

KfK 3008  
Oktober 1980

# **Analyse der Migrationspfade von Plutonium in einem terrestrischen Ökosystem**

R. Avenhaus, S. Fenyi, A. T. Jakubick,  
mit einem Anhang von J. Ludewig  
Institut für Datenverarbeitung in der Technik  
Projekt Spaltstoffflußkontrolle

**Kernforschungszentrum Karlsruhe**



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Datenverarbeitung in der Technik

Projekt Spaltstoffflußkontrolle

KfK 3008

Analyse der Migrationspfade von Plutonium

in einem terrestrischen Ökosystem

von

R. Avenhaus, S. Fenyi, A.T. Jakubick

mit einem Anhang von

J. Ludewig

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

## Zusammenfassung

Es wird ein lineares Bilanzierungsmodell für die Migration des Plutoniums in der Natur aufgestellt, wobei die kinetischen Konstanten des Modells den Messungen des Fallout-Plutoniums entnommen werden. Solch ein konsistentes Modell für das Fallout-Plutonium eignet sich u.a. für die Analyse der Migrationspfade von industriell freigesetztem Plutonium.

In dieser Arbeit wird die Methodik zur Analyse von Boxenmodellen weiterentwickelt. Die Zusammenhänge zwischen Boxenmodellen und Traceranalyse werden diskutiert. Die numerischen Rechnungen, die sich auf mitteleuropäische Breiten beziehen, haben illustrativen Charakter.

## Analysis of plutonium pathways in a terrestrial ecosystem

### Abstract

A linear balance model for the plutonium pathways in the nature is developed, the kinetic model constants of which are taken from measurements of fallout plutonium. Such a consistent model for the fallout plutonium may be used, e.g., for the analysis of the pathways of industrially released plutonium.

In this paper the methodology of the analysis of box models is further developed. The relation between box models and tracer analysis is discussed. The numerical calculations which refer to middle European latitudes are of illustrative nature.

## Inhalt

	<u>Page</u>
1. Einleitung	1
2. Aufstellung eines Boxen-Modelles für das Ökosystem	3
2.1. Quelle	3
2.2. Umweltkonzentrationen	5
2.3. Transferdaten	9
2.4. Schlußbemerkungen	14
3. Mathematische Auswertung des Boxenmodelles	20
3.1. Differentialgleichungssystem für ein n-Boxen-Modell	20
3.2. Gleichgewichtszustände	21
3.3. Zeitverhalten des Systems	29
4. Verifikation des Boxenmodelles für den Plutonium-Kreislauf	34
4.1. Boxenmodelle für Konzentrationen	34
4.2. Numerische Ergebnisse	37
Literatur	41
Anhang von J. Ludewig	44
Kurze Beschreibung eines Programmsystems zur interaktiven Berechnung von Inventar-Vektoren	

## 1. Einleitung

In Ergänzung des Plutonium-Flusses im Kernbrennstoff-Kreislauf der kerntechnischen Industrie wird sich in der Umgebung von Plutonium-verarbeitenden Anlagen aufgrund unvermeidbarer Freisetzungen auch ein Plutonium-Kreislauf in der Umwelt einstellen. Diesen äußeren Plutonium-Kreislauf gilt es zu quantifizieren, damit effektive Überwachungskonzepte entworfen werden können.

Eine zuverlässige Methode zur Gewinnung der für die Entwicklung eines ökosystemanalytischen Modelles notwendigen Daten besteht darin, die Verteilung des Fallout-Plutoniums aus den Kernwaffentests der vergangenen Jahre zu rekonstruieren. Im Falle eines Erfolges kann das Modell dann bei der Kontrolle der Migrationspfade des industriell freigesetzten Plutoniums benutzt werden. Dieser Weg ist möglich, da

- die Menge des durch Kernwaffentests freigesetzten Plutoniums gut bekannt ist, da
- die Plutonium-Konzentration in repräsentativen Teilbereichen der Umwelt gemessen wurde, und da
- die Transferkonstanten in erster Näherung abgeschätzt werden können.

In dieser Arbeit wird die Methodik der Erstellung von Boxenmodellen entwickelt: Es werden die für die Beschreibung der Migrationspfade relevanten Boxen (auch Compartments genannt) definiert, und es wird ein lineares Differentialgleichungssystem für die *Massentransfers* zwischen den Boxen aufgestellt. (Da ähnliche Differentialgleichungssysteme oft für Konzentrationsänderungen benutzt werden, wird die Beziehung zwischen diesen beiden Beschreibungsarten kurz diskutiert).

Da die mathematische Analyse solcher Differentialgleichungssysteme im Zusammenhang mit der Analyse des globalen CO<sub>2</sub>-Problems ausführlich dargestellt wurde, werden in dieser Arbeit nur solche Fragestellungen behandelt, die sich erst hier ergaben, z.B. die Implikationen von komplexen Eigenwerten der Matrix der Transferkonstanten.

Die Ergebnisse der Modellbildung und der Analyse des zugehörigen Differentialgleichungssystems wurden in illustrativer Weise auf Mitteleuropa angewandt (die Daten zur Ernährung beruhen auf bundesdeutschen Statistiken,

während die Meßdaten bezüglich Atmosphäre und Boden für Mitteleuropa repräsentativ sind). Es wurde ein *konsistenter Satz* von Gleichgewichtsinventaren und von Transferkonstanten bestimmt, und es wurde die Zeitkonstante der Einstellung des Gleichgewichtes nach einer Störung abgeschätzt.

Es muß betont werden, daß die zahlenmäßigen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit rein illustrativen Charakter haben; bevor konkrete Aussagen für eine vorgegebene Region gemacht werden können, bedarf es unter anderem einer viel genaueren Datenanalyse. Aus diesem Grunde wurde auch die eingangs erwähnte Rekonstruktion der sich aufgrund des Fallout-Plutoniums einstellenden Konzentrationen bislang verzichtet; sie soll wegen ihres hohen rechentechnischen Aufwandes Gegenstand zukünftiger Arbeiten sein.

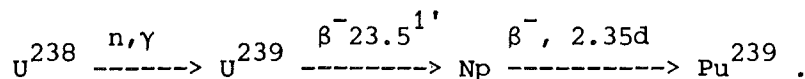
## 2. Aufstellung eines Boxen-Modelles für das Ökosystem

Die Beschreibung der Migrationspfade von Plutonium in einem terrestrischen Ökosystem erfordert die quantitative Angabe des in das Ökosystem gelangenden Plutonium (d.h. die Angabe der Quelle), die Definition der Boxen, in denen sich Plutonium befinden kann, sowie die Angabe der Plutonium-Transfers zwischen den Boxen. Liegen Angaben über die derzeitigen Plutonium-Konzentrationen in den einzelnen Boxen vor, so lassen sich die aus dem Modell errechneten Konzentrationen mit diesen vergleichen (dies soll einer späteren Arbeit vorbehalten bleiben).

### 2.1. Quelle

In den Jahren 1950-1962 wurden über 400 Kernwaffentests in der Atmosphäre durchgeführt /1/. Die Stärke der Explosionen entsprach ca. 511 Megatonnen Energieäquivalent TNT, es wurden ca.  $8 \pm 3$  Tonnen  $\text{Pu}^{230}$  und  $\text{Pu}^{240}$  freigesetzt. Die intensivste Versuchstätigkeit lag in den Jahren 1957/58 und 1961/62, die letzten oberirdischen Tests der USA, UK und UdSSR wurden im Dezember 1962 abgeschlossen. Die fortdauernden Kernwaffenversuche von Frankreich auf der Südhalbkugel und von China auf der Nordhalbkugel, die den Gehalt an freigesetztem Plutonium um ca. 200 kg vermehrten, führten lediglich zu einer vernachlässigbaren Vermehrung der oben genannten Menge.

Das freigesetzte Plutonium stellt zum Teil das ungespaltene  $\text{Pu}^{239}$  der Bomben dar, da der Wirkungsgrad der getesteten Kernwaffen bei 50 % lag, zum Teil (insbesondere bei den thermonuklearen Explosionen) entstand es durch multiplen Neutroneneinfang entsprechend der Kette



Während der Verdampfungsphase läuft bei einer Kernexplosion unter den Nukliden eine Fraktionierung ab, bei der  $\text{Pu}^{239}$  der Gruppe von  $\text{Zr}^{95}$ ,  $\text{Mo}^{99}$ ,  $\text{Ce}^{144}$ ,  $\text{Nd}^{147}$  und  $\text{Eu}^{156}$  folgt und von den anderen Nukliden bis zu einem mehr oder weniger konstanten Verhältnis getrennt wird. Die größte Trennung wird gegenüber  $\text{Sr}^{90}$  erreicht, wobei sich ein  $\text{Pu}^{239}/\text{Sr}^{90}$ -Verhältnis von 0.017 einstellt (zum Vergleich:  $\text{Pu}^{239}/\text{Zr}^{95}=1.04$ ). Die Verfolgung dieses Isotopenverhältnisses entlang des Migrationspfades von Plutonium ist vor allem bei der



Kontrolle des Plutonium-Inventars in einzelnen Bereichen der Umwelt von Bedeutung.

Während der Kondensationsphase lagert sich das Plutonium an Aerosolteilchen an. Der weitere Weg der Aerosolteilchen hängt von der Stärke und Höhe der Explosion ab: Kernspaltungsbomben im Kilotonnenbereich injizieren das Plutonium direkt in die Troposphäre, die energiereicheren thermonuklearen Waffen im Megatonnenbereich befördern das Plutonium dagegen bis in die Stratosphäre. Da etwa 60 % der Tests (318 Mt) mit thermonuklearen Waffen durchgeführt wurden, kann die Stratosphäre als ein Reservoir von radioaktiven Aerosolen betrachtet werden, aus dem die Pu-aktiven Teilchen nur langsam ausgeschieden werden. Die Abgabe der Aerosole aus der Stratosphäre erfolgt nach einem spezifischen, breitenabhängigen Muster. Infolgedessen ist die Fallout-Konzentration, die der Atmosphäre und damit der Erdoberfläche zugeführt wird, nicht einheitlich: Sie weist ein Maximum auf der nördlichen Hemisphäre in mittleren Breitengraden aus, ein weiteres Maximum in geringerer Höhe - etwa ein Fünftel des Maximums auf der nördlichen Hemisphäre - ist in der gemäßigten Zone der südlichen Hemisphäre zu beobachten. Die Bilanz der Pu<sup>239,240</sup>-Verteilung lautet folgendermaßen

256±33	KCi	Pu <sup>239,240</sup>	auf der Nordhalbkugel
69±14	KCi	Pu <sup>239,240</sup>	auf der Südhalbkugel
<hr/>			
325±36	KCi	Pu <sup>239,240</sup>	auf der Erdoberfläche

Die angegebenen Werte wurden anhand der weltweiten Messungen der Pu-239, 240 Konzentration im Boden /1/ abgeleitet. Gleichzeitig muß angenommen werden, daß vor der Ablagerung die gleichen Mengen durch die Atmosphäre durchgegangen sind.

## 2.2. Umweltkonzentrationen

Wir definieren jetzt die einzelnen Boxen und diskutieren deren Inventare. Die Nummern in den Klammern hinter den Boxen entsprechen den Nummern der Boxen in Figur 2.

### *Atmosphäre (1)*

Den zeitlichen Verlauf der Pu-Konzentration in der Atmosphäre während der letzten 25 Jahre findet man z.B. bei Jakubick /2/. Diese Konzentration erreichte im Jahr 1963 ein Maximum von ca.  $6 \cdot 10^{-5}$  [Bq/m<sup>3</sup>] in Heidelberg. Die integrierte Aktivitätskonzentration zwischen 1954 und 1975 in Heidelberg betrug ca.  $2.2 \cdot 10^{-4}$  [Bq/m<sup>3</sup>].

### *Anorganischer Boden (2) und Wurzelzone mit organischem Boden (3)*

Eine Übersicht der Pu<sup>239</sup>- und der Pu<sup>238</sup>-Konzentration im Boden in Deutschland gibt Tabelle 1. Aus der Tiefenverteilung in den Jahren 1977 und 1979 ist ersichtlich, daß ca. 90 % der Kontamination oberhalb von 10 cm zu finden ist, d.h. also dort, wo der organische Anteil stark ist. Meßbare Konzentrationen sind jedoch bis zur Tiefe von 30 cm feststellbar. Die Kontamination dieser Schicht beträgt  $(3.9-6.6) \cdot 10^7$  [Bq/km<sup>2</sup>].

Es läßt sich zeigen, daß die Plutonium-Menge im Boden in Abhängigkeit von der geographischen Breite, modifiziert durch die lokale Niederschlagsmenge, variiert. Infolgedessen findet man im Norden Deutschlands einen höheren Plutonium-Pegel als im Süden (siehe Figur 1). Zusätzliche Änderungen der Plutonium-Konzentration ergeben sich aufgrund der Abwanderung in die Tiefe. Diese Abwanderung erfolgt nach Jakubick et.al /3/ im Mittel mit einer Rate von 0.5 [cm/a].

Detaillierte Untersuchungen der Tiefenverteilung des Plutonium zeigen, daß die organische Substanz in der Wurzelzone eine etwa zehnmal höhere Akkumulation des Plutoniums gegenüber dem tieferen organischen Boden verursacht. Zusätzlich zur direkten Kontamination wird der Wurzelzone das Plutonium mit der abgestorbenen Biomasse zugeführt. Aufgrund der Biodegradation der organischen Substanz im Boden kann jedoch wieder Plutonium freigesetzt werden.

