



Bundesministerium
für Umwelt, Naturschutz
und Reaktorsicherheit

SCHRIFTENREIHE REAKTORSICHERHEIT UND STRAHLENSCHUTZ

**DREIDIMENSIONALE ANALYSEN ZUM TRANSPORT
VERSCHIEDENER NUKLIDKETTEN BEI NICHTLINEARER
ADSORPTION IN EINEM PORÖSEM MEDIUM MIT DEM
RECHENPROGRAMM TOUGH2**

BMU - 2003-624



WIR STEUERN UM AUF ERNEUERBARE ENERGIEN.

BMU – 2003-624

**Dreidimensionale Analysen zum Transport
verschiedener Nuklidketten bei nichtlinearer Adsorption
in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm
TOUGH2**

Javeri, V.

IMPRESSUM

Dieser Band enthält einen Abschlussbericht über ein vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) gefördertes Vorhaben. Verantwortlich für den Inhalt sind allein die Autoren. Das BMU übernimmt keine Gewähr für die Richtigkeit, die Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter. Der Eigentümer behält sich alle Rechte an der weiteren Nutzung oder Vervielfältigung des Berichts vor.

Der Bericht wurde durch die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH (GRS), Köln erstellt.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmer wieder und muss nicht mit der des BMU übereinstimmen.

Herausgeber:

Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit
Arbeitsgruppe RS I 1
Postfach 12 06 29
53048 Bonn

ISSN 1612-6386

Erscheinungsjahr: 2003

Kurzfassung

Im Rahmen von Analysen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle in einer tiefen geologischen Formation wird postuliert, daß das Grundwasser in das Endlager eindringt. Die radiologischen Substanzen können nach Lösung im Grundwasser im Endlager transportiert, umverteilt und anschließend in die Geosphäre freigesetzt werden. In diesem Bericht wird im Rahmen einer orientierenden Analyse der Transport verschiedener Nuklidketten unter Berücksichtigung der nichtlinearen Adsorption in einer dreidimensionalen Grundwasserströmung mit dem Rechenprogramm TOUGH2/EOS9NT untersucht. Die Anwendbarkeit der neueren TOUGH2-Version auf dreidimensionale Probleme wird aufgezeigt. Die Analysen zeigen u.a., daß mit dem linearen Adsorptionsmodell der Nuklidtransport im Vergleich zum nichtlinearen Langmuir-Ansatz deutlich unterschätzt werden kann.

Abstract

To analyse the long term safety of a repository for nuclear waste in a deep geological formation, groundwater inflow into the repository is postulated. The radionuclides after being dissolved in groundwater can be transported out of the repository and subsequently can be released into the geosphere. In the present report, within a scoping analysis, the transport of different nuclide chains including non-linear adsorption in a three dimensional groundwater flow is investigated with the computer code TOUGH2/EOS9NT. The application of the new TOUGH2-version to three dimensional problems is demonstrated. The analyses show that with the linear adsorption model the nuclide transport can be substantially underestimated compared to the non-linear Langmuir-model.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung..... | 1 |
| 2 | Kurze Beschreibung des Rechenprogramms TOUGH2 | 2 |
| 3 | Transport verschiedener Zerfallsreihen bei nichtlinearer Adsorption | 6 |
| 3.1 | Rechenmodell und Rechenfälle | 6 |
| 3.2 | Ergebnisse | 10 |
| 4 | Zusammenfassung | 14 |
| 5 | Literaturverzeichnis | 17 |

Bilder

Verteiler

Abbildungsverzeichnis

Bild 3-1: Dreidimensionales Modell zum Nuklidtransport in einem porösen Medium (Fall TN1)

Bild 3-2: Stationäre Verteilung der Porengeschwindigkeit bei $y = 25$ m im Fall TN1

Bild 3-3: Stationäre Verteilung der Porengeschwindigkeit bei $y = 475$ m im Fall TN1

Bild 3-4: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 25$ m und $t = 1000$ Jahre im Fall TN1

Bild 3-5: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 25$ m und $t = 10\,000$ Jahre im Fall TN1

Bild 3-6: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 475$ m und $t = 10\,000$ Jahre im Fall TN1

Bild 3-7: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 25$ m und $t = 10\,000$ Jahre im Fall TN2

Bild 3-8: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 25$ m und $t = 10\,000$ Jahre im Fall TN3

Bild 3-9: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 25$ m und $t = 10\,000$ Jahre im Fall TN4

Bild 3-10: Verteilung des Nuklids Cs135 bei $y = 25$ m und $t = 10\,000$ Jahre im Fall TN5

Bild 3-11: Abfluß des Nuklids Cs135 an der oberen Randfläche R für die Fälle TN1 bis TN5

Bild 3-12: Abfluß des Nuklids Np237 an der oberen Randfläche R für die Fälle TN1 bis TN5

Bild 3-13: Abfluß des Nuklids U238 an der oberen Randfläche R für die Fälle TN1 bis TN5

Bild 3-14: Integraler Verzögerungsfaktor für das Nuklid Cs135 für die Fälle TN1 bis TN5

Bild 3-15: Integraler Verzögerungsfaktor für das Nuklid Np237 für die Fälle TN1 bis TN5

Bild 3-16: Integraler Verzögerungsfaktor für das Nuklid U238 für die Fälle TN1 bis TN5

Verzeichnis der häufig verwendeten Symbole

| | |
|---|---|
| d | molekularer Diffusionskoeffizient [m^2/sec] |
| g | Erdbeschleunigung [m/sec^2] |
| k | Permeabilität [m^2] |
| m | Masse [kg] |
| n | Porosität |
| p | Druck [N/m^2] bzw. [Pa] |
| t | Zeit [sec] |
| u | Darcy-Geschwindigkeit [m/sec] |
| x | horizontale Koordinate [m] |
| y | horizontale Koordinate senkrecht zur Papierebene [m] |
| z | vertikale Koordinate [m] |
| A | Fläche [m^2] |
| D | Dispersionskoeffizient [m^2/sec] |
| K | Verteilungskoeffizient [m^3/kg] |
| L | Langmuir-Parameter [m^3/kg] |
| Q | Massenstrom [kg/sec] |
| R | Verzögerungsfaktor |
| S | Sättigung |

| | |
|-----------|---|
| T | Temperatur [grad] |
| V | Volumen [m ³] |
| X | Massenanteil in der Flüssigkeitsphase |
| Y | Massenanteil im Festkörper |
| β | Dispersionslänge [m] |
| λ | Zerfallskonstante [1/sec] |
| μ | Dynamische Zähigkeit [kg/(m · sec)] bzw. [Pa · sec] |
| ρ | Dichte [kg/m ³] |

Index

1 bis 99 Tracer bzw. Nuklid in der Flüssigkeitsphase

F Flüssigkeitsphase bzw. Flüssigkeitsgemisch

1 Einleitung

Im Rahmen von Analysen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle in einer tiefen geologischen Formation wird postuliert, daß das Grundwasser in das Endlager eindringt. Dadurch können radioaktive Substanzen nach Lösung in der Flüssigkeitsphase im Endlagerbergwerk transportiert, umverteilt und anschließend in die Geosphäre freigesetzt werden. Der Nuklidtransport kann auch durch molekulare Diffusion, hydrodynamische Dispersion und durch Naturkonvektion bei einem Temperatur- bzw. Dichtegefälle sowie durch Gasbildung verursacht werden.

Zur Beschreibung der Transportvorgänge im Endlager und im Deckgebirge bzw. in der Geosphäre kann das dreidimensionale Rechenprogramm TOUGH2 für eine poröse Konfiguration verwendet werden. In der GRS wurde bereits mit TOUGH2 der Gas- und Stoff- bzw. Nuklidtransport unter Berücksichtigung der Naturkonvektion, der Gesteinskonvergenz, der Gesteinsheterogenität, der Gasbildung, der Zweiphasenströmung, der Dichteströmung, der molekularen Diffusion, der hydrodynamischen Dispersion sowie der nichtlinearen Adsorption bei unterschiedlichen Bedingungen untersucht. Speziell in /JAV 00A, JAV 01/ wurde der Nuklidtransport bei variabler Salinität in einem zwei bzw. dreidimensionalen homogenen bzw. heterogenen porösen Medium mit der bisher häufig benutzten Programmversion TOUGH2/EOS7R analysiert, mit der aber maximal nur zwei Nuklide berücksichtigt werden können. Ferner wurde in /JAV 01A/ der Transport verschiedener Nuklidketten in einer zweidimensionalen Grundwasserströmung mit der neueren Version TOUGH2/EOS9NT untersucht.

In Ergänzung zu den obigen Arbeiten werden im vorliegenden Bericht zunächst im Kap. 2 die wesentlichen Aspekte von TOUGH2/EOS9NT beschrieben, mit der der Transport verschiedener Nuklidketten in einer dreidimensionalen ungesättigten Grundwasserströmung analysiert werden kann. Danach wird im Rahmen einer orientierenden Analyse im Kap. 3 der Transport verschiedener Nuklidketten mit nichtlinearer Adsorption in einer dreidimensionalen gesättigten Grundwasserströmung untersucht. Die vorliegenden Untersuchungen können zu Vergleichsanalysen mit ähnlichen Rechenprogrammen, wie z. B. NAMMU /FIS 01/, SPRING /GKW 00/ herangezogen werden.

2 Kurze Beschreibung des Rechenprogramms TOUGH2

Das Rechenprogramm TOUGH2 (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) wurde von K. Pruess am Lawrence Berkeley Laboratory, USA zur Simulation der transienten Zweiphasenströmung und des Wärmetransports in einer dreidimensionalen anisotropen porösen Konfiguration entwickelt /PRU 87, PRU 91/. In den letzten Jahren wurde TOUGH2 derart erweitert, daß auch der Nuklidtransport bei Berücksichtigung der Zweiphasenströmung und einer variablen Salinität analysiert werden kann /PRU 91A, PRU 95, MOR 99/. Das Programmsystem TOUGH2 besteht aus zwei Haupt-Teilen:

- Allgemeiner Teil: Dieser Teil enthält u.a. Programme zur
 - Erstellung eines einfachen dreidimensionalen Gitternetzes,
 - Steuerung der instationären Rechnung,
 - Berechnung der Stoffdaten anhand einer vollständigen Wasser-Dampf-Tafel,
 - Lösung eines linearen Gleichungssystems mit verschiedenen Methoden (Solver).
- Problemorientierter Teil: Mit diesem Programmteil, mit dem sog. EOS-Teil (Equation of State), werden die Anzahl und die Art der zu behandelnden Stoffe (Komponenten und Phasen) festgelegt. Es gibt verschiedene EOS-Teile, die abhängig von dem zu untersuchenden Problem herangezogen werden können. Zur Erstellung eines vollständigen Programmsystems muß der allgemeine Programmteil mit einem der verschiedenen EOS-Teile gekoppelt werden.

In den bisherigen Analysen mit TOUGH2 in der GRS wurden hauptsächlich drei verschiedene EOS-Teile angewendet. Nachfolgend werden sie kurz zusammengefaßt:

TOUGH2/EOS5:

- Die Flüssigkeitsphase bzw. das Flüssigkeitsgemisch besteht aus:
 - Wasser (Primär-Komponente),
 - einem im Wasser löslichen Gas.
- Die Gasphase bzw. das Gasgemisch besteht aus:

- Wasserdampf,
- Luft, Wasserstoff oder Kohlendioxid.

In TOUGH2/EOS5 werden drei Erhaltungsgleichungen für eine poröse ein- bis dreidimensionale Konfiguration gelöst:

- Massenerhaltung für Wasser,
- Massenerhaltung für die Gaskomponente,
- eine gemeinsame Energieerhaltung mit dem thermischen Gleichgewicht zwischen allen Komponenten und Gestein.

Zur Beschreibung der Strömung werden zwei Darcy-Gleichungen gelöst:

- Darcy-Gleichung für die Flüssigkeitsphase,
- Darcy-Gleichung für die Gasphase,
 - Kapillardruck $p_{\text{kap}} = (p_G - p_F) = f(\text{Phasenanteil})$,
 - Permeabilität der Flüssigkeitsphase = $f(\text{Richtung, Phasenanteil})$,
 - Permeabilität der Gasphase = $f(\text{Richtung, Phasenanteil})$.

Mit TOUGH2/EOS5 wurde die Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers Konrad untersucht /JAV 92/.

TOUGH2/EOS7:

In Ergänzung zum TOUGH2/EOS5 wird bei der Dreikomponenten-Version TOUGH2/EOS7 Salzwasser als ein weiterer Stoff in der Flüssigkeitsphase betrachtet und eine dritte Massenerhaltungsgleichung gelöst, wobei die Dichte und die Zähigkeit der Flüssigkeitsphase vom Salzwasseranteil abhängen. TOUGH2/EOS7 deckt TOUGH2/EOS5 ab. Mit TOUGH2/EOS7 wurden in der GRS verschiedene Analysen zum Gas-, Stoff- und Wärmetransport durchgeführt (siehe z.B. /JAV 95B, JAV 96B, JAV 98A, JAV 99/).

TOUGH2/EOS7R:

In Ergänzung zum TOUGH2/EOS7 wird bei der Fünfkomponenten-Version TOUGH2/EOS7R zusätzlich ein Mutternuklid und ein Tochternuklid betrachtet und zwei weitere Massenerhaltungssätze für diese Nuklide gelöst. TOUGH2/EOS7R deckt TOUGH2/EOS5 und TOUGH2/EOS7 ab. Mit TOUGH2/EOS7R wurden in der GRS verschiedene zwei- und dreidimensionale Analysen zum Gas- und Nuklidtransport unter Berücksichtigung der Zweiphasenströmung, der nichtlinearen Adsorption, der Gesteinskonvergenz und der variablen Salinität durchgeführt (siehe z.B. /JAV 96C, JAV 00A, JAV 00B, JAV 01/).

