

Technická zpráva číslo 481/2020

TESTOVÁNÍ TRANSPORTNÍCH MODELŮ S VYUŽITÍM IN-SITU ZAHRANIČNÍCH EXPERIMENTŮ

ZÁVĚREČNÁ ZPRÁVA

Autoři: Milan Hokr, Václava Havlová,
Aleš Vetešník, Libor Gvoždík
a kolektiv

Technická univerzita v Liberci

Liberec, únor 2020



SÚRAO

Název projektu: Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště

Název dílčího projektu: Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů

Název dílčí etapové zprávy: Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů

Závěrečná zpráva

Evidenční číslo objednatele: SÚRAO TZ 481/2020

Evidenční číslo poskytovatele: PB-2020-ZZ-S1900-022-Transport4

ŘEŠITELÉ:

Technická univerzita v Liberci¹, ÚJV Řež², FJFI ČVUT³, PROGEO s.r.o.⁴

Autoři: Milan Hokr¹, Václava Havlová², Aleš Vetešník³, Libor Gvoždík⁴

Autorský kolektiv: Martin Milický⁴, Michal Polák⁴, Dan Reimitz³, Jakub Říha¹, Dagmar Trpkošová², Jakub Višňák³, Dušan Vopálka³

Horní Indexy u jmen autorů odkazují na výčet institucí výše.



SÚRAO



SÚRAO

Obsah

1	Úvod	20
1.1	Kontext prací – projekt GWFTS, Task 9	20
1.2	Struktura náplně projektu a zprávy	22
2	Simulační softwaru a metodiky výpočtů	24
2.1	Flow123d	24
2.2	Goldsim	25
2.2.1	Metodika řešení pomocí <i>Cell pathway</i> s ohledem na možnosti propojování objektů tohoto typu v rámci tzv. <i>Cell net</i>	26
2.2.2	Metodika řešení pomocí <i>Pipe pathway</i>	28
2.2.3	Význam frakce porozity v Goldsim	29
2.3	ConnectFlow/NAPSAC	30
2.4	MT3DMS	31
3	Řešení úlohy WPDE (Task 9A)	33
3.1	Shrnutí zadání a vstupních dat	33
3.2	Realizace modelového řešení	35
3.2.1	Řešení pomocí Goldsim <i>Pipe pathway</i>	35
3.2.2	Řešení pomocí Goldsim <i>Cell Net</i>	37
3.2.3	Řešení ve Flow123d	39
3.2.4	Řešení v MODFLOW/MT3D	42
3.3	Porovnání průnikových křivek	43
3.4	Výpočty a porovnání citlivosti	47
3.4.1	Metodika výpočtu citlivosti	48
3.4.2	Výsledky	49
3.5	Kalibrace modelu na měření	58
3.6	Doplňující analýzy	61
3.6.1	Ovlivnění pořadím experimentů	61
3.6.2	Vliv diskretizace Flow123d	62
3.6.3	Vliv diskretizace a variant v MT3D	63
3.7	Závěry z modelování WPDE	66
4	Řešení úlohy LTDE-SD (Task 9B)	67
4.1	Shrnutí zadání a dat	67
4.2	Porovnání modelů na úvodním příkladu	71
4.2.1	Vstupní data	71
4.2.2	Výsledky porovnání	72

4.3	Inverzní model Flow123d	74
4.3.1	Etapa 1	75
4.3.2	Etapa 2	81
4.4	Inverzní model Goldsim.....	84
4.4.1	Etapa 1	84
4.4.2	Etapa 2	89
4.5	Závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře.....	93
5	Modelování LTDE-SD pomocí konceptu mikro-DFN	94
5.1	Shrnutí vstupních dat	94
5.2	Metodika mikro-DFN modelování	96
5.3	Výsledky mikro-DFN modelování	97
5.3.1	Optimalizace hustoty mikropuklin	98
5.3.2	Vliv pozadřových mikropuklin na výsledky transportu	99
5.3.3	Simulace difuze sorbujícího se stopovače.....	100
5.3.4	Simulace experimentu LTDE – vyhodnocení výsledků	101
6	Řešení úlohy TDE (Task 9C)	105
6.1	Shrnutí zadání a dat.....	105
6.2	Realizace modelů.....	107
6.2.1	Řešení Task 9C pomocí Flow123d.....	107
6.2.2	Řešení Task 9C pomocí Goldsim (ÚJV).....	110
6.2.3	Řešení FJFI (varianta Goldsim a analytické).....	114
6.3	Porovnání řešení referenční varianty.....	116
6.4	Analýza vlivu advekce	120
6.5	Inverzní model TUL.....	125
6.6	Inverzní model ÚJV	132
6.7	Inverzní model a vyhodnocení PROGEO	139
6.8	Zjednodušené analytické řešení (TUL).....	144
6.9	Alternativní vyhodnocení (FJFI).....	145
6.10	Závěry.....	146
7	Řešení úlohy transportu v měřítku SA (Task 9D)	147
7.1	Shrnutí zadání a dat.....	147
7.1.1	Krok 9D-1 – fiktivní stopovače.....	148
7.1.2	Krok 9D-2 – rozpadová řada	149
7.2	Řešení Flow123d (TUL)	151
7.2.1	9D-1.....	151

7.2.2	9D-2	152
7.3	Varianty řešení FJFI	152
7.3.1	Analytické řešení	152
7.3.2	Model v GoldSim	154
7.4	Řešení Goldsim (ÚJV)	154
7.5	Řešení MT3D (PROGEO)	155
7.6	Porovnání řešení	157
7.6.1	9D-1	157
7.6.2	9D-2	160
7.6.3	Pomocná úloha s jednotnou sorpcí	162
7.7	Ověření vlivů ve výpočtu	164
8	Závěr	168
9	Reference	170

Seznam obrázků:

Obr. 1	Návaznost jednotlivých kroků řešení Task 9 v programu TF GWFTS (Lofgren et al, 2015)	23
Obr. 2	Ilustrace významu propojení podoblastí různých dimenzí v modelu transportu použitém v softwaru Flow123d.	25
Obr. 3	Schématické znázornění pravoúhlé (A) a válcové (B) geometrie sítě cel. Převzato a upraveno z (GoldSim 2014)	27
Obr. 4	Schéma konfigurace experimentu WPDE, který je modelování v kroku 9A (řešení popsáno níže v této zprávě) (Lofgren et al, 2015)	33
Obr. 5	Koncepční model transportu radionuklidů v experimentu WPDE pro Task 9A.	34
Obr. 6	Rozdělení transportní cesty do jednotlivých částí dle jejich geometrie a procesů v nich uvažovaných.	36
Obr. 7	Schématické znázornění koncepčního modelu WPDE1-2 experimentů v GoldSim – pomocí sítě cel pro horninu a štěrbinu a dále dvou elementů Pipe pathway (PipeInlet a PipeOutlet) pro přívodní a odvodní hadičky.	38
Obr. 8:	Geometrie modelu WPDE pro slepou predikci. Červená část představuje žilkovanou rulu (VGN) a zelená část představuje pegmatitovou žulu (PGR).	39
Obr. 9:	Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci (část PGR skryta, aby byly vidět diskretizace pukliny)	40
Obr. 10	Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci – řez. Dvě tenké vrstvy elementů matrice kolem pukliny.	40
Obr. 11	Geometrie a diskretizace modelu	43
Obr. 12	Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-1 jednotlivými modely pro HTO.	44

Obr. 13 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-1 jednotlivými modely pro Na-22.	44
Obr. 14 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-1 jednotlivými modely pro Cl-36.	45
Obr. 15 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro HTO.	45
Obr. 16 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Na-22.	46
Obr. 17 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Cl-36.	46
Obr. 18 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Sr-85.	47
Obr. 19 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Ba-133.	47
Obr. 20 Citlivost průnikových křivek HTO ve WPDE-2 na disperzi (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.	51
Obr. 21 Citlivost průnikových křivek Na-22 ve WPDE-2 na disperzi (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.	51
Obr. 22 Citlivost průnikových křivek HTO ve WPDE-2 na pórovitost (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.	52
Obr. 23 Citlivost průnikových křivek Ba-133 ve WPDE-2 na efektivní difúzní koeficient (D) a koeficient sorpce (K) (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.	52
Obr. 24 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – HTO	59
Obr. 25 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – Sr-85	61
Obr. 26 WPDE – sekvenční simulace obou experimentů – výsledky – HTO.....	62
Obr. 27 WPDE-2 – Ba-133 – vliv diskretizace, srovnání s měřenými daty a výsledky modelu GoldSim	63
Obr. 28 Vliv diskretizace modelu na průběh průnikové křivky Na-22 (var0)	64
Obr. 29 Vliv disperze a rozevření pukliny na průběh průnikové křivky HTO	65
Obr. 30 Konfigurace experimentu LTDE-SD: Vlevo vrty protínající puklinu, umístění objemu s roztokem radionuklidů, směr migrace a poloha obvrtného bloku. Vpravo konfigurace vzorkování jádra z obvrtní a volba profilů pro modely Task 9B-1 (níže). Žlutě je vyznačena izolace oddělující oblast jádra o průměru 177 mm, která byla v kontaktu s radionuklidy, zatímco vnější měla být teoreticky nezasažena. (Lofgren et al, 2015)	68
Obr. 31 Konfigurace experimentu LTDE-SD se znázorněním geometrického významu modelů pro dva typy vzorků (axisymetrický pro D a jednorozměrný pro A)	68
Obr. 32 Schéma přípravy analyzovaných vzorků z vrtného jádra (převzato z Lofgren et al, 2015).	69
Obr. 33 LTDE-SD – rozměry a umístění experimentálních sekcí.....	70
Obr. 34 Výsledky in-situ difúzního experimentu LTDE-SD – koncentrační profily pro Na-22 a Cl-36 – měřená data vs. Model. Převzato z (Nilsson et al. 2010, Obrázky 4-1a a 4-2a).....	71

Obr. 35 Porovnání profilů Na-22 spočtených modely Flow123d, GoldSim (Cell net) a MT3DMS pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).....	73
Obr. 36 Porovnání profilů Cl-36 spočtených modely Flow123d a GoldSim (Cell net) pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).	73
Obr. 37 Porovnání profilů Ni-63 spočtených modely Flow123d a GoldSim (Cell net) pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).	73
Obr. 38 Porovnání profilů Cs-137 spočtených modely Flow123d a GoldSim (Cell net) pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).	74
Obr. 39 Porovnání profilů Cl-36 spočtených modely Flow123d, GoldSim (Cell net) a MT3DMS pro typ D a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).....	74
Obr. 40 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)	76
Obr. 41 LTDE-SD – závislost hodnoty distribučního koeficientu lineární sorpce na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu).....	76
Obr. 42 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Na-22	78
Obr. 43 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cl-36	79
Obr. 44 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Co-57	79
Obr. 45 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63	80
Obr. 46 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ba-133	80
Obr. 47 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cs-137	81
Obr. 48 LTDE-SD – model roztoku – Cs-137.....	83
Obr. 49 LTDE-SD – model roztoku – Ni-63.....	83
Obr. 50 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63	84
Obr. 51 Rozdělení 1D sítě do 17 oddělených částí v grafickém rozhraní GoldSim.	84
Obr. 52 Jedna ze 17 oddělených částí 1D sítě v grafickém rozhraní GoldSim. V oddělené části jsou definovány vlastní hodnoty transportních parametrů pomocí elementů FluidS8 a SolidS8. Vlastní podsít konečných objemů byla tvořena pěti elementy Cell (S8_Z1R1- S8_Z5R1), přičemž difúzní délky se lišily pro jednotlivé oddělené části podobně, jako se měnily tloušťky jednotlivých řezů odebraných z horniny.....	85
Obr. 53 Zadání objektové funkce pro optimalizaci v grafickém prostředí GoldSim.....	87

Obr. 54 Srovnání experimentálního a modelového průběhu aktivity Cl-36 v horninové vrstvě.	87
Obr. 55 Závislost D_e rovnice (3.1) na vzdálenosti od zdroje pro Cl-36 pro optimální hodnoty parametrů $D_{e0} = 1,002 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$, $\alpha = 3,18 \cdot 10^{-6}$, $n = 3,13$. Oranžová úsečka označuje limitní hodnotu difúzního koeficientu ve vodě.....	88
Obr. 56 Srovnání experimentálního a modelového průběhu aktivity Na-22 v horninové vrstvě.	88
<i>Obr. 57 Autoradiograf (nalevo) a fotografie (napravo) řezu vzorku A.9. Černě zbarvené části v autoradiografu je možné interpretovat jako síť mikropuklin, které představují preferenční transportní cesty. Převzato z (Löfgren et al. 2015).</i>	89
Obr. 58 Detail geometrie cylindrické sítě modelu D vzorku, barevně jsou odlišeny oblasti různých modelových hornin (prostorově proměnné parametry).	90
Obr. 59 Srovnání experimentálních a modelových průběhů aktivity pěti radionuklidů v horninové vrstvě.....	92
Obr. 60 Snímek mikrostruktury získaný metodou C-14-PMMA – vzorek LTDE-SD1 (DD18, 2017).....	95
Obr. 61 Snímek mikrostruktury získaný metodou C-14-PMMA – vzorek LTDE-SD2 (DD18, 2017).....	95
Obr. 62 Vymezení základních prvků charakteristických pro horninovou matici – BDZ, delší významnější mikropukliny a méně významné mikropukliny tvořící pozadí snímku. Vlevo mikrosnímek horninové matrice (vzorek LTDE-SD2) a vpravo řez sestaveným mikro-CPM modelem s náhodně generovanou sítí mikropuklin.....	97
Obr. 63 Řezy generovanými mikropuklinovými sítěmi pro různé hodnoty parametru A mocninné funkce. Nahoře řezy mikro-DFN modelem, dole modely převedené na mikro-CPM.	98
Obr. 64 Variantní simulace průniku stopovače pro různá nastavení transportních parametrů menších mikropuklin na pozadí – prostorová distribuce aktivity ve 3D doméně.....	99
Obr. 65 Variantní simulace průniku stopovače pro různá nastavení transportních parametrů menších mikropuklin na pozadí – množství stopovače v řezech modelovou doménou.	100
Obr. 66 Laboratorní difuzní experiment LTDIII – koncepce horninové matrice bez významných mikropuklin s rozdělením domény dle procentuálního zastoupení minerálů (Aarský granit)100	
Obr. 67 Laboratorní difuzní experiment LTDIII – porovnání měřených průnikových křivek s výsledky kalibrovaného modelu (vlevo vstupní rezervoár, vpravo výstupní rezervoár difuzní cely)	101
Obr. 68 Cl-36 – porovnání měřených dat a modelových výsledků – vlevo řezy vzorkem a modelovou doménou, vpravo průběh aktivity ve zdrojovém rezervoáru.....	104
Obr. 69 Na-22 – porovnání měřených dat a modelových výsledků – vlevo řezy vzorkem a modelovou doménou, vpravo průběh aktivity ve zdrojovém rezervoáru.....	104
Obr. 70 Cs-137 – porovnání měřených dat a modelových výsledků – vlevo řezy vzorkem a modelovou doménou, vpravo průběh aktivity ve zdrojovém rezervoáru.....	104
Obr. 71 Schéma sestavy vrtů v místě a okolí experimentu TDE – injekční vrt má číslo 326 a monitorovací vrty jsou 324 a 327 (převzato z Löfgren et al. 2017).	106

Obr. 72 Task 9C – Flow123d – výpočetní síť modelu	109
Obr. 73 Znázornění diskretizace pro nesorbující se nuklidy, hrubší dělení modelové oblasti mezi monitorovacím a injekčním vrtem.....	112
Obr. 74 Znázornění diskretizace pro nesorbující se nuklidy, detailnější dělení modelové oblasti mezi monitorovacím a injekčním vrtem.....	112
Obr. 75 Znázornění rovnoměrné diskretizace pro sorbující se nuklidy, diskretizace modelové oblasti byla dělána ve třech variantách.....	113
Obr. 76 Znázornění nerovnoměrné diskretizace pro sorbující se nuklidy, diskretizace modelové oblasti byla dělána ve dvou variantách, diskretizace ve směru osy x je shodná jako diskretizace ve směru osy y.....	114
Obr. 77 Planární 2D síť použitá v GoldSim pro úlohu 9C.....	115
Obr. 78 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač HTO, průběh v injektážním vrtu vlevo a v obou detekčních vrtech vpravo.	117
Obr. 79 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Cl-36, průběh v injektážním vrtu vlevo a v obou detekčních vrtech vpravo.	117
Obr. 80 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Na-22, průběh v injektážním vrtu ve dvou různých měřících os.	118
Obr. 81 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Ba-133, průběh v injektážním vrtu.	118
Obr. 82 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Cs-134, průběh v injektážním vrtu.	118
Obr. 83 Vývoj aktivity Na-22 v injekčním vrtu pro čtyři uvažované diskretizace modelu ÚJV-Goldsim.....	119
Obr. 84 Detail vývoje aktivity Na-22 v injekčním vrtu pro čtyři uvažované diskretizace modelu ÚJV-Goldsim.	119
Obr. 85 Detail vývoje aktivity Na-22 v injekčním vrtu dle modelu ÚJV-Goldsim – porovnání rovnoměrného a nerovnoměrného rozdělení modelové oblasti, křivky pro nerovnoměrné dělení oblasti se překrývají	120
Obr. 86 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem od injektážního vrtu – závislost relativní aktivity na čase v injektážním vrtu	121
Obr. 87 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem od injektážního vrtu – závislost relativní aktivity na čase v monitorovacích vrtech	121
Obr. 88 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem k injektážnímu vrtu – závislost relativní aktivity na čase v injektážním vrtu	122
Obr. 89 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem k injektážnímu vrtu – závislost relativní aktivity na čase v monitorovacích vrtech	122
Obr. 90 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem k injektážnímu vrtu – vývoj koncentračního pole (v časech 1, 2, 3, 4, 5 a 10 let)	123
Obr. 91 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – měřený tlakový spád – vývoj okrajové podmínky proudění.....	124

Obr. 92 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – měřený tlakový spád – závislost relativní aktivity na čase v injektážním vrtu	124
Obr. 93 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – měřený tlakový spád – závislost relativní aktivity na čase v monitorovacích vrtech	125
Obr. 94 Task 9C – Flow123d – aktualizovaná výpočetní síť pro inverzní model	126
Obr. 95 Task 9C- Flow123d – rozložení porozity v modelové oblasti.....	128
Obr. 96 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, HTO	129
Obr. 97 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, HTO varianta 2.....	129
Obr. 98 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, CI-36	130
Obr. 99 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, Na-22.....	130
Obr. 100 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, Ba-133	131
Obr. 101 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, Cs-134	131
Obr. 102 Původní měřená data, strmý pokles během prvního dne přičítán nastavení vlastního experimentu	133
Obr. 103 Vývoj aktivity v injekčním vrtu	133
Obr. 104 Vývoj aktivity v monitorovacím vrtu	134
Obr. 105 Vývoj aktivity v monitorovacím vrtu	134
Obr. 106 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro původní publikovaná data pro různou kombinaci modelových parametrů	135
Obr. 107 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro ořezaná data pro různou kombinaci modelových parametrů	135
Obr. 108 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro původní publikovaná data, vývoj aktivity v injekčním vrtu.....	136
Obr. 109 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro ořezaná data, vývoj aktivity v injekčním vrtu	136
Obr. 110 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky v monitorovacím vrtu	137
Obr. 111 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky v monitorovacím vrtu	137
Obr. 112 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro různou kombinaci modelových parametrů, vývoj aktivity v injektážním vrtu.....	138
Obr. 113 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro různou kombinaci modelových parametrů, vývoj aktivity v injektážním vrtu.....	138
Obr. 114 Task 9C – měřené relativní aktivity HTO a CI-36 v pozorovacích vrtech PP324 a PP327	140
Obr. 115 Tack 9C – MT3DMS – diskretizace modelové domény – vlevo celý model o velikosti 500x500 mm, vpravo výřez s vyznačenou výpočetní sítí modelových buněk 1x1 mm	141
Obr. 116 Task 9C – simulace HTO v MT3DMS – varianta kalibrace aktivity v injektážním vrtu PP326. Vlevo porovnání měřené a modelové průnikové křivky v injektážním vrtu, vpravo v pozorovacích vrtech.....	143