### *Pflanzliche Nahrung (4) und Tierfutter (5)*

Es ist notwendig, zwischen pflanzlicher Nahrung für Menschen und Futter für Nutztiere zu unterscheiden, da in beiden Fällen unterschiedliche Plutonium-Konzentrationen vorliegen. Der Grund dafür liegt im jahreszeitlich unterschiedlichen Charakter der Kontamination der Nahrungsmittel pflanzlicher Herkunft: Vor Aussaat wird lediglich der Ackerboden direkt kontaminiert. Durch Pflügen wird eine homogene Durchmischung in der Wurzelzone erreicht. Die Aufnahme dieser Kontamination erfolgt später lediglich durch die Wurzel. Während der Vegetationsperiode ist sowohl die Kontamination der Pflanzenoberfläche wie auch die Wurzelaufnahme wirksam.

Durch Aufbereitung der Pflanzen zu Lebensmitteln wird im Gegensatz zum Tierfutter eine Verringerung der Kontamination bewirkt. Weizen und Roggen enthalten beispielsweise 10-15 [fCi Pu<sup>239</sup> pro kg Frischgewicht], aber im Mehl findet man nach Frindik et al. /4/ lediglich 1.4-2.4 [fCi/kg]. Kartoffeln enthalten nach Frindik et al. ca. 2-5 [f(Ci Pu<sup>239</sup> pro kg Frischgewicht)], aber schon durch Waschen sinkt die Plutonium-Konzentration auf ein Drittel ab.

In Gemüse und Obst erreicht die Pu<sup>239</sup>-Konzentration Werte bis zu 10 [fCi/kg]. Hier kann deutlich die Wirksamkeit der Dekontamination durch Aufbereitung gezeigt werden. Bei Äpfeln beträgt die durchschnittliche Pu<sup>239</sup>-Konzentration 1.5 [fCi/kg Frischgewicht], die Konzentration in der Schale beträgt jedoch 13 [fCi/kg] und im Obstinernen nur 0.9 [fCi/kg] entsprechend einem Gewichtsverhältnis von Schale und Inneren von 1:3.7. Für Gemüse gilt i.a., daß die grünen oberirdischen Teile die höhere Konzentration haben, das Verhältnis beträgt nach Gnevshva /6/ etwa 1:5 bis 9. Aus dem Konzentrationsunterschied zwischen Oberfläche und Inneren kann geschlossen werden, daß bei der Kontamination zwei verschiedene Mechanismen gewirkt haben: Im Inneren der Produkte ist lediglich das Plutonium zu finden, das durch die Wurzelaufnahme in die Pflanzen gelangte. Die Oberflächenkontamination, meist durch Resuspension zugeführt, wird nicht an den Menschen weitergegeben. Demgegenüber wird den landwirtschaftlichen Nutztieren die Kontamination des Futters voll zugeführt. Statt der jahreszeitlichen Schwankung der Wirksamkeit einzelner Zufuhrmechanismen wird die Erhöhung der Plutonium-Konzentration im Boden in diesem Fall durch beide Aufnahmemechanismen weitergegeben. Wenn die Futterproduktion im vorgeschlagenen Ökosystem auf die Weide beschränkt bleibt, dann kann Gras als

repräsentativ für Futter angenommen werden. Die mittlere Plutonium-Konzentration von Gras in der Umgebung von Karlsruhe liegt nach Jakubick et al. /30/ bei ca. 20[fCi/kg].

#### *Tierische Nahrung (6)*

Die wichtigsten Lebensmittel tierischer Herkunft sind dem Verbräuche nach Fleisch und Milch. Zwar geht über die Hälfte des Fleischkonsums auf Schweinefleisch zurück, dieses kann jedoch in einem begrenzten Ökosystem nur schlecht behandelt werden, da Schweine überwiegend mit Futter nichtlokaler Herkunft gefüttert werden. Als repräsentativ für die Plutonium-Konzentration im Fleisch von Nutztieren wird daher das Rindfleisch angesehen. Es wird vorausgesetzt, daß das Rindvieh innerhalb des betrachteten Ökosystems weidet. Entsprechend den Messungen von Frindik et al. /7/ findet man 20-45[fCi Pu<sup>239</sup> pro kg Rinderblut (Frischgewicht)]. Rinderleber hat bis zu 120[fCi/kg (Frischgewicht)]. Im Rindfleisch ist Pu<sup>239</sup> kaum nachweisbar. Anhand des Verhältnisses zu anderen Elementen kommt man aber zu einem mittleren Gehalt von 16[fCi Pu<sup>239</sup> pro kg Rindfleisch (frisch)]. Ähnliche Überlegungen führen zu einer Konzentration von 1.7[fCi pro kg Milch]. Die sonstige Verteilung im Tier wird nicht betrachtet, da für den Weitertransport zum Menschen lediglich die Plutonium-Konzentration in Fleisch, Leber und Milch von Bedeutung sind.

Durch die Beschränkung auf ein terrestrisches Ökosystem, bei dem Fisch als Nahrungsmittel vernachlässigt wird, entsteht keine große Verfälschung der Ernährungssituation, da Fisch in der Gesamtnahrung in Deutschland lediglich 1,5 % ausmacht.

#### *Mensch (7)*

Die Verteilung der Plutonium-Konzentration im Menschen ist bekanntlich sehr heterogen. Auf eine getrennte Betrachtung einzelner Organe als separate Boxen wird jedoch verzichtet, da im vorliegenden Fall die Verteilung des Plutonium-Inventars im vorgeschlagenen Ökosystem und nicht die Strahlenbelastung untersucht werden soll. Im übrigen hält sich die vorliegende Betrachtung des Menschen an das ICRP-Standardmodell /8/.

Das inhalierte Plutonium wird zum großen Teil bereits im nasopharyngealem und tracheobronchialen Bereich aufgehalten. Von diesen Organen gelangt das Plutonium zum Teil in den Blutkreislauf, zum Teil in den GI-Trakt.

Das inhalierte Plutonium, das bis in die pulmonare Region gelangt, wird zu ca. einem Viertel in den Lymphdrüsen abgelegt und akkumuliert. Die restlichen drei Viertel werden entweder in das Blut transportiert oder in tracheobronchiale Bereiche zurücktransportiert. Von dort aus wird das Plutonium zum Teil wieder direkt in das Blut und zum Teil in den GI-Trakt befördert.

Vom GI-Trakt wird das meiste Plutonium aus dem Körper ausgeschieden; nur ein Anteil von  $3 \cdot 10^{-5}$  wird in das Blut übernommen.

Die Ingestion führt das Plutonium direkt in den GI-Trakt. Von dort aus wird das meiste aus dem Körper ausgeschieden, nur ein Anteil von  $3 \cdot 10^{-5}$  wird vom Blutkreislauf übernommen. Diese Angabe bezieht sich auf  $\text{PuO}_2$ . Löslichere Plutonium-Formen werden meistens bereitwilliger vom Blut übernommen. Ein Teil davon wird mit dem Urin ausgeschieden. Die bezüglich des Blutpfades wichtigsten Plutonium-akkumulierenden Bereiche sind Nieren, Leber, Knochen und Gonaden.

Die z.Zt. typische Plutonium-Konzentration im Menschen beträgt  $3.1[\text{fCi}/75 \text{ kg}]$ . Nach Einstellung einer Gleichgewichtskonzentration kann mit folgenden, auf das Frischgewicht des Organs bezogenen Konzentrationsverhältnissen gerechnet werden:

Lymphknoten : Lunge : Knochen : Leber : Nieren :  
1 :  $4 \cdot 10^{-3}$  :  $2 \cdot 10^{-3}$  :  $10^{-3}$  :  $10^{-3}$  .

Die mengenmäßigen Verhältnisse des Plutoniums im Körper ergeben ein anderes Bild:

Knochen : Leber : Lunge : Gonaden  
1 : 0.96 : 0.83 : 0.30 .

Aus dem Verhältnis der Plutonium-Konzentration im Gesamtkörper und der Weltbevölkerung zur gesamten auf der Erde freigesetzten Plutoniummenge von 0.3 bis  $0.5[\text{Mio Ci}]$  kann abgeleitet werden, daß ca. der  $10^{-17}$ -te Teil des freigesetzten Plutoniums vom Menschen aufgenommen wurde.

### 2.3. Transferdaten

Wir diskutieren jetzt die möglichen Transfers zwischen den im vorhergehenden Abschnitt definierten Boxen.

#### *Atmosphäre (1) und Boden (2)*

Wir betrachten nur die in enger Wechselwirkung mit dem Boden stehende Atmosphäre in Bodennähe. Für diese Schicht wird angenommen, daß die Aerosolkonzentration durch die bodennahe Luftturbulenz relativ homogen durchmischt ist. Dies bewirkt, daß die Plutonium-Konzentration dieses Teils der Atmosphäre durch die Resuspension auf einem relativ konstanten Niveau gehalten wird. Die Verweilzeit von Plutonium in der betrachteten Luftschicht beträgt nach Jakubick et al. /2/ 4[Tage]. Die Transferkonstante zum Boden hat demzufolge den Wert  $0.25[\text{Tage}^{-1}]$ . Für die Wechselwirkung von Atmosphäre und Boden gilt

$$\begin{aligned} \text{Pu-Inventar der Atmosphäre} \cdot \text{Depositions-Zeitkonstante} &= \\ &= \text{Pu-Inventar des Bodens} \cdot \text{Resuspensions-Zeitkonstante}. \end{aligned}$$

Aus Arbeiten von Jakubick et al. /9/ ist das Verhältnis der Inventare von Atmosphäre und Boden bekannt, es liegt bei  $10^{-10}$ . Die Resuspensionskonstante hat daher den Wert  $0.25 \cdot 10^{-10} [\text{Tage}^{-1}]$ .

Der Mensch atmet täglich  $20[\text{m}^3 \text{Luft}]$  ein, womit der den Depositionsvorgang in einem bestimmten Umkreis beeinflusst. Der Wert der Depositionsgeschwindigkeit von Plutonium beträgt nach Chamberlain und Chadwick /9/ etwa  $432[\frac{\text{m}}{\text{Tag}}]$ . Durch den Menschen wird ein Umkreis von

$$\frac{\text{Inhalationsrate}}{\text{Depositionsrate}} = 0.4629 \cdot 10^{-1} [\frac{\text{m}^2}{\text{Person}}]$$

beeinflusst. Bei einer Bevölkerungsdichte von  $250[\frac{\text{Personen}}{\text{km}^2}]$  kommen bei einer Atmosphäre-Boden-Transferkonstante von  $0.25[\text{Tage}^{-1}]$

$$250 \cdot 0.25 = 62.5 [\frac{\text{Personen}}{\text{km}^2 \text{Tag}}]$$

mit Plutonium aus der Atmosphäre in Kontakt. Sie entziehen der Atmosphäre das Plutonium mit einer Transferkonstante von

$$(0.4629 \cdot 10^{-1}) \cdot (0.625 \cdot 10^{-4}) = 0.289 \cdot 10^{-5} [\text{Tage}^{-1}] .$$

Ähnlich ergibt sich für Rindvieh bei einer Atmungsrate von  $130 \left[ \frac{\text{m}^3}{\text{Tag}} \right]$ , daß ein Umkreis von

$$\frac{130}{432} \frac{\frac{\text{m}^3}{\text{Tag Rindvieh}}}{\frac{\text{m}}{\text{Tag}}} = 0.3009 \frac{\text{m}^2}{\text{Rindvieh}}$$

beeinflußt wird; bei  $219 [\text{Stück Rindvieh pro km}^2]$  und einer Depositions-Transferkonstante von  $0.25 [\text{Tage}^{-1}]$  ergibt sich

$$(0.3009) \cdot (54.75 \cdot 10^{-6}) = 0.1647 \cdot 10^{-4} [\text{Tage}^{-1}]$$

als Wert der Transferkonstanten, mit dem das Rindvieh der Atmosphäre das Plutonium entzieht.

Die Übertragung von Plutonium aus der Atmosphäre auf die Pflanzen ist durch das Produkt der Interzeption von Plutonium pro Zeiteinheit und Bewuchsdichte bestimmt. Martin /11/ bestimmte den Interzeptionsfaktor der Vegetation zu  $0.5 \cdot 10^{-3} [\text{m}^2/\text{g}]$ . Bei einer Plutonium-Verweilzeit in der Atmosphäre von  $4 [\text{Tagen}]$  ergibt dies eine Interzeption von  $0.125 \cdot 10^{-6} [\text{km}^2/\text{kg Tag}]$ . Die Bewuchsdichte der landwirtschaftlich genutzten Fläche beträgt  $0.466 \cdot 10^6 [\text{kg}/\text{km}^2]$ . Daraus ergibt sich der Wert der Transferkonstante zu

$$(0.125 \cdot 10^{-6}) \cdot (0.466 \cdot 10^6) = 0.582 \cdot 10^{-1} [\text{Tage}^{-1}] .$$

Werden keine Unterschiede in der Bewuchsdichte angenommen, so ist die abgeleitete Transferkonstante des Plutonium-Transfer für das Futter und für pflanzliche Lebensmittel gültig.

### *Organischer Boden (Wurzelzone) (3)*

Die Plutonium-Akkumulation in diesem Teil des Bodens kommt zustande durch

- die im Vergleich zum anorganischen Boden unterschiedliche Bindung des Plutonium an die organische Substanz,
- in der toten Biomasse mitgeschlepptes Plutonium, und
- menschliche und tierische Exkremete und Abfallwirtschaft (diese Akkumulation wirkt allerdings nur bis zur Zersetzung der organischen Substanz).