Die grundlegenden Bestimmungsgleichungen wurden bereits in den bisherigen GRS-Berichten zu den Untersuchungen mit der Dreikomponenten- bzw. Fünfkomponenten-Version von TOUGH2 erläutert und der Stand der Verifikation bzw. der Validation wurde dargelegt /JAV 95A, JAV 95B, JAV 96A, JAV 96B, JAV 96C, JAV 97, JAV 97A, JAV 98B, JAV 98C, JAV 99/. In die Dreikomponenten-Version TOUGH2/EOS7 und in die Fünfkomponenten-Version mit zwei Radionukliden TOUGH2/EOS7R wurden eigene Modellerweiterungen zur Berücksichtigung der Gesteinskonvergenz bei Zweiphasenströmung, des radioaktiven Zerfalls, der nichtlinearen Nuklidadsorption, der zeitabhängigen Randbedingungen erster Art und der richtungsabhängigen Diffusion bzw. Dispersion eingeführt /JAV 98A, JAV 00B/. Die bisherigen Untersuchungen haben gezeigt, daß TOUGH2 mit den Modellerweiterungen insgesamt zufriedenstellende Ergebnisse liefert und zur Analyse des Gas- und Nuklidtransports für eine beliebige poröse Konfiguration als geeignet angesehen werden kann.

TOUGH2/EOS9NT:

Wie oben dargestellt, können mit dem bisherigen Programm TOUGH2/EOS7R maximal nur zwei Nuklide behandelt werden. Daher wurde von Moridis et al ein neuer problemorientierter Teil EOS9NT entwickelt, mit dem der Transport von maximal 99 Tracern bzw. Nukliden in einer isothermen, ungesättigten Grundwasserströmung untersucht werden kann /MOR 99/. Die wesentlichen Merkmale von TOUGH2/EOS9NT werden zusammengefaßt:

- Zur Beschreibung der ungesättigten Grundwasserströmung wird die Richards-Näherung verwendet /MAR 86/. Dabei wird die Gasphase als eine passive Phase

ohne eigene Geschwindigkeit behandelt und auf die Massenerhaltungsgleichung der Gaskomponente verzichtet. Die hydraulische Durchlässigkeit bzw. die Permeabilität zur Bestimmung der Grundwasserströmung wird abhängig von der Wassersättigung anhand einer vorgegebenen Funktion ermittelt. Diese Modellierung ist zweckmäßiger und weniger aufwendig als die ausdrückliche Modellierung der Zweiphasenströmung wie bei TOUGH2/EOS7 bzw. EOS7R, wenn die Gasphase keine wichtige Rolle spielt, z.B. während der Flutungs- oder Zuflußphase. Diese Modellierung ist aber nicht geeignet, wenn das Strömungsverhalten bei einer Gasbildung untersucht werden soll; in einem solchen Fall ist TOUGH2/EOS7 bzw. EOS7R heranzuziehen.

- Die gelösten Stoffe bzw. Nuklide beeinflussen die Stoffeigenschaften der Flüssigkeitsphase nicht. Die Dichte und die Zähigkeit der Flüssigkeitsphase bzw. des Grundwassers hängen nur von dem Druck und der Temperatur ab.
- Mehrere Nuklidketten mit insgesamt 99 Nukliden können betrachtet werden. Für jedes Nuklid bzw. für jeden Tracer wird eine eigene Massenerhaltungsgleichung unter Berücksichtigung der Advektion, der Diffusion, der hydrodynamischen Dispersion und der Adsorption mit der integralen Finite-Differenzen-Methode gelöst, wobei für jedes Nuklid ein eigener separater Zeitschritt abhängig von dem Courant-Kriterium und von der Halbwertszeit des Nuklides verwendet wird. Dadurch kann der Rechenaufwand merklich reduziert werden.
- Nichtlineare Gleichgewichts- oder kinetische Adsorption von Nukliden gemäß dem Freundlich- oder Langmuir-Ansatz wird abhängig vom Gesteins- und Nuklidtyp beschrieben. Für jedes Nuklid können unterschiedliche Adsorptionsarten abhängig vom Gesteinstyp vorgegeben werden.
- Nuklidtransport kann unter Berücksichtigung von Kolloiden simuliert werden.
- Im Gegensatz zum TOUGH2/EOS7 bzw. EOS7R werden die Strömungs- und die Transportrechnung automatisch entkoppelt, wenn das Geschwindigkeitsfeld den stationären Zustand erreicht. Dies kann zu einer deutlichen Reduzierung des Rechenaufwands im Vergleich zum TOUGH2/EOS7R führen.
- Wie bei den früheren Versionen gibt es auch beim TOUGH2/EOS9NT keinen Post- bzw. Pre-Processor zur Erstellung des Datensatzes und zur Auswertung der Ergebnisse. Der Benutzer muß eigene Hilfsprogramme erstellen, um die Ergebnisse problemorientiert auszuwerten.

Das Programm TOUGH2/EOS9NT wurde speziell zur Untersuchung des Nuklidtransports in der ungesättigten Strömung in der Geosphäre des Endlagers Yucca Mountain, Nevada, USA entwickelt und liegt zur Zeit nur in einer nicht-exportfähigen Arbeitsversion vor. Dennoch wurde sie der GRS von den Entwicklern kostenlos - wie die früheren Versionen - zur Verfügung gestellt. Die Programmbeschreibung liegt nur in einer Entwurffassung vor /MOR 99/. Ohne eine ausreichende Erfahrung mit den früheren TOUGH2-Versionen ist eine Anwendung von TOUGH2/EOS9NT sehr schwierig. In /MOR 99/ wurden mit Hilfe von etwa 10 eindimensionalen analytisch lösbaren linearen Testbeispielen einige Aspekte von TOUGH2/EOS9NT überprüft. Dabei wurde eine gute Übereinstimmung mit den bereits bekannten Ergebnissen beobachtet. Bei der ersten eigenen Anwendung bzw. Überprüfung von TOUGH2/EOS9NT in /JAV 01A/ wurde bei den ein- und zweidimensionalen Analysen zum Nuklidtransport eine gute Übereinstimmung mit der früheren Version TOUGH2/EOS7R und mit den Rechenprogrammen MARNIE und NAMMU festgestellt. Eine ausführliche Anwendung bzw. Überprüfung aller modellierten Prozesse ist ein langwieriger Vorgang. Die nachfolgenden dreidimensionalen Analysen leisten dazu einen weiteren Beitrag.

3 Transport verschiedener Zerfallsreihen bei nichtlinearer Adsorption

In /JAV 01A/ wurde der Transport verschiedener Nuklidketten unter Berücksichtigung der nichtlinearen Adsorption in einem zweidimensionalen porösen Medium analysiert. In Ergänzung dazu wird in diesem Kapitel der dreidimensionale Transport von verschiedenen Zerfallsreihen mit mehr als zwei Nukliden in der Geosphäre eines Endlagers mit der neueren Version TOUGH2/EOS9NT untersucht, wobei jedoch eine solche Konfiguration mit mehr als zwei Nukliden mit der früheren Version TOUGH2/EOS7R nicht behandelt werden kann.

3.1 Rechenmodell und Rechenfälle

Beim hier postulierten dreidimensionalen Modell fließt das Grundwasser infolge eines vorgeschriebenen horizontalen Druckgefälles über ein Endlager mit einem vorgegebenen Nuklidinventar. Das Endlager befindet sich im unteren Teil des Modellgebiets. Die Radionuklide im kontaminierten Grundwasser strömen aus dem

Endlager in das umgebende Gestein ein und werden anschließend durch die Advektion und durch die Diffusion von unten nach oben transportiert. Die Radionuklide sind von Anfang an in Wasser gelöst, beeinflussen die Eigenschaften des kontaminierten Grundwassers nicht und können an der Oberfläche des porösen Mediums adsorbiert werden. Das betrachtete dreidimensionale Rechenmodell ist im Bild 3-1 dargestellt. Zunächst wird im Rechenfall TN1 die Adsorption vernachlässigt. In den weiteren Fällen wird die Nuklidadsorption nach dem nichtlinearen Langmuir-Ansatz berücksichtigt.

Das Nuklidinventar im Endlager (Materialgebiet 4) besteht aus zwei Nuklidketten bzw. insgesamt aus neun Nukliden:

- vereinfachte Neptunium-Zerfallsreihe: Cm-245 → Pu-241 → Am-241 → Np-237,
- vereinfachte Uran-Radium-Zerfallsreihe: U-238 → U-234 → Th-230 → Ra-226,
- Cs-135.

Die anfängliche Masse der gelösten Nuklide im Materialgebiet 4 ist:

| Nuklid-Nr. | Nuklid-Name | Halbwertszeit in Jahren | Masse des gelösten Nuklids in kg |
|------------|-------------|----------------------------|-------------------------------------|
| 1 | Cm-245 | 8,5E3 | 1E5 |
| 2 | Pu-241 | 1,4E1 | 0 |
| 3 | Am-241 | 4,3E2 | 0 |
| 4 | Np-237 | 2,1E6 | 0 |
| 5 | U-238 | 4,5E9 | 1E4 |
| 6 | U-234 | 2,4E5 | 0 |
| 7 | Th-230 | 7,7E4 | 0 |
| 8 | Ra-226 | 1,6E3 | 0 |
| 9 | Cs-135 | 2,3E6 | 1E6 |

Die obigen Mengenangaben sind nur als ein Beispiel zu verstehen. Andere Mengenvorgaben für jedes Nuklid sind bei TOUGH2/EOS9NT möglich.

Die wesentlichen Merkmale des Rechenfalls TN1 sind:

Rechenfall TN1:

- horizontale Länge: 5000 m, 125 Elemente je 40 m,
- vertikale Höhe: 500 m, 25 Elemente je 20 m,
- horizontale Breite senkrecht zur Papierebene: 500 m, 10 Elemente je 50 m,
- Porosität: 0,1,
- Permeabilität: $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$,
- gesättigte Strömung ohne Gasphase, $S_F = 1$,
- Dichte der Lösung: $\rho_F = \rho_{\text{Wasser}}(\rho, T)$,
- dynamische Zähigkeit der Lösung: $\mu_F = \mu_{\text{Wasser}}(\rho, T)$,
- Dichte des Gesteins: 1900 kg/m^3 ,
- Endlager (Materialgebiet 4):
 - x: 2400 bis 2600 m,
 - y: 0 bis 50 m,
 - z: -480 bis -500 m,
 - Porosität: 0,4,
 - Permeabilität: $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$,
- keine Adsorption,
- keine Dispersion,
- einheitliche Diffusion für alle Komponenten: $d = 1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$, mit diesem relativ hohen Wert soll der Einfluß der Dispersion näherungsweise berücksichtigt werden.
- Anfangsbedingung:
 - Materialgebiet 1: $T = 25 \text{ °C}$, nur Grundwasser,
 - Materialgebiet 4: $T = 25 \text{ °C}$, Massenanteil der Nuklide in der Flüssigkeitsphase gemäß dem vorgegebenen Nuklidinventar (siehe oben),

- Bedingungen an Randflächen:
 - linke obere Fläche "L" (x = 0 bis 200 m, y = 0 bis 50 m, z = 0): T = 25 °C, p = 6 bar, Zufluß des nicht-kontaminierten Grundwassers, keine Diffusion,
 - rechte obere Fläche "R" (x = 4800 m bis 5000 m, y = 0 bis 50 m, z = 0): T = 25 °C, p = 1 bar, nur advektiver Abfluß, keine Diffusion,
 - alle anderen Randflächen: undurchlässig,
- Diskretisierung: insgesamt 31250 Volumenelemente.

Rechenfälle TN2 bis TN5:

Im Gegensatz zum Fall TN1 wird in den Fällen TN2 bis TN5 die Adsorption der Nuklide berücksichtigt. Die nichtlineare Adsorption gemäß dem Langmuir-Ansatz findet nur außerhalb des Materialgebiets 4 statt. Die zugehörigen Parameter sind:

$$X_i = \frac{\text{Masse des Nuklids } i \text{ in der Flüssigkeitsphase}}{\text{Masse der Flüssigkeitsphase}},$$

$$Y_{\text{Ads}, i} = \frac{\text{Masse des adsorbierten Nuklids } i}{\text{Masse des Festkörpers}},$$

$$Y_{\text{Langmuir, Ads}, i} = K_{L, i} \rho_F X_i / (1 + L_{L, i} \rho_F X_i),$$

$K_{L, i}$: Verteilungskoeffizient nach Langmuir (Volumen/Masse),

$L_{L, i}$: Langmuir-Parameter (Volumen/Masse).

Ausgehend vom Fall TN1 werden die Rechenfälle TN2 bis TN5 wie folgt definiert:

| Nuklid | Langmuir-Verteilungs- koeffizient K_L in m^3/kg für die Fälle TN2 bis TN5 | Langmuir-Parameter L_L in m^3/kg | | | |
|--------|--|--------------------------------------|----------|----------|----------|
| | | Fall TN2 | Fall TN3 | Fall TN4 | Fall TN5 |
| Cm-245 | 1E-2 | 100 | 50 | 10 | 0 |
| Pu-241 | 2E-2 | 200 | 100 | 20 | 0 |
| Am-241 | 3E-2 | 500 | 250 | 50 | 0 |
| Np-237 | 1E-3 | 1000 | 500 | 100 | 0 |
| U-238 | 2E-3 | 800 | 400 | 80 | 0 |
| U-234 | 2E-3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Th-230 | 4E-2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Ra-226 | 2E-3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Cs-135 | 3E-3 | 400 | 200 | 40 | 0 |

Im Fall TN5 wird die lineare Henry-Adsorption simuliert und in den Fällen TN2 bis TN4 die nichtlineare Langmuir-Adsorption. In den Fällen TN1 bis TN5 nimmt die Adsorption schrittweise zu. Die postulierten Adsorptions-Parameter und die anderen Annahmen sind nur als ein Beispiel zu verstehen. Für eine konkrete Analyse sind jedoch standortspezifische Daten erforderlich. Unterschiedliche Vorgaben für die Adsorptionsparameter für jedes Nuklid sind bei TOUGH2/EOS9NT möglich. Alle anderen Modellannahmen des Falles TN1 bleiben erhalten.