Obr. 117 Task 9C – simulace HTO v MT3DMS – varianta kalibrace aktivity v pozorovacích vrtech PP324 a PP327. Vlevo porovnání měřené a modelové průnikové křivky v injektážním vrtu, vpravo v pozorovacích vrtech.	143
Obr. 118 Task 9C – heterogenní pórovitost zadaná na základě mikrosnímku horninové matrice	144
Obr. 119 Ověření předpokladu lineárního růstu koncentrace a souvisejícího konstantního toku hmoty.	145
Obr. 120 Srovnání časových průběhů koncentrací v PP324 pro model s PP324 bez hraniční podmínky.....	146
Obr. 121 Schéma úlohy transportu s difúzí do matrice v měřítku odpovídajícím bezpečnostnímu výpočtu.....	148
Obr. 122 Odvození zjednodušené rozpadové řady (převzato z Crawford,2019).	150
Obr. 123 Schéma transportu v zidealizované puklině s rozevřením 2b; modré šipky označují směr advektivního toku, oranžové šipky difúzí do matrice, c, z, t označuje koncentraci radionuklidu v proudící vodě, c', x, z, t koncentraci v pórové vodě horninové matrice.	152
Obr. 124 Schéma transportní části modelu úlohy 9D v GoldSim.	154
Obr. 125 Způsob simulace pukliny v programu GoldSim, schéma matematického modelu	155
Obr. 126 Task 9D - diskretizace modelové domény v řešení PROGEO	156
Obr. 127 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer A ve (4 modely).	158
Obr. 128 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer B (3 modely a varianta bez disperze korespondující s analytickým řešením).	158
Obr. 129 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer C (4 modely).	158
Obr. 130 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer D (3 modely a varianta bez disperze korespondující s analytickým řešením).	159
Obr. 131 Porovnání řešení 9D-1-b průnikových křivek pro všechny tracery (A – 4 modely, B – 3 modely, C – 4 modely, D – 3 modely).	159
Obr. 132 Porovnání řešení 9D-1 příčných profilů dvěma modely (Flow123d a GoldSim – GS) pro všechny tracery, vlevo pulsní přítok bez rozpadu (varianta a), vpravo kontinuální přítok s rozpadem (varianta b).....	160
Obr. 133 Porovnání řešení 9D-2 průnikových křivek pro 6 radionuklidů v rozpadové řadě (Pb je graficky nerozlišitelné od Po) – dva nezávisle zpracované výpočty Goldsim.....	161
Obr. 134 Porovnání řešení 9D-2 průnikových křivek pro 5 radionuklidů v rozpadové řadě (Pb není vyneseno, je graficky nerozlišitelné od Po) – výpočty 3 různými softwary	161
Obr. 135 Kontrolní porovnání průnikových křivek 9D-1 (tracer D) a 9D-2 (uran) mezi Flow123d(TUL) a GoldSim (ÚJV).	162
Obr. 136 Průnikové křivky u pomocného modelu (profily Po a Pb jsou identické s Ra u obou modelů).	163
Obr. 137 Příčné profily u pomocného modelu (profily Po a Pb jsou identické s Ra u obou modelů).	163

Obr. 138 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač A	164
Obr. 139 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač B	165
Obr. 140 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač C	165
Obr. 141 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač D	166
Obr. 142 Task9D-1a – vliv mocnosti horninové matrice – normalizované průnikové křivky.	167
Obr. 143 Task9D-1a – vliv disperze v puklině – normalizované průnikové křivky.....	167

Seznam tabulek:

Tab. 1 Transportní parametry uvažované v matematickém modelu, které jsou společné pro všechny tři modely (výpočty v podkapitole 3.3). Koeficient difúze ve volné vodě (referenční) je v ostatních modelech jiný a je uveden v příslušných kapitolách. Pro hodnoty neuvedené v zadání je citován zdroj.	34
Tab. 2: Časové konstanty experimentů a modelu transportu.	34
Tab. 3 Geometrie jednotlivých částí transportní cesty (úseky horniny VGN2, PGR1, VGN1 jsou uvedeny ve směru transportu, tj. od vzdálenějšího konce vrtu k ústí).	35
Tab. 4 Injektovaná aktivita radionuklidů v experimentech WPDE_1 a WPDE_2.	35
Tab. 5 Znázornění transportních procesů uvažovaných v jednotlivých částech transportní cesty.....	37
Tab. 6: Parametry modelu proudění.	40
Tab. 7 Hodnoty mezí parametrů pro výpočty citlivosti a nejistot. ZD označuje zadávací dokumentaci, tj. zprávu (Lofgren et al. 2015).	49
Tab. 8 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro HTO.	53
Tab. 9 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Na-22.	54
Tab. 10 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Cl-36.	55
Tab. 11 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Sr-85.	56
Tab. 12 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Ba-133.	57
Tab. 13 Vliv změny porozity na efektivní difuzivitu.	59
Tab. 14 WPDE-2 – rozdělení horninové matrice do vrstev.	60
Tab. 15 Přehled prezentovaných modifikovaných modelových variant.	64
Tab. 16 Parametry použité pro úvodní výpočty porovnání modelů na profilech A a D experimentu LTDE-SD, dle (Nilsson et al. 2010).	69
Tab. 17 Výběr klíčových okamžiků experimentu a analýz, jak byly zjištěny z různých zdrojů, a související změny podmínek transportu. Poslední sloupec ukazuje odpovídající možné změny okrajových podmínek modelu.	69
Tab. 18 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)75	75
Tab. 19 LTDE-SD – hodnoty difuzivity ve volné vodě pro jednotlivé stopovače77	77
Tab. 20 LTDE-SD – srovnání maximální hodnoty zjevné difuzivity s difuzivitou ve volné vodě78	78
Tab. 21 R- souřadnice cylindrické sítě reprezentující D vzorky.	90
Tab. 22 Vybrané parametry, které byly použity pro simulaci průnikových křivek zobrazených na Obr. 59. Hodnoty parametrů byly optimalizovány vzhledem k detekovaným průnikovým křivkám.	91

<i>Tab. 23 Relativní zastoupení hornin a jejich porozity, které byly použity pro simulaci průnikových křivek zobrazených na Obr. 59 (výsledek optimalizace)</i>	92
Tab. 24 Zadané variantní hodnoty transportních parametrů pozadřových mikropuklin	98
Tab. 25 Laboratorní difuzní experiment LTDIII – kalibrované hodnoty transportních parametrů jednotlivých minerálů a BDZ vrstvy.....	101
Tab. 26 CI-36 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu	103
Tab. 27 Na-22 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu pro řezy modelovou doménou	103
Tab. 28 Na-22 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu pro průnikovou křivku ve vstupním rezervoáru	103
Tab. 29 Cs-137 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu	103
Tab. 30 Task 9C – souřadnice středů otevřených úseků vrtů a vzájemná vzdálenost vrtů..	107
Tab. 31 Task 9C – objemy roztoků ve vrtech včetně přívodních hadiček (detailní rozlišení jednotlivých příspěvků k celkovému objemu jsou součástí zadávací dokumentace Löfgren et al. 2017).	107
Tab. 32 Modelové transportní parametry použitých stopovačů.	107
Tab. 33 Diskretizace modelové oblasti pro nesorbující se nuklidy, údaje jsou v cm.....	111
Tab. 34 Rovnoměrná diskretizace modelové oblasti pro sorbující se nuklidy, údaje jsou v cm	111
Tab. 35 Nerovnoměrná diskretizace modelové oblasti pro sorbující se nuklidy, údaje jsou v cm	111
Tab. 36 Task 9C – Flow123d – parametry vzešlé z kalibrace společně s parametry slepé predikce	128
Tab. 37 Finální kalibrované parametry	132
Tab. 38 Variantní modelové parametry.....	132
Tab. 40 Výsledky analytického řešení a interpretace rychlosti toku mezi vrty.	145
Tab. 39 Parametry toku a interakce hornina-matrice pro Task 9D v kontextu Task 9A (WPDE).	148
Tab. 40 Parametry modelových stopovačů A-D dle zadání, porozita odpovídá relativnímu objemu pórů horniny dostupných pro daný stopovač.....	149
Tab. 41 Časy pro výstup profilu	149
Tab. 42 Varianty modelu dle zadání (výpočty jsou provedeny pro první dvě).	149
Tab. 43 Zadané parametry uvažovaných radionuklidů (dle (Crawford, 2019), kde je také vysvětlen původ dat).	150
Tab. 46 Task9D – Flow123d – parametry a OKP modelu proudění.....	151
Tab. 47 Task9D – Flow123d – parametry modelu transportu	151
Tab. 48 Porovnání hodnot na průnikové křivce v čase 1 Ma (aktivita normalizovaná vstupní aktivitou U-238).	162

Tab. 48 Porovnání hodnot na průnikové křivce v čase 1 Ma (aktivita normalizovaná vstupní aktivitou U-238) pro upravenou úlohu s jednotnou sorpcí.....	163
Tab. 48 Task9D – Flow123d – varianty sítě.....	164

Seznam textových příloh:

- Tabulka předávaných podkladů GWFTS

Seznam elektronických příloh:

- Zpráva SKB s vyhodnocením 9A: Evaluation and modelling report of Task 9A based on comparisons and analyses of predictive modelling results for the REPRO WPDE experiments, Soler et al., SKB R-17-10, Jan 2019
- Odeslaný manuskript článku do časopisu Hydrogeology Journal: Soler et al., Predictive modelling of a simple field matrix diffusion experiment. Is it so straightforward? (leden 2020)

Seznam použitých zkratk:

BDZ	zóna porušená vrtáním (borehole disturbed zone)
DFN	diskrétní síť puklin (discrete fracture network)
EDZ	zóna porušená ražbou (excavation disturbed zone)
F123	Flow123d
GS	GoldSim
GWFTS	Groundwater Flow and Transport of Solutes
HÚ	hlubinné úložiště
IV	injektažní vrt
LTDE-SD	Long Term Sorption Diffusion Experiment
MV	monitorovací vrt
OKP	okrajové podmínky
PEEK	polyetheretherketon
REPRO	REtention PROperties
SKB	švédská správa jaderného paliva (Svensk kärnbränslehantering)
SA	hodnocení bezpečnosti (safety assessment)
TF	Task Force
TDE	Through Diffusion Experiment
WPDE	Water Phase Diffusion Experiment
ZL	zadávací list

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Abstrakt

Zpráva popisuje výsledky řešení dílčího projektu označeného jako „Transport4“, jehož obsahem je řešení modelových úloh transportu radionuklidů na základě dat in-situ experimentů v podzemních laboratořích Äspö a Onkalo, dle zadání mezinárodního projektu Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (GWFTS). Součástí řešení jsou tři úlohy dle experimentů WPDE, LTDE-SD a TDE a jedna syntetická úloha transportu v měřítku pro hodnocení bezpečnosti. Výsledkem byla vzájemná verifikace několika simulačních softwarů (GoldSim, Flow123d, MT3D) na vybraných úlohách a datech. Byly identifikovány případy, kdy může dojít k nepřesnosti vlivem diskretizace u silně sorbujících radionuklidů. Dalšími výsledky byly inverzní analýzy experimentálních dat. Na různých případech bylo ukázáno, že měřený difúzní profil i časové průběhy průnikových křivek apod. lze přesněji vystihnout modely s nehomogenní horninovou maticí (typicky porozitou a distribučním koeficientem), což je fyzikálně interpretováno jako zóna ovlivněná vrtáním nebo opracováním vzorku. Druhým postupem vysvětlení měřených dat byl mikro-DFN model, založený na autoradiografických snímcích vzorků a model nehomogenní v mikroskopickém měřítku.

Klíčová slova

Transport, difúze do matrice, sorpce, inverzní model, verifikace, in-situ experiment, stopovač, citlivost, Flow123d, GoldSim, MT3D

Abstract

The report describes a solution of the partial project denoted as “Transport4”, aimed on model problem solution of radionuclide migration problems according to the in-situ experimental data in the underground laboratories Äspö and Onkalo, based on the specification of the international project Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (GWFTS).

The solution includes three experiments (WPDE, LTDE-SD and TDE) and one synthetic transport task of the safety-assessment scale. The result was mutual verification of several simulation software (GoldSim, Flow123d, MT3D) on selected tasks and data. Cases were defined where inaccuracy may occur due to discretization for strongly sorbing radionuclides. Other results were inverse analyses of experimental data. In various cases, it has been shown that the measured diffusion profiles as well as the breakthrough curves, etc. can be more accurately represented by models with inhomogeneous rock matrix (typically porosity and distribution coefficient), which is physically interpreted as a zone affected by drilling or sample processing. The second procedure to explain the measured data was the micro-DFN model based on autoradiographic images of the samples and a model inhomogeneous on a microscopic scale.

Keywords

Transport, matrix diffusion, sorption, inverse model, verification, in-situ experiment, tracer, sensitivity, Flow123d, GoldSim, MT3D

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

1 Úvod

Tato zpráva byla zpracována v rámci projektu SÚRAO „Výzkumná podpora bezpečnostního hodnocení hlubinného úložiště“, který je součástí přípravy hlubinného úložiště radioaktivních odpadů (dále jen HÚ). Cílem projektu je získat vybraná data, modely, argumenty a další informace potřebné pro zhodnocení potenciálních lokalit pro umístění HÚ z hlediska dlouhodobé bezpečnosti. Na základě veřejného zadávacího řízení byla v červenci 2014 uzavřena čtyřletá smlouva s ÚJV Řež, a. s. a jeho subdodavateli: Českou geologickou službou; ČVUT v Praze; Technickou univerzitou v Liberci; Ústavem Geoniky AV ČR, v. v. i.; a společnostmi Arcadis CZ a. s.; PROGEO, s. r. o.; Chemcomex Praha, a. s. a Centrum výzkumu Řež s. r. o. o poskytování výzkumné podpory hodnocení dlouhodobé bezpečnosti v následujících oblastech:

- i. Chování VJP a forem RAO, nepřijatelných do přípovrchových úložišť, v prostředí hlubinného úložiště;
- ii. Chování ukládacích obalových souborů (UOS) VJP a RAO v prostředí hlubinného úložiště;
- iii. Chování tlumících, výplňových a dalších konstrukčních materiálů v prostředí hlubinného úložiště;
- iv. Řešení úložných vrtů a jejich vliv na vlastnosti obklopujícího horninového prostředí;
- v. Chování horninového prostředí;
- vi. Transport radionuklidů z úložiště;
- vii. Další charakteristiky lokalit potenciálně ovlivňující bezpečnost úložiště.

Cílem tohoto dílčího projektu „*Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů*“ je validovat koncepční a počítačové modely transportu radionuklidů, vytvořené v prostředí GoldSim a Flow123d, případně dalších, s využitím dat poskytnutých ze zahraničních podzemních laboratoří.

Cílem této zprávy je shrnutí výsledků za celé období řešení a zhodnocení přínosů pro český program HÚ a využitelnosti modelů a experimentálních zkušeností v budoucích projektech SÚRAO.

Studované experimenty a modely se soustředí na problematiku retenčních jevů v horninové matici působících na migraci radionuklidů advekcí v puklině. Řešenou otázkou jsou odchylky experimentálních dat od modelů lineární difúze a sorpce v homogenním prostředí, což je často zároveň spojeno s rozdílným chováním difúze a sorpce v laboratorních a in-situ podmínkách, v závislosti na měřítku apod.

Konkretizované zadání modelových úloh a cíle řešení vycházely z dokumentů vydaných mezinárodním projektem GWFTS, což je vysvětleno v další části úvodu.

1.1 Kontext prací – projekt GWFTS, Task 9

Řešení tohoto dílčího projektu a citované využití dat zahraničních experimentů je vázáno na účast řešitelů v programu Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes řízeném švédskou správou jaderného paliva (SKB). Program byl zahájen již v roce 2003, s postupně měněnými širšími úlohami/tématy (Task) s pořadovými čísly a SÚRAO se v něm účastní od

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

roku 2015 právě v souvislosti s řešením dílčího projektu v této zprávě, a to v úloze „Task 9“. Fakticky je úlohou myšlena širší tematika s více dílčími konkrétními úkoly a daty. Program má své webové stránky <https://www.skb.se/taskforce/>, na nichž v neveřejné části (SÚRAO má jako partner přihlašovací údaje) jsou umístěna veškerá data za celou historii. Data k Task 9 (tj. příslušná k řešení v této zprávě) byla předává SÚRAO rovněž na úložiště SIEVERT, dle seznamu v Příloze 1.

Projekty Task Force (TF) řízené SKB jsou zaměřeny na spolupráci odborníků na numerické modelování v různých oblastech relevantních pro hlubinné úložiště napříč zapojenými státy. Úlohy jsou orientovány na porovnání modelů mezi sebou i společnou interpretaci poskytnutých experimentálních dat, v současné době zejména in-situ. S podporou SÚRAO dosud úspěšně probíhala spolupráce v rámci TF on Engineered Barrier System (EBS). Cílem účasti je zkvalitnění verifikace používaných softwarů pro simulaci jevů podstatných pro bezpečnostního analýzu – v tomto případě Flow123d a GoldSim, případně i dalších, pro simulace jevů proudění a transportu látky v horninovém prostředí.

Obsahem úlohy „Task 9“ pro období 2015-2019 je dle zadání ověření modelů transportu radionuklidů, konkrétně pak kombinací jevů advekce, difúze a sorpce v malém měřítku, na základě experimentálních dat z podzemních laboratoří Äspö Hard Rock Laboratory ve Švédsku a ONKALO (Olkiluoto, Finsko) a v nich provedených experimentů. Členění podtémat a jejich věcná a časová návaznost dle původního záměru jsou znázorněny na Obr. 1. V průběhu řešení byla řídicím výborem GWFTS upravena specifikace a návaznost úloh 9C a 9D. Dílčí podúlohy 9A-9D mají určeny své koordinátory.

Práce v projektu pokrývá problematiku v širokém, až mezioborovém rozsahu. Pro vyhodnocení je třeba propojit fakta detailů chování radionuklidů v hornině přes porozumění různým koncepčním modelům transportu a jejich souvislostem, až po vlastnosti numerických algoritmů, které mohou ovlivnit výsledky (varianty metod, diskretizace, nelinearity). V modelování experimentálních dat je pak rozlišován různý kontext použití modelu – jako přímou úlohu můžeme označit výpočet s konkrétními danými vstupy, zatímco v inverzní úloze hledáme hodnoty parametrů (nebo vybíráme z více modelových popisů) s cílem dosažení shody výsledků s experimentem. V prvním případě pak má vedle verifikace (správnosti modelů ve smyslu přesnosti řešení rovnic) také specifický význam tzv. slepá predikce, kdy autor při řešení do prezentace výsledků nezná (experimentální) data, se kterými se mají výsledky porovnat. Koncepce projektu umožňuje i tzv. validaci, kdy jsou modely vzniklé inverzní analýzou jednoho experimentu ověřeny proti jinému experimentu ve srovnatelných podmínkách slepou predikcí.

Zadání modelových úloh vychází z konfigurací experimentů a pro jednotlivé podúlohy (9A-9D) jsou podrobně specifikována v dokumentech vydaných v rámci GWFTS – pro každou podúlohu byly řídicím výborem určen koordinátor odpovědný za formulaci a dodaná data a zároveň pro celý projekt pracoval jako „evaluator“ Josep Soler, v jehož kompetenci bylo vyhodnocení výstupů modelů navzájem. Na jednotlivé dokumenty zadání se tato zpráva odkazuje v příslušných kapitolách. Zároveň s primárním zadáním byly organizovaně distribuovány další podpůrná data – tabulky s experimentálními daty, šablony po zpracování výsledků, upřesňující komentáře, fotodokumentace apod. Celý seznam tzv. „delivery“ je uveden v tabulkové formě jako Příloha 1.

Od managementu GWFTS (na němž se podíleli i zástupci SÚRAO) se odvíjel také časový harmonogram práce řešitelů, a v souladu s tím bylo aktualizováno zadání dílčího projektu.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

Způsob a rozsah zapojení jednotlivých spoluřešitelů do vybraných úloh projektu GWFTS-Task 9 byly průběžně konzultovány na kontrolních dnech s účastí SÚRAO.

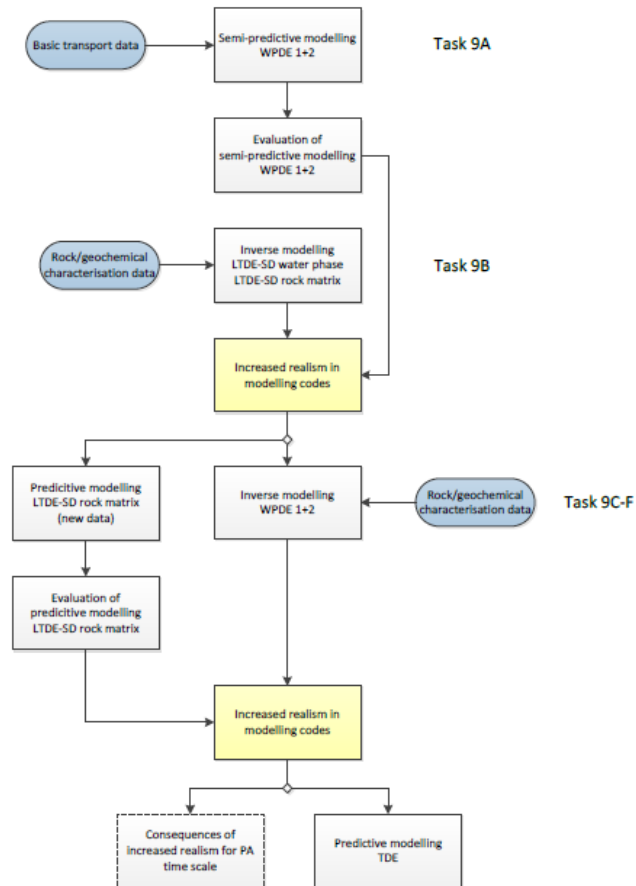
1.2 Struktura náplně projektu a zprávy

Kapitoly zprávy jsou uspořádány primárně dle řešených úloh specifikovaných GWFTS – 9A až 9D. K tomu je doplněna první kapitola popisující matematické formulace použitých modelů a charakteristiky softwaru související s řešenými úlohami. V samostatné kapitole je pak zpracována specifická aplikace metody mikro-DFN, což bylo jedním z podnětů k řešení v rámci GWFTS a zároveň předmětem zadání dílčího projektu SÚRAO pro spoluřešitele PROGEO. Kapitola je umístěna za kapitolou Task 9B, k němuž se dominantně váže, ale zároveň se odkazuje na data z jiných zdrojů. Jako první část každé kapitoly je pak shrnutí zadání a předaných dat s odkazy do zdrojových dokumentů GWFTS, které má SÚRAO k dispozici.

Vedle prezentace výsledků přímo vázaných na úlohy GWFTS je předmětem řešení také porovnání českých řešitelských týmů mezi sebou. Ve struktuře zprávy jde obvykle v rámci podúlohy (Subtask) o první podkapitolu týkající se samotného řešení. V případě Task 9A, 9C, 9D byla zadáním prediktivní analýza a porovnávat tak bylo možné přímo výsledky dle specifikace GWFTS, za předpokladu sjednocení použitých parametrů modelu. V případě Task 9B šlo o inverzní analýzu, kde je předmětem zadání naopak hledat optimální předpoklad na typ modelu a parametry, proto byla za účelem vzájemného porovnání navíc stanovena přípravná úloha s pevně zadanými daty.