Aus den Messungen von Romney /12/ über die zeitliche Änderung der Plutonium-Aufnahme durch die Pflanzen kann errechnet werden, daß durch die Pflanzenwurzel ein Anteil von ca. 25 % von jedem  $10^{-5}$ -ten Teil des Plutonium-Bodeninventars über ein Jahr aufgenommen wird. Hieraus folgt eine Transferkonstante von  $0.6849 \cdot 10^{-8} [\text{Tage}^{-1}]$ . Dieser Wert kann in erster Näherung trotz bekannter Schwankungen von Pflanze zu Pflanze für Futter und für pflanzliche menschliche Nahrung verwendet werden.

Nach Zersetzen der organischen Substanz, in der sich das Plutonium akkumuliert, werden ca. 99 % des Plutonium-Inventars dem anorganischen Boden zugeführt. Es kann damit gerechnet werden, daß nicht mehr als ca. 1 % durch die entstehenden organischen Lösungen mobilisiert werden. Für den Transfer ergibt sich dann der Wert

$$\frac{0.99}{0.01} * (k_{53} + k_{43}) = 0.1356 \cdot 10^{-5} [\text{Tage}^{-1}] ,$$

wobei  $k_{53}$  und  $k_{43}$  die Transferkonstanten vom Tierfutter und von der pflanzlichen Nahrung zum organischen Boden sind (siehe Figur 2).

#### *Lebensmittel pflanzlicher Herkunft (pflanzliche Nahrung) (4)*

Von den 1.871[kg Nahrung], die der Mensch täglich zu sich nimmt, sind 59.3 % pflanzlicher Herkunft. Die landwirtschaftliche Produktivität beim Anbau von Getreide, Kartoffeln, Gemüse und Obst liegt bei  $0.466 \cdot 10^6 [\text{kg}/\text{km}^2]$ . Bei dieser Produktivität kann ein Mensch pro Tag von  $2.381 \cdot 10^{-6} [\text{km}^2]$  ernährt werden. Bei einer Bevölkerungsdichte von  $250 [\text{Personen}/\text{km}^2]$  ergibt sich ein Wert der Transferkonstante der pflanzlichen Nahrung zum Menschen von

$$2.381 \cdot 10^{-6} * 250 = 0.595 \cdot 10^{-3} [\text{Tage}^{-1}] .$$

Während der Vegetationsperiode erfolgt nach Bulman /13/ die Pu-Abtragung aus der kontaminierten Pflanzenoberfläche mit einer Halbwertszeit von 15 bis 30 Tagen, wobei der höhere Wert von Martin /13/ als realistischer betrachtet wird. Die Transferkonstante von der Pflanzenoberfläche in den anorganischen Boden hat den Wert

$$\frac{\ln 2}{30} = 0.231 \cdot 10^{-1} [\text{Tage}^{-1}] .$$



Den Plutonium-Transfer aus den Pflanzenresten in den organischen Boden berechnen wir mit Hilfe folgender Bilanz:

Dem Menschen werden, wie im vorangehenden Abschnitt gezeigt, lediglich 10 % des in den pflanzlichen Lebensmitteln enthaltenen Plutonium zugeführt. In den organischen Boden gelangen daher 90 % des Plutoniums der pflanzlichen Lebensmittel. Die Transferkonstante dieses Transfers hat daher den Wert

$$\frac{0.9}{0.1} * (k_{24} + k_{74}) = 0.2084 [\text{Tage}^{-1}] .$$

*Tierfutter* (5)

Aus dem Futter bzw. beim Weiden übernimmt das Rindvieh die volle Gras-Kontamination. Der Ablauf der Aufnahme läßt sich folgendermaßen abschätzen: Jedes Stück Rindvieh bekommt 10[kg Gras/Tag]. Bei einer Produktivität von  $10^5$ [kg Gras pro  $\text{km}^2$ ] bedeutet dies  $10^{-4}$ [ $\text{km}^2$  abgegraste Weide pro Tag und Stück Rindvieh]. Da auf 1[ $\text{km}^2$  Weide] 219 Stück Rindvieh kommen, ist die Transferkonstante Weide-Rindvieh

$$10^{-4} \frac{\text{km}^2}{\text{Tag Rindvieh}} * 219 \frac{\text{Rindvieh}}{\text{km}^2} = 0.219 * 10^{-1} [\text{Tage}^{-1}] .$$

Für die Abnahme der Gras-Oberflächenkontamination kann ebenso wie bei den pflanzlichen Lebensmitteln eine Transferkonstante von  $0.231 * 10^{-1}$ [Tage<sup>-1</sup>] angesetzt werden. Der Unterschied zwischen Lebensmitteln pflanzlicher Herkunft und Tierfutter besteht vor allem im Wert des Plutonium-Inventars, da von den Tieren ein höherer Anteil aufgenommen wird als von den Menschen. Es ist realistisch anzunehmen, daß zwei Drittel des Plutonium-Inventars des Futters aufgenommen wird. Daraus folgt für den Rücktransport des Plutonium aus dem abgestorbenen Gras in den organischen Boden

$$\begin{aligned} & \frac{\text{Inventar Futter}}{\text{Inventar Tier}} * (k_{65} + k_{25}) = \\ & = \frac{0.33}{0.66} * (0.219 * 10^{-1} + 0.231 * 10^{-1}) = 0.225 * 10^{-1} [\text{Tage}^{-1}] . \end{aligned}$$

*Lebensmittel tierischer Herkunft (Tierische Nahrung) (6)*

Wie schon im früheren Abschnitt wird das Rindvieh als repräsentativ für landwirtschaftliche Tiere gewählt. Das aufgenommene Plutonium ist im Tier im wesentlichen auf Milch, Leber, Muskeln und Knochen verteilt. Der Plutonium-Pfad zu diesen Organen führt durch den GI-Trakt oder über die Lunge und wird vom Blut verteilt.

Nach Martin et al. /14/ wird das Futter aus dem Kuhmagen mit einer Halbwertszeit von 40[Stunden] ausgeschieden. Die Transferkonstante der Elimination des verarbeiteten Futter aus der Kuh hat daher den Wert

$$\frac{\ln 2}{1.66} = 0.4159[\text{Tage}^{-1}] .$$

Dies ist gleichzeitig der Wert der Transferkonstante für den Teil des Plutonium-Inventars, der nicht durch Lebensmittel tierischer Herkunft in den Menschen, sondern in den organischen Boden gelangt.

Der Mensch bekommt 40.7 % seiner Nahrung in Form von Lebensmitteln tierischer Herkunft. Auf 300[kg Fleisch] und 9.5[kg Leber] pro Stück Rindvieh bzw. 10 kg Milch pro Kuh und Tag stellt dies  $0.246 \cdot 10^{-2}$  [Stück Rindvieh pro Tag und Person] dar. Entsprechend den genannten Dichten von Personen und Stück Rindvieh von  $250 \left[ \frac{\text{Personen}}{\text{km}^2} \right]$  und  $219 \left[ \frac{\text{Stück Rindvieh}}{\text{km}^2} \right]$  lautet der Wert der Transferkonstante

$$0.238 \cdot 10^{-2} \cdot \frac{258}{219} = 0.272 \cdot 10^{-2} [\text{Tage}^{-1}] .$$

*Mensch (7)*

Die mittlere Aufenthaltsdauer der Nahrung im Menschen bis zur Ausscheidung beträgt 0.75[Tage]. Für den Transfer von Menschen in den organischen Boden folgt daraus eine Transferkonstante von

$$\frac{\ln 2}{0.75} = 0.924[\text{Tage}^{-1}] .$$

#### 2.4. Schlußbemerkungen

Im betrachteten Ökosystem wurde auf die Betrachtung der Plutonium-Migrationspfade in einem aquatischen System verzichtet. Dies ist in erster Näherung möglich, weil

- durch den Trinkwasserpfad dem Menschen bedeutend weniger Plutonium zugeführt wird als durch Inhalation und Nahrungsmittelaufnahme, und weil
- wie erwähnt der Anteil der Fische an der Gesamtnahrung in Deutschland nur 1,5 % beträgt.

Dort, wo lokale Abweichungen vom durchschnittlichen Ernährungsmuster existieren, ist die Anwendung des vorgelegten Modelles nicht möglich.

Darüber hinaus wird durch die Beschränkung der Betrachtung auf ein *terrestrisches* Ökosystem die Verteilung der Plutonium-Mengen eingeschränkt, und es werden dadurch die Inventare verfälscht. In einem weiteren Schritt ist also eine erweiterte Betrachtung der Migrationspfade notwendig.

In Tabelle 2 sind die Transferkonstanten  $k_{ij}$  für den Plutonium-Massen-transfer von der j-ten zu der i-ten Box zusammengestellt. Dabei sind die Daten unter Benutzung der im nächsten Kapitel abzuleitenden Zusammenhänge konsistent gemacht worden. In Figur 2 ist das Boxen-Modell für den Plutonium-Massenkreislauf im regionalen Ökosystem graphisch dargestellt.

Tab. 1: Tiefenverteilung von Plutonium in mitteleuropäischen Böden  
(nach eigenen Angaben eines der Autoren (A.J.).

Entnahmestelle (Zuordnung s. unten!)

$^{239, 240}\text{Pu}$ $10^6 \text{ Bq/km}^2$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
0					8.54	11.85	7.92	4.46		.119	4.464	5.320
5	12.37	27.79	27.25	41.68	9.44	13.22	15.61	16.08	28.8	26.740	48.800	19.280
					6.29	17.21	15.13	19.84		2.497	15.45	11.290
					4.84	14.87	11.09	4.97		1.640	7.686	8.134
10	18.21	28.77	20.72	18.65	2.73	10.52	3.78	1.52	18.79	.989	5.449	5.789
					1.61	4.95	3.13	1.27		.581	3.567	2.933
20	14.15	10.82	12.97	9.30	1.44	2.47	2.85	.29		.414	2.533	1.98
					.85	1.33	.39	.16	1.29	.214	2.221	.700
					.91	.46	.86	.07		.236	2.047	.881
20	15.98	7.34	5.28	3.69	.68	.28	.50	.05	.28	2.352	1.793	.624
					.40	.19		.04		.203	1.377	.363
					.23	.21		.05		.126	.870	.169
25	3.69	2.76	2.21	1.90	.16	.05		.03	.19	.193	.690	.142
					.09	.06		.02		.231	.759	.095
30	1.38	.55	.91	.91	.13	.10			.07	2.226	.826	-
					.10					.119		
					.21					.049		
35	1.11	.91	.91	.58					.18	.017		
Σ :	66.89	78.94	70.25	76.71	38.65	77.77	61.26	48.85	49.60	38.946	98.532	57.7

1; SCHOEMBERG, Obstwiese, Tonboden (Mineral.: Kaolin, mixed layer Ton-mineral); 2. SCHRAMBERG, Weide, Tonboden (Mineral.: Illit); 3. BOEHRINGEN, Steinbruch, Tonboden (Mineral.: Illit, Montmorillonit, Chlorit); 4. HOHEN-BOHL/Stuttgart, Weide, Tonboden (Montmorillonit); 5. HEIDELBERG, Golfplatz, Sandboden; 6. HEIDELBERG, Wiese, Lehmboden; 7. HEIDELBERG, Musterhof, Tonboden (Illit, Chlorit); 8. KRAUTZE, Wiese, Gley (2 cm Entnahmetiefe); 9. KRAUTZE, Wiese, Gley (5 cm Entnahmetiefe); 10. GORLEBEN, Wald, Podzol; 11. BRÜKENDORF, Sandgrube, Braunerde; 12. TREBEL, Wald-Sandgrube, Ranker.

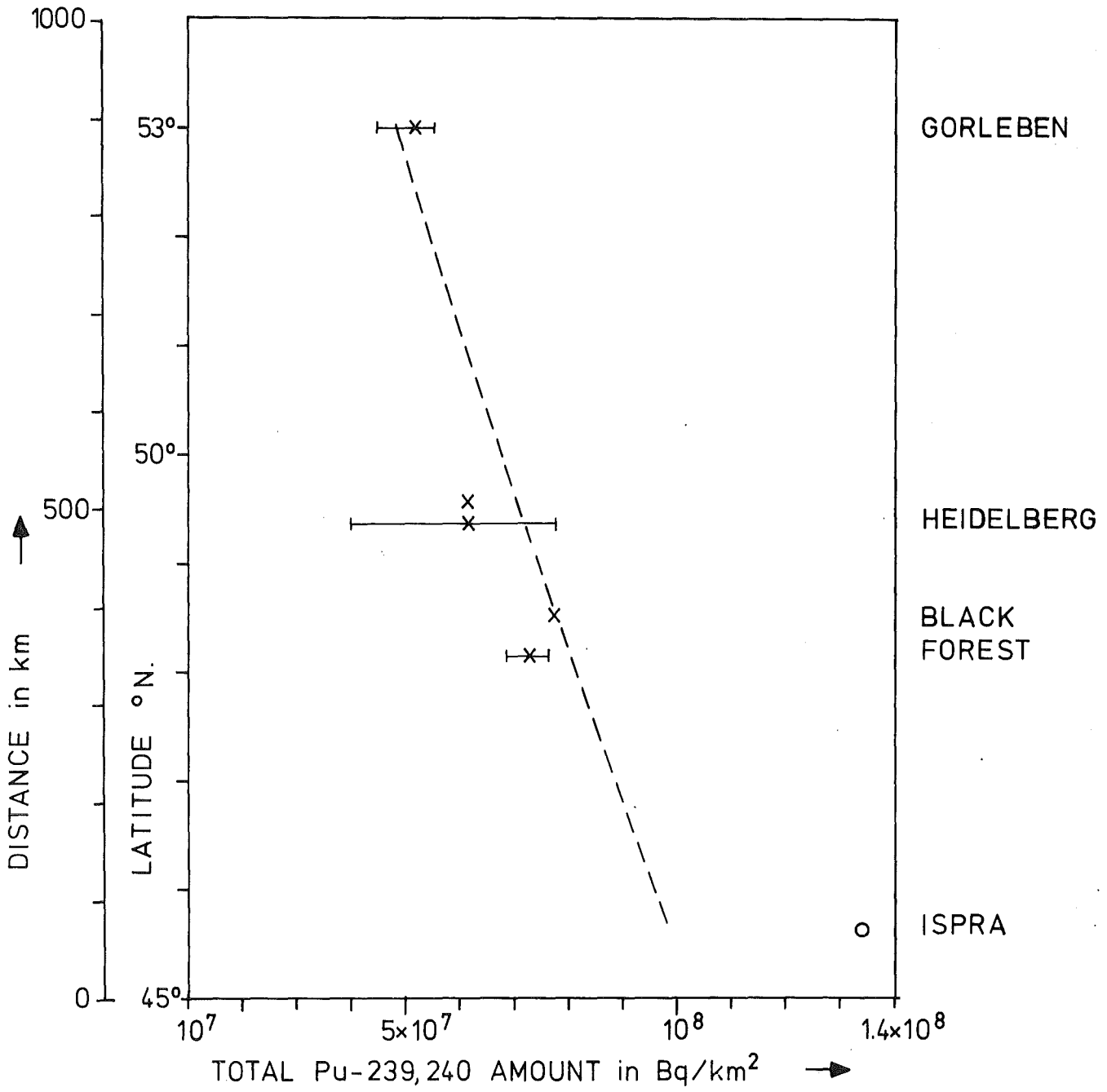
Tab. 1: Fortsetzung!

