

**Berechnung radiologischer
Konsequenzen der
Freisetzung radioaktiver
Stoffe aus einem Endlager
in die Biosphäre mit dem
Programm BioTREND**

Berechnung radiologischer Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Stoffe aus einem Endlager in die Biosphäre mit dem Programm BioTREND

Tatiana Reiche
Dirk-Alexander Becker

September 2014

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrunde liegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) im Rahmen des Vorhabens ADEMOS „Anpassung des EMMOS-Programmpakets an moderne Softwareanforderungen“ unter dem Förderkennzeichen 02 E 10367 erstellt.

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

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

Deskriptoren:

Biosphäre, Endlager, Modellierung, Programmcode, Radionuklide

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Aufgabenbereich und Funktionalitäten von BioTREND.....	3
3	Grundlegende Größen im Strahlenschutz	5
4	Ermittlung von Dosiskonversionsfaktoren und Organdosisumwandlungsfaktoren.....	11
5	In BioTREND ermittelte Größen.....	15
5.1	Effektivdosis	15
5.2	Organdosis	20
5.3	Kollektivdosis.....	21
5.4	Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströme.....	22
6	Ablauf einer Rechnung.....	27
6.1	Eingabedaten	28
6.2	Nuklidwahl	29
6.3	Teilsummen	30
6.4	Wasserentnahmestelle	31
6.5	Ausgaben in die Ergebnisdateien	32
6.5.1	Vorspanndatei (.evs).....	33
6.5.2	Datei mit jährlichen Effektivdosen (.edo).....	35
6.5.3	Header-Datei für Radiotoxizitäten (tox.evs).....	36
6.5.4	Datei mit Radiotoxizitäten (tox.edo)	37
6.5.5	Dateien mit Kontrolldaten (.out und .pbd).....	39
6.5.6	Die Logdatei (RepoTREND.log).....	39
6.5.7	Protokolldateien zur Ausführung von Rechenmodulen mit RepoTREND (.pcl)	41
6.6	Parallelisierung	42
7	Testen von BioTREND.....	45
8	Zusammenfassung und Ausblick.....	47

	Literaturverzeichnis.....	49
	Abbildungsverzeichnis.....	53
	Tabellenverzeichnis.....	55
	Abkürzungsverzeichnis.....	57
A	Symbolverzeichnis	59
B	Spezifikation eines BioTREND-Rechenlaufs in XENIA.....	61
B.1	Erforderliche Module.....	61
B.2	Modul <i>job-configuration</i>	62
B.3	Modul BioTREND	64
	<i>nuclide settings</i>	64
	<i>subtotal</i>	65
	<i>domain properties</i>	66
	<i>age groups</i>	67
	<i>organ</i>	68
	<i>control parameters</i>	69
	<i>input</i>	70
	<i>indicators</i>	71
B.4	Modul <i>dosefactors</i>	72
B.5	Modul <i>nuclidedata</i>	74
B.6	Modul <i>elementdata-FF</i>	77
B.7	Einstellungen in der Ansicht <i>Job Paramters</i>	79
	<i>Target Host</i>	79
	<i>Local Output Directory, Working Directory</i>	80
	<i>Queue Command, Queue Alias</i>	80
	<i>Remote User</i>	83
B.8	Ansicht <i>Submit</i>	84
	Stichwortverzeichnis	87

1 Einleitung

Um eine langfristige Isolierung der radioaktiven Abfälle von der Biosphäre zu gewährleisten, ist beabsichtigt, diese in einem Endlager in tiefen geologischen Formationen zu lagern. Das Endlagersystem wird üblicherweise in drei Teile unterteilt: den Nahbereich mit den untertage befindlichen Einlagerungsorten, die Geosphäre und die Biosphäre.

Die Langzeitsicherheit eines Endlagersystems muss wegen der langen zu betrachtenden Zeiträume und wegen der Vielzahl der ablaufenden Prozesse mit Hilfe von Computerprogrammen bewertet werden. Dies erfolgt im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse, die wie folgt definiert wird /BMU 10/:

Als Langzeitsicherheitsanalyse wird die Analyse des Langzeitverhaltens des Endlagers nach Stilllegung bezeichnet. Zentraler Aspekt ist die Analyse des Einschlussvermögens des Endlagersystems und seiner Zuverlässigkeit. Sie umfasst z. B. die Entwicklung konzeptioneller Modelle, die Szenarienentwicklung, die Konsequenzenanalyse, die Unsicherheitsanalyse sowie den Vergleich der Ergebnisse mit vorgegebenen Sicherheitsprinzipien, Schutzkriterien und sonstigen Nachweisanforderungen. Sie ist Voraussetzung für den Langzeitsicherheitsnachweis.

Das Programmpaket RepoTREND ist ein leistungsfähiges Instrumentarium für die Analyse der Freisetzung von Schadstoffen aus dem Endlager im Hinblick auf die Beurteilung der Konsequenzen aus den möglichen Entwicklungen /REI 11/, /REI 12/, /REI 14/. Es ist modular aufgebaut. Die einzelnen Module von RepoTREND bilden Prozesse in den einzelnen im Wesentlichen unabhängigen Endlagerbereichen ab (Abb. 1.1). RepoTREND bietet damit die Möglichkeit, eine eventuelle Freisetzung von Schadstoffen aus dem Endlager, ihren Transport bis zum menschlichen Organismus und die damit verbundenen radiologischen Konsequenzen zu modellieren.

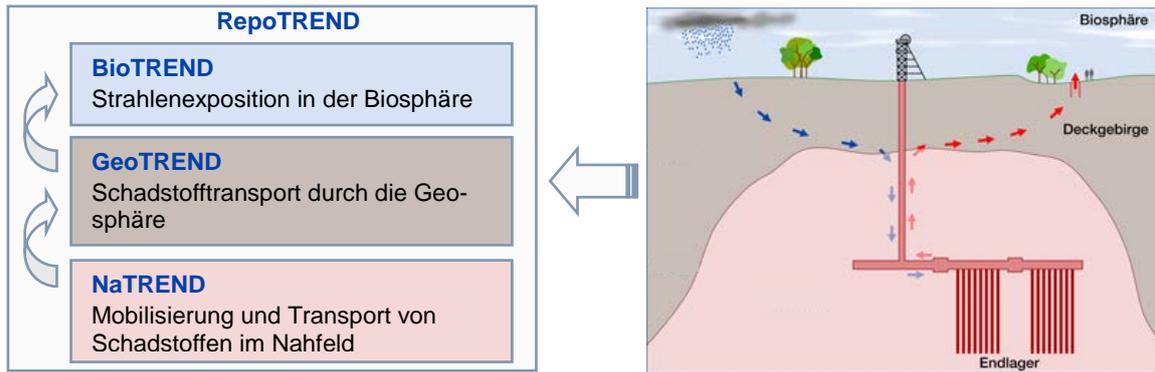


Abb. 1.1 Rechenmodule von RepoTRENd für verschiedene Teilbereiche von Endlagern (links) und eine entsprechende Modellvorstellung einer möglichen Freisetzung von Schadstoffen aus einem Endlager (rechts)

Im vorliegenden Bericht wird das neu entwickelte Biosphärenmodul *BioTRENd* (**BIO**-sphärenmodul von Repo**TRENd**) vorgestellt, mit dessen Hilfe die Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Schadstoffe in die Biosphäre berechnet werden können.

Im Kapitel 2 wird auf die Einsatzmöglichkeiten und auf den Leistungsumfang von BioTRENd eingegangen. Im Kapitel 3 werden grundlegende, für BioTRENd relevante Größen aus dem Strahlenschutz erläutert. Die wichtigsten Umrechnungsfaktoren bei der Bestimmung von effektiven Individualdosen sowie Organdosen sind die Dosiskonversionsfaktoren bzw. Organdosisumrechnungsfaktoren. Wie diese ermittelt werden, wird im Kapitel 4 geschildert. Im Kapitel 5 werden die in BioTRENd berechneten Größen sowie die dabei angewandten Rechenverfahren vorgestellt. Im Kapitel 6 wird auf einige Aspekte hingewiesen, die bei der Spezifikation und Durchführung von Rechenläufen berücksichtigt werden müssen. Im Kapitel 7 wird darüber berichtet, wie BioTRENd getestet wurde. Im Kapitel 8 wird eine Zusammenfassung der Arbeitsergebnisse vorgestellt und ein Ausblick gegeben.

2 Aufgabenbereich und Funktionalitäten von BioTREND

Basierend auf den Ergebnissen einer Ausbreitungsrechnung sowie einer separaten Biosphärenmodellierung werden im Modul BioTREND Dosisbelastungen für Individuen als jährliche Effektivdosis und Organdosis sowie Dosen für Kollektive berechnet.

BioTREND umfasst die in EXCON und EXMAS (Vorgänger aus dem Programmpaket EMOS /BUH 99/) umgesetzten fachlichen Konzepte und Funktionalitäten in teilweise überarbeiteter Form. Im neuen Biosphärenmodul sind darüber hinaus einige neue Anforderungen realisiert. Zu den wichtigsten Änderungen gegenüber den Modulen EXCON und EXMAS zählen die folgenden Punkte:

- BioTREND akzeptiert als Eingangsdaten sowohl Konzentrationen als auch Aktivitäts- bzw. Massenströme von Schadstoffen und vereint damit die Funktionalitäten von EXCON und EXMAS.
- Mit BioTREND können Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströme berechnet werden (s. Abschnitt 5.4). Der Einsatz dieser Sicherheitsindikatoren bei der Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern radioaktiver Abfälle wird zurzeit in zahlreichen internationalen Projekten diskutiert (siehe z. B. /IAEA 94/, /IAEA 03/, /BEC 03/).
- In einen Rechenlauf können mehrere, auch unterschiedlich parametrisierte Biosphärenmodule integriert werden, was eine flexiblere und detailliertere Analyse der Simulationsergebnisse ermöglicht.
- Alle Ausgaben können auf bestimmte, vom Benutzer definierte Referenzwerte normiert werden.
- Bei der Berechnung von Kollektivdosen können in BioTREND beliebig viele unterschiedliche Personengruppen berücksichtigt werden. In den Vorgängermodulen werden Kollektivdosen für exakt zwei Personengruppen (im Normalfall für Erwachsene und Kinder) ermittelt.
- Zusätzlich zu den Summenwerten über alle Nuklide sowie über alle Spalt- und Aktivitätsprodukte wie auch über alle Actinoide werden in BioTREND standardmäßig Summenwerte über jede Zerfallsreihe gebildet und ausgegeben.

Der generelle Ablauf einer BioTREND-Rechnung sieht wie folgt aus:

Als Erstes wird ein BioTREND-Rechenlauf über die grafische Benutzeroberfläche XENIA spezifiziert (s. Anhang B). Bereits bei der Parametereingabe werden automatisch einige Prüfungen auf Plausibilität, Konsistenz und Vollständigkeit der Daten vorgenommen. Ein spezifizierter BioTREND-Rechenlauf kann von XENIA aus gestartet werden.

Einer BioTREND-Rechnung geht eine Freisetzungs- oder Ausbreitungsrechnung voraus, die mit Nahfeld- und/oder Fernfeldmodulen durchgeführt wird. Diese Berechnungen können im Rahmen desselben Rechenlaufs oder auch separat erfolgen. Aus den durch diese Module berechneten Schadstoffkonzentrationen und/oder Aktivitäts- bzw. Massenströmen werden in BioTREND mit Hilfe von Biosphären-Dosiskonversionsfaktoren die jährlichen Effektivdosen berechnet. Neben den separaten Werten für jedes ausgewählte Nuklid werden auch die Summenwerte für alle Nuklide sowie ausgewählte Teilsommen errechnet. Diese Daten werden im spezifizierten Format als Funktion der Zeit in den Ausgabedateien abgelegt und können grafisch dargestellt werden. Als weitere Ergebnisse eines BioTREND-Rechenlaufs werden folgende Größen ermittelt und in entsprechenden Ausgabedateien gespeichert:

- nuklidspezifische maximale jährliche Effektivdosen und die Zeitpunkte ihres Auftretens,
- nuklidspezifische Kollektivdosen,
- maximale Organdosen und die Zeitpunkte ihres Auftretens,
- ggf. Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströme.

3 Grundlegende Größen im Strahlenschutz

In diesem Kapitel werden einige für BioTREND relevante Begriffe und Größen aus dem Strahlenschutz erläutert.

Unter *Radioaktivität* versteht man die Eigenschaft instabiler Atomkerne, sich spontan in andere Atomkerne umzuwandeln und dabei eine *ionisierende Strahlung* auszusenden.

Als *ionisierende Strahlung* wird die energiereiche Strahlung bezeichnet, die in der Lage ist, beim Durchdringen der Stoffe Elektronen aus Atomen oder Molekülen zu entfernen, so dass positiv geladene Ionen entstehen.

Die Anzahl der Kernzerfälle einer Stoffmenge pro Zeiteinheit wird als *Aktivität* oder *Zerfallsrate* bezeichnet und wird in *Becquerel (Bq)* ausgedrückt. 1 Bq entspricht einem Kernzerfall pro Sekunde.

Die Energiemenge in Joule (J), die durch die Strahlung an eine Masse (in kg) abgegeben und von dieser absorbiert wird, wird als *Energiedosis* bezeichnet, die in *Gray (Gy)* gemessen wird: $1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg}$.

Unter *Strahlenexposition* versteht man das Ausgesetztsein von Lebewesen, insbesondere des Menschen gegenüber natürlicher und künstlich erzeugter Strahlung. Die ionisierende Strahlung wird dabei in unterschiedlichem Maße vom Körpergewebe absorbiert. Die Menge der aufgenommenen Strahlung wird durch die Angabe einer *Dosis* ausgedrückt.

Die Strahlung verursacht Ionisation in den Zellen des menschlichen Gewebes. Hohe Dosen führen zur unmittelbaren Zerstörung der Zellen. In diesem Fall spricht man von deterministischen, akuten oder kausalen Schäden, bei denen der direkte Zusammenhang Dosis – Wirkung offensichtlich ist. Bei geringeren Dosen kann es zur Erhöhung des Krebsrisikos und Risikos von genetischen Schäden kommen. Die Auswirkung von kleineren Dosen zeigt sich später und kann nicht direkt, sondern nur durch statistische Häufungen nachgewiesen werden. In diesem Fall spricht man von stochastischen oder Spätschäden.

Wenn man bei der Strahlenexposition die potenzielle schädigende Einwirkung von ionisierender Strahlung auf Lebewesen betrachtet, so spricht man von *Strahlenbelastung*. Um Aussagen über die Konsequenzen von verschiedenen Strahlenbelastungen formulieren zu können, muss eine Größe definiert werden, aus der das Risiko direkt abgeleitet werden kann.

Die Auswirkung der Strahlung auf das Körpergewebe kann allein aus der Angabe der Energiedosis nicht abgeleitet werden, weil verschiedene Strahlungsarten unterschiedlich starke biologische Wirkungen im menschlichen Körper hervorrufen. Beispielweise ist die biologische Wirkung der Alphastrahlung etwa zwanzigmal größer als die der Betastrahlung bei der gleichen Energiedosis. Diese Unterschiede werden durch bestimmte Koeffizienten, so genannte *Strahlungs-Wichtungsfaktoren* charakterisiert (Tab. 3.1).

Tab. 3.1 Strahlungs-Wichtungsfaktoren für verschiedene Arten ionisierender Strahlung /SSV 11/

Strahlungsart	Strahlungs-Wichtungsfaktor
Gammastrahlung	1
Elektronen	1
Neutronen je nach Energie	5...20
Protonen (> 2 Mev)	5
Alphastrahlung	20

Die Multiplikation der Energiedosis in Gray (Gy) mit dem Strahlungs-Wichtungsfaktor ergibt die *Äquivalentdosis*, also die Dosis, welche die biologische Wirksamkeit unterschiedlicher Strahlenarten berücksichtigt. Wenn mehrere Strahlenarten gleichzeitig einwirken, werden ihre Äquivalentdosen addiert. Weil der Strahlungs-Wichtungsfaktor dimensionslos ist, hat die Äquivalentdosis formal dieselbe Einheit wie die Energiedosis. Zur Unterscheidung wird sie jedoch in der Einheit *Sievert (Sv)* angegeben.

Die *Organdosis* ist definiert als die von einem bestimmten Organ, Gewebe oder Körperteil aufgenommene Energiedosis multipliziert mit dem Strahlungs-Wichtungsfaktor der betreffenden Strahlenart. Die Organdosis ist somit eine Äquivalentdosis, die in einem bestimmten Organ oder Gewebe auftritt.

Die Organdosis berücksichtigt unterschiedliche Empfindlichkeit der einzelnen Organe gegenüber ionisierender Strahlung nicht. Um diese Unterschiede zu berücksichtigen, wurden die so genannten *Gewebe-Wichtungsfaktoren* eingeführt (Tab. 3.2).

Tab. 3.2 Gewebe-Wichtungsfaktoren für verschiedene Organe und Gewebe /SSV 11/

Organe und Gewebe	Gewebe-Wichtungsfaktor
Keimdrüsen	0,20
Knochenmark (rot)	0,12
Dickdarm	0,12
Lunge	0,12
Magen	0,12
Blase	0,05
Brust	0,05
Leber	0,05
Speiseröhre	0,05
Schilddrüse	0,05
Haut	0,01
Knochenoberfläche	0,01
Andere Organe oder Gewebe	0,05
<i>Summe</i>	<i>1</i>

Die Summe aller Gewebe-Wichtungsfaktoren ergibt eins. Wenn man die Organdosen jeweils mit Gewebe-Wichtungsfaktoren multipliziert und aufsummiert, so erhält man die *effektive Dosis (Effektivdosis)* für den gesamten Körper. Das Adjektiv *effektiv* bezieht sich hierbei darauf, dass Belastungen von Einzelorganen auf die Gesamtbelastung des Individuums umgerechnet werden. Ein Gewebe-Wichtungsfaktor definiert somit den Beitrag des der Strahlung ausgesetzten Organs zum Schadensrisiko des gesamten Körpers. Die Effektivdosis berücksichtigt somit sowohl die unterschiedliche Wirksamkeit unterschiedlicher Strahlungsarten als auch die unterschiedliche Empfindlichkeit der Or-

gane gegenüber ionisierender Strahlung. Die effektive Dosis wird ebenfalls in Sievert (Sv) angegeben.

Aus der Effektivdosis kann das Strahlenrisiko direkt abgeleitet werden. Deswegen ist die Effektivdosis die zentrale Größe, die bei der Bewertung von Risiken durch Strahlenexposition herangezogen wird. Um einen Wert für das Krebsrisiko abzuschätzen, multipliziert man die Effektivdosis z. B. mit einem vorgegebenen Krebserkrankungs- oder Krebstodesfallkoeffizienten. Dabei ergeben eine Exposition des ganzen Körpers oder eine Exposition nur einiger einzelner Organe das gleiche Risiko, wenn die Effektivdosen gleich sind. An dieser Stelle ist es wichtig zu betonen, dass das Risiko ein stochastischer Begriff ist, demzufolge gelten die Aussagen immer nur für eine entsprechend große Personengruppe.

Unter dem Begriff *Kollektivdosis* versteht man das Produkt aus der Anzahl der Individuen der exponierten Personengruppe und der mittleren Pro-Kopf-Effektivdosis in Sv. Die Kollektivdosis wird in Personen-Sievert (Person-Sv) angegeben und drückt die Dosis aus, die eine Gruppe von Personen (Kollektiv) insgesamt erhält. Nimmt man einen linearen Zusammenhang zwischen Strahlenbelastung und Strahlenschäden an, so lässt sich aus der Kollektivdosis unmittelbar z. B. mit bekannten Krebserkrankungskoeffizienten die Zahl der erwarteten Krebsfälle in der entsprechenden Personengruppe berechnen.

Die auf eine Zeiteinheit bezogene Dosis wird als *Dosisleistung* oder auch *Dosisrate* bezeichnet.

Die Effektivdosis ist physikalisch nicht messbar. Sie muss daher aus messbaren Größen – z. B. aus der Aktivität (Bq) einer bestimmten Stoffmenge – abgeleitet werden.

Wenn Radionuklide in den Körper aufgenommen werden (dies kann entweder über *Ingestion* oder *Inhalation*, zusammengefasst unter dem Überbegriff *Inkorporation*, erfolgen), wird die Energiedosis über den Zeitraum des Aufenthalts der Radionuklide im Körper in Organen bzw. im gesamten Körper akkumuliert. Das wird durch die *Organfolgedosis* bzw. durch die *effektive Folgedosis* ausgedrückt, die die Organosisleistung bzw. Effektivdosisleistung über die Expositionszeit integriert. Bei der Inkorporation ist vor allem zu berücksichtigen, in welchem Alter (Säugling, Kind, Jugendlicher, Erwachsener) diese erfolgte. Wie der Körper auf das inkorporierte

Radionuklid reagiert, hängt auch davon ab, um welches chemische Element es sich dabei handelt, wie auch davon, in welchem chemisch-physikalischen Zustand das Radionuklid in den Körper gelangt. Beispielweise kann der menschliche Körper nur eine bestimmte Menge von Kalium aufnehmen. Führt man größere Mengen von Kalium zu, so wird dieses im Wesentlichen ausgeschieden. Jod dagegen wird fast vollständig in der Schilddrüse eingelagert. Zu beachten ist auch der Effekt von in vivo produzierten Tochternukliden. Auch andere Faktoren müssen in Betracht gezogen werden. Die gesamte Wirkung eines inkorporierten Radionuklids über einen Zeitraum von 50 Jahren nach der Inkorporation wird durch *Ingestions-* und *Inhalationsdosiskoeffizienten* /ICRP 96/ ausgedrückt. Bei der Ermittlung dieser Koeffizienten werden alle relevanten physikalischen und biologischen Prozesse berücksichtigt. Durch Multiplikation der inkorporierten Aktivität (Bq) eines Radionuklids mit entsprechendem Inhalations-/Ingestionskoeffizienten (Sv pro ingestiertes/inhalierendes Bq) berechnet sich die auf die innere Strahlenexposition durch dieses Radionuklid zurückzuführende Effektivdosis oder genauer effektive Folgedosis (Sv) für die Referenzperson aus der entsprechenden Personengruppe.

Unter *Radiotoxizität* einer Radionuklidmenge versteht man diejenige effektive Folgedosis, der der menschliche Körper nach Inkorporation dieser Radionuklidmenge ausgesetzt wäre. Sie wird demnach ebenfalls in Sv angegeben. Die Radiotoxizität ist ein Maß für die gesundheitsschädliche Wirkung inkorporierter Stoffe aufgrund ihrer Radioaktivität.

In der Biosphäre werden die freigesetzten Radionuklide verteilt und können auf unterschiedlichen Wegen zu einer Exposition führen. Diese möglichen Wege bezeichnet man als *Expositionspfade*. Die Definition von Expositionspfaden beruht auf einer Reihe von Annahmen über menschliche Verzehr- und Verhaltensgewohnheiten. Unter Berücksichtigung aller relevanten Annahmen werden nuklidspezifische *Biosphären-Dosiskonversionsfaktoren DKF* in $(\text{Sv/a})/(\text{Bq/m}^3)$ ermittelt. Mit Hilfe von DKF wird aus der Aktivitätskonzentration (Bq/m^3) an einer definierten Schnittstelle zur Biosphäre die Effektivdosis berechnet, die pro Jahr von einer Referenzperson aus der entsprechenden Personengruppe aufgenommen wird (*jährliche Effektivdosis* in Sv/a). Analog werden *Biosphären-Organosiskonversionsfaktoren ODKF* verwendet, um die Organosidosis für ein interessierendes Organ abzuschätzen. DKF sind die wichtigsten Eingangsgrößen für BioTREND. Auf die Ermittlung der DKF und ODKF wird im Kapitel 4 näher eingegangen.

4 Ermittlung von Dosiskonversionsfaktoren und Organo- siskonversionsfaktoren

Die Ermittlung der Biosphären-Dosiskonversionsfaktoren DKF erfolgt in einer separaten Biosphärenmodellierung /PRO 02/, /AVV 12/. Beim Modellieren der Biosphäre werden folgende Aspekte berücksichtigt:

Wenn Radionuklide aus einem Endlager bis in die Biosphäre gelangen, dann breiten sie sich dort in gelöster Form aus. Sie verdünnen sich im Grundwasser und gelangen auf verschiedenen Wegen zum Menschen. Die wichtigsten Expositionspfade, über welche Radionuklide von Menschen aufgenommen werden können, sind:

- der direkte Konsum von kontaminiertem Wasser aus Tiefbrunnen und
- der Verzehr von Nutzpflanzen, die über die Beregnung mit kontaminiertem Wasser radioaktive Stoffe aufgenommen haben.

Weitere Pfade sind:

- der Konsum von aus kontaminierten Oberflächengewässern gewonnenem Trinkwasser,
- der Verzehr von Fisch aus kontaminierten Oberflächengewässern sowie
- der Verzehr von tierischen Produkten aus Nutztierhaltung, bei der kontaminiertes Oberflächenwasser zur Viehtränke und zur Beregnung von Futterpflanzen eingesetzt wurde.