Nad rámec specifikace GWFTS byly, v souladu se stanoviskem SÚRAO na kontrolních dnech, rovněž řešeny inverzní model v návaznosti na Task 9A a 9C po zveřejnění dat experimentu (po zpracování prediktivních modelů jednotlivými řešiteli). To je podobným způsobem předmětem dalších podkapitol následujících po zadaném prediktivním modelu v rámci kapitoly daného Tasku.

Prezentované postupy řešení a modelové výsledky jsou označovány primárně na základě použitého softwaru (v názvech kapitol, popiscích grafů apod.), případně zároveň s doplněním zkratky spoluřešitelské instituce realizující dané řešení. Reference přes instituci je podstatná pro rozlišení případů použití GoldSim dvěma pracovišti. Další případy jsou pak různá doplňující vyhodnocení v souvislosti s inverzními modely, kdy nejde o specifickou vazbu na software, a je rovněž použita zkratka instituce pro označení části práce nebo konkrétních dat výsledků.



Obr. 1 Návaznost jednotlivých kroků řešení Task 9 v programu TF GWFTS (Lofgren et al, 2015).

2 Simulační softwary a metodiky výpočtů

2.1 Flow123d

Řešitelé TUL použili dle zadání vlastní software Flow123d (TUL, 2015). Flow123d slouží k simulaci proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek a tepla v rozpukaném porézním prostředí. Originalita tohoto software spočívá v podpoře výpočtů na komplexních sítích sestávajících se ze simplexových elementů různých dimenzí. Díky tomu lze kombinovat modely ekvivalentního kontinua s modely diskretních puklinových sítí (Obr. 2).

Současná verze obsahuje smíšený-hybridní řešič pro ustálené a neustálené darcyovské proudění, konečně-objemový model a model implementující nespojitou Galerkinovu metodu pro transport látek a tepla (advekce, difúze/vedení, disperze). Užitím štěpení operátoru software podporuje modely různých lokálních procesů včetně dvojí porozity, sorpce, rozpadů a jednoduchých chemických reakcí.

Výpočty mohou být spuštěny paralelně užitím MPI (message parsing interface) se škálovatelností až na stovky procesorů. Vstupní rozhraní založené na souborovém formátu JSON umožňuje specifikaci obecných časoprostorově závislých dat pro libovolný fyzikální parametr. Program podporuje výstupy do formátů GMSH a VTK.

Webová stránka vývoje projektu je <http://flow123d.github.io/>. Simulace popsané v této zprávě byly realizovány postupně ve verzích 1.8.3. (úlohy 9A, 9B, 9C), 2.2.0 (9D-1), 3.0.1. (9D-2).

V několika příštích odstavcích budou stručně popsány nejdůležitější části modelu (relevantní pro simulace experimentů v této zprávě).

Výpočty ustáleného a neustáleného proudění v porézním a puklinovém prostředí jsou popsány Darcyho rovnicí a rovnicí kontinuity. V současnosti jsou podporovány tři typy okrajových podmínek (Dirichlet, Neuman a Robin) jakožto nástroj pro obdržení unikátního řešení. Principiálními neznámými jsou tlaková výška a tok.

Pohyb látek rozpuštěných ve vodě je řízen advekcí a hydrodynamickou disperzí. Proces je popsán následující soustavou rovnic bilance hmoty:

$$\partial_t(\vartheta \delta_a \vartheta c^i) + \text{div}(\mathbf{q} c^i) - \text{div}(\vartheta \delta_a \mathbf{D}^i \nabla c^i) = F_S^i + F_C^c + F_R(c^1, \dots, c^s). \quad (2.1.1)$$

Principiální neznámou je koncentrace c^i [kg m⁻³] látky $i \in \{1, \dots, s\}$, což je hmotnost látky v jednotkovém objemu vody. Ostatními veličinami jsou:

- Porozita ϑ [-], tj. podíl objemu zaplněného vodou ku objemu celkovému.
- Tenzor hydrodynamické disperze \mathbf{D}^i [m²s⁻¹] má tvar:

$$\mathbf{D}^i = D_m^i \tau \mathbf{I} + |\mathbf{v}| \left(\alpha_L^i \mathbf{I} + (\alpha_L^i - \alpha_T^i) \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}}{|\mathbf{v}|^2} \right), \quad (2.1.2)$$

který reprezentuje (izotropickou) molekulární difuzi a mechanickou disperzi ve směru podélném a příčném ke směru proudění. Zde D_m^i [m²s⁻¹] je koeficient molekulární difuze i -té látky, $\tau = \vartheta^{1/3}$ je geometrický faktor (v dokumentaci a některé literatuře označováno jako tortuozita), α_L^i [m] and α_T^i [m] jsou podélná respektive příčná disperzivita. Konečně, \mathbf{v} [ms⁻¹] je mikroskopická rychlost vody, jejíž vztah k Darcyho toku \mathbf{q} je dán předpisem $\mathbf{q} = \vartheta \delta_a \mathbf{v}$, kde δ_a [m^{3-d}] je koeficient průřezu (rozevření pukliny nebo plocha průřezu kanálu dle dimenze domény d).

- F_S^i [kgm^{-d}s⁻¹] reprezentuje hustotu zdrojů koncentrace v porézním médiu.

- F^c [$\text{kgm}^{-\text{d}}\text{s}^{-1}$] reprezentuje hustotu zdrojů koncentrace daných výměnou mezi regiony různé dimenze.
- $F_R(\dots)$ [$\text{kgm}^{-\text{d}}\text{s}^{-1}$] je reakční člen (dvojitá porozita, sorpce, radioaktivní rozpad).

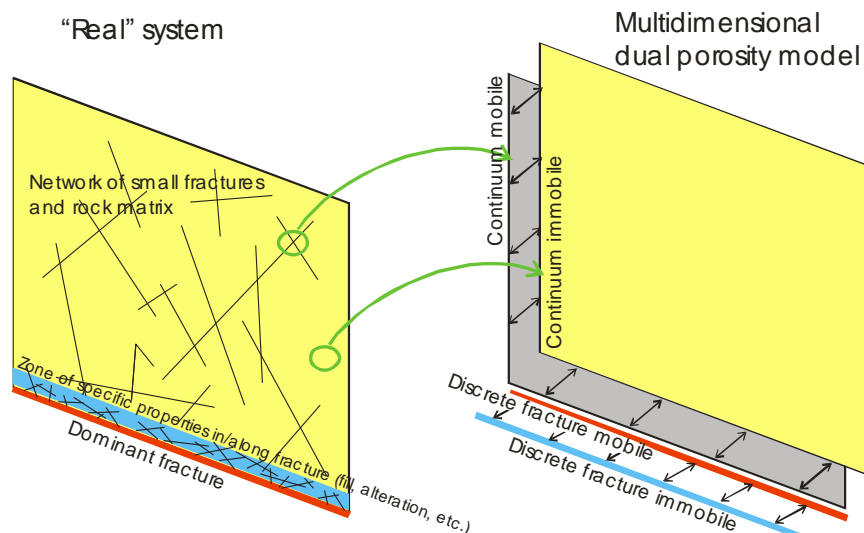
V rámci výše popsaného modelu Flow123d umožňuje dva různé přístupy k řešení úlohy transportu:

- Pro simulaci čisté advekce ($D = 0$) je vhodné zvolit model transportu využívající štěpení operátoru, který reprezentuje konečně-objemový řešič explicitní v čase. Řešení je pro jeden krok výpočtu rychlejší, ale maximální časový krok je omezen. Výsledná koncentrace je po částech konstantní na elementech sítě. Tento řešič podporuje reakční člen (včetně jednoduchých chemických reakcí, dvojitá porozita a sorpce).
- Plný model obsahující difuzi (disperzi) je řešen nespojitou Galerkinovou metodou (implicitní v čase). Metoda neklade žádná omezení na časový krok výpočtu. Aproximace v prostoru je po částech polynomiální, v současnosti až do řádu 3. Reakční člen je implementován jen pro lineární sorpci:

$$F_R^i = -\partial_t \left((1 - \vartheta) \delta M^i \rho_s c_s^i \right), \quad c_s^i = \frac{k_i^i}{\rho_l} c, \quad (2.1.3)$$

kde c_s^i [mol kg^{-1}] je koncentrace sorbované látky, k_i^i [mol kg^{-1}] je sorpční koeficient, ρ_s a ρ_l [kgm^{-3}] jsou hustoty pevné fáze (horniny) respektive kapalné fáze (rozpouštědla). M^i [kg mol^{-1}] představuje molární hmotnost i -té látky. Počáteční koncentrace v pevné fázi je uvažována v rovnováze s koncentrací v kapalné fázi.

Podrobnější popis matematického modelu použitého ve Flow123d lze nalézt na webových stránkách vývoje projektu zmíněných výše.



Obr. 2 Ilustrace významu propojení podoblastí různých dimenzí v modelu transportu použitém v softwaru Flow123d.

2.2 Goldsim

V prostředí GoldSim je možné použít k řešení úloh migrace radionuklidů dva přístupy. První přístup je založen na modelování oblasti, ve které dochází k transportu, pomocí konečných

objemů, které jsou v GoldSim reprezentovány pomocí komponenty *Cell pathway*. Přehled metodiky je uveden v podkapitole 2.2.1. Druhý přístup je založen na modelování oblasti pomocí diskrétních puklin, které jsou v GoldSim reprezentovány pomocí komponenty *Pipe pathway*, přehled metodiky je uveden v podkapitole 2.2.2. Jeden nebo oba postupy aplikovali na jednotlivé úlohy řešitelé z ÚJV a FJFI.

2.2.1 Metodika řešení pomocí *Cell pathway* s ohledem na možnosti propojování objektů tohoto typu v rámci tzv. *Cell net*

Konečně objemový přístup rozdělí sledovanou oblast na elementární objemy, které se v GoldSim nazývají cely (*Cell pathway*). Celá oblast je pak reprezentována sítí vzájemně propojených cel (*Cell net*). Hmotnost radionuklidu v jedné cele se může změnit jak difúzním a/nebo advektivním transportem mezi sousedními celami, tak radioaktivním rozpadem samotného radionuklidu, popřípadě i mateřského radionuklidu přítomného v cele. Základní hmotnostní bilanční rovnici i -té cely lze zapsat ve tvaru (GoldSim 2014):

$$\frac{dm_k^i}{dt} = -m_k^i \lambda_k + m_p^i \lambda_p \frac{A_k}{A_p} + \sum_{c=1}^{NF^i} f_k^c, \quad (2.2.1)$$

kde index k označuje dceřiný a index p mateřský radionuklid, m_k^i [M] je hmotnost radionuklidu v i -té cele, t [T] je čas, $\lambda_{k,p}$ [T⁻¹] jsou rozpadové konstanty a $A_{k,p}$ [M/mol] jsou atomové hmotnosti, f_k^c [M/T] označuje rychlost vtoku c -tým transportním spojením do i -té cely a NF^i je počet transportních cest z/do i -té cely. V případě advektivního transportního spojení je tok z i -té do j -té cely definován jako

$$f_{i \rightarrow j}^A = q_{i \rightarrow j} c_k^i, \quad (2.2.2)$$

kde $q_{i \rightarrow j}$ [L³/T] je objemová rychlost kapalně fáze a c_k^i [M/ L³] je koncentrace k -tého radionuklidu v kapalně fázi i -té cely. Rychlost difúzního toku z i -té do j -té cely je definován jako

$$f_{i \rightarrow j}^D = D_k^{i,j} (c_k^i - c_k^j), \quad (2.2.3)$$

kde $D_k^{i,j}$ [L³/T] je difúzní vodivost mezi i -tou a j -tou celou, která je vypočítána jako

$$D_k^{i,j} = \frac{A^{i,j}}{\frac{\Delta x_i}{D_e^i} + \frac{\Delta x_j}{D_e^j}}, \quad (2.2.4)$$

kde $A^{i,j}$ [L²] je difúzní plocha, $\Delta x_{i,j}$ [L] je difúzní délka v i -té, respektive j -té, cele. $D_e^{i,j}$ [L²/T] označuje efektivní difúzní koeficient porézního materiálu v cele, který je roven $D_e = \varepsilon G D_f$, kde ε je porozita materiálu a G je geometrický faktor (Poznámka: GoldSim označuje nesprávně G jako tortuositu τ , přičemž platí známý vztah $G = \delta/\tau^2$, kde δ je konstrikivita).

Cela se chová jako ideální míchaný reaktor, ve kterém dojde k okamžité rovnováze mezi kapalnou a pevnou fází. V případě zanedbání limitů rozpustnosti je koncentrace c_k^i v kapalně fázi vypočítána jako

$$c_k^i = \frac{m_k^i}{K_{d,k}^i M^i + V^i}, \quad (2.2.5)$$

kde $K_{d,k}^i$ [L³/M] je distribuční koeficient k -tého radionuklidu v i -té cele, jejichž hmotnost je M^i [M], V^i [L³] označuje objem kapalně fáze v i -té cele.

Aby GoldSim řešil rovnice (2.2.1) pro celou síť cel, nejdříve identifikuje podsítě cel vzájemně propojených transportem, a evoluci těchto podsítí řeší samostatně. Radionuklidy, které jsou součástí rozpadové řady, jsou taktéž vzájemně propojeny. Proto GoldSim sestaví z rovnic (2.2.1) pro každou rozpadovou řadu podsítě cel samostatnou soustavu diferenciálních rovnic, která může být v maticovém tvaru zapsána jako

$$\mathbf{m}' = [\mathbf{D} + \mathbf{T}]\mathbf{m}, \quad (2.2.6)$$

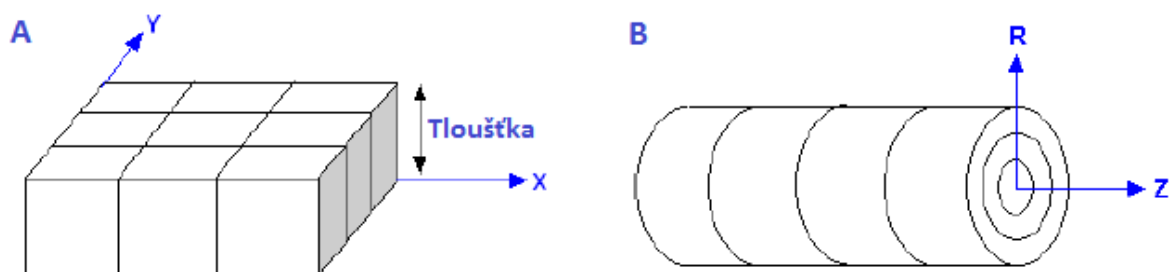
kde \mathbf{m} [M] označuje vektor hmotností radionuklidů rozpadové řady, \mathbf{m}' [M/T] je vektor rychlosti změn hmotností radionuklidů rozpadové řady, \mathbf{D} [1/T] je matice obsahující rozpadové a přírůstkové koeficienty, \mathbf{T} [1/T] je matice obsahující transportní koeficienty. GoldSim používá pro soustavu diferenciálních rovnic (2.2.6) Eulerovu implicitní metodu (Press *et al.* 2007), která pro časový krok Δt řeší (2.2.6) jako

$$\mathbf{m}(t + \Delta t) = [\mathbf{I} - \mathbf{D}\Delta t - \mathbf{T}\Delta t]^{-1}\mathbf{m}(t), \quad (2.2.7)$$

kde \mathbf{I} označuje jednotkovou matici a operace $^{-1}$ maticovou inverzi. V případě neuvažování limitů rozpustnosti je maticová rovnice (2.2.7) lineární. GoldSim používá pro její řešení upravenou verzi iterativních metod z knihovny *Iterative Methods Library IML++*, version 1.2a, která je dostupná na webových stránkách the National Institute of Standards <http://math.nist.gov/iml++/> (GoldSim 2014).

Pro zvýšení přesnosti implicitní Eulerovy metody GoldSim automaticky dělí časový krok v závislosti na uživatelem zvolené přesnosti výpočtu. Přesnost výpočtu (vysoká, střední, nízká) je možné nastavit v záložce *Contaminant Transport* dialogového okna *Model | Options*. Je nutné však poznamenat, že implicitní Eulerova metoda je stabilní, dělení časových kroků poskytuje pouze přesnější řešení (Press *et al.* 2007).

GoldSim poskytuje speciální element, tzv. *CellNet Generator*, pro automatizaci vytváření sítě cel. *CellNet Generator* umožňuje vytvořit dvourozměrnou řadu cel reprezentující pravoúhlou nebo válcovou oblast včetně advektivních nebo difúzních transportních spojení (Obr. 3). Objem cel v pravoúhlé síti cel je definován pomocí souřadnic X, Y a tloušťky. Souřadnice X a Y mohou buď ekvidistantně dělit celkovou délku a šířku oblasti, nebo mohou být zadány uživatelem. Objem cel ve válcové síti cel je definován pomocí axiálních Z a radiálních R souřadnic, a úhlu, který může být z intervalu (0°,360°] (úhel 360° náleží celému válci). Stejně jako v případě pravoúhlé sítě Z a R souřadnice mohou buď ekvidistantně dělit celkovou délku a poloměr válcové oblasti, nebo mohou být uživatelem zadány.



Obr. 3 Schématické znázornění pravoúhlé (A) a válcové (B) geometrie sítě cel. Převzato a upraveno z (GoldSim 2014).

Je možné v rámci jedné sítě cel modelovat zóny s různými vlastnostmi. K tomu je nejdříve potřebné definovat vlastnosti jednotlivých zón (např. kapalnou a pevnou fázi, Darcyho rychlost atd.) a potom pomocí grafického rozhraní zadat podoblast sítě cel, kde se tato zóna nachází. Po zadání všech vlastností modelované oblasti element *CellNet Generator* vygeneruje síť cel. *CellNet Generator* umožňuje vytvořit síť cel o maximálním počtu 9801 cel (99x99). Při větším počtu cel je nezbytné pro práci s modelem zvýšit v operačním systému Windows maximální limit pro GDI objekty (alespoň na hodnotu 50 000, maximální možná hodnota je 65.536).

2.2.2 Metodika řešení pomocí Pipe pathway

Výchozí volbou pro modelování transportních úloh kombinující advekci s difúzí do matrice je komponenta *Pipe pathway*, která představuje „chromatografickou kolonu“, kdy kapalina vtéká spolu se studovanými látkami (kontaminanty, radionuklidy) na jedné straně komponenty, proudí komponentou a vytéká na jejím konci. Časová změna koncentrace v mobilní zóně i -té komponenty *Pipe pathway*, ${}^F C_k^i$ [M/L³], je popsána parciální diferenciální rovnicí druhého řádu, která může být vyjádřena ve tvaru:

$$\frac{\partial {}^F C_k^i}{\partial t} = -\frac{Q_k^i}{{}^F S^i {}^F R_k^i} \frac{\partial {}^F C_k^i}{\partial z} + \frac{\alpha^i Q_k^i}{{}^F S^i {}^F R_k^i} \frac{\partial^2 {}^F C_k^i}{\partial z^2} - \lambda_k {}^F C_k^i + \frac{P^i {}^G D_{w,k} {}^G \delta {}^G \varepsilon}{{}^F S^i {}^F R_k^i} \frac{\partial {}^G C_k^i}{\partial x}, \quad (2.2.8)$$

kde členy v součtu na pravé straně reprezentují, po řadě, advekci a disperzi (ve směru osy z), radioaktivní rozpad, a difuzi a sorpci v kolmém směru ke stěně trhliny v horninovém masivu (označeno jako směr x). Q_k^i [L³/T] je objemový tok vody v mobilní zóně i -té komponenty *Pipe pathway*, ${}^F S^i$ [L²] označuje příčnou plochu (vzhledem k směru toku) mobilní zóny *Pipe pathway* a ${}^F R_k^i$ retardační faktor k -tého radionuklidu, α^i [L] označuje disperzi, P^i [L] je smáčený obvod *Pipe pathway*, ${}^G D_{w,k}$ [L²/T] je difúzní koeficient k -tého radionuklidu ve volné vodě, ${}^G \delta$ je geometrický faktor a ${}^G \varepsilon$ porozita horniny, a nakonec ${}^G C_k^i$ [M/L³] označuje koncentrace k -tého radionuklidu v horninovém masivu, jejíž evoluce se řídí rovnicí

$$\frac{\partial {}^G C_k^i}{\partial t} = \frac{{}^G D_{w,k} {}^G \delta}{{}^G R_k^i} \frac{\partial^2 {}^G C_k^i}{\partial x^2} + \frac{{}^G D_{w,k} {}^G \delta}{{}^G S^i {}^G R_k^i} \frac{\partial {}^G S^i}{\partial x} \frac{\partial {}^G C_k^i}{\partial x} - \lambda_k {}^G C_k^i, \quad (2.2.9)$$

kde první dva členy napravo odpovídají difúzi se sorpcí, a třetí člen popisuje radioaktivní rozpad. ${}^G S^i$ [L] je difúzní plocha na jednotku délky a ${}^G R_k^i$ retardační faktor, jehož hodnota je definována jako

$${}^G R_k^i = 1 + \frac{{}^G \rho K_{d,k}}{{}^G \varepsilon}, \quad (2.2.10)$$

kde ${}^G \rho$ [M/L³] je hustota horniny v suchém stavu a ${}^G K_{d,k}$ [L³/M] rozdělovací koeficient k -tého radionuklidu v hornině. Komponenta *Pipe pathway* využívá numerickou Laplaceovu transformaci pro řešení rovnic (2.2.8 a 2.2.9).

