

RepoTREND

**Das Programmpaket
zur integrierten Langzeit-
sicherheitsanalyse von
Endlagersystemen**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

RepoTREND

Das Programmpaket
zur integrierten Langzeit-
sicherheitsanalyse von
Endlagersystemen

Version 4.5 (Stand März 2016)

Tatiana Reiche

April 2016

Anmerkung:

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

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

GRS - 413
ISBN 978-3-944161-95-2

Deskriptoren

Programmcode, Endlager, Langzeitsicherheit, Simulation

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grafische Benutzeroberfläche XENIA	5
2.1	Allgemeine Angaben zur Benutzeroberfläche	6
2.2	Datenbank	8
2.3	Aktueller Stand – Version 3.1.....	10
3	Nahfeldmodule.....	13
4	Fernfeldmodule der Familie GeoTREND	17
5	Biosphärenmodul BioTREND	19
6	Framework RepoSTAR für probabilistische Analysen.....	21
7	Ablaufsteuerung	23
8	Postprocessing.....	25
9	Ablauf eines RepoTREND-Rechenlaufs	29
9.1	Deterministischer Rechenlauf	29
9.2	Statistischer Rechenlauf	30
10	Qualitätsmanagement	33
11	Zusammenfassung und Ausblick.....	35
	Literaturverzeichnis.....	37
	Abbildungsverzeichnis.....	41
	Abkürzungsverzeichnis.....	43
	Stichwortverzeichnis.....	45

1 Einleitung

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 Szenarientwicklung, die Konsequenzenanalyse, die Unsicherheitsanalyse sowie den Vergleich der Ergebnisse mit vorgegebenen Sicherheitsprinzipien, Schutzkriterien und sonstigen Nachweisanforderungen /BMU 10/. Die Langzeitsicherheit muss wegen der langen zu betrachtenden Zeiträume und wegen der Vielzahl der ablaufenden Prozesse mit Hilfe von Computerprogrammen bewertet werden. Für die zur Beurteilung der Konsequenzen aus den entwickelten Szenarien durchzuführende Analyse möglicher Freisetzung von Schadstoffen aus dem Endlager steht das Programmpaket *RepoTREND* (Transport and **RE**etention of **N**on-dacaying and **D**ecaying contaminants in final **REPO**sitory) zur Verfügung.

Bei der Ausbreitung der Schadstoffe vom Endlager in die Biosphäre werden drei voneinander im Wesentlichen unabhängige Teilsysteme betrachtet: das Nahfeld, die Geosphäre und die Biosphäre (Abb. 1.1). Entsprechend modular ist RepoTREND aufgebaut. RepoTREND liefert damit die Möglichkeit, Prozesse in den einzelnen Endlagerbereichen zu modellieren: eine eventuelle Freisetzung von Schadstoffen aus dem Endlager, ihren Transport mit dem tiefen Grundwasser in der Geosphäre in das oberflächennahe Grundwasser und letztendlich bis zum menschlichen Organismus sowie die damit verbundenen radiologischen Konsequenzen.

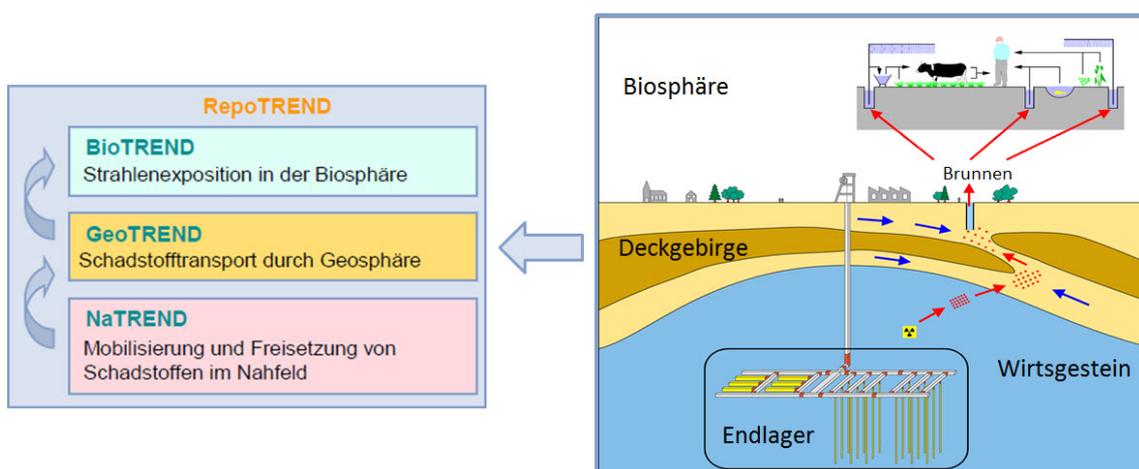


Abb. 1.1 Rechenmodule von RepoTREND für verschiedene Teilbereiche von Endlagern

Das Programmpaket RepoTREND wird seit 2007 von der GRS entwickelt und umfasst in der aktuellen Version 4.5 folgende Komponenten (Abb. 1.2):

- *XENIA*: grafische Benutzeroberfläche zur Dateneingabe /REI 11/,
- Nahfeldmodule:
 - *LOPOS*: Prozesse in einem Grubengebäude im Salzgestein /HIR 99/,
 - *CLAYPOS*: Prozesse in einem Endlager im Ton- und Kristallingestein,
- Fernfeldmodule der Familie *GeoTREND*:
 - *POSA*: Schadstofftransport in vollgesättigten porösen Medien /REI 11/,
 - *FRAME*: Schadstofftransport in vollgesättigten geklüftet-porösen Medien unter der Berücksichtigung der Matrixdiffusion /REI 14/,
 - *COFRAME*: Kolloid beeinflusster Transport von Schadstoffen in vollgesättigten geklüftet-porösen Medien bei kinetisch kontrollierten Interaktionsprozessen /REI 14/,
- *BioTREND*: Berechnung von Strahlenbelastungen in der Biosphäre /REI 14a/,
- *RepoSTAR*: ein Rahmen zur probabilistischen Analysen /BEC 16/.

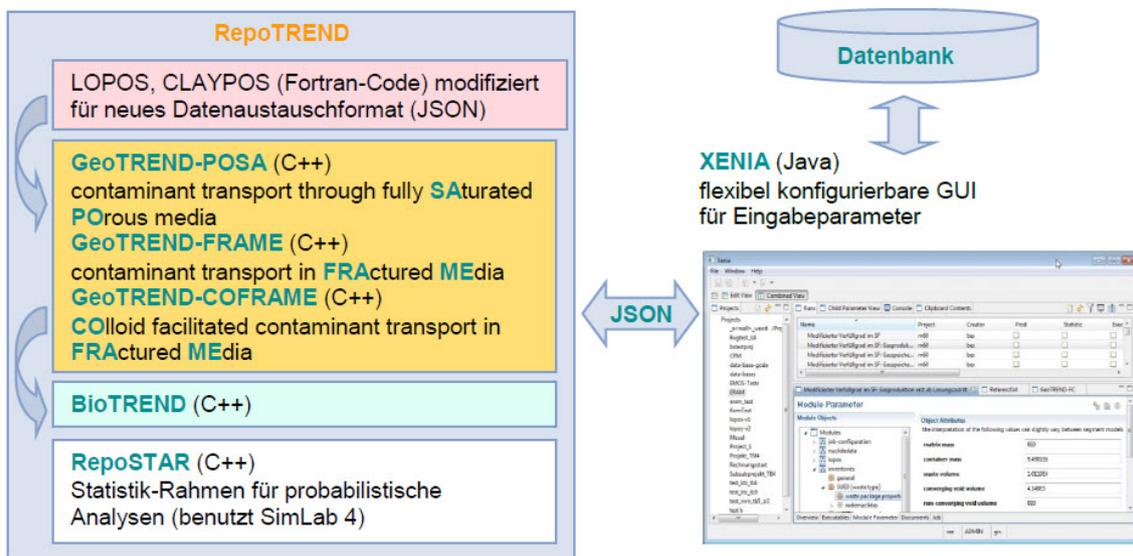


Abb. 1.2 RepoTREND Version 4.5

Durch die modulare Struktur kann RepoTREND flexibel in unterschiedlichen Anwendungen eingesetzt werden. Alle Rechenmodule sind beliebig miteinander kombinierbar, d. h. beispielweise, dass jedes Modul für den Fernbereich an jedes Rechenmodul für

den Nahbereich angeschlossen oder mit einem anderen Rechenmodul für den Fernbereich verknüpft werden kann.

RepoTREND wurde im Rahmen des vom BMWi geförderten Vorhabens ADEMOS (FKZ 02E10367) in der Zeit vom 1.04.2007 bis 31.03.2016 entwickelt. In diesem Vorhaben sollte der existierende Fortran-Rechencode EMOS /BUH 99/ zur Simulation von Prozessen in einem Endlager durch ein modernes, flexibles, ausbaufähiges Programmsystem abgelöst werden. Der Schwerpunkt der Arbeiten lag dabei auf der Programmentwicklung, die fokussiert auf moderne Anforderungen an die Softwareentwicklung war: von Techniken und Methoden wie objektorientierter Programmierung bei der Entwicklung der grundlegenden Softwarearchitektur bis zum Einsatz höherer Programmiersprachen, die diese Verfahren unterstützen bzw. ermöglichen. Der vorliegende Bericht fasst die Ergebnisse des Vorhabens zusammen: in den folgenden Kapiteln werden die einzelnen RepoTREND-Module sowie der Ablauf eines RepoTREND-Rechenlaufs vorgestellt. Die Ergebnisse aus dem FuE-Vorhaben sind detailliert in den folgenden Berichten niedergelegt:

- GRS-A-3623 Anpassung des Programmpakets EMOS an moderne Softwareanforderungen. ADEMOS – Phase 1.

- GRS-333 Modellierung des Schadstofftransports in geklüftet-porösen Medien unter Berücksichtigung von Kolloiden mit den Transportprogrammen FRAME und COFRAME.

- GRS-345 Berechnung radiologischer Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Stoffe aus einem Endlager in die Biosphäre mit dem Programm BioTREND.

- GRS-411 RepoSTAR – Ein Coderahmen zur Steuerung und Auswertung statistischer Rechenläufe mit dem Programmpaket RepoTREND.

2 Grafische Benutzeroberfläche XENIA

Die grafische Benutzeroberfläche *XENIA* (fleXible ENhanced Interface Application) (Abb. 2.1) ist ein wesentlicher Bestandteil des Programmpakets RepoTREND und dient dazu, Eingabedaten für Rechenläufe zusammenzustellen, Rechenläufe zu starten und zu verwalten. Sie übernimmt damit die Steuerung von Rechenläufen, indem sie eine Scriptdatei automatisch generiert und zur Abarbeitung an einen zu spezifizierenden Rechner weiterleitet.

Die Eingabedaten und Informationen zu den Rechenläufen werden in einer Datenbank gespeichert, wobei jeder Rechenlauf eindeutig einem Projekt zugeordnet ist.

Die Anbindung von XENIA an eine Datenbank sowie zahlreiche eingebaute Funktionalitäten zur Überprüfung der Eingabedaten auf ihre Korrektheit und zur Nachvollziehbarkeit der durchgeführten Änderungen trägt erheblich zur Qualitätssicherung bei und ist eine weitere Besonderheit von XENIA.

Die folgenden Abschnitte vermitteln eine Übersicht über die Arbeit mit XENIA. Eine detaillierte Beschreibung von Vorgehensweisen, Ansichten und Konfigurationen kann dem Bericht /REI 11/ (grundlegendes Konzept und Funktionalitätsumfang in der ersten Version) sowie der Programm- und Benutzerdokumentation zu XENIA entnommen werden.