Einen Überblick über diese Ingestionspfade gibt Abb. 4.1.

onspfade ausgeschlossen werden (z. B. aus klimatischen Gründen) oder einzelne Parameter verändert werden (z. B. das Maß an Verdünnung in einem Fluss). Je nach den Standortbedingungen können auch weitere Pfade hinzukommen, z. B. bei Standorten am Meer der Konsum von Meerestieren oder die Nutzung von Algen.

Aus der Betrachtung der Ingestionspfade sowie der Annahme von Verzehrgewohnheiten und unter der Berücksichtigung von biokinetischen Daten¹ für Referenzpersonen unterschiedlicher Altersgruppen /ICRP 96/ kann die aus einer Freisetzung von Radionukliden resultierende Strahlenexposition für ein Individuum abgeleitet werden. DKF bzw. ODKF /ICRP 96/, /PRO 02/ geben also die Effektivdosis pro aufgenommener Aktivität eines Radionuklids an. Geht man bei den Aufnahmemengen von den jährlichen Werten aus, so ergibt sich eine entsprechende Dosisbelastung in Sv/a.

Die DKF in $(\text{Sv/a})/(\text{Bq/m}^3)$ ermöglichen eine einfache Umrechnung von beliebigen Grundwasserkontaminationen in Bq/m^3 an einer Schnittstelle mit der Biosphäre in jährliche Effektivdosen (Sv/a).

Ebenso wie die DKF sind die Organdosiskonversionsfaktoren ODKF die zentralen Umrechnungsfaktoren zur Berechnung der Organdosen. Sie werden in gleicher Weise ermittelt wie die DKF. Die Organdosen werden dann ebenfalls direkt aus den Grundwasserkontaminationen berechnet.

¹ Die Biokinetik beschreibt das Verhalten einer Substanz hinsichtlich seiner Aufnahme, seines Transfers/Transports und seiner Speicherung/Retention in Organen und Gewebe sowie der folgenden Ausscheidung aus dem Körper. Biokinetische Parameter und Modelle sind wesentliche Bestandteile bei der Berechnung der Strahlenschäden von inkorporierten Radionukliden.

5 In BioTREND ermittelte Größen

In diesem Kapitel werden Berechnungsvorschriften vorgestellt, nach denen die relevanten Größen in BioTREND ermittelt werden.

5.1 Effektivdosis

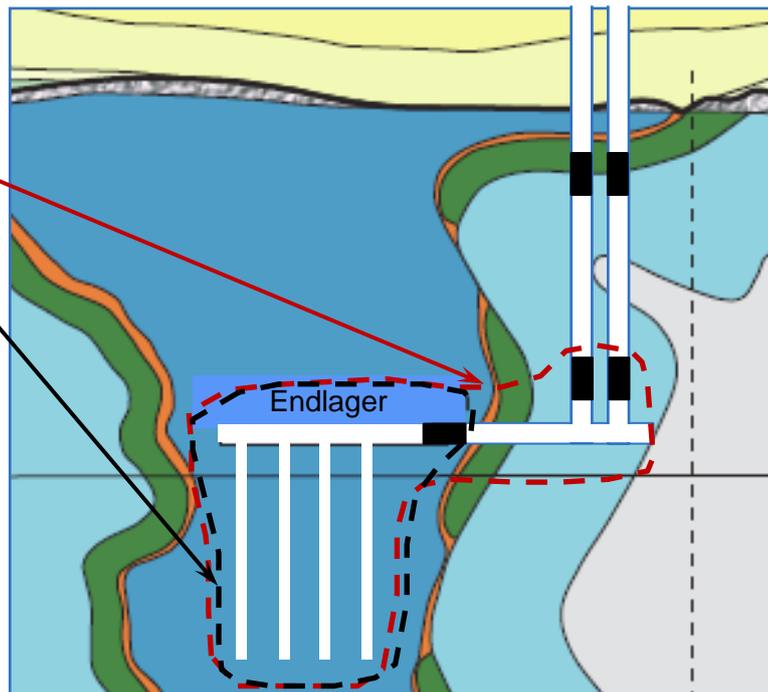
Die Berechnung von Effektivdosen E in BioTREND kann entweder für Aktivitätskonzentrationen c oder für Aktivitätsströme s an einem vorgegebenen Ort – im Weiteren als *Wasserentnahmestelle* (s. Abschnitt 6.3) bezeichnet – durchgeführt werden. Welche Größe für die Dosisberechnung herangezogen werden soll, wird per Benutzereinstellung festgelegt (s. Abschnitt *control parameters* im Anhang B.3).

Das Berechnungsmodell mit Radionuklidkonzentrationen c als Eingangsgrößen ist anzuwenden, wenn diese die Aktivitätskonzentrationen im Grundwasser unmittelbar an der Schnittstelle zur Biosphäre, also quasi im Biosphärenwasser wiedergeben. Das *Biosphärenwasser* ist dabei als das Wasser definiert, das zum Trinken, zur Viehtränke, zur Bewässerung u. ä. verwendet wird /BEC 03/. Dieses Wasser wird normalerweise aus einem Brunnen oder einem Fluss entnommen. Die Radionuklidkonzentration im Biosphärenwasser hat einen unmittelbaren Einfluss auf die menschliche Gesundheit, anders als die Konzentration von Radionukliden im Grundwasser.

Das Berechnungsmodell, das die Aktivitätsströme s als Eingangsgrößen verwendet, wird z. B. bei einem vereinfachten Sicherheitsnachweis /BMU 10/, /MOE 12/ angewandt, bei dem das Einschussvermögen des sogenannten *einschlusswirksamen Gebirgsbereichs*² (ewG) bewertet wird, der einen äußeren Rand der Anlage im Endlagersystem (Teil des Wirtsgesteins) definiert (Abb. 5.1). Der Schadstofftransport durch die Geosphäre wird je nach Festlegung des ewG gar nicht oder nur zu einem Teil simuliert. In diesem Fall werden die Prozesse im Deckgebirge in vereinfachter Weise im Biosphärenmodell berücksichtigt. Bei diesem Nachweisverfahren werden Radionuklidströme am Rand des ewG berücksichtigt.

² /BMU 10/: „Der einschusswirksame Gebirgsbereich ist der Teil des Endlagersystems, der im Zusammenwirken mit den technischen Verschlüssen (Schachtverschlüsse, Kammerabschlussbauwerke, Dammbauwerke, Versatz,...) den Einschluss der Abfälle sicherstellt.“

Beispiele der Definition eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG)



■ = technische Barriere

Abb. 5.1 Beispiele der Definition eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG)

Bei der Verwendung des letzteren Berechnungsverfahrens wird angenommen, dass der relevante Radionuklidstrom in einem vorgegebenen Volumenstrom verdünnt bzw. verteilt wird. Dieser wird als konstant angenommen und muss als Systemparameter *Referenzwasserstrom Q* (*reference water flow*, s. Abschnitt *control parameters* im Anhang B.3) vom Benutzer definiert werden. Bei der Festlegung des Wertes des Referenzwasserstroms werden Modellannahmen und -parameter sowie Sicherheitsanforderungen berücksichtigt. Beispielsweise kann der Grundwasserstrom in der Geosphäre als Referenzwasserstrom angenommen werden. Tritt der relevante Radionuklidstrom entsprechend dem modellierten System in einen Vorfluter ein, dann muss die relevante Verdünnung bei der Festlegung des Referenzwasserstroms berücksichtigt werden. Handelt es sich um die Bewertung des Einschussvermögens eines ewG, dann wird z. B. die jährlich aus dem Versorgungsbrunnen entnommene Wassermenge in m^3/a für eine Gruppe von Referenzpersonen als Referenzwasserstrom modelliert.

Ausgehend von der Aktivitätskonzentration $c_k(t)$ des Nuklids k im Grundwasser an der Wasserentnahmestelle zum Zeitpunkt t und den Dosiskonversionsfaktoren B ergeben sich die nuklidspezifischen jährlichen effektiven Dosisbelastungen $E_k(t)$ für zukünftige Individuen durch einfache Multiplikation (5.1). Da sich die DKF für Individuen unterschiedlicher Personengruppen unterscheiden, ergeben sich dementsprechend spezifische Dosisbelastungen. Die Klassifikation nach Personengruppen soll an dieser Stelle deutlich machen, dass es sich nicht nur um Altersgruppen sondern auch um andere Bevölkerungsgruppen handeln kann, z. B. um eine Gruppe der beruflich strahlenexponierten Personen. Zusätzlich wird ein konstanter, vom Benutzer vorzugebender Multiplikationsfaktor p berücksichtigt (s. Abschnitt *input* im Anhang B.3). Durch diese Konstante kann z. B. eine Verdünnung der Radionuklidkonzentration modelliert oder eine Normierung der Daten vorgenommen werden.

Wenn Aktivitätsströme als Ausgangsgröße gewählt werden, dann werden entsprechende nuklidspezifische Aktivitätskonzentrationen $c_k(t)$ an der Wasserentnahmestelle zum Zeitpunkt t aus den Aktivitätsströmen $s_k(t)$ und dem Referenzwasserstrom Q abgeleitet und aus diesen entsprechende jährliche Effektivdosen berechnet (5.2).

$$E_{a,k}(t) = p \cdot B_{a,k} \cdot c_k(t) \quad , \quad (5.1)$$

$$E_{a,k}(t) = p \cdot B_{a,k} \cdot \frac{s_k(t)}{Q} \quad , \quad (5.2)$$

$E_{a,k}(t)$ jährliche Effektivdosis [Sv/a], die auf das Nuklid k zurückzuführen ist, für eine Referenzperson aus einer Personengruppe a zum Zeitpunkt t ,

p konstanter Multiplikationsfaktor [-],

$B_{a,k}$ nuklid- und personengruppenspezifischer Biosphären-Dosiskonversionsfaktor (DKF) [(Sv/a)/(Bq/m³)],

Q Referenzwasserstrom [m³/a],

$c_k(t)$ Aktivitätskonzentration [Bq/m³] des Nuklids k im Grundwasser an der Wasserentnahmestelle zum Zeitpunkt t ,

$s_k(t)$ Aktivitätsstrom [Bq/a] des Nuklids k im Grundwasser an der Wasserentnahmestelle zum Zeitpunkt t .

Wenn die Nuklidkonzentrationen bzw. Nuklidströme in einer anderen Einheit (z. B. in mol/m³ oder kg/m³ bzw. in mol/a oder kg/a) angegeben sind, dann werden diese durch

Multiplikation mit dem entsprechenden Konversionsfaktor in die benötigte Einheit konvertiert.

In BioTREND können Radionuklide als Zerfallsprodukte berücksichtigt werden, die in den vorangehenden Freisetzungs- oder Ausbreitungsrechnungen nicht enthalten waren (s. Abschnitt 6.2). Diese Tochternuklide werden bei ausreichend kurzen Halbwertszeiten kein eigenes Wanderungsverhalten im Deckgebirge zeigen, sondern an jedem Ort im Aktivitätsgleichgewicht zum Mutternuklid vorliegen.

Dieses Aktivitätsgleichgewicht bezieht sich auf die gesamte am Ort vorhandene Aktivitätsmenge, also den gelösten und den sorbierten Anteil. Für die Dosisberechnungen sind aber nur die gelösten Konzentrationen von Interesse. Ist die gelöste Aktivitätskonzentration des Mutternuklids k' bekannt, so ergibt sich die gelöste Aktivitätskonzentration des Tochternuklids k zu

$$c_k(t) = \frac{R_{f,k'}}{R_{f,k}} c_{k'}(t) \quad . \quad (5.3)$$

Analog sind die Überlegungen bezüglich der Aktivitätsströme. Wenn der Aktivitätsstrom und damit die gelöste Aktivitätskonzentration des Mutternuklids k' bekannt sind, so berechnen sich die gelöste Aktivitätskonzentration und damit der Aktivitätsstrom des Tochternuklids k folgendermaßen:

$$s_k(t) = \frac{c_k(t)}{Q} = \frac{R_{f,k'}}{R_{f,k}} \cdot \frac{c_{k'}(t)}{Q} = \frac{R_{f,k'}}{R_{f,k}} s_{k'}(t) \quad . \quad (5.4)$$

Hierbei geben die Retardationsfaktoren R_f [-] das Verhältnis von Gesamtmenge zu gelöster Menge eines Radionuklids an. Sie errechnen sich aus den Verteilungskoeffizienten der Sorption K_d [m^3/kg] wie folgt:

$$R_f = 1 + \frac{1-n}{n} \rho K_d \quad , \quad (5.5)$$

n Porosität des Gesteins [-],

ρ Gesteinsdichte [kg/m^3].

An dieser Stelle ist hervorzuheben, dass sichergestellt werden muss, dass alle Größen, die sich auf das Umfeld der Wasserentnahmestelle beziehen und in BioTREND vorzugeben sind, kompatibel zu den entsprechenden Angaben in der vorangehenden Freisetzungs- oder Ausbreitungsrechnung (Nahfeld- und Fernfeldrechenmodule) sind.

Die Ergebnisse können *normiert* werden. Wenn der Benutzer die entsprechende Option bei der Spezifikation des Rechenlaufs aktiviert hat (*normalise doses to the reference value*, s. Abschnitt *age groups* im Anhang B.3), dann wird als Normierungsfaktor der Referenzwert verwendet, der bei den relevanten personengruppenspezifischen DKF (*reference value*, s. Anhang B.4) als solcher vorgegeben wurde. In der Regel ist dies ein gesetzlich vorgeschriebener Grenzwert, z. B. die maximale zusätzliche jährliche Effektivdosis gemäß /BMU 10/. Sollen die Ergebnisse auf einen anderen Wert normiert werden, dann kann dies durch die entsprechende Wahl der oben beschriebenen Multiplikationskonstante p modelliert werden.

Neben den nuklidspezifischen jährlichen Effektivdosen wird auch die Summendosis als Summe über die Beiträge aller Nuklide automatisch berechnet, weil laut /BMU 10/ gefordert ist, dass die durch Ableitung radioaktiver Stoffe bedingte Strahlenexposition des Menschen die Grenzwerte für die effektive Dosis nicht überschreitet, wobei die Summe der Dosen aller Nuklide ausschlaggebend ist. Von BioTREND werden auch Summenwerte über einige weitere Nuklidgruppen standardmäßig berechnet. Darüber hinaus können Summen über die vom Benutzer ausgewählten Nuklide berechnet werden. Im Abschnitt 6.3 ist ausführlich erläutert, welche Nuklidgruppen automatisch erfasst werden und wie die zusätzlichen Nuklidgruppen für die Berechnung von Teilsummen definiert werden können.

Die berechneten jährlichen Effektivdosen – sowohl nuklidspezifische als auch Summendosen – werden im spezifizierten Format als Funktion der Zeit in der Ausgabedatei *edo* (Abschnitt 6.5.2) mit der zugehörigen Vorspanndatei *evs* (Abschnitt 6.5.1) gespeichert und können dann grafisch dargestellt werden.

Außerdem werden Maximalwerte der jährlichen Effektivdosen für jede berücksichtigte Personengruppe sowie die Zeiten, an denen diese Werte registriert wurden, festgehalten und in der *out*-Ausgabedatei gespeichert (Abschnitt 6.5.5).

5.2 Organdosis

Neben der effektiven Individualdosis können mit BioTREND auch die Organdosen H_T berechnet werden. Die Berechnung der durch Einzelnuclide verursachten Organdosen erfolgt in gleicher Weise wie die Berechnung der Individualdosis.

Ausgehend von der Aktivitätskonzentration $c_k(t)$ des Nuklids k im Grundwasser an der Wasserentnahmestelle zum Zeitpunkt t und den Organdosiskonversionsfaktoren B_T ergeben sich die nuklidspezifischen Organdosen $H_{T,k}$ für Individuen durch Multiplikation (5.9). Auch die ODKF von Individuen unterschiedlicher Personengruppen (speziell Altersgruppen) unterscheiden sich, wodurch sich dementsprechend spezifische Dosisbelastungen ergeben. Der konstante Multiplikationsfaktor p , dessen Bedeutung im vorigen Abschnitt 5.1 erläutert wurde, wird auch bei der Berechnung von Organdosen berücksichtigt. Aus den Aktivitätsströmen $s_k(t)$ und einem vorzugebenden Referenzwasserstrom Q wird die Organdosis entsprechend (5.7) ermittelt.

Wie bei der effektiven Dosis verlangt /BMU 10/, dass bei der Organdosis die Summe über alle Nuklidbeiträge den Grenzwert für das jeweilige Organ nicht überschreitet. Deshalb, sowie aus Gründen der Übersichtlichkeit, wird von BioTREND die Organdosis ausschließlich als Summe über die Dosisbeiträge aller Nuklide berechnet:

$$H_{T,a}(t) = \sum_{\text{alle Nuklide } k} H_{T,a,k}(t) = p \cdot \sum_k B_{T,a,k} \cdot c_k(t) \quad , \quad (5.6)$$

$$H_{T,a}(t) = p \cdot \sum_k B_{T,a,k} \cdot \frac{s_k(t)}{Q} \quad , \quad (5.7)$$

$H_{T,a,k}(t)$ jährliche Organdosis [Sv/a] in einem Organ, Gewebe oder Körperteil T , die auf das Nuklid k zurückzuführen ist, für eine Referenzperson aus einer Personengruppe a zum Zeitpunkt t ,

$H_{T,a}(t)$ Summe über die Dosisbeiträge aller Nuklide [Sv/a] für eine Referenzperson aus einer Personengruppe a zum Zeitpunkt t ,

$B_{T,a,k}$ nuklid- und Personengruppenspezifischer Biosphären-Organdosiskonversionsfaktor (ODKF) [(Sv/a)/(Bq/m³)],

Die Aktivitätskonzentrationen bzw. –ströme für Nuklide, die in den vorangehenden Freisetzungs- oder Ausbreitungsrechnungen nicht enthalten waren, werden entsprechend der Gleichung (5.3) bzw. (5.4) ermittelt.

Die Ausgabe erfolgt für jedes Organ für den Zeitpunkt des Erreichens des Maximums der Organdosis. Die Beiträge der drei wichtigsten Nuklide werden jeweils mit ausgegeben. Neben der Organdosis berechnet BioTREND standardmäßig auch die auf einen Referenzwert bezogene Dosis. Der Referenzwert ist organ- und personengruppenspezifisch und wird vom Benutzer bei den relevanten personengruppenspezifischen ODKF (*reference value*, s. Anhang B.4) als solcher vorgegeben. In der Regel ist dies ein gesetzlich vorgeschriebener Grenzwert, z. B. die zusätzliche maximale jährliche Effektivdosis gemäß /BMU 10/. Alle Ergebnisse werden im spezifizierten Format in der *out*-Ausgabedatei gespeichert (Abschnitt 6.5.5).

5.3 Kollektivdosis

Bei der Berechnung der kollektiven Effektivdosis S wird davon ausgegangen, dass eine unveränderlich zusammengesetzte Personengruppe der gleichen Strahlenexposition ausgesetzt ist. Die Kollektivdosis in einer Personengruppe ist das Produkt aus dem Mittelwert der Effektivdosisrate in dieser Personengruppe und der Anzahl der Personen dieser Gruppe. Die gesamte Effektivdosis ergibt sich dann als Integral vom Zeitpunkt des Beginns der Radionuklidfreisetzung t_f bis zum betrachteten Zeitpunkt t . Die Kollektivdosis der Gesamtpopulation ist dann die Summe der Kollektivdosen der einzelnen berücksichtigten Personengruppen:

$$S_k = \sum_a S_{a,k} = \int_{t_f}^t \sum_a P_a \cdot E_{a,k}(t') dt' \quad , \quad (5.8)$$

S_k effektive Kollektivdosis der Gesamtpopulation [Sv], die auf das Nuklid k zurückzuführen ist,

$S_{a,k}$ effektive Kollektivdosis der Personengruppe a [Sv], die auf das Nuklid k zurückzuführen ist,

P_a Anzahl der Personen in der Personengruppe a .

Dieses Integral wird in BioTREND durch die zeitdiskrete Addition über den Zeitbereich approximiert. Die effektive Kollektivdosis wird in BioTREND für die gesamte Simulationszeit berechnet. Die berechneten Werte werden im spezifizierten Format in der *out*-Ausgabedatei gespeichert (Abschnitt 6.5.5).

5.4 Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströme

Bei der Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle werden unterschiedliche *Sicherheitsindikatoren* und *Leistungsindikatoren* (*performance indicators*) eingesetzt /BEC 03/, /WOL 08/, /BEC 09/:

- Ein *Leistungsindikator* ist ein Maß für die Leistung eines Systems insgesamt bzw. seiner Bestandteile. Leistungsindikatoren werden normalerweise auf die Bestandteile eines Systems angewendet (einzelne Barriere oder Teilsysteme). Sie helfen, die Rollen unterschiedlicher Systemkomponenten wie auch Zusammenhänge zwischen ihnen zu verstehen. Leistungsindikatoren sind somit nützlich beim Optimieren eines Endlagersystems und eignen sich gut beim Entwickeln von Systemkonzepten.
- Ein *Sicherheitsindikator* ist eine durch ein geeignetes Modell berechenbare Bewertungsgröße, die ein Maß für die Wirksamkeit eines Gesamtsystems in Bezug auf einen bestimmten Sicherheitsaspekt darstellt. Ein Sicherheitsindikator erfordert den Vergleich mit einem Referenzwert, der eine lokale oder globale Grenze festlegt, die als sicher anzusehen ist.

Die meisten Sicherheitsanforderungen sind in Form von Grenzwerten für jährliche Dosen und Risiken definiert, die nicht überschritten werden dürfen. Die Berechnung von jährlichen Dosen und Risiken basiert auf Annahmen über das menschliche Verhalten und über die Prozesse nahe der Bodenoberfläche, die über lange Zeiträume jedoch schwierig zu prognostizieren sind. Im Gegensatz dazu kann im Allgemeinen die Entwicklung des Wirtsgesteins über den gesamten Bewertungszeitraum sowie die der Geosphäre zumindest bis zum Eintreten einer Vergletscherung mit ausreichender Genauigkeit vorhergesagt werden. Aus diesem Grund werden bei einigen Sicherheitsnachweisen (z. B. /NAG 02/) zusätzlich zu den jährlichen Dosen und Risiken auch solche Sicherheitsindikatoren betrachtet, die unabhängig von der Beschreibung des menschlichen Verhaltens und ggf. den klimatischen Verhältnissen sind. Die zusätzliche Verwendung solcher Sicherheitsindikatoren kann die Robustheit eines Sicherheitsnachweises steigern und wird

bei der Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern radioaktiver Abfälle auf der internationalen Ebene als sinnvoll angesehen /IAEA 94/, /IAEA 03/, /BEC 03/, /BEC 09/.

In BioTREND können über die beschriebenen Dosen und Dosisraten hinaus zwei zusätzliche Sicherheitsindikatoren berechnet werden: Radiotoxizitätskonzentrationen im Biosphärenwasser und Radiotoxizitätsströme aus der Geosphäre bzw. aus dem definierten ewG.

Die *Radiotoxizitätskonzentration im Biosphärenwasser* R_c [Sv/m³] repräsentiert die Radiotoxizität von Radionukliden in 1 m³ Biosphärenwasser. Dieser Sicherheitsindikator kann auch als die Dosis interpretiert werden, die ein menschliches Individuum als Folge des Konsums von 1 m³ Biosphärenwasser erhält. Die Radiotoxizitätskonzentration wird berechnet als

$$R_c = m_c \sum_{\text{alle Nuklide } k} c_k g_k , \quad (5.9)$$

c_k Aktivitätskonzentration [Bq/m³] des Radionuklids k im Biosphärenwasser,

g_k Ingestionsdosiskoeffizient [Sv/Bq] für das Radionuklid k ,

m_c benutzerdefinierter Multiplikationsfaktor [-].

Dabei wird ein konstanter, vom Benutzer vorzugebender Multiplikationsfaktor m_c berücksichtigt (s. Abschnitt *indicators* im Anhang B.3). Durch diese Konstante kann z. B. eine Verdünnung der Radionuklidkonzentration modelliert oder eine Normierung der Daten vorgenommen werden.

Bei der Berechnung der Radiotoxizität werden Ingestionskoeffizienten g für Erwachsene benutzt, die einer innerhalb von 50 Jahren erhaltenen Effektivdosis entsprechen /ICRP 96/.

Der *Radiotoxizitätsstrom aus der Geosphäre* R_s [Sv/a] repräsentiert die Radiotoxizität aller Radionuklide, die aus der Geosphäre in die Biosphäre innerhalb eines Jahres freigesetzt werden. Der Radiotoxizitätsstrom kann auch als jährliche Effektivdosis interpretiert werden, die ein menschliches Individuum infolge der Ingestion aller aus der Geo- in die Biosphäre freigesetzten Radionuklide erhalten würde. Der Radiotoxizitätsstrom wird berechnet als:

$$R_s = m_s \sum_{\text{alle Nuklide } k} s_k g_k , \quad (5.10)$$

s_k Aktivitätsstrom [Bq/a] des Radionuklids k aus der Geo- in die Biosphäre,
 m_s benutzerdefinierter Multiplikationsfaktor [-].