Uvnitř komponenty může docházet k následujícím procesům:

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

- 1D advektivní proudění,
- podélná disperze,
- podélná difúze,
- retardace,
- přeměna radionuklidů,
- výměna mezi mobilní a imobilní zónou (difúze do horninové matrice).

Komponenta je definována následujícími parametry:

- délka,
- průtočná plocha,
- smočený obvod,
- disperze,
- přítomnost vrstvy, kde probíhá difúze do horninové matrice,
- průtokem na vstupu a výstupu komponenty.

2.2.3 Význam frakce porozity v Goldsim

Program Goldsim využívá dále parametr frakce porozity. Ta vyjadřuje omezenou dostupnost pórů pro studovaný kontaminant a je počítána z porozity materiálu a efektivní porozity. Frakce porozity je dána vztahem:

$$f_{m,s} = \frac{D_{f,m,s}}{n_m \cdot t_m \cdot d_f \cdot d_{f,s}} = \frac{D_{f,m,s}}{n_m \cdot t_m \cdot d_f \cdot \frac{D_{f,s}}{d_f}} = \frac{D_{f,m,s}}{n_m \cdot t_m \cdot D_{f,s}}, \quad (2.2.11)$$

kde:

d_f referenční difúzní koeficient kontaminantu a nosného média f , [$L^2 \cdot T^{-1}$],

$D_{f,m,s}$ efektivní difúzní koeficient kontaminantu s v mobilní zóně (tzn. D_e),

$D_{f,s}$ difúzní koeficient kontaminantu s , v nosném médiu f , při nekonečném zředění, (pro vodu totéž co $D_{w,s}$), [$L^2 \cdot T^{-1}$],

$d_{f,s}$ relativní difúzní koeficient kontaminantu s , v nosném médiu f , při nekonečném zředění, [-],

$f_{m,s}$ frakce porozity materiálu m dostupná pro kontaminant s [-],

n_m porozita materiálu m [-],

t_m geometrický faktor materiálu m [-], $t_m \in (0;1>$ (GoldSim 2014) a je dán jako třetí odmocnina z porozity.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

2.3 ConnectFlow/NAPSAC

Program NAPSAC pro matematické modelování proudění a transportu v diskrétní puklinové síti (koncept DFN) je součástí programového balíku označovaného jako ConnectFlow (Hartley 1998; Wood 2018). ConnectFlow zahrnuje dva modelovací programy NAMMU a NAPSAC. NAMMU představuje aplikaci pracující na základě konceptu ekvivalentního kontinua (ECPM) a NAPSAC pracuje s konceptem diskrétní puklinové sítě (DFN). ConnectFlow také umožňuje kombinovat simulace provedené programy NAMMU a NAPSAC, čímž se celkově vytváří velmi flexibilní aplikace umožňující napojení modelování v puklinovém a průlinovém prostředí v různých měřítcích. Modelování je založeno na řešení matematické formulace problému numerickou metodou konečných prvků. Pro matematické modelování v rámci řešeného úkolu byl na pracovišti PROGEO využit program NAPSAC pro generování mikropuklinových DFN sítí a program NAMMU pro jejich upscaling a převod do spojitého prostředí horninové matrice v CPM.

Programy NAPSAC/NAMMU byly vyvíjeny v posledních 30 letech (dříve AEA Technology, Serco Assurance, AMEC a v současnosti WOOD) a verifikovány na mezinárodní úrovni (např. SKB, STRIPA mine, TRUE site atd.). Splňuje mezinárodní standardy kvality ISO 9001 a TickIT.

NAPSAC umožňuje modelování následujících geologických aspektů horninového prostředí:

- modelování puklin v široké škále rozsahu měřítek, od modelování heterogenní samostatné pukliny po modelování miliónů puklin v regionálním rozsahu,
- generování pravidelných a nepravidelných sítí a strukturálních gridů pro charakterizaci geologických vlastností,
- generování jednotlivých stochastických puklin a puklinových sad na základě různých geostatistických pravděpodobnostních distribučních funkcí,
- vložení deterministické pukliny nebo puklin do stochastické sady puklin,
- použití deterministické pukliny pro kontrolované generování populací stochastických puklin,
- stanovení vzájemné korelace dvojic parametrů, spojení některých parametrů do jedné vlastnosti, např. vztah délka-rozevření,
- import plošné nebo prostorové distribuce puklin z externích zdrojů a datových gridů na základě parametrů jako je litologie, deformace nebo mocnost;
- dynamickou tvorbu puklin a analýzu současného napětí,
- simulace jakéhokoli rozsahu měřítko, od hodnot získaných z vrtného jádra až po pozorování v kontinentálním měřítku.

Program NAPSAC umožňuje:

- simulovat stacionární nebo transientní tok v puklinové síti,
- realizovat stacionární simulaci ve velmi velké puklinové síti díky efektivní výpočetní numerické metodě,
- počítat plně spojitý tenzor propustnosti včetně hlavních hodnot a směrů, což umožňuje změny měřítko, analýzu závislosti na měřítku a určení reprezentativního elementárního objemu,
- počítat porositu a velikost bloků horninové matrice mezi puklinami,
- počítat stacionární i transientní přítoky do tunelů a důlních děl,
- počítat efekt hydromechanického „párování“ (vzájemné závislosti parametrů – coupling). Hydraulické rozevření je závislé na distribuci tlaků založené na analytickém

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

popisu tlakového pole, které vzniká v důsledku tíhy horninového nadloží nebo radiálního namáhání kolem tunelu,

- simulovat transport stopovače skrz síť puklin pomocí stochastické particle tracking metody, což může být využito pro výpočet disperse rozpuštěných látek transportovaných podzemní vodou,
- simulovat transport hmoty pro kapalinu s proměnlivou hustotou,
- simulovat nenasyčené proudění v puklinovém prostředí.

2.4 MT3DMS

MT3DMS (Zheng a Wang 1999; Zheng 2010), respektive MT3D-USGS (Bedekar et al. 2016a, 2016b) je modulární třídímní transportní model vyvinutý v roce 1990 pro simulace pohybu rozpuštěných látek v hydrogeologických podmínkách spjitého porézního prostředí – koncept CPM. Původně byl tento program označován pouze jako MT3D (modular 3-D transport model), během svého vývoje byl ale rozšířen o řadu reakčních balíčků pro simulace transportu vícesložkových směsí. Aktuální verze MT3DMS (MS označuje multi-species a lze v ní tedy simulovat také transport vícesložkových roztoků a směsí látek) je schopna simulovat pohyb látek v podzemní vodě způsobený advekcí, disperzí, difuzí a různými chemickými reakcemi. Program byl použit řešiteli z PROGEO.

MT3DMS byl vyvinut pro použití s libovolným modelem řešícím proudění podzemní vody pomocí metody konečných rozdílů s blokově centralizovanou sítí (např. model MODFLOW). Program MT3DMS je založen na předpokladu, že změny v koncentračním poli nemají významný vliv výpočet proudového pole (tzn. tento program není určen pro vícefázové proudění látek s různou hustotou). Po sestavení a kalibraci hydraulického modelu (po výpočtu proudového pole) je nutné připravit vstupní data transportního modelu, které jsou následně načteny při simulaci transportu. Transport pomocí MT3DMS je tedy řešen nezávisle na výpočtu a kalibraci modelu proudění.

MT3DMS obsahuje tři výpočetní mechanismy řešení transportu v jednom kódu:

- standardní metodu konečných diferencí,
- metodu particle-tracking založenou Euler-Lagrangeově metodě a
- TVD (total-variation-diminishing) metodu konečných rozdílů vyššího řádu.

MT3DMS lze použít k simulaci změn koncentrace rozpuštěných látek v podzemní vodě s různými typy okrajových podmínek a externích zdrojů či propadů. Program MT3DMS umožňuje řešit šíření rozpuštěného znečištění (roztoků) zahrnutím všech základních transportních procesů do řešených rovnic:

- advekce – transport rozpuštěné látky stejnou rychlostí, jakou se pohybuje proudící podzemní voda popsáný advekčním členem transportní rovnice,
- disperse (hydrodynamická disperse) jako suma mechanické disperse a molekulární difuze,
- základní chemické reakce – lineární nebo nelineární rovnovážná sorpce, nerovnovážná (rate-limited) sorpce, reakce prvního řádu reprezentující radioaktivní rozpad nebo biodegradaci (sofistikovanější chemické reakce lze simulovat pomocí speciálních balíčků, např. RT3D),
- bodové nebo plošné zdrojové a propadové členy (přítok/odtok vody o definované koncentraci, rozpouštění látek apod.),

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

Program MT3DMS umožňuje konceptualizovat transport rozpuštěných látek v puklinovém nebo silně heterogenním prostředí pomocí systému složeného ze dvou rozdílných prostředí (dual-domain). Koncept duálního prostředí nahrazuje hodnotu efektivní pórovitosti, která charakterizuje nehomogenní porézní prostředí ve výpočetní buňce, dvěma hodnotami pórovitosti zvláště pro mobilní (preferenční zónu s dominantním advekčním prouděním) a imobilní doménu (málo propustnou matici s dominantní difúzí). Přechod látek mezi mobilní a imobilní doménou je umožněna pomocí koeficientu přestupu hmoty (mass transfer coefficient). Advekčně-difuzní model založený na konceptu duálního prostředí může být pro modelování transportu v puklinovém prostředí nebo silně heterogenním porézním prostředí vhodnější než klasický advekčně-disperzní model. Samozřejmě za předpokladu, že lze vhodně charakterizovat obě hodnoty pórovitosti a koeficient přestupu hmoty ve výpočetních buňkách.

3 Řešení úlohy WPDE (Task 9A)

3.1 Shrnutí zadání a vstupních dat

Předmětem experimentu WPDE v podzemní laboratoři Onkalo ve Finsku je sledování difúze radionuklidů do horninové matrice při současném transportu advekci v puklině, která je napodobena štěrbinou mezi stěnou vrtu a vloženým válcem (Obr. 4, Lofgren et al. 2015). Měřena je pouze koncentrace v odtokové hadici (průniková křivka) bez rozborů vzorků horniny.

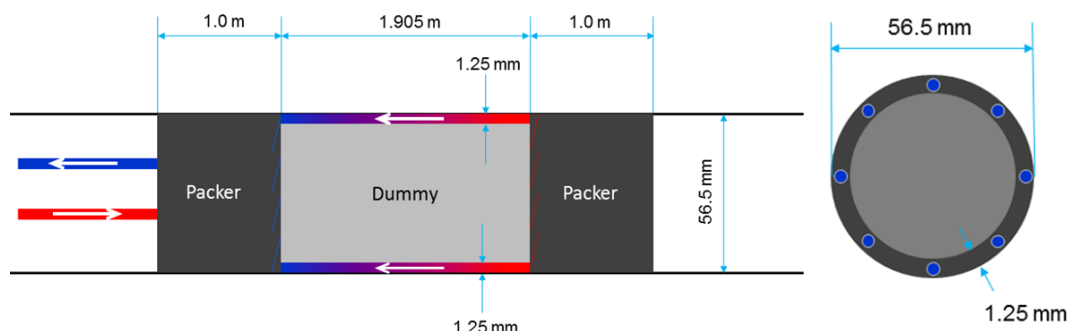
Modelová úloha navržená v zadání koncepčně zjednodušuje experiment následovně (Obr. 5):

- Rovnoměrný tok válcovou štěrbinou s předpokladem ideálního míchání v radiálním směru, což vede na osově symetrickou úlohu difúze do horniny.
- Hornina je v rámci rozlišených bloků PGR a VGN (s odlišnými parametry) homogenní.
- Přítokové a odtokové hadičky jsou zahrnuty jako časové zpoždění, eventuálně s efektem disperze.

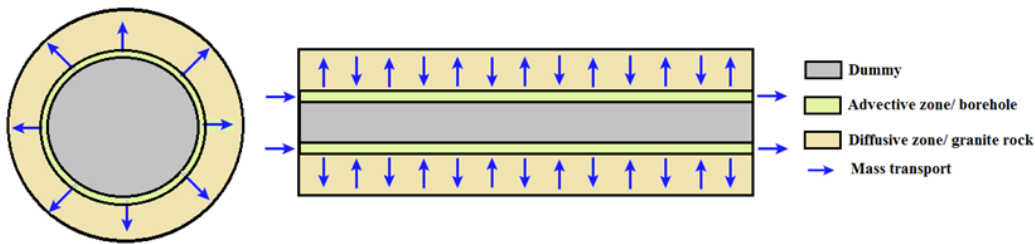
Hlavní vstupní parametry modelu jsou pórovitost horniny, efektivní difúzní koeficient v hornině a koeficient difúze ve volné vodě každého radionuklidu a distribuční koeficient lineární sorpce každého radionuklidu a podélná disperzivita v puklině. Pro chlor Cl-36 byl experimentálně určen kapacitní faktor, vyjadřující předpokládanou aniontovou exkluzi (z toho vyplývá různý způsob vstupu dat u jednotlivých softwarů a řešitelů). Data kompilovaná ze zadávací dokumentace (Lofgren et al. 2015) a další literatury jsou uvedena v Tab. 1 a jsou také součástí níže uvedené tabulky Tab. 7 rozšířené o intervaly neurčitosti v části 3.4. Porozity byly odvozeny na základě Tabulky 2-8 v zadávací dokumentaci (jako aritmetický průměr pro každý z horninových typů). Efektivní difuzivity pro oba horninové typy byly částečně převzaty z Tabulky 2-9 zadávací dokumentace (Lofgren et al., 2015). Hodnoty pro Na-22, Sr-85 a Ba-133 nebyly v dokumentaci uvedeny. Jejich zdroje jsou rovněž uvedeny v Tab. 1. Koeficienty lineární sorpce byly převzaty z Tabulky 2-11 zadávací dokumentace (Lofgren et al., 2015).

Dalšími parametry pak jsou časoprostorová data experimentu, shrnutá v Tab. 2 a Tab. 3. Konkrétní geometrie ve vztahu ke koncepčnímu modelu je pak různá podle typu numerického řešení, fakticky se liší rozměrem v radiálním směru, tj. zasaženým objemem horniny.

Experiment proběhl ve dvou variantách (Tab. 2), WPDE-1 s rychlejším prouděním a kratší dobou realizace, s třemi radionuklidy, a WPDE-2 s pomalejším prouděním a delší dobou, s 5 radionuklidy. Seznam radionuklidů s jejich injektovaným množstvím je v Tab. 4.



Obr. 4 Schéma konfigurace experimentu WPDE, který je modelován v kroku 9A (řešení popsáno níže v této zprávě) (Lofgren et al, 2015).




Obr. 5 Konceptní model transportu radionuklidů v experimentu WPDE pro Task 9A.

Tab. 1 Transportní parametry uvažované v matematickém modelu, které jsou společné pro všechny tři modely (výpočty v podkapitole 3.3). Koefficient difúze ve volné vodě (referenční) je v ostatních modelech jiný a je uveden v příslušných kapitolách. Pro hodnoty neuvedené v zadání je citován zdroj.

Nuklid	K_d VGN [m ³ /kg]	K_d PGR [m ³ /kg]	D_e VGN [m ² /s]	D_e PGR [m ² /s]	D_w [m ² /s]	Pórovitost VGN [-]	Pórovitost PGR [-]	Objemová hmotnost [kg/m ³]	Poločas rozpadu [a]	
H-3	0	0	1,83E-13	5,70E-13	2,30E-09	8.20E-03	5.00E-03	2.70E+03	1.23E+01	
Na-22	1,30E-03	8,00E-04	4,65E-13 (POSIVA-97-07)		1,33E-09	Vanyšek (2009)	8.20E-03	5.00E-03	2.70E+03	2.60E+00
Cl-36	0	0	5,00E-15	5,00E-13	2,03E-09		8.20E-03	5.00E-03	2.70E+03	3.01E+05
Sr-85	1,10E-03	1,10E-03	3,30E-13 (SKB R-99-13)		7,91E-09		8.20E-03	5.00E-03	2.70E+03	1.78E-01
Ba-133	6,00E-02	8,00E-02	1,47E-13 (Widestrand et al., 2007)		5,41E-10		8.20E-03	5.00E-03	2.70E+03	1.05E+01
Poznámka	V Cell modelu pod element Solid		V Cell modelu pod element Fluid		Rozlišení RN jen pro Goldsim-Pipe		V Goldsim Cell modelu pod element Solid			Flow123d nepoužito

Tab. 2: Časové konstanty experimentů a modelu transportu.

	WPDE-1	WPDE-2
Doba experimentu (a simulace)	8760 h (1 rok)	17520 h (2 roky)
Délka vtláčení	50 min	5 h
Průtok tekutiny	20 µl/min	10 µl/min
Zpoždění v přívodní trubici	16 h	32 h
Zpoždění v odtokové trubici	17 h	34 h

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Tab. 3 Geometrie jednotlivých částí transportní cesty (úseky horniny VGN2, PGR1, VGN1 jsou uvedeny ve směru transportu, tj. od vzdálenějšího konce vrtu k ústí).

	Přívodní trubice	VGN2	PGR1	VGN1	Odtoková trubice do detektoru	Odtoková trubice do sběrného zařízení
Délka [m]	24,2	1,41	0,15	0,35	25,7	4,6
Plocha toku [m²]	7,85E-07	2,17E-04	2,17E-04	2,17E-04	7,85E-07	7,85E-07

Tab. 4 Injektovaná aktivita radionuklidů v experimentech WPDE_1 a WPDE_2.

Radionuklid	Aktivita WPDE_1 [Bq]	Aktivita WPDE_2 [Bq]
H-3	1,71E+07	3,11E+07
Na-22	1,38E+06	2,04E+06
Cl-36	1,25E+06	5,09E+06
Sr-85		4,12E+06
Ba-133		2,46E+06

Požadovaným výstupem výpočtů jsou průnikové křivky, tj. časové průběhy koncentrací radioaktivních stopovačů. Ty jsou vyjádřeny pro snadnější porovnání jako tok aktivity normovaný celkovou injektovanou aktivitou (rozměr 1/čas). Vedle toho jsou určovány rozměrové parametry grafu průnikové křivky (výšky a pozice zvolených bodů). Radioaktivní rozpad nebyl součástí simulace (vyhodnocované hodnoty jsou dle zadání kompenzované).

Součástí zadání (Lofgren et al. 2015) a dodaných šablon tabulek pro výsledky byl výpočet citlivosti a neurčitosti. Konkrétní význam pojmů ale nebyl nijak specifikován a ponechán na vlastní volbu řešitelům. Pro to byl mezi českými řešiteli rovněž dohodnut do velké míry jednotný postup (část 3.4).

Podrobně jsou pak metodika řešení a porovnání výsledků mezi českými institucemi pro jednotně zadané vstupy předmětem sekcí 3.2 a 3.4.

3.2 Realizace modelového řešení

Společné parametry pro modely byly uvedeny v předchozí kapitole. Níže jsou popsány specifické způsoby použití těchto dat pro konkrétní software, případně odchylky vyplývající z koncepčních modelů, na nichž použité softwary jsou založeny. Použití jednotlivými řešiteli bylo následovně: ÚJV – GS Pipe pathway, FJFI – GS Cell Net, TUL – Flow123d a PROGEO – MT3D.

3.2.1 Řešení pomocí Goldsim Pipe pathway

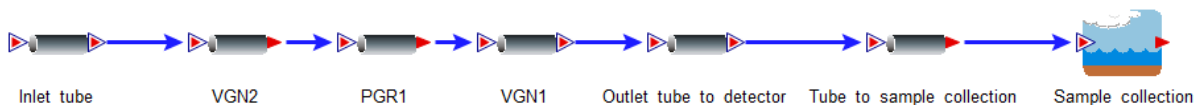
Pro řešení úlohy byla použita komponenta *Pipe pathway* ve všech sledovaných částech systému, tedy jak pro simulaci procesů horninovým prostředím, tak pro přívod stopovače od

jeho zdroje do části vymezené obturátorem a následný odvod stopovače do sběrného zařízení. Pouze samotné sběrné zařízení je simulováno komponentou *Cell pathway*.


Transportní cesta stopovače byla rozdělena na několik částí, kdy jednotlivé části se liší uvažovanými transportními procesy (Obr. 6):

- přívodní trubice,
- horninové prostředí tvořené typem horniny VGN (rozděleno na dvě části),
- horninové prostředí tvořené typem horniny PGR,
- odtoková trubice do detektoru,
- odtoková trubice do sběrného zařízení.

Ve všech částech transportní cesty bylo uvažováno advektivní proudění. V částech tvořené horninovým prostředím (části VGN1, VGN2 a PGR1) byly navíc uvažovány transportní procesy disperze a difúze do horninové matrice (Tab. 5). K procesu disperze může docházet i v přívodní a odtokových trubicích, v prvních výpočtech však tyto procesy uvažovány nebyly z důvodu porovnání výsledků jednotlivých řešitelů. Radionuklidy se tedy šíří advekcí přívodní trubicí, jejich transport v části vymezené obturátorem probíhá jednak dále vlivem advekce a jednak vlivem disperze a molekulární difúze. Vlivem disperze nastává rozptýl koncentrace radionuklidů ve směru proudění a vlivem molekulární difúze nastává difúze do horninové matrice, kde je radionuklid zachytáván a následně na základě koncentračního gradientu uvolňován zpět do proudového pole kapaliny ve štěrbině mezi stěnou vrtu a obturátorem (Obr. 5). Poté jsou radionuklidy odváděny odtokovou trubicí do trubice směřující ke sběrnému zařízení, transportním procesem v těchto trubicích je již opět je advekce. Podélná disperze byla uvažována jako 1/10 měřítka úlohy, dále byla předepsána mocnost difúzní zóny 1 m. Geometrie jednotlivých částí je uvedena v Tab. 3.