3.2 Ergebnisse

Die obigen Rechenfälle wurden mit der neueren Version TOUGH2/EOS9NT bis $t = 10^5$ Jahre gerechnet. Da bei diesen Rechnungen die numerische Peclet-Zahl im hinsichtlich des Stofftransports relevanten Bereich überwiegend

$$(Peclet)_{Numerik} = (u\Delta x) / (nd) < 4$$

ist, kann man davon ausgehen, daß die gewählte Diskretisierung ausreichend genaue Ergebnisse liefert /JAV 98/. Dennoch wären etwas genauere Ergebnisse möglich, wenn eine feinere Diskretisierung eingeführt wird. Eine solche Rechnung erfordert jedoch einen merklich höheren Rechenaufwand als die hier dargestellte, bereits aufwendige dreidimensionale Analyse mit stark nichtlinearen gekoppelten Massenerhaltungssätzen für neun Komponenten. Zur Steuerung des Zeitschritts wurde das Courant-Kriterium im für den Nuklidtransport relevanten Bereich eingehalten:

Courant-Zahl: $Co = (u/n) (\Delta t/\Delta x) \leq 1$.

Abhängig vom Rechenfall lag der maximale Zeitschritt zwischen 2 und 80 Jahren, wobei der kleinere Wert hauptsächlich für den Fall ohne Adsorption gilt, weil alle Nuklide die Abflußfläche R erreichen, in deren Nähe relativ große Geschwindigkeiten auftreten. Zu einer sinnvollen Begrenzung des Rechenaufwandes wird in TOUGH2/EOS9NT der Zeitschritt nicht nur anhand der kleinsten Maschenweite und der größten Geschwindigkeit, sondern auch anhand der relevanten Änderung der Massenanteile der Nuklide bestimmt (internes Genauigkeitskriterium). Dies kann dazu führen, daß in einem Volumenelement das Courant-Kriterium verletzt wird, in dem relativ große Geschwindigkeiten auftreten aber keine bedeutenden Änderungen der Nuklidanteile berechnet werden. Da in TOUGH2 die Zeitdiskretisierung voll implizit als finite Differenz erster Ordnung erfolgt, muß eine Verletzung des Courant-Kriteriums nicht unbedingt zu ungenauen Ergebnissen führen. Die bisherigen Erfahrungen zeigen, daß keine nennenswerten Abweichungen bei den Ergebnissen zu erwarten sind, wenn die Courant-Zahl zwischen 1 und 3 liegt.

Die Darstellung der Verteilungen der Geschwindigkeit und des Massenanteils beim vorliegenden dreidimensionalen Modell ist nicht einfach, weil sie von den drei Koordinaten x, y und z abhängen. Zu einer übersichtlichen Darstellung dieser Ergebnisse werden zwei End-Ebenen in y-Richtung (senkrecht zur Papierebene) $y = 25$ m und $y = 475$ m gewählt, weil sie eine Eingrenzung der Verteilungen erlauben.

In den Bildern 3-2 und 3-3 sind die aus den x- und z-Komponenten ermittelten stationären Geschwindigkeitsverteilungen im Fall TN1 für $y = 25$ m und $y = 475$ m wiedergegeben. Da der Nuklidtransport die Geschwindigkeitsverteilung nicht beeinflußt, gelten diese Bilder auch für die Fälle TN2 bis TN5. Die Bilder 3-2 und 3-3 zeigen eine deutliche Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der y-Ebene. In der Ebene $y = 475$ m sind die Geschwindigkeiten um den Faktor 30 kleiner als die in der Ebene

$y = 25$ m. Durch die vorgegebene Druckbedingung an den oberen Randflächen fließt das Grundwasser an der linken oberen Fläche L in das Modellgebiet ein und strömt durch das Endlager in der Bodenmitte. Das kontaminierte Grundwasser strömt aus dem Endlager und fließt anschließend aus dem Modellgebiet an der rechten oberen Fläche R wieder ab. Im stationären Zustand sind der Zufluß des nicht-kontaminierten Grundwassers und der Abfluß des kontaminierten Grundwassers gleich und betragen $5,407 \cdot 10^6$ kg/Jahr. Die maximale Porengeschwindigkeit von $1,7 \cdot 10^{-8}$ m/s tritt - abgesehen von Randgebieten - im Endlager auf. Die schwache vertikale Strömung bei $x = 2500$ m im unteren Teil des Modellgebiets in der Ebene $y = 25$ m ist auf die deutlich unterschiedliche Porosität und Permeabilität im Materialgebiet 4 (Endlager) und im Materialgebiet 1 (umgebendes Gestein) zurückzuführen, wobei

$$n_{\text{Endlager}}/n_{\text{Gestein}} = 0,4/0,1 = 4,$$

$$k_{\text{Endlager}}/k_{\text{Gestein}} = 10^{-12}/10^{-14} = 100.$$

Zu einer übersichtlichen Darstellung der Ergebnisse zum Transportverhalten von Nukliden werden nachfolgend nur drei Nuklide mit einer relativ großen Halbwertszeit ($> 1 \cdot 10^6$ Jahre) aus verschiedenen Zerfallsreihen betrachtet; es sind: Np-237, U-238 und Cs-135.

In den Bildern 3-4 bis 3-6 sind beispielhaft die Verteilungen der Massenanteile des Nuklids Cs-135 in der Flüssigkeitsphase für die zwei Randebenen $y = 25$ m und $y = 475$ m bei $t = 1000$ Jahre und bei $t = 10000$ Jahre für den Fall TN1 ohne Adsorption dargestellt. Vergleicht man diese Massenanteile mit dem ursprünglichen Wert im Endlager (Cs-135: $X = 0,0125$), so ist eine hundertfache oder höhere Verdünnung in der Ebene $y = 25$ m in den ersten 10000 Jahren zu beobachten. Die Bilder 3-5 und 3-6 vermitteln einen Eindruck über das Transportverhalten der Nuklide in der y -Richtung. Die Konzentration des Nuklids Cs-135 in der Ebene $y = 475$ m ist um den Faktor 10000 niedriger als die in der Ebene $y = 25$ m, da die Geschwindigkeiten senkrecht zur y -Ebene um den Faktor 100 bis 1000 kleiner als die in der y -Ebene sind.

Die Bilder 3-7 bis 3-10 zeigen beispielhaft die Verteilungen der Massenanteile des Nuklids Cs-135 in der Flüssigkeitsphase in der Ebene $y = 25$ m bei $t = 10000$ Jahre für die Fälle TN2 bis TN5 mit der nichtlinearen Langmuir-Adsorption nur im Materialgebiet 1. In den Fällen TN2 bis TN5 wird der Langmuir-Verteilungskoeffizient K_L festgehalten und der Langmuir-Parameter L_L schrittweise reduziert. Folglich nimmt die Adsorption in

den Fällen TN2 bis TN5 schrittweise zu. Die maximale Nuklidadsorption tritt im Fall TN5 mit der linearen Adsorption ($L_L = 0$) auf. Aus den Bildern 3-5 und 3-6 bis 3-10 kann man klar entnehmen, daß mit zunehmender Adsorption das Nuklid Cs-135 langsamer aus dem Endlager nach oben zur Abflußfläche R transportiert wird. Der Knick bei $x = 2600$ m und $z = -470$ m bei der Cs-137-Verteilung im Bild 3-10 ist darauf zurückzuführen, daß alle Nuklide nur außerhalb des Endlagers im Materialgebiet 1 adsorbiert werden.

Auf die weitere Darstellung der Nuklidverteilung in der Ebene $y = 475$ m wird verzichtet, weil dort die Nuklidkonzentrationen sehr gering sind.

Zu einem integralen Vergleich der betrachteten Rechenfälle werden in den Bildern 3-11 bis 3-13 die Abflüsse der Nuklide Cs-135, Np-237 und U-238 aus dem Modellgebiet an der oberen Randfläche R wiedergegeben. Ohne Adsorption im Fall TN1 werden die Nuklide deutlich früher und mit einem höheren maximalen Wert aus dem Modellgebiet als in den Fällen TN2 und TN3 mit der nichtlinearen Langmuir-Adsorption ausgetragen. Dividiert man den Nuklid-Massenstrom an der oberen Randfläche R durch den gesamten Wasserabfluß von $5,407 \cdot 10^6$ kg/Jahr, so erhält man den Nuklid-Massenanteil X im Abfluß. Zum Beispiel für Cs-135 liegt X_{\max} bei $3,7 \cdot 10^{-5}$ an der oberen Randfläche R im Fall TN1 ohne Adsorption. Vergleicht man diesen Wert mit dem anfänglichen Massenanteil von $1,25 \cdot 10^{-2}$ für Cs-135 im Endlager, so ist eine 300-fache bzw. eine höhere Verdünnung zu beobachten. Die Abflüsse der restlichen Nuklide sind im Vergleich zu den in den Bildern 3-11 bis 3-13 dargestellten Verläufen vernachlässigbar. Ferner zeigen die Fälle TN2 bis TN5 folgende Ergebnisse hinsichtlich der Nuklidaustragung an der oberen Randfläche R:

TN2 (Langmuir-Adsorption): keine U238-Austragung,

TN3 (Langmuir-Adsorption): keine U238-Austragung,

TN4 (Langmuir-Adsorption): keine Nuklidaustragung,

TN5 (lineare Adsorption): keine Nuklidaustragung.

Zu einem weiteren integralen Vergleich der Fälle mit der Nuklidadsorption ist in den Bildern 3-14 bis 3-16 die zeitliche Entwicklung des integralen Verzögerungsfaktors für die drei Nuklide für die Fälle TN2 bis TN5 dargestellt, wobei

$$R_{\text{integral}} = 1 + \frac{\text{adsorbierte Nuklidmasse im gesamten Modellgebiet}}{\text{Nuklidmasse in Flüssigkeitsphase im gesamten Modellgebiet}}$$

Da in den betrachteten Fällen die Nuklide nur außerhalb des Materialgebiets 4 adsorbiert werden können, liegt der integrale Verzögerungsfaktor in der Anfangsphase bei 1. Sobald die Radionuklide das Materialgebiet 4 verlassen, kann die Adsorption wirksam werden und damit nimmt der integrale Verzögerungsfaktor allmählich zu und bleibt im Fall TN5 mit einer linearen Adsorption nach etwa 5000 Jahren weitgehend konstant. Die schwächere nichtlineare Langmuir-Adsorption in den Fällen TN2 bis TN4 führt zu niedrigeren Verzögerungsfaktoren im Vergleich zum Fall TN5 mit der linearen Adsorption (vgl. /LUH 96/). Bei Mutternukliden U-238 und Cs-135 nimmt der Verzögerungsfaktor in den Fällen TN2 bis TN4 monoton zu, weil die wirksame Nuklidkonzentration im gesamten Modellgebiet abnimmt. Beim Tochternuklid Np-237 ist jedoch das integrale Adsorptionsverhalten in den Fällen TN2 bis TN4 nicht monoton und der integrale Verzögerungsfaktor zeigt ein relatives Minimum bei etwa $t = 3000$ Jahre, weil die wirksame Nuklidkonzentration eines Tochternuklids auch durch die Adsorption und durch den Zerfall der Mutternuklide beeinflusst wird.

Zusammenfassend kann man aus den vorliegenden Analysen zum Nuklidtransport folgern:

- Mit der neueren Programmversion TOUGH2/EOS9NT kann der Transport verschiedener Nuklidketten in einem Grundwasser-System bei Berücksichtigung der nichtlinearen Nuklidadsorption in einem dreidimensionalen porösen Medium analysiert werden. Das Programm liefert plausible nachvollziehbare Ergebnisse.
- Mit dem linearen Adsorptionsmodell kann der Nuklidtransport im Vergleich zum nichtlinearen Ansatz nach Langmuir abhängig von den Adsorptionsparametern deutlich unterschätzt werden.

4 Zusammenfassung

Im Rahmen von Analysen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle in einer tiefen geologischen Formation wird postuliert, daß das Grundwasser in das Endlager eindringt. Die radiologischen Substanzen können nach Lösung im Grundwasser im Endlager transportiert, umverteilt und anschließend in die Geosphäre

freigesetzt werden. Zur Beschreibung der Transportvorgänge im Endlager, im Deckgebirge bzw. in der Geosphäre kann das dreidimensionale Rechenprogramm TOUGH2 für eine poröse Konfiguration verwendet werden. In der GRS wurde bereits mit TOUGH2 der Gas- und Stoff- bzw. Nuklidtransport bei unterschiedlichen Bedingungen untersucht. Mit der bisher häufig benutzten Programmversion TOUGH2/EOS7R können aber maximal nur zwei Nuklide berücksichtigt werden.

In Ergänzung zu den bisherigen Arbeiten werden im vorliegenden Bericht zunächst im Kap. 2 die wesentlichen Aspekte der neueren Programmversion TOUGH2/EOS9NT beschrieben, mit der der Transport verschiedener Zerfallsreihen mit maximal 99 Nukliden in einer dreidimensionalen ungesättigten Grundwasserströmung analysiert werden kann. Danach wird im Rahmen einer orientierenden Analyse im Kap. 3 der Transport verschiedener Nuklidketten mit nichtlinearer Langmuir-Adsorption in einer dreidimensionalen gesättigten Grundwasserströmung untersucht. Anhand der bisher durchgeführten Analysen kann man folgern:

- Bei gleichen Modellannahmen liefern die frühere Version TOUGH2/EOS7R und die neuere Version TOUGH2/EOS9NT gleiche Ergebnisse.
- Bei einer stationären Grundwasserströmung ist die Rechnung zum Nuklidtransport mit TOUGH2/EOS9NT deutlich schneller als die mit TOUGH2/EOS7R.
- Mit TOUGH2/EOS9NT kann der Transport verschiedener Nuklidketten in einem Grundwasser-System bei Berücksichtigung der nichtlinearen Nuklidadsorption in einem ein-, zwei- oder dreidimensionalen porösen Medium analysiert werden. Das Programm liefert plausible nachvollziehbare Ergebnisse.
- Mit dem linearen Adsorptionsmodell kann der Nuklidtransport im Vergleich zum nichtlinearen Ansatz nach Langmuir abhängig von den Adsorptionsparametern deutlich unterschätzt werden.

Insgesamt kann man anhand bisheriger Analysen folgendes feststellen: Die neuere Version TOUGH2/EOS9NT liefert plausible Ergebnisse zum Transport verschiedener Nuklidketten in einer dreidimensionalen Grundwasserströmung. Da hier eine konstante Wasserdichte postuliert wurde bzw. die salinitätsabhängige Wasserdichte vernachlässigt wurde, ist bei solchen Analysen eine Überschätzung des Nuklidtransports zu erwarten. Zu einer quantitativen Überprüfung der vorliegenden Analysen sollten Vergleichsanalysen mit ähnlichen Programmen, wie z. B. NAMMU, SPRING, durchgeführt werden. In einem späteren Bericht sollen weitere Aspekte von

TOUGH2/EOS9NT, z. B. Nuklidtransport in einer ungesättigten Strömung, behandelt werden.

5 Literaturverzeichnis

- /FIS 01/ Fischer-Appelt, K. et al.:
Implementierung von nichtlinearen Sorptionsansätzen in die
Transportrechenprogramme MARNIE, NAMMU und TOUGH2 und deren
Überprüfung durch Vergleichsrechnungen
GRS-A-2897 (Mai 2001)¹ [BMU-Schriftenreihe BMU-2001-583]
- /GKW 00/ GWK:
Rechenprogramm SPRING: Simulation of Processes in Groundwater
GWK-Ingenieurgesellschaft mbH, Bochum (2000)
- /JAV 92/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zur Gasausbreitung im Gebirge des Endlagers
Konrad mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-1925 (Mai 1992)¹
- /JAV 95A/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zum Nuklidtransport durch Naturkonvektion,
Gesteinskonvergenz und Dispersion in porösen Medien mit dem
Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2240 (Mai 1995)¹
- /JAV 95B/ Javeri, V.:
Analysen zum Stofftransport bei zwei Flüssigkeiten unterschiedlicher
Dichte in porösen Medien mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2265 (Oktober 1995)¹
- /JAV 96A/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zum Barrierenverhalten in einem salinaren
Endlager mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2302 (Febr. 1996)¹

- /JAV 96B/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zum Gas- und Stofftransport in einem Endlager im Salinar
in GRS-PTE-Workshop: Gase im Endlager (Mai 96)
GRS-129 (Dezember 1996)
- /JAV 96C/ Javeri, V.:
Orientierende Analysen zum Gas- und Nuklidtransport in einem Endlager im Salinar
GRS-A-2389 (Oktober 1996)¹
- /JAV 97/ Javeri, V.:
Vergleichende Analysen zum Nuklidtransport in einem vereinfachten Grubengebäude eines Endlagers im Salinar
GRS-A-2411 (Januar 1997)¹
- /JAV 97A/ Javeri, V.:
Analysen zum Gas- und Nuklidtransport im Westfeld der Grube Bartensleben des Endlagers Morsleben (ERAM)
GRS-A-2429 (Febr. 1997)¹
- /JAV 98/ Javeri, V.:
Analysen zum Stofftransport in einem heterogenen porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2524 (Januar 1998)¹
- /JAV 98A/ Javeri, V.:
Combined Gas and Nuclide Transport in a two-dimensional Repository considering a variable Rock Convergence
in TOUGH Workshop, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, California, USA, LBL-41995 (May 1998)
- /JAV 98B/ Javeri, V.:
Analysen zum Gas- und Nuklidtransport in einem vereinfachten Grubengebäude eines Endlagers im Salinar
GRS-A-2569 (Juni 1998)¹

- /JAV 98C/ Javeri, V.:
Analysen zum Nuklidtransport in einem heterogenen porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2650 (Dez. 1998)¹
- /JAV 99/ Javeri, V.:
Analysen zur thermohalinen Konvektion in einem heterogenen porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2697 (Mai 1999)¹ [BMU-Schriftenreihe BMU-2001-578]
- /JAV 99A/ Javeri, V.:
Analysen zum Nuklidtransport bei variablem Salzwasseranteil und nichtlinearer Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2742 (Okt. 1999)¹
- /JAV 00/ Javeri, V.:
Analysen zum Nuklidtransport bei salzanteilabhängiger Adsorption in einem heterogenen porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
GRS-A-2757 (Januar 2000)¹ [BMU-Schriftenreihe BMU-2000-556]
- /JAV 00A/ Javeri, V.:
Analysis of nuclide transport including non linear adsorption depending on brine fraction in a two dimensional heterogeneous porous medium
Proceedings of Int. Conf. on Radioactive Waste Disposal, Berlin
459-464 (Sept. 2000)¹
- /JAV 00B/ Javeri, V.:
Scoping analysis of combined gas and nuclide transport including variable brine fraction and rock convergence in a two dimensional repository
Proceedings of Int. Conf. on Radioactive Waste Disposal, Berlin,
465-470 (Sept. 2000)
- /JAV 00C/ Javeri, V. et al.:
Vergleichende Analysen zur Grundwasserströmung bei variabler Salinität mit den Rechenprogrammen d3f und TOUGH2
GRS-A-2857 (Dezember 2000)¹

- /JAV 01/ Javeri, V.:
 Dreidimensionale Analysen zum Nuklidtransport bei salzanteilabhängiger Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
 GRS-A-2864 (März 2001)¹ [BMU-Schriftenreihe BMU-2001-584]
- /JAV 01A/ Javeri, V.:
 Analysen zum Transport verschiedener Nuklidketten bei nichtlinearer Adsorption in einem porösen Medium mit dem Rechenprogramm TOUGH2
 GRS-A-2923 (August 2001)¹
- /LUH 96/ Lührmann, L. et al.:
 Das eindimensionale Transportprogramm CHET2
 GRS-125 (März 1996)
- /MAR 86/ de Marsily, G.:
 Quantitative Hydrogeology
 Academic Press (1986)
- /MOR 99/ Moridis, G. et al.:
 EOS9NT: A TOUGH2 Module for the Simulation of Water Flow and Solute/Colloid Transport in the Subsurface
 Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, USA,
 LBNL-42352 (March 99) [unvollständiger Entwurf]
- /PRU 87/ Pruess, K.:
 TOUGH User's Guide
 Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley,
 California, USA, LBL-20700 (June 1987)
- /PRU 91/ Pruess, K.:
 TOUGH2 - A general purpose numerical simulator for multiphase fluid and heat flow
 Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley,
 California, USA, LBL-29400 (May 1991)

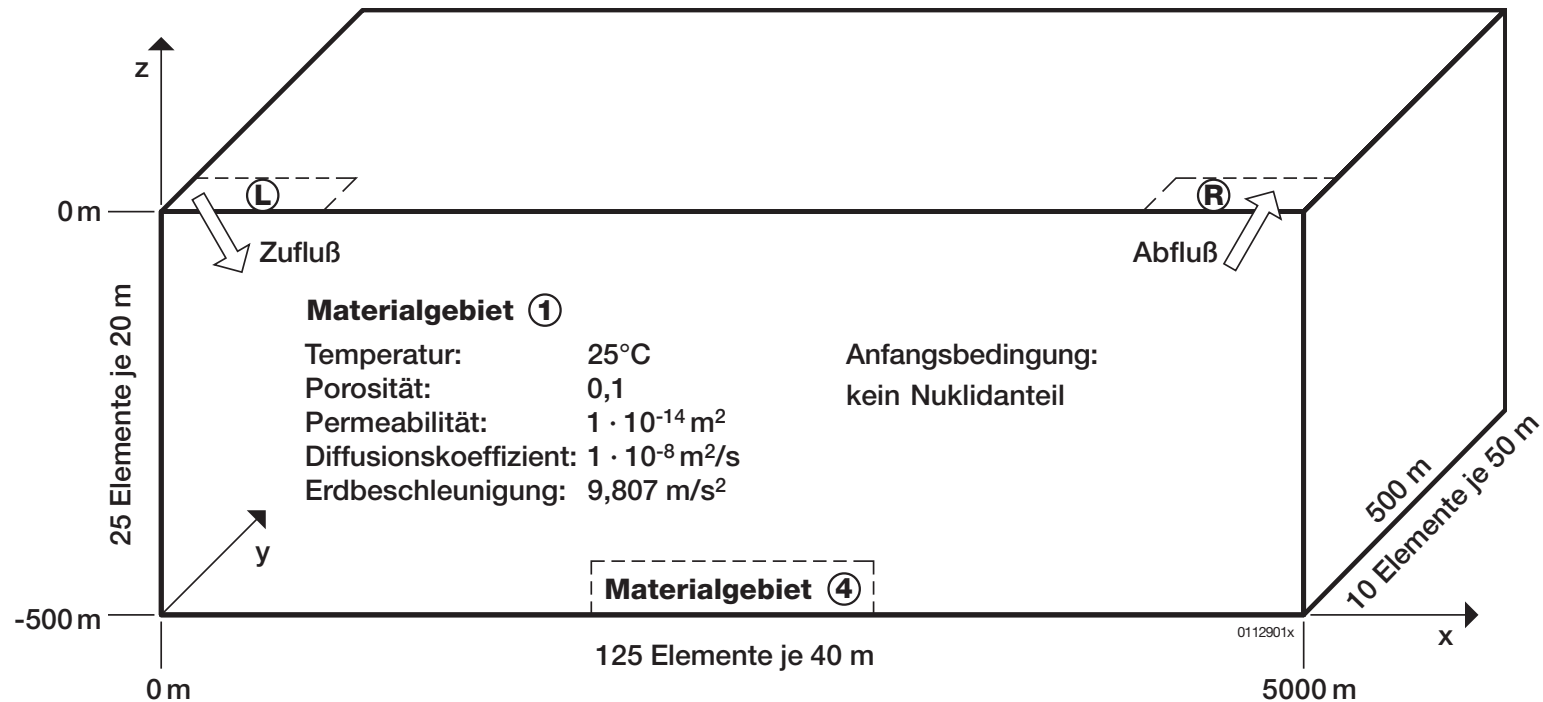
/PRU 91A/ Pruess, K.:

EOS7, An equation of state module for the TOUGH2 simulator for two phase flow of saline water and air, Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-31114 (Aug. 1991)

/PRU 95/ Pruess, K. et al.:

EOS7R: Radionuclide Transport for TOUGH2
Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, California, USA, LBL-34868 (Nov. 1995)

¹ Die gekennzeichneten Literaturstellen sind im Auftrag des BMU erstellte GRS-A-Berichte bzw. Statusberichte. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere dürfen solche Berichte nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt werden bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.



Bedingungen an Randflächen außer **Ⓐ** und **Ⓑ**: kein Massenfluß

Randfläche **Ⓐ**: $x = 0$ bis 200 m ; $y = 0$ bis 50 m ; $z = 0$

Randfläche **Ⓑ**: $x = 4800$ bis 5000 m ; $y = 0$ bis 50 m ; $z = 0$

Bedingungen an Randflächen **Ⓐ** und **Ⓑ**: $p_{\text{L}} = 6 \text{ bar}$ bzw. $p_{\text{R}} = 1 \text{ bar}$;

nur Grundwasser-Zufluß; nur vertikale Advektion; keine Diffusion

Materialgebiet ④: $x = 2400$ bis 2600 m ; $y = 0$ bis 50 m ; $z = -480$ bis -500 m

Porosität: 0,4; Permeabilität: $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$;

Anfängliche Nuklidmasse: Cm-245: 10^5 kg

U-238: 10^4 kg

Cs-135: 10^6 kg

Bild 3-1: Dreidimensionales Modell zum Nuklidtransport in einem porösen Medium

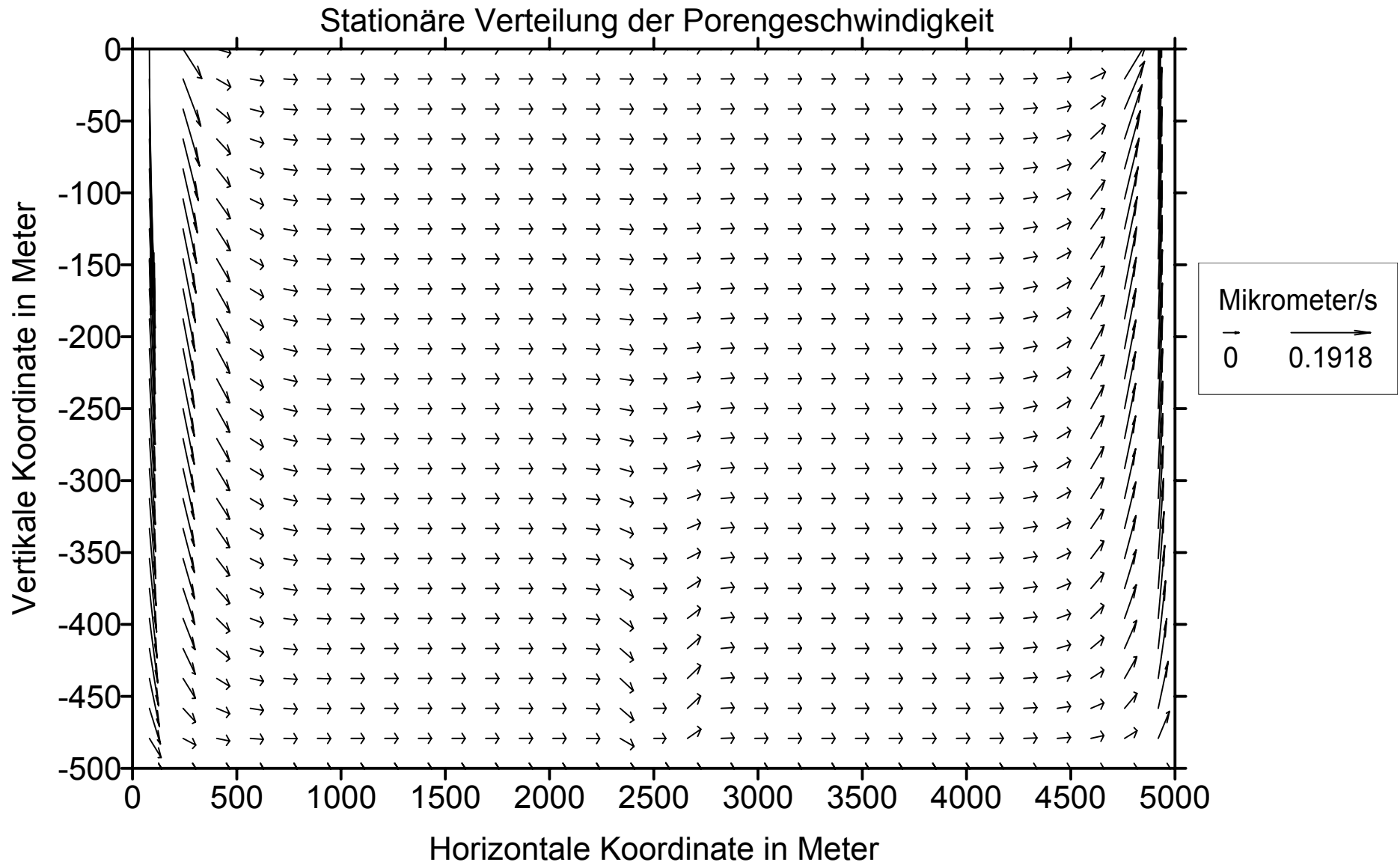


Bild 3-2: Stationäre Verteilung der Porengeschwindigkeit für den Fall TN1 ($y = 25 \text{ m}$)

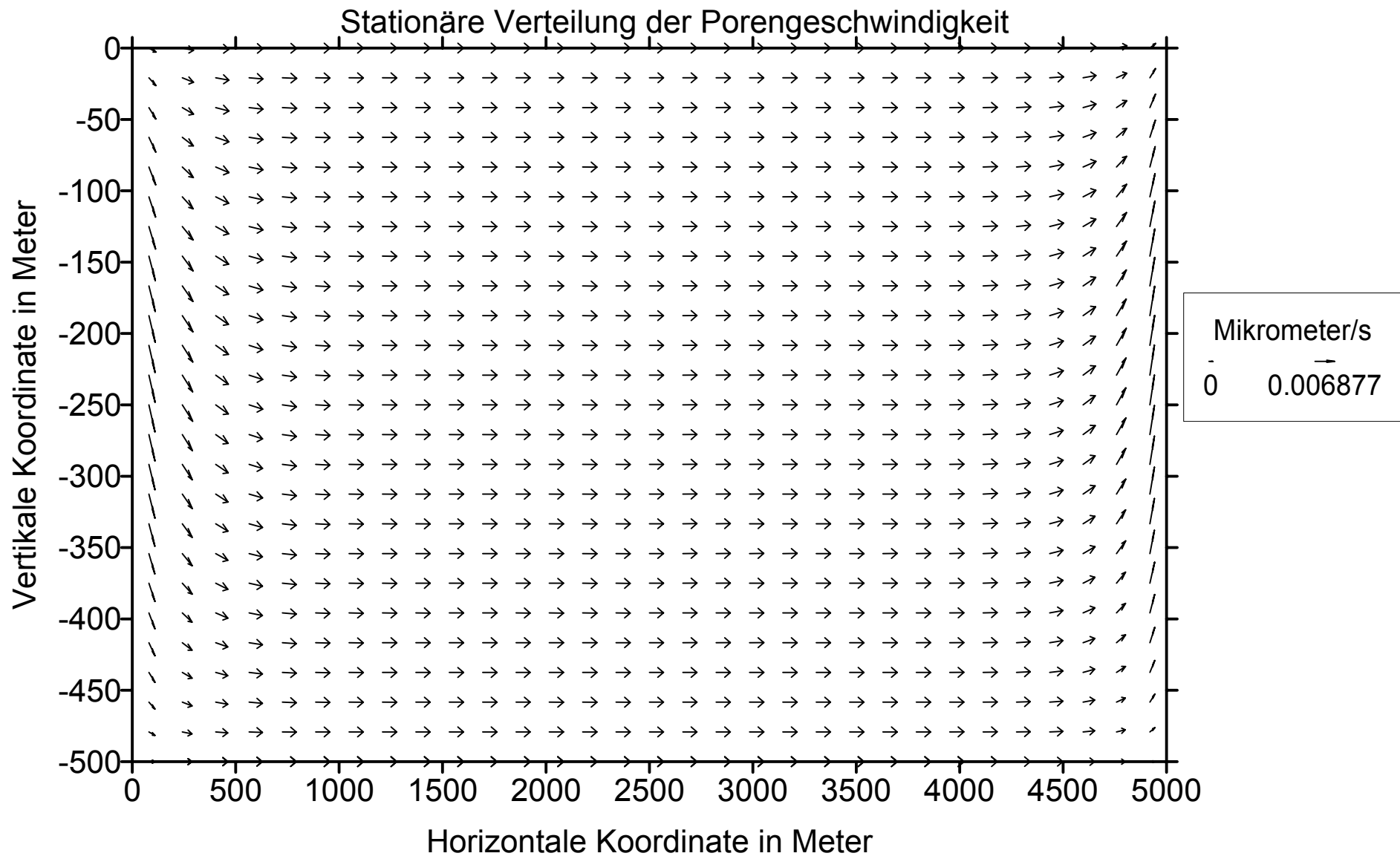


Bild 3-3: Stationäre Verteilung der Porengeschwindigkeit für den Fall TN1 ($y = 475$ m)

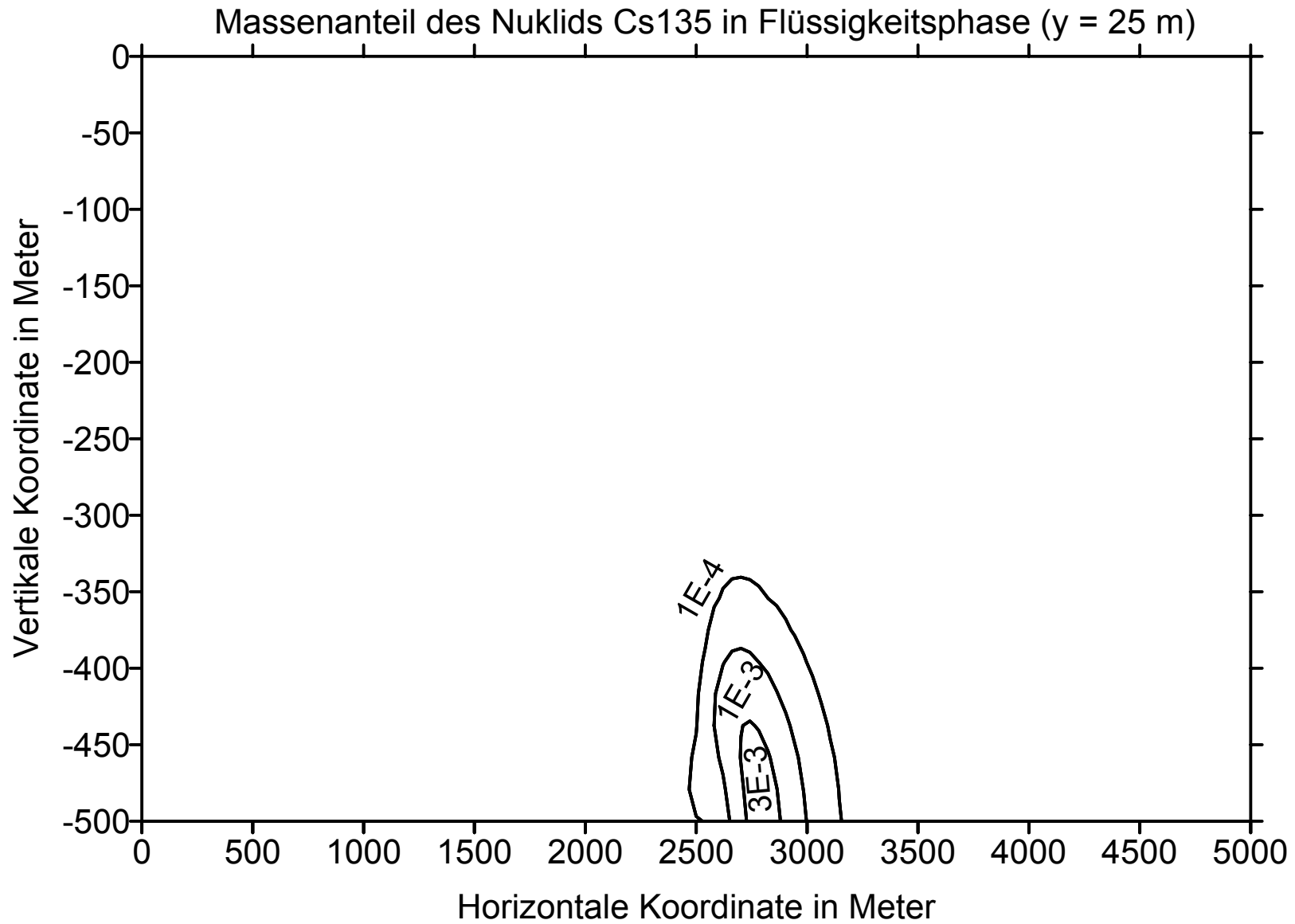


Bild 3-4: Fall TN1 bei t = 1000 Jahre

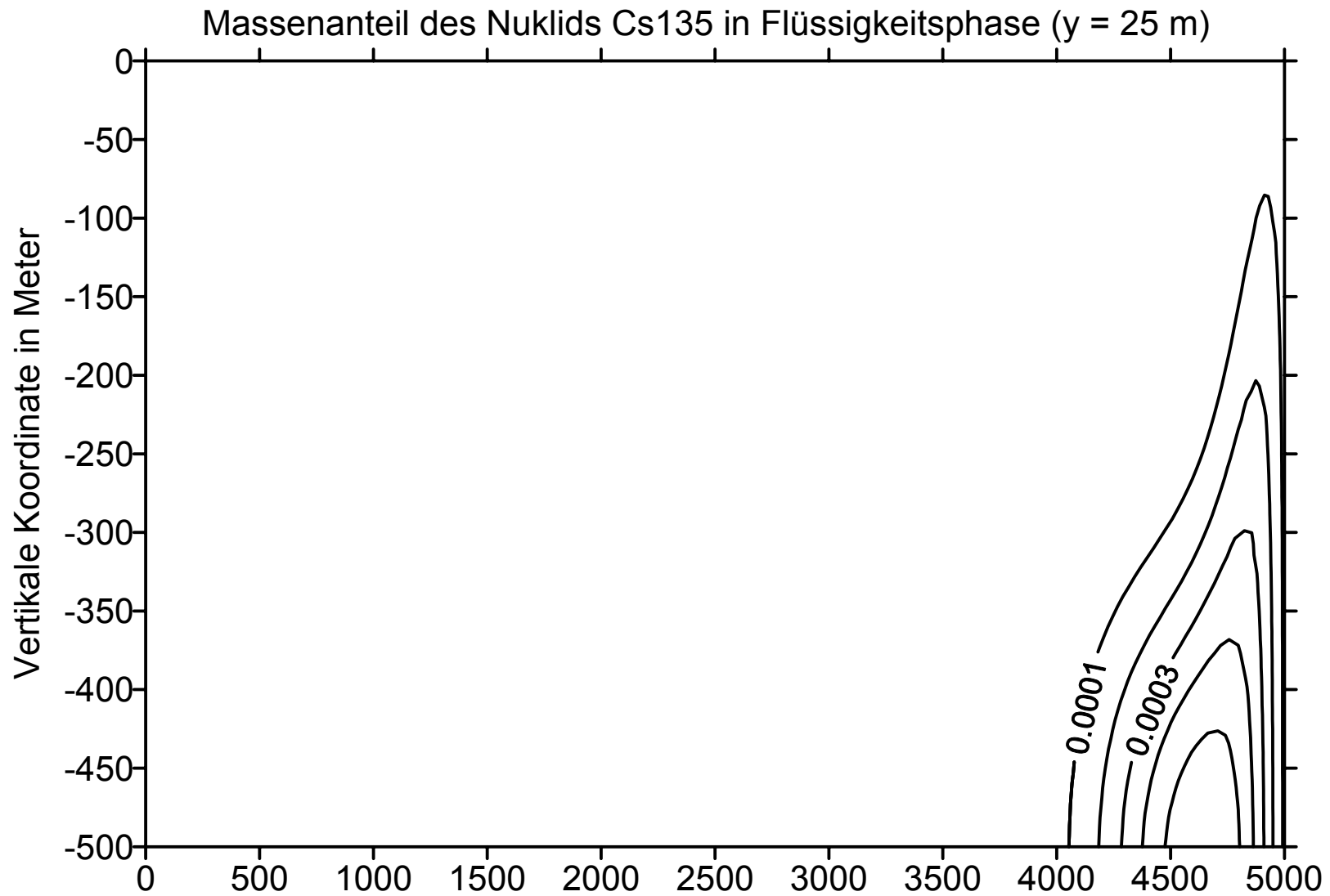


Bild 3-5: Fall TN1 bei t = 10000 Jahre

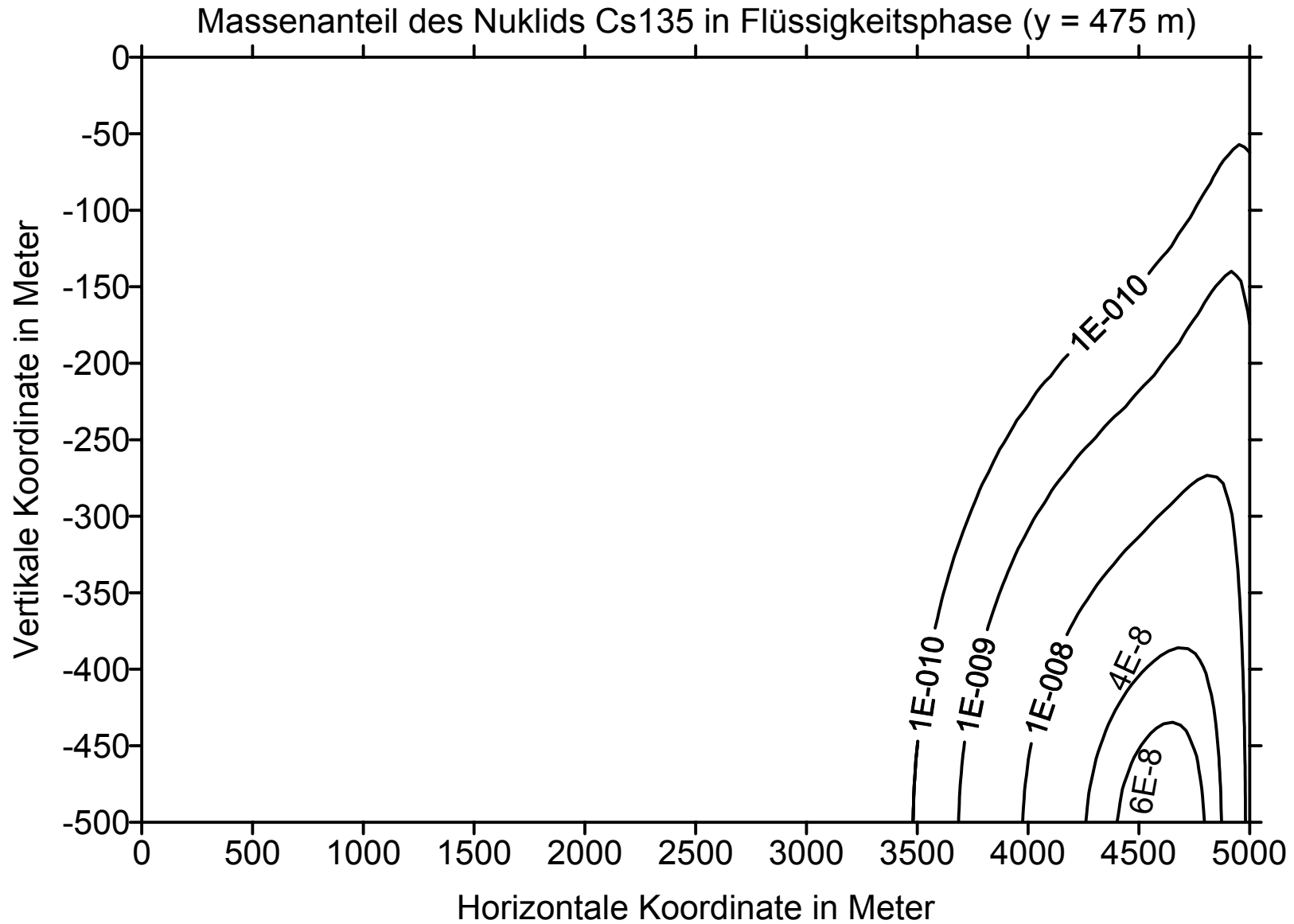


Bild 3-6: Fall TN1 bei t = 10000 Jahre

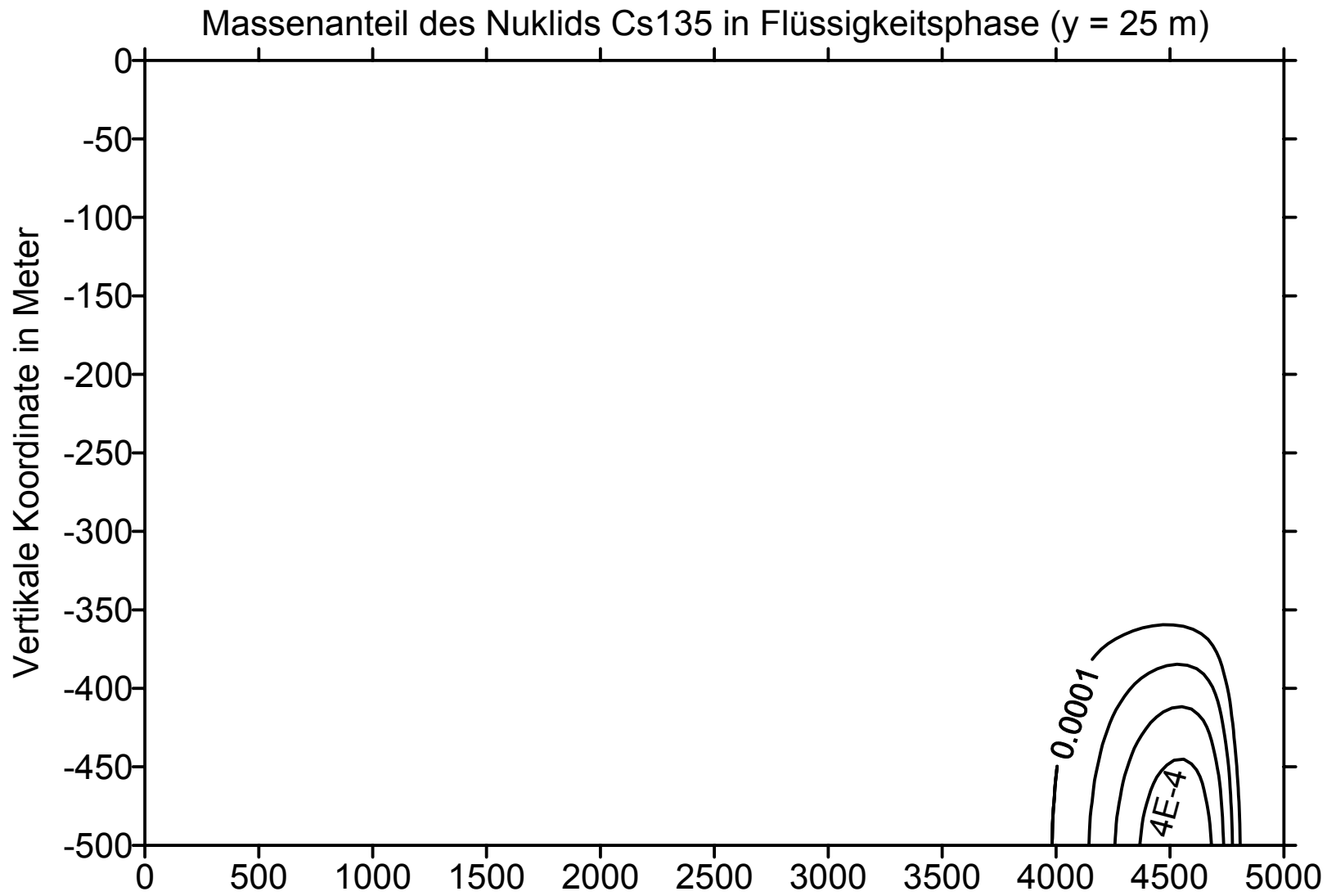


Bild 3-7: Fall TN2 bei t = 10000 Jahre

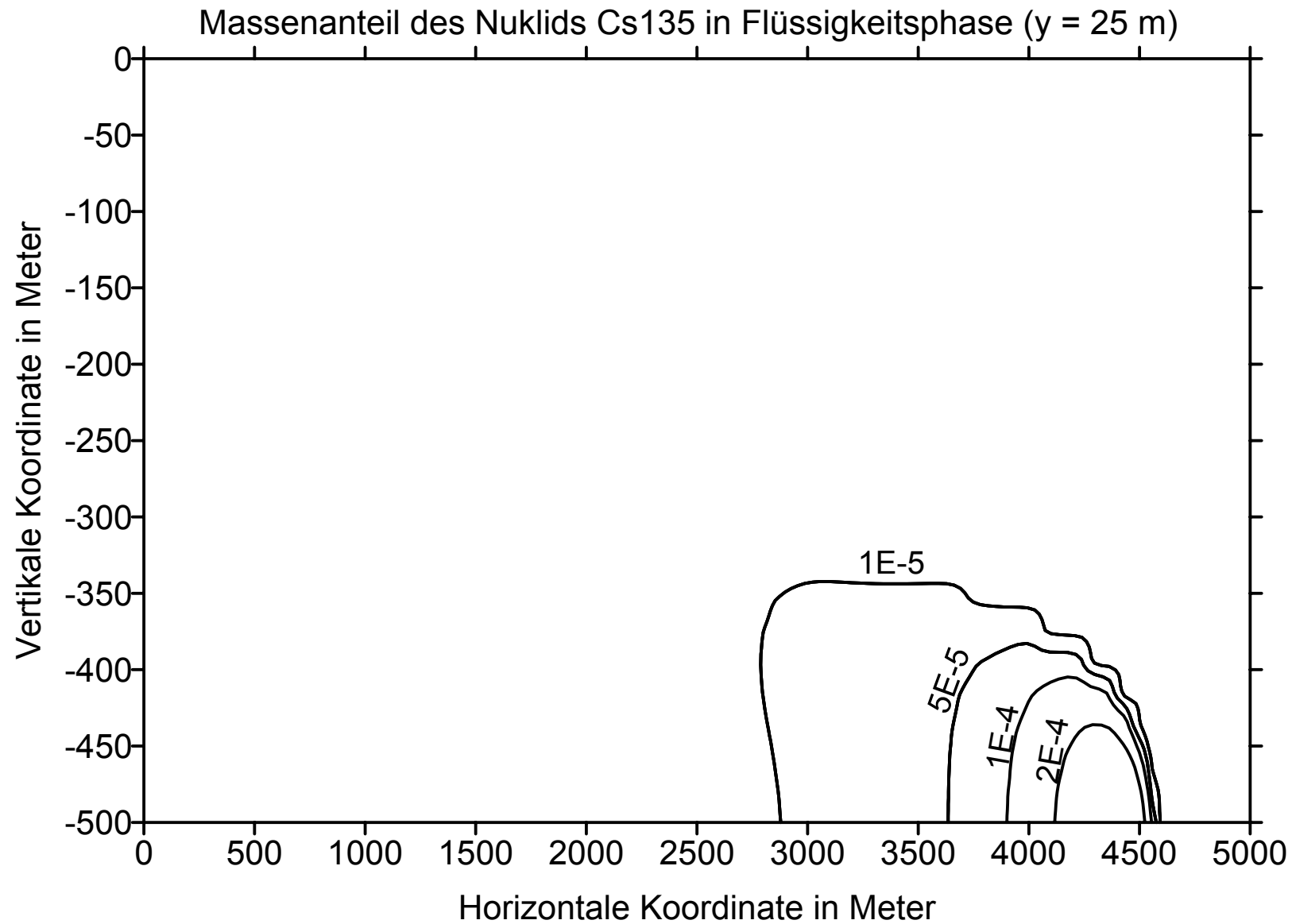


Bild 3-8: Fall TN3 bei t = 10000 Jahre

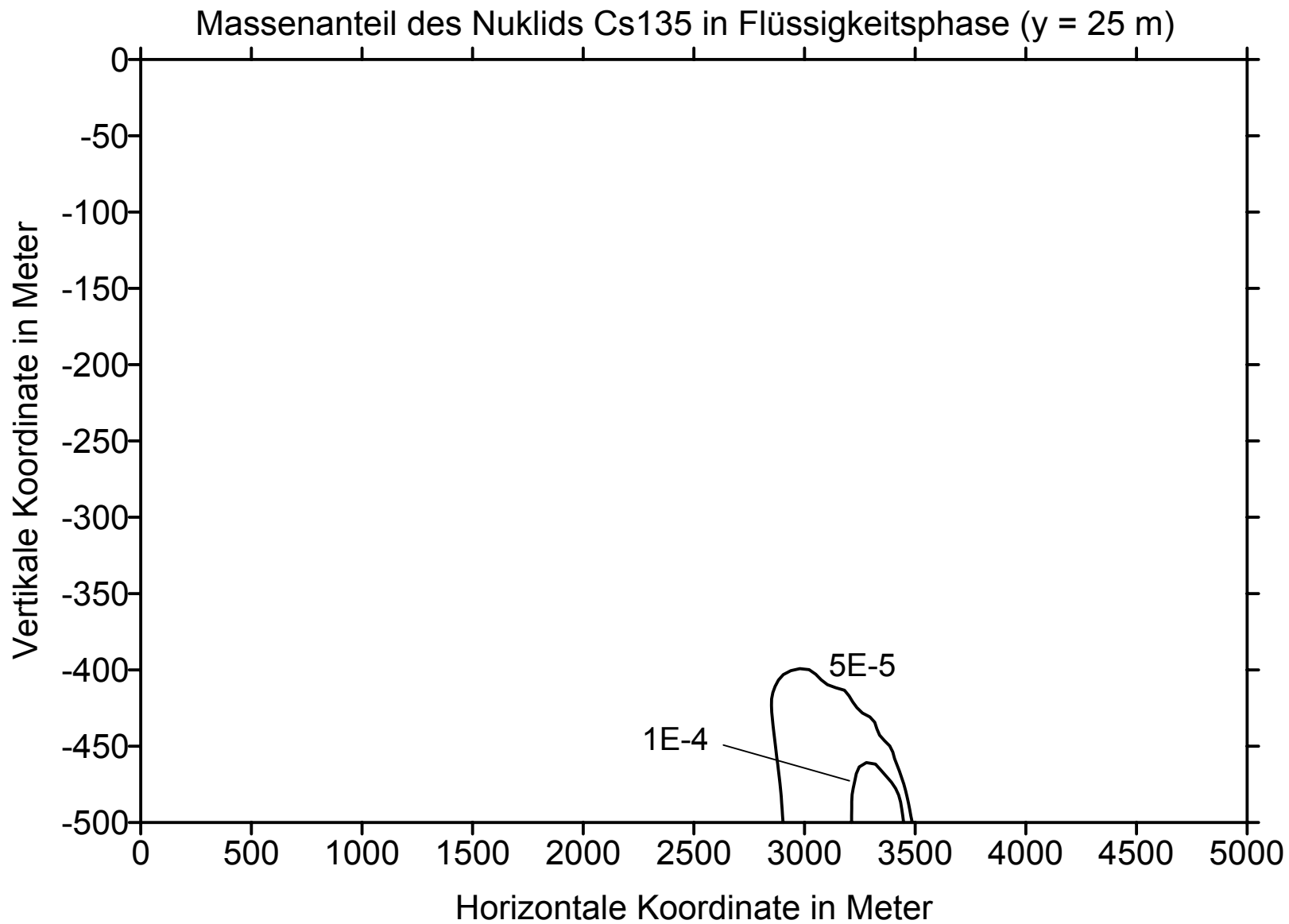


Bild 3-9: Fall TN4 bei t = 10000 Jahre

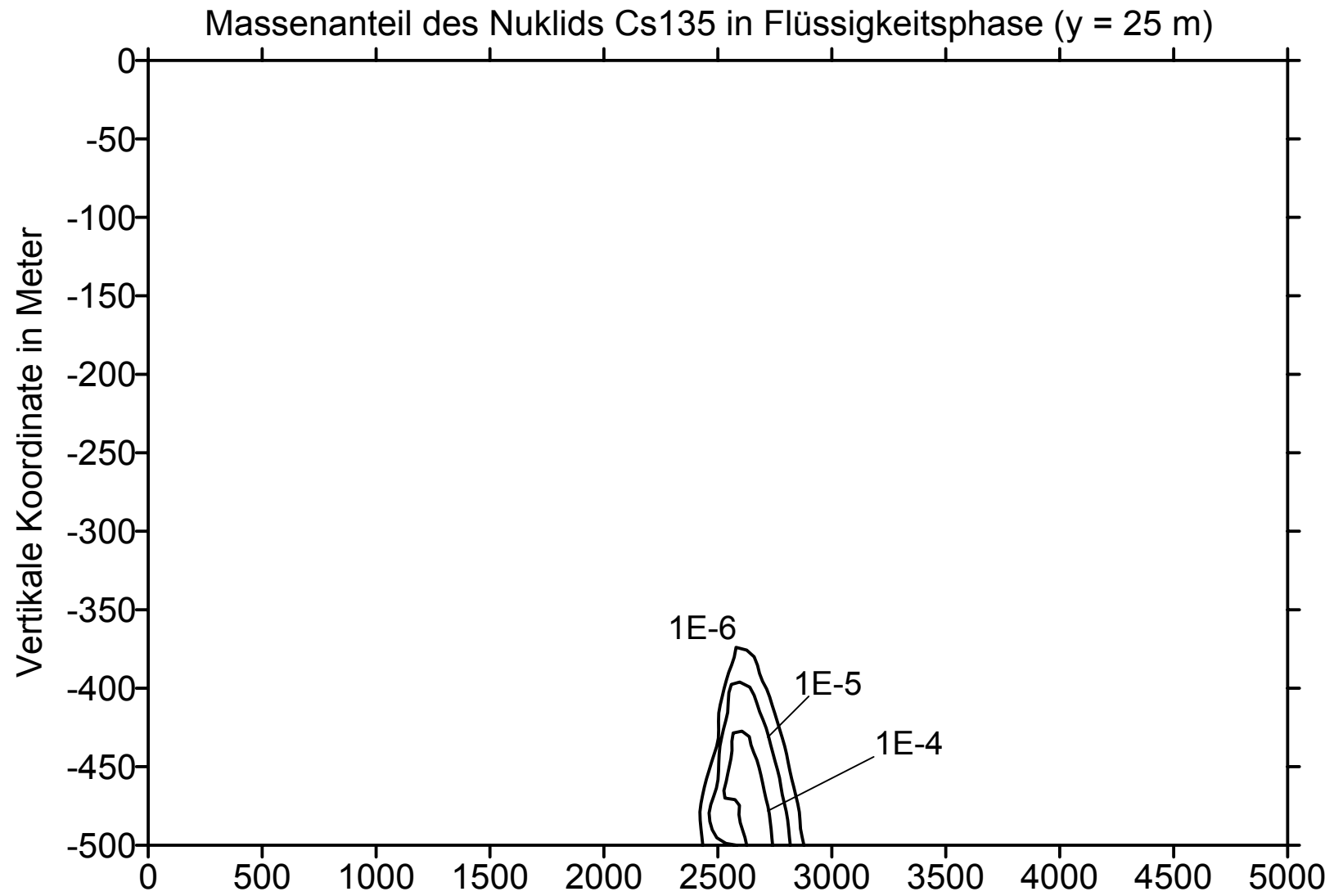


Bild 3-10: Fall TN5 bei t = 10000 Jahre

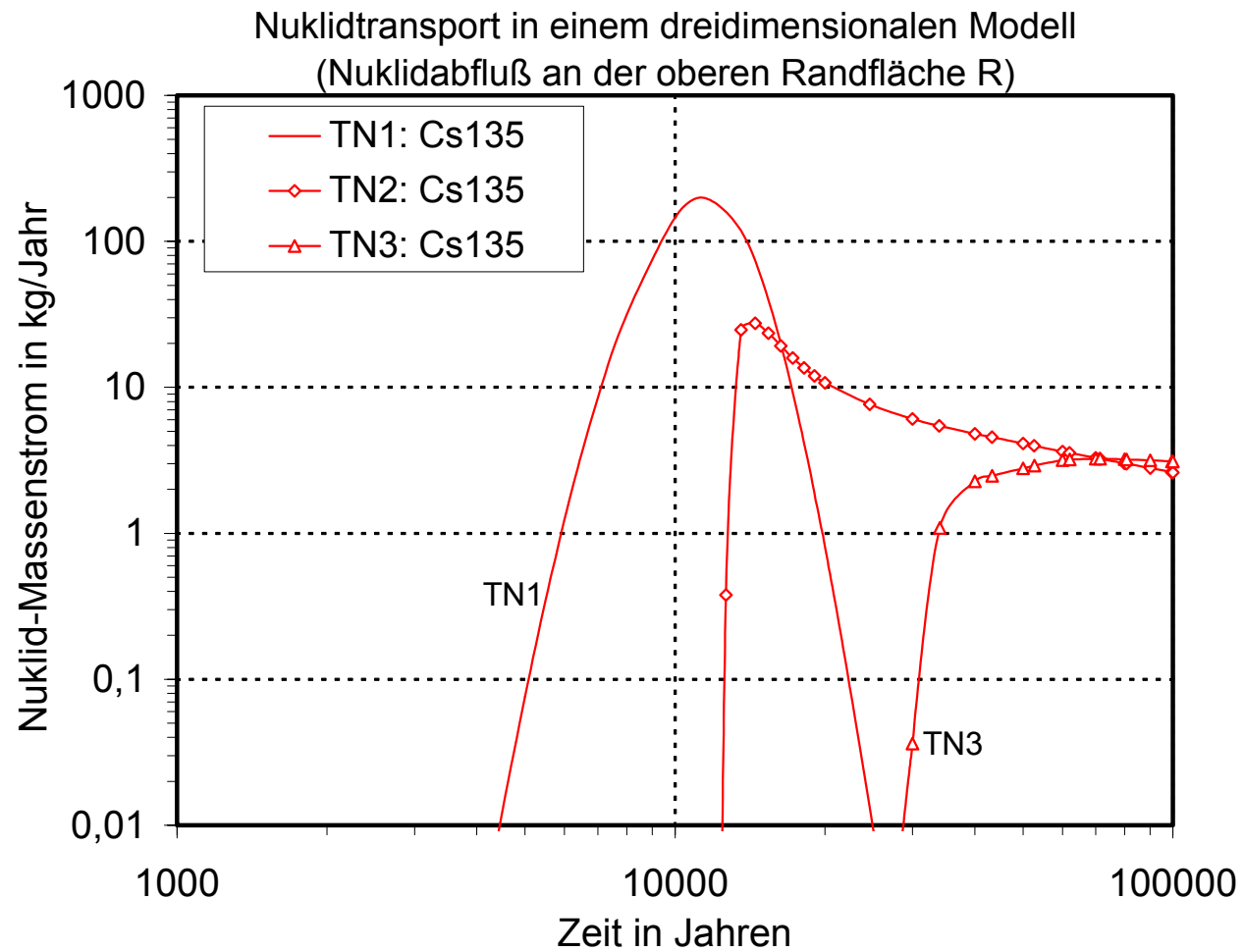


Bild 3-11: Abfluß des Nuklids Cs135 an der oberen Randfläche R für die Fälle TN1 bis TN3

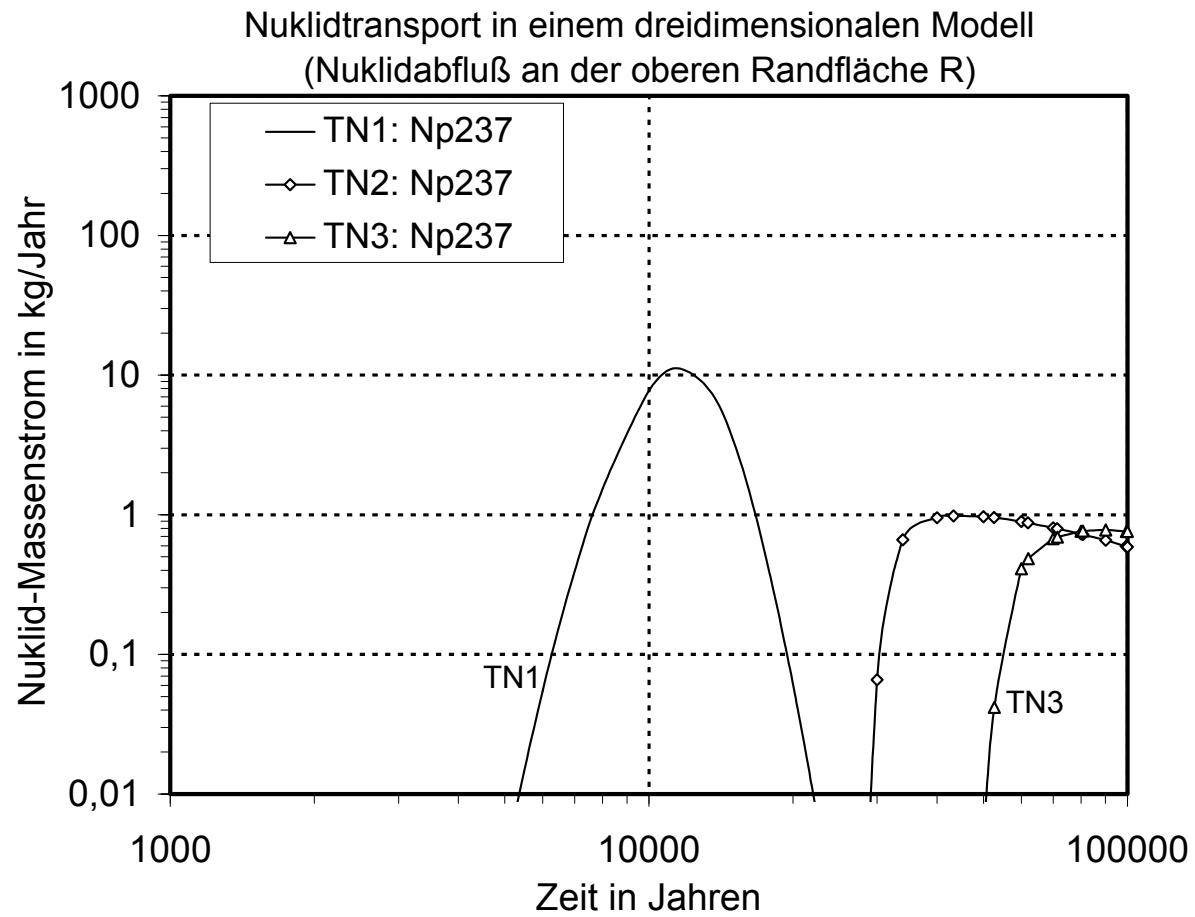


Bild 3-12: Abfluß des Nuklids Np237 an der oberen Randfläche R für die Fälle TN1 bis TN3

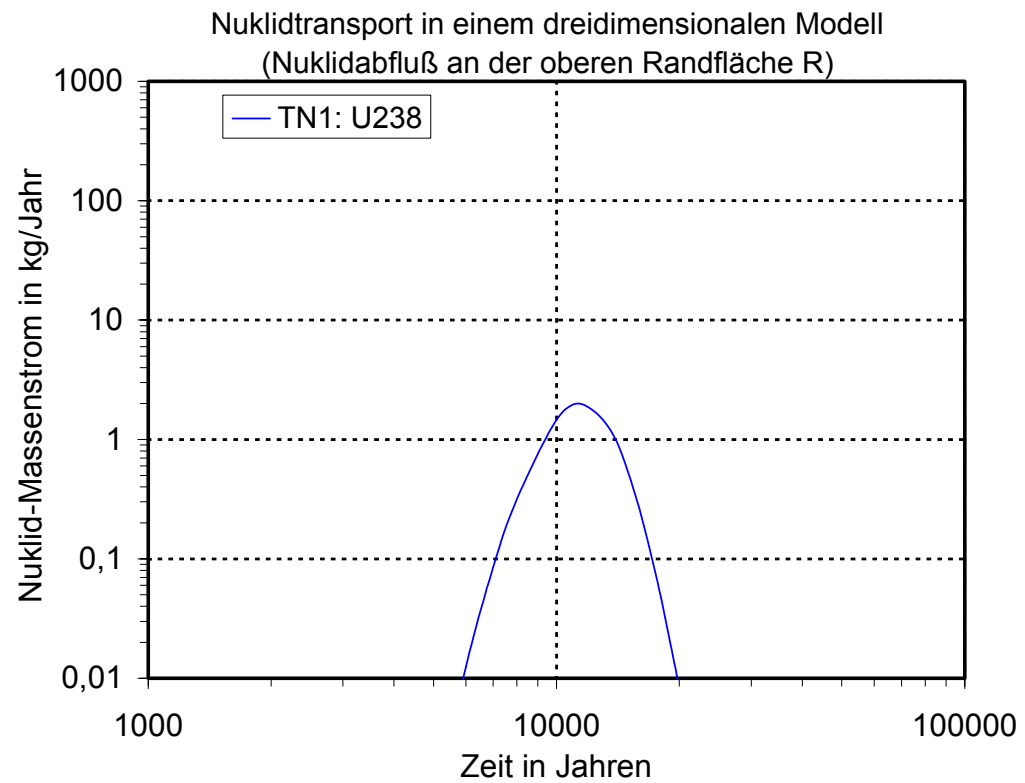


Bild 3-13: Abfluß des Nuklids U238 an der oberen Randfläche R für den Fall TN1

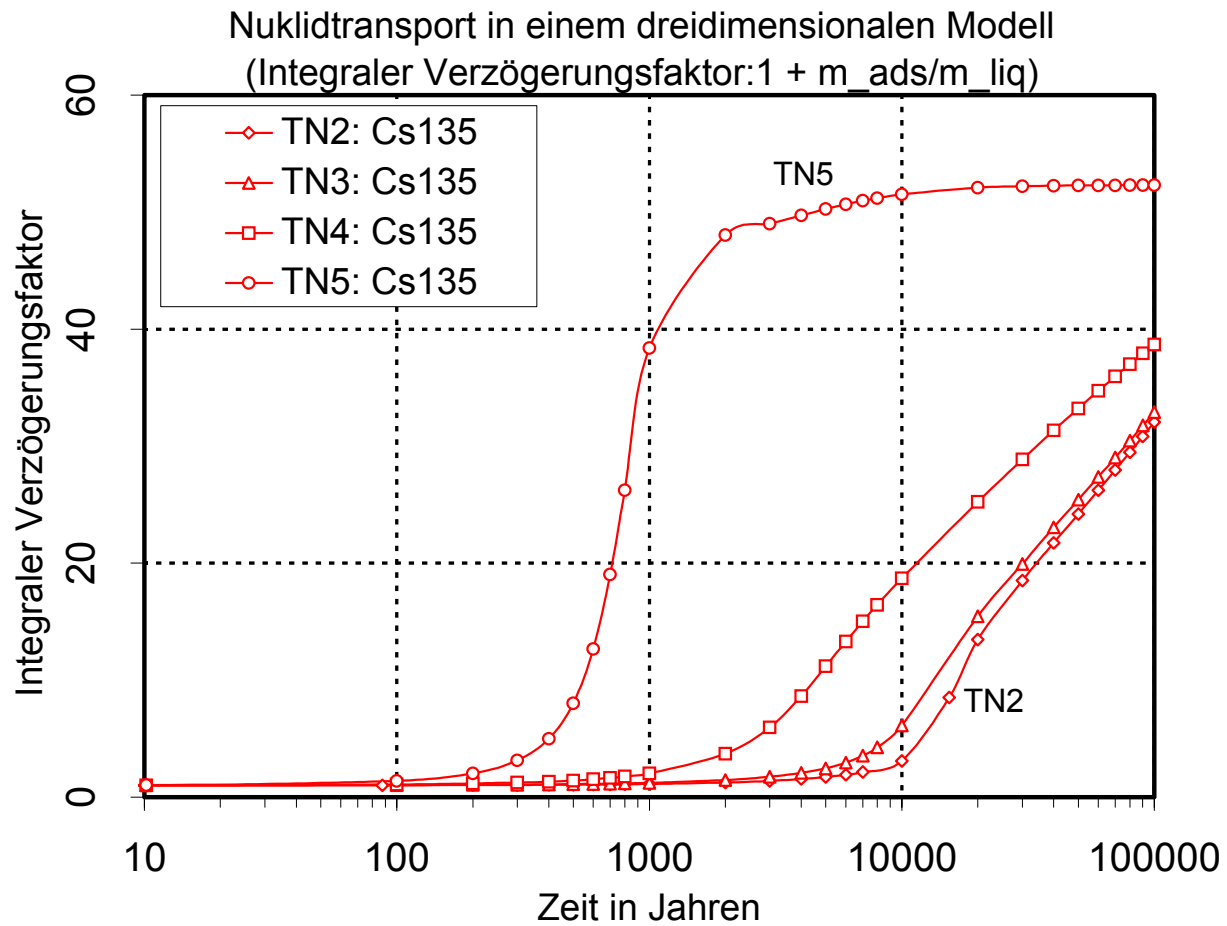


Bild 3-14: Integraler Verzögerungsfaktor für das Nuklid Cs135 für die Fälle TN2 bis TN5

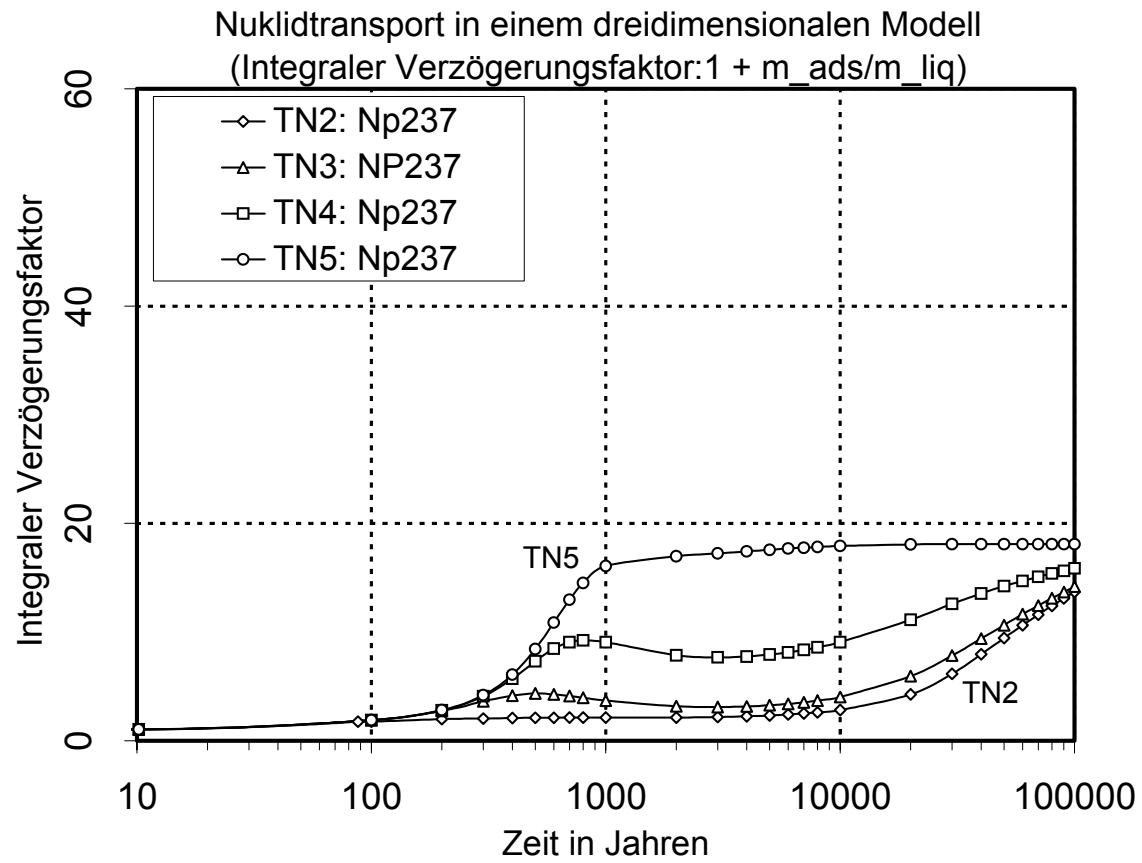


Bild 3-15: Integraler Verzögerungsfaktor für das Nuklid Np237 für die Fälle TN2 bis TN5

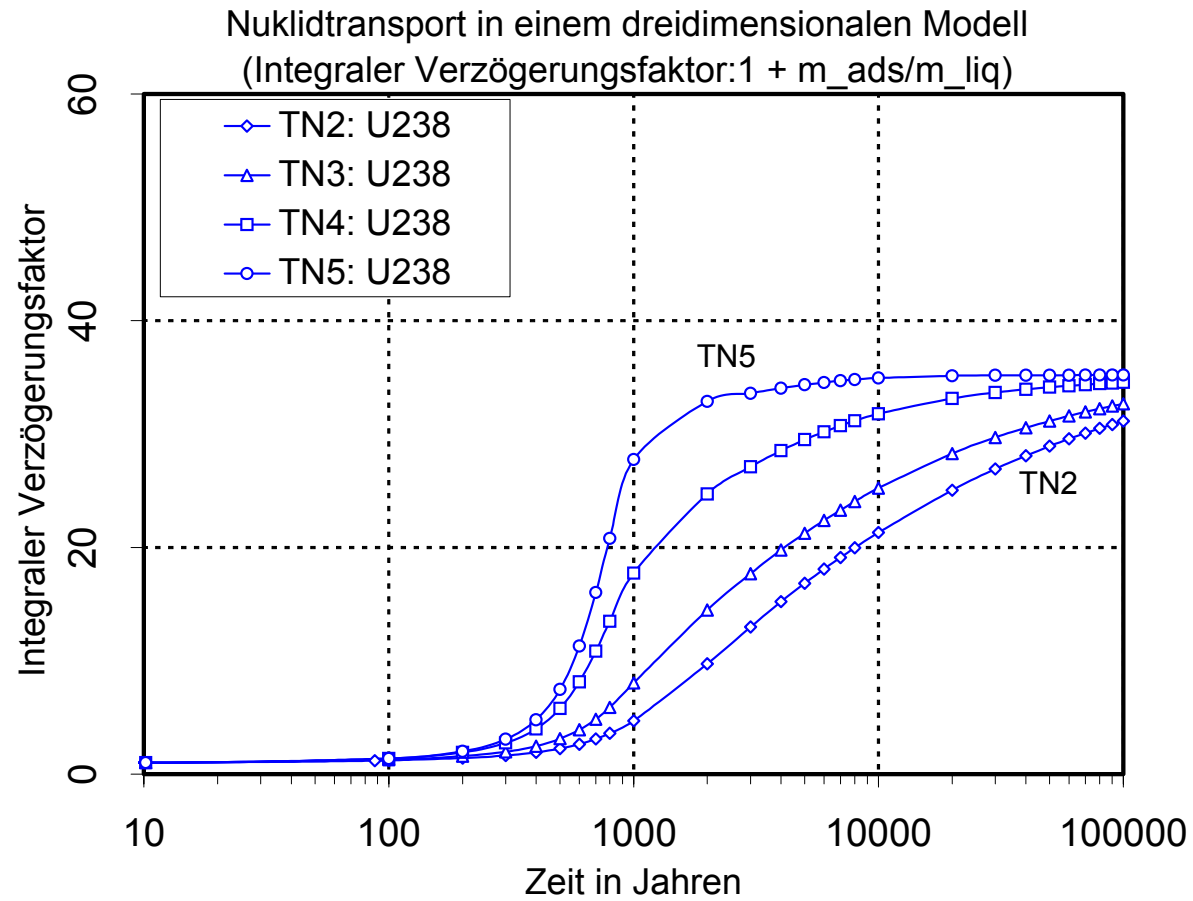


Bild 3-16: Integraler Verzögerungsfaktor für das Nuklid U238 für die Fälle TN2 bis TN5