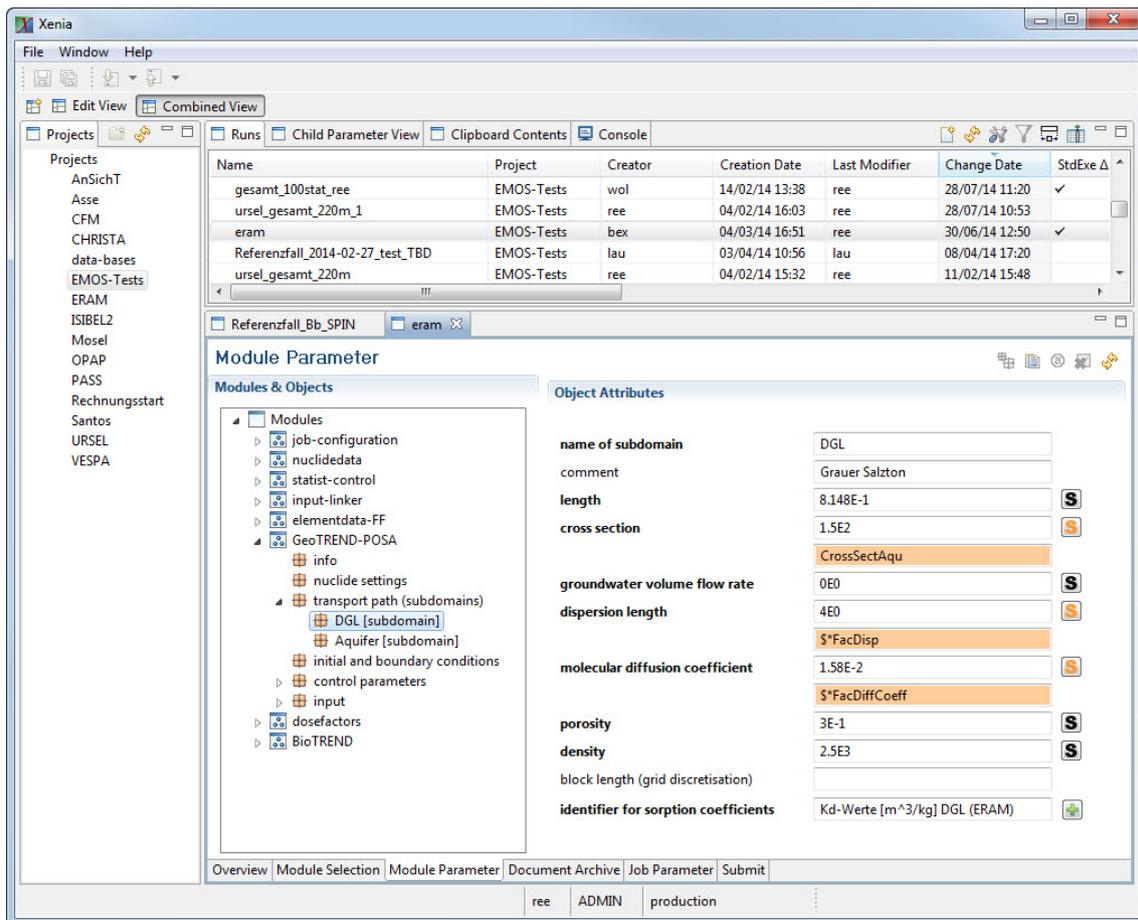


Abb. 2.1 Grafische Benutzeroberfläche XENIA

2.1 Allgemeine Angaben zur Benutzeroberfläche

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

- Alle Daten und Informationen zu Rechenläufen werden in der Datenbank abgelegt. Zu jedem Rechenlauf wird u. a. gespeichert, welche Rechenmodule von RepoTREND in welcher Version und welche Eingabedaten verwendet werden.
- Logisch zusammenhängende Daten werden in sogenannten *Modulen* zusammengefasst. Ein gewähltes Modul inklusive der zugehörigen Versionsnummer definiert eindeutig die Masken für die Eingabe der von diesem Modul benötigten Daten.
- Die Eingabemasken von XENIA sind flexibel. Der Aufbau einer Eingabeansicht ist durch eine entsprechende *Konfigurationsdatei (Modulbeschreibung)* festgelegt. Wenn die Struktur einer Ansicht geändert werden muss, so kann der Entwickler die

entsprechende Konfigurationsdatei abändern, bzw. durch eine neue Konfigurationsdatei eine neue Eingabeansicht generieren, so dass die Parameterliste durch neue Eingabedaten ergänzt wird oder nicht mehr erforderliche Daten entfernt werden. Über die Konfigurationsdatei kann auch der Datentyp und der Wertebereich einzugebender Daten festgelegt werden. Dadurch ist eine einfache Überprüfung der eingegebenen Daten auf Plausibilität bereits bei der Eingabe möglich.

- Die Eingabemasken zum Starten von Modellrechnungen (Abb. 2.2) erlauben eine flexible Auswahl des zu verwendenden Compute-Servers, ggf. der Anzahl von Rechenknoten für parallele Job-Verarbeitung und der Ausgabesteuerung, d. h. der Auswahl von Pfaden für die Ergebnisausgabe.
- Nach Eingabe aller Informationen in die Eingabemasken und Start einer Rechnung führt XENIA folgende Aktionen aus:
 - Erstellung einer JSON-Datei (siehe Abschnitt 2.2) mit den eingegebenen, den Rechenlauf spezifizierenden Daten,
 - Zusammenstellung aller für die Rechnung erforderlichen Dateien,
 - Abarbeitung des Rechenjobs,
 - Verwaltung der Ausgabedateien und
 - Aufräumen temporärer Verzeichnisse.
- Die eingeführte interne Verwaltung von Zugriffsrechten trägt zur Qualitätssicherung bei.

In der Benutzerdokumentation ist im Detail zusammengestellt, wie die Bedienungsfläche aufgebaut ist und in welche Eingabemaske welche Daten einzugeben sind.

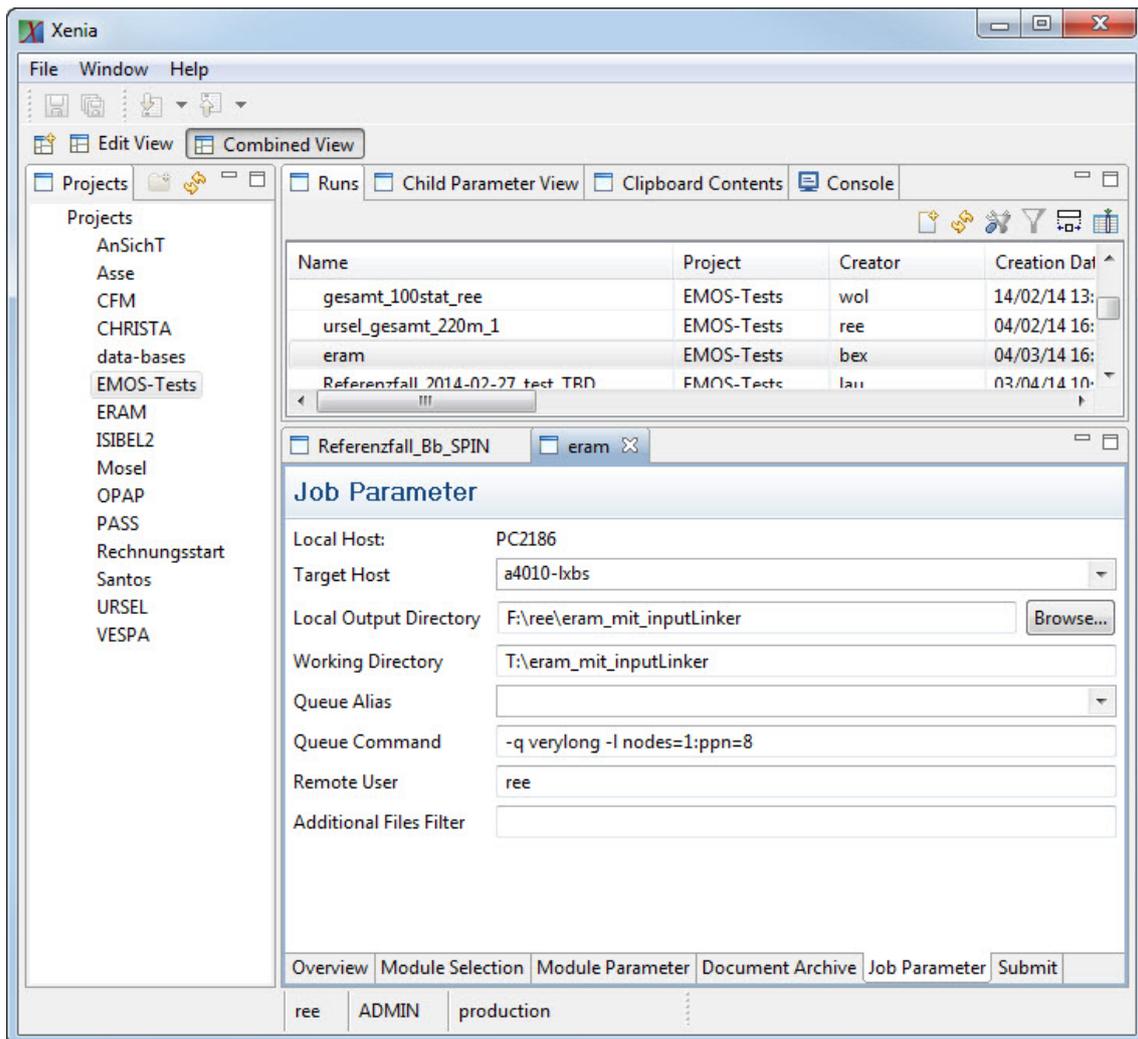


Abb. 2.2 Ansicht für Eingaben zum Starten von Rechenläufen

2.2 Datenbank

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

Die Ablage in der Datenbank dient nicht nur der Speicherung von Parametern sondern auch der Qualitätssicherung, d. h. der Nachverfolgbarkeit von Rechenläufen und den damit verknüpften Daten, wie beispielsweise der Angabe des Anwenders, des Status' des Rechenlaufs, usw.

Die Rechenmodule von RepoTREND greifen bei einer Modellrechnung nicht direkt auf die Datenbank zu, sondern verwenden eine Datei im JSON-Format /WWW JS/, in der

alle von den Modulen benötigten Informationen gespeichert sind. Diese Datei wird von XENIA beim Starten eines Rechenlaufs generiert. In Abb. 2.3 ist ein Beispiel einer einfach aufgebauten Datei angegeben.

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

Abb. 2.3 Beispiel einer JSON-Datei

Abb. 2.4 zeigt schematisch die Einbindung der Datenbank im Programmsystem, bestehend aus dem Programm RepoTREND und der Bedienungsfläche XENIA.

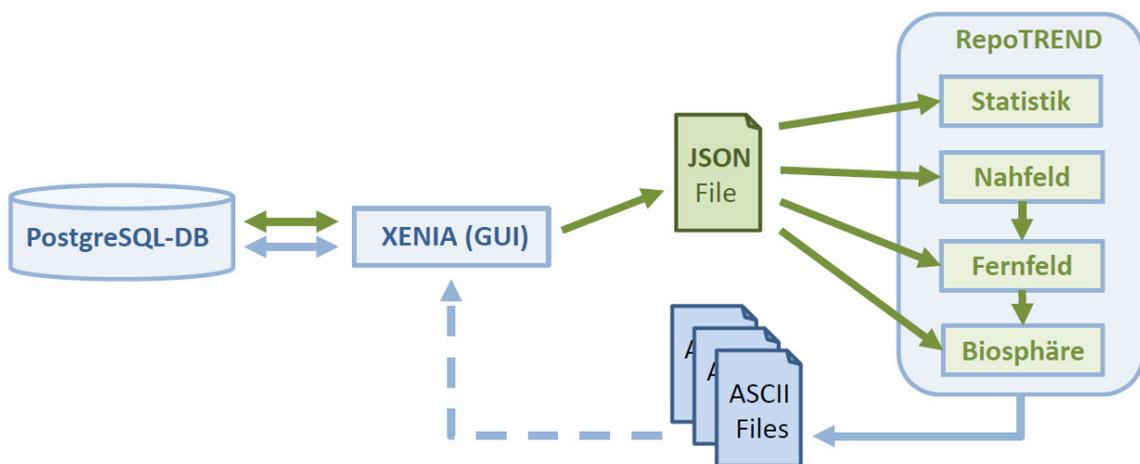


Abb. 2.4 Schematische Darstellung der Einbindung der Datenbank

2.3 Aktueller Stand – Version 3.1

Die Bedienungsoberfläche XENIA liegt zurzeit in der Version 3.1 vor. Bei der Entwicklung der ersten Version (beschrieben in /REI 11/) lag der Schwerpunkt auf der Entwicklung der Datenbankschnittstelle und der Struktur sowie einer ersten Realisierung der flexiblen Eingabeoberfläche. Weiterhin wurde die Verwaltung von Rechenläufen (Starten von Rechenläufen, Ablage der Ergebnisdateien, usw.) in die Oberfläche integriert. Mit dem Einsatz der ersten Version von XENIA für Test- und Anwendungsrechnungen wurde die prinzipielle Einsatzfähigkeit der neuen grafischen Benutzeroberfläche gezeigt, aber gleichzeitig wurde der Verbesserungsbedarf deutlich.

In den letzten Jahren wurde XENIA um zahlreiche Funktionalitäten erweitert. Die Verbesserungen betreffen hauptsächlich folgende Bereiche:

- Flexibilität bei der Eingabe von Daten,
- Reduzierung des Arbeitsaufwandes und der Fehleranfälligkeit beim Spezifizieren und Verwalten der Rechenläufe,
- Erweiterung und Verbesserung von Funktionalitäten zur Qualitätskontrolle.

Unter anderem wurden folgende Verbesserungen und Erweiterungen realisiert:

- umfangreiche Kopierfunktionen für eingegebene Daten,
- Verbesserung der Pflege von Modulbeschreibungen,
- übersichtliche Verwaltung von Benutzerrechten, Datenbanken, zugelassenen Compute-Server usw. über eine grafische Oberfläche,
- Import von bereits existierenden Rechenläufen,
- Möglichkeit, beliebigen Parametern eine optionale statistische Spezifikation hinzuzufügen,
- Automatische Zuordnung von Executables zu Modulversion+Compute-Rechner,
- zusätzliche Filter- und Sortiermöglichkeiten (z. B. nach Datum, verwendeten Modulversionen, Ersteller usw.),
- Speicherung von mehreren Versionen eines Rechenlaufs sowie Versionenvergleich,

- Verbesserung der Nachvollziehbarkeit von zuletzt durchgeführten Änderungen,
- Automatisierung einiger Arbeitsschritte bei der Verwaltung von Rechenläufe (z. B. Speicherung von solchen Informationen wie Änderungsdatum, Bearbeiter und Rechenlaufzustände, oder automatische Speicherung von allen zugehörigen Daten und Dateien beim Archivieren eines Rechenlaufs in einem schreibgeschützten Verzeichnis).

Eine detaillierte Beschreibung aller in der aktuellen Version vorhandenen Funktionalitäten ist in der Benutzerdokumentation enthalten.

3 Nahfeldmodule

Mit den Nahfeldmodulen können Prozesse in einem Grubengebäude (Abb. 3.1) simuliert werden. Zurzeit stellt RepoTREND dafür zwei überarbeitete EMOS-Nahfeldmodule zur Verfügung:

- LOPOS /HIR 99/: Mobilisierung von Radionukliden und ihr einphasiger Transport in einem Grubengebäude im Salzgestein. Das zugrunde liegende Modell umfasst folgende Prozesse:
 - Korrosion von Abfallbehälter,
 - Mobilisierung von Radionukliden (Korrosion von Abfallmatrix),
 - Advektion, Diffusion, Dispersion,
 - Radioaktiver Zerfall,
 - Gebirgskonvergenz,
 - Salzgruskompaktion,
 - Temperaturentwicklung (zeitliche und räumliche),
 - Gasbildung,
 - Sorption,
 - Ausfällung und Auflösung von Stoffen.

- CLAYPOS: eindimensionaler, einphasiger diffusiver Transport von Radionukliden durch eine vollgesättigte Barriere aus einem geringpermeablen, kluffreien porösen Medium (wie z. B. Ton- oder kluffreies Kristallingestein). Bei der Modellerstellung wurden folgende Prozesse berücksichtigt:
 - Mobilisierung von Radionukliden,
 - Diffusion,
 - Radioaktiver Zerfall,
 - Sorption,
 - Ausfällung und Auflösung von Stoffen,
 - Verdünnung im oberflächennahen Grundwasser.

Die EMOS-Nahfeldmodule LOPOS und CLAYPOS wurden an mehreren Stellen überarbeitet, an das neue Datenaustauschformat angepasst und an die neue grafische Benutzeroberfläche XENIA angebunden /REI 11/. Durch diese Rechenmodule können die wesentlichen Prozesse in einem Endlagersystem im Salzgestein sowie die Schadstoffverbreitung im Ton- und Kristallingestein mit der aktuellen RepoTREND-Version erfasst werden.

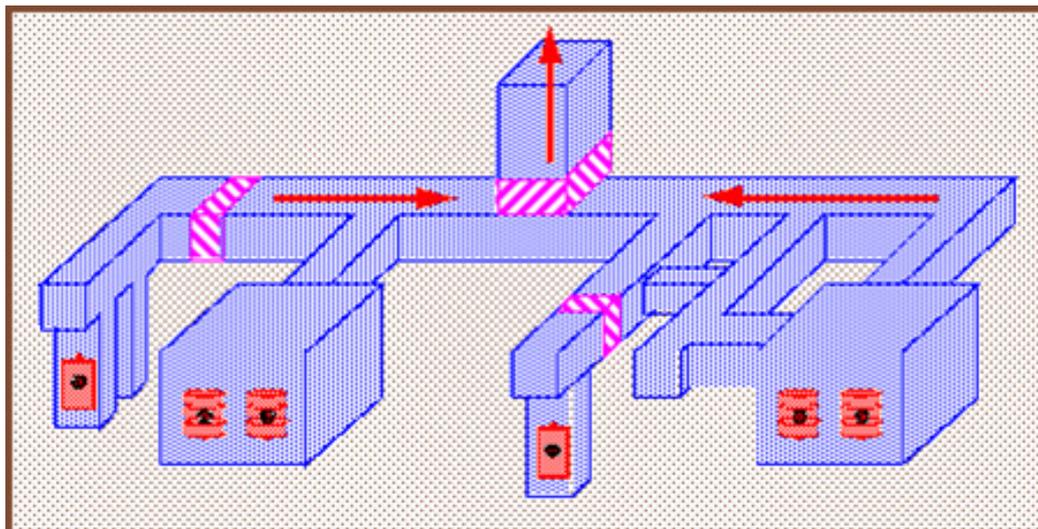


Abb. 3.1 Schematische Darstellung eines Grubengebäudes

Die aktuelle Version 4.5 kann jedoch nur als Zwischenlösung betrachtet werden, da er bei einer auf den Wirtsgesteinstyp nicht festgelegten, deutschlandweiten Standortsuche nicht optimal eingesetzt werden kann. Es fehlt ein grundlegendes Nahfeldmodul, das die Möglichkeiten einer Vergleichbarkeit von Ergebnissen an verschiedenen Standorten deutlich verbessern würde. Darüber hinaus konnte das im Jahr 2010 in den Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle verankerte Konzept des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG) bis jetzt ebenfalls nicht adäquat bei der Konzeption eines Nahfeldmoduls berücksichtigt werden. Auch weitere fachliche Anforderungen sind in der aktuellen Version von LOPOS und CLAYPOS nicht abgedeckt. So kann z. B. ein zweiphasiger Schadstofftransport in LOPOS nicht berücksichtigt werden. Dem Nahfeldmodul CLAYPOS für Ton- und Kristallgestein fehlen wichtige Möglichkeiten, z. B. die Modellierung des Radionuklidtransportes durch das Grubengebäude. Einige relevante Effekte, wie z. B. Umlösungs- oder Korrosionsprozesse, sind bisher nicht oder unzureichend berücksichtigt wurden. Zudem hat sich das existierende Nahfeldmodul LOPOS als extrem arbeits- und zeitaufwändig in Bezug auf die Wartung und Fehlersuche erwiesen.

Die Entwicklung eines neuen Nahfeldmoduls, das diesen neuen Anforderungen entspricht, stellt eine anspruchsvolle und mit umfangreichen Verifizierungen verbundene Aufgabe dar, die im Rahmen des Vorhabens ADEMOS nicht zu leisten war. Das zu entwickelnde Nachfolgemodul, das den Namen *NaTREND* (**NAh(NeAr)**feldmodul von **RepoTREND**) bekommen hat, soll im Rahmen eines Nachfolgeprojekts fertig gestellt werden.

Die wichtigsten Herausforderungen bei der Entwicklung von NaTREND sind folgende:

- Das modellierende System ist in höchstem Maße komplex.
- Das Modellgebiet ist i. A. extrem heterogen. Einzelne Systembereiche können sich in ihren Eigenschaften, in der Relevanz von Prozessen/Effekten sowie in den zugrunde liegenden Modellen für einen und denselben Prozess unterscheiden.
- Die Anforderungen an das modellierende System ändern sich mit der Zeit durch eine Änderung gesetzlicher Vorgaben, Entwicklung unterschiedlicher Endlagerkonzepte oder durch den Fortschritt der Wissenschaft und Technik.

Unter der Berücksichtigung dieser Herausforderungen muss die zu entwickelnde zugrunde liegende Softwarearchitektur (sie definiert die grundlegenden Komponenten eines Softwaresystems und beschreibt die Zusammenhänge, die zwischen den Komponenten bestehen) vor allem eine hohe Modularität der Programmstruktur und eine hohe Flexibilität gegenüber neuer Anforderungen erweisen, um eine einfache Modifikation und Erweiterung des Programmcodes zu gewährleisten. Das heißt, dass es z. B. möglich sein soll

- mehrere Transportmodelle zu koppeln, wie z. B. Transport in porösen Medien und beim freien Fluss (in einem unverfüllter Raum) oder
- neue relevante Effekte einzubinden bzw. bereits integrierte abzuändern oder
- bestimmte Rechenalgorithmen auszutauschen oder alternative einzubauen.

Eine Softwarearchitektur mit den genannten Hauptmerkmalen beeinflusst maßgeblich den erforderlichen Aufwand für die (Weiter-)Entwicklung des Programmcodes. Die Erstellung relevanter Softwarearchitektur gilt deswegen als das wesentliche Teilziel bei der Entwicklung von NaTREND.

Mit NaTREND soll ein Rechenmodul zur Simulation von Basisprozessen im Nahfeld eines Endlagersystems zur Verfügung gestellt werden, in dem vor allem das Konzept umgesetzt wird, das

- die für das Nahbereich grundlegenden Prozesse (d. h. relevant für jedes Endlagerkonzept) erfasst und

- eine Spezialisierung bzw. Erweiterung der Basisversion entsprechend beliebigen Anforderungen, die relevant für konkrete Endlagerkonzepte sind, auf einer (relativ) einfachen Weise ermöglicht.

Außerdem sollen in der erstellten Version des Nahfeldmoduls die Vorgänge im Nahbereich eines Endlagers im Salzgestein unter der Berücksichtigung eines Zweiphasenflusses abgebildet werden. Soweit möglich werden auch Anforderungen berücksichtigt, die spezifisch für die Endlagerung im Kristallin- und Tongestein sind.

Im Rahmen des Vorhabens ADEMOS wurde mit der Entwicklung von zugrunde liegenden konzeptionellen, mathematischen und numerischen Modellen sowie mit dem Entwurf relevanter Softwarearchitektur für das Nahfeldmodul NaTREND bereits begonnen. Ein Beispiel für den Entwurf einiger Programmstrukturen für NaTREND ist in Abb. 3.2 dargestellt.

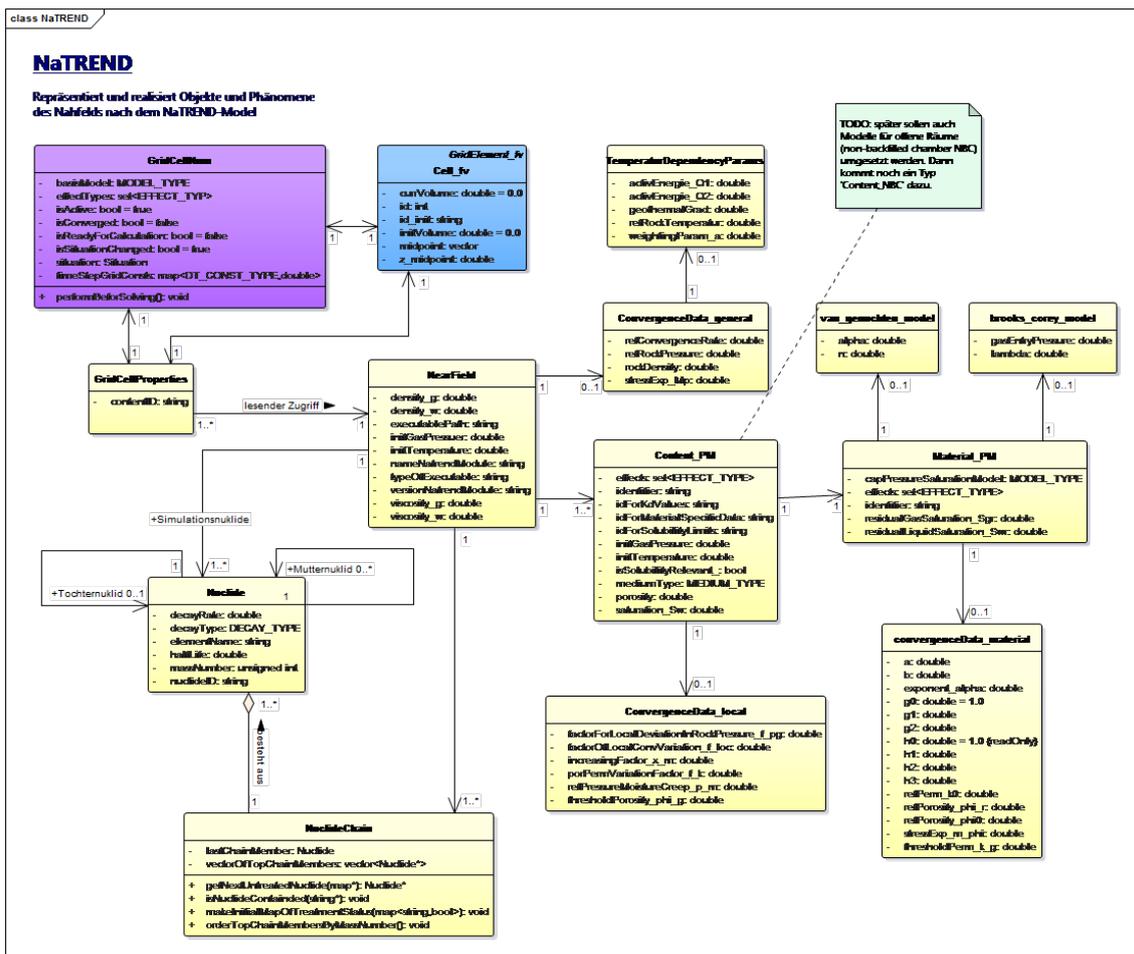


Abb. 3.2 Einige Programmstrukturen für NaTREND als UML-Diagramm

4 Fernfeldmodule der Familie GeoTREND

Die Modellierung des Schadstofftransports durch das Deckgebirge ist ein wesentlicher Bestandteil der Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager in tiefen geologischen Formationen. In Abb. 4.1 ist das prinzipielle Schema dargestellt: Schadstoffe gelangen an einer Stelle in den Grundwasserstrom, werden verdünnt und mit dem Grundwasser transportiert. Sie gelangen schließlich in einen oberflächennahen Aquifer und damit in die Biosphäre.

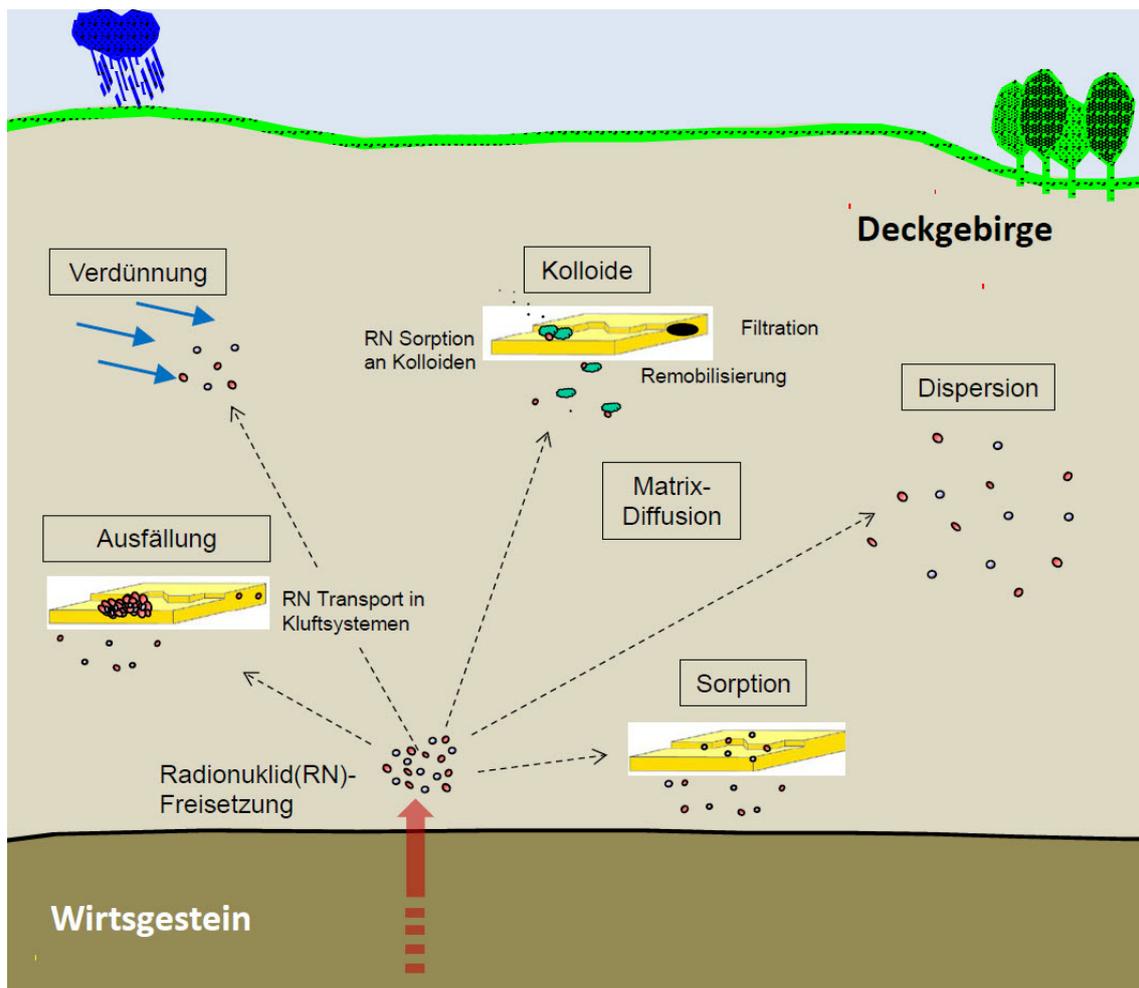


Abb. 4.1 Skizze der Ausbreitung von Schadstoffen im Deckgebirge

Das RepoTREND-Programmpaket stellt eine Reihe von im Rahmen des Vorhabens ADEMOS entwickelten Rechenmodulen (Fernfeldmodulen) zur Verfügung, die unterschiedliche Transportmodelle zur Simulation der eindimensionalen Schadstoffausbreitung durch die Geosphäre abbilden. Diese Rechenmodule werden unter der Bezeichnung *GeoTREND*-Familie (**GEOS**phärenmodul von Repo**TREND**) aufgeführt:

- GeoTREND-POSA (transport in **PO**rous **SA**turated media): Dieses Modul berechnet den advektiven, diffusiven und dispersiven Schadstofftransport in einem gesättigten porösen Medium, wobei die Sorption der Schadstoffe mit einem linearen Ansatz nach dem K_d -Konzept berücksichtigt wird. Radioaktiver Zerfall und Verdünnung werden ebenfalls berücksichtigt. Eine detaillierte Beschreibung des Rechenmoduls ist dem Bericht /REI 11/ zu entnehmen.
- GeoTREND-FRAME (transport in **FRA**ctured-porouse **ME**dia): Mit diesem Rechenmodul kann der Transport von Schadstoffen durch ein gesättigtes geklüftet-poröses Medium simuliert werden. Auch hier werden alle Basistransportmechanismen wie Advektion, Diffusion und Dispersion sowie die Diffusion von Schadstoffen in die Gesteinsmatrix modelliert und Sorption sowie radioaktiver Zerfall berücksichtigt. Im Bericht /REI 14/ ist eine ausführliche Dokumentation zu dem Rechenmodul FRAME enthalten.
- GeoTREND-COFRAME (**CO**lloid facilitated transport in **FRA**ctured-porouse **ME**dia): Dieses Modul unterscheidet sich von FRAME dadurch, dass zusätzlich eine Beeinflussung des Schadstofftransports durch Kolloide berücksichtigt wird. Durch Anlagerung an Kolloide kann der Schadstofftransport beschleunigt oder verlangsamt werden, je nach Mobilität der beteiligten Kolloide. Eine umfangreiche Dokumentation zu den zugrunde liegende Modellen, relevanten Programmstrukturen sowie durchgeführten Tests ist im Bericht /REI 14/ zu finden.

In Zusammenarbeit mit dem Projekt Kolorado-e (FKZ 02E11203A) wurden umfangreiche Modellrechnungen von einigen im Rahmen des internationalen CFM-Projekts (**CO**lloid **F**ormation and **M**igration) im Untertagelabor Grimsel durchgeführten Experimenten mit dem Fernfeldmodul COFRAME durchgeführt.

Ein Artikel zu dem im Fernfeldmodul COFRAME umgesetzten Modell des kolloidbeeinflussten Transports von Radionukliden in geklüftet-porösen Medien bei kinetisch verlaufenden Interaktionsprozessen, inklusive Ergebnissen der Variationsrechnungen und Modellrechnungen für Experimente an Grimsel Test Site (GTS), wurde verfasst und bei der Fachzeitschrift „Transport in Porous Media“ veröffentlicht /REI 15/.

5 Biosphärenmodul BioTREND

Mit Hilfe des neu entwickelten Biosphärenmoduls *BioTREND* (**BIO**sphärenmodul von Repo**TREND**) können die Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Schadstoffe in die Biosphäre berechnet werden /REI 14a/.

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. In Abb. 5.1 sind die berücksichtigten Expositionspfade in der Biosphäre schematisch dargestellt.

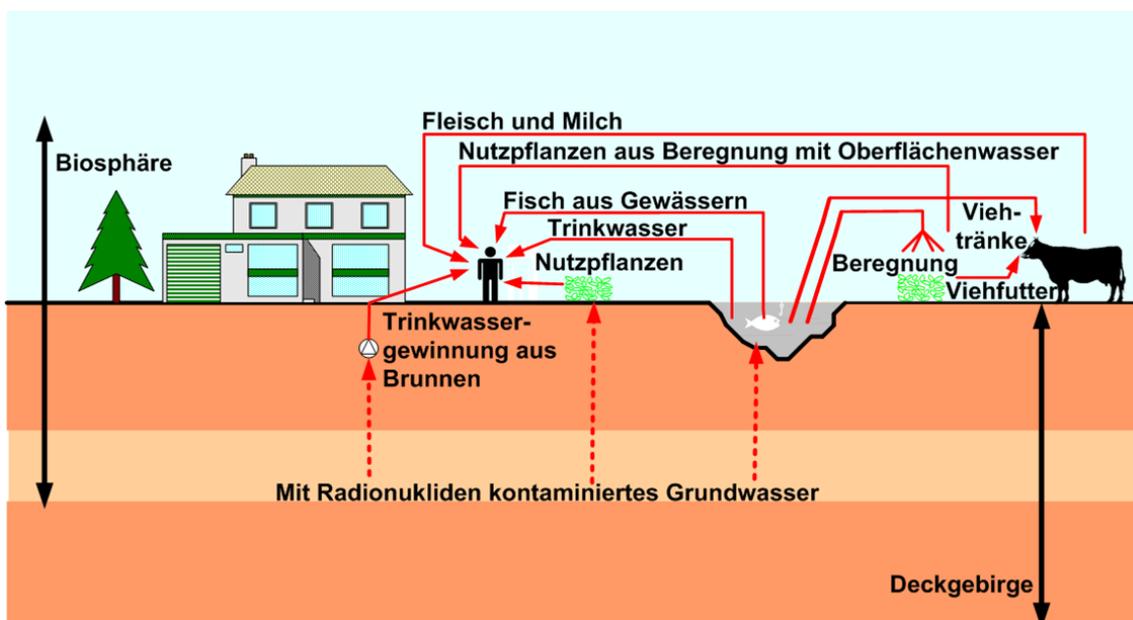


Abb. 5.1 Nutzungs- und Ingestionspfade bei der Ausbreitung von Radionukliden in der Biosphäre

Unter Berücksichtigung aller relevanten Annahmen werden im Rahmen einer separaten Biosphärenmodellierung nuklidspezifische *Biosphären-Dosisumwandlungsfaktoren* *DKF* sowie *Biosphären-Organodosiskonversionsfaktoren* *ODKF* ermittelt. Mit Hilfe von *DKF* und *ODKF* werden im Rechenmodul *BioTREND* aus der Aktivitätskonzentration oder Aktivitätsströmen (Ergebnisse einer Ausbreitungsrechnung) an einer definierten Schnittstelle zur Biosphäre Dosisbelastungen für Individuen als jährliche Effektivdosis sowie Organodosen und Dosen für Kollektive berechnet. Eine detaillierte Dokumentation zu *BioTREND* ist dem Bericht /REI 14a/ zu entnehmen.

6 Framework RepoSTAR für probabilistische Analysen

Das Programmpaket RepoTREND ermöglicht neben der deterministischen, d. h. auf festen Eingabedaten beruhenden Untersuchung genau definierter Rechenfälle, auch die Durchführung statistischer (oder probabilistischer) Analysen. Der Grundgedanke ist dabei, diejenigen Parameter, deren Werte mit signifikanten Ungewissheiten behaftet sind, durch geeignete statistische Verteilungen zu repräsentieren und in einer Vielzahl von Einzelrechenläufen zahlreiche mögliche Wertekombinationen durchzuspielen. Die so erzeugten Sätze von Ergebnissen können dann statistisch analysiert werden und erlauben auf diese Weise Rückschlüsse auf die Ungewissheit der Analyse. Dies wird als *Ungewissheitsanalyse* (oder Unsicherheitsanalyse¹) bezeichnet. Weiterhin kann mithilfe geeigneter Verfahren die Sensitivität des Systems gegenüber Schwankungen der verschiedenen Parameterwerte ermittelt werden. Eine derartige *globale Sensitivitätsanalyse* kommt zum einen dem generellen Systemverständnis zugute, zum anderen erlaubt sie gegebenenfalls die Fokussierung weiterer Untersuchungsaktivitäten auf bestimmte Problemparameter.

Probabilistische Ungewissheits- und Sensitivitätsanalysen werden im Programmpaket RepoTREND über einen speziellen Statistik-Rahmen realisiert, der den Namen *RepoSTAR* trägt (**Repo**TREND framework for **STAT**istic **R**uns). Die zugrunde liegenden Konzepte sowie eine Übersicht über die Funktionsweise des Statistikrahmens sind in /BEC 16/ gegeben (siehe auch den Abschnitt 9.2).

¹ Dieser Ausdruck wird in der deutschsprachigen Literatur häufig verwendet. Im Kontext von Sicherheitsanalysen kann er jedoch irreführend erscheinen. Deshalb wird im Kontext von Sicherheitsanalysen der Begriff *Ungewissheit* für „unsicheres Wissen“ bevorzugt.

7 Ablaufsteuerung

Jeder Rechenlauf besteht aus einer Abfolge von Programmen (Rechenmodulen), die zum Teil aufeinander aufbauen und deshalb in geeigneter Reihenfolge nacheinander auszuführen sind. Die Steuerung dieses Ablaufs wird mittels eines *Skriptprogramms* durchgeführt.

Über die grafische Benutzeroberfläche XENIA kann der Benutzer die Ausführung eines ausgewählten Rechenlaufs auslösen, wenn alle Daten vollständig vorliegen. Dieser Vorgang besteht im Wesentlichen aus zwei Teilen:

- Transfer von Kopien der für den Rechenlauf erforderlichen Dateien zum Dateisystem des ausführenden Rechners. Neben der JSON-Datei und ggf. benötigten weiteren Daten gehören hierzu auch die ausführbaren Programme (Executables).
- Weitergabe des Rechenauftrags an den ausführenden Rechner. Dies geschieht, indem das Skriptprogramm dem Rechner zur Ausführung übergeben wird, welches festlegt, wie mit den bereitgestellten Daten umzugehen ist.

Das Skriptprogramm startet und steuert den Rechenlauf, indem es die Kommunikation mit dem Betriebssystem übernimmt, die einzelnen Rechenmodule aufruft und die Datenströme organisiert. Seine Funktionsweise in /REI 11/ beschrieben.

Das Steuerskript wurde in der Skriptsprache *Python* realisiert. Dadurch ist eine betriebssystemübergreifende Implementierung möglich. Weiterhin kann auf eine umfangreiche Modulbibliothek, die u.a. Threading und Queuing bereitstellt, zurückgegriffen werden.

8 Postprocessing

Unter dem Begriff *Postprocessing* versteht man die Nachbearbeitung und Aufarbeitung der Rechenergebnisse. Dabei werden große Datenmengen in einer übersichtlichen, verständlichen Form dargestellt, die die Analyse der Ergebnisse erleichtern bzw. ermöglichen.

Während eines Rechenlaufs werden von allen Rechenmodulen Ergebnisse in Dateien abgelegt. Zwei dieser Dateien, die Problembeschreibungsdatei und die Standard-Ausgabedatei, enthalten eine strukturierte und kommentierte Ausgabe der Eingangsdaten und der wesentlichen Rechenergebnisse. Sie können direkt ausgedruckt oder mit einem Texteditor am Bildschirm angesehen werden und dienen der Dokumentation des Rechenlaufs und einem schnellen Überblick. Die übrigen Dateien werden ohne Kommentare in einem bestimmten ASCII-Format beschrieben und müssen mit Postprozessoren weiterverarbeitet werden. Eine Übersicht über die Ausgabedateien sowie die genaue Beschreibung von Dateiformaten sind den Berichten zu jeweiligen Rechenmodulen zu entnehmen.

Für die grafische Darstellung wird das kommerzielle Visualisierungstool Tecplot[®] verwendet /WWW TEC/. Tecplot[®] erwartet darzustellende Daten in einem eigenen Format. Der von GRS entwickelte *RepoTREND-Konverter* überführt die RepoTREND-Ausgabedateien in das erforderliche Tecplot-Format. Der Konverter ist bereits in die Tecplot-Umgebung integriert und kann unmittelbar nach dem Starten von Tecplot[®] geöffnet werden (Abb. 8.1). Im Hauptfenster können die zu konvertierenden Dateien ausgewählt werden (Abb. 8.2). Den Konvertierungsvorgang wird mit einer aussagekräftigen Meldung abgeschlossen (Abb. 8.3). Nach dem Konvertieren können Rechenergebnisse in Tecplot[®] dargestellt werden (Abb. 8.4).

Der aktuelle RepoTREND-Konverter basiert auf der Version aus dem Jahr 2003, ist in Fortran90 programmiert und verlangt ein Linux-Betriebssystem. Der Umgang mit dem Konverter ist intuitiv, die genaue Beschreibung über die Funktionsweise kann der Programmbeschreibung entnommen werden.

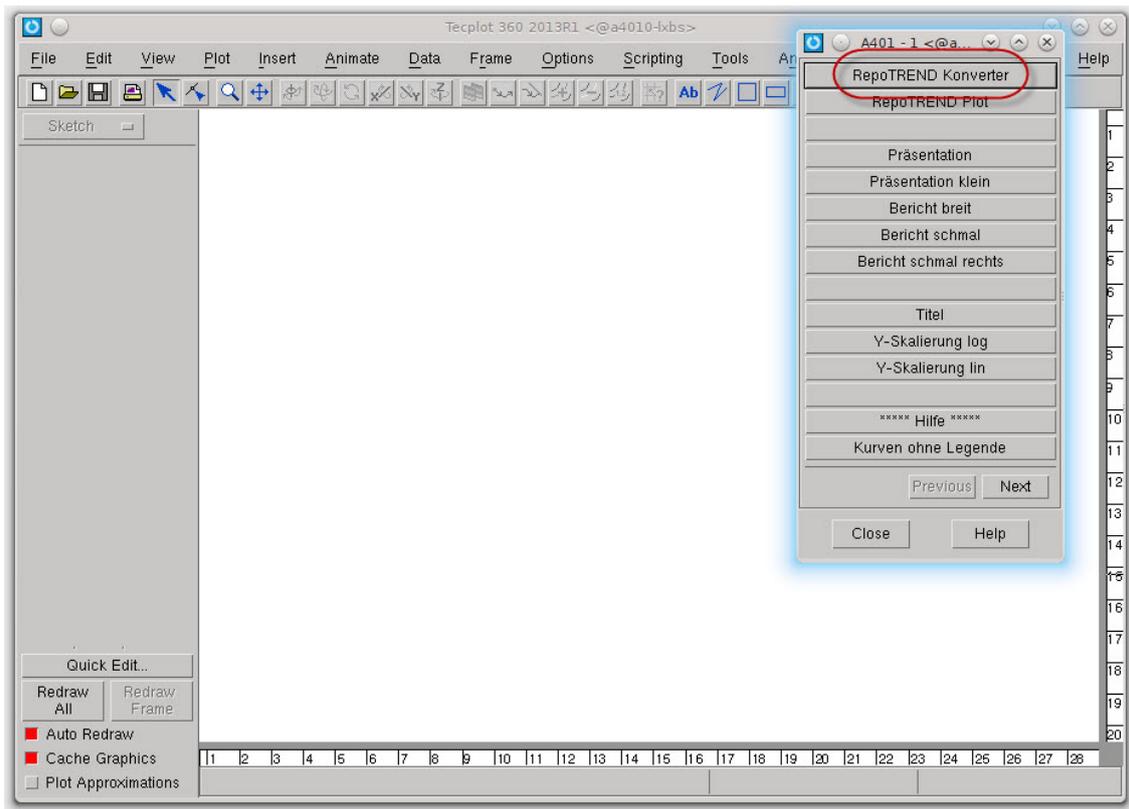


Abb. 8.1 Starten vom Konverter

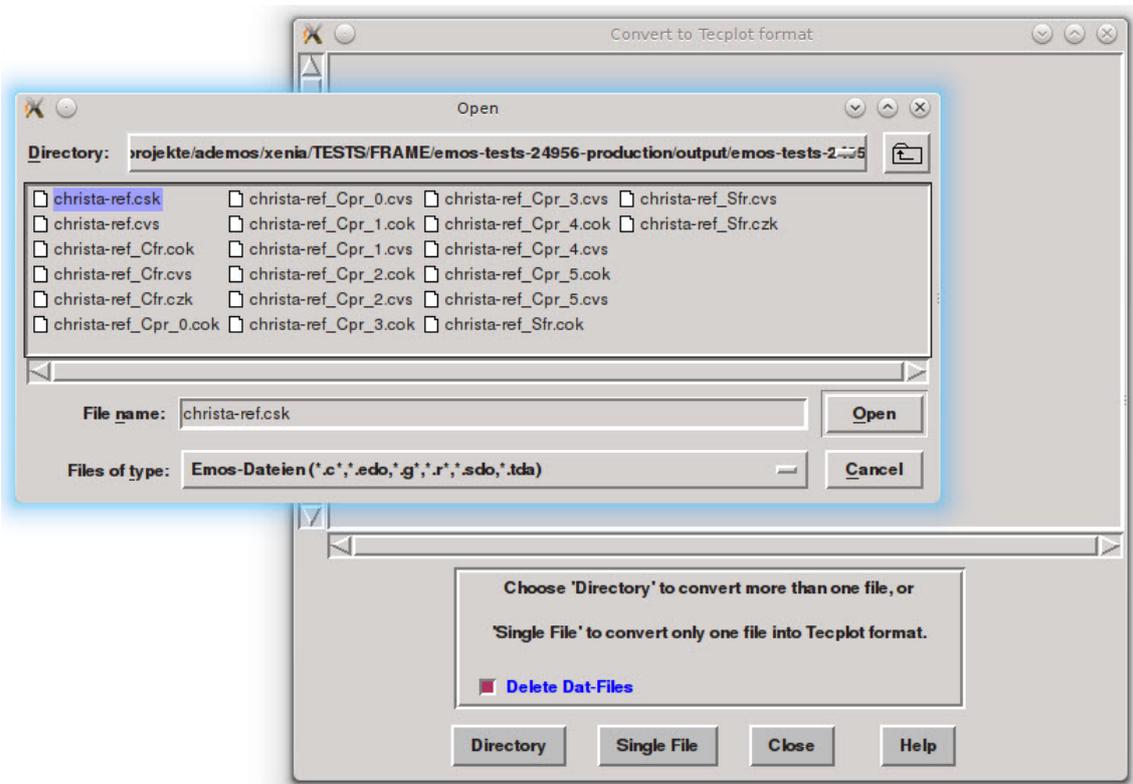


Abb. 8.2 Auswahl der zu konvertierenden Dateien

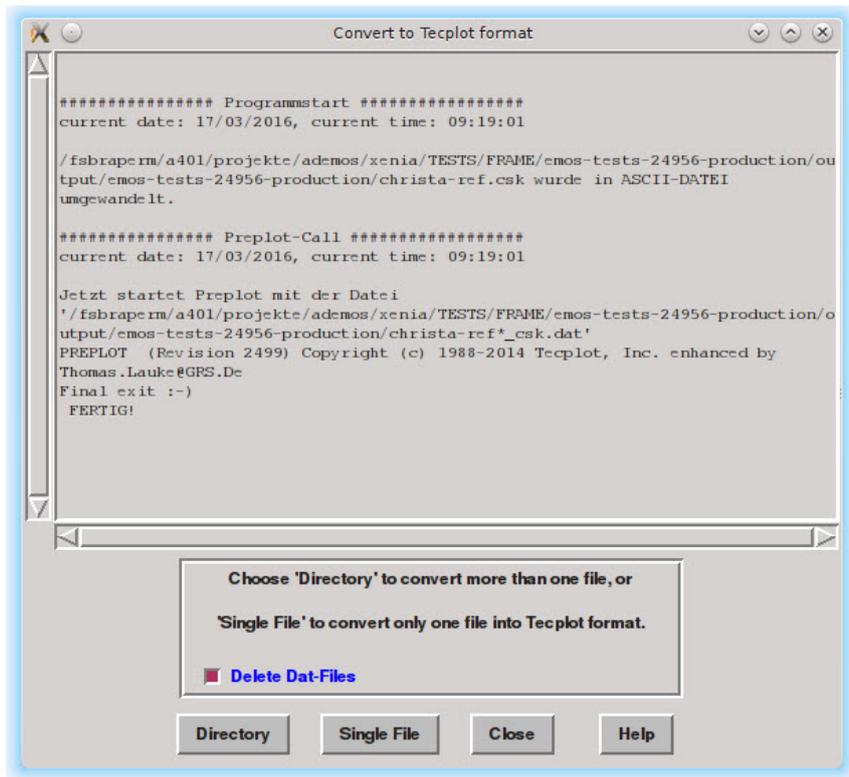


Abb. 8.3 Abschluss eines Konvertierungsvorgangs

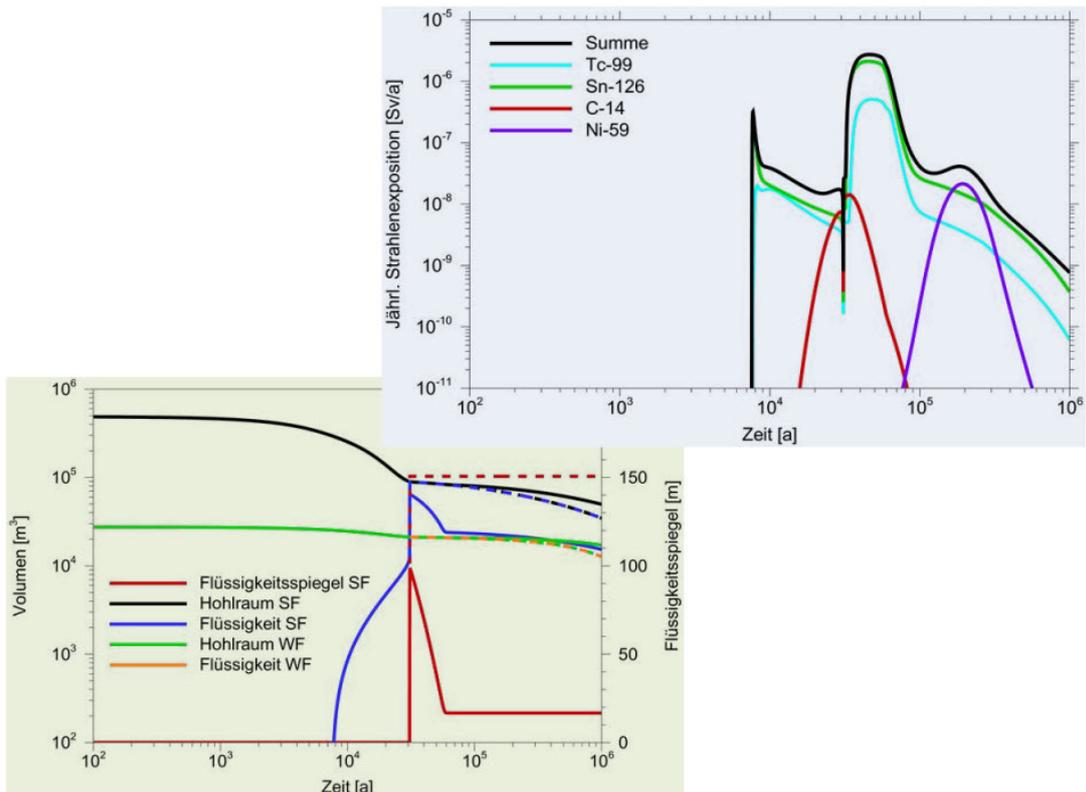


Abb. 8.4 Grafische Ausgabe von Rechenergebnissen

9 Ablauf eines RepoTREND-Rechenlaufs

Der generelle Ablauf bei der Arbeit mit RepoTREND ist folgender: Die Programmparameter werden über die grafische Benutzeroberfläche XENIA eingegeben, die an eine Datenbank angebunden ist. Die eingegebenen Daten werden beim Starten einer Simulation automatisch in eine programmkonforme Eingabedatei im bekannten JSON-Format zusammengefasst. Die Module kommunizieren über einheitliche Dateischnittstellen. Die Steuerung des Programmablaufs erfolgt über ein Scriptprogramm, welches die einzelnen Module nacheinander aufruft und die korrekte Datenübergabe sicherstellt. Die Rechenergebnisse werden in Ausgabedateien in bestimmten Formaten zusammengefasst und können grafisch dargestellt werden.

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

9.1 Deterministischer Rechenlauf

Bei einem deterministischen Rechenlauf werden die Rechenmodule einmal in der festgelegten Reihenfolge ausgeführt. Die Eingangsdaten werden mit der grafischen Bedienoberfläche XENIA erstellt. Zentrales Element ist die sequentielle Abarbeitung der Rechenmodule für das Nahfeld, das Fernfeld und die Biosphäre. Die Ausgangsgrößen eines Rechenmoduls – Schadstoffströme und Schadstoffkonzentrationen – sind Eingangsgrößen des jeweils nachfolgenden Moduls. Die Ausgangsgrößen sind gleichzeitig die Eingangsdaten für den RepoTREND-Konverter. Neben der Ausgabe von Rechenergebnissen sind umfassende Möglichkeiten für eine Kontrollausgabe der Eingangsdaten vorgesehen. Durch eine entsprechende Auswahl der Steuerparameter im entsprechenden Modul in XENIA werden diese Kontrollausgaben aktiviert. In Abb. 9.1 ist der schematische Ablauf eines deterministischen Rechenlaufs dargestellt.

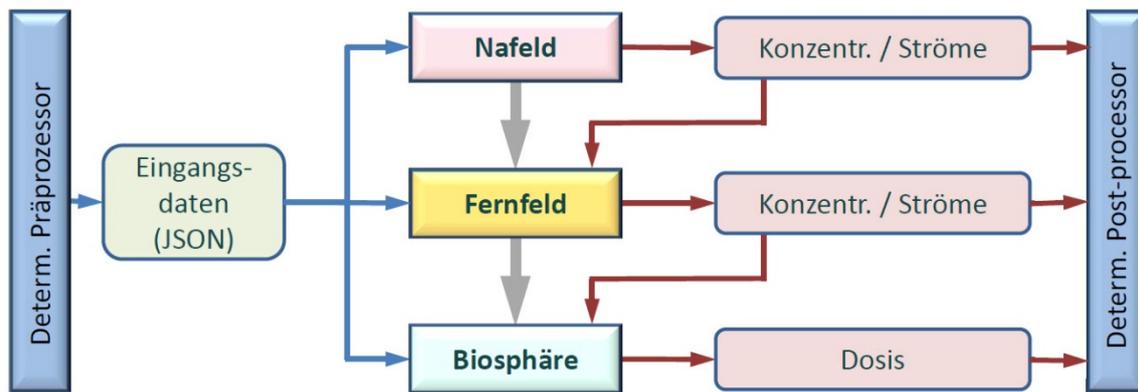


Abb. 9.1 Ablauf eines deterministischen Rechenlaufs

9.2 Statistischer Rechenlauf

Eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wird typischerweise anhand eines statistischen Rechenlaufs durchgeführt. Der Vorgang erfolgt in drei Schritten, die jeweils unabhängig voneinander, jedoch unter Einhaltung der Reihenfolge auszuführen sind:

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

Diese Arbeitsschritte werden durch Bestandteile des statistischen Rahmen RepoSTAR /BEC 16/ gewährleistet.

Zur Ziehung der Stichprobe dient das Programm *pre-statist*. Die Dateneingabe für das Programm *pre-statist* erfolgt über die Benutzeroberfläche XENIA. Dafür existiert ein XENIA-Modul, das den Namen *statist* trägt. Dieses kann als erstes Modul in einen statistischen Rechenlauf eingebunden oder als separater Rechenlauf angelegt werden. *pre-statist* greift auf die externe Bibliothek *Simlab 4* zu, welche ihrerseits Skripte einbindet, die in der Programmiersprache R verfasst sind. Die Parametersätze werden in eine Ausgabedatei geschrieben.

Das Modul *statist-control* übernimmt die Ausführung einzelner Spiele. Für jedes Spiel erzeugt das Programm aus der JSON-Originaldatei des Rechenlaufs eine spezifisch modifizierte JSON-Datei, in der die zu variierenden Parameter durch einen entsprechenden Datensatz aus der Stichprobenziehung definiert sind. Die modifizierte JSON-Datei wird der Rechenmodulkette für die Datenversorgung übergeben. Der Ablauf je-

des einzelnen Spiels entspricht der Beschreibung eines deterministischen Rechenlaufs im Abschnitt 9.1.

Nach Beendigung eines statistischen Rechenlaufs stehen dem Anwender Dateien zur Verfügung, in denen die über alle durchgeführten Spiele gesammelten Daten für alle Nuklide und alle Zeitpunkte enthalten sind.

Die Auswertung der Ergebnisse eines statistischen Rechenlaufs einschließlich der Erzeugung grafischer Darstellungen erfolgt nicht im Rahmen des Rechenlaufs selbst, sondern nach Abschluss desselben nach den Vorstellungen des Benutzers. Eine solche Auswertung stellt selbst keinen Rechenlauf dar, sondern wird unabhängig und interaktiv auf der Basis der erzeugten Ergebnisse durchgeführt. Hierzu dient das Programm *RepoSUN* (**Repo**STAR tool for **S**ensitivity and **UN**certainty analysis), welches als separates Programm mit eigener Bedienoberfläche ausgeführt ist (Abb. 9.2). Die Ergebnisse einer Auswertung können in Dateien in unterschiedlichen Formaten (wie das Format zur grafischen Darstellung in Tecplot® oder Formate für ein Tabellenkalkulationsprogramm) zur weiteren Analyse ausgegeben werden. Der Ablauf eines probabilistischen Rechenlaufs ist in Abb. 9.3 schematisch dargestellt.

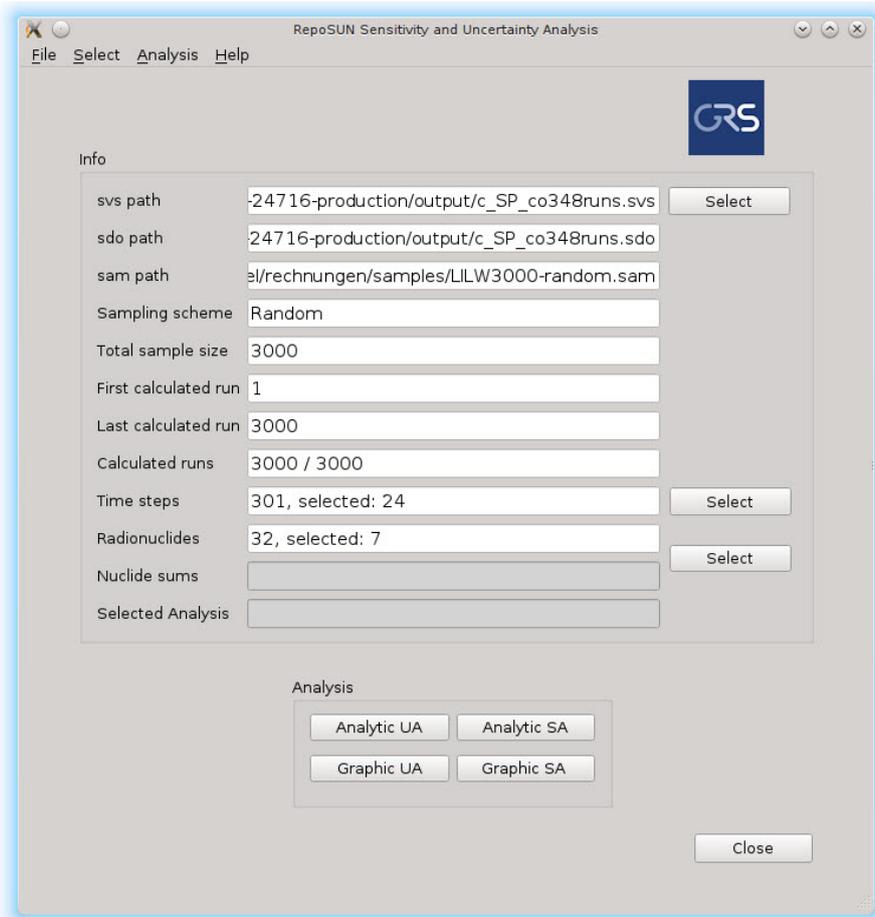


Abb. 9.2 Hauptfenster des RepoSUN-GUI

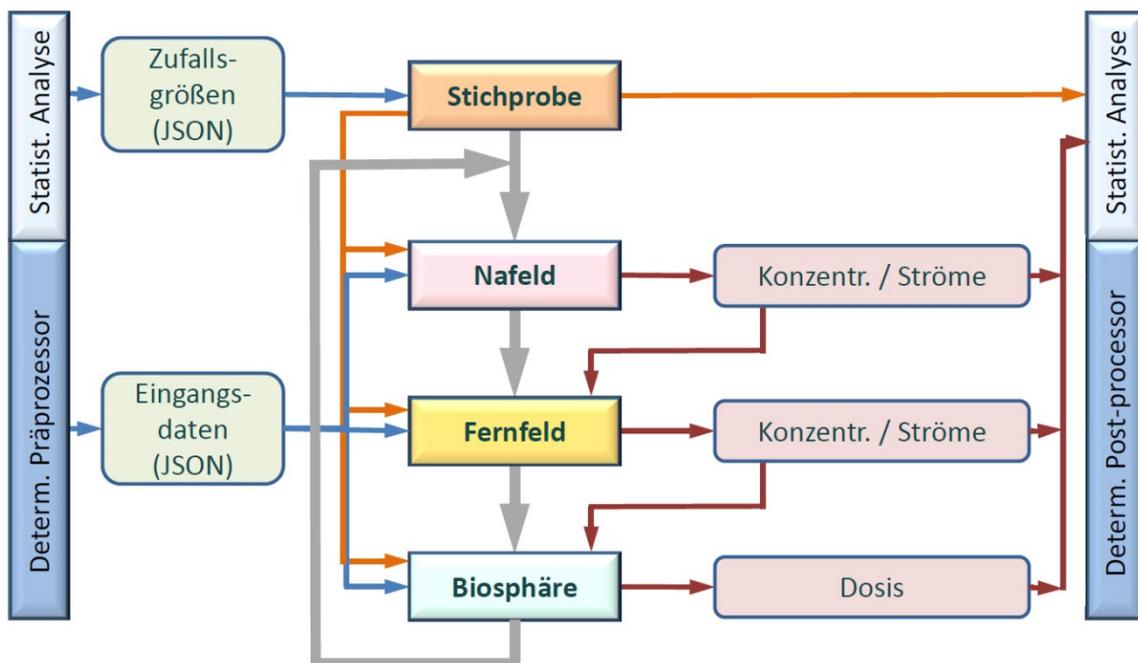


Abb. 9.3 Ablauf eines statistischen Rechenlaufs

10 Qualitätsmanagement

Bei derartiger Komplexität der Software ist die Qualitätssicherung (QS) in jedem Arbeitsschritt unabdingbar. Alle Arbeitsprozesse bei der Softwareentwicklung, ihre Abfolge und die Qualitätsanforderungen sowie Qualitätssicherungsmaßnahmen sind in einem projektspezifischen Qualitätsmanagementhandbuch festgehalten. Die festgelegten Regelungen betreffen die Neuentwicklung von Routinen, Weiterentwicklung, Fehlerbehebung, Aufnahme neuer Anforderungen sowie alle damit in Verbindung stehenden Tätigkeiten. Das Ziel ist, einen Programmcode zu schaffen, der einem hohen Qualitätsstandard genügt. Dabei kommt es besonders auf Transparenz und Nachvollziehbarkeit an, damit eine effektive Wartung auch bei Wechsel von Bearbeitern über einen langen Zeitraum gewährleistet ist.

Die QS-Maßnahmen umfassen zwei Bereiche:

- *Konstruktive Qualitätssicherung*: Festlegung der Vorgehensweisen für den Software-Entwicklungsprozess. Dazu gehören Methoden, Werkzeuge, Richtlinien, Checklisten usw., die dafür sorgen, dass sowohl das Produkt als auch der Entstehungsprozess den Qualitätsanforderungen entsprechen.
- *Analytische Qualitätssicherung*: Beurteilung des existierenden Qualitätsniveaus. Dies wird durch das Testen von System-Bestandteilen und des Gesamtsystems erreicht. Dabei ist dafür zu sorgen, dass alle Anforderungen durch die Tests abgedeckt werden, und dass es Möglichkeiten für Regressionstests gibt.

Somit stellen die analytischen Maßnahmen sicher, dass ein Qualitätsstandard erreicht ist. Durch eine möglichst gute konstruktive Qualitätssicherung kann der Aufwand für die analytische Qualitätssicherung gering gehalten werden.

Entsprechend diesem QS-Handbuch wurde die Standardisierung der Arbeitsprozesse bei der Entwicklung von RepoTREND etabliert. Die Programmcodeentwicklung erfolgt in einer festgelegten Entwicklungsumgebung (*Eclipse MWW EC/*). Versions- und Konfigurationsmanagement (mit *Subversion MWW SVN/*) sowie Nachverfolgung der Behandlung von Fehlern und Anforderungen (mit *Bugzilla MWW BUG/*) wurden eingeführt. Umfangreiche Tests auf allen Entwicklungsebenen werden durchgeführt. Eine Bibliothek mit automatischen Tests (speziell Regressionstests) wird gepflegt und weiterentwickelt. Codereviews werden durchgeführt. Zeitgemäße Dokumentation des Programmcodes (Codekommentare, die den festgelegten Konventionen entsprechen und

durch externe Tools wie z. B. *Doxygen* ([WWW DOX/](http://www.doxygen.org) erfasst werden können) und der Programmstruktur (mit Hilfe der *UML*-Diagramme, z. B. [/RUP 07/](#)) wird gewährleistet.

11 Zusammenfassung und Ausblick

Mit dem Programmpaket RepoTREND wurde ein leistungsfähiges, anwendungs- und pflegefreundliches Softwaresystem zur Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle im tiefen geologischen Untergrund zur Verfügung gestellt.

Bei der Entwicklung des Programmpakets wurden moderne Anforderungen an die Softwareentwicklung berücksichtigt: von Techniken und Methoden wie objektorientierter Programmierung bei der Entwicklung der grundlegenden Softwarearchitektur bis zum Einsatz höherer Programmiersprachen, die diese Verfahren unterstützen bzw. ermöglichen. Durch die modulare Struktur ist der Programmcode leicht an neue Anforderungen anzupassen.

In der aktuellen Version 4.5 enthält RepoTREND folgende Komponenten:

- eine bezüglich der Datenschnittstellen angepasste und an mehreren Stellen überarbeitete Version des Codes LOPOS zur Simulation von Prozessen in einem Grubengebäude im Salzgestein,
- eine bezüglich der Datenschnittstellen angepasste Version des Codes CLAYPOS zur Simulation einer Radionuklid Ausbreitung aus einem Endlager im Ton- oder Kristallingestein,
- mehrere vollständig neu entwickelte, verwandte Rechenmodule zur Simulation von Transportprozessen in der Geosphäre (GeoTREND-Familie),
- das neu entwickelte Biosphärenmodul BioTREND,
- den neu entwickelten Statistikrahmen RepoSTAR,
- die neue, datenbankgestützte, grafische Benutzeroberfläche XENIA zum Eingeben von Programmparametern und zum Verwalten von Rechenläufen.

Somit ermöglicht das Programmpaket, die komplexen Prozesse in einem Endlagersystem zu modellieren, zu analysieren und dadurch besser zu verstehen. Mit RepoTREND wurden bereits in vergangenen Jahren zahlreiche Anwendungsrechnungen im Zusammenhang mit Forschungs- und Entwicklungsarbeiten erfolgreich durchgeführt (z. B. im Rahmen von solchen Projekten wie URSEL /JOB 16/, ISIBEL /BUH 16/, Kolorado-e /HUB 16/ und /REI 15/, MOSEL /SPI 16/, PASS /RUB 16/, VESPA /BIS 16/).

Mit den Rechenmodulen LOPOS und CLAYPOS werden zwar die wesentlichen Prozesse in einem Endlagersystem im Salzgestein sowie die Schadstoffverbreitung im Ton- und Kristallingestein erfasst, sie können jedoch eine Reihe von modernen Anforderungen nicht bzw. nicht optimal abdecken. Ihre Weiterentwicklung, sowie Wartung und Fehlersuche erweisen sich als sehr arbeits- und zeitaufwendig. Das neue Nahfeldmodul NaTREND soll die beiden aktuell verwendeten Nahfeldmodule ablösen. Mit der Entwicklung von NaTREND wurde bereits begonnen.

Literaturverzeichnis

- /BEC 16/ Becker, D.-A.: RepoSTAR – Ein Coderahmen zur Steuerung und Auswertung statischer Rechenläufe mit dem Programmpaket RepoTREND, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-411, BMWi-FKZ 02E10367, Braunschweig, 2016, (to be published).
- /BIS 16/ Bischofer, B., Hagemann, S., Altmaier, M., Banik, N., Bosbach, N., Bracke, G., Brendler, V., Curtius, H., Finck, N., Franzen, C., Gaona, X., Geckeis, H., Heberling, F., Herm, M., Kindlein, J., Marsac, R., Metz, V., Muñoz, A., Rozov, K., Schäfer, Th., Scharge, T., Totskiy, Y., Wiedemann, M., Yalcintas, E.: Behaviour of long-lived fission and activation products in the near field of a nuclear waste repository and the possibilities of their retention (VESPA), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Forschungszentrum Jülich, Helmholtzzentrum Dresden-Rossendorf, und Karlsruher Institut für Technologie, GRS-374, BMWi-FKZ 02E10770, 02E10780, 02E10790, und 02E10800, Braunschweig, 2016, (to be published).
- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle, Bonn, Stand: 30. September 2010.
- /BUH 16/ Buhmann, D., Laggiard, E., Rübél, A., Spießl, S., Wolf, J.: Probabilistische Bewertung von Szenarien in Langzeitsicherheitsanalysen. Ergebnisse des Projekts ISIBEL, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-416, BMWi-FKZ 02E10719, Braunschweig, 2016, (to be published).
- /BUH 99/ Buhmann, D.: Das Programmpaket EMOS. Ein Instrumentarium zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-159, Braunschweig, 1999.
- /HIR 99/ Hirsekorn, R.-P., Boese, B. und Buhmann, D.: LOPOS: Programm zur Berechnung der Schadstofffreisetzung aus netzwerkartigen Grubengebäuden, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-157, Braunschweig, 1999.

- /HUB 16/ Huber, F., Schäfer, Th., Noseck, U. (eds.): Final report of the Kollorado-e project, KIT Scientific report, March 2016, (to be published).
- /JOB 16/ Jobmann, M., Flügge, J., Hammer, J., Krone, J., Kühnlenz, T., Meleshyn, A., Wolf, J.: Site-specific evaluation of safety issues for high-level waste disposal in crystalline rocks, Technical Report, DBE TECHNOLOGY GmbH, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, BMWi-FKZ 02E10750 (GRS), 02E10760 (DBETEC), Peine, 2016, (to be published).
- /REI 11/ Reiche, T., Becker, D., Buhmann, D., Lauke, T.: Anpassung des Programmpakets EMOS an moderne Softwareanforderungen, ADEMOS – Phase 1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3623, BMWi-FKZ 02E10367, Braunschweig, 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, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-333, BMWi-FKZ 02E10367, Braunschweig, 2014.
- /REI 14a/ Reiche, T., Becker, D.-A.: Berechnung radiologischer Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Stoffe aus einem Endlager in die Biosphäre mit dem Programm BioTREND, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-345, BMWi-FKZ 02E10367, Braunschweig, 2014.
- /REI 15/ Reiche, T., Noseck, U., Schäfer, T.: Migration of Contaminants in Fractured-Porous Media in the Presence of Colloids: Effects of Kinetic Interactions, *Transport in Porous Media*, 111(1), 143–170, 2015.
- /RUB 16/ Rübél, A., Buhmann, D., Kindlein, J., Lauke, Th.: Full scale demonstration of plugs and seals - Report on conceptual and integrated modelling activities, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-415, BMWi-FKZ 02E11142, Braunschweig, 2016, (to be published).

/RUP 07/ Rupp, Ch., Queins, S., Zengler, B.: UML 2 glasklar, Hanser-Verlag, München, 2007.

/SPI 16/ Spießl, S., Becker, D.-A.: Investigation of Modern Methods of Probabilistic Sensitivity Analysis of Final Repository Performance Assessment Models (MOSEL), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-412, BMWi-FKZ 02E10941, Braunschweig, 2016, (to be published).

/WWW BUG/ <https://www.bugzilla.org/>, Homepage von Bugzilla.

/WWW DOX/ <http://www.stack.nl/~dimitri/doxygen/index.html>, Homepage von Doxygen.

/WWW EC/ <http://www.eclipse.org/>, Homepage von Eclipse.

/WWW JS/ <http://www.json.org/json-de.html>, Homepage des Formats JSON.

/WWW SVN/ <https://subversion.apache.org/>, Homepage Subversion.

/WWW TEC/ <http://www.tecplot.com/>, Homepage von Tecplot®.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Rechenmodule von RepoTREND für verschiedene Teilbereiche von Endlagern	1
Abb. 1.2	RepoTREND Version 4.5.....	2
Abb. 2.1	Grafische Benutzeroberfläche XENIA.....	6
Abb. 2.2	Ansicht für Eingaben zum Starten von Rechenläufen	8
Abb. 2.3	Beispiel einer JSON-Datei	9
Abb. 2.4	Schematische Darstellung der Einbindung der Datenbank	9
Abb. 3.1	Schematische Darstellung eines Grubengebäudes.....	14
Abb. 3.2	Einige Programmstrukturen für NaTREND als UML-Diagramm	16
Abb. 4.1	Skizze der Ausbreitung von Schadstoffen im Deckgebirge	17
Abb. 5.1	Nutzungs- und Ingestionspfade bei der Ausbreitung von Radionukliden in der Biosphäre	19
Abb. 8.1	Starten vom Konverter.....	26
Abb. 8.2	Auswahl der zu konvertierenden Dateien.....	26
Abb. 8.3	Abschluss eines Konvertierungsvorgangs	27
Abb. 8.4	Grafische Ausgabe von Rechenergebnissen	27
Abb. 9.1	Ablauf eines deterministischen Rechenlaufs.....	30
Abb. 9.2	Hauptfenster des RepoSUN-GUI	32
Abb. 9.3	Ablauf eines statistischen Rechenlaufs.....	32

Abkürzungsverzeichnis

ADEMOS	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen
BioTREND	BIOsphärenmodul von RepoTREND
CLAYPOS	model for CLAY type rePOSitory
COFRAME	COlloid facilitated transport in FRActured-porouse Media
DKF	Dosiskonversionsfaktor
EMOS	Endlagerbezogene MOdellierung von Szenarien
FRAME	transport in FRActured-porouse MEdia
GeoTREND	GEOsphärenmodul von RepoTREND
LOPOS	model for LOOp like structured rePOSitory
NaTREND	NAh(NeAr)feldmodul von RepoTREND
POSA	transport in POrous SAaturated media
RepoSTAR	RepoTREND framework for STATistic Runs
RepoSUN	RepoSTAR tool for Sensitivity and UNcertainty analysis
RepoTREND	Transport and REtention of Non-dacaying and Decaying contaminants in final REPOSitory
XENIA	flexible ENhanced Interface Application

Stichwortverzeichnis

A

Ablaufsteuerung.....	23
ADEMOS.....	3
analytische Qualitätssicherung	33
Auswertung	30, 31

B

Biosphären-Dosiskonversionsfaktoren	19
Biosphären-Organodosiskonversionsfaktoren	19
BioTREND	2, 19

C

CLAYPOS.....	2
COFRAME	2, 18

D

Datenbank.....	8
deterministischer Rechenlauf	29
DKF	19
Dosiskonversionsfaktoren.....	19

E

EMOS	3
Expositionspfade	19

F

FRAME.....	2, 18
------------	-------

G

GeoTREND.....	17
GeoTREND-COFRAME	2, 18
GeoTREND-FRAME.....	2, 18
GeoTREND-POSA.....	2, 18
globale Sensitivitätsanalyse	21

K

Konfigurationsdatei.....	6
konstruktive Qualitätssicherung	33
Konverter	25

L

LOPOS	2, 13
-------------	-------

M

Modul in XENIA.....	6
Modulbeschreibung	6

N

Nahfeldmodule	13
NaTREND.....	14

O

ODKF	19
Organodosiskonversionsfaktoren	19

P

POSA	2, 18
Postprocessing	25
pre-statist.....	30
Python.....	23

Q

Qualitätsmanagement	33
---------------------------	----

R

RepoSTAR.....	2, 21
RepoSUN.....	31
RepoTREND.....	1
RepoTREND-Konverter.....	25

S

Sensitivitätsanalyse.....	21
Simlab 4	30
Skriptprogramm.....	23
Spiel	29
statist, XENIA-Modul.....	30
statist-control.....	30
statistischer Rechenlauf.....	29
Stichprobenziehung	30

T

Tecplot® 25

U

Ungewissheitsanalyse 21

Unsicherheitsanalyse 21

X

XENIA 2, 5

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

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