Obr. 6 Rozdělení transportní cesty do jednotlivých částí dle jejich geometrie a procesů v nich uvažovaných.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Tab. 5 Znáznornění transportních procesů uvažovaných v jednotlivých částech transportní cesty.

Část systému	Přívodní trubice	VGN2	PGR1	VGN1	Odtoková trubice do detektoru	Odtoková trubice do sběrného zařízení	Sběrné zařízení
Uvažované procesy	Advekce	Advekce	Advekce	Advekce	Advekce	Advekce	Vyrovňování koncentrace
		Disperze	Disperze	Disperze			
		Difúze do horninové matrice	Difúze do horninové matrice	Difúze do horninové matrice			

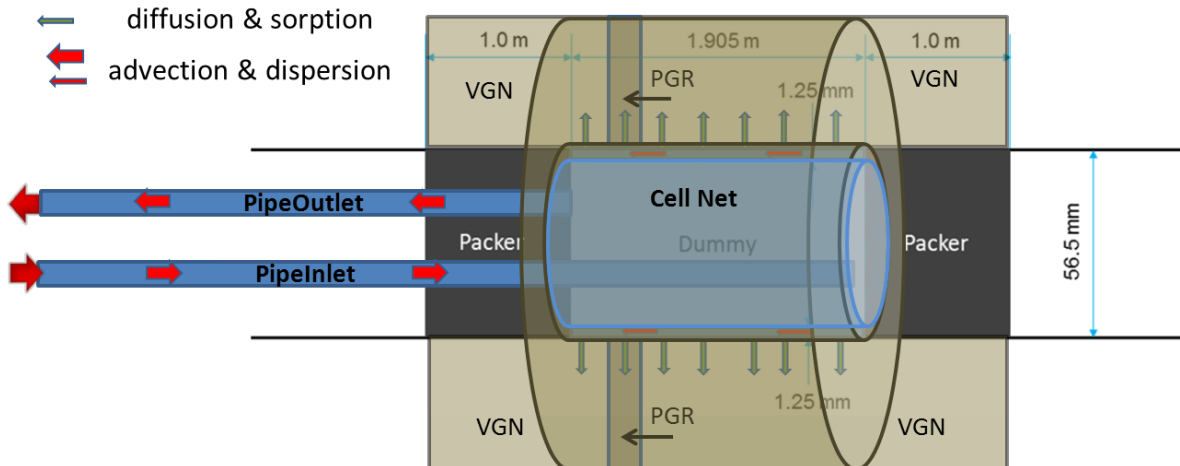
V matematickém modelu byly uvažovány následující parametry transportních procesů (Tab. 1):

- K_d jako parametr sorpce, byla uvažována lineární sorpční izoterma,
- D_e a D_w jako parametry difúze do horninové matrice, jsou zásadní pro výpočet frakce porozity, tedy porozity, která se skutečně podílí na transportu radionuklidů (kapitola 2.2.3),
- porozita jako parametr nutná k výpočtu frakce porozity a geometrického faktoru / tortuozity,
- objemová hmotnost,
- poločas rozpadu.

Jako okrajová podmínka byl předepsán průtok v přívodní trubici a aktivita sledovaných radionuklidů, jejichž hodnota se lišila dle simulovaného experimentu (Tab. 2, Tab. 4).

3.2.2 Řešení pomocí Goldsim Cell Net

Migraci stopovačů v experimentech WPDE1-2 lze rozdělit na část, ve které docházelo pouze k transportu pomocí advekce s disperzí (transport přívodními a odvodními PEEK hadičkami), a část, kdy advekce s disperzí byla doprovázena difúzí se sorpcí do horninového prostředí (transport štěrbinou v okolí horninového prostředí a do horniny). I tento transport lze modelovat v GoldSim pomocí elementu *Pipe pathway*. Horninové prostředí ovšem vykazuje heterogenitu, která může ovlivnit průběh transportu a samotná *Pipe pathway* je určena spíše pro modelování transportu v homogenním prostředí. Proto bylo navrženo otestovat model štěrbinu a horninového prostředí pomocí sítě cel, která umožňuje modelovat poměrně jednoduchým postupem heterogenity vlastností horninového prostředí. Jedním z cílů této práce bylo otestovat, zda je možné pomocí sítě cel representovat zjednodušený model WPDE1-2 experimentů, ekvivalentní jednomu elementu *Pipe pathway*.



Obr. 7 Schématické znázornění koncepčního modelu WPDE1-2 experimentů v GoldSim – pomocí sítě cel pro horninu a štěrbinu a dále dvou elementů Pipe pathway (PipeInlet a PipeOutlet) pro přívodní a odvodní hadičky.

Obr. 7 schematicky znázorňuje koncepční model WPDE1-2 experimentů (úplný popis v předchozí sekci 3.1 a zprávě Lofgren et al, 2015). Přívodní a odvodní PEEK hadičky, které byly modelovány pomocí dvou *Pipe pathway*, jsou v modelu označeny jako *PipeInlet* a *PipeOutlet*. Jejich základní parametry jsou uvedeny v Tab. 3. Axiální disperze v těchto prvních je 1/10 délky, tedy 2,42 m, resp. 2,57 m. Štěrbinu a okolní horninu byly modelovány pomocí sítě cel s válcovou geometrií. Síť cel (Cell Net) byla rozdělena na tři zóny, dvě zóny modelují VGN a PGR horniny a třetí zóna štěrbinu s proudící syntetickou podzemní vodou. V PipeInlet a PipeOutlet a v celách představujících štěrbinu byl uvažován pouze transport pomocí advekce s disperzí, v celách s horninou byl implementován pouze difúzní transport v pórové vodě horniny se sorpcí na horninové prostředí. Výsledky simulací, tzv. průnikové křivky, byly ukládány a jsou ve zprávě prezentovány pro výstup z PipeOutlet.

Injekce stopovače do přívodní PEEK hadičky byla modelována pomocí elementu *Selector*. Pokud byl čas simulace, v GoldSim označený jako *ETime*, z intervalu [0;48,7] min (WPDE1) popřípadě [0;300] min (WPDE2), byla vstupní rychlost (v GoldSim označeno jako *Input Rate*) *PipeInlet* nenulová, vypočítána jako: (celková hmotnost stopovače krát objemová rychlost proudění tekutiny v experimentu) / objem injekční smyčky. V ostatních časech simulace byla vstupní rychlost do elementu *PipeInlet* nulová, což odpovídá konstantnímu průtoku syntetické podzemní vody bez stopovačů.

Štěrbinu mezi horninou a inertním materiálem (na Obr. 7 označen jako dummy), stejně jako okolní horninu byly modelovány pomocí sítě cel. Byla zvolena síť cel s válcovou geometrií a úhlem 360°. Byly nadefinovány tři zóny, dvě zóny reprezentovaly dva různé typy horniny a třetí zóna představovala štěrbinu, kudy proudila syntetická podzemní voda se stopovači. Obě horniny byly modelovány pomocí elementu *Solid*, jehož parametry jsou uvedeny v tabulce společné pro všechny modely (Tab. 1). Navíc je zadán geometrický faktor, který odpovídá GS parametru „Tortuosity“ a jeho hodnota byla nastavena na 1, protože se v GS používá pouze k přepočtu efektivní difuzivity na relativní difuzivitu. Pro nadefinování různých efektivních difúzních koeficientů obou typů horninového materiálu bylo nezbytné vytvořit dva elementy *Fluid*, jejichž parametry jsou rovněž uvedeny v Tab. 1. Axiální disperze toku vody ve štěrbině byla zohledněna zvýšením referenčního difúzního koeficientu elementu *Fluid* náležejícímu celám štěrbině, a to podle vztahu $D_L = D_w + \alpha_L v_L$, kde D_w [L²/T] označuje referenční difúzní

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

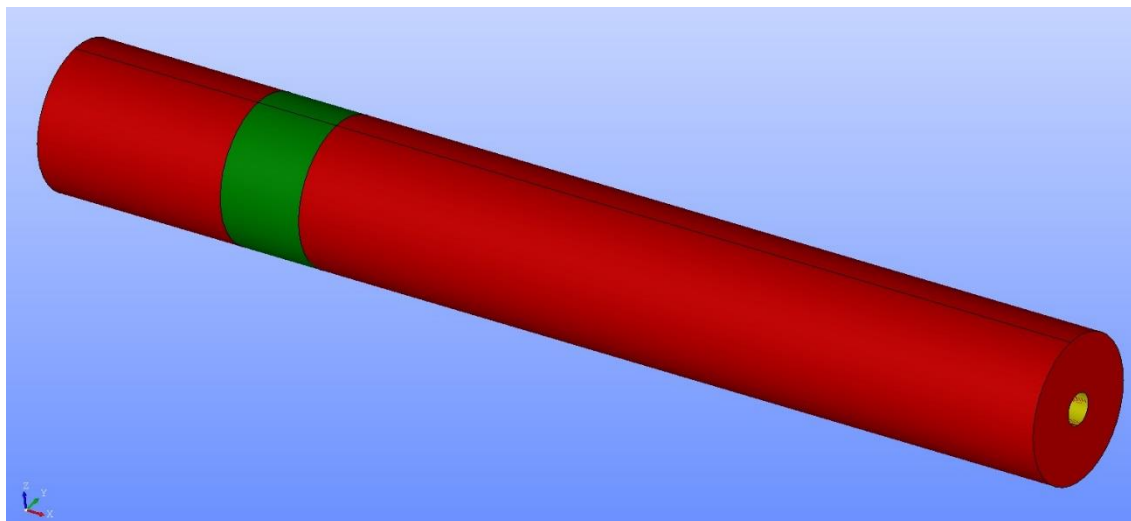
koeficient, α_L [L] axiální disperzi toku a v_L [L/T] rychlost toku. Za D_w byla použita hodnota $2,3 \cdot 10^{-9}$ m²/s pro všechny radionuklidy (odpovídá hodnotě v Pipe modelu pro HTO). Všechny důležité vstupní parametry modelu byly zadány pomocí elementu *Spreadsheet*, který umožňuje dynamickou výměnu dat s Microsoft Excel souborem.

Při implementaci modelu v GoldSim pomocí sítě cel se ukázalo jako nezbytné optimalizovat rozvrstvení a počet Z a R souřadnic sítě cel tak, aby diskretizace štěrbiny a horniny nevnášela do výsledků významnou numerickou chybu. První výpočty totiž ukázaly, že příliš hrubá síť cel v okolí štěrbiny vede k nesprávným výsledkům pro sorbující radionuklidy (např. Na-22). Prvotní vyhodnocení a porovnání mj. s analytickým řešením bylo součástí průběžné zprávy (Hokr et al., 2015). V této zprávě jsou prezentovány výsledky s optimalizovanou sítí.

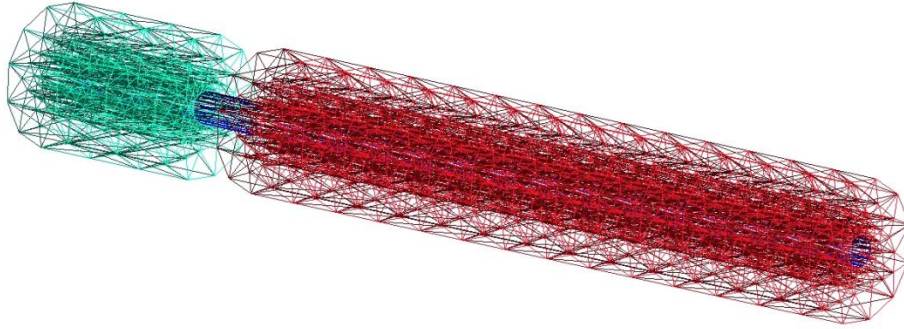
3.2.3 Řešení ve Flow123d

Geometrie se skládá z 2D pukliny a 3D horniny (rozdělené do tří částí dle specifikací v části 3.1). Větší míra heterogenity horninové matrice nebyla dle zadávací dokumentace při slepé predikci přípustná. Geometrie je zobrazena na Obr. 8. Mocnost horniny je ve výchozí verzi 0,1 m (v dalších variantách byla zvyšována). Diskretizace geometrie je znázorněna na Obr. 9 a Obr. 10. Síť má 720 2D elementů reprezentujících puklinu a 12 096 3D elementů reprezentujících horninu. Puklinu obklopují dvě tenké vrstvy elementů matrice. Jejich přítomnost významně zpřesňuje výsledky modelu pro sorbující stopovače (viz dále).

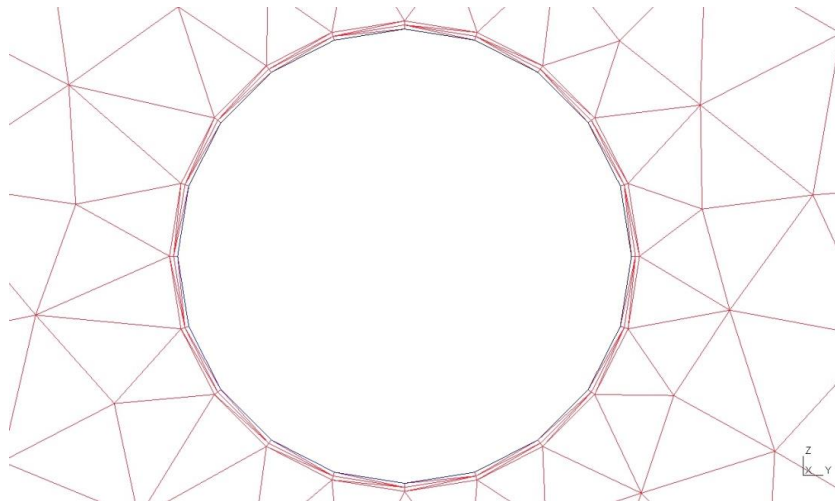
Parametry modelu proudění byly spočteny (případně zvoleny) tak, aby výsledná rychlost proudění odpovídala průtokům v experimentu (20 μ l/min pro WPDE-1 a 10 μ l/min pro WPDE-2) a aby vyhověly popisu v zadávací dokumentaci (permeabilita horninové matrice v řádu 1e-19 m²). Jsou uvedeny v Tab. 6.



Obr. 8: Geometrie modelu WPDE pro slepou predikci. Červená část představuje žilkovanou rulu (VGN) a zelená část představuje pegmatitovou žilu (PGR).



Obr. 9: Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci (část PGR skryta, aby byly vidět diskretizace pukliny).



Obr. 10 Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci – řez. Dvě tenké vrstvy elementů matrice kolem pukliny.

Tab. 6: Parametry modelu proudění.

	WPDE-1	WPDE-2
Hydraulická vodivost pukliny	1,28 m/s	1,28 m/s
Hydraulická vodivost horniny	9,81e-13 m/s	9,81e-13 m/s
Okrajová podmínka v $x=0$ m	Dirichlet $\Phi = 0$ m	Dirichlet $\Phi = 0$ m
Okrajová podmínka v $x=1,905$ m (odpovídá průtoku dle specifikace experimentu)	Neumann $q = -1,536e-6$ m/s	Neumann $q = -0,768e-6$ m/s
Zbylé okrajové podmínky	Neumann nulový tok	Neumann nulový tok

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Hydraulická vodivost pukliny byla spočtena z jejího rozevření pomocí kubického zákona:

$$K = \frac{\rho \cdot g}{12\mu} \cdot b^2,$$

kde b je rozevření pukliny [m], ρ je hustota vody [kg/m³], g je tíhové zrychlení [m/s²] a μ je dynamická viskozita vody [N·s·m⁻²]. Hydraulická vodivost horninové matrice byla spočtena ze známé hodnoty permeability κ [m²] jako:

$$K = \kappa \cdot \frac{\rho \cdot g}{\mu}.$$

Hodnota Neumannovy okrajové podmínky na vtokové části hranice byla spočtena jako podíl požadovaného toku puklinou a plochy jejího řezu (spočtené jako plocha mezikruží). V použité verzi SW Flow123d je tok uvažován vždy ve směru jednotkové vnější normály, proto je u hodnoty vtoku záporné znaménko.

Simulován byl transport tří (WPDE-1) respektive pěti (WPDE-2) stopovačů. V zadávací dokumentaci je u každého z experimentů pro každý ze stopovačů uvedena injektovaná aktivita [Bq]. Dále byl znám objem roztoku, ve kterém byly stopovače rozpuštěny (1 ml pro WPDE-1, 3 ml pro WPDE-2). Jelikož ve Flow123d je transportovanou kvantitou nikoli aktivita ale hmotnost, bylo nejprve třeba provést přepočítání aktivity na hmotnost [g] jejím vydělením specifickou aktivitou a [Bq/g]:

$$a = \frac{\ln(2) \cdot N_A}{T_{1/2} \cdot M},$$

kde N_A je Avogadrova konstanta, $T_{1/2}$ je poločas rozpadu [s] (tabelovaný v zadávací dokumentaci) a M je molární hmotnost [g/mol].

Okrajové podmínky transportu byly předepsány na vtokové části pukliny tak, aby injektovaná množství odpovídala zadání.

Doba trvání injektáže byla spočtena ze známých kvantit (objem roztoku se stopovači a rychlost toku). Čas nula simulační periody je v okamžiku, kdy započalo vtlačení stopovačů. Před vstupem do experimentální sekce (pukliny) musel roztok projít PEEK potrubím o známé délce a vnitřním průměru, ze kterých byla spočtena doba zpoždění. V modelu, který zahrnuje jen samotnou experimentální sekci, je tak okrajová podmínka sepnuta až v čase odpovídajícím tomuto zpoždění. K analogickému zpoždění dochází rovněž při výstupu z experimentální sekce, v tomto případě je o jeho hodnotu posunuta časová osa výstupů modelu (průnikové křivky), aby byly srovnatelné s experimentálně změřenými daty. Jelikož ani přírodní ani odvodní potrubí nejsou explicitně modelovány, je v simulaci zanedbána případná disperze v nich.

Po ukončení injektáže byla okrajová podmínka transportu přepnuta na Dirichletovu OKP nulové koncentrace. Časové konstanty simulace jsou uvedeny v Tab. 2.

Materiálové parametry modelu (koeficienty v rovnicích) jsou uvedeny ve společné tabulce s Goldsim modely Tab. 1. Navíc je zadána hodnota porozity 1 pro elementy pukliny (volný prostor) a nižší hodnoty pro CI-36 jako ekvivalent aniontové exkluze na základě měřených dat kapacitního faktoru (Lofgren et al, 2015), $1,75 \cdot 10^{-4}$ pro VGN a 0,013 pro PGR.

Jelikož je rychlost proudění podzemní vody v horninové matici zanedbatelná, je hydrodynamická disperze uvažována pouze v puklině. Koeficient podélné disperzivity je uvažován jako 10 % charakteristické délky ($\alpha_L = 0,19$ m), koeficient příčné disperzivity jako

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

desetina podélné ($\alpha_T = 0,019$ m). Jedná se o jediný parametr modelu, jehož hodnota nemá oporu v měřených datech, nejistota jeho zadání je tak velká. V puklině byla uvažována efektivní difuzivita 10^{-9} m²/s stejná pro všechny stopovače (nebyla zadána, zvolená hodnota je odlišná od modelů Goldsim, v poměru k disperzi nemá vliv).

Koeficienty lineární sorpce použité v simulaci jsou uvedené v Tab. 1. V puklině není sorpce uvažována. Hustota horniny byla nastavena na 2 700 kg/m³ a hustota vody na 1 000 kg/m³.

Veškeré popsané simulace úlohy 9A byly realizovány pomocí SW Flow123d ve verzi 1.8.3.

Výsledky všech tří sorbujících stopovačů vypadaly při prvních simulacích výrazně jinak, než je níže prezentováno, průnikové křivky vykazovaly daleko vyšší retardaci. Díky srovnání výsledků simulací s výsledky ostatních týmů zúčastněných v GWFTS byla tato nesrovnalost odhalena a po ověření správnosti matematicko-fyzikálního modelu a jeho vstupů vysvětlena vlivem diskretizace výpočetní domény v blízkosti pukliny. Diskretizace byla následně upravena přidáním dvou tenkých vrstev elementů v horninové matici bezprostředně sousedící s puklinou. Tato úprava dramaticky vylepšila shodu výstupů modelu Flow123d s výstupy ostatních řešitelů s tím, že pro nejsilněji sorbující stopovač (baryum) jsou výsledky stále mírně odlišné. I v případě barya by šlo shodu s ostatními vylepšit dalšími úpravami výpočetní sítě, nicméně ve fázi slepé predikce to nebylo účelné. Vliv jemnosti výpočetní sítě na výsledky barya tak je diskutován dále v textu v části zabývající se shodou s měřeními průnikovými křivkami.

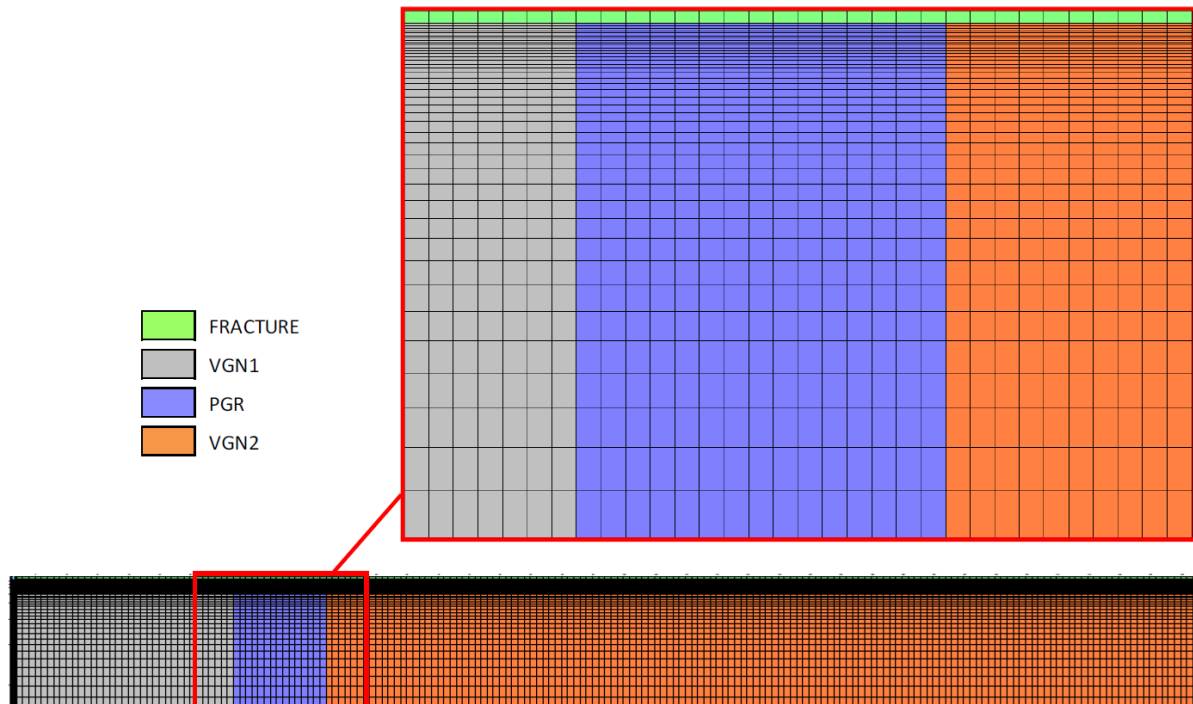
3.2.4 Řešení v MODFLOW/MT3D

Simulace úlohy WPDE v programech MODFLOW2000 a MT3DMS (v5.3) byla provedena PROGEO pro vybrané varianty nad rámec původně plánovaného řešení. Základní konfigurace modelu, tj. rozdělení modelové domény na puklinu a horninové typy, zadávané hydraulické a transportní parametry, okrajové podmínky atd., byly převzaty ze společného zadání. Variantně byl řešen vliv disperze, variability rozevření pukliny a diskretizace (velikosti výpočetní buňky) na výsledky modelu.

Zadaná úloha je řešena analogicky jako 2D osově symetrický problém. Modelová doména je tvořena pravoúhlou sítí výpočetních buněk a má velikost 1,9 m x 0,2 m (1,9 m odpovídá délce otevřeného úseku vrtu a 0,2 m je zadaná mocnost horninové matrice). Délka výpočetních buněk ve směru osy vrtu je konstantní 10 mm (celkem 190 sloupců). Šířka první řady výpočetních buněk reprezentujících puklinu je 1,25 mm. Šířka výpočetních buněk reprezentujících horninovou matici se ve směru od pukliny do horniny postupně zvětšuje z 1 mm na 20 mm (celkem 42 řad). Geometrie modelu a velikost výpočetních buněk je patrná z Obr. 11.

Programy MODFLOW/MT3DMS umožňují řešit pouze 3D úlohy v kartézských souřadnicích, tj. je nutné zadat také mocnost modelové vrstvy. Osová symetrie úlohy je proto zadána způsobem, kdy se směrem od pukliny do horniny zvětšuje mocnost výpočetních buněk (tloušťka buněk ve směru osy z) tak, aby odpovídala obvodu kružnice v dané vzdálenosti od osy vrtu.

Simulace úlohy probíhá ve dvou krocích – nejprve je programem MODFLOW spočten ustálený model proudění a je uloženo rychlostní pole (objemové toky mezi výpočetními buňkami). V dalším kroku je programem MT3DMS spočten transienční transportní model s konstantním časovým krokem 100 s.



Obr. 11 Geometrie a diskretizace modelu

Vstupní modelové hodnoty hydraulických a transportních parametrů pro jednotlivé stopovače HTO, Cl-36 a Na-22, pro PUKLINU a pro horninové typy VGN1, PGR a VGN2 zadané v základních srovnávacích variantách (var0) odpovídají jednotnému zadání tak, aby umožnily přímé porovnání modelových výsledků realizovaných v různých softwarech. V rámci dalších variantních simulací byly modifikovány některé vstupní hodnoty parametrů s cílem ověřit citlivost modelového řešení na změnu zadávaných parametrů (část 3.6.3).

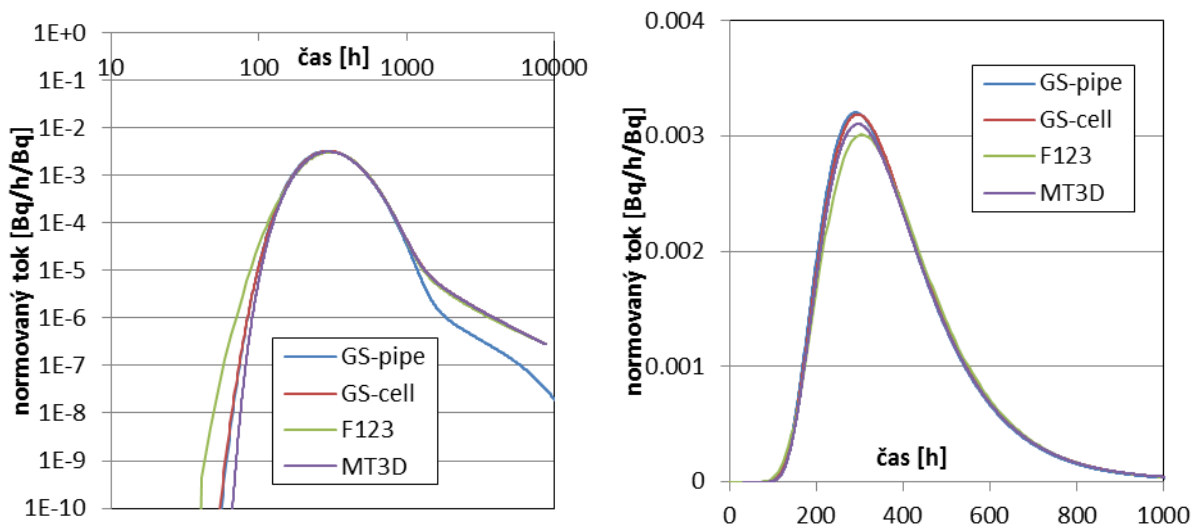
Součástí matematického modelu nebyl pohyb stopovačů přírodními a odvodními hadičkami. Pro experiment WPDE-1 byla proto přičtena doba průchodu hadičkami 32 hod do prezentovaných výsledků (grafů a tabulek).

3.3 Porovnání průnikových křivek

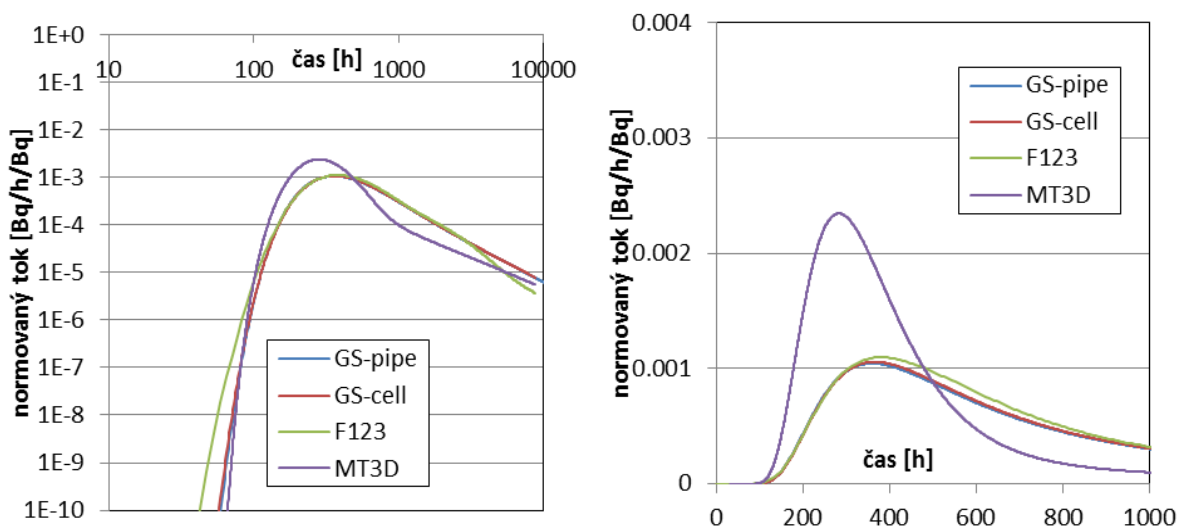
Porovnání prezentované v této části je pro aktualizované výpočty po prvním porovnání a diskusích na kontrolních dnech směřujících k vyjasnění některých drobných rozdílů v zadávaných parametrech. Obsahuje data zasláná jako finální koordinátorovi Task 9A v předepsaných šablonách v červnu 2016.

Průnikové křivky jsou vykresleny pro každý radionuklid v obou experimentech, vždy ve dvojicích v log-log osách a v lineárních osách, v prvním případě je dobře porovnatelná poklesová část křivky, kde se projevují vlastnosti horninové matrice, v druhém případě je pak přesněji vidět tvar a hodnota maxima píku (kromě sekundárního vlivu sorpce je řízeno hlavně disperzí v puklině). Obrázky Obr. 12 až Obr. 19 jsou v pořadí HTO, Na-22 a Cl-36 pro WPDE-1 a HTO, Na-22, Cl-36, Sr-85 a Ba-133 pro WPDE-2. Modely jsou označeny zkratkami: F123 je Flow123d (řešeno TUL), GS je GoldSim, varianta Pipe (element „Pipe Pathway“, řešena ÚJV) a varianta Cell (síť elementů „Cell“, řešena FJFI) a MT3D (řešeno PROGEO).

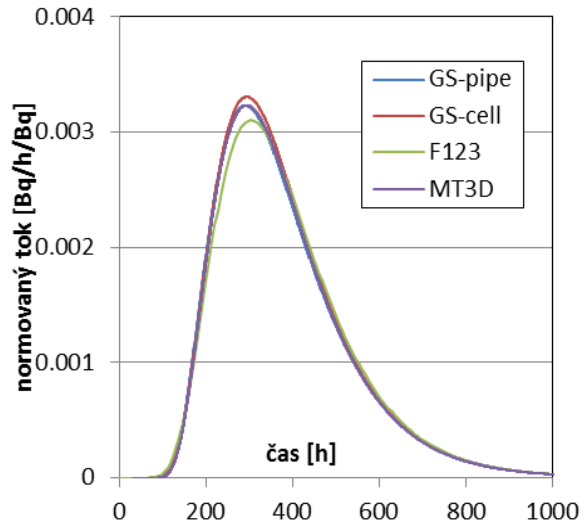
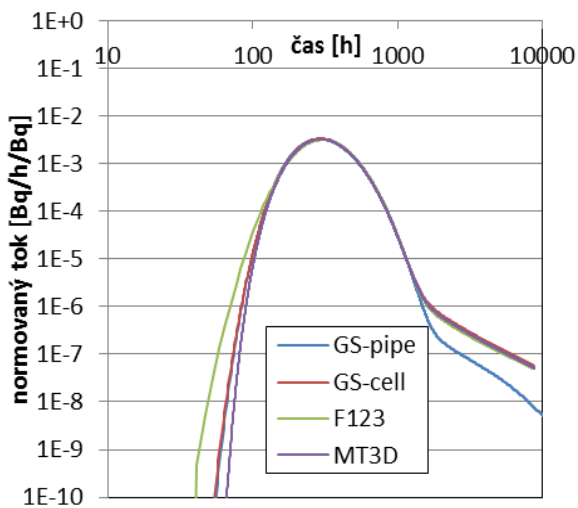
Viditelný je rozdíl velikosti píku F123 proti oběma variantám GS u Na-22 a Sr-85 u WPDE-2 (u WPDE-1 je ale pro obdobné Na-22 nepatrný), což může být pozůstatek efektu diskretizace pozorovaného u sorbujících radionuklidů, kde bez zjemnění sítě vycházely výsledky výrazně odlišné. Pravděpodobně obdobný efekt je pozorovatelný u křivky Na-22 (WPDE-1) spočtené MT3D, která je i přes provedené zjemnění odlišná. Taktéž neodstraněna zůstala neshoda křivky Ba-133 spočtené F123. Vlivy diskretizace jsou podrobněji komentovány pro MT3D v části 3.6.3 a byly analyzovány detailněji v průběžné zprávě (Hokr et al., 2015). Dá se říci, že jde o všeobecný jev, nesouvisející s konkrétním softwarem nebo numerickou metodou, protože i v případě GS-cell bylo nutné provést úpravy sítě v případě Ba-133; navíc tím získáváme indicii o „konvergenci“, na základě níž lze křivky GS považovat za ty správné. U křivek GS-Pipe je rozdílná poklesová část křivek HTO a Cl-36 (nesorbujících) což je dáno způsobem interpretace frakce pórovitosti a geometrického faktoru (tortuozity) – část 2.2.3.



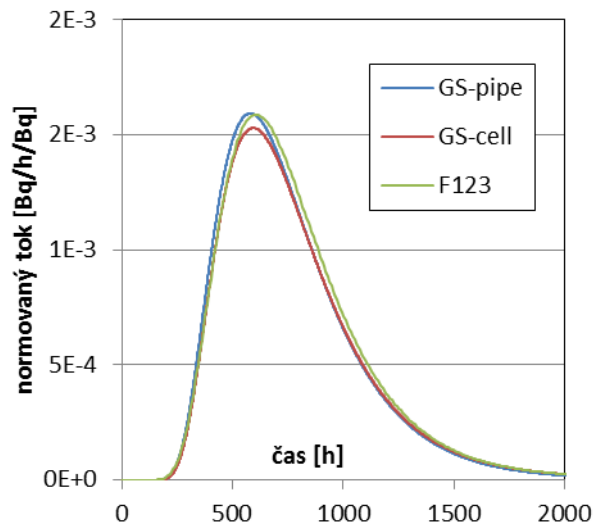
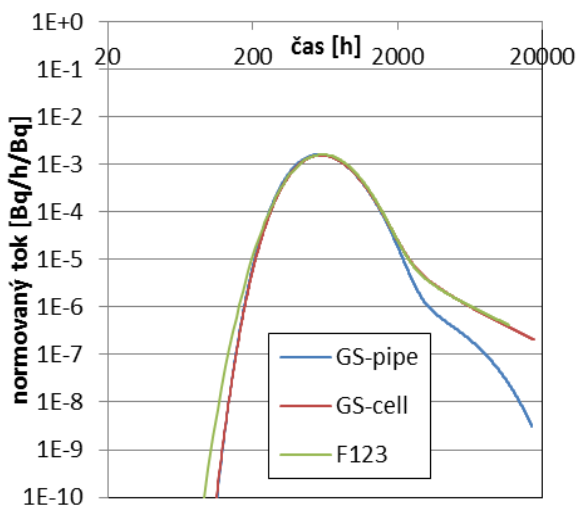
Obr. 12 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-1 jednotlivými modely pro HTO.



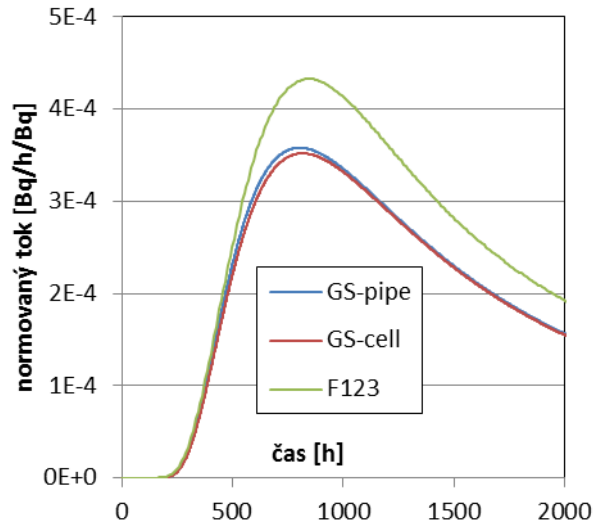
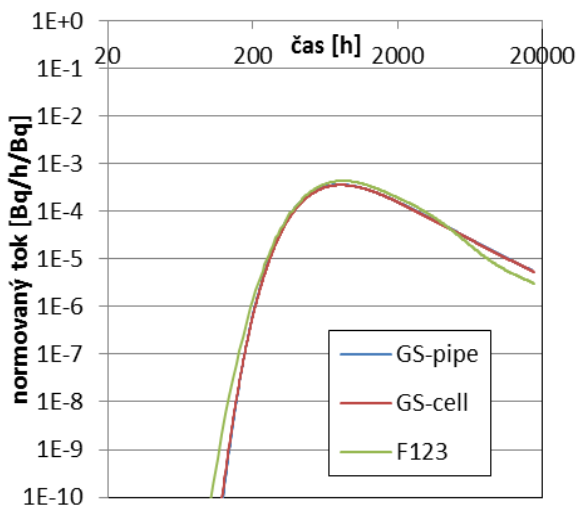
Obr. 13 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-1 jednotlivými modely pro Na-22.



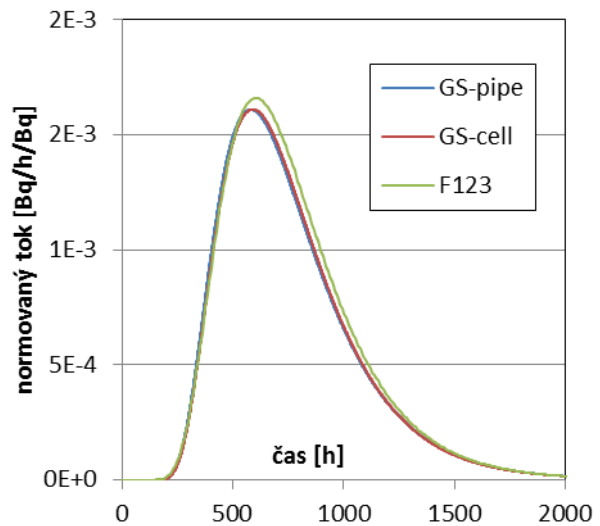
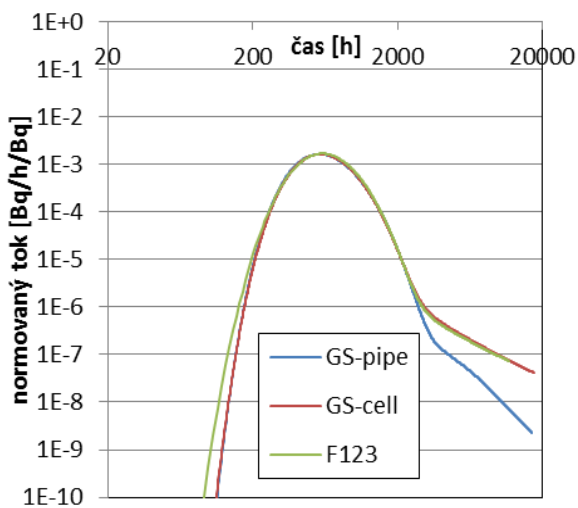
Obr. 14 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-1 jednotlivými modely pro Cl-36.



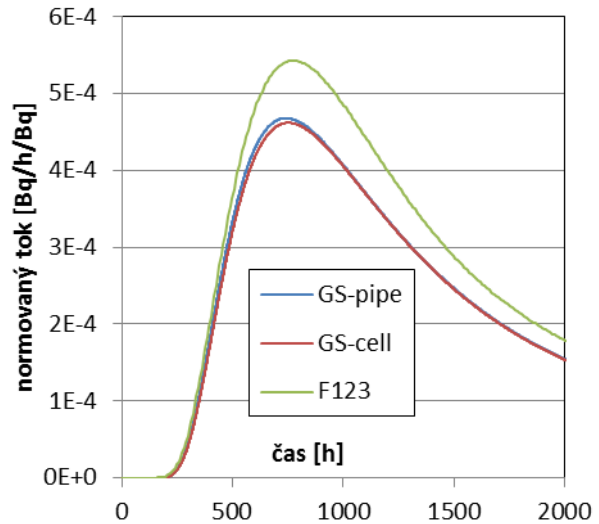
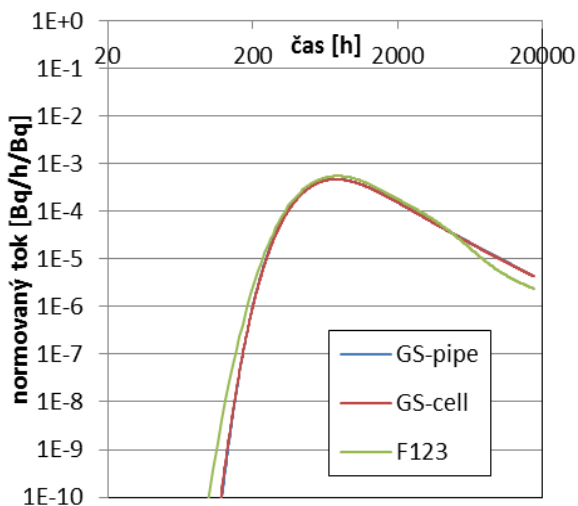
Obr. 15 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro HTO.



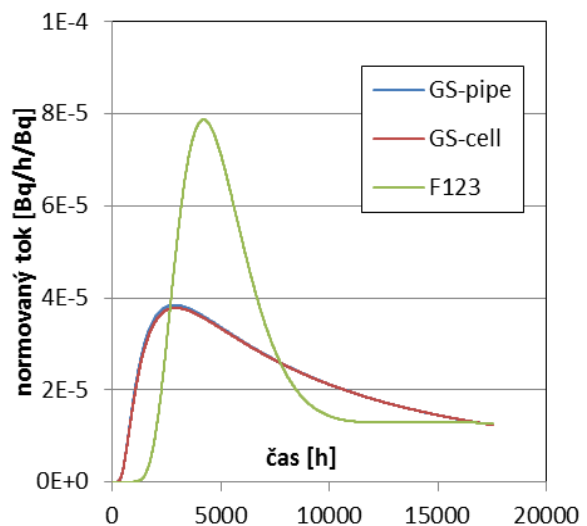
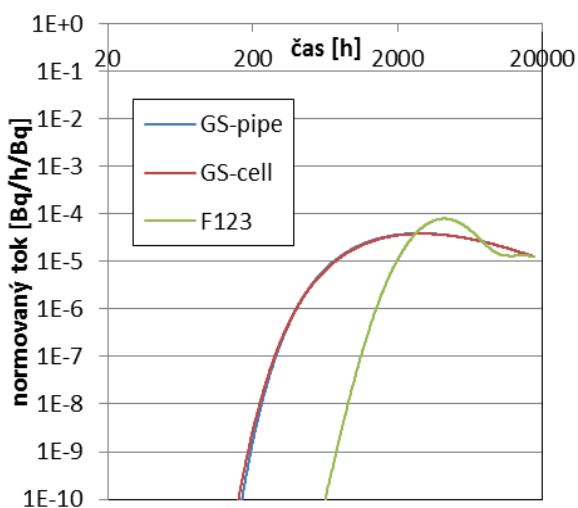
Obr. 16 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Na-22.



Obr. 17 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Cl-36.



Obr. 18 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Sr-85.



Obr. 19 Porovnání vypočtených průnikových křivek WPDE-2 jednotlivými modely pro Ba-133.

3.4 Výpočty a porovnání citlivosti

V zadání (Lofgren et al. 2015) byla jmenovitě uvedena problematika citlivosti a neurčitosti, ale bez konkrétní specifikace. Pojmy jsou často používány v různém kontextu s různým významem. Při zpracování jsme vycházeli s těchto úvah:

- Jako účel zadání lze považovat přípravu na budoucí vyhodnocení měřených dat, tj. odhad jaké parametry mohou být ze shody modelu a měření odhadovány, resp. zda rozdíl modelu a dat je spíše způsoben nepřesnou hodnotou parametru (měření padá do mezí neurčitosti výsledků modelu) nebo chybným modelem, tj. s některými nesprávnými předpoklady nebo zjednodušením (měření padá mimo meze neurčitosti)
- Výpočet s neurčitostí byl nepřímou definován formátem požadované tabulky pro výstupy, tj. výpočet horních a dolních mezí (upper/lower prediction).



- Jako podklad pro neurčitost parametrů byly použity směrodatné odchylky uváděné spolu s měřenými daty v literatuře. Konkrétní reference jsou uvedeny v Tab. 7. V některých případech bylo nutné hodnoty upravit vlastním odhadem, aby výpočet dával smysl (rozptyl větší než hodnota).
- Pojem „citlivosti“ mohl být míněn jako podklad pro neurčitost pro jednotlivé parametry, ale také přímo jako číselná hodnota. Pro druhý případ byly provedeny výpočty metodikou uvedenou v následující části 3.4.1
- Postupem ve výše uvedeném bodě byl získán dílčí podklad pro hodnocení shody dat s měřením bez nutnosti vyhodnocovat plnohodnotné meze neurčitosti (výpočetně náročné) a je možné porovnat, zda vliv parametru je u jednotlivých modelů/software období, což má význam zejména v případě rozdílů mezi výsledky – je možné posoudit, zda rozdíl je v mezích nebo mimo meze vlivu parametru.
- Korektní výpočet neurčitosti vyžaduje výpočet se všemi kombinacemi změn parametrů, tj. pro N parametrů 2^N výpočtů. Vzhledem k tomu, že řada parametrů má minimální efekt, mj. všechny pro horniny PGR, provedl tým FJFI takový výpočet pro 3 parametry: pórovitost a difúzní koeficient horniny VGN a buď pro disperzivitu pro nesorbující stopovače nebo sorpční koeficient pro sorbující stopovače.

3.4.1 Metodika výpočtu citlivosti

Citlivostí jako hodnotou rozumíme poměr mezi změnou výsledku modelu a změnou parametru, derivaci příslušné funkce vyjadřující závislost zvoleného výsledku modelu (např. bodové nebo integrální hodnoty) na parametrech. Aproximovat je možné běžnými diferenčními vzorci a použitím výpočtu modelu s perturbovanými parametry. V našem případě uvažování mezi intervalem nejistot parametrů přirozeně nejde o aproximaci derivace, ale využíváme stejný princip pro vzájemné kvantitativní porovnání vlivu parametrů mezi sebou.

Aby byly hodnoty nezávislé na jednotkách a měřítku různých veličin, uvažujeme dále normalizaci hodnotou výsledku i parametru. Použitý vzorec tedy je

$$s = \frac{\left(1 - \frac{y_2}{y_1}\right)}{\left(1 - \frac{b_2}{b_1}\right)} = \frac{y_2 - y_1}{b_2 - b_1} \frac{b_1}{y_1} \quad (2.1)$$

kde $y(b)$ je funkce vyjadřující závislost výsledku modelu y na hodnotě parametru b , hodnoty označené indexem 1 pak mají význam referenční hodnoty a hodnoty s indexem 2 vyjadřují změněnou hodnoty, tj. v našem případě jednu z mezí nejistot. Vzorec je stejným způsobem použit pro horní i dolní mez, výsledek je přirozeně vlivem „neinfinitezimálního“ intervalu i výrazně odlišný.

Jako výsledky modelu (skalární kritéria) jsou zvoleny hodnoty, které jsou voleny na stejném principu jako v zadání 9A, následovně:

- Hodnota maxima koncentrace v průnikové křivce [kg/h/kg]
- Čas dosažení maxima koncentrace [h]
- Šířka píku průnikové křivky definovaná jako časový úsek mezi hodnotou 50% maxima v růstové části a v poklesové části [h]

Zmíněné hodnoty jsou získány postprocesingem výsledků modelu. Ty mají diskrétní podobu, tj. jednotlivé časové kroky. Hodnoty jsou tak určeny s přesností na jeden krok časové

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

diskretizace, což je buď 1 h nebo 8 h. V druhém případě pak je často výsledkem „nulová citlivost“, kdy poloha hodnoty na křivce zůstane ve stejném časovém kroku.

Zvolené meze parametrů jsou uvedeny v Tab. 7. Referenční hodnoty jsou identické, jako byly uvažovány pro porovnání v předchozí kapitole 3.3. Hodnota „pórovitost CI-36“ je chápána jako dostupná pórovitost (s uvážením aniontové exkluze), určená z experimentů jako kapacitní faktor. Meze jsou ve většině případů voleny dle uvedených směrodatných odchylek měření. V případě pórovitosti VGN pro CI-36 byla dolní mez volena cca polovina hodnoty místo směrodatné odchylky, která je větší než hodnota.

Tab. 7 Hodnoty mezi parametrů pro výpočty citlivosti a nejistot. ZD označuje zadávací dokumentaci, tj. zprávu (Lofgren et al. 2015).

Parametr	Reference	Minimum	Maximum	Zdroj
Podélná disperzivita [m]	0,19	0,1	0,28	Určeno GWFTS
Pórovitost VGN [-]	0,0082	0,0011	0,03	Tab 2-8 ZD
Pórovitost PGR [-]	0,005	0,0026	0,0077	Tab 2-8 ZD
Pórovitost VGN [] CI-36	0,000175	0,0001	0,0006	Tab 2-9 ZD
Pórovitost PGR [] CI-36	0,013	0,011	0,015	Tab 2-9 ZD
K_d Na-22 VGN [m ³ /kg]	0,0013	0,001	0,0016	Tab 2-11 ZD
K_d Na-22 PGR [m ³ /kg]	0,0008	0,0005	0,0011	Tab 2-11 ZD
K_d Sr-85 VGN [m ³ /kg]	0,0011	0,0008	0,0014	Tab 2-11 ZD
K_d Sr-85 PGR [m ³ /kg]	0,0011	0,0008	0,0014	Tab 2-11 ZD
K_d Ba-133 VGN [m ³ /kg]	0,06	0,04	0,08	Tab 2-11 ZD
K_d Ba-133 PGR [m ³ /kg]	0,08	0,06	0,1	Tab 2-11 ZD
D_e HTO VGN [m ² /s]	1,83E-13	1,2E-13	2,8E-13	Tab 2-9 ZD
D_e HTO PGR [m ² /s]	5,7E-13	5,1E-13	6,3E-13	Tab 2-9 ZD
D_e Na-22 VGN [m ² /s]	4,65E-13	3,7E-13	5,6E-13	Posiva 97-07
D_e Na-22 PGR [m ² /s]	4,65E-13	3,7E-13	5,6E-13	Posiva 97-07
D_e CI-36 VGN [m ² /s]	5E-15	2E-15	8E-15	Tab 2-9 ZD
D_e CI-36 PGR [m ² /s]	5E-13	4E-13	6E-13	Tab 2-9 ZD
D_e Sr-85 VGN [m ² /s]	3,3E-13	2,5E-13	4,1E-13	SKB R-99-13
D_e Sr-85 PGR [m ² /s]	3,3E-13	2,5E-13	4,1E-13	SKB R-99-13
D_e Ba-133 VGN [m ² /s]	1,47E-13	1,17E-13	1,77E-13	Widestrand et al., 2007
D_e Ba-133 PGR [m ² /s]	1,47E-13	1,17E-13	1,77E-13	Widestrand et al., 2007

3.4.2 Výsledky

Porovnání hodnot citlivostí pro jednotlivá kritéria a parametry je prezentováno v tabulkách Tab. 8 až Tab. 12. Ty mají pro pět vyhodnocovaných radionuklidů jednotnou formu až na chybějící sorpční koeficienty u HTO a CI-36. V horní části tabulky jsou vždy samotné spočtené hodnoty

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

modelu (kvantitativní kritéria charakterizující průnikovou křivku) a v dolní části stejně uspořádané hodnoty citlivostí určené dle vztahu (2.1).

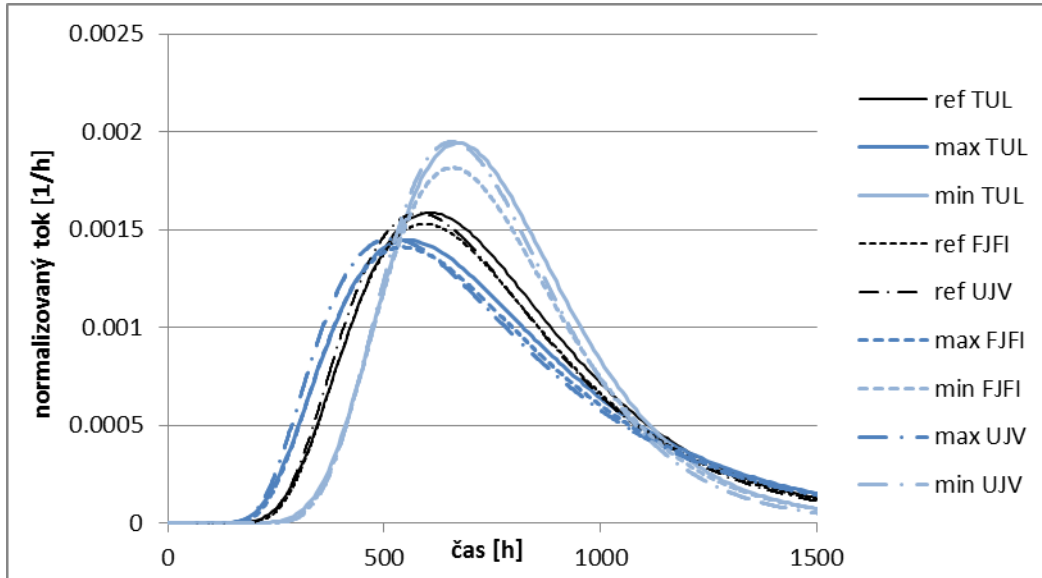
Porovnání zároveň doplňuje grafy průnikových křivek v části 3.3 – u velké části hodnot kritérií vidíme řádovou shodu odpovídající optické shodě grafů. Naopak je pozorovatelný rozdíl u odlišných průnikových křivek Ba-133 z programu Flow123d při přibližné shodě obou variant GoldSim. V případě konzistentních hodnot jsou zároveň většinou odpovídající i citlivosti, kde ale jsou dva specifické případy

- V případě malých citlivostí je někdy nulová hodnota u jednoho programu proti nenulové u druhého programu. To je způsobené výše zmíněnou metodikou s diskrétními časovými kroky a právě proto, že jde o citlivost na hranici rozlišení, nemá praktický smysl se tím zabývat.
- V případě vlivu disperze se objevuje anomálie od obvyklého efektu vyšší disperze na dřívější detekci a nižší pík, a naopak. Nastává v různé formě u všech sorbujících radionuklidů, především u obou variant GoldSim.

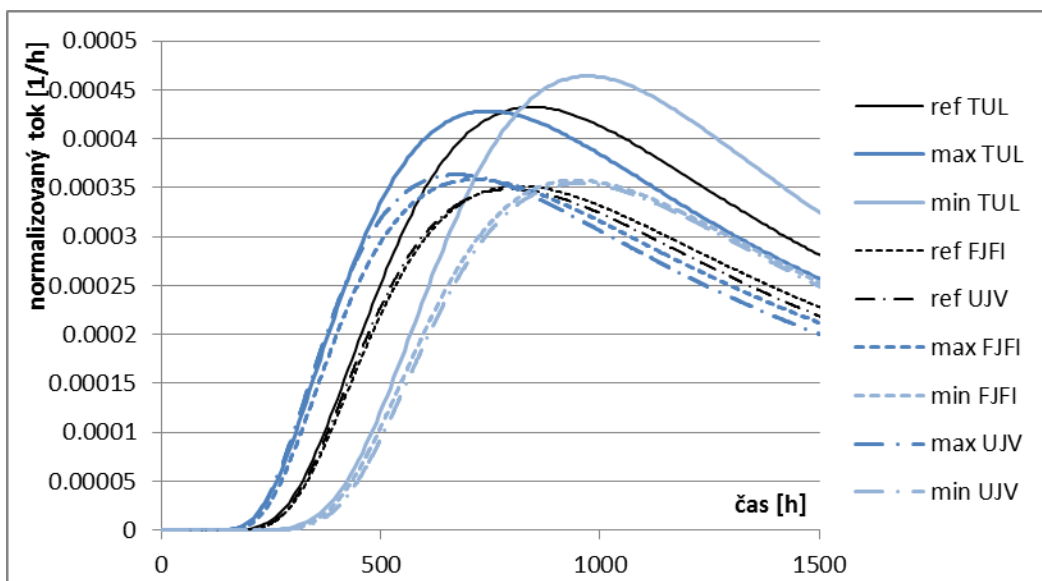
Standardní efekt disperze odpovídá záporné citlivosti u polohy a velikosti píku u min i max (snížení hodnoty při vyšší disperzi resp. zvýšení hodnoty při nižší disperzi) a je takto vidět jednotně u všech softwarů v případě HTO a Cs-137, pro první případ je zároveň demonstrováno na grafech na Obr. 20. V případě Na-22 a Sr-90 velmi podobně v obou variantách GoldSim je pro referenční případ minimum velikosti píku a obě změny disperze vedou k jeho růstu, tj. citlivosti na min a max mají opačné znaménko. V případě Flow123d efekt není v této podobě, ale lze pozorovat nesymetrii citlivosti pro min a max disperze, orientovanou směrem k jevu pozorovaného u GoldSim. Pro Na-22 je to demonstrováno na grafu na Obr. 21. Pro případ Ba-133 se trend závislosti spočtený GoldSim plně obrací: nárůst píku při vyšší disperzi a pokles při nižší.

Nemonotonie závislosti je netypická a samotná identifikace minima je nečekaná „náhoda“. Na druhou stranu se nedá říci, že by šlo jako celek o náhodný efekt, protože se projevuje konzistentně – mírně sorbující radionuklidy jako přechod mezi nesorbujícími a více sorbujícím a také stejně orientovaný efekt u více různých numerických schémat.

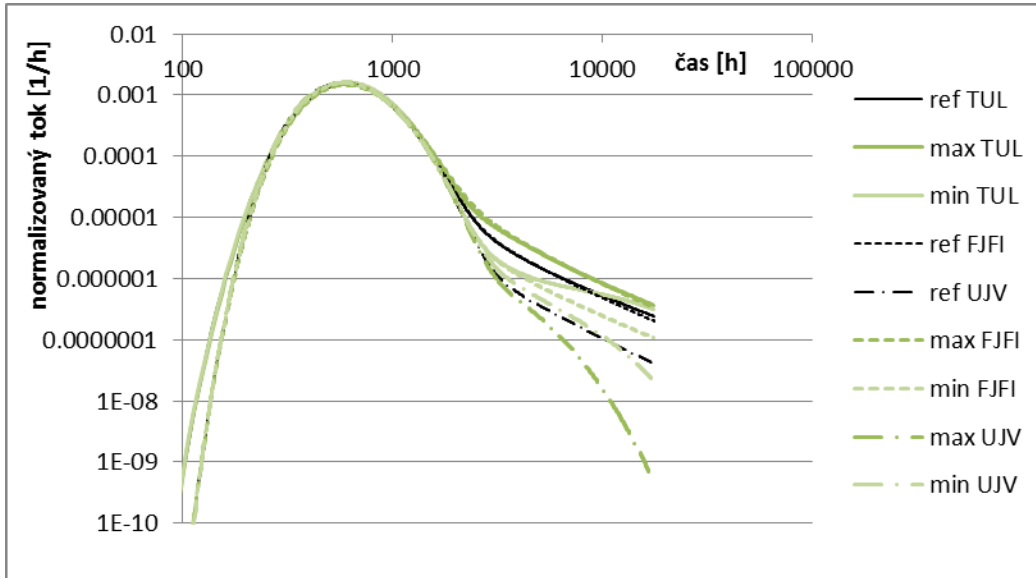
Další citlivosti u nesorbujících radionuklidů jsou zanedbatelné, efekt pórovitosti je na poklesovou část křivky (poloha přímky v log-log osách), která není postižena kritérii (Obr. 22). Viditelný efekt na grafech i hodnotách je v případě difúze a sorpce u sorbujících radionuklidů, které se projevují hlavně na velikost píku, poměrně konzistentně mezi různými případy. I v případě odlišných křivek mezi Flow123d a GoldSim u baria lze trend ovlivnění parametrem považovat za podobný (Obr. 23).



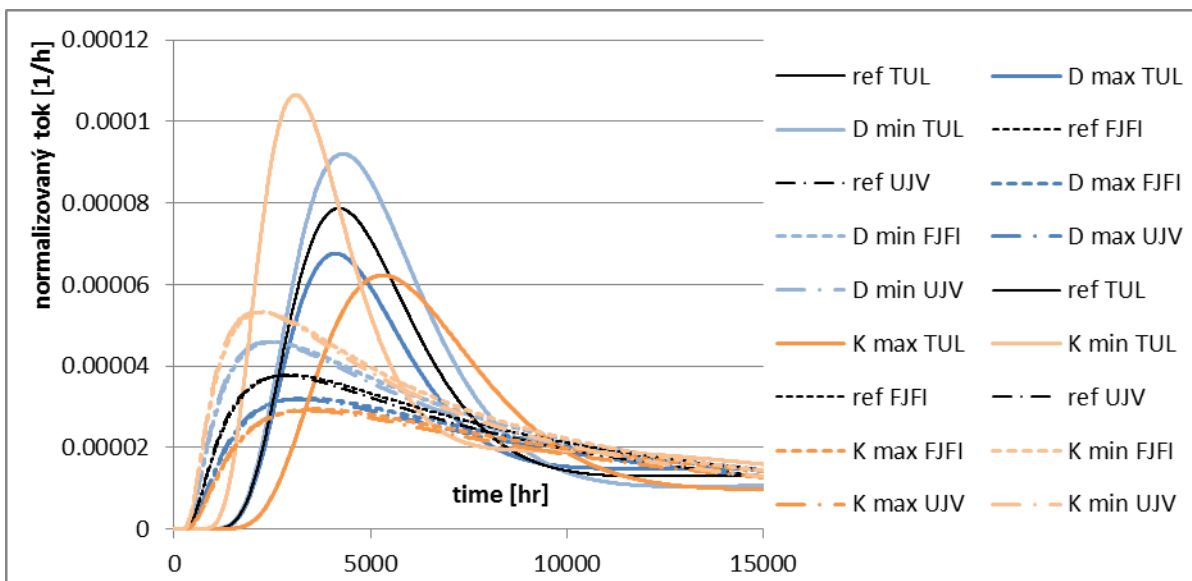
Obr. 20 Citlivost průnikových křivek HTO ve WPDE-2 na disperzi (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.



Obr. 21 Citlivost průnikových křivek Na-22 ve WPDE-2 na disperzi (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.



Obr. 22 Citlivost průnikových křivek HTO ve WPDE-2 na pórovitost (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.



Obr. 23 Citlivost průnikových křivek Ba-133 ve WPDE-2 na efektivní difúzní koeficient (D) a koeficient sorpce (K) (min/max dle Tab. 7) s porovnáním tří výpočtů.

Tab. 8 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro HTO.

	HTO	Poloha maxima [h]			Šířka píku [h]			Hodnota maxima [1/h]		
		parametr	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d
Hodnota kritéria	referenční	581	602	594	560	576	568	1.59E-3	1.59E-3	1.53E-3
	disperze max	518	554	543	596	624	606	1.46E-3	1.45E-3	1.41E-3
	disperze min	657	674	657	467	496	486	1.96E-3	1.94E-3	1.82E-3
	De VGN max	582	610	594	562	576	571	1.58E-3	1.56E-3	1.51E-3
	De VGN min	581	602	593	559	576	565	1.60E-3	1.60E-3	1.55E-3
	De PGR max	581	602	594	560	576	568	1.59E-3	1.59E-3	1.53E-3
	De PGR min	581	602	594	560	576	568	1.59E-3	1.59E-3	1.53E-3
	poro VGN max	581	610	597	560	584	580	1.60E-3	1.54E-3	1.46E-3
	poro VGN min	581	602	591	562	576	560	1.59E-3	1.63E-3	1.58E-3
	poro PGR max	581	602	594	560	576	568	1.59E-3	1.59E-3	1.53E-3
	poro PGR min	581	602	593	560	576	567	1.59E-3	1.59E-3	1.53E-3
	Citlivost na parametr	disperze max	-2.3E-1	-1.7E-1	-1.8E-1	1.4E-1	1.8E-1	1.4E-1	-1.8E-1	-1.9E-1
disperze min		-2.8E-1	-2.5E-1	-2.2E-1	3.5E-1	2.9E-1	3.0E-1	-4.8E-1	-4.7E-1	-4.0E-1
De VGN max		3.2E-3	2.5E-2	0.0E+0	6.7E-3	0.0E+0	1.0E-2	-1.0E-2	-2.6E-2	-2.7E-2
De VGN min		0.0E+0	0.0E+0	4.9E-3	5.2E-3	0.0E+0	1.5E-2	-1.0E-2	-3.2E-2	-3.3E-2
De PGR max		0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	-3.0E-3	-3.8E-3	-4.5E-3
De PGR min		0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	-3.0E-3	-4.0E-3	-4.7E-3
poro VGN max		0.0E+0	5.0E-3	1.9E-3	0.0E+0	5.2E-3	7.9E-3	8.4E-4	-1.1E-2	-1.7E-2
poro VGN min		0.0E+0	0.0E+0	5.8E-3	-4.1E-3	0.0E+0	1.6E-2	5.3E-3	-3.0E-2	-3.9E-2
poro PGR max		0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	4.3E-4	-2.2E-3	-3.0E-3
poro PGR min		0.0E+0	0.0E+0	3.5E-3	0.0E+0	0.0E+0	3.7E-3	8.0E-4	-3.0E-3	-4.0E-3

Tab. 9 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Na-22.

	Na-22	Poloha maxima [h]			Šířka píku [h]			Hodnota maxima [1/h]		
		GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell
Hodnota kritéria	parametr									
	referenční	802	842	815	1368	1368	1371	3.58E-4	4.33E-4	3.52E-4
	disperze max	678	746	715	1294	1352	1332	3.71E-4	4.28E-4	3.58E-4
	disperze min	958	970	945	1338	1288	1343	3.65E-4	4.64E-4	3.58E-4
	De VGN max	832	866	845	1488	1520	1492	3.21E-4	3.95E-4	3.15E-4
	De VGN min	771	818	784	1244	1240	1247	4.06E-4	4.78E-4	4.00E-4
	De PGR max	804	850	817	1376	1376	1380	3.55E-4	4.30E-4	3.49E-4
	De PGR min	800	842	812	1358	1352	1361	3.61E-4	4.35E-4	3.55E-4
	poro VGN max	802	842	816	1368	1360	1375	3.58E-4	4.35E-4	3.51E-4
	poro VGN min	802	842	814	1368	1368	1370	3.58E-4	4.32E-4	3.52E-4
	poro PGR max	802	842	815	1368	1368	1371	3.58E-4	4.33E-4	3.52E-4
	poro PGR min	802	842	815	1368	1368	1371	3.58E-4	4.33E-4	3.52E-4
	Kd VGN max	836	882	849	1503	1488	1507	3.17E-4	3.84E-4	3.11E-4
	Kd VGN min	767	802	779	1228	1240	1231	4.13E-4	4.96E-4	4.06E-4
	Kd PGR max	806	850	819	1382	1376	1386	3.53E-4	4.27E-4	3.47E-4
Kd PGR min	798	842	810	1349	1344	1353	3.64E-4	4.39E-4	3.58E-4	
Citlivost na parametr	disperze max	-3.3E-1	-2.4E-1	-2.6E-1	-1.1E-1	-2.5E-2	-6.0E-2	7.6E-2	-2.1E-2	4.0E-2
	disperze min	-4.1E-1	-3.2E-1	-3.4E-1	4.6E-2	1.2E-1	4.3E-2	-4.0E-2	-1.5E-1	-3.5E-2
	De VGN max	1.8E-1	1.4E-1	1.8E-1	4.3E-1	5.4E-1	4.3E-1	-5.0E-1	-4.3E-1	-5.1E-1
	De VGN min	1.9E-1	1.4E-1	1.9E-1	4.4E-1	4.6E-1	4.4E-1	-6.5E-1	-5.2E-1	-6.7E-1
	De PGR max	1.2E-2	4.7E-2	1.2E-2	2.9E-2	2.9E-2	3.2E-2	-3.7E-2	-2.9E-2	-4.1E-2
	De PGR min	1.2E-2	0.0E+0	1.8E-2	3.6E-2	5.7E-2	3.6E-2	-4.2E-2	-3.3E-2	-4.7E-2
	poro VGN max	0.0E+0	0.0E+0	4.6E-4	0.0E+0	-2.2E-3	1.1E-3	3.7E-5	2.3E-3	-1.3E-3
	poro VGN min	0.0E+0	0.0E+0	1.4E-3	0.0E+0	0.0E+0	8.4E-4	3.1E-4	1.2E-3	-1.3E-3
	poro PGR max	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	9.3E-6	1.2E-4	-9.9E-5
	poro PGR min	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	1.9E-5	7.8E-5	-9.9E-5
	Kd VGN max	1.8E-1	2.1E-1	1.8E-1	4.3E-1	3.8E-1	4.3E-1	-5.0E-1	-4.9E-1	-5.0E-1
	Kd VGN min	1.9E-1	2.1E-1	1.9E-1	4.4E-1	4.1E-1	4.4E-1	-6.7E-1	-6.4E-1	-6.7E-1
	Kd PGR max	1.3E-2	2.5E-2	1.3E-2	2.7E-2	1.6E-2	2.9E-2	-3.6E-2	-3.4E-2	-3.9E-2
	Kd PGR min	1.3E-2	0.0E+0	1.6E-2	3.7E-2	4.7E-2	3.5E-2	-4.6E-2	-4.2E-2	-4.9E-2

Tab. 10 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro CI-36.

	CI-36	Poloha maxima [h]			Šířka píku [h]			Hodnota maxima [1/h]		
		parametr	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d
Hodnota kritéria	referenční	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	disperze max	517	554	541	593	616	597	1.47E-3	1.46E-3	1.48E-3
	disperze min	656	666	653	464	480	475	1.98E-3	2.17E-3	1.92E-3
	De VGN max	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	De VGN min	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	De PGR max	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	De PGR min	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	poro VGN max	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	poro VGN min	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	poro PGR max	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
	poro PGR min	580	602	590	557	568	557	1.61E-3	1.66E-3	1.61E-3
Citlivost na parametr	disperze max	-1.8E-1	-2.6E-1	-1.7E-1	-2.3E-1	-1.7E-1	-1.8E-1	1.4E-1	1.8E-1	1.5E-1
	disperze min	-4.9E-1	-6.4E-1	-4.1E-1	-2.8E-1	-2.2E-1	-2.3E-1	3.5E-1	3.3E-1	3.1E-1
	De VGN max	-6.0E-4	-6.7E-4	-6.8E-4	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	De VGN min	-6.0E-4	-8.6E-4	-9.0E-4	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	De PGR max	-2.4E-3	-5.2E-3	-6.0E-3	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	De PGR min	-2.4E-3	-5.7E-3	-6.6E-3	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	poro VGN max	4.9E-5	-2.9E-4	-4.5E-4	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	poro VGN min	1.5E-4	-5.3E-4	-7.3E-4	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	poro PGR max	4.0E-4	-3.1E-3	-5.0E-3	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	poro PGR min	4.8E-4	-3.5E-3	-5.4E-3	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0

Tab. 11 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Sr-85.

	Sr-85	Poloha maxima [h]			Šířka píku [h]			Hodnota maxima [1/h]		
		GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell
Hodnota kritéria	parametr									
	referenční	741	778	752	1121	1120	1124	4.68E-4	5.43E-4	4.62E-4
	disperze max	634	690	666	1087	1128	1113	4.75E-4	5.32E-4	4.63E-4
	disperze min	873	882	862	1057	1040	1068	4.91E-4	5.88E-4	4.82E-4
	De VGN max	765	794	775	1213	1208	1215	4.20E-4	4.98E-4	4.14E-4
	De VGN min	716	746	727	1026	1040	1028	5.32E-4	6.01E-4	5.26E-4
	De PGR max	743	778	754	1128	1128	1132	4.64E-4	5.39E-4	4.57E-4
	De PGR min	739	770	750	1113	1112	1114	4.73E-4	5.47E-4	4.67E-4
	poro VGN max	741	770	753	1121	1112	1126	4.68E-4	5.46E-4	4.60E-4
	poro VGN min	741	778	752	1121	1120	1123	4.68E-4	5.43E-4	4.62E-4
	poro PGR max	741	778	752	1121	1120	1124	4.68E-4	5.43E-4	4.62E-4
	poro PGR min	741	778	752	1121	1120	1124	4.68E-4	5.43E-4	4.62E-4
	Kd VGN max	767	802	779	1224	1224	1227	4.15E-4	4.80E-4	4.09E-4
	Kd VGN min	713	738	723	1014	1016	1017	5.41E-4	6.24E-4	5.34E-4
	Kd PGR max	743	778	754	1129	1128	1133	4.63E-4	5.37E-4	4.57E-4
Kd PGR min	739	770	749	1111	1112	1113	4.74E-4	5.49E-4	4.68E-4	
Citlivost na parametr	disperze max	3.3E-2	-4.2E-2	4.4E-3	-3.0E-1	-2.4E-1	-2.4E-1	-6.4E-2	1.5E-2	-2.1E-2
	disperze min	-1.1E-1	-1.7E-1	-9.0E-2	-3.8E-1	-2.8E-1	-3.1E-1	1.2E-1	1.5E-1	1.1E-1
	De VGN max	-4.2E-1	-3.4E-1	-4.3E-1	1.3E-1	8.5E-2	1.3E-1	3.4E-1	3.2E-1	3.3E-1
	De VGN min	-5.6E-1	-4.4E-1	-5.7E-1	1.4E-1	1.7E-1	1.4E-1	3.5E-1	2.9E-1	3.5E-1
	De PGR max	-3.8E-2	-3.0E-2	-4.3E-2	1.1E-2	0.0E+0	1.1E-2	2.6E-2	2.9E-2	2.9E-2
	De PGR min	-4.5E-2	-3.4E-2	-5.0E-2	1.1E-2	4.2E-2	1.1E-2	2.9E-2	2.9E-2	3.7E-2
	poro VGN max	4.4E-5	2.2E-3	-1.3E-3	0.0E+0	-3.9E-3	5.0E-4	0.0E+0	-2.7E-3	6.7E-4
	poro VGN min	3.7E-4	-5.2E-4	-1.3E-3	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	1.0E-3
	poro PGR max	8.3E-6	1.4E-4	-7.7E-5	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	poro PGR min	1.7E-5	1.4E-4	-7.7E-5	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	Kd VGN max	-4.2E-1	-4.3E-1	-4.2E-1	1.3E-1	1.1E-1	1.3E-1	3.4E-1	3.4E-1	3.4E-1
	Kd VGN min	-5.7E-1	-5.5E-1	-5.7E-1	1.4E-1	1.9E-1	1.4E-1	3.5E-1	3.4E-1	3.5E-1
	Kd PGR max	-3.8E-2	-4.0E-2	-4.2E-2	9.9E-3	0.0E+0	9.8E-3	2.6E-2	2.6E-2	2.9E-2
	Kd PGR min	-4.5E-2	-4.4E-2	-5.0E-2	9.9E-3	3.8E-2	1.5E-2	3.3E-2	2.6E-2	3.6E-2

Tab. 12 Výsledky vyhodnocení citlivosti kritérií průnikové křivky na parametry modelu pro Ba-133.

	Ba-133	Poloha maxima [h]			Šířka píku [h]			Hodnota maxima [1/h]		
		parametr	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d	GS-cell	GS-pipe	F123d
Hodnota kritéria	referenční	2858	4202	2926	10179	4016	10366	3.84E-5	7.87E-5	3.78E-5
	disperze max	2123	3690	2309	8421	4104	9011	4.36E-5	7.81E-5	4.15E-5
	disperze min	3924	4938	3826	11893	3592	11806	3.46E-5	8.67E-5	3.46E-5
	De VGN max	3262	4106	3334	11925	3960	12120	3.27E-5	6.76E-5	3.22E-5
	De VGN min	2448	4306	2508	8412	4112	8588	4.67E-5	9.21E-5	4.59E-5
	De PGR max	2894	4194	2966	10333	4008	10543	3.78E-5	7.77E-5	3.71E-5
	De PGR min	2818	4210	2881	10003	4032	10168	3.91E-5	7.97E-5	3.86E-5
	poro VGN max	2858	4130	2926	10179	3944	10366	3.84E-5	7.99E-5	3.78E-5
	poro VGN min	2858	4226	2926	10179	4032	10365	3.84E-5	7.84E-5	3.78E-5
	poro PGR max	2858	4202	2926	10179	4008	10366	3.84E-5	7.87E-5	3.78E-5
	poro PGR min	2859	4202	2926	10179	4016	10366	3.84E-5	7.87E-5	3.78E-5
	Kd VGN max	3515	5306	3596	13020	5064	13233	2.99E-5	6.23E-5	2.94E-5
	Kd VGN min	2185	3098	2241	7279	2992	7443	5.43E-5	1.07E-4	5.32E-5
	Kd PGR max	2900	4290	2974	10365	4120	10582	3.77E-5	7.68E-5	3.70E-5
	Kd PGR min	2808	4114	2870	9959	3912	10118	3.93E-5	8.06E-5	3.88E-5
Citlivost na parametr	disperze max	2.9E-1	-1.5E-2	2.1E-1	-5.4E-1	-2.6E-1	-4.5E-1	-3.6E-1	4.6E-2	-2.8E-1
	disperze min	2.1E-1	-2.1E-1	1.8E-1	-7.9E-1	-3.7E-1	-6.5E-1	-3.6E-1	2.2E-1	-2.9E-1
	De VGN max	-7.3E-1	-6.9E-1	-7.3E-1	6.9E-1	-1.1E-1	6.8E-1	8.4E-1	-6.8E-2	8.3E-1
	De VGN min	-1.1E+0	-8.3E-1	-1.0E+0	7.0E-1	-1.2E-1	7.0E-1	8.5E-1	-1.2E-1	8.4E-1
	De PGR max	-7.7E-2	-6.2E-2	-8.7E-2	6.2E-2	-9.3E-3	6.7E-2	7.4E-2	-9.8E-3	8.4E-2
	De PGR min	-8.9E-2	-6.3E-2	-1.0E-1	6.9E-2	-9.3E-3	7.5E-2	8.5E-2	-2.0E-2	9.4E-2
	poro VGN max	1.3E-6	5.8E-3	-4.3E-5	0.0E+0	-6.4E-3	0.0E+0	0.0E+0	-6.7E-3	0.0E+0
	poro VGN min	8.1E-6	4.3E-3	-4.3E-5	0.0E+0	-6.6E-3	0.0E+0	0.0E+0	-4.6E-3	1.1E-4
	poro PGR max	-4.8E-7	4.6E-4	-2.1E-6	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	-3.7E-3	0.0E+0
	poro PGR min	1.6E-6	5.1E-4	-2.2E-6	-7.3E-4	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0	0.0E+0
	Kd VGN max	-6.7E-1	-6.3E-1	-6.6E-1	6.9E-1	7.9E-1	6.9E-1	8.4E-1	7.8E-1	8.3E-1
	Kd VGN min	-1.2E+0	-1.1E+0	-1.2E+0	7.1E-1	7.9E-1	7.0E-1	8.5E-1	7.6E-1	8.5E-1
	Kd PGR max	-7.6E-2	-9.6E-2	-8.5E-2	5.9E-2	8.4E-2	6.6E-2	7.3E-2	1.0E-1	8.3E-2
	Kd PGR min	-9.1E-2	-9.8E-2	-1.0E-1	7.0E-2	8.4E-2	7.7E-2	8.6E-2	1.0E-1	9.6E-2

3.5 Kalibrace modelu na měření

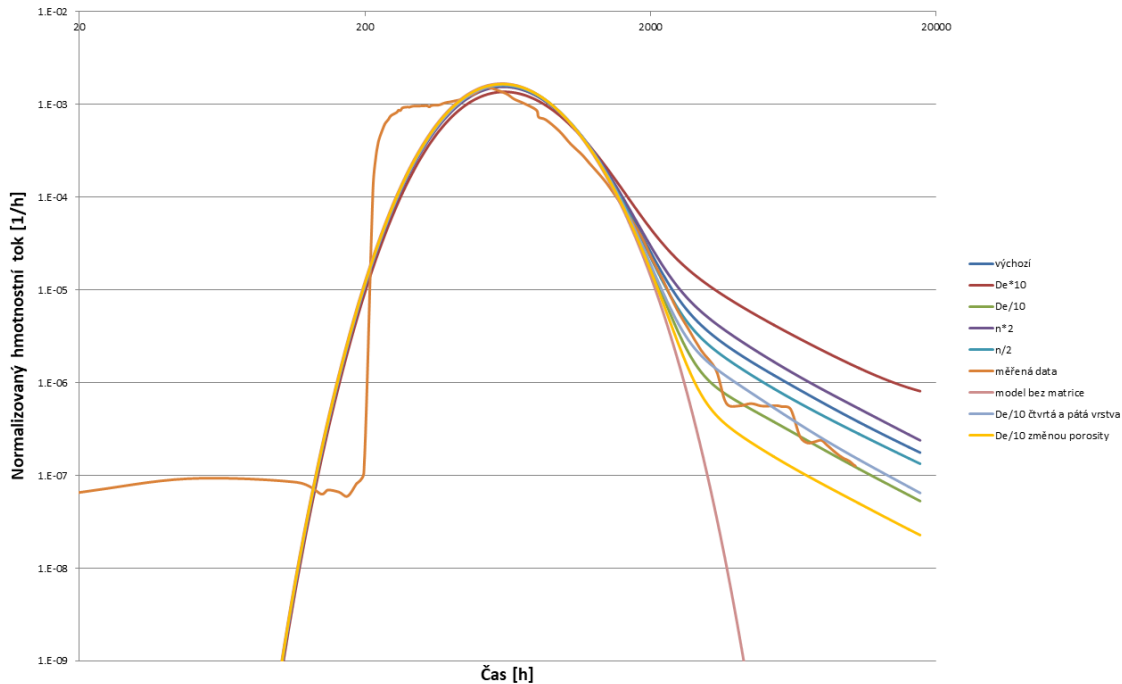
Kalibrace byla provedena v pozdější fázi řešení projektu, po uveřejnění měřených dat vedením GWFTS a to pouze pomocí modelu ve Flow123d. Pro všechny níže popsané simulace byla vytvořena nová výpočetní síť, již jen dvojrozměrná. K tomuto bylo přistoupeno s cílem dosáhnout akceptovatelné časové náročnosti, nikoli však na úkor vypovídající schopnosti modelu. Třetí rozměr je emulován parametrem `cross_section` (parametr Flow123d, představuje mocnost respektive průřez u elementů dimenze menší než 3), jehož hodnota se plynule mění dle předpisu:

$$cs = 6,2832 \cdot y,$$

což zajišťuje axisymetrii úlohy (směr osy y je kolmý na puklinu). Ekvivalentnost výstupů byla ověřena testovacími výpočty.

Na Obr. 24 je analyzována shoda prediktivního modelu experimentu WPDE-2 (stopovače HTO) s měřenými daty (obě osy grafu jsou v logaritmické škále). Z obrázku jsou patrné následující fakta charakterizující míru shody prediktivního modelu a měřených dat:

- Nenulová hodnota měřených dat od počátku doby simulace – je dána posloupností provedených experimentů, bude diskutováno samostatně dále v textu.
- Náběžná hrana – měřená data stoupají strmě k maximu daleko dříve, než maxima dosahují výsledky simulací. To je podivné, jelikož průtok umělou puklinou byl během celého experimentu monitorován a kolem hodnoty uvedené v zadávací dokumentaci (a použité při simulaci) fluktuuje jen zcela zanedbatelně. Míra vlivu přítomnosti horninové matrice v modelu na průběh náběžné hrany byla otestována simulací samostatně pukliny. Výsledek tohoto modelu je na Obr. 24 znázorněn růžovou křivkou. Je patrné, že zahrnutí horninové matrice má pro konzervativní stopovač vliv jen na průběh sestupné hrany, na hranu náběžnou ani na hodnotu a polohu maxima nemá pozorovatelný vliv. Molekulární difúze i hydrodynamická disperze, které jsou v puklině simulovány, nemají vliv na pozici maxima, jen na jeho hodnotu a na míru rozmytí („šířku“ průnikové křivky). Z toho plyne závěr, že náběžnou hranu měřených dat nelze při stávající konfiguraci modelu experimentu replikovat. Lze se jen domnívat, čím je rychlý nástup koncentrace na výstupu zapříčiněn. Možným vysvětlením je nepřesnost (nesoustřednost) uložení ucpávky vrtu, což mohlo způsobit vznik preferenční cesty. Vliv mohly mít také nepravidelnosti na stěnách vrtu, případně ne zