK	: Anzahl der Ausgabezeitpunkte pro Dekade in .czk

Anhang: Bestimmung der Maxima der analytischen Lösungen

1. Maximum von Lösung 2:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi\alpha ut}} \left(\frac{x}{ut} \right) \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut} \right). \quad (55)$$

Es wird t als konstant angesehen und der Ort des Maximums zu diesem Zeitpunkt gesucht:

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi\alpha ut}} \left[\exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut} \right) \left(\frac{1}{ut} - \left(\frac{x}{ut} \right) \frac{2(x-ut)}{4\alpha ut} \right) \right]. \quad (56)$$

Nullsetzen der Ableitung liefert:

$$1 - \frac{2x_{\text{Max}}(x_{\text{Max}} - ut)}{4\alpha ut} = 0, \quad (57)$$

$$x_{\text{Max}} = \frac{ut}{2} + \sqrt{\left(\frac{ut}{2} \right)^2 + 2\alpha ut}. \quad (58)$$

Mit der Näherung $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \dots$ für $x \ll 1$, d. h. $8\alpha \ll ut$

und Abbruch nach dem linearen Glied erhält man:

$$\underline{\underline{x_{\text{Max}} = ut + 2\alpha}} \quad (59)$$

2. Maximum von Lösung 3:

$$c(x, t) = c_0 \left[\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha ut}} \left(\exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut} \right) - \frac{1}{2\alpha} \left(e^{x/\alpha} \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4\alpha ut}} \right) \right) \right) \right]. \quad (60)$$

Nach [19] (Formel 7.1.23) gilt:

$$\sqrt{\pi} z \exp(z^2) \operatorname{erfc}(z) - 1 - \dots; \quad (61)$$

daraus folgt:

$$\operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4\alpha ut}}\right) \sim \exp\left(-\frac{(x+ut)^2}{4\alpha ut}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{4\alpha ut}}{x+ut}\right); \quad (62)$$

eingesetzt ergibt sich

$$c(x, t) = c_0 \left(\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha ut}} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut}\right) - \frac{1}{2\alpha} \left(\exp\left(\frac{x}{\alpha} - \frac{(x+ut)^2}{4\alpha ut}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{4\alpha ut}}{x+ut}\right) \right) \right), \quad (63)$$

$$c(x, t) = c_0 \left(\left(\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha ut}} - \frac{1}{2\alpha \times \sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{4\alpha ut}}{x+ut} \right) \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut}\right) \right), \quad (64)$$

$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{\pi\alpha ut}} \left(\left(1 - \frac{ut}{x+ut} \right) \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut}\right) \right). \quad (65)$$

Bei konstantem t nach x abgeleitet ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{\pi\alpha ut}} \left(\left[\left(1 - \frac{ut}{x+ut} \right) \left(\frac{-2(x-ut)}{4\alpha ut} \right) + \frac{ut}{(x+ut)^2} \right] \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut}\right) \right), \quad (66)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{\pi\alpha ut}} \left(\left[\frac{(-2x \cdot (x+ut) \cdot (x-ut) + 4\alpha (ut)^2)}{4\alpha ut \cdot (x+ut)^2} \right] \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha ut}\right) \right), \quad (67)$$

Damit die Ableitung null wird muß die Klammer über dem Bruchstrich null werden:

$$[2x_{\text{Max}} (x_{\text{Max}} + ut) (x_{\text{Max}} - ut) = 4\alpha \cdot (ut)^2]. \quad (68)$$

Die Gleichung dritten Grades wird iterativ gelöst:

$$x_{\text{Max}} = ut + \frac{2\alpha(ut)^2}{x_{\text{Max}}(x_{\text{Max}} + ut)} . \quad (69)$$

Die gesuchte Lösung wird in der Gegend von ut liegen. Als Startwert wird daher ut eingesetzt und nach der ersten Iteration abgebrochen. Man erhält:

$$\underline{\underline{x_{\text{Max}} = ut + \alpha}} \quad (70)$$

d. h. für große ut strebt das Maximum gegen diesen Wert.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1	Ausschnitt aus dem Transportweg mit Zuordnung der Parameter.....	8
Abbildung 2	Fließschema einer Transportrechnung	17
Abbildung 3	Ortsabhängigkeit der Konzentration für eine numerische und drei analytische Lösungen. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 0,9. Die in Kapitel 2.3.7 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.	27
Abbildung 4	Ortsabhängigkeit der Konzentration für die analytische Lösung und vier numerische Lösungen. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 0,9. Die in Kapitel 2.3.6 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.	28
Abbildung 5	Ortsabhängigkeit der Konzentration für die analytische Lösung und drei numerische Lösungen, wobei die Nuklidquelle nicht am Rand des Modellgebiets liegt. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 0,9. Die in Kapitel 2.3.7 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde nicht durchgeführt.	29
Abbildung 6	Ortsabhängigkeit der Konzentration für eine analytische und vier numerische Lösungen. Der Faktor f_{DTRED} war in allen Fällen 1,0. Die in Kapitel 2.3.6 beschriebene Korrektur für die numerische Dispersion wurde durchgeführt. ...	30
Abbildung 7	Ortsabhängigkeit der Konzentration für I-129. Die Ergebnisse des Programms CHET1 sind durchgezogen dargestellt, die Ergebnisse des Programms SWIFT dagegen gepunktet. Aufgetragen sind die Konzentrationen für fünf Zeitpunkte. Der Wechsel der Porosität liegt bei 31 500 m. Die Rechnung mit CHET1 wurden mit Korrektur der numerischen Dispersion und einer Gitter-Pecletzahl von 0.753 durchgeführt. Bei SWIFT ist eine Gitter-Pecletzahl von 0.075 notwendig, um die erforderliche Genauigkeit zu erreichen.....	37
Abbildung 8	Ortsabhängigkeit der Konzentration für U-235. Die Ergebnisse des Programms CHET1 sind durchgezogen dargestellt, die Ergebnisse des Programms SWIFT dagegen gepunktet. Aufgetragen sind die Konzentrationen für fünf Zeitpunkte. Der Wechsel der Porosität liegt bei 31 500 m. Der K_d -Wert ändert sich bei 6 900 m und bei 31 500 m. Die Rechnung mit CHET1 wurde mit Korrektur der numerischen Dispersion und einer Gitter-Pecletzahl von 0.753 durchgeführt. Bei SWIFT ist eine Gitter-Pecletzahl von 0.0075 notwendig, um die erforderliche Genauigkeit zu erreichen.....	39
Abbildung 9	Numerische Lösung ohne Korrektur der numerischen Dispersion in Abhängigkeit von der Zeitdiskretisierung. Aufgetragen ist in jeder Kurve die Konzentration in Bq/m^3 gegen den Ort in m nach einer Zeit von 75 Jahren. Variiert	

wurde der Faktor f_{DTRED} , der nach Kapitel 3.2.4 die Zeitschrittweite festlegt. Für die Rechnungen wurde eine Gitter-Pecletzahl von 0,3 verwendet. 41

Abbildung 10

Numerische Lösung mit Korrektur der numerischen Dispersion in Abhängigkeit von der Zeitdiskretisierung. Aufgetragen ist in jeder Kurve die Konzentration in Bq/m^3 gegen den Ort in m nach einer Zeit von 75 Jahren. Variiert wurde der Faktor f_{DTRED} , der nach Kapitel 3.2.4 die Zeitschrittweite festlegt. Für die Rechnungen wurde eine Gitter-Pecletzahl von 10,0 verwendet..... 42

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1	Halbwertszeiten und K_d -Werte der in Testreihe 2 berücksichtigten Radionuklide31
Tabelle 2	Vergleich der Lösungen der Programme TROUGH und CHET1 mit der analytischen Lösung. Angegeben sind für die Nuklide, die keinen nennenswerten Aufbau durch radioaktiven Zerfall erleiden, die Ankunftszeiten und die Höhen der Maxima Ende des Ausbreitungsweges. Zur besseren Überschaubarkeit sind zusätzlich die numerischen Werte auf die analytischen bezogen eingetragen.32
Tabelle 3	Abhängigkeit der Ergebnisse der numerischen Simulation von der Diskretisierung. Angegeben sind die Ankunftszeiten und Höhen der Maxima bezogen auf die Werte der analytischen Rechnung34
Tabelle 4	Vergleich zwischen einer TROUGH-Rechnung und einer CHET1-Rechnung für die Radionuklide in den Zerfallsreihen. Angegeben sind die Ankunftszeiten und die Höhen der Maxima am Ende des Ausbreitungsweges sowie jeweils der Quotient aus den Ergebnissen beider Rechnungen. Bei den Feldern, die leer geblieben sind, erreichen die Radionuklide wegen des radioaktiven Zerfalls die Biosphäre nicht.....35
Tabelle 5	Vergleich zwischen TROUGH und CHET1-Rechnung bei Aufaddieren von in der Deckgebirgsrechnung nicht berücksichtigten Mutternukliden. Pu-240 erreicht wegen des radioaktiven Zerfalls die Biosphäre nicht.36
Tabelle 6	Zeitabhängigkeit der Quellrate für U-23538
Tabelle 7	K_d -Werte für Uran und Porositäten39

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

Schwertnergasse 1

50667 Köln

Telefon (02 21) 20 68-0

Telefax (02 21) 20 68-888

Forschungsgelände

85748 Garching b. München

Telefon (0 89) 3 20 04-0

Telefax (0 89) 3 20 04-599

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon (0 30) 8 85 89-0

Telefax (0 30) 8 85 89-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon (0531) 80 12-0

Telefax (0531) 80 12-200