Entnahmestelle (Zuordnung s. unten!)

Tiefe cm	Entnahmestelle (Zuordnung s. unten!)											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
0					.456	.541	.415	.140		0.0	.239	.177
5	.377	1.1	1.065	1.312	.431	.600	.897	.558	1.024	.639	1.626	.671
10	.533	.747	.608	.505	.174	.474	.459	.126		.071	.277	.201
15	.549	.217	.343	.266	.086	.141	.050	.034		.023	.153	.047
20	.526	.096	.120	.116	.076	.128	.086	.010	.043	.014	.061	.047
25	.093	.067	.044	.049	.027	.099	.112	.009		0.0	.041	-
30	.038	.028	0.0	.041	.015	.052	0.0	0.0		0.0	-	.039
35	0.0	.051	.099	.041	0.0	.068	.092		.012	.084	.114	
Σ	2.116	2.306	2.279	2.33	1.63	3.211	2.833	1.493	1.509	1.017	3.102	1.662

1; SCHOEMBERG, Obstwiese, Tonboden (Mineral.: Kaolin, mixed layer Ton-mineral); 2. SCHRAMBERG, Weide, Tonboden (Mineral.: Illit); 3. BOEHRINGEN, Steinbruch, Tonboden (Mineral.: Illit, Montmorillonit, Chlorit); 4. HOHEN-BOHL/Stuttgart, Weide, Tonboden (Montmorillonit); 5. HEIDELBERG, Golfplatz, Sandboden; 6. HEIDELBERG, Wiese, Lehmboden; 7. HEIDELBERG, Musterhof, Tonboden (Illit, Chlorit); 8. KRAUTZE, Wiese, Gley (2 cm Entnahmetiefe); 9. KRAUTZE, Wiese, Gley (5 cm Entnahmetiefe); 10. GORLEBEN, Wald, Podzol; 11. BRÜKENDORF, Sandgrube, Braunerde; 12. TREBEL, Wald-Sandgrube, Ranker.

Fig. 1: Änderung des Plutonium-Pegels im Boden von Mitteleuropa.



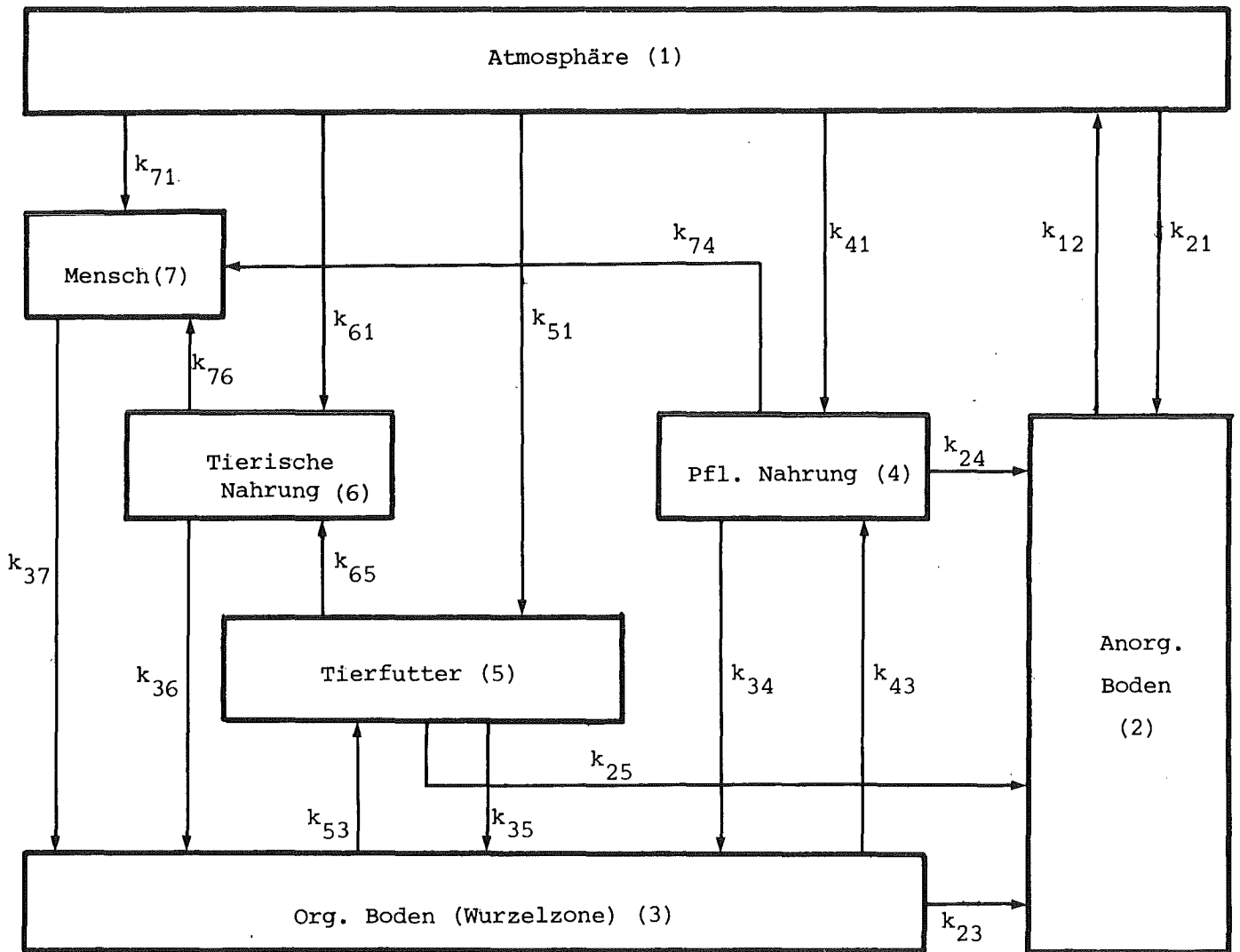


Fig. 2: Graphische Darstellung des Boxen-Modelles für den Pu-Kreislauf in einem regionalen Ökosystem.

Atmosphäre	Anorg. Boden	$k_{21}$	.25	[Tage <sup>-1</sup> ]
	Pflanzl. Nahrung	$k_{41}$	.58 E-1	
	Tierfutter	$k_{51}$	.58 E-1	
	Tierische Nahrung	$k_{61}$	.17 E-4	
	Mensch	$k_{71}$	.29 E-5	
Anorg. Boden	Atmosphäre	$k_{12}$	.25 E-10	
Org. Boden	Anorg. Boden	$k_{23}$	.14 E-5	
	Pflanzl. Nahrung	$k_{43}$	.68 E-8	
	Tierfutter	$k_{53}$	.68 E-8	
Pflanzl. Nahrung	Anorg. Boden	$k_{24}$	.23 E-1	
	Organischer Boden	$k_{34}$	.21	
	Mensch	$k_{74}$	.59 E-3	
Tierfutter	Anorg. Boden	$k_{25}$	.23 E-1	
	Org. Boden	$k_{35}$	.22 E-1	
	Tierische Nahrung	$k_{65}$	.22 E-1	
Tierische Nahrung	Organischer Boden	$k_{36}$	.41 E-1	
	Mensch	$k_{76}$	.27 E-2	
Mensch	Organischer Boden	$k_{37}$	.90	

Tabelle 2: Die Transferkonstanten  $k_{ij}$  [Tage<sup>-1</sup>] für den Pu-Massentransfer von der j-ten zur i-ten Box.



### 3. Mathematische Auswertung des Boxenmodelles

Die Analyse von Boxenmodellen für Massenkreisläufe wurde schon an verschiedenen Stellen ausführlich dargestellt (siehe z.B. /15/). Wir fassen die für den Plutonium-Kreislauf wichtigsten Ergebnisse in diesem Kapitel zusammen und ergänzen sie um einige weitere Ergebnisse, die wir aufgrund spezieller Eigenschaften des Pu-Kreislaufes benötigen.

#### 3.1. Differentialgleichungssystem für ein n-Boxen-Modell

Wir betrachten das durch Figur 1 gegebene 7-Boxenmodell für den Pu-Kreislauf. Ganz allgemein lautet das ein n-Boxenmodell beschreibende lineare Differentialgleichungssystem wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} m_1(t) &= - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{j1} \cdot m_1(t) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{1j} \cdot m_j(t) \\ \frac{d}{dt} m_2(t) &= - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n k_{j2} \cdot m_2(t) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n k_{2j} \cdot m_j(t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{dt} m_n(t) = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{jn} \cdot m_n(t) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{nj} \cdot m_j(t)$$

Wenn wir den Vektor  $\underline{m}(t) := (m_1(t), \dots, m_n(t))^T$  und die Übergangsmatrix

$$\underline{K} := \begin{bmatrix} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{j1} & k_{12} & k_{13} & \dots & k_{1n} \\ k_{21} & - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n k_{j2} & k_{23} & \dots & k_{2n} \\ k_{31} & k_{32} & - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 3}}^n k_{j3} & \dots & k_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & k_{n2} & k_{n3} & \dots & - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{jn} \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

definieren, lautet das Differentialgleichungssystem (3.1)

$$\frac{d}{dt} \underline{m}(t) = \underline{K} \cdot \underline{m}(t) \quad . \quad (3.3)$$

Dieses Differentialgleichungssystem beschreibt einen massenerhaltenden Übergang vom Zustand  $\underline{m}(t)$  zum Zustand  $\underline{m}(t')$ ,  $t' > t$ : Aus (3.1) folgt

$$\frac{d}{dt}(m_1(t) + m_2(t) + \dots + m_n(t)) = 0 \quad (3.4)$$

oder

$$m_1(t') + m_2(t') + \dots + m_n(t') = m_1(t) + m_2(t) + \dots + m_n(t) \quad .$$

Diese Massenerhaltungseigenschaft wird mathematisch dadurch ausgedrückt, daß sich die Spalten der Matrix  $\underline{K}$  zu 0 addieren.

Relationen der Art (3.1) wurden zur Beschreibung von Diffusionsprozessen chemischen Reaktionen u.a. (siehe z.B. /16/, /17/) verwendet. In den meisten dieser Fälle ist es möglich, eine *intensive* Größe (Konzentration, Partialdruck, chemisches Potential) zu finden, d.h. eine generalisierte Kraft, die im Gleichgewicht in allen Boxen den gleichen Wert annimmt. In unserem Fall ist dies nicht möglich, da wir verschiedene Kräfte zu berücksichtigen haben. Daher sind die hier angegebenen Relationen als eine *phänomenologische* Beschreibung des Pu-Kreislaufes anzusehen, bei der die *Massenerhaltung* das einzige berücksichtigte physikalische Prinzip darstellt. Wir werden jedoch sehen, daß dieses Prinzip weitreichende Konsequenzen hat.

### 3.2. Gleichgewichtszustände

Ein notwendiges Kriterium für die Unabhängigkeit des Gleichgewichtsvektors  $\underline{x}$  von den Anfangsbedingungen ist die eindeutige Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems

$$\underline{K} \cdot \underline{x} = 0 \quad , \quad (3.5)$$

das entsprechend (3.1) die folgende explizite Form hat:

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{j1} \cdot x_1 + k_{12} \cdot x_2 + \dots + k_{1n} \cdot x_n = 0 \\
 & k_{21} \cdot x_1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n k_{j2} \cdot x_2 + \dots + k_{2n} \cdot x_n = 0 \\
 & \vdots \\
 & k_{n1} \cdot x_1 + k_{n2} \cdot x_2 + \dots - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{jn} \cdot x_n = 0 .
 \end{aligned}
 \tag{3.6}$$

Hat die Matrix  $\underline{K}$  den Rang  $n-1$ , so ist die Lösung  $\underline{x}$  von (3.6) ein eindimensionaler Unterraum des  $\mathbb{R}^n$ . Normieren die Länge von  $\underline{x}$  auf 1,

$$\|\underline{x}\| = 1 , \tag{3.7}$$

so ist  $\underline{x}$  eindeutig bestimmt.

Wenn wir zusätzlich verlangen, daß bei  $t=\infty$  keine Box leer sein darf,

$$x_i > 0 \text{ für alle } i=1, \dots, n ,$$

so muß  $\underline{K}$  nach dem Frobenius'schen Satz /18/ *irreduzibel* sein. Für irreduzible Matrizen ist der beste Algorithmus zur Lösung des Gleichungssystems (3.5) ein modifiziertes Gauß'sche Eliminationsverfahren.

Bei irreduziblen Matrizen kann jede Zeile von (3.6) als lineare Folge der restlichen  $n-1$  Zeilen betrachtet werden, daher wählen wir die letzte Zeile. Dieses Verfahren ist für reduzible Matrizen nicht anwendbar, da die abhängige Zeile vom System festgelegt ist /17/. Da reduzible Systeme für Materialkreisläufe nur von prinzipiellen Interessen sind, schließen wir sie aus den folgenden Überlegungen aus.

*Bestimmung des Gleichgewichtsvektors  $\underline{x}$*

Wir legen den Gauß'schen Algorithmus für stark zusammenhängende System in folgender Weise fest: Wir bringen die Matrix  $\underline{K}$  auf die letzte Zeile auf obere Dreiecksform. Die Irreduzibilität der Matrix  $\underline{K}$  garantiert dann, daß die erste Null in der Hauptdiagonale in der letzten Zeile auftaucht. Wegen

nicht exakter Zahlendarstellung und Rundungsfehler entsteht hier keine exakte Null. Die sich so ergebende Pseudonull dient als Prüfgröße für die Güte des Algorithmus.

Beim Rückwärtseinsetzen geben wir der Komponente  $x_n$  den Zahlenwert 1, damit wird die einparametrische Lösung zuerst fixiert. Wenn das Rückwärtseinsetzen abgelaufen ist, wird der Vektor  $\underline{x}$  entsprechend (3.7) normiert.

Der Gauß'sche Algorithmus bietet für Matrizen vom Typ der Matrix  $\underline{K}$  einen grundsätzlichen Vorteil: Wir werden beweisen, daß die Matrix  $\underline{K}$  "Quasipivot-eigenschaften" hat, d.h. daß das absolut größte Element in der zu eliminierenden Spalte bereits in der Hauptdiagonale steht. Aus diesem Grunde können wir auf die viel kompliziertere Pivotisierung verzichten.

Zur Vorbereitung der folgende

*Satz 1*

Nach Durchführung eines Gauß'schen Eliminationsschrittes hat die "geränderte" Matrix  $\underline{K}^{(1)}$ , d.h. die Matrix, die sich nach dem Eliminationsschritt durch Weglassen von erster Zeile und Spalte ergibt, weiterhin die Eigenschaft, daß die Spaltensumme null ist.

*Beweis*

Die Matrix  $\underline{K}$  hat vor dem Eliminationsschritt die durch (3.2) gegebene Gestalt:

$$\begin{bmatrix} -\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1}}^n k_{i1} & k_{12} & k_{13} & \dots & k_{1n} \\ k_{21} & -\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 2}}^n k_{i2} & k_{23} & \dots & k_{2n} \\ k_{31} & k_{32} & -\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 3}}^n k_{i3} & \dots & k_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & k_{n2} & k_{n3} & \dots & -\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq n}}^n k_{in} \end{bmatrix}$$

Mit den Größen

$$b_{1j} := \frac{k_{1j}}{\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1}}^n k_{i1}} \quad \text{für } j > 1 \quad (3.9)$$

haben die Elemente der geänderten Matrix die Form /19/

$$k_{ij}^{(1)} = k_{ij} + k_{i1} \cdot b_{1j} \quad \text{für } i, j \geq 2. \quad (3.10)$$

Die Spaltensumme der aus den Elementen  $k_{ij}^{(1)}$  bestehenden Matrix  $\underline{\underline{K}}^{(1)}$ ,

$$\underline{\underline{K}}^{(1)} := \begin{bmatrix} k_{22}^{(1)} & \dots & k_{2n}^{(1)} \\ \vdots & & \vdots \\ k_{n2}^{(1)} & \dots & k_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

lautet

$$\sum_{i=2}^n k_{ij}^{(1)} = \sum_{i=2}^n k_{ij} + \sum_{i=2}^n k_{i1} \cdot \frac{k_{1j}}{\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1}}^n k_{i1}} \quad \text{für alle } j \geq 2. \quad (3.12)$$

Da die Spaltensummen von  $\underline{\underline{K}}$  null ist, folgt

$$\sum_{i=2}^n k_{ij} = -k_{1j},$$

woraus mit (3.10) folgt

$$\sum_{i=2}^n k_{ij}^{(1)} = 0 \quad \text{für alle } j \geq 2 \quad (3.13)$$

□

Natürlich gilt die Aussage auch für alle weiteren Eliminationsschritte.

Aus der speziellen Gestalt von (3.2) entnimmt man unter Berücksichtigung von (3.10), daß nach einem Eliminationsschritt die Außendiagonalelemente nur mit positiven Größen ergänzt werden. Daraus folgt

$$k_{ij}^{(1)} \geq 0 \text{ für alle } i, j \text{ mit } i \neq j . \quad (3.14)$$

Diese Erkenntnis genügt zum Beweis des folgenden

*Satz 2*

Die Matrix  $\underline{\underline{K}}$  besitzt Quasipivoteigenschaften.

*Beweis*

Die sich bei einem Eliminationsschritt ergebende Matrix  $\underline{\underline{K}}^{(1)}$  hat dieselben Eigenschaften wie  $\underline{\underline{K}}$ , d.h. die Nicht-Diagonalelemente sind nichtnegativ, die Spaltensumme ist null. Daraus folgt, daß das dem Betrage nach größte Element in der ersten Spalte von  $\underline{\underline{K}}^{(1)}$  das Haupt-Diagonalelement ist.

□

Für den Gleichgewichtsvektor  $\underline{x}$  läßt sich ein einfacher algebraischer Ausdruck angeben:

*Satz 3*

Der Gleichgewichtsvektor  $\underline{x}$  von  $\underline{\underline{K}}$  ist durch die Hauptdiagonale der zu  $\underline{\underline{K}}$  assoziierten Matrix gegeben. Er ist unabhängig von einem gemeinsamen Faktor der Hauptdiagonalelemente der Matrix.

*Beweis*

Die assoziierte Matrix  $\underline{\underline{K}}_{=A}$  von  $\underline{\underline{K}}$  hat die Form

$$\underline{\underline{K}}_{=A} := \begin{bmatrix} k_{a11} & k_{a12} & \dots & k_{a1n} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ k_{an1} & k_{an2} & \dots & k_{ann} \end{bmatrix} ; \quad (3.15)$$

die Matrixelemente  $k_{aij}$  von  $\underline{\underline{K}}_{=A}$  sind gegeben durch

$$k_{aij} = (-1)^{i+j} \cdot \det(\underline{\underline{K}}^{ij}) , \quad (3.16)$$

wobei die Matrizen  $\underline{K}^{ij}$  die entsprechenden (durch Streichen der i-ten Zeile und der j-ten Spalte entstehenden) Minoren sind.

Wir werden anschließend zeigen, daß die assoziierte Matrix (3.15) spaltenweise aus gleichen Elementen besteht:

$$\underline{K}_A = \begin{bmatrix} k_{a11} & k_{a22} & \cdot & \cdot & \cdot & k_{ann} \\ \vdots & \vdots & & & & \vdots \\ k_{a11} & k_{a22} & \cdot & \cdot & \cdot & k_{ann} \end{bmatrix} . \quad (3.17)$$

In diesem Fall wird das lineare Gleichungssystem (3.6) durch die Größen  $k_{a_{ii}}$  befriedigt,

$$\begin{aligned} - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1}}^n k_{i1} \cdot k_{a11} + k_{12} \cdot k_{a22} + k_{13} \cdot k_{a33} + \cdot \cdot \cdot + k_{1n} \cdot k_{ann} &= 0 \\ k_{21} \cdot k_{a11} - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 2}}^n k_{i2} \cdot k_{a22} + k_{23} \cdot k_{a33} + \cdot \cdot \cdot + k_{2n} \cdot k_{ann} &= 0 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ k_{n1} \cdot k_{a11} + k_{n2} \cdot k_{a22} + k_{n3} \cdot k_{a33} + \cdot \cdot \cdot - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq n}}^n k_{in} \cdot k_{ann} &= 0 , \end{aligned} \quad (3.18)$$

da gilt

$$\det(\underline{K}) = 0 , \quad (3.19)$$

denn: Bildet man die Determinante von  $\underline{K}$ , so bildet man das innere Produkt der i-ten Zeile von  $\underline{K}$  mit der i-ten Zeile der assoziierten Matrix (3.15). So entsteht aber die i-te Zeile des linearen Gleichungssystems (3.18).

Von den Größen  $k_{a_{ii}}$  ist *mindestens* eine von null verschieden, da wir vorausgesetzt haben, daß die Matrix  $\underline{K}$  den Rang n-1 hat. Nach dem Satz von Frobenius /18/ kann behauptet werden, daß *alle*  $k_{a_{ii}}$  größer als null sind:

$$k_{a_{ii}} > 0 \quad \text{für alle } i . \quad (3.20)$$





### *Konsistenz der Meßdaten*

Für den Fall, daß sowohl für die Übergangskoeffizienten  $k_{ij}$  als auch für die Gleichgewichtsinventare  $x_i$  Meßdaten vorliegen, die aber nicht die Gleichungen (3.6) erfüllen, ergibt sich das Problem, zu einem konsistenten, d.h. die Gleichungen (3.6) erfüllenden Datensatz zu kommen. Dabei sollen im hier interessierenden Fall nur die Übergangskoeffizienten verändert werden.

Wir diskutieren zuerst einen *qualitativen Weg*.

Mit den anfänglich zur Verfügung stehenden Schätzwerten der  $k_{ij}$  berechnen wir den Gleichgewichtsvektor  $\underline{x}$ . Weichen die Elemente dieses Vektors von den anfänglich geschätzten bzw. gemessenen Inventaren ab, korrigieren wir die Werte der  $k_{ij}$  nach "gesundem Menschenverstand" und wiederholen die Prozedur. Für dieses "Verfahren" wurde ein interaktives FORTRAN-Programm entwickelt, das im Anhang wiedergegeben ist.

Da die Werte der Übergangskoeffizienten sich um viele Zehnerpotenzen unterscheiden, existiert aufgrund der *Ventilwirkung* der Kinetik eine Entkopplung im System. Dies bedeutet, daß Änderungen der Übergangskoeffizienten auch nur lokalisierte Änderungen der Inventare bewirken; diese "Gutmütigkeit" des Systems erlaubt in der Tat eine erfolgreiche Anwendung des beschriebenen qualitativen Weges.

Wir skizzieren jetzt einen *quantitativen Weg*.

Der Satz 3 ermöglicht es, die Inventare explizite anzugeben:

$$\begin{aligned} k_{a11}(k_{ij}, i, j=1\dots n) &= x_1 \\ k_{ann}(k_{ij}, i, j=1\dots n) &= x_n \end{aligned} \quad (3.24)$$

Diese expliziten Ausdrücke bestehen nach Frobenius /18/ aus positiven homogenen Produkttermen und können für  $n \leq 7$  mit Hilfe der Rechner-Sprache REDUCE ermittelt werden.

Wir betrachten nun die Gleichungen (3.24) als Nebenbedingungen und wählen als Fehlerfunktional den Ausdruck

$$F := \sum_{i \neq j} (k_{ij}^{(0)} - k_{ij})^2, \quad (3.25)$$

wobei  $k_{ij}^{(0)}$  eine anfängliche Schätzung der  $k_{ij}$  ist. Wir ermitteln die den Nebenbedingungen (3.24) so, daß das Fehlerfunktional  $F$  minimiert wird:

$$F(k_{ij}, i, j=1 \dots n) \stackrel{!}{=} \min. \quad (3.26)$$

Eine Diskussion bzw. Anwendung dieses quantitativen Weges erfolgte bisher noch nicht.

### 3.3. Zeitverhalten des Systems

Die Lösung des Differentialgleichungssystems

$$\dot{\underline{m}} = \underline{K} \cdot \underline{m} \quad (3.27)$$

lautet in Vektorform

$$\underline{m} = \underline{\exp}(\underline{K} \cdot t) \cdot \underline{m}^{(0)}, \quad (3.28)$$

wobei  $\underline{m}^{(0)}$  der Vektor der Anfangsbedingungen ist.

Die erste Näherung von (3.28) für äquidistante Zeitschritte  $t_1 - t_0 = 1$  lautet

$$\underline{m}(t_\nu) = (\underline{K} + \underline{I})^\nu \cdot \underline{m}^{(0)}, \quad \nu = 1, 2, \dots, \quad (3.29)$$

wobei  $(\underline{K} + \underline{I})^\tau$  bei entsprechender Skalierung von (3.27) eine stochastische Matrix ist. Die Matrix

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} (\underline{K} + \underline{I})^\nu \quad (3.30)$$

existiert und besteht bei irreduziblen Matrizen  $\underline{K}$  spaltenweise aus dem Gleichgewichtsvektor  $\underline{x}$ .

Den zu (3.5) gehörenden Eigenvektor  $\underline{x}$  mittels (3.30) zu bestimmen, ist äquivalent mit dem Miese'schen Potenzierungsverfahren. Bei diesem Verfahren wird der maximale Eigenwert auspotenziert  $/20/$ .

Numerisch ist ein Eigenwert gegenüber kleinen Änderungen der Koeffizienten stabil, wenn der Links- und Rechtseigenvektor zu diesem Eigenwert nichtortho-

gonal ist (Wilkinson /21/). Der betreffende Linkseigenvektor von  $\underline{\underline{K+I}}$  lautet

$$\underline{\underline{x}}_L = (1, 1, \dots, 1)^T ,$$

der Rechtseigenvektor ist  $\underline{\underline{x}}$ . Daher kann gefolgert werden, daß der Eigenwert 1 numerisch stabil ist, da  $\underline{\underline{x}}_L$  und  $\underline{\underline{x}}$  nichtorthogonal sind (sie befinden sich beide im selben Orthanten).

Es tritt leider eine andere Art Instabilität auf: Die (gewöhnliche) FORTRAN-Arithmetik rundet nicht, sondern schneidet. Ein einziger Potenzierungsschritt genügt, um die Spaltensummennorm der Matrix unter 1 zu drücken. Im weiteren potenziert sich die ganze Matrix zu null herunter. Abhilfe leistet hier nur die Renormierung oder eine höhere Genauigkeit.

Für Systeme, deren Übergangsmatrix  $\underline{\underline{K}}$  nur reelle Eigenwerte hat, ist die Geschwindigkeit, mit der das System von einem beliebigen Ausgangszustand in den Gleichgewichtszustand übergeht, durch den betragsmäßig kleinsten Eigenwert bestimmt.

Für Systeme, deren Übergangsmatrix  $\underline{\underline{K}}$  komplexe Eigenwerte hat, läßt sich die Geschwindigkeit des Übergangs in den Gleichgewichtszustand nicht ausschließlich durch den Eigenwert mit dem betragsmäßig kleinsten Realteil bestimmen, da die komplexen Anteile zu nicht vernachlässigbaren Oszillationen führen.

Bei solchen Systemen definiert man ein Funktional mit streng monotonem Zeitverhalten (das sogenannte Ljapunov-Funktional), wobei dieses Zeitverhalten durch zwei Exponentialfunktionen eingegrenzt werden kann. Die Zeitkonstanten dieser Exponentialfunktionen beschreiben dann das Zeitverhalten des Systems.

Wir gehen aus von dem folgenden

Satz 4 (Einschließungssatz /22/)

Sei

$$\dot{\underline{\underline{y}}} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{y}} , \quad \underline{\underline{y}}_0 := \underline{\underline{y}}(t_0) \quad (3.31)$$

ein lineares Differentialgleichungssystem, und

$$\underline{\underline{H}} := \frac{1}{2}(\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{A}}^T) \quad (3.32)$$

eine Hermitesche Matrix. Dann gilt

$$\|\underline{y}_0\| \cdot \exp \lambda t \leq \|\underline{y}(t, \underline{y}_0)\| \leq \|\underline{y}_0\| \cdot \exp \Lambda t, \quad (3.33)$$

wobei

$$\|\underline{y}\|^2 := \underline{y}^\tau \cdot \underline{y},$$

und  $\lambda$  und  $\Lambda$  der kleinste und größte Eigenwert von  $A$  ist.

□

Aus diesem Satz entnehmen wir, daß  $y$  das gesuchte Funktional darstellt. Eine Beziehung zwischen den Eigenwerten von  $\underline{H}$  und den Realteilen der Eigenwerte von  $\underline{A}$  liefert der

*Satz 5 (Bendixson /23/)*

Die (reellen) Eigenwerte von  $\underline{H}$  schließen die Realteile der komplexen Eigenwerte von  $\underline{A}$  ein:

$$\lambda \leq \operatorname{Re} \operatorname{EW}(\underline{A}) \leq \Lambda. \quad (3.34)$$

□

Spezielle Überlegungen gelten, wenn der maximale Eigenwert von  $\underline{A}$  null ist, und damit die obere Schranke der Abschätzung (3.33) durch den Satz von Bendixon trivial ist. In diesem Fall geht man wie folgt vor: Aus der Tatsache, daß die Matrix  $\underline{H}$  den maximalen Eigenwert null hat, ergibt sich sofort eine bekannte partikuläre Lösung des Differentialgleichungssystems

$$\dot{\underline{z}} = \underline{H} \cdot \underline{z}. \quad (3.35)$$

Daher kann man den Grad dieses Systems genau um 1 vermindern. Der maximale Eigenwert der das reduzierte System beschreibenden Matrix im  $\mathbb{R}^{n-1}$  ist dann der zweitgrößte Eigenwert von  $\underline{H}$ .

Die bisherigen Überlegungen lassen sich nunmehr folgendermaßen auf unsere Problemstellung übertragen. Dazu definieren wir die Matrix

$$\underline{T} := \begin{bmatrix} \sqrt{x_1} & & & 0 \\ & \sqrt{x_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sqrt{x_n} \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

und mit Hilfe von  $\underline{T}$  die Matrix

$$\frac{1}{2}[\underline{K} + (\underline{T}^2)^{-1} \underline{KT}^2]^\tau \quad (3.37)$$

Diese Matrix ist zu einer symmetrischen Matrix ähnlich, da sie die dafür notwendigen und hinreichenden Kolmogoroff-Wegscheider'schen Bedingung /17/ erfüllt. Diese Bedingung besagt, daß die Matrix (3.37) durch Rechtsmultiplikation mit  $\underline{T}^2$  symmetrisiert wird, was in der Tat der Fall ist.

Wir symmetrisieren die Matrix (3.37) mittels einer Ähnlichkeitstransformation wie folgt:

$$\begin{aligned} \underline{T}^{-1} \cdot \frac{1}{2}[\underline{K} + (\underline{T}^2)^{-1} \underline{KT}^2]^\tau &= \\ &= \frac{1}{2}(\underline{T}^{-1} \underline{KT} + \underline{TK}^\tau \underline{T}^{-1}) = \\ &= \frac{1}{2}[\underline{T}^{-1} \underline{KT} + (\underline{T}^{-1} \underline{KT})^\tau] \quad (3.38) \end{aligned}$$

Wir wenden nun die beiden oben genannten Sätze auf die Matrix

$$\underline{A} := \underline{T}^{-1} \underline{KT} \quad (3.39)$$

an, Dazu brauchen wir den folgenden

*Hilfssatz*

Die Matrix

$$\frac{1}{2}[\underline{K} + (\underline{T}^{-2} \underline{KT}^2)^\tau]$$

hat null als einfachen Eigenwert. Der dazu gehörige Eigenvektor ist der Gleichgewichtsvektor  $\underline{x}$  von  $\underline{K}$ .

Beweis

Aus der expliziten Darstellung

$$(\underline{T}^{-2} \underline{K} \underline{T}^2)^\tau = \begin{bmatrix} -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{j1} & k_{21} \cdot \frac{x_1}{x_2} & \dots & k_{n1} \cdot \frac{x_1}{x_n} \\ k_{12} \cdot \frac{x_2}{x_1} & -\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 2}}^n k_{j2} & \dots & k_{n2} \cdot \frac{x_2}{x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{1n} \cdot \frac{x_n}{x_1} & k_{2n} \cdot \frac{x_n}{x_2} & \dots & -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{jn} \end{bmatrix}$$

erkennen wir sofort, daß zum Eigenwert null der Matrix  $(\underline{T}^{-2} \underline{K} \underline{T}^2)^\tau$  der Eigenvektor  $\underline{x}$  gehört. Somit folgt die Behauptung sofort aus

$$\underline{K} \cdot \underline{x} = 0 \quad \text{und} \quad (\underline{T}^{-2} \underline{K} \underline{T}^2)^\tau \underline{x} = 0 .$$

□

Aus diesem Hilfssatz folgt aufgrund der Tatsache, daß ähnliche Matrizen gleiche Eigenwerte haben, daß die Matrix

$$\underline{H} = \frac{1}{2}(\underline{A} + \underline{A}^\tau) = \frac{1}{2}(\underline{T}^{-1} \cdot \underline{K} \cdot \underline{T} + (\underline{T}^{-1} \cdot \underline{K} \cdot \underline{T})^\tau)$$

ebenfalls den Eigenwert 0 besitzt. Entsprechend dem oben gesagten kann die Abschätzung des Zeitverhaltens unseres Systems mit dem zweitgrößten Eigenwert von  $\underline{H}$  auf nichttriviale Weise vorgenommen werden, wenn die zum Eigenwert null gehörige partikuläre Lösung eliminiert.

#### 4. Verifikation des Boxenmodelles für den Plutonium-Kreislauf

In diesem Kapitel wenden wir die Ergebnisse des dritten Kapitels auf den Plutonium-Kreislauf an. Vorher diskutieren wir jedoch Boxenmodelle für Konzentration, die in der Literatur in verschiedenen Zusammenhängen zu finden sind.

##### 4.1. Boxenmodelle für Konzentrationen

Es läßt sich zeigen, daß das Differentialgleichungssystem (3.1) aus den Prinzipien der Massenerhaltung und aus einem linearen Geschwindigkeitsansatz abgeleitet werden kann /17/. Vielfach wird das gleiche Gleichungssystem ohne weitere Begründung auch für *Konzentrationen*  $c_i$ , angegeben, es lautet dann, wenn wir die Übergangskoeffizienten mit  $\tau_{ij}$  bezeichnen, für  $n$  Boxen <sup>1)</sup>

$$\begin{aligned} \frac{dc_1}{dt} &= - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n \tau_{j1} \cdot c_1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n \tau_{1j} \cdot c_j \\ \cdot & \quad \cdot \quad \quad \cdot \\ \cdot & \quad \cdot \quad \quad \cdot \\ \cdot & \quad \cdot \quad \quad \cdot \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\frac{dc_n}{dt} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n \tau_{jn} \cdot c_n + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n \tau_{nj} \cdot c_j \quad .$$

Aus (4.1) folgt natürlich wieder

$$\sum_{i=1}^n \dot{c}_i = 0 \quad (4.2)$$

oder, wenn wir integrieren,

---

<sup>1)</sup> In /24/ sind z.B. solche Gleichungen für Konzentrationen von Radionukliden  $c_i$  [Ci/m<sup>3</sup>] angegeben, wobei der einen Massenschwund darstellende radioaktive Zerfall berücksichtigt wurde.

$$\sum_{i=1}^n c_i = \text{const} , \quad (4.3)$$

d.h. die Summe der Konzentrationen ist zeitlich invariant, was physikalisch nicht zu rechtfertigen ist.

Ein Weg, diese Schwierigkeit zu umgehen, besteht darin, den Boxen Volumina zuzuordnen. Schreiben wir die Konzentrationen also in der Form

$$c_i := \frac{m_i}{V_i} , \quad i=1, \dots, n , \quad (4.4)$$

wobei  $m_i$  die Masse in der  $i$ -ten Box und  $V_i$  ihr Volumen ist, so erhalten wir aus dem Differentialgleichungssystem (3.1) für die Massen  $m_i$  das folgende Differentialgleichungssystem für die Konzentrationen  $c_i$ :

$$\begin{aligned} \dot{c}_1 &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{j1} \cdot c_1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n k_{1j} \cdot \frac{V_j}{V_1} \cdot c_j \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ \dot{c}_n &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{jn} \cdot c_n - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n k_{nj} \cdot \frac{V_j}{V_n} \cdot c_j \end{aligned} \quad (4.5)$$

Formal können wir diese Gleichungen wie folgt ableiten: Wenn wir die Matrix  $\underline{V}$  definieren durch

$$\underline{V} := \begin{bmatrix} V_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & V_n \end{bmatrix} , \quad (4.6)$$

entspricht die Transformation (4.4) der Basistransformation

$$\underline{c} = \underline{V}^{-1} \cdot \underline{m} , \quad (4.7)$$



und wir erhalten, wie sich leicht zeigen läßt, für  $\underline{c}$  das Gleichungssystem

$$\underline{\dot{c}} = (\underline{V}^{-1} \cdot \underline{K} \cdot \underline{V}) \cdot \underline{c} , \quad (4.8)$$

d.h. wir erhalten das Gleichungssystem für  $\underline{c}$  aus dem Gleichungssystem für  $\underline{m}$ , indem wir die Ähnlichkeitstransformation

$$\underline{K} \mapsto \underline{V}^{-1} \cdot \underline{K} \cdot \underline{V}$$

durchführen. Man kann zeigen /17/, /25/, daß diese Ähnlichkeitstransformation nur dann einen (physikalischen) Sinn hat, wenn gilt:

$$\begin{bmatrix} V_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & V_n \end{bmatrix} = \text{const.} \cdot \begin{bmatrix} m_1^\infty & 0 & \dots & 0 \\ 0 & m_2^\infty & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & m_n^\infty \end{bmatrix} , \quad (4.9)$$

wobei

$$m_i^\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} m_i , \quad i=1, \dots, n ,$$

die Gleichgewichtsinventare sind, ist äquivalent mit

$$c_i^\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} c_i \quad \text{für alle } i=1, \dots, n .$$

In Worten: Diese Ähnlichkeitstransformation hat nur dann einen physikalischen Sinn, wenn die Bedingung, daß die Gleichgewichtsinventare  $m_i^\infty$  proportional zu den Volumina ist, gleichwertig damit ist, daß die Gleichgewichtskonzentrationen alle gleich sind.

Diese Aussage ist von grundsätzlicher Bedeutung, z.B. für Diffusionsmodelle, bei denen Konzentrationen eine Interpretation besitzen sollten.

Es existieren andere Interpretationsmöglichkeiten für das Gleichungssystem (4.6). So kann z.B. bei der Tracer Analyse die spezifische Aktivität die Rolle der Konzentrationen übernehmen, da die spezifische Aktivität ebenso wie die Konzentration eine intensive Größe ist, die das Bestreben hat, sich auszugleichen, d.h. in jeder Box den gleichen Wert anzunehmen.

Ein Kriterium dafür, daß die Bedingung (4.9) erfüllt ist, wurde in /25/ angegeben: Es besagt, daß die Matrix

$$\underline{K} \cdot \underline{V} + \underline{I} , \quad (4.10)$$

wobei  $\underline{I}$  die Einheitsmatrix ist, doppelstochastisch ist, d.h. daß die Zeilen- und Spaltensummen dieser Matrix sich zu 1 addieren und daß alle Elemente zwischen null und 1 liegen.

Die vorliegenden Überlegungen wurden angestellt, weil die experimentellen Meßdaten in Form von Übergangskoeffizienten zwischen Konzentrationen dargestellt werden. Wir interpretieren dies so, daß wir die Koeffizienten auf Boxen mit gleichen Volumina beziehen. Im folgenden werden wir, da wir den Konzentrationsausgleich nicht als physikalisches Prinzip einbringen wollen, ausschließlich das Massenmodell behandeln.

#### 4.2. Numerische Ergebnisse

Wir haben die Ausgangsdaten entsprechend dem im 3. Kapitel genannten qualitativen Verfahren auf Konsistenz geprüft und mit geringen Änderungen konsistent gemacht. Wie schon erwähnt ist die Programmbeschreibung des Verfahrens im Anhang wiedergegeben. Das Ergebnis wurde in Tabelle 1 wiedergegeben.

Die Matrix  $\underline{K}$  ist in konsistenter Form ohne Hauptdiagonalelemente in Tabelle 3 angegeben. Die Endinventare sind in Tabelle 4 angegeben. Sie liegen im Intervall  $(1, 10^{-12})$ ; die Prüfgröße, d.h. die absolute Genauigkeit des Gauß'schen Verfahrens liegt bei  $10^{-15}$ . Dies bedeutet, daß das Verfahren gut konditioniert ist, da es gerade eben die Genauigkeit der Maschine (IBM 370) nicht überschreitet.

Bezüglich des Zeitverhaltens haben wir nur die erste Näherung des Anfangswertproblems behandelt: Mit dem Mieses'schen Verfahren wurden die Potenzen der Matrix  $\underline{K} + \underline{I}$  bestimmt, und es wurde daraus der Eigenvektor  $\underline{x}$  ermittelt. Die Übereinstimmung mit dem Gauß'schen Verfahren ist als gut zu bezeichnen.

Auch aus der ersten Näherung der Lösung der Differentialgleichung (3.1) lassen sich einige wichtige Schlüsse ziehen; das ganze System hat, wenn es von

	1	2	3	4	5	6	7
1		.2500 E-10	.0000 E-00	.0000 E-00	.0000 E-00	.0000 E-00	.0000 E-00
2	.2500 E-00		.1400 E-05	.2300 E-01	.2300 E-01	.0000 E-00	.0000 E-00
3	.0000 E-00	.0000 E-00		.2100 E-00	.2200 E-01	.4100 E-01	.9200 E-00
4	.5800 E-01	.0000 E-00	.6800 E-08		.0000 E-00	.0000 E-00	.0000 E-00
5	.5800 E-01	.0000 E-00	.6800 E-08	.0000 E-00		.0000 E-00	.0000 E-00
6	.1700 E-04	.0000 E-00	.0000 E-00	.0000 E-00	.2200 E-01		.0000 E-00
7	.2900 E-05	.0000 E-00	.0000 E-00	.5900 E-03	.0000 E-00	.2700 E-02	

Tabelle 3: Matrix K der in Tabelle 1 angegebenen Transferkoeffizienten.

1	Atmosphäre	.683 E-10
2	Anorg. Boden	.100 E+01
3	Org. Boden	.321 E-05
4	Pflanzl. Nahrung	.893 E-10
5	Tierfutter	.594 E-10
6	Tierische Nahrung	.299 E-10
7	Mensch	.145 E-12

Tabelle 4: Vektor der auf Gesamtinventar 1 normierten Gleichgewichtsinventare.

der Box "Boden" initialisiert wird, eine allgemeine Zeitkonstante von 80 Jahren. Diese Zeitkonstante haben wir so definiert, daß alle Boxen ihren Gleichgewichtswert größenordnungsmäßig stabilisiert haben müssen.

Die numerische Lösung des inhomogenen Systems mit Hilfe neuer Approximationen ("forced terms" oder "input function" /26/) erfordert bei der IBM-Maschine vierfache Genauigkeit aus folgenden Gründen: Die interessanteste Box "Mensch" gilt mit einem Relativinventar von  $10^{-12}$  schon als schwach bestimmt. Für diese Box garantiert das Gauß'sche Verfahren nur zwei gültige Stellen. Darüberhinaus ist es erforderlich, Modelle zu untersuchen, bei denen dieses Inventar noch niedrigere Werte erreicht ( $10^{-11}$  bis  $10^{-15}$ ). Die Control Data Corporation bietet in der erforderlichen Genauigkeitsklasse bessere Routinen als IBM.

Ein weiteres wesentliches Ergebnis der vorläufigen Untersuchung des Anfangsverfahrens ist das folgende: Wenn man die Box, deren Gleichgewichtswert sehr klein ist, auf das Mehrfache dieses Gleichgewichtswertes überlädt, pflanzt sich diese Überdosis durch das ganze System zwangsweise fort. Dies bedeutet in unserem Fall konkret: Wenn die Box "Atmosphäre" überlastet wird, wird zwangsweise die Box "Mensch" auch bis auf das  $10^9$ -fache des Gleichgewichtswertes hochgeschaukelt. Dies ist selbstverständlich unmöglich und deutet die Grenzen des linearen Boxenmodelles an: Damit das lineare Boxenmodell gültig ist, dürfen die Boxen, die einen niedrigen Gleichgewichtswert haben, nicht überladen werden. Dies bedeutet in unserem Fall, daß die Box "Atmosphäre" nicht am Anfang das gesamte Plutonium-Inventar aufnehmen darf.

Für die Auswertung des Einschließungssatzes von Bendixon müssen die Eigenwerte der Matrix  $\frac{1}{2} \cdot (\underline{A} + \underline{A}^T)$  bestimmt werden. Diese sind in Tabelle 5 angegeben. Am meisten fällt auf, daß der zweitgrößte Eigenwert, der im Einschließungssatz die Rolle von  $\Lambda$  übernimmt, sehr nahe bei null liegt. Dadurch wird der Einschließungssatz leider sehr unscharf. In unserem Fall besagt dieses Ergebnis, daß das Ljapunov'sche Funktional zwischen einem Tag und rund 800 Jahren auf ein e-tel abklingt. Dieses Ergebnis ist typisch für *steife* Systeme, d.h. Systeme mit extrem unterschiedlichen Übergangskoeffizienten. Da das System linear ist, kann eine Spektralkontraktion vorgenommen werden, so daß die Eigenwerte von  $\underline{K}$  immer im Intervall  $-2 < \lambda_i \leq 0$  für alle  $i$  liegen. Die Steifheit des Systems bedingt die Verteilung der Eigenwerte. Die unangenehmste Ei-

genschaft steifer Systeme, daß nämlich der Lösungsbeitrag des Eigenwertes  $\lambda$  bei entsprechenden Anfangsbedingungen zwar vernachlässigbar klein, andererseits jedoch prinzipiell wichtig ist, z.B. für die Gleichgewichtslage  $\underline{x}$ , tritt hier deutlich in Erscheinung.

$$\lambda_1 = 1.000000$$

$$\lambda_2 = 0.999998$$

$$\lambda_3 = 0.965193$$

$$\lambda_4 = 0.957385$$

$$\lambda_5 = 0.927772$$

$$\lambda_6 = 0.628827$$

$$\lambda_7 = 0.079510$$

Tabelle 5: Eigenwerte der Matrix, die der in Tabelle 3 wiedergegebenen Matrix entsprechend Formel (3.38) zugeordnet ist. Das Eigenwertspektrum wurde um eins nach rechts verschoben.

Die erwähnte Gleichgewichtseinstellung von 80 Jahren hängt mit den speziell gewählten Anfangsbedingungen zusammen: Wird das System von der Box "Boden" her initiiert, so wird der Eigenwert  $\lambda$  wenig erregt, da die kleinste Transferate die Resuspension ist (sie ergibt eine Zeitkonstante von  $9 \cdot 10^8$  a).

## Literatur

### zu Kapitel 2:

- /1/ Hardy, E.; Key, D.W.; Volchok, H.L.: Global inventory and distribution of fallout plutonium. *Nature* 241, p. 444 (1973).
- /2/ Jakubick, A.T.: Geochemistry and -Physics of Plutonium Migration. In: *Origin and Distribution of the Elements*, L.H. Ahrens, Ed., Pergamon Press (1979).
- /3/ Jakubick, A.T.: Analysis of Pu-Release Consequences on the Environmental Geochemistry. In: *Scientific Basis for Nuclear Waste Management*, G.J. McCarthy, Ed., Plenum Publishing Corporation (1979).
- /4/ Frindik, O.: Plutonium im Getreide und Boden. *Lebensm. - Wissenschaft und Technol.* 10, p. 162-165 (1977).
- /5/ Frindik, O.: Plutonium im Gemüse, Obst und Böden. *Z. Pflanzenernähr. Bodenkd.* 141, p. 257-264 (1978).
- /6/ Gnersheva, G.I.: Uptake of plutonium-239 into agricultural plants from soil. *Biol. Naki*, 14, 60 (1971).
- /7/ Frindik, O.; Diehl, D.F.: Die Plutonium-Alpha-Aktivität von Lebensmitteln. *Deutsche Lebensmittel-Rundschau* 3, p. 100-102 (1975).
- /8/ ICRP Publication 8, Task Group of the ICRP on lung dynamics. Deposition and retention models for internal dosimetry of the human respiratory tract. *Health Phys.*, 12, 173 (1966).
- /9/ Jakubick, A.T.: In situ migration of Pu in geomedial. Workshop on the migration of long-lived radionuclides in the geosphere, Brussels, 29th-31st January, 1979. Commission of the European Communities, OECD Nuclear Energy Agency, in press.
- /10/ Chamberlain, A.C., and R.C. Chadwick: Deposition of Airborne Radioiodine Vapor. *Nucleonics*, 8, p. 22-25 (1953).

- /11/ Martin, W.E.: Interception and Retention of Fallout by Desert Shrubs. Health Physics, 11, p. 1341-1354 (1965).
- /12/ Romney, E.M.; Mork, H.M., and Lorson: Persistence of Plutonium in Soil, Plants, and Small Mammals. Health Physics, 19, p. 487-491 (1970).
- /13/ Bulman, R.A.: Concentration of actinides in the foodchain. Nat. Radiological Protection Board Harwell, NRPB-R 44 (1976).
- /14/ Martin, W.E. and S.G. Blom: Plutonium transport and Dose estimation model. In: Proc. Symposium on Transuranium Nuclides in the Environment, Vienna, IAEA (1976).

zu den Kapiteln 3 und 4:

- /15/ Avenhaus, R.; Fenyi, S.; Frick, H.: Box Models for the CO<sub>2</sub> cycle of the Earth. Environment International, in print.
- /16/ Aschinger, G.A.: Stabilitätsaussagen über Klassen von Matrizen mit verschwindenden Zeilensummen. Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems. Springer 1975.
- /17/ Fenyi, S.: Matrizentheoretische Formulierung von Erhaltungssätzen und deren Anwendung in Natur- und Wirtschaftswissenschaften. In Vorbereitung.
- /18/ Isaacson, D.L.; Madsen, R.W.: Markov Chains. Theory and Applications. Wiley 1976.
- /19/ Faddejew, D.R.; Faddejeva, W.N.: Numerische Methoden der linearen Algebra, Oldenbourg 1964.
- /20/ Henrici, R.: Elemente der numerischen Analysis. Bibliographisches Inst. Mannheim, 1972.
- /21/ Wilkinson, J.H.: Rundungsfehler. Springer 1969.
- /22/ Zadeh, L.A.: Linear System Theory. McGraw Hill, 1969.

- /23/ Bendixson, I.: Sur les racines d'une équation fondamentale.  
Acta math. 25, 367-370 (1902).
- /24/ ICRP Publication 29. Radionuclide Release into the Environment.  
Assessment of Doses to Man. Pergamon Press 1978.
- /25/ Schwiegk, H.; Turba, F. (Herausgeber): Künstliche radioaktive Isotope.  
Springer 1961.
- /26/ Avenhaus, R.; Hartmann, G.: The Carbon Cycle of the Earth. A Material  
Balance Approach. IIASA Report, RR-75-45 December 1975.



A n h a n g von J. Ludewig

Kurze Beschreibung eines Programmsystems zur interaktiven

Berechnung von Inventar-Vektoren

1. Das Hauptprogramm

Sei  $\underline{M}$  eine Markov'sche Übergangsmatrix (alle Zeilensummen sind gleich 1) der Größe  $n \times n$ . Der Inventar-Vektor ist definiert durch

$$(a) \quad \underline{x}^T \cdot \underline{M} = \underline{x}^T$$

und

$$(b) \quad \sum_{i=1}^n x_i = 1 .$$

Aus (a) folgt

$$\underline{x}^T \cdot \underline{M} = \underline{x}^T \cdot \underline{E} \quad \text{oder} \quad (\underline{M}^T - \underline{E}) \cdot \underline{x} = 0$$

was vereinfacht geschrieben wird

$$(c) \quad \underline{K} \cdot \underline{x} = \underline{0}$$

$$\text{mit } k_{i,j} = \begin{cases} m_{j,i} , & \text{falls } i \neq j \\ m_{j,i} - 1, & \text{falls } i = j \end{cases}$$

$\underline{x}$  kann also berechnet werden als Lösung des linearen Gleichungssystems (c), die nach (b) normalisiert ist.

Diese Rechnung wird vom Programm ELIMINATION ausgeführt.  $\underline{x}$  wird auf dem Bildschirm ausgegeben. Als Maß der Rechenungenauigkeit wird der Wert von  $k_{n,n}$  nach der Elimination angezeigt; er sollte sehr dicht bei Null, dem theoretischen Wert, liegen.

Die angezeigten Ergebnisse werden außerdem in eine Datei geschrieben, so daß sie dokumentiert werden können.

## 2. Eingabe der Übergangsmatrix

Die Änderung und Eingabe großer Matrizen (hier bis zur Ordnung  $n=10$ ) ist ohne spezielle Hilfsmittel umständlich und fehlerträchtig. Um viele Versuche mit unterschiedlichen Werten zu machen, wurde daher ein spezielles Eingabeprogramm realisiert. Es ist darauf abgestimmt, daß die Matrix unter SPF, dem komfortabelsten verfügbaren Editor unseres Großrechners, aufgebaut und modifiziert wird.

Zunächst wurde eine Darstellung entworfen, die es erlaubt, die gesamte Matrix auf dem Bildschirm (22 Zeilen von 72 Zeichen) zu zeigen. Jedes Element hat die Form

.1234  
E-12 .

Da alle Spaltensummen gleich 1 sind, ist ein Element jeder Spalte redundant. Daher wird die Hauptdiagonale nicht eingegeben. Sie ist zur besseren Übersicht durch 'xxx' markiert.

Die Subroutine MATIN liest eine Datei der beschriebenen Form, wie sie am Beispiel für  $n=7$  abgebildet ist, ein, prüft die formale Korrektheit (Einhaltung des Formats) und wandelt sie in ein normales FORTRAN-Feld. Ferner identifiziert sie  $n$ , die Ordnung der Matrix.

```
EDIT --- TS0535.EIN7.DATA ----- COLUMNS 001 072
COMMAND INPUT ==> _ SCROLL ==> HALF
***** ***** TOP OF DATA *****
000100      1      2      3      4      5      6      7
000200 1 XXX      .2500 .0000 .0000 .0000 .0000 .0000
000300      XXX  E-10  E-00  E-00  E-00  E-00  E-00
000400 2 .2500 XXX      .1400 .2300 .2300 .0000 .0000
000500      E-00  XXX  E-05  E-01  E-01  E-00  E-00
000600 3 .0000 .0000 XXX      .2100 .2200 .4100 .9200
000700      E-00  E-00  XXX  E-01  E-01  E-01  E-00
000800 4 .5800 .0000 .6800 XXX      .0000 .0000 .0000
000900      E-01  E-00  E-08  XXX  E-00  E-00  E-00
001000 5 .5800 .0000 .6800 .0000 XXX      .0000 .0000
001100      E-01  E-00  E-08  E-00  XXX  E-00  E-00
001200 6 .1700 .0000 .0000 .0000 .2200 XXX      .0000
001300      E-04  E-00  E-00  E-00  E-01  XXX  E-00
001400 7 .2900 .0000 .0000 .5900 .0000 .2700 XXX
001500      E-05  E-00  E-00  E-03  E-00  E-02  XXX
***** ***** BOTTOM OF DATA *****
```

SPF-Darstellung der Matrix auf dem Bildschirm.

### 3. Kommando-Prozeduren

Es stehen Kommando-Prozeduren zur Verfügung, um

- eine neue Matrix der Ordnung n zu generieren (alle Elemente außerhalb der Hauptdiagonalen mit 0 vorbelegt),
- das FORTRAN-Programm ELIMINATION mit seiner Subroutine MATIN zu starten.

Der Anwender braucht außer geringen Kenntnissen von SPF nur die Aufrufe dieser beiden Prozeduren zu kennen (die jeweils einen HELP-Parameter haben, der die Ausgabe einer Anleitung bewirkt).

```
C      BERECHNUNG DES INVENTAR-VEKTORS
C
C      REAL*8 TRANS(10,10)
C      INTEGER N
C      LOGICAL OK
C
C      WRITE (23,5)
C 5 FORMAT(//' BERECHNUNG DES INVENTAR-VEKTORS'/)
C
C      CALL MATIN(N, TRANS, OK)
C      IF (OK) CALL ELIM(N, TRANS)
C
C      STOP
C      END
C
C
C
C
C
C
C
C
C      SUBROUTINE MATIN(N, TRANS, OK)
C      INTEGER N
C      REAL*8 TRANS(10,10)
C      LOGICAL OK
C
C      PROGRAMM ZUM EINLESEN EINER UEBERGANGSMATRIX
C      JOCHEN LUDEWIG      IDT/KFK      79-12-12
C
C      PARAMETER:
C          N :   ECHTE ORDNUNG DER MATRIX TRANS
C          TRANS : UEBERGANGSMATRIX (AUSGABE-PARAMETER)
C                  MUSS MIT DER DIMENSION 10 X 10 DEKLARIERT SEIN
C          OK:   TRUE, WENN DIE EINGABE AKZEPTIERT IST
C
C      ACHTUNG, DIE DEKLARATIONEN VON N UND TRANS MUESSEN IN ALLEN
C      PROGRAMMEN UEBEREINSTIMMEN.
C
C      MATIN BENUTZT DIE FORTRAN-FILES 21, 22, 23 WIE FOLGT:
C          21   EINGABE-MATRIX (IM FORMAT WIE NULLMAT.DATA)
C          22   SCRATCH-FILE
C          23   AUSGABE (NUR FUER FEHLERMELDUNGEN)
C      DIE KOMMANDO-PROZEDUR LIESMAT.CLIST ALLOKIERT ALLE DREI FILES
C      AUTOMATISCH, FILE 23 AUF DAS TERMINAL. FILE 22 WIRD ANGELEGT
C      UNTER DEM NAMEN HILF.DATA. FILE 21 IST MATIN.DATA.
C
```

```
C
C MANT(10) UND EXP1(10), EXP2(10) ENTHALTEN MANTISSE UND EIN- ODER
C ZWEISTELLIGE EXPONENTEN, DIE ZUSAMMEN EINE ZEILE DER UEBERGANGS-
C MATRIX BILDEN.
C DEZIMAL-PUNKT, BLANK UND BLANKE WERDEN ZUR PRUEFUNG DES FORMATS
C VERWENDET UND MIT POINT0, BLANK0 AND BLNKE0 VERGLICHEN.
C ZERO UND ZEREXP WERDEN BENOETIGT, UM DIE HAUPTDIAGONALE AUF NULL
C ZU SETZEN. I UND J SIND DIE INDIZES FUER ZEILEN UND SPALTEN.
C
C INTEGER*2 POINT0/'.'/, BLANK0/' '/, ZEREXP/'0'/,
* POINT(10), BLANK(10), EXP1(10), EXP2(10),
* I, J, DIM(10)
C INTEGER*4 ZERO/'0000'/, MANT(10)
C REAL*8 BLNKE0/' E-'/, BLANKE(10)
C
C REWIND 21
C REWIND 22
C
C SET TRANS TO ZERO.
C
C DO 100 I=1,10
C DO 100 J=1,10
C TRANS(I,J)=.0
100 CONTINUE
C
C UEBERSCHRIFT LESEN ZUR ERMITTLUNG DER ORDNUNG VON TRANS.
C DIE UEBERSCHRIFT HAT DAS FORMAT
C      1      2      3 ..... (BIS N)
C
C READ (21,7) (DIM(I), I=1,10)
C 7 FORMAT(10I7)
C
C DO 8 I = 1,10
C IF (DIM(I) .EQ. I) N = I
C 8 CONTINUE
C
C HAUPTSCHLEIFE ZUM LESEN UND UMWANDELN DER MATRIX.
C
C DO 120 I=1,N
C
C DIE ZEILEN MIT DEN MANTISSEN HABEN DAS FORMAT
C NN .1000 .2000 .9999 ..... (NN IST DIE ZEILENNUMMER IN SP.1)
C
C READ (21,10) (POINT(J),MANT(J),BLANK(J), J=1,N)
10 FORMAT(2X,10(A2,A4,A1))
C
C DIE ZEILEN MIT DEN EXPONENTEN HABEN DAS FORMAT
C E-00 E-1 E-17 ..... (E UND MINUS SIND OBLIGATORISCH)
C
C READ (21,20) (BLANKE(J),EXP1(J),EXP2(J), J=1,N)
20 FORMAT(2X,10(A5,A1,A1))
C
```

```
C
C   HAUPT-DIAGONALE AUF NULL SETZEN.
C
C   MANT(I)=ZERO
C   EXP1(I)=ZEREXP
C   EXP2(I)=ZEREXP
C
C   STRUKTUR DER EINGELESENEN ZEILE PRUEFEN.
C
C   DO 110 J=1,N
C   IF (I .EQ. J) GOTO 110
C   IF (POINT(J) .NE. POINTO .OR.
*   BLANK(J) .NE. BLANKO .OR.
*   BLANKE(J) .NE. BLNKEO)      GOTO 200
C
C   EINSTELLIGEN EXPONENTEN IN ZWEISTELLIGEN UMWANDELN
C
C   IF (EXP2(J) .NE. BLANKO) GOTO 110
C   EXP2(J) = EXP1(J)
C   EXP1(J) = ZEREXP
C
C 110 CONTINUE
C
C   DIE UMGEWANDELTE ZEILE WIRD IN EINEN SCRATCH-FILE GESCHRIEBEN;
C   MANTISSE UND EXPONENT STEHEN JETZT HINTEREINANDER, UM NACHFOLGEND
C   IM E-FORMAT EINLESEN ZU KOENNEN.
C
C   WRITE (22,30) (MANT(J) ,EXP1(J), EXP2(J), J=1,10)
C   30 FORMAT (10(A4,1H-,A1,A1))
C
C 120 CONTINUE
C
C   ZEILENWEISES EINLESEN DES SCRATCH-FILES NACH TRANS
C
C   REWIND 22
C   DO 130 I=1,N
C   READ (22,40) (TRANS(I,J), J=1,N)
C 130 CONTINUE
C   40 FORMAT (10E7.4)
C
C   OK = .TRUE.
C   GOTO 999
C
C   FEHLERBEHANDLUNG
C
C 200 WRITE (23,50) I,J
C   50 FORMAT (/ ' ***** FEHLER IN ZEILE ',I2,', SPALTE ',I2,' *****')
C   OK = .FALSE.
C 999 RETURN
C   END
C
C
```

```
C
SUBROUTINE ELIM (N, TRANS)
C
ELIMINATION FUER DIE UEBERGANGSMATRIX
REAL*8 TRANS(10,10), INV(10), SUM, INVIL
INTEGER N, NMIN1
NMIN1 = N-1

C
C
C
ELEMENTE IN DER HAUPTDIAG. BESETZEN MIT DER NEGATIVEN ZEILENSUMME
C
DO 20 I=1,N
SUM = .0
DO 10 J=1,N
SUM = SUM - TRANS(J,I)
10 CONTINUE
TRANS(I,I) = SUM
20 CONTINUE

C
C
C
UMWANDLUNG VON TRANS IN EINE OBERE DREIECKSMATRIX
C
DO 35 K = 1,NMIN1
C
IF (TRANS(K,K) .NE. .0) GOTO 25
C
DIESER ZWEIG WIRD NIEMALS DURCHLAUFEN, WENN DIE MATRIX KORREKT IST
WRITE (23,22)
22 FORMAT (/ ' RANG DER MATRIX IST KLEINER ALS N - 1 ' //)
GOTO 100

C
25 NBEGIN= K+1
DO 30 I = NBEGIN,N
DO 30 J = NBEGIN,N
TRANS(I,J) = TRANS(I,J) - TRANS(I,K)*TRANS(K,J)/TRANS(K,K)
C
DA DIE ELEMENTE AUSSERHALB DER HAUPTDIAGONALEN KLEIN SIND,
C
KOENNEN DIE DER HAUPTDIAGONALEN ALS PIVOTS GENOMMEN WERDEN.
30 CONTINUE

C
35 CONTINUE

C
```

```
C
C   BERECHNUNG DES INVENTAR-VEKTORS VON HINTEN NACH VORN
C
C   INV(N) = 1.
C   1. IST EIN FREI GEWAHLTER WERT.
C   SUM = .0
C
C   DO 50 MI = 1,NMIN1
C   INVIL = .0
C   IL = N - MI
C
C           D.H. IL = N-1, 1   (LAEUFT RUECKWAERTS)
C   ILPL1 = IL + 1
C
C   DO 45 L = ILPL1, N
C   INVIL = INVIL - TRANS(IL,L) * INV(L)
45 CONTINUE
C
C   INV(IL) = INVIL / TRANS(IL,IL)
C   SUM = SUM + INV(IL)
50 CONTINUE
C
C
C   NORMALISIEREN DES INVENTAR-VEKTORS AUF SUMME 1
C
C   DO 70 I = 1,N
70 INV(I) = INV(I) / SUM
C
C   AUSGABE AUF DISPLAY ( = FILE 23 ) UND AUF FILE 22
C
C   REWIND 22
C
C   WRITE (23,80) (I, INV(I),I=1,N)
C   WRITE (22,80) (I, INV(I),I=1,N)
80 FORMAT (/ ' INVENTAR-VEKTOR' ,
*         / ' ===== ' , 10(/I3,D12.4)/)
C   WRITE (23,90) N,N,TRANS(N,N)
C   WRITE (22,90) N,N,TRANS(N,N)
90 FORMAT ( ' RECHEN-UNGENAUIGKEIT: TRANS(' ,I2,' ' ,I2,' ) = ' , D12.4//)
C   WRITE (23,95)
95 FORMAT ( ' AUSGABE STEHT AUF FILE 22, EINGABE IST UNVERAENDERT' )
C
100 RETURN
END
```