Auch hier wird ein konstanter, vom Benutzer vorzugebender Multiplikationsfaktor m_s berücksichtigt (s. Abschnitt *indicators* im Anhang B.3), der mehr Flexibilität beim Modellieren erlaubt.

Sowohl bei der Berechnung der Radiotoxizitätskonzentration als auch des Radiotoxizitätsstroms werden keine Expositionspfade definiert bzw. berücksichtigt. Diese Sicherheitsindikatoren sind demzufolge von jeglichen Biosphärenmodellen unabhängig und können deswegen als robustere Sicherheitsindikatoren für längere Zeiträume betrachtet werden. Dabei ist aber zu beachten dass diese Indikatoren durch Verwendung der Ingestionsdosiskoeffizienten auf die Radiosensitivität heute lebender Menschen abgestimmt sind.

Die Aussage bezüglich der Sicherheit anhand eines Sicherheitsindikators kann nur in Bezug auf den entsprechenden Referenzwert gemacht werden. Wie Referenzwerte für unterschiedliche Sicherheitsindikatoren abgeleitet werden, ist beispielweise in /BEC 03/, /BEC 09/ beschrieben.

Wenn der Benutzer bei der Spezifikation eines BioTREND-Rechenlaufs die Option für die Berechnung von zusätzlichen Sicherheitsindikatoren ausgewählt hat (s. Abschnitt *indicators* im Anhang B.3), dann werden beide in diesem Abschnitt beschriebenen Sicherheitsindikatoren berechnet. Die für die Berechnung erforderlichen Ingestionsdosiskoeffizienten für alle ausgewählten Nuklide müssen spezifiziert werden (s. Anhang B.4). Fehlen diese Daten, so bricht das Programm mit entsprechender Fehlermeldung ab. Der zugehörige Referenzwert fließt zwar in die Berechnungen nicht ein, er sollte aber der Vollständigkeit halber an der bei den Ingestionsdosiskoeffizienten für diesen Parameter vorgesehenen Stelle eingetragen werden.

Radiotoxizitätskonzentrationen im Biosphärenwasser und Radiotoxizitätsströme aus der Geosphäre werden separat für jedes ausgewählte Nuklid berechnet. Darüber hinaus

werden auch die Summenwerte für alle Nuklide sowie ausgewählte Teilsummen (s. Abschnitt 6.3) ermittelt. Diese Daten werden im spezifizierten Format als Funktion der Zeit in den Ausgabedateien *tox.edo* (Abschnitt 6.5.4) mit der zugehörigen Header-Datei *tox.evs* abgelegt (Abschnitt 6.5.3) und können grafisch dargestellt werden.

6 Ablauf einer Rechnung

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

Als erstes wird ein Anwendungsfall in Form eines Rechenlaufs über die grafische Oberfläche XENIA spezifiziert. Die komplette Spezifikation dieses Anwendungsfalls wird dann in einer Datei im JSON-Format gespeichert. Die Erläuterungen zu den XENIA-Funktionalitäten und einige relevante Anmerkungen zu dem JSON-Format sind in /REI 11/ enthalten. Im Anhang B ist beschrieben, wie ein BioTREND-Rechenlauf in XENIA definiert wird. Zum Startzeitpunkt des Programms muss die entsprechende JSON-Datei mit allen den modellierten Anwendungsfall spezifizierenden Informationen im Arbeitsverzeichnis vorliegen.

Nach dem Starten des Programms werden als erstes die Eingangsdaten aus der JSON-Datei eingelesen. Entsprechend den eingegebenen Daten werden Initialisierungen vorgenommen.

Die Berechnung der Effektivdosen und ggf. Radiotoxizitätskonzentrationen und -ströme wird für die Zeitperiode und für diejenigen Zeitpunkte durchgeführt, für die eine Ergebnisausgabe in der Freisetzungs- bzw. Ausbreitungsrechnung erfolgt und in den entsprechenden Dateien gespeichert ist.

Aus den für den aktuellen Zeitschritt relevanten Aktivitätskonzentrationen bzw. Aktivitätsströmen werden zuerst jährliche nuklidspezifische Effektivdosen für jede definierte Personengruppe und ggf. für jedes definierte Organ berechnet. Falls Radiotoxizitäten entsprechend der gewählten Einstellung ermittelt werden sollen, so wird dies ebenfalls durchgeführt. Dann werden die Summenwerte berechnet und die effektive Kollektivdosis sowie die Maximalwerte für jährliche Effektivdosen aktualisiert.

Nach dem Ablauf der gesamten Rechnung werden die Ergebnisse sowie allgemeine Informationen zu dem Rechenlauf in die Ausgabedateien geschrieben.

6.1 Eingabedaten

Daten, die einen Rechenlauf spezifizieren, werden in der grafischen Bedingungsoberfläche XENIA /REI 11/ eingegeben und in einer Datei im JSON-Format gespeichert. BioTREND bezieht die erforderlichen Eingabedaten aus dieser JSON-Datei. Einige Erläuterungen dazu, wie ein BioTREND-Rechenlauf in XENIA spezifiziert wird, sind im Anhang B zu finden.

Für eine Rechnung mit BioTREND müssen außerdem sowohl die Nuklidkonzentrationen als auch die Nuklidfreisetzungsraten an der Wasserentnahmestelle über die gesamte Simulationszeit bekannt sein. Diese Größen werden von einem der vorangehenden Nahfeld- oder Fernfeld-Rechenmodule berechnet und in einem spezifizierten Format in zwei ASCII-Dateien gespeichert:

- eine Ausgabedatei mit der Erweiterung **sk* mit Konzentrationen und Freisetzungsraten der Schadstoffe zu den bestimmten Zeitpunkten, wobei in einer BioTREND-Rechnung je nach Benutzereinstellung nur eine der beiden Größen relevant ist,
- eine Vorspanndatei mit der Erweiterung **vs* mit den Daten, die zur Interpretation der oben genannten **sk*-Ausgabedatei notwendig sind,

wobei das *-Symbol an dieser Stelle als Platzhalter für einen der Buchstaben *r*, *c* und *g* verwendet wird.

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

- *rvs*- und *rsk*-Datei – Ausgabe des Nahfeldmoduls LOPOS (Definition des Formats in /STR 96/ und Änderung des Formats im Anhang von /REI 11/),
- *gvs*- und *gsk*-Datei, die vom Rechenmodul CLAYPOS stammen,
- *cvs*- und *csk*-Datei, die von einem der Fernfeldmodule (CHET1 /STR 96/ und /KUE 96/, CHET2 /LUE 96/, CHETMAD, TRAPIC /LUE 99/) oder von einem der RepoTREND-Fernfeldmodule (POSA /REI 11/, FRAME, COFRAME /REI 14/) ausgegeben werden.

Beide Dateinamen sind an der entsprechenden Stelle in der JSON-Datei (bzw. in XENIA) angegeben (s. Abschnitt *input* im Anhang B.3).

Darüber hinaus sind folgende Daten für alle für einen BioTREND-Rechenlauf definierten Nuklide zu spezifizieren:

- Dosiskonversionsfaktoren (Anhang B.4),
- Organdosiskonversionsfaktoren und entsprechende Referenzwerte (Anhang B.4), falls entsprechend der gewählten Benutzereinstellung Organdosener berechnet werden sollen (s. Abschnitt *organ* im Anhang B.3),
- Ingestionsdosiskoeffizienten (Anhang B.4), wenn die Option zur Berechnung von Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströmen gewählt wurde (s. Abschnitt *indicators* im Anhang B.3),
- nuklidspezifische Zerfallsdaten (Anhang B.5),
- elementspezifische Verteilungskoeffizienten für die Wasserentnahmestelle (Anhang B.6).

Alle diese Daten werden in XENIA eingegeben und sind dementsprechend in der JSON-Datei enthalten.

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

6.2 Nuklidauswahl

Die in einem BioTREND-Rechenlauf zu berücksichtigenden Nuklide werden vom Benutzer in XENIA vorgegeben (s. Abschnitt *nuclide settings* im Anhang B.3). Dabei können nur solche Nuklide betrachtet werden, die entweder selbst oder deren Mutternuklide in der vorangehenden Freisetzungs- bzw. Ausbreitungsrechnung berücksichtigt wurden. Die Einhaltung dieser Bedingung wird von BioTREND überprüft. Für die in den Eingabe-

dateien nicht enthaltenen Tochternuklide wird angenommen, dass sie sich im Aktivitätsgleichgewicht befinden. Sie werden entsprechend den Gleichungen (5.3) bzw. (5.4) behandelt.

6.3 Teilsummen

Sowohl jährliche Effektivdosen (Abschnitt 5.1) als auch Radiotoxizitäten (Abschnitt 5.4) und Kollektivdosen (Abschnitt 5.3) werden separat für jedes Nuklid berechnet. Darüber hinaus werden auch einige Summenwerte als Summe über die Beiträge der Nuklide bestimmter Nuklidgruppen ermittelt. Folgende Summenwerte werden von BioTREND standardmäßig berechnet:

- Summe über die Beiträge aller in BioTREND gerechneten Nuklide. Dieser Wert wird in den Ausgabedateien mit dem symbolischen Namen *SD 0* bezeichnet.
- Summe über die Beiträge aller Spalt- und Aktivierungsprodukte, bezeichnet als *SD 1*,
- Summe über die Beiträge aller Actinoiden und ihrer Zerfallsprodukte, bezeichnet als *SD 2*,
- Summe über die Beiträge aller Nuklide einer $(4n + N)$ -Zerfallsreihe, bezeichnet als *SS N*, wobei $0 \leq N \leq 3$.

Die Unterteilung der Nuklide in *Spalt- und Aktivierungsprodukte* und *Actinoide und ihre Zerfallsprodukte* wird in BioTREND anhand der Massenzahl vorgenommen. Alle Nuklide mit der Massenzahl ≥ 205 werden den *Actinoiden und ihren Zerfallsprodukten* zugeordnet. Thallium-205 (TI-205) ist somit das Nuklid mit der kleinsten Massenzahl, das zu einer Zerfallsreihe ($(4n + 1)$ -Zerfallsreihe) gehört. Nuklide mit einer kleineren Massenzahl werden entsprechend als *Spalt- und Aktivierungsprodukte* eingruppiert.

Zusätzlich zu den Teilsummen, die von BioTREND standardmäßig berechnet werden, können auch Summen über vom Benutzer ausgewählte Nuklide berechnet werden (s. Abschnitt *subtotal* im Anhang B.3). Bei der Ausgabe werden benutzerdefinierte Teilsummen mit dem symbolischen Namen '+<Elementname> <Massenzahl>' (z. B. '+Tc 99') bezeichnet, wobei nach dem +-Zeichen der Elementname und die Massenzahl des ersten für diese Teilsomme gewählten Nuklids steht.

Mehr Information zu den Bezeichnern von Teilsummen ist im Abschnitt 6.5.1 zu finden. Ausführliche Informationen darüber, welche Nuklide bei der Berechnung jeweiligen Summenwertes berücksichtigt wurden, werden in die *pbd*-Ausgabedatei (Abschnitt 6.5.5) geschrieben. Zusätzlich enthält die Vorspanndatei *evs* (Abschnitt 6.5.1) einige Informationen zu den Standardsummen.

Die berechneten Summenwerte werden zusammen mit den nuklidspezifischen Größen im entsprechenden Format ausgegeben. Dabei werden Teilsummen wie symbolische Nuklide behandelt.

An dieser Stelle ist Folgendes hervorzuheben: Bei der Berechnung von Summenwerten erfolgt eine einfache Addition der vorhandenen nuklidspezifischen Endergebnisse. Das bedeutet u. a., dass, falls es sich bei den nuklidspezifischen Ergebnissen um normierte oder infolge einer Multiplikation mit bestimmten Konstanten entstandenen Werte handelt, bei der Berechnung von Teilsummen eben diese Werte addiert werden.

6.4 Wasserentnahmestelle

Die Stelle, auf die sich die für BioTREND relevanten Aktivitätskonzentrationen bzw. Aktivitätsströme beziehen, wird als *Wasserentnahmestelle* bezeichnet.

Wenn der Nuklidtransport durch das Deckgebirge mit einem der Fernfeldmodule in einer vorangehenden Rechnung simuliert wurde, dann gilt die Ausgabestelle des relevanten Fernfeldmoduls automatisch als Wasserentnahmestelle.

Falls eine direkte Freisetzung der Radionuklide aus dem Nahbereich betrachtet werden soll, übernimmt BioTREND die Ausgabedaten eines Nahfeldmoduls ohne Zwischenschaltung eines Fernfeldmoduls. Bei einem Nahfeldmodul können ggf. mehrere Austrittsstellen modelliert werden. Wenn es sich um solches Nahfeldmodul handelt (z. B. LOPOS), dann muss der Name desjenigen Ausgabesegments vom Benutzer (s. Definition von *rvs*- und *rsk*-Dateien in /STR 96/ und Formaterweiterung in /REI 11/) explizit spezifiziert werden, das als Wasserentnahmestelle fungieren soll (s. Abschnitt *input* im Anhang B.3). Falls mehrere Austrittsstellen berücksichtigt werden sollen, so können für jede Austrittsstelle separate BioTREND-Rechnungen durchgeführt werden. Die ermittelten Effektivdosen werden im Anschluss der durchgeführten Rechnungen addiert.

Zur Entnahmestelle muss eine Multiplikationskonstante p (*multiplication factor*, s. Abschnitt *input* im Anhang B.3) vorgegeben werden. Die relevanten Radionuklidkonzentrationen bzw. -ströme werden mit dieser Konstante multipliziert (Abschnitte 5.1 und 5.2). Dadurch kann z. B. eine Verdünnung der Radionuklidkonzentration modelliert oder eine Normierung der Daten vorgenommen werden. Wenn die Eingangsgrößen unverändert bleiben sollen, so wird der Wert 1 gewählt.

6.5 Ausgaben in die Ergebnisdateien

Eine Übersicht darüber, welche Ausgabedateien von BioTREND erstellt werden, ist in Tab. 6.1 gegeben. In den Ausgabedateien werden Rechenergebnisse sowie wichtige Informationen zum Ablauf der Rechnung gespeichert.

Tab. 6.1 Ausgaben eines BioTREND-Rechenlaufs

Dateiname	Erweiterung
<output file name>_<module ID>	.evs
<output file name>_<module ID>	.edo
<output file name>_<module ID>_tox	.evs
<output file name>_<module ID>_tox	.edo
<output file name>	.out
<output file name>	.pbd
RepoTREND	.log
p _<Executable-Name>	.pcl

Die Bestandteile eines Dateinamens werden wie folgt definiert:

- Durch eine <Erweiterung> wird der Typ und somit der Inhalt einer Datei festgelegt. Im Weiteren wird erläutert, welche Dateitypen vom Programm generiert werden.
- Die Zeichenkette <output file name> wird als Eingabeparameter im XENIA-Modul *job-configuration* (Anhang B.2) definiert. Falls diese Angabe fehlt, wird standardmäßig die Zeichenkette *job* an dieser Stelle verwendet.

- Wenn der Benutzer bei der Definition eines Rechenlaufs den optionalen Parameter *module ID* mit einem Wert belegt hat (s. Abschnitt *control parameters* im Anhang B.3), dann wird die angegebene Zeichenkette bei der Zusammenstellung des Dateinamens an den Rechenlaufnamen angehängt. Der Parameter *module ID* sollte insbesondere dann spezifiziert werden, wenn mehrere Transportrechnungen mit BioTREND innerhalb eines Rechenlaufs durchgeführt werden müssen, um zu verhindern, dass Dateien überschrieben werden.
- *<Executable-Name>* ist der Name des relevanten RepoTREND-Executables.

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

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

In den weiteren Abschnitten werden die Ausgaben von BioTREND genau erläutert.

6.5.1 Vorspanndatei (.evs)

Die sogenannte *Vorspanndatei* hat die Erweiterung *evs* und enthält Daten, die zur Interpretation der zugehörigen *edo*-Ausgabedatei (Abschnitt 6.5.2) mit den Rechenergebnissen benötigt wird. Ein Beispiel einer Vorspanndatei ist in Abb. 6.1 zu sehen.

Das Format einer *evs*-Datei ist in /STR 96/ spezifiziert. Die wichtigsten Informationen, die in einer Vorspanndatei enthalten sind, sind Anzahl und Namen der berücksichtigten Personengruppen sowie Anzahl und Namen der gerechneten Nuklide und (Teil)Summen, wobei Teilsummen wie symbolische Nuklide behandelt werden.

Die Information zu einem Nuklid aus der Nuklidliste enthält drei Bestandteile: Elementname, Massenzahl und Abstand in der Nuklidliste zum nächsten Tochternuklid. Entsprechend diesem Format sind auch die Bezeichner für die Teilsummen eingeführt, wobei die zwei ersten Bestandteile den Summennamen (s. Abschnitt 6.3) und der dritte Bestandteil die Anzahl der in dieser Summe berücksichtigten Nuklide repräsentiert. Im Kommentar %%COMMENT sind Erläuterungen zu den Bezeichnern von Standardsummen enthalten. Die *pbid*-Ausgabedatei (Abschnitt 6.5.5) beinhaltet dann ausführliche Informationen sowohl zu den von BioTREND standardmäßig gerechneten als auch zu den benutzerdefinierten Teilsummen.

```

Biosphere module: BioTREND      V.2012-11-23
Mon Jun 30 12:57:28 2014
%%UNITS
    1
    Sv/a
%%ORT    Altersgruppen
    2
    >17a      <1a
%%NUKLID
    33
    Cs 135 0  Se  79 0  Tc  99 0  Am 241 1  Np 237 1  Pa 233 1  U 233 1  Th 229 1
    Ra 225 1  Ac 225 0  U 238 1  Th 234 1  U 234 1  Th 230 1  Ra 226 1  Pb 210 1
    Po 210 0  Am 243 1  Pu 239 1  U 235 1  Pa 231 1  Ac 227 1  Th 227 1  Ra 223 0
    SD  024  SD  1 3  SD  221  SS  0 0  SS  1 7  SS  2 7  SS  3 7  +Tc  99 3
    +U 233 4
%%DIVERS
    2
    24          9
%%AUSGABE
    1
    JA      (Nuklidfreisetzung erfolgte)

%%COMMENT
Bedeutung von Variablennamen:
SD  0 - Summe der Dosisraten ueber alle in BioTREND gerechneten Nuklide

SD  1 - Summe der Dosisraten ueber alle in BioTREND gerechneten Spalt- und Aktivierungsprodukte

SD  2 - Summe der Dosisraten ueber alle in BioTREND gerechneten Actiniden und ihrer Zerfallsprodukte

SS  N - mit 1<=N<=4, Summe der Dosisraten ueber eine (4n+N)-Zerfallsreihe

Anmerkungen:
- Die Info, welche Nuklide bei der Berechnung jeweiliger Teilsumme beruecksichtigt wurden, ist in der pbd-Datei zu finden.

- Falls sich die ausgegebenen Werte auf einen Referenzwert beziehen (normierte Werte), so werden bei der Berechnung von Teilsummen ebenfalls normierte Werte ausgegeben.

```

Abb. 6.1 Beispiel einer evs-Vorspanndatei

6.5.2 Datei mit jährlichen Effektivdosen (.edo)

Eine zur *evs*-Vorspanndatei gehörende *edo*-Datei (nicht zu verwechseln mit der *tox.edo*-Datei) enthält Blöcke mit Daten zu jedem in BioTREND gerechneten Zeitpunkt in chronologischer Reihenfolge. Ein Datenblock umfasst folgende Angaben:

- Ausgabezeitpunkt,
- jährliche Effektivdosen für alle gerechneten Nuklide und Teilsummen zu dem relevanten Ausgabezeitpunkt. Diese Daten sind in Blöcken gruppiert – ein Block für jede im Rechenlauf definierte Personengruppe. Die Anzahl und die Reihenfolge der Blöcke entsprechen somit der Anzahl und der Reihenfolge der Personengruppen in der entsprechenden Liste der Vorspanndatei *evs*.

Das Format einer *edo*-Dateien ist in /STR 96/ genau spezifiziert. Ein Beispiel einer *edo*-Datei ist in Abb. 6.2 dargestellt.

```

Biosphere module: BioTREND    V.2012-11-23
Mon Jul  7 10:52:10 2014
0.00000000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00
1.40341299E+06
2.852E-24 3.949E-19 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 1.401E-45 0.000E+00 1.401E-45 2.943E-44 5.745E-44 4.204E-45
9.809E-45 0.000E+00 0.000E+00 1.401E-45 1.401E-45 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
3.949E-19 3.949E-19 1.051E-43 0.000E+00 0.000E+00 1.023E-43 1.401E-45 3.949E-19
0.000E+00
3.753E-25 5.574E-19 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 1.401E-45 1.541E-44 3.363E-44 4.204E-45
7.006E-45 0.000E+00 0.000E+00 1.401E-45 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
5.574E-19 5.574E-19 6.306E-44 0.000E+00 0.000E+00 6.166E-44 1.401E-45 5.574E-19
0.000E+00
1.13702544E+07
1.072E-10 5.544E-16 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 5.665E-31 2.218E-30
1.435E-32 4.827E-33 4.927E-17 3.331E-19 9.716E-17 2.157E-15 4.054E-15 3.108E-16
6.622E-16 0.000E+00 0.000E+00 6.235E-17 6.549E-17 1.637E-17 3.111E-20 1.801E-19
1.072E-10 1.072E-10 7.475E-15 0.000E+00 2.804E-30 7.331E-15 1.444E-16 1.072E-10
3.331E-19
1.410E-11 7.827E-16 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 5.665E-31 2.348E-30
5.741E-32 2.087E-32 3.331E-17 5.899E-19 5.344E-17 1.166E-15 2.432E-15 2.568E-16
5.000E-16 0.000E+00 0.000E+00 5.101E-17 4.093E-17 8.514E-18 5.567E-20 6.877E-19
1.411E-11 1.410E-11 4.544E-15 0.000E+00 2.993E-30 4.442E-15 1.012E-16 1.410E-11
5.899E-19

```

Abb. 6.2 Beispiel einer *edo*-Datei mit jährlichen Effektivdosen für jede Personen-
gruppe

6.5.3 Header-Datei für Radiotoxizitäten (*tox.evs*)

Eine Header-Datei *tox.evs* wird nur dann generiert, wenn entsprechend der Benutzer-
einstellung (s. Abschnitt *indicators* im Anhang B.3) Radiotoxizitäten berechnet wurden.
Diese Datei ist ähnlich der *evs*-Vorspanndatei aufgebaut und wird zur Interpretation der
zugehörigen *tox.edo*-Datei (Abschnitt 6.5.4) benötigt. Ein Beispiel einer *tox.evs*-Header-
Datei ist in Abb. 6.3 dargestellt.

Das Format einer *tox.evs*-Dateien ist der in /STR 96/ angegebenen Spezifikation einer
evs-Vorspanndatei angepasst. Eine *tox.evs*-Header-Datei enthält u. a. folgende Informa-
tionen:

- unter %%ORT: die Bezeichnung für die in der entsprechenden *tox.edo*-Datei enthaltenen Daten – *Flows* für Radiotoxizitätsströme und *Concentr.* für Radiotoxizitätskonzentrationen,
- unter %%UNITS: Maßeinheiten für die genannten Größen in entsprechender Reihenfolge,
- unter %%NUKLID: Anzahl und Namen der gerechneten Nuklide und (Teil)Summen, wobei Teilsummen wie symbolische Nuklide behandelt werden (wie in der *evs-Vorspanndatei*).

```

RADIOTOXICITIES for biosphere module: BioTREND          V.2012-11-23
Fri Jul  4 11:18:01 2014
%%UNITS
      2
      Sv/a      Sv/m3
%%ORT      Radiotoxicities
      2
      Flows Concentr.

%%NUKLID
      33
Cs 135 0 Se 79 0 Tc 99 0 Am 241 1 Np 237 1 Pa 233 1 U 233 1 Th 229 1
Ra 225 1 Ac 225 0 U 238 1 Th 234 1 U 234 1 Th 230 1 Ra 226 1 Pb 210 1
Po 210 0 Am 243 1 Pu 239 1 U 235 1 Pa 231 1 Ac 227 1 Th 227 1 Ra 223 0
SD  024 SD  1 3 SD  221 SS  0 0 SS  1 7 SS  2 7 SS  3 7 +Tc 99 3
+U 233 4

```

Abb. 6.3 Beispiel einer Header-Datei *tox.evs* für Radiotoxizitäten

6.5.4 Datei mit Radiotoxizitäten (*tox.edo*)

Eine zur *tox.evs*-Header-Datei zugehörige *tox.edo*-Datei mit Radiotoxizitäten wird nur dann generiert, wenn diese Größen entsprechend der Benutzereinstellung tatsächlich berechnet wurden. Eine *tox.edo*-Datei enthält Blöcke mit Daten zu jedem in BioTREND gerechneten Zeitpunkt in chronologischer Reihenfolge. Ein Datenblock umfasst folgende Angaben:

- Ausgabezeitpunkt,
- Radiotoxizitätsströme für alle gerechneten Nuklide und Teilsummen zu dem relevanten Zeitpunkt,

- Radiotoxizitätskonzentrationen für alle gerechneten Nuklide und Teilsummen zu dem relevanten Zeitpunkt,

Das Format einer *tox.edo*-Dateien ist der in /STR 96/ angegebenen Spezifikation einer *csk*-Datei (Ergebnisse einer Schadstoffausbreitungsrechnung, ermittelt durch eins der Geosphärenmodule) angepasst. Ein Beispiel einer *tox.edo*-Datei ist in Abb. 6.4 dargestellt.

```

RADIOTOXICITIES for biosphere module: BioTREND          V.2012-11-23
Mon Jul 7 10:52:10 2014
0.00000000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00
1.40341299E+06
1.501E-20 5.052E-16 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 7.006E-45 6.166E-44
2.662E-44 2.662E-44 8.014E-42 3.740E-41 8.722E-42 2.482E-41 8.000E-41 6.000E-41
6.000E-41 0.000E+00 0.000E+00 2.360E-42 2.037E-42 6.026E-43 6.026E-43 6.026E-43
5.052E-16 5.052E-16 2.853E-40 0.000E+00 1.233E-43 2.789E-40 6.206E-42 5.052E-16
3.744E-41
5.764E-22 1.940E-17 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 2.803E-45
1.401E-45 1.401E-45 3.083E-43 1.436E-42 3.349E-43 9.529E-43 3.072E-42 2.304E-42
2.304E-42 0.000E+00 0.000E+00 9.108E-44 7.847E-44 2.382E-44 2.382E-44 2.382E-44
1.940E-17 1.940E-17 1.095E-41 0.000E+00 4.204E-45 1.071E-41 2.382E-43 1.940E-17
1.438E-42
1.13702544E+07
5.640E-07 7.093E-13 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 1.111E-27 9.589E-27
4.110E-27 4.110E-27 4.684E-13 2.186E-12 5.101E-13 1.836E-12 5.676E-12 4.257E-12
4.257E-12 0.000E+00 0.000E+00 1.332E-13 1.744E-13 5.158E-14 5.158E-14 5.158E-14
5.640E-07 5.640E-07 1.965E-11 0.000E+00 1.892E-26 1.919E-11 4.623E-13 5.640E-07
2.186E-12
2.166E-08 2.723E-14 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 4.267E-29 3.682E-28
1.578E-28 1.578E-28 1.798E-14 8.390E-14 1.958E-14 7.050E-14 2.179E-13 1.634E-13
1.634E-13 0.000E+00 0.000E+00 5.114E-15 6.693E-15 1.980E-15 1.980E-15 1.980E-15
2.166E-08 2.166E-08 7.544E-13 0.000E+00 7.264E-28 7.367E-13 1.775E-14 2.166E-08
8.390E-14

```

Abb. 6.4 Beispiel einer *tox.edo*-Datei mit Radiotoxizitäten

6.5.5 Dateien mit Kontrolldaten (.out und .pbd)

In der *out*-Datei werden einige Informationen zur Kontrolle des ausgeführten Rechenlaufs ausgegeben:

- Datum,
- Angaben zu der Programmversion,
- Name des Rechenlaufs,
- Angaben zu benötigter Rechenzeit und benutztem Arbeitsspeicher.

Außerdem enthält die *out*-Datei folgende von BioTREND berechnete Größen:

- Maximalwerte der jährlichen Effektivdosen für jede berücksichtigte Personengruppe sowie die Zeiten, an denen diese Werte registriert wurden, für alle gerechneten Nuklide und Teilsummen,
- Kollektivdosis für alle gerechneten Nuklide und Teilsummen,
- ggf. Organdosen.

Diese Daten sind in tabellarischer Form entsprechend dem in /STR 96/ festgelegten Format gespeichert.

In der *pbd*-Datei werden in einer übersichtlichen Form alle vom Benutzer zur Spezifikation des Rechenlaufs angegebenen Parameter gespeichert.

6.5.6 Die Logdatei (RepoTREND.log)

Die Logdatei *RepoTREND.log* (Abb. 6.5) enthält das automatisch geführte Protokoll bestimmter Aktionen, die während der Simulation ausgeführt werden. Speziell alle in den Programmcode eingebauten Fehler-, Warn-, Debug- und Infomeldungen werden in diese Datei ausgegeben. Jede Meldung hat einen eindeutigen Bezug auf die relevante Programmcodezeile. Die Logdatei dient in erster Linie der Problemanalyse auf der Programmcodeebene. Aber auch die Eingabeparameter werden vom Programm soweit möglich analysiert. Wenn ein vom Benutzer angegebener Parameterwert bestimmten im Programm eingebauten Kriterien nicht entspricht, gibt es zwei Optionen: entweder wird

der angegebene Wert als bedenklich gekennzeichnet, jedoch akzeptiert, oder das Programm wird abgebrochen. Dementsprechend wird eine Warn- bzw. eine Fehlermeldung in die Logdatei ausgegeben.

Die Logdatei wird allerdings nur dann generiert, wenn das Programm beim Starten die Datei *log4cxx.properties* im Arbeitsverzeichnis vorfindet. Der Benutzer sollte dafür sorgen, dass dies gewährleistet ist (s. Anhang B.2). In der Datei *log4cxx.properties* sind Einstellungen für das im Programm verwendeten Logger-Tool gespeichert. Eine der Einstellungen bewirkt, dass Logger-Einträge in eine Datei herausgeschrieben werden sollen. Durch das Editieren der gespeicherten Konfigurationen können außerdem z. B. die Menge und der Ausführlichkeitsgrad der auszugebenden Informationen sowie die Größe der Logdatei geändert werden, Benachrichtigungsfunktionalitäten eingeschaltet werden und viel mehr, ohne dass der Programmcode neu kompiliert werden muss. Falls die Konfigurationsdatei *log4cxx.properties* beim Programmstart im Arbeitsverzeichnis nicht gefunden wird, wird der Standardlogger verwendet, der alle Informationen auf die Konsole ausgibt. Wenn der Rechenlauf auf einem entfernten Rechner ausgeführt wird, bleiben diese Logger-Informationen für den Benutzer unsichtbar.

```
INFO (./src/start/main.cpp:48) - Starting application.
WARN (./src/modelObjects/GeoTREND_FC_F/Fracture.cpp:215) - Block length in fracture 0.6 greater
than dispersion length of nuclides. It could lead to numerical errors
WARN (./src/modelObjects/GeoTREND_FC_F/GeoTREND_FC/Fracture_FC.cpp:221) - Block length in frac-
ture 0.6 greater than dispersion length of colloids. It could lead to numerical errors
WARN (./src/modelObjects/GeoTREND_FC_F/GeoTREND_FC/TransportPath_GeoFC.cpp:84) - Illegal nega-
tive value of colloid diameter=-1e-07. Only -0.00298521 is permissible
DEBUG (./src/geometry/Grid_1D.cpp:326) - Input grid description string: d = 1 domain: [0,6]
indices: [0: 10]
DEBUG (./src/geometry/Grid_1D.cpp:326) - Input grid description string: d = 1 domain:
[0.0025, 0.0525] indices: [0: 5]
INFO (./src/problemSolvers/solver_GeoTREND_FC/Solver_GeoFC.cpp:165) - Initial fluid velocity:
1260 [m/a]
INFO (./src/problemSolvers/solver_GeoTREND_FC/Solver_GeoFC.cpp:166) - Initial colloid velocity:
1642.98 [m/a]
INFO (./src/problemSolvers/solver_GeoTREND_FC/Solver_GeoFC.cpp:570) - Created the pool with 5
threads
INFO (./src/problemSolvers/solver_GeoTREND_FC/Reports_GeoFC.cpp:46) - Created the pool with 7
threads for creating of output files
INFO (./src/start/main.cpp:98) - Exit application
```

Abb. 6.5 Beispiel einer Logdatei *RepoTREND.log*

6.5.7 Protokolldateien zur Ausführung von Rechenmodulen mit RepoTREND (.pcl)

Die pcl-Protokolldateien werden ab RepoTREND v. 3.0 generiert.

Ein Rechenlauf kann mehrere Rechenmodule enthalten, die mit demselben oder aber auch mit unterschiedlichen Executables ausgeführt werden sollen. Die Verknüpfung eines Rechenmoduls mit dem relevanten Executable erfolgt in XENIA (Anhang B.8). Die Information über diese Zuordnung ist in der JSON-Datei enthalten.

Zu jedem RepoTREND-Executable (ab v. 3.0) wird eine Protokolldatei *p_<Executable-Name>.pcl* mit Informationen über die Ausführung der für dieses Executable relevanten Rechenmodule ausgegeben. Ein Beispiel einer pcl-Datei ist in Abb. 6.6 dargestellt.

```
Wed Oct 16 11:44:37 2013
%%M_NUMBER_IN_JSON:    3      %%M_STATE:    finished
%%M_NUMBER_IN_JSON:    2      %%M_STATE:    finished
```

Abb. 6.6 *pcl*-Protokolldatei

Im Einzelnen enthält eine pcl-Datei folgende Angaben:

1. Zeile: das Datum und die Uhrzeit, wann die Datei generiert wurde. Format: eine Zeichenkette der max. Länge 80.
2. Zeile: Angaben zum Rechenmodul, das im Rahmen des definierten Rechenlaufs als erstes vom relevanten Executable ausgeführt wurde:
 - 20 Stellen: die Kennung %%M_NUMBER_IN_JSON,
 - 5 Stellen: die fortlaufende Nummer des relevanten Rechenmoduls in der in der JSON-Datei enthaltenen Modulliste,
 - 15 Stellen: die Kennung %%M_STATE,
 - 10 Stellen: der Status *finished*, der gesetzt wird, sobald die Ausführung des Rechenmoduls beendet ist.

3. Zeile: und folgende Zeilen für jedes weitere vom Executable ausgeführte Rechenmodul in der Ausführungsreihenfolge, wie in Zeile 2.

An dieser Stelle ist anzumerken, dass die Reihenfolge der Rechen- und Hilfsmodule bei der Definition eines Rechenlaufs beliebig sein darf. Sie stimmt mit der Reihenfolge, in der die Rechenmodule ausgeführt werden, i. A. nicht überein. Die Ausführungsreihenfolge wird vom Programm anhand der semantischen Zusammenhänge festgelegt. Im in Abb. 6.6 dargestellten Beispiel wurde als erstes das Rechenmodul ausgeführt, das in der Modulliste der JSON-Datei an der dritten Position zu finden ist, und danach das zweite Rechenmodul aus dieser Liste.

6.6 Parallelisierung

In RepoTREND sind einige Ansätze zur Parallelisierung der Programmausführung umgesetzt. Dabei erfolgt Parallelisierung auf zwei Ebenen:

Bei statistischen Rechenläufen werden einzelne *Spiele* (Einzelsimulationen mit je unterschiedlichen Eingabedatensätzen) auf mehreren Computern oder Rechenkernen gleichzeitig ausgeführt /REI 11/. Damit das tatsächlich erfolgt, muss eine entsprechende Anzahl von Rechenprozessoren angefordert werden (s. Abschnitt *Queue Command*, *Queue Alias* im Anhang B.7).

Aber auch innerhalb eines Rechenlaufs werden verschiedene Abläufe parallel bzw. nebenläufig ausgeführt. Das sind vor allem Abläufe, die naturgemäß nebenläufig verlaufen, wie z. B. Behandlung von verschiedenen, voneinander unabhängigen Nuklidketten bzw. Einzelnukliden, Erstellung von unterschiedlichen Ausgabedateien usw. Diese Parallelisierung wurde durch das Konzept *Multithreading* realisiert. Der Begriff *Multithreading* bezeichnet das gleichzeitige Abarbeiten mehrerer *Threads* (Ausführungsstränge) innerhalb eines einzelnen Prozesses (Anwendungsprogramms). Die entsprechenden Programmteile werden in separaten Threads ausgeführt. Die Threads bearbeiten ihre Aufgaben unabhängig voneinander und werden im Anschluss synchronisiert. Mehrere Threads können dabei sowohl auf einem Prozessorkern als auch auf mehreren gleichzeitig ausgeführt werden, je nach Hardware-Architektur und je nachdem, welches Betriebssystem auf dem Zielrechner installiert ist. Einige Systemkonfigurationen ermögli-

chen die gleichzeitige Ausführung mehrerer Threads innerhalb eines Prozessorkerns. Bei anderen wiederum kann nur ein Thread pro Prozessorkern ablaufen.

Die RepoTREND-Module sind so realisiert, dass das Programm

- zunächst automatisch die optimale Anzahl von erforderlichen Threads feststellt (z. B. Anzahl der Nuklidketten und Einzelnuklide oder Anzahl der Ausgabedateien),
- dann die Anzahl der Threads, die vom System zur Verfügung gestellt werden können, bestimmt
- und schließlich die kleinere von beiden Zahlen nimmt und genau diese Anzahl von Threads generiert.

Die nebenläufig abzuarbeitenden Aufgaben werden in eine Schlange gestellt. Ein Thread übernimmt eine Aufgabe aus der Schlange, arbeitet diese ab und holt sich dann die nächste, bis alle Aufgaben abgearbeitet sind. Die beste Rechenzeit erreicht man somit dann, wenn alle Aufgaben gleichzeitig ausgeführt werden können, wenn also die erforderliche Anzahl von Threads vom System auch zur Verfügung gestellt werden kann.

Demzufolge sollte der Benutzer auch bei einem deterministischen Rechenlauf stets mehrere Prozessorkerne anfordern (s. Abschnitt *Queue Command*, *Queue Alias* im Anhang B.7), um die optimale Rechenleistung zu erzielen. Wichtig ist es hier, zu berücksichtigen, dass das Multithreading nur dann auf mehreren Prozessorkernen funktioniert, wenn diese über gemeinsamen Speicher verfügen. Sinnvollerweise sollten deshalb mehrere Prozessorkerne desselben Knotens in Anspruch genommen werden. Hier sind einige Beispiele von gültigen Angaben für den Fall, dass 4 Nuklidketten und 2 Einzelnuklide behandelt werden müssen und ein Thread pro Prozessorkern vom System zur Verfügung gestellt wird:

- Die Einstellung `nodes=1:ppn=6` ist optimal, in sechs Threads werden alle Nuklidketten und Einzelnuklide parallel abgearbeitet.
- Bei der Einstellung `nodes=1:ppn=4` werden Nuklidketten und Einzelnuklide von vier Threads gleichzeitig abgearbeitet.
- Bei der Einstellung `nodes=1:ppn=10` werden zehn Prozessorkerne durch das Programm beansprucht, jedoch nur sechs davon ausgelastet. Bei dem nächsten Ar-

beitsschritt, z. B. bei der Generierung von Ausgabedateien, können aber auch mehr Threads zum Einsatz kommen.

- Bei der Einstellung $nodes=1:ppn=1$ werden Nuklidketten und Einzelnuclide sequenziell abgearbeitet. In diesem Fall wird man von der Parallelisierung gar nicht profitieren.
- Bei der Einstellung $nodes=3:ppn=2$ werden Nuklidketten und Einzelnuclide von zwei Threads auf einem Knoten gleichzeitig abgearbeitet. Die vom Programm beanspruchten zwei weiteren Knoten mit je zwei Prozessoren werden dabei nicht ausgelastet. Diese Einstellung ist somit nicht sinnvoll.

Wenn ein Rechenlauf auf einem Rechner ohne Queuing-System – z. B. auf einem lokalen Rechner – ausgeführt wird, werden die Einstellungen für die Threads automatisch vorgenommen. Im Anhang B.7 ist es ausführlich beschrieben, welche Einstellungen wie vorgenommen werden können.

7 Testen von BioTREND

Zum Testen von BioTREND wurden automatisierte Testfälle erstellt, in denen BioTREND-Rechnungen stichprobenartig durch eine direkte Kalkulation entsprechend den umgesetzten mathematischen Formeln nachgebildet wurden. Die automatisierten Testfälle werden speziell bei den Regressionstests eingesetzt. Konkret wird die Berechnung von folgenden Größen kontrolliert:

- Effektivdosen für unterschiedliche Personengruppen zu unterschiedlichen Zeitpunkten für bestimmte Nuklide wie auch alle Standard- und einige benutzerdefinierte Teilsummen,
- Kollektivdosen,
- Organdosen für unterschiedliche Organe von Individuen aus verschiedenen Personengruppen,
- Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströme zu unterschiedlichen Zeitpunkten für bestimmte Nuklide wie auch alle Standard- und einige benutzerdefinierte Teilsummen,
- Maximalwerte der jährlichen Effektivdosen für jede in einem Testfall berücksichtigte Personengruppe sowie die Zeiten, an denen diese Werte registriert wurden.

Das Protokoll über den Verlauf von automatisierten Tests wird in einer Datei festgehalten.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der Arbeit war, ein Rechenmodul für das Programm RepoTREND zu entwickeln, das zur Bewertung der Strahlenexposition in der Biosphäre eingesetzt werden kann. Als erstes wurde eine Auswahl der benötigten charakteristischen Größen aus dem Strahlenschutz festgelegt, die relevant für die Risikoabschätzung infolge einer Strahlenexposition sind. Dann wurden Ansätze zur Berechnung dieser Größen gewählt und anschließend im Programmmodul BioTREND umgesetzt.

Somit wurde mit BioTREND ein Programmcode zur Verfügung gestellt, in dem basierend auf den Ergebnissen einer Freisetzungs- bzw. Ausbreitungsrechnung sowie einer separaten Biosphärenmodellierung Dosisbelastungen für Individuen als jährliche Effektivdosis und Organdosis sowie für Kollektive berechnet werden können. Optional können Radiotoxizitätskonzentrationen und Radiotoxizitätsströme ermittelt werden.

Um das Einsatzgebiet des neuen Rechenmoduls zu erweitern, wäre es sinnvoll, BioTREND um die Berechnung weiterer Größen zu ergänzen, wie z. B.:

- die Energiedosis, die als eine auf Menschen nicht bezogene Größe zur Bewertung des Strahleneinflusses auf andere Objekte und Subjekte der Biosphäre, wie z. B. Tiere oder Mikroorganismen, herangezogen werden kann,
- der Sicherheitsindikator RGI (**R**adiologischer **G**eringfügigkeits**I**ndex) /MOE 12/, der das Ausmaß der Radionuklidfreisetzung aus dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Verhältnis zu einem Freisetzungswert angibt,
- der Beitrag zur Leistungsdichte aufgrund radioaktiver Strahlung im Porenwasser der Randzone des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs durch aus dem Endlagerbergwerk freigesetzte Radionuklide (contribution to power density in the porewater at the CRZ boundary) /NOS 12/.

Literaturverzeichnis

- /AVV 12/ Allgemeine Verwaltungsvorschrift zu §47 der Strahlenschutzverordnung: Ermittlung der Strahlenexposition durch die Ableitung radioaktiver Stoffe aus Anlagen oder Einrichtungen, BAnz AT 05.09.2012 B1, 2012.
- /BEC 03/ Becker, D.-A., Buhmann, D., Storck, R., Alonso, J., Cormenzana, J.-L., Hugi, M., van Gemert, F., O'Sullivan, P., Laciok, A., Marivoet, J., Sillen, X., Nordman, H., Vieno, T., Niemeyer, M.: Testing of Safety and Performance Indicators (SPIN), EUR 19965 EN, European Commission, Brüssel, 2003.
- /BEC 09/ Becker, D.-A., Wolf, J.: General Concepts of Supporting the Safety Case by Means of Safety and Performance Indicators, PAMINA-D3.4.1, European Commission, 2009.
- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle, Bonn, Stand: 30. September 2010.
- /BUH 99/ Buhmann, D.: Das Programmpaket EMOS. Ein Instrumentarium zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern, GRS-Bericht 159, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 1999.
- /IAEA 94/ IAEA: Safety indicators in different time frames for the safety assessment of underground radioactive waste repositories, IAEA-TECDOC-767, Wien, 1994.
- /IAEA 03/ IAEA: Safety indicators for the safety assessment of radioactive waste disposal. Sixth report of the Working Group on Principles and Criteria for Radioactive Waste Disposal, IAEA-TECDOC-1372, Wien, 2003.
- /ICRP 96/ International Commission on Radiological Protection: Age-dependent doses to members of the public from intake of radionuclides: Part 5 Compilation of ingestion and inhalation dose coefficients, ICRP 72, Pergamon Press, Oxford, 1996.

- /KUE 96/ Kühle, T., Zude, F., Lührmann, L.: Das eindimensionale Transportprogramm CHET1 unter Berücksichtigung der Sorption nach dem K_d -Konzept, GRS-Bericht 124, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 1996.
- /LUE 96/ Lührmann, L., Nosek, U.: Das eindimensionale Transportprogramm CHET2 unter Berücksichtigung nichtlinearer, elementspezifischer Gleichgewichtssorption, GRS-Bericht 125, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 1996.
- /LUE 99/ Lührmann, L.: Modellierung des kolloidbeeinflussten Schadstofftransports mit dem Rechenprogramm TRAPIC, GRS-Bericht 149, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 1999.
- /MOE 12/ Mönig, J., Buhmann, D., Rübél, A., Wolf, J., Baltés, B., Fischer-Appelt, K.: Sicherheits- und Nachweiskonzept, Bericht zum Arbeitspaket 4, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-Bericht 277, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2012.
- /NAG 02/ Nagra: Projekt Opalinus Clay: The long-term safety of a repository for spent fuel, vitrified high-level waste and long-lived intermediate-level waste sited in the Opalinus Clay of the Züricher Weinland, Nagra, NTB 02-05, Wettingen, 2002.
- /NOS 12/ Noseck, U., Becker, D.-A., Brassler, T., Fahrenholz, C., Flüggé, J., Herbert, H.-J., Ionescu, A., Kröhn, K.-P., Kull, H., Meleshyn, A., Mönig, J., Röhlig, K., Rübél, A., Rothfuchs, T., Wolf, J.: Scientific Basis for a Safety Case of Deep Geological Repositories, GRS-Bericht 298, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2012.
- /REI 11/ Reiche, T., Becker, D., Buhmann, D., Lauke, T.: Anpassung des Programmpaketes EMOS an moderne Softwareanforderungen, ADEMOS – Phase 1, GRS-A-Bericht 3623, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, FKZ des BMWi 02E10367, 2011.

- /REI 14/ Reiche, T., Noseck, U., Wolf, J. W.: Modellierung des Schadstofftransports in geklüftet-porösen Medien unter der Berücksichtigung von Kolloiden mit den Transportprogrammen FRAME und COFRAME, GRS-Bericht 333, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, FKZ des BMWi 02E10367, 2014.
- /PRO 02/ Pröhl, G., Gering, F.: Dosiskonversionsfaktoren zur Berechnung der Strahlenexposition in der Nachbetriebsphase von Endlagern nach dem Entwurf der Allgemeinen Verwaltungsvorschriften zu §47 Strahlenschutzverordnung, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, Institut für Strahlenschutz, Neuherberg, 2002.
- /REI 12/ Reiche, T.: RepoTREND – An Advanced Modelling Tool for Performance Assessment of Radioactive Waste Repositories, EUROSAFE, 2012.
- /SSV 11/ Strahlenschutzverordnung (StrlSchV): Dosimetrische Größen, Gewebe- und Strahlungs-Wichtungsfaktoren, Anlage VI (zu §§ 3, 47, 49, 55, 95, 117), 2011.
- /STR 96/ Strock, R., Buhmann, D., Hirsekorn, R.-P., Kühle, T., Lührmann, L.: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle. Version 5, GRS-Bericht 122, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 1996.
- /WOL 08/ Wolf, J., Rübél, A., Noseck, U., Becker, D.-A.: Safety and Performance Indicators for Repositories in Salt and Clay Formations, GRS-Bericht 240, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2008.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Rechenmodule von RepoTREND für verschiedene Teilbereiche von Endlagern (links) und eine entsprechende Modellvorstellung einer möglichen Freisetzung von Schadstoffen aus einem Endlager (rechts)	2
Abb. 4.1	Nutzungs- und Ingestionspfade bei der Ausbreitung von Radionukliden in der Biosphäre	12
Abb. 5.1	Beispiele der Definition eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG).....	16
Abb. 6.1	Beispiel einer <i>evs</i> -Vorspanndatei.....	34
Abb. 6.2	Beispiel einer <i>edo</i> -Datei mit jährlichen Effektivdosen für jede Personengruppe	36
Abb. 6.3	Beispiel einer Header-Datei <i>tox.evs</i> für Radiotoxizitäten.....	37
Abb. 6.4	Beispiel einer <i>tox.edo</i> -Datei mit Radiotoxizitäten	38
Abb. 6.5	Beispiel einer Logdatei <i>RepoTREND.log</i>	40
Abb. 6.6	<i>pcl</i> -Protokolldatei	41
Abb. B.1	Die für einen BioTREND-Rechenlauf erforderlichen XENIA-Module	62
Abb. B.2	Modul <i>job-configuration</i>	63
Abb. B.3	Nuklid- und Teilsummendefinition in <i>nuclide settings</i>	64
Abb. B.4	Definition einer Teilsumme unter <i>subtotal</i>	65
Abb. B.5	Definition von Umgebungsparametern an der Wasserentnahmestelle in <i>domain properties</i>	66
Abb. B.6	Definition von Personengruppen in <i>age groups</i>	68
Abb. B.7	Definition eines Organs unter <i>organ</i>	69
Abb. B.8	Definition von Steuerungsparametern unter <i>control parameters</i>	70
Abb. B.9	Definition der Pfade zu den Eingabedateien mit Konzentrationen und Zustromsraten der Nuklide unter <i>input</i>	71
Abb. B.10	Definition von Parametern zur Berechnung von Radiotoxizitäten unter <i>indicators</i>	72

Abb. B.11	Spezifikation von Dosiskonversionsfaktoren, Organdosiskonversionsfaktoren und Ingestionsdosiskoeffizienten im Modul <i>dosefactors</i>	73
Abb. B.12	Pflege der Umrechnungsfaktoren an der zentralen Stelle	74
Abb. B.13	Nuklid- und Tracerspezifikation im Modul <i>nuclidedata</i>	76
Abb. B.14	Pflege der Nukliddaten an der zentralen Stelle	77
Abb. B.15	Spezifikation von Sorptionsparametern unter <i>elementdata-FF</i>	78
Abb. B.16	Einstellungen in der Ansicht <i>Job Parameters</i>	79
Abb. B.17	Ansicht <i>Job Parameter</i> bei einem lokal auszuführenden Rechenlauf	83
Abb. B.18	Ansicht <i>Submit</i>	84

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Strahlungs-Wichtungsfaktoren für verschiedene Arten ionisierender Strahlung /SSV 11/	6
Tab. 3.2	Gewebe-Wichtungsfaktoren für verschiedene Organe und Gewebe /SSV 11/	7
Tab. 6.1	Ausgaben eines BioTREND-Rechenlaufs	32

Abkürzungsverzeichnis

BioTREND	BIOsphärenmodul von RepoTREND
CHET	Verknüpfung von CHEmischen Effekten, die eine Radionuklidrückhaltung bewirken, mit dem Transport
CLAYPOS	model for CLAY type rePOSitory
COFRAME	COlloid facilitated transport in FRActured-porous MEdia
DKF	Dosiskonversionsfaktor
EMOS	Endlagerbezogene MOdellierung von Szenarien
ewG	einschlusswirksamer Gebirgsbereich
EXCON	calculation of radiation EXposure from contaminant CONcentrations
EXMAS	calculation of radiation EXposure from contaminant MASs flows
FRAME	transport in FRActured-porouse MEdia
GeoTREND	GEOsphärenmodul von RepoTREND
LOPOS	model for LOOp like structured rePOSitory
NaTREND	Nah(NeAr)feldnmodul von RepoTREND
POSA	transport in POrous SATurated media
RepoSTAR	RepoTREND framework for STATistic Runs
RepoTREND	Transport and REtention of Non-dacaying and Decaying contaminants in final REPOSitory
RGI	Radiologischer GeringfügigkeitsIndex
TRAPIC	TRANsport of Pollutants Influenced by Colloids
XENIA	fleXible ENhanced Interface Application

A Symbolverzeichnis

Die Liste gibt die wichtigsten im Text verwendeten Symbole an. Eine Reihe von Symbolen kann mit Indizes z. B. für ein Element oder Nuklid versehen auftreten. Symbole, die nur einmal vorkommen, sind nicht aufgelistet. Ebenfalls nicht verzeichnet sind die Symbole, die als Kürzel oder Laufvariable in Algorithmen verwendet werden. Die angegebenen Maßeinheiten entsprechen den Maßeinheiten, die im Rechenmodul BioTREND verwendet werden.

Symbol	Einheit	Beschreibung
B	$[(\text{Sv/a})/(\text{Bq/m}^3)]$	Biosphären-Dosiskonversionsfaktor (DKF)
B_T	$[(\text{Sv/a})/(\text{Bq/m}^3)]$	Biosphären-Organdosiskonversionsfaktor (ODKF)
c	$[\text{Bq/m}^3]$	Aktivitätskonzentration
E	$[\text{Sv/a}]$	jährliche Effektivdosis
g	$[\text{Sv/Bq}]$	Ingestionsdosiskoeffizient
H_T	$[\text{Sv/a}]$	jährliche Organdosis
K_d	$[\text{m}^3/\text{kg}]$	Verteilungskoeffizient
m_c	$[-]$	Multiplikationskonstante, die bei der Berechnung von Radiotoxizitätskonzentrationen berücksichtigt wird
m_s	$[-]$	Multiplikationskonstante, die bei der Berechnung von Radiotoxizitätsströmen berücksichtigt wird
n	$[-]$	Porosität des Gesteins
P	$[-]$	Anzahl der Personen in einer Personengruppe
p	$[-]$	Multiplikationskonstante, die bei der Berechnung von Effektivdosen und Organdosen berücksichtigt wird

Symbol	Einheit	Beschreibung
Q	[m ³ /a]	Referenzwasserstrom
R_c	[Sv/m ³]	Radiotoxizitätskonzentration im Biosphärenwasser
R_f	[-]	Retardationsfaktor
R_s	[Sv/a]	Radiotoxizitätsstrom von der Geosphäre
S	[Sv]	effektive Kollektivdosis
s	[Bq/a]	Aktivitätsstrom
ρ	[kg/m ³]	Gesteinsdichte

B Spezifikation eines BioTREND-Rechenlaufs in XENIA

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie ein deterministischer BioTREND-Rechenlauf in XENIA spezifiziert wird. Es wird dabei die zurzeit aktuelle Version des relevanten XENIA-Moduls verwendet: BioTREND_2012-11-23.

Zur Durchführung von statistischen Rechenläufen wurde der statistische Rahmen RepoSTAR entwickelt /REI 11/. Die Spezifikation eines statistischen Rechenlaufs ist nicht der Gegenstand des vorliegenden Dokuments.

Es wird vorausgesetzt, dass der Benutzer mit den XENIA-Funktionalitäten vertraut ist /REI 11/. Weiterhin wird davon ausgegangen, dass die Arbeit mit XENIA intuitiv ist, und dass die Bedeutung der einzugebenden Parameter klar bzw. durch vorhandene Kommentare und Tooltips ausreichend erklärt ist. Es wird nur auf die Aspekte eingegangen, die eine zusätzliche Erläuterung erfordern.

B.1 Erforderliche Module

Es ist darauf zu achten, dass bei der Spezifikation eines Rechenlaufs stets aktuelle Versionen der XENIA-Module benutzt werden.

Ein BioTREND-Rechenlauf wird aus folgenden Modulen zusammengestellt (Abb. B.1):

- *job-configuration*,
- *BioTREND*,
- *dosefactors*,
- *nuclidedata*,
- *elementdata-FF*.

Der Rechenlauf kann je nach Anwendungsfall durch andere Module (Nahfeld-, Fernfeld- oder zusätzliche Biosphärenmodule) ergänzt werden. Die Reihenfolge der Module ist beliebig. Die in Abb. B.1 vorgegebene Modulreihenfolge ist somit nicht zwingend, jedoch aus Gründen der Übersichtlichkeit empfohlen.

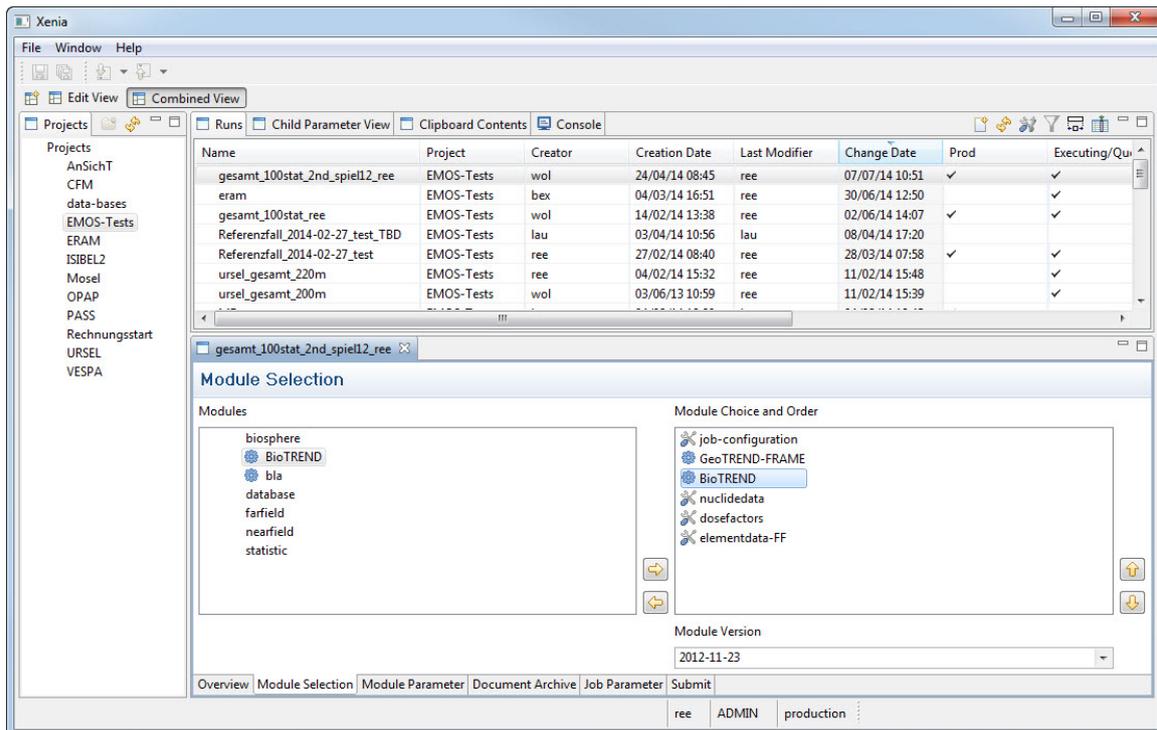


Abb. B.1 Die für einen BioTREND-Rechenlauf erforderlichen XENIA-Module

B.2 Modul *job-configuration*

Das Modul *job-configuration* (Abb. B.2) ist ein optionales Modul mit einem Objekt *run settings*, das zwei Attribute hat:

- Pflichtattribut *output file name* – die Namen aller Ausgabedateien werden mit der in diesem Eingabefeld definierten Zeichenkette beginnen (s. Abschnitt 6.5).
- Optionales Attribut *additional files* – hier sollte der Pfad zu der Datei *log4cxx.properties* eingegeben werden. In dieser Datei sind Einstellungen für den Logger von RepoTREND gespeichert. Die wichtigste Einstellung dabei ist, dass das Programm die Logdatei *RepoTREND.log* für den relevanten Rechenlauf generieren soll, in die alle Einträge des Loggers (alle Probleme und alle wichtigen Informationen) ausgegeben werden (s. Abschnitt 6.5.6). Diese log-Datei ist insbesondere bei der Problemsuche und Problemanalyse wichtig.

Wenn dieses Eingabefeld leer bleibt, dann wird die Konfigurationsdatei *log4cxx.properties* vom Programm nicht gefunden. In diesem Fall übernimmt der

Logger automatisch die Default-Einstellungen. Per default werden alle log-Einträge auf den Bildschirm ausgegeben und bleiben für den Benutzer unsichtbar, falls der Rechenlauf remote, d. h. auf einem entfernten Rechner abgearbeitet wird (Normalfall).

Selbst wenn ein Rechenlauf augenscheinlich erfolgreich abgelaufen ist, sollte sich der Benutzer die log-Einträge ansehen. Dabei ist insbesondere auf Warnungen (WARN) zu achten. Diese Einträge weisen vor allem auf die Aspekte (Parameterwerte, Einstellungen,...) hin, die vom Programm zwar akzeptiert wurden, jedoch zu Problemen führen können. Es handelt sich vor allem um solche Probleme, die auf den ersten Blick nicht erkannt werden können.

Falls das optionale Modul *job-configuration* einem Rechenlauf nicht hinzugefügt wurde, dann

- werden Namen aller Ausgabedateien mit *job* beginnen,
- wird keine Logdatei *RepoTREND.log* generiert.

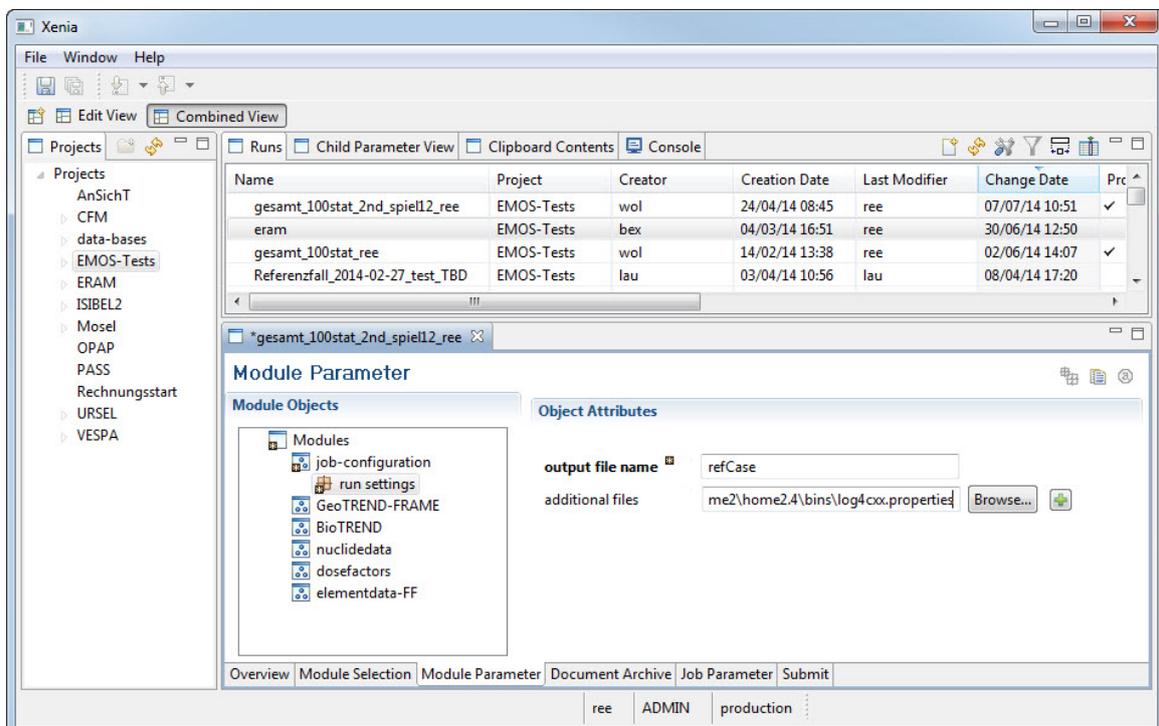


Abb. B.2 Modul *job-configuration*

B.3 Modul BioTREND

nuclide settings

Nuklide, die in der Biosphäre berücksichtigt werden müssen, werden unter dem Objekt *nuclide settings* (Abb. B.3) als explizit angegebene flache Liste *considered nuclides* spezifiziert. Dabei können nur solche Nuklide betrachtet werden, die entweder selbst oder deren Mutternuklide in der vorangehenden Freisetzungs- bzw. Ausbreitungsrechnung berücksichtigt wurden. Die Einhaltung dieser Bedingung wird von BioTREND überprüft.

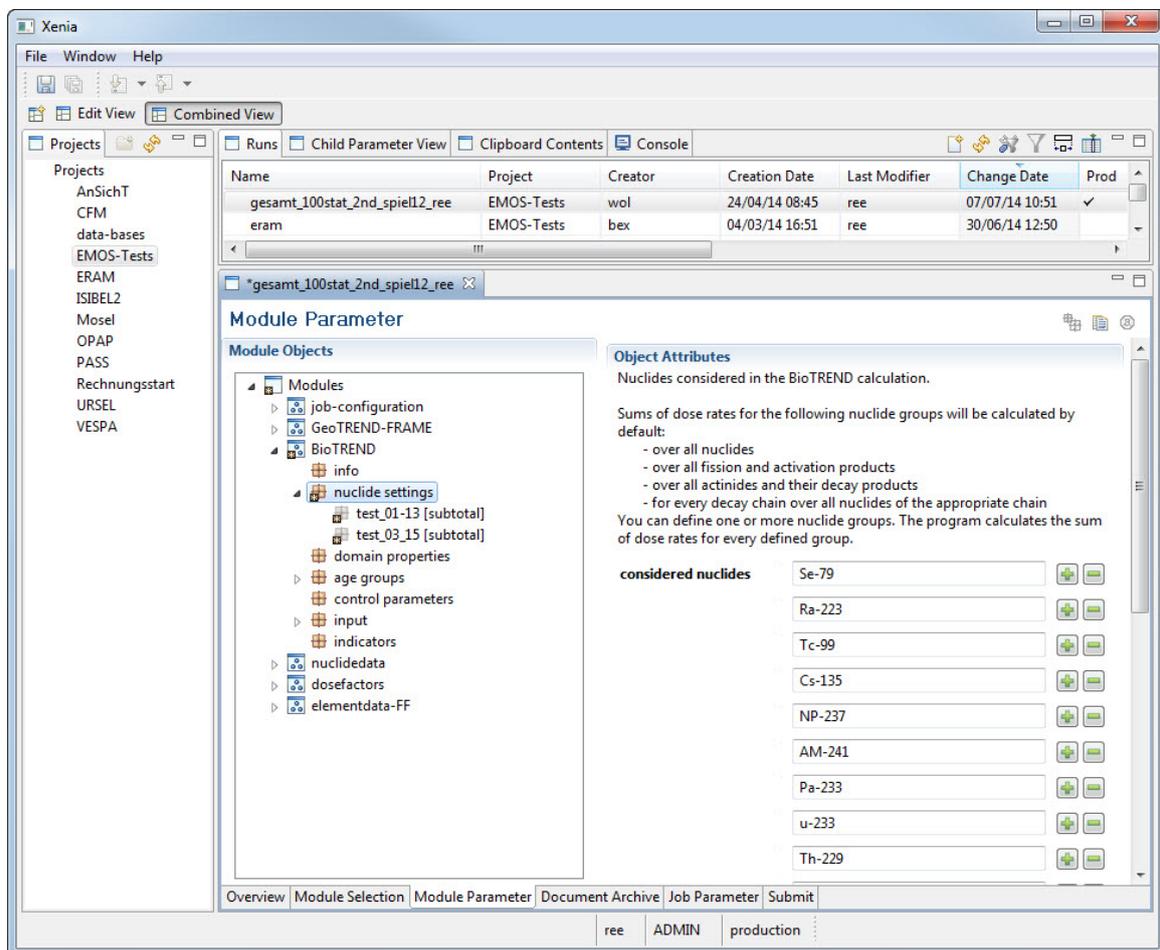


Abb. B.3 Nuklid- und Teilsummendefinition in *nuclide settings*

Die in dieser Ansicht definierten Nuklide müssen unter dem Modul *nuclidedata* und die entsprechenden chemischen Elemente unter dem Modul *elementdata-FF* spezifiziert werden. Für alle Nuklide aus dieser Liste müssen Dosiskonversionsfaktoren und ggf.

Organdosiskonversionsfaktoren sowie Ingestionsdosiskoeffizienten für alle relevanten Personengruppen und Organe unter dem Modul *dosefactors* definiert werden.

subtotal

In BioTREND werden einige Teilsummen standardmäßig berechnet (s. Abschnitt 6.3). Zusätzlich können Summenwerte über bestimmte, vom Benutzer ausgewählte Nuklide berechnet werden. Die in einer benutzerdefinierten Teilsumme zu berücksichtigenden Nuklide werden, wie in Abb. B.4 dargestellt, in einem optionalen Objekt *subtotal* definiert. Dabei dürfen nur Nuklide gewählt werden, die unter *nuclide settings* aufgelistet sind.

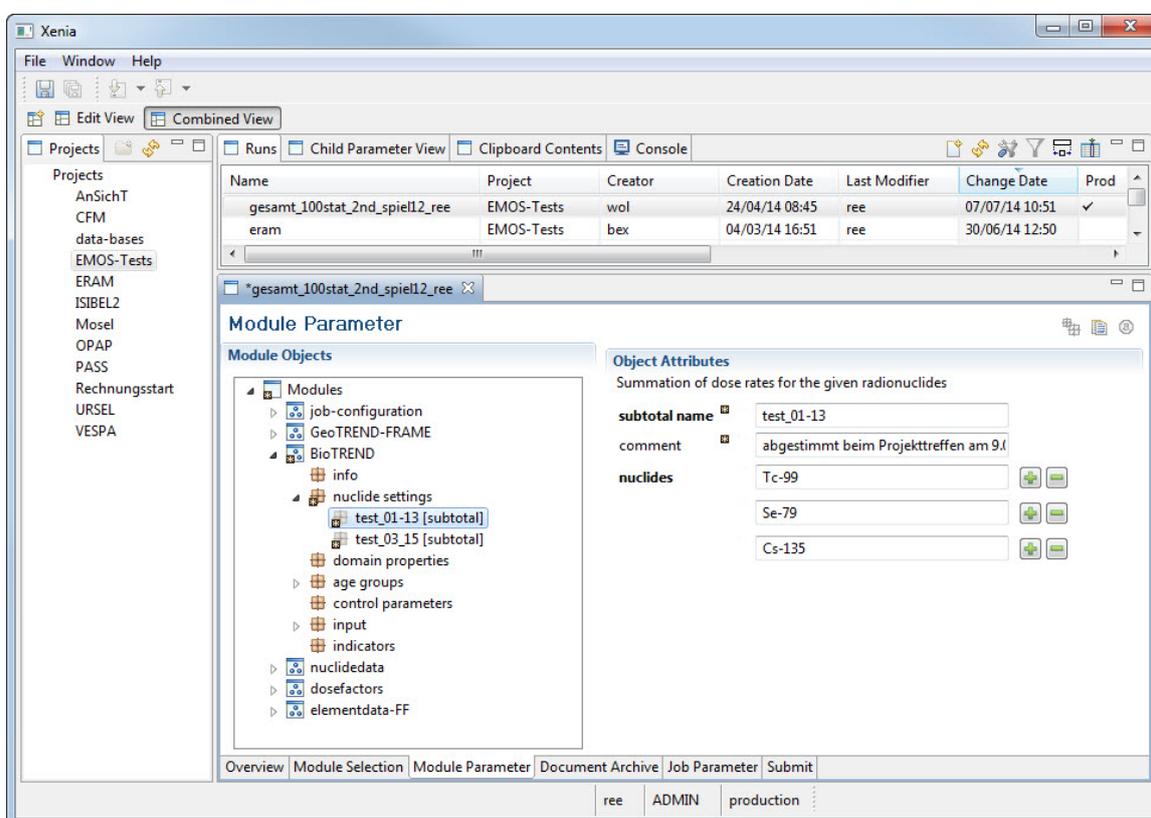


Abb. B.4 Definition einer Teilsumme unter *subtotal*

domain properties

In der Ansicht *domain properties* (Abb. B.5) werden Parameter definiert, die sich auf das Gestein an der Wasserentnahmestelle beziehen. Diese Parameter werden bei der Behandlung derjenigen Radionuklide benötigt, die in den vorangehenden Freisetzung- oder Ausbreitungsrechnungen nicht enthalten waren, und dessen Aktivitätskonzentrationen bzw. Aktivitätsströme aus den entsprechenden Größen für ihre Mutternuklide abgeleitet werden (s. Abschnitt 5.1). Die Parameterwerte müssen kompatibel zu den entsprechenden Angaben in der vorangehenden Freisetzung- oder Ausbreitungsrechnung sein.

Im Eingabefeld *identifier for Kd-values* ist der Name des Objekts vom Typ *[Kd-values in [m³/kg]]* aus dem Modul *elementdata-FF* einzugeben, in dem die relevanten Verteilungskoeffizienten K_d eingetragen sind.

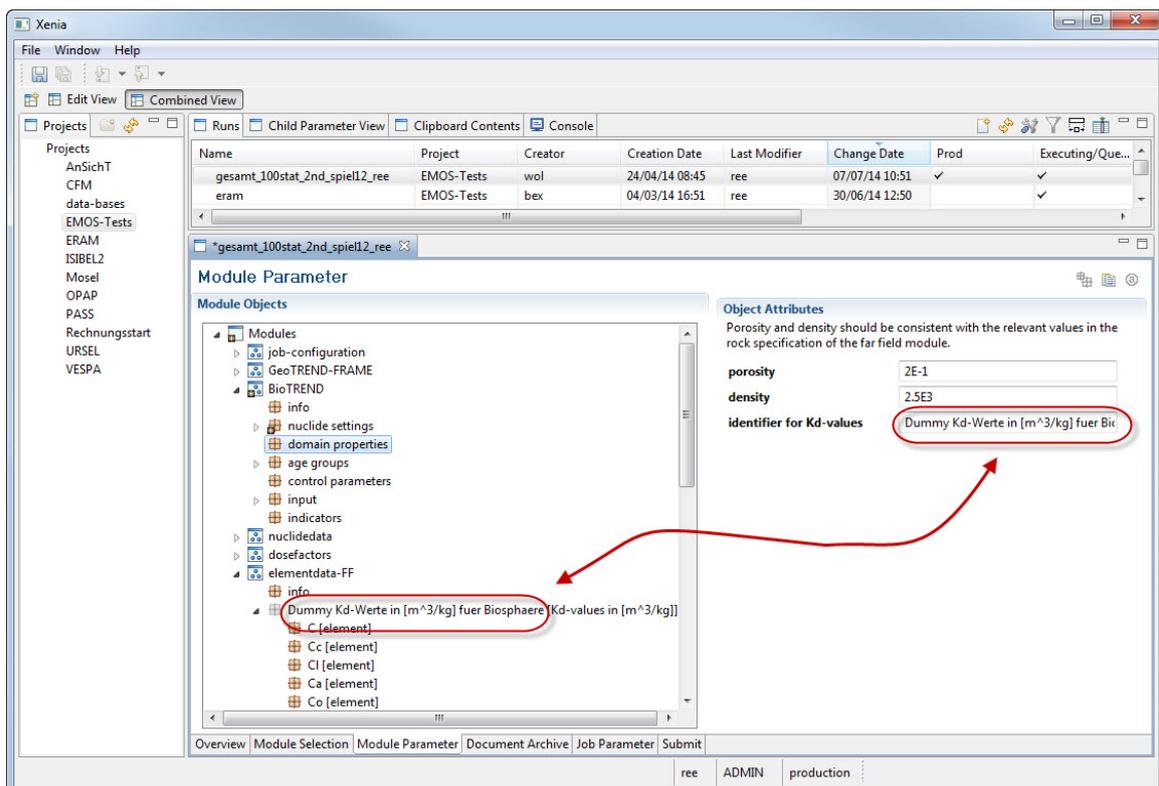


Abb. B.5 Definition von Umgebungsparametern an der Wasserentnahmestelle in *domain properties*

age groups

Jede zu berücksichtigende Personengruppe ist als ein Objekt vom Typ [*age group*] unter dem Objekt *age groups* zu definieren (Abb. B.6).

Im Eingabefeld *identifier for dose conversion factors* ist der Name des Objekts vom Typ [*DCF/DC*] aus dem Modul *dosefactors* einzugeben, in dem die für diese Personengruppe relevanten Dosiskonversionsfaktoren *B* eingetragen sind.

Falls die Option *normalise doses to the reference value* ausgewählt wird, so werden die berechneten jährlichen Effektivdosen auf den bei den relevanten DKF definierten Referenzwert normiert.

In den optionalen Unterobjekten *organ* (siehe nächsten Abschnitt) können Organe definiert werden, für welche Organdosen ermittelt werden sollen.

Mindestens eine Personengruppe muss und beliebig viele können definiert werden.

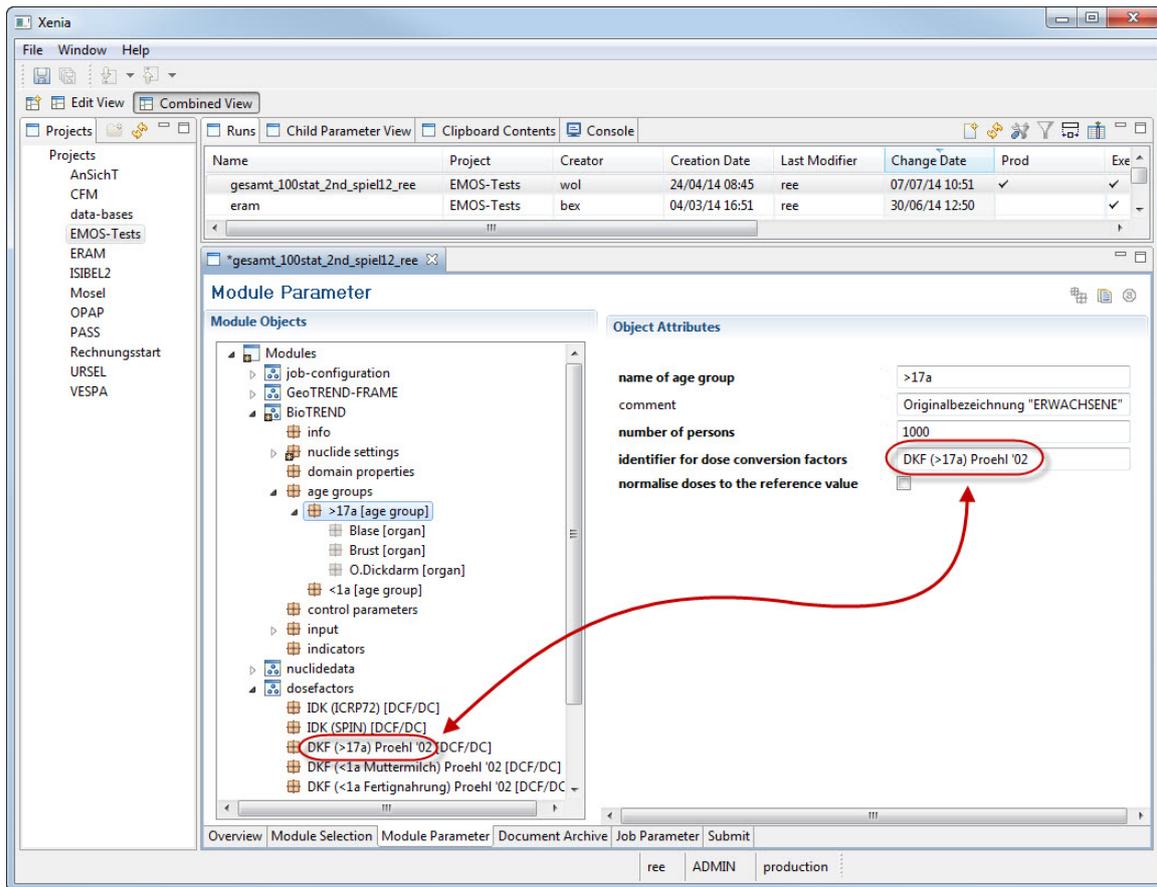


Abb. B.6 Definition von Personengruppen in *age groups*

organ

Jedes Organ, für das die Dosisbelastung ermittelt werden soll, muss als Unterobjekt des Typs *[organ]* bei der relevanten Personengruppe eingefügt werden (Abb. B.7).

Im Eingabefeld *identifizier für dose conversion factors* ist der Name des Objekts vom Typ *[DCF/DC]* aus dem Modul *dosefactors* einzugeben, in dem die für dieses Organ relevanten Organdosisumkonversionsfaktoren B_T eingetragen sind.

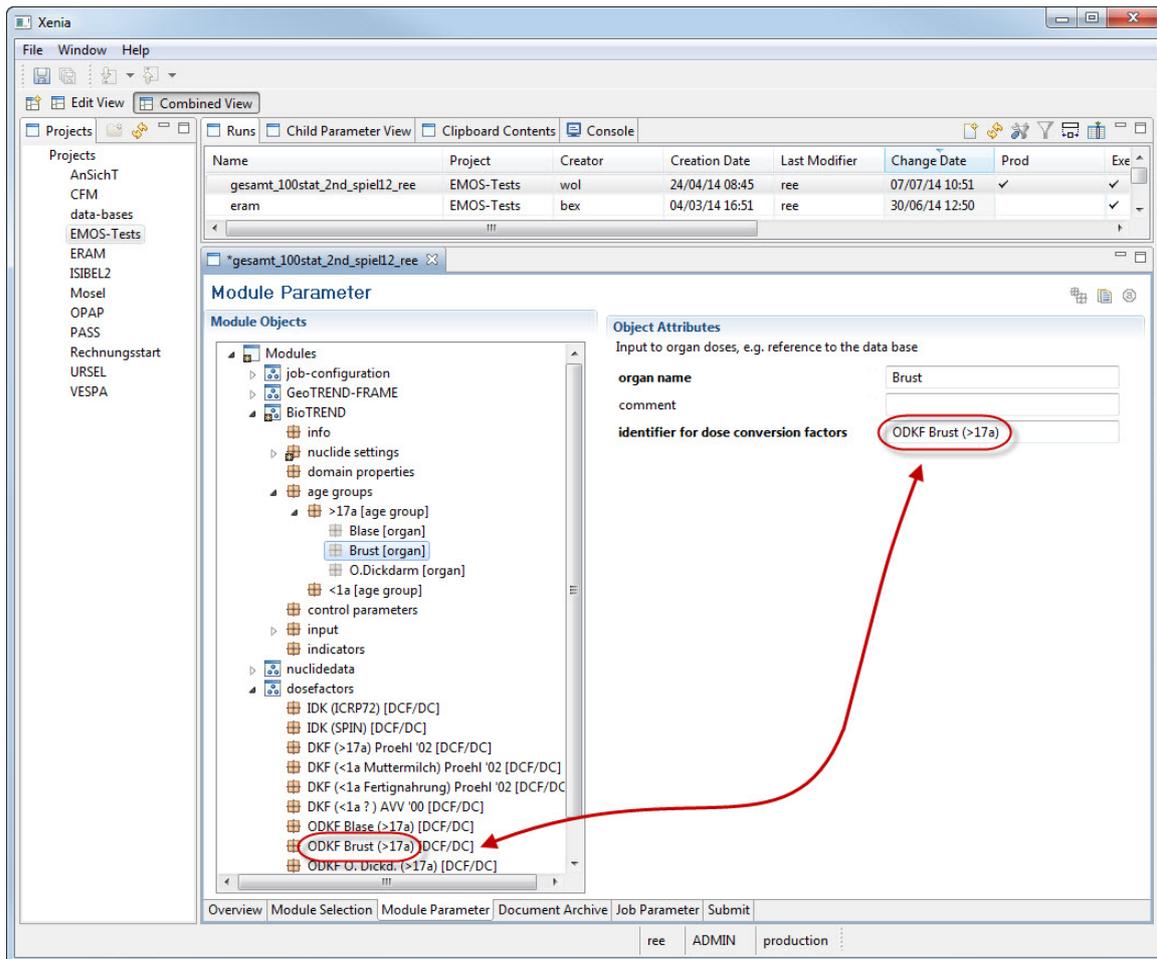


Abb. B.7 Definition eines Organs unter *organ*

control parameters

Unter dem Objekt *control parameters* (Abb. B.8) werden Parameter definiert, die die gesamte Simulation steuern.

In der Auswahlliste *basis for dose calculation* muss eine der vorhandenen Optionen gewählt werden:

- *input nuclide flow rates* ist dann zu wählen, wenn Nuklidströme als Eingangsdaten verwendet werden sollen. In diesem Fall muss auch der Referenzwasserstrom im Eingabefeld *reference water flow* definiert werden. Fehlt diese Angabe, so wird das Programm mit entsprechender Fehlermeldung abgebrochen.

- *input nuclide concentrations* ist zu wählen, wenn die Berechnungen auf den Nuklidkonzentrationen an der Wasserentnahmestelle basieren sollen.

module ID muss auf jeden Fall dann definiert werden, wenn mehrere BioTREND-Module in einem Rechenlauf vorhanden sind. Die in diesem Feld eingegebene Zeichenkette wird in den Namen der Ausgabedateien integriert (s. Abschnitt 6.5).

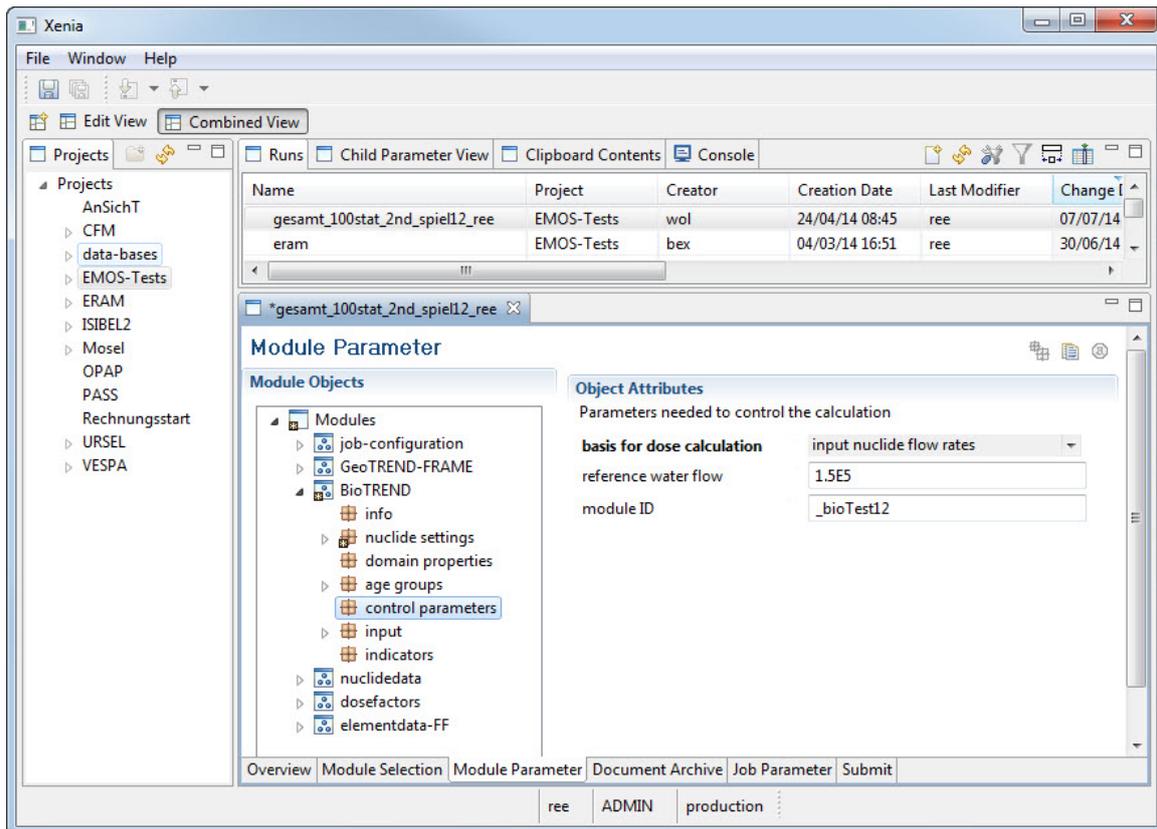


Abb. B.8 Definition von Steuerungsparametern unter *control parameters*

input

Unter dem Objekt *input* (Abb. B.9) wird spezifiziert, aus welchen Eingabedateien die Nuklidkonzentrationen bzw. –ströme über die gesamte Simulationszeit entnommen werden soll. Dafür muss **exakt ein** Unterobjekt hinzugefügt werden. Der Typ dieses Unterobjekts ist durch den Typ der Eingabedateien festgelegt (s. Abschnitt 6.1). In Abb. B.9 ist ein Beispiel für den Fall dargestellt, wenn die Ergebnisse eines Fernfeldmoduls als Eingabedaten verwendet werden sollen. Ist der Typ des Unterobjekts *rvs*, *rsk*, so muss

noch der Name des Ausgabesegments definiert werden. Obwohl eine *rsk*-Datei Schadstofffreisetzungsraten mehrerer Ausgabe-segmente enthalten kann, kann nur **ein** Ausgabe-segment als Schnittstelle zur Biosphäre berücksichtigt werden.

Der im Eingabefeld *multiplication factor* definierte Wert wird bei der Berechnung von jährlichen Effektivdosen und Organdosen berücksichtigt (s. Abschnitte 5.1 und 5.2).

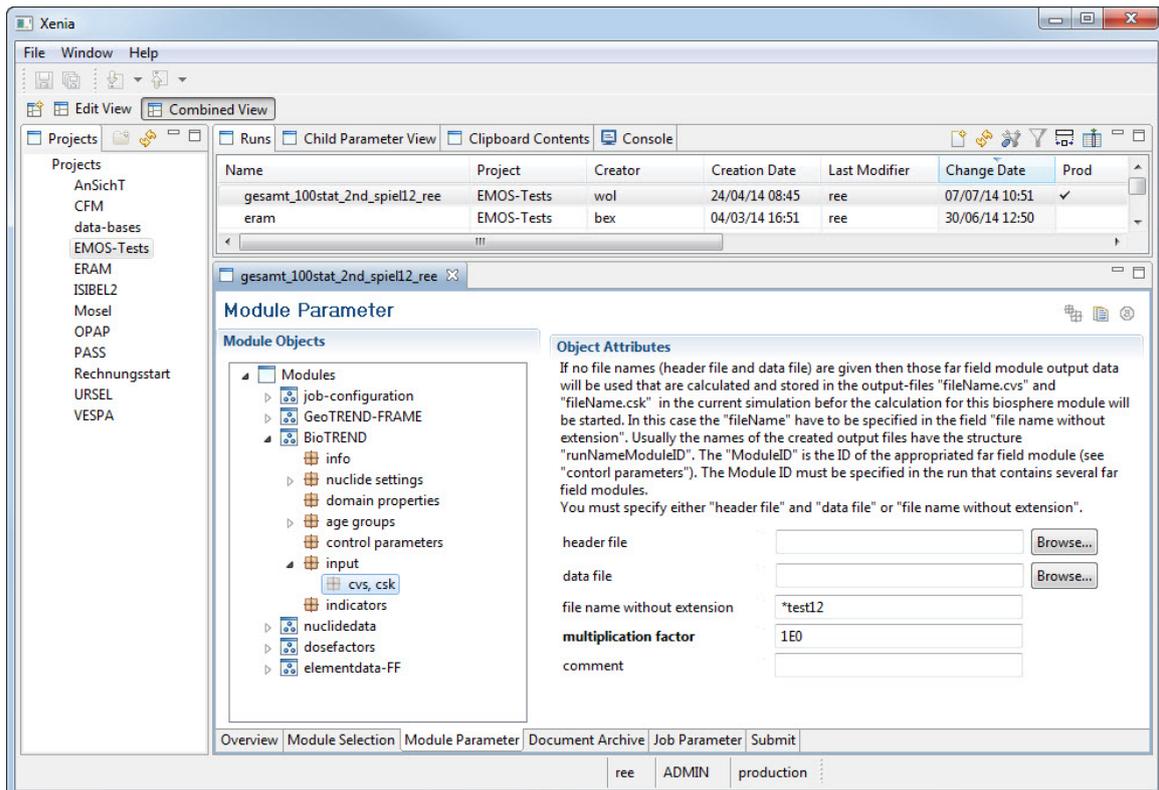


Abb. B.9 Definition der Pfade zu den Eingabedateien mit Konzentrationen und Zu-stromraten der Nuklide unter *input*

indicators

Wenn Radiotoxizitätskonzentrationen und -ströme berechnet werden sollen, dann muss die Option *calculate radiotoxicities* unter *indicators* (Abb. B.10) ausgewählt werden. Ist diese Option gewählt, dann ist der Name des Objekts vom Typ $[DCF/DC]$ aus dem Modul *dosefactors* im Eingabefeld *identifier for dose conversion factors* einzugeben, in dem die relevanten Ingestionsdosiskoeffizienten g eingetragen sind.

Im optionalen Eingabefeld *multiplication factor for radiotoxicity concentration* wird die Multiplikationskonstante m_c definiert, die bei der Berechnung von Radiotoxizitätskonzentrationen berücksichtigt werden kann. Die entsprechende Multiplikationskonstante m_s für Radiotoxizitätsströme kann im Eingabefeld *multiplication factor for radiotoxicity flow* eingegeben werden.

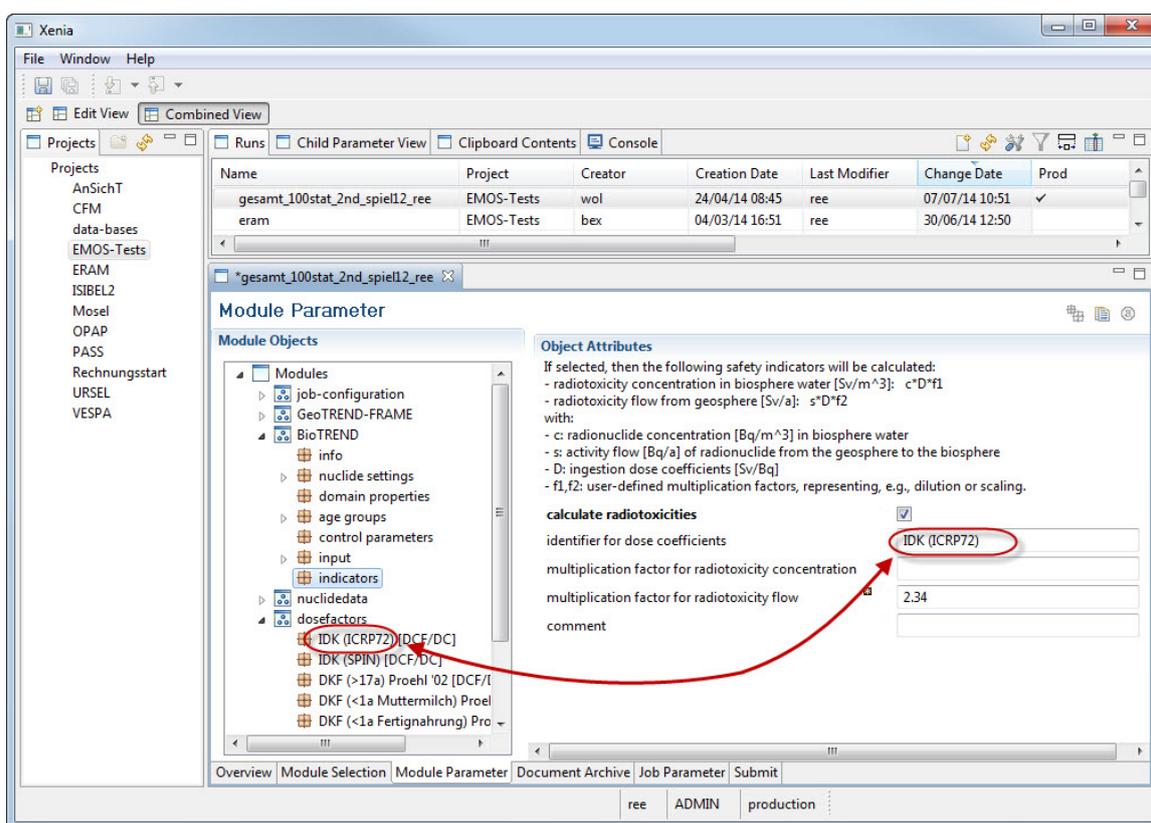


Abb. B.10 Definition von Parametern zur Berechnung von Radiotoxizitätskonzentrationen und -strömen unter *indicators*

B.4 Modul *dosefactors*

Im Modul *dosefactors* (Abb. B.11) werden in separaten Unterobjekten Dosiskonversionsfaktoren, Organdosisumwandlungsfaktoren und Ingestionsdosiskoeffizienten mindestens für die im Rechenlauf ausgewählten Nuklide (s. Abschnitt *nuclide settings* im Anhang B.3) spezifiziert. Das Modul darf auch Einträge von Nukliden enthalten, die für die Simulation irrelevant sind, diese Einträge werden vom Programm ignoriert.

Im Eingabefeld *reference value* kann ein Referenzwert eingegeben werden. Für Organ-
 dosisfaktoren ist der Referenzwert eine Pflichtangabe. Falls die Option *normalise doses*
to the reference value bei der Spezifikation einer Personengruppe gewählt wurde
 (s. Abschnitt *age groups* im Anhang B.3), muss auch der Referenzwert bei entsprechen-
 den Dosisumrechnungsfaktoren definiert werden. Wenn diese obligatorischen Angaben
 fehlen, wird das Programm mit entsprechender Fehlermeldung abgebrochen.

Ein BioTREND-Rechenlauf muss exakt ein Modul *dosefactors* enthalten.

Alle dosisrelevanten Umrechnungsfaktoren über alle Nuklide werden zentral (Abb. B.12)
 unter dem Projekt *data-bases* als Rechenlauf *dose-related-data* mit einem einzigen Mo-
 dul *dosefactors* gepflegt und qualitätsgesichert. Bei der Definition eines eigenen Re-
 chenlaufs sollte der Benutzer das Modul *dosefactors* mit den gesamten Daten aus die-
 sem Rechenlauf in seinen eigenen übernehmen (mit Copy&Paste). Die Daten können
 dann im eigenen Rechenlauf projektspezifisch angepasst und ergänzt werden. Es wird
 nachdrücklich davon abgeraten, diese Daten aus anderen Projekten zu übernehmen.

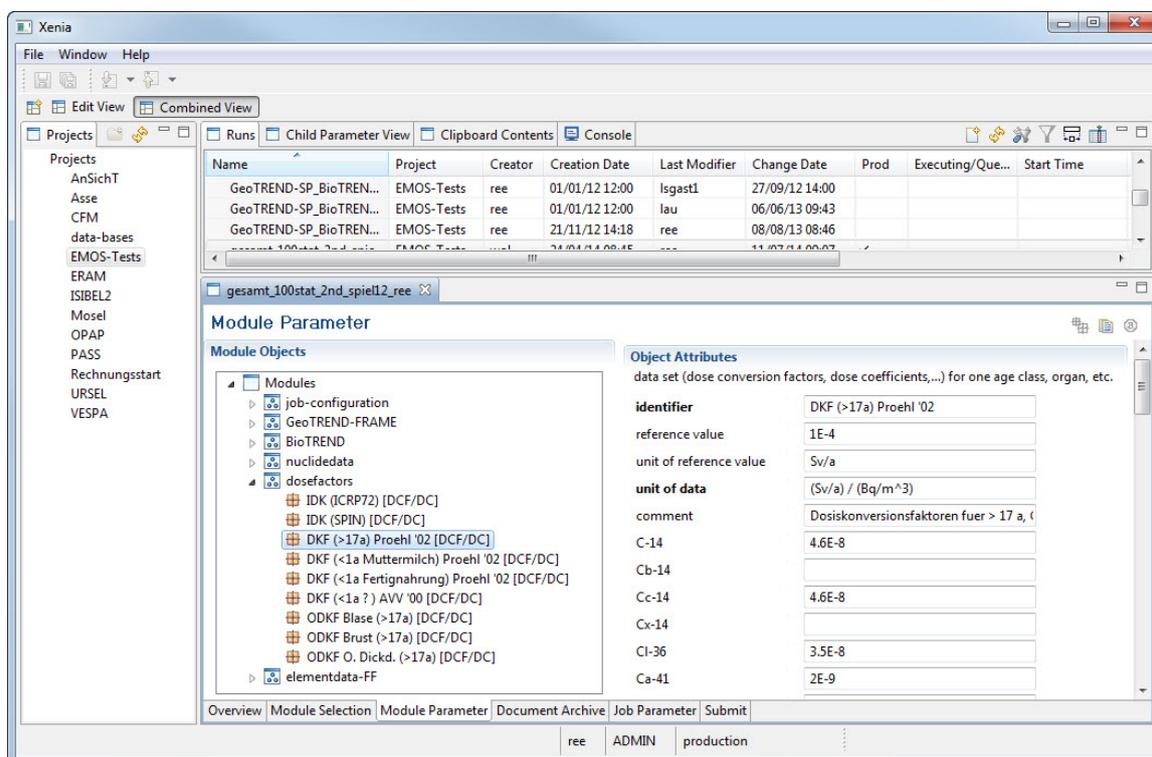


Abb. B.11 Spezifikation von Dosisumrechnungsfaktoren, Organ-
 dosisumrechnungsfaktoren und Ingestionsdosisumrechnungsfaktoren im Modul *dosefactors*

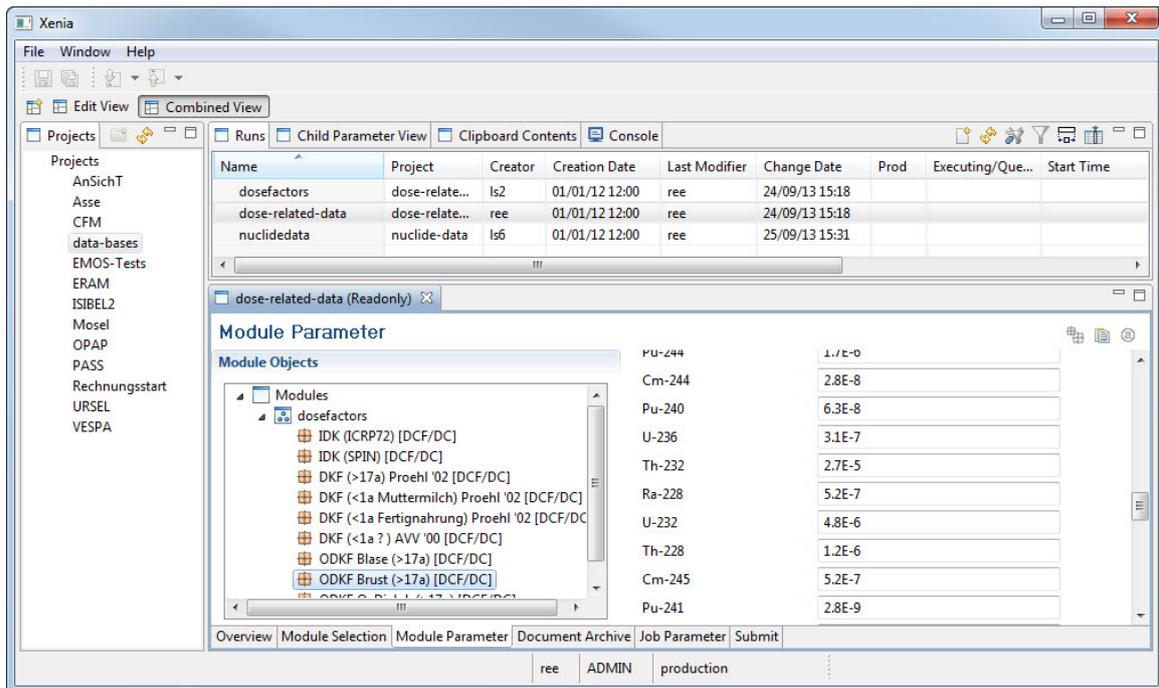


Abb. B.12 Pflege der Umrechnungsfaktoren an der zentralen Stelle

B.5 Modul *nuclidedata*

Im Modul *nuclidedata* (Abb. B.13) werden mindestens die für die Simulation ausgewählten Nuklide (s. Abschnitt *nuclide settings* im Anhang B.3) spezifiziert. Das Modul darf aber auch Einträge von Nukliden enthalten, die für die Simulation irrelevant sind, diese Einträge werden vom Programm ignoriert. Ein Rechenlauf muss exakt ein Modul *nuclidedata* enthalten.

Daten über alle Nuklide werden zentral (Abb. B.14) unter dem Projekt *data-bases* als Rechenlauf *nuclidedata* mit einem einzigen Modul *nuclidedata* gepflegt und qualitätsgesichert. Bei der Definition eines eigenen Rechenlaufs sollte der Benutzer das Modul *nuclidedata* mit den gesamten Daten aus diesem Rechenlauf in seinen eigenen übernehmen (mit Copy&Paste). Die Daten können dann im eigenen Rechenlauf projektspezifisch angepasst und ergänzt (z. B. projektspezifisch verwendete Tracer hinzufügen) werden. Es wird nachdrücklich davon abgeraten, diese Daten aus anderen Projekten zu übernehmen.

Einige Hinweise zur Definition eines Nuklids bzw. eines Tracers im Modul *nuclidedata*:

Im Eingabefeld *decay product* ist die Bezeichnung des Tochternuklids einzugeben. Falls das relevante Nuklid kein Zerfallsprodukt hat, bleibt das Eingabefeld leer. Anhand dieser Informationen werden aus den für die Simulation ausgewählten Nukliden Nuklidketten gebildet.

Das Attribut *decay product (index offset)* wird zwar vom Programm RepoTREND ignoriert, jedoch von den angepassten alten EMOS-Programmen ausgewertet. Aus diesem Grund sollte auch dieses Feld sorgfältig gepflegt werden, für den Fall, dass diese Daten mit alten EMOS-Programmen benutzt werden. Falls das relevante Nuklid ein Zerfallsprodukt hat, dann bestimmt die in diesem Feld eingegebene Zahl die Stelle in der Nuklidliste nach dem relevanten Nuklid, an der sich das Tochternuklid befindet. Wenn z. B. wie in Abb. B.13 eine Zwei eingegeben wurde, dann muss sich das Tochternuklid an der zweiten Stelle in der Nuklidliste nach dem relevanten Nuklid befinden. Die Bezeichnung des Tochternuklids ist im Eingabefeld *decay product* eingetragen. Somit ist bei der Erweiterung der Nuklidliste um eigene Nuklide auch auf die korrekte Reihenfolge der neuen Einträge in der Gesamtliste zu achten. U. U. müssen die Werte *decay product (index offset)* anderer Nuklide dann angepasst werden.

Anhand des Attributs *decay* stellt das Programm vor allem fest, ob es sich bei diesem Eintrag um ein stabiles Isotop handelt oder nicht. Die Strahlungsarten an sich werden in der aktuellen Version des Programms nicht weiter ausgewertet. Diese Information wird jedoch vom Programm ausgelesen und in die *pbd*-Protokolldatei im Kontext von Nuklideigenschaften ausgegeben.

Das Attribut *heat conversion factor* ist für die Weiterentwicklung vorgesehen. Aktuell wird dieser Parameter vom Programm ignoriert.

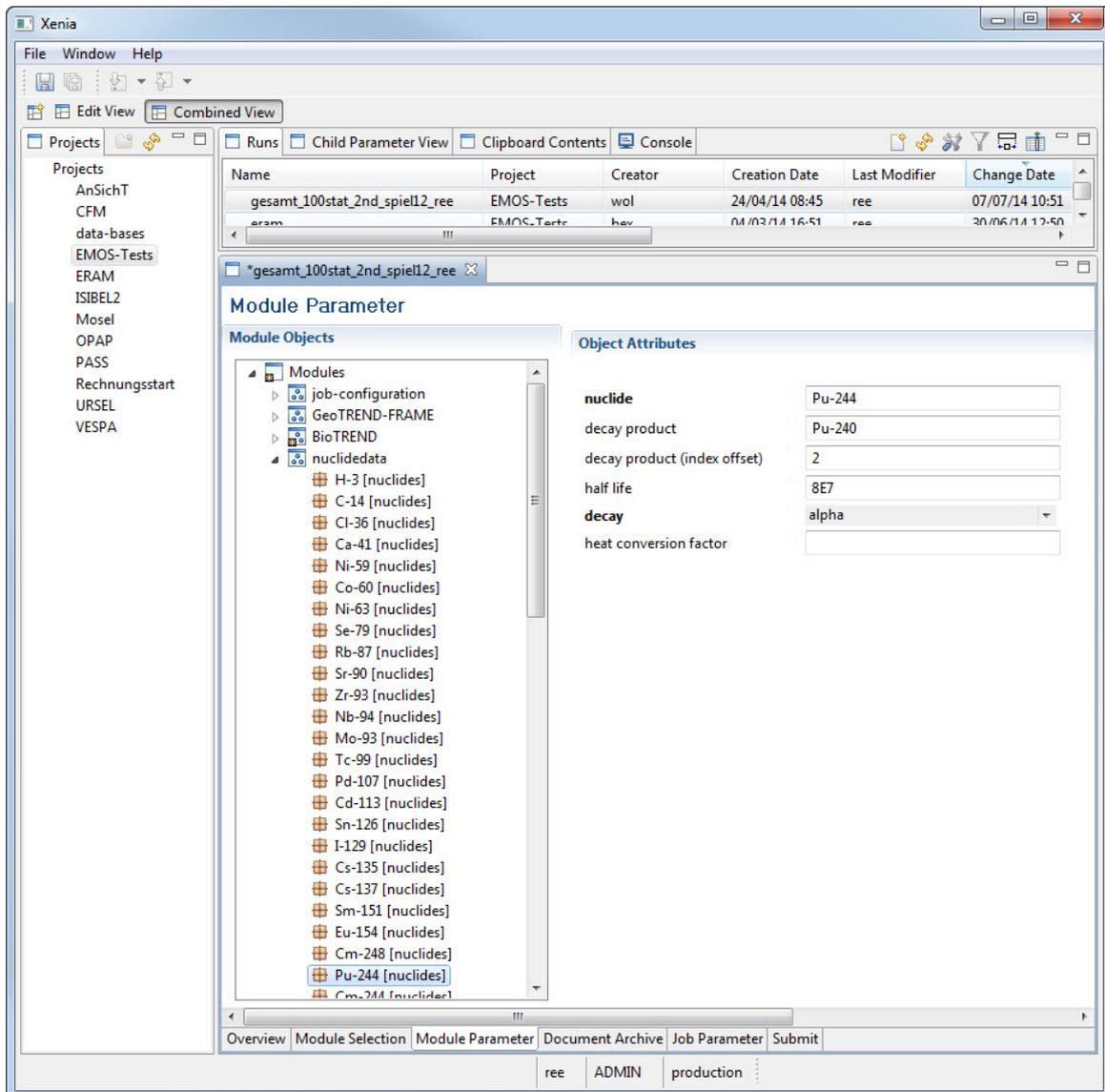


Abb. B.13 Nuklid- und Tracerspezifikation im Modul *nuclidedata*

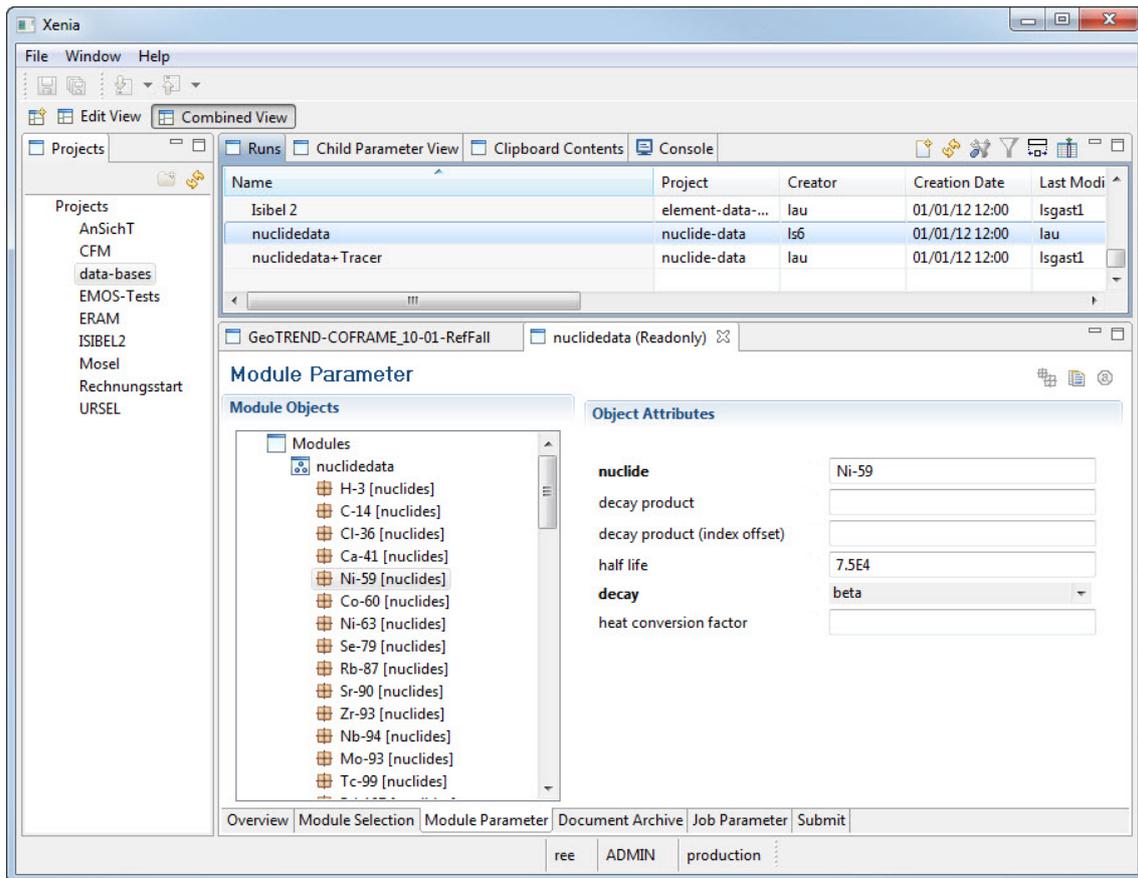


Abb. B.14 Pflege der Nukliddaten an der zentralen Stelle

B.6 Modul *elementdata-FF*

Im Modul *elementdata-FF* (Abb. B.15) werden Eigenschaften (hauptsächlich Sorptionsparameter) von chemischen Elementen spezifiziert. Auf jeden Fall müssen die Elemente spezifiziert werden, die durch die Nuklidauswahl unter *nuclide settings* festgelegt wurden. Das Modul darf aber auch die Spezifikation von Elementen enthalten, die in der Simulation nicht beteiligt sind. Einträge von solchen Elementen werden vom Programm ignoriert.

Standardmäßig enthält *elementdata-FF* keine Unterobjekte. Zur Spezifikation von Sorptionsparametern muss der Benutzer entsprechende Unterobjekte einfügen. Der Typ eines einzufügenden Unterobjekts entspricht dem Sorptionskonzept, das in der für die Berechnung relevanten Gleichung verwendet werden soll. Die benötigten Unterobjekte können sowohl in einem Modul *elementdata-FF* wie in Abb. B.15 gruppiert als auch auf

mehrere Module *elementdata-FF* verteilt werden. Der Benutzer kann aber auch an dieser Stelle weitere Unterobjekte pflegen, die für den aktuellen Rechenlauf keine Relevanz haben. Solche Unterobjekte werden vom Programm ignoriert.

Jedes Unterobjekt bekommt einen eindeutigen Namen, der im Eingabefeld *identifier* angegeben ist. Über diesen Namen wird der Bezug zu diesen Objekten hergestellt.

Für einen BioTREND-Rechenlauf ist obligatorisch ein Unterobjekt des Typs *[Kd-values in [m³/kg]]* einzufügen, in dem die Verteilungskoeffizienten K_d für das Gestein an der Wasserentnahmestelle spezifiziert werden. Der Name dieses Unterobjekts muss im Eingabefeld *identifier for Kd-values* unter *domain properties* (Abb. B.5) eingetragen werden.

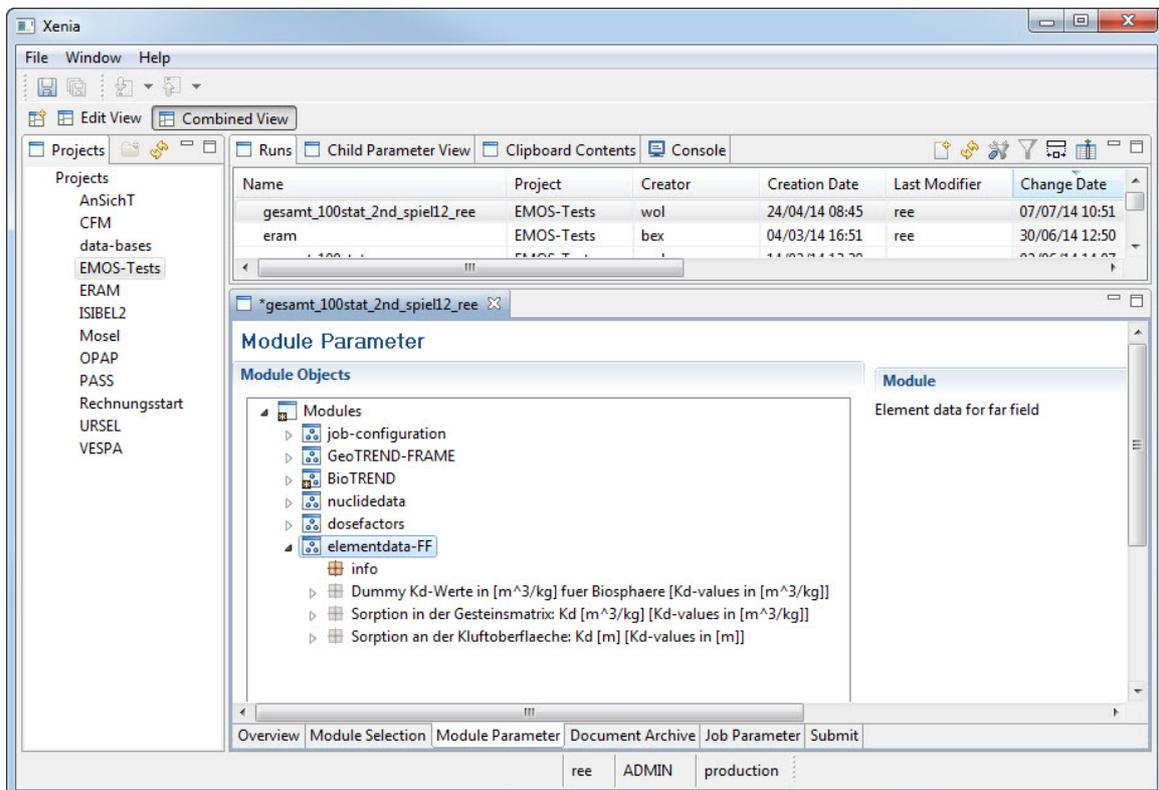


Abb. B.15 Spezifikation von Sorptionsparametern unter *elementdata-FF*

B.7 Einstellungen in der Ansicht *Job Parameters*

In den folgenden Unterabschnitten werden die Einstellungen kurz erläutert, die in der Ansicht *Job Parameters* (Abb. B.16) vorgenommen werden müssen.

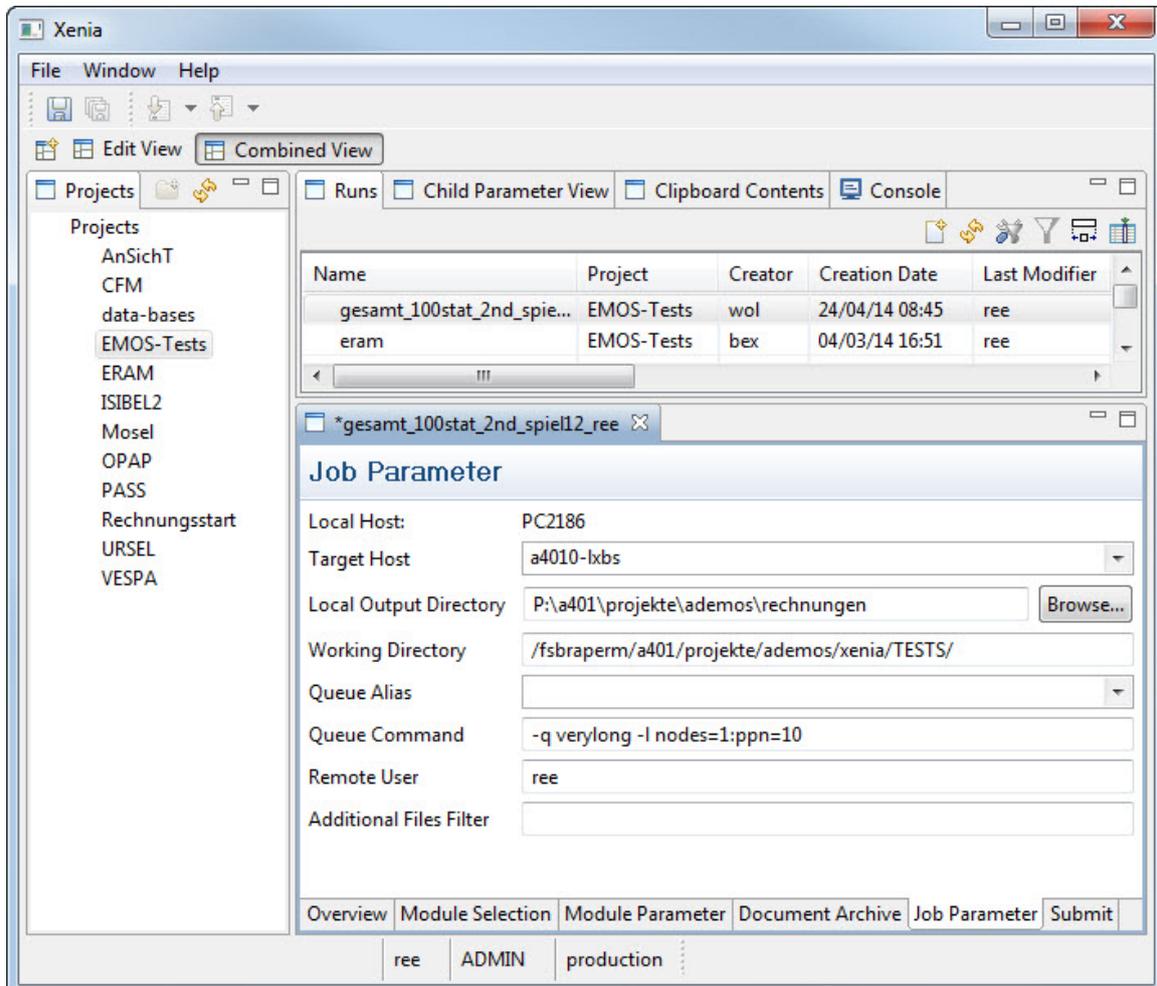


Abb. B.16 Einstellungen in der Ansicht *Job Parameters*

Target Host

Unter *Target Host* muss der Name des gewünschten Zielrechners in der Auswahlliste selektiert werden.

Hier ist zu berücksichtigen, dass der Rechenlauf auf einem lokalen Rechner nur von *Linux* aus gestartet werden kann (XENIA unter *Linux* öffnen und den Rechenlauf star-

ten). Auf den anderen Rechnern ist ein *Queuing-System* installiert /REI 11/. Die Rechenläufe, die auf diesen entfernten Rechnern laufen sollen, können sowohl unter *Windows* als auch unter *Linux* gestartet werden.

Local Output Directory, Working Directory

Unter *Local Output Directory* muss ein Pfad zu dem Verzeichnis eingegeben werden (durch Texteingabe oder Navigation über den *Browser-Button*), in das alle Ausgabedateien nach dem Finalisieren des Rechenlaufs gespeichert werden sollen. Der Pfad muss vom Zielrechner aus erreichbar sein. Der Benutzer muss alle Zugriffsrechte für dieses Verzeichnis besitzen. Es wird sowohl die *Windows*- als auch die *Linux*-Schreibweise für den Pfad akzeptiert.

Unter *Working Directory* muss der Pfad zu einem Arbeitsverzeichnis eingegeben werden. Dort wird automatisch ein Unterverzeichnis angelegt, in dem ein Verzeichnis angelegt wird, in das alle für den Programmstart und für die Transportrechnung erforderlichen Dateien kopiert werden und in dem alle Ausgabedateien des relevanten Rechenlaufs gespeichert werden. Im Verzeichnisnamen ist die von XENIA automatisch vergebene ID des Rechenlaufs integriert: somit ist der Verzeichnisname eindeutig. Beim Finalisieren des Rechenlaufs werden alle Ausgabedateien nach *Local Output Directory* transferiert, das unter *Working Directory* generierte Verzeichnis wird gelöscht. In diesem Eingabefeld wird nur die *Linux*-Schreibweise (mit Schrägstrich '/' als Pfad-Trennzeichen) für den Pfad akzeptiert.

Queue Command, Queue Alias

Auf jedem entfernten Rechner aus der Liste in *Target Host* ist ein *Queuing-System* installiert. Es handelt sich dabei um ein Software-System, das die Rechenressourcen, die von vielen Benutzern genutzt werden, reguliert, um vor allem Konflikte bei der Ressourcenbeanspruchung zu vermeiden.

Für die allgemeine Verteilung der Rechenjobs steht die Hauptqueue zur Verfügung, die Jobs entgegennimmt und an Knoten mit freien Rechenressourcen verteilt. Sie entscheidet auch, in welcher Reihenfolge wartende Jobs an die Knoten übergeben und gestartet

werden. Je nach dem Queuing-System bezieht die Prioritätsberechnung folgende Gesichtspunkte mit ein:

- die bisher vom jeweiligen Nutzer verbrauchte Rechenzeit,
- die bisher von der jeweiligen Gruppe des Nutzers verbrauchte Rechenzeit,
- vom Job beantragte Laufzeit,
- vom Job beantragter Arbeitsspeicher,
- das festgelegte Rechenkongingent der jeweiligen Gruppe des Nutzers,
- vom Job beantragte Anzahl der Knoten und Prozessorkerne.

Beim Starten eines Rechenlaufs auf einem entfernten Rechner übergibt XENIA den relevanten Job durch den Befehl *qsub* an das Queuing-System. Jeder Benutzer sollte sich vor dem Abschicken seines Jobs über dessen voraussichtliche Laufzeit und dessen maximal benötigten Arbeitsspeicher bewusst sein. Diese Parameter werden durch eine Reihe von optionalen Flags spezifiziert (falls nicht definiert, werden Standardwerte verwendet) und sind notwendig, um die Priorität des Jobs zu berechnen.

Diese Parameter werden im Eingabefeld *Queue Command* definiert. Der Benutzer kann im Feld *Queue Alias* ein Alias (Deckname) in der Auswahlliste markieren. Jedem Alias ist ein Parametersatz zugeordnet, der bei Auswahl des Alias in das Eingabefeld *Queue Command* eingetragen wird. Der relevante Parametersatz kann entweder unverändert übernommen oder manuell angepasst werden. Falls die Parameter manuell geändert werden, wird die Selektion der Auswahlliste in *Queue Alias* zurückgesetzt. Diese Auswahlliste ist als Hilfestellung gedacht, damit der Benutzer auch ohne genaue Kenntnisse der Parameter-Syntax sinnvolle Werte angeben kann. Alternativ können die Angaben direkt in *Queue Command* erfolgen.

An dieser Stelle werden nur die wichtigsten *qsub*-Optionen kurz erklärt:

- **-q queue:** spezifiziert eine Jobklasse und somit die Queue, in der der Job laufen soll. Im in Abb. B.16 dargestellten Beispiel wird der relevante Job mit *-q verylong* in eine *verylong*-Queue für lange laufende Jobs eingestellt. Typischerweise stehen auch *long*- und *short*-Queues zur Verfügung.

- **-l resource_list**: definiert Ressourcen, die für den relevanten Job erforderlich sind. Die Ressourcenanforderungen werden durch Komma getrennt hinter -l angegeben. Mit der Option *nodes=n:ppn=p* werden *n* Knoten mit jeweils *p* Prozessorkernen angefordert. Weiterhin können beispielweise der maximal benötigte Arbeitsspeicher und/oder die Wallclock-Zeit (Laufzeit) angefordert werden.

An dieser Stelle ist anzumerken, dass RepoTREND parallelisiert ist. Aus diesem Grund sollten stets mehrere Prozessoren bzw. Prozessorkerne für einen RepoTREND-Rechenlauf – sowohl für einen statistischen als auch für einen deterministischen – angefordert werden, um eine möglichst hohe Recheneffektivität zu erhalten. Welche Einstellung für einen Rechenlauf sinnvoll ist, ist im Abschnitt 6.6 beschrieben.

Überschreitet ein Job bei seiner Ausführung die angegebenen Parameter (z. B. Laufzeit oder Speicherkapazität), so wird dieser unwiderruflich abgebrochen. Jobs werden nur dann gestartet, wenn ausreichend Knoten zur Verfügung stehen und die angegebenen Ressourcen bereitgestellt werden können.

Für einen Rechenlauf, der auf dem lokalen Rechner ausgeführt werden soll (Abb. B.17), sind diese Angaben nicht erforderlich und können deshalb auch nicht gemacht werden (die entsprechenden Felder sind deaktiviert).

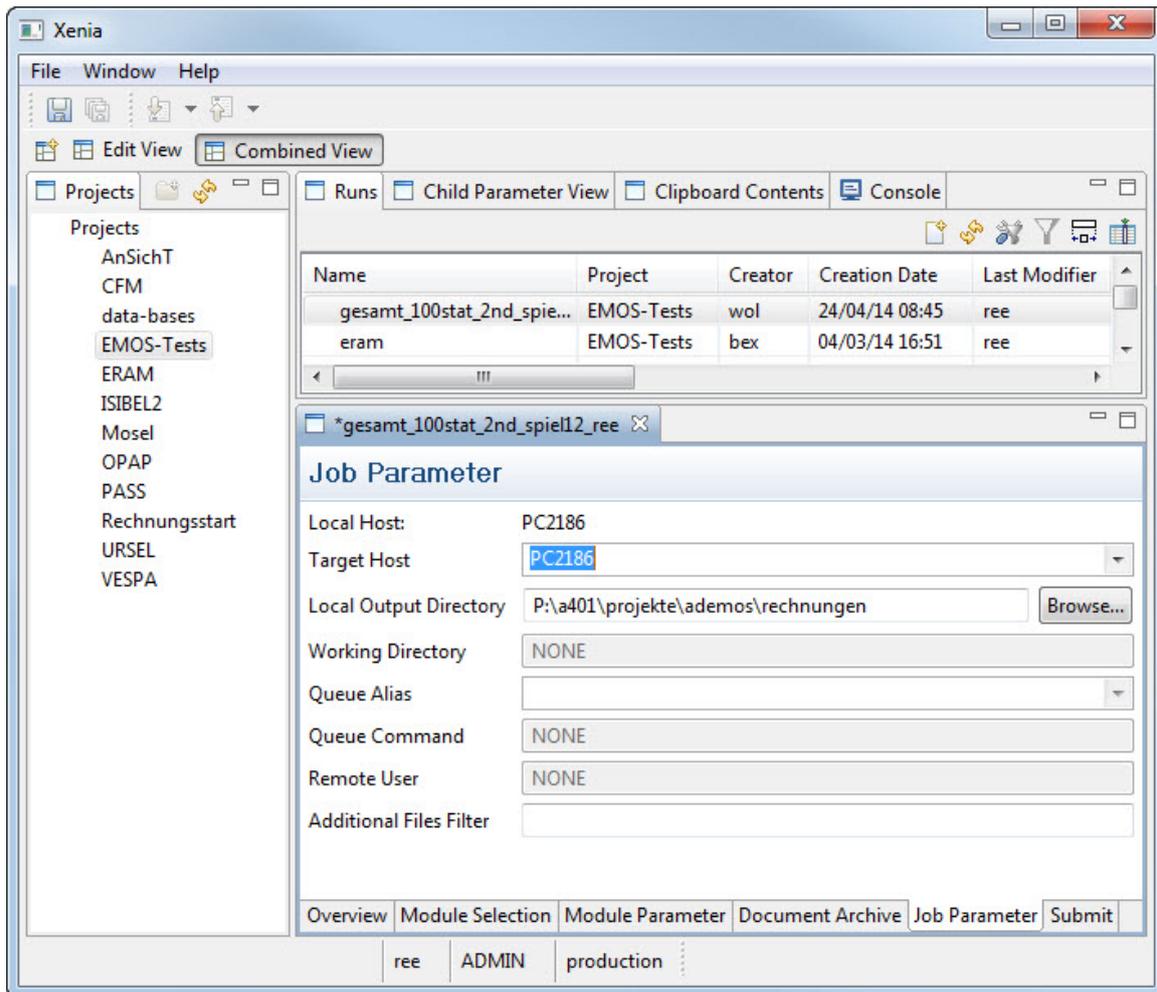


Abb. B.17 Ansicht *Job Parameter* bei einem lokal auszuführenden Rechenlauf

Remote User

Im Eingabefeld *Remote User* muss der *Benutzername* des Benutzers eingetragen werden (in GRS ist dies standardmäßig das GRS-Kürzel des jeweiligen Mitarbeiters), den den relevanten Rechenlauf auf dem festgelegten Rechner starten möchte. Mit diesem Benutzernamen erfolgt die Anmeldung des Benutzers auf dem Zielrechner. Wenn der Benutzername von diesem Rechner erkannt wird, wird der Benutzer per Dialogfenster nach dem Passwort gefragt.

Es ist zu beachten, dass der eingetragene Benutzername von demjenigen des am Startrechner angemeldeten Benutzers abweichen kann. Das erforderliche Passwort ist jedoch immer das des als *Remote User* eingetragenen Benutzers.

Beim Anlegen eines neuen Rechenlaufs wird automatisch der Benutzername des angemeldeten Benutzers in das Feld eingetragen. Wenn eine Kopie eines Rechenlaufs erstellt wird, werden alle Daten, auch der Benutzername in *Remote User*, übernommen. Wenn diese Kopie von einem anderen Benutzer verwendet werden soll, dann muss der Benutzername entsprechend geändert werden, sonst wird die Anmeldung am Zielrechner an der Angabe des "falschen" Passwortes scheitern.

B.8 Ansicht *Submit*

In der Ansicht *Submit* (Abb. B.18) müssen Executables (ausführbare Dateien) für die im Rahmen des Rechenlaufs verwendeten XENIA-Rechenmodule ausgewählt werden. In dem hier erläuterten Beispiel müssen Executables für die Module GeoTREND-FRAME und BioTREND gewählt werden. Bei der standardisierten Vorgehensweise muss der Benutzer in der Spalte *Standard* einen Haken an der entsprechenden Stelle setzen. In der Spalte *Path* erscheint der Pfad zu dem gültigen sogenannten *Standard-Executable*.

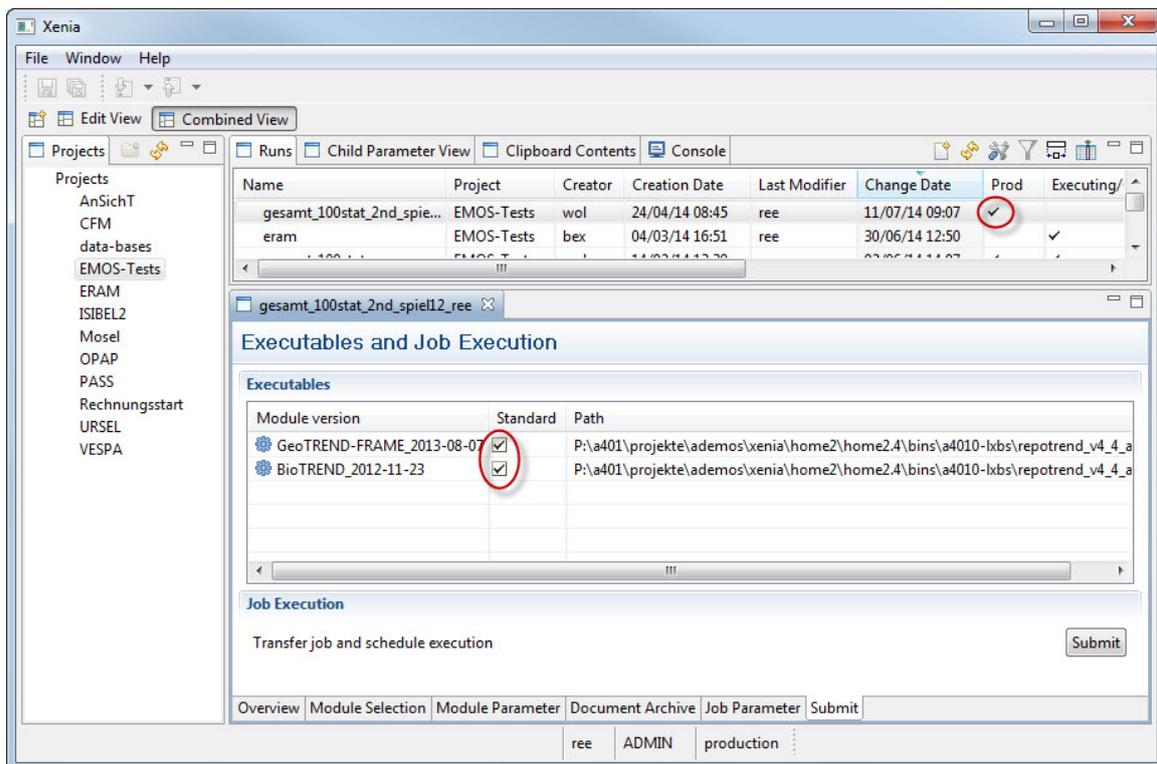


Abb. B.18 Ansicht *Submit*

Bei einem *Standard Executable* handelt es sich um eine qualitätsgesicherte und freigegebene, ausführbare Datei. Die ausschließlich mit *Standard Executables* ausgeführten Rechenläufe bekommen automatisch den Status *Production Run* (Haken in der Spalte *Prod* in der Ansicht *Runs*).

In der Entwicklungsphase oder für andere Zwecke können noch nicht freigegebene, sogenannte *User Executables* benutzt werden. Dafür muss der Haken in der Spalte *Standard* abgewählt und der Pfad zu dem *User Executable* in der Spalte *Path* eingegeben werden.

Wenn die Angaben vollständig, aus XENIA-Sicht korrekt und auch gespeichert sind, dann kann der Rechenlauf durch das Betätigen des *Submit*-Buttons gestartet werden. In der Ansicht *Console* können einige darauf folgende Aktionen verfolgt werden.

Ein Rechenlauf kann nicht gestartet werden (*Submit*-Button ist deaktiviert), wenn irgendwelche Probleme vorhanden sind. Welche Probleme noch zu beheben sind, wird in der Ansicht unten angezeigt.

Stichwortverzeichnis

#

mc, Multiplikationsfaktor 23, 72
ms, Multiplikationsfaktor 24, 72

A

additional files, Attribut in XENIA 62
age group, Objekt in XENIA 67
age groups, Objekt in XENIA 67
Aktivität 5
Äquivalentdosis 6
Ausgabedatei
 edo, Datei mit jährlichen Effektivdosen 35
 evs, Vorspanndatei 33
 out, Datei mit Maximal-, Kollektiv- und
 Organdosen 39
 pbd, angegebene Parameter zur
 Rechenlaufspezifikation 39
 pcl, Protokolldatei 41
 RepoTREND.log, Logdatei 39
 tox.edo, Datei mit Radiotoxizitäten 25, 37
 tox.evs, Header-Datei für Radiotoxizitäten. 25,
 36
Ausgabesegment 31, 71

B

basis for dose calculation, Attribut in XENIA 69
Becquerel 5
Benutzername 83
Biosphären-Dosiskonversionsfaktoren 9, 11
Biosphärenmodell 12
Biosphären-Organosiskonversionsfaktoren 9
Biosphärenwasser 15, 23
BioTREND 2
BioTREND, Modul in XENIA 64
Bq 5

C

calculate radiotoxicities, Attribut in XENIA 71
COFRAME 28
considered nuclides, Attribut in XENIA 64
Console, Ansicht in XENIA 85
control parameters, Objekt in XENIA 69
csk-Ausgabedatei 28

D

data-bases, Projekt in XENIA 73, 74
decay product (index offset), Attribut in XENIA
 75
decay product, Attribut in XENIA 75
decay, Attribut in XENIA 75
deterministischer Rechenlauf 43
DKF 9, 11, 17, 67
domain properties, Objekt in XENIA 66
dosefactors, Modul in XENIA 65, 72
dose-related-data 73
Dosis 5
Dosiskonversionsfaktoren 9, 11, 29, 64, 67, 72
Dosisleistung 8
Dosisrate 8

E

edo-Ausgabedatei 19, 35
Effektivdosis 7, 15, 21
effektive Dosis 7
effektive Folgedosis 8
Eingabedateien 28, 70
Eingabedaten 28
Einschlussvermögen 15
einschlusswirksamer Gebirgsbereich 15, 47
elementdata-FF, Modul in XENIA 64, 66, 77
EMOS 3

Energiedosis	5, 47	input, Objekt in XENIA	70
Entnahmestelle.....	15, 20, 31, 66	ionisierende Strahlung.....	5
evs-Ausgabedatei	31, 33	J	
evs-Vorspanndatei.....	33	jährliche Effektivdosis.....	9, 35
ewG	15, 47	job.....	32, 63
EXCON	3	Job Parameters, Ansicht in XENIA	79
Executable	41, 84	job-configuration, Modul in XENIA.....	32, 62
EXMAS	3	Joule.....	5
Expositionspfade	9	JSON.....	27, 28, 41
F		K	
FRAME	28	Kollektivdosis.....	8, 21, 39
G		L	
GeoTREND	1	-l resource_list, qsub-Option	82
GeoTREND-COFRAME.....	28	Leistungsindikator	22
GeoTREND-FRAME	28	Local Output Directory, Eingabefeld in XENIA..	80
GeoTREND-POSA	28	<i>log4cxx.properties</i>	40, 62
Gewebe-Wichtungsfaktoren	7	log-Datei	39
Gray	5	Logdatei	39, 63
Gy	5	M	
H		module ID, Attribut in XENIA.....	33, 70
heat conversion factor, Attribut in XENIA	75	multiplication factor, Attribut in XENIA.....	32, 71
I		multiplicatoin factor for radiotoxicity	
identifier for dose conversion factors, Attribut in XENIA.....	67, 68, 71	concentration, Attribut in XENIA.....	72
identifier for Kd-values, Attribut in XENIA..	66, 78	multiplicatoin factor for radiotoxicity flow,	
identifier, Attribut in XENIA.....	78	Attribut in XENIA	72
indicators, Objekt in XENIA.....	71	Multiplikationsfaktor mc	23, 72
Indikator	22, 47	Multiplikationsfaktor ms	24, 72
Ingestion	8	Multiplikationsfaktor p.....	17, 19, 20, 32
Ingestionsdosiskoeffizient	9, 23, 29, 71	Multithreading.....	42
Ingestionsdosiskoeffizienten	72	N	
Inhalation	8	NaTREND	1
Inhalationsdosiskoeffizient.....	9	normalise doses to the reference value, Attribut in XENIA.....	19, 67, 73
Inkorporation.....	8		

Normierungsfaktor	19	Radiologischer Geringfügigkeitsindex	47
nuclide settings, Objekt in XENIA	64, 65	Radiotoxizität.....	9, 23, 36, 37, 71
nuclidedata, Modul in XENIA.....	64, 74	Radiotoxizitätskonzentration	22, 23, 72
nuclidedata, Rechenlauf in XENIA	74	Radiotoxizitätskonzentration im	
O		Biosphärenwasser	23
ODKF.....	9, 13, 20	Radiotoxizitätsstrom.....	22, 23, 72
organ, Objekt in XENIA	67, 68	Radiotoxizitätsstrom von der Geosphäre	23
Organdosis.....	6, 20, 67, 68	reference value, Attribut in XENIA	19, 21, 73
Organdosisumkonversionsfaktoren 9, 11, 13, 20, 29,		reference water flow, Attribut in XENIA.....	16, 69
65, 68, 72		Referenzwasserstrom	16, 69
Organfolgedosis.....	8	Referenzwert	19
out-Ausgabedatei	19, 21, 22, 39	Remote User, Eingabefeld in XENIA	83
output file name, Attribut in XENIA.....	32, 62	RepoSTAR	61
P		RepoTREND.....	1
p, Multiplikationsfaktor	17, 19, 20, 32	RepoTREND.log.....	39, 62
Parallelisierung	42, 82	Retardationsfaktor	18
Passwort	83	RGI	47
pbd-Ausgabedatei	31, 34, 39	run settings, Objekt in XENIA.....	62
pcl-Protokolldatei	41	Runs, Ansicht in XENIA.....	85
performance indicator.....	22	S	
POSA	28	SD-0, Teilsumme	30
Production Run.....	85	SD-1, Teilsumme	30
Q		SD-2, Teilsumme	30
-q destination, qsub-Option	81	Sicherheitsindikator.....	22, 47
qsub	81	Sievert.....	6
qsub-Optionen		Spiel	42
<i>-l resource_list</i>	82	SS-N, Teilsumme	30
<i>-q destination</i>	81	Standard Executable.....	84
Queue Alias, Eingabefeld in XENIA .	42, 43, 80, 81	statistischer Rechenlauf	42
Queue Command, Eingabefeld in XENIA... 42, 43,		Strahlenbelastung.....	6
80, 81		Strahlenexposition.....	5
Queuing-System	44, 80	Strahlungsart	75
R		Strahlungs-Wichtungsfaktoren.....	6
Radioaktivität	5	Submit	85
		Submit, Ansicht in XENIA	84
		subtotal, Objekt in XENIA	65

Summendosen.....	19	heat conversion factor	75
Sv	6	identifier.....	78
T		identifier for dose conversion factors ...	67, 68, 71
Target Host, Eingabefeld in XENIA.....	79	identifier for Kd-values.....	66, 78
Teilsommen	19, 30, 65	module ID.....	33, 70
Thread	42	multiplication factor.....	32, 71
tox.edo-Ausgabedatei	25, 37	multiplicatoin factor for radiotoxicity	
tox.evs-Ausgabedatei	25, 36	concentration.....	72
U		multiplicatoin factor for radiotoxicity flow ..	72
User Executables	85	normalise doses to the reference value.	67, 73
V		normalisedoses to the reference value.....	19
Verteilungskoeffizient	18, 29, 66, 78	output file name.....	32, 62
Vorspanndatei	31, 33	reference value	19, 21, 73
W		reference water flow.....	16, 69
Wasserentnahmestelle.....	15, 20, 31, 66	XENIA-Modul	
Working Directory, Eingabefeld in XENIA.....	80	BioTREND	64
X		dosefactors.....	65, 72
XENIA, grafische Oberfläche.....	27	elementdata-FF	64, 66, 77
XENIA-Ansicht		job-configuration.....	32, 62
Console.....	85	nuclidedata.....	64, 74
Job Paramters	79	XENIA-Objekt	
Runs.....	85	age group	67
Submit.....	84	age groups.....	67
XENIA-Attribut		control parameters	69
additional files.....	62	domain properties.....	66
basis for dose calculation	69	indicators.....	71
calculate radiotoxicities	71	input	70
considered nuclides	64	nuclide settings	64, 65
decay	75	organ	67, 68
decay product	75	run settings	62
decay product (index offset)	75	subtotal	65
		Z	
		Zerfallsrate.....	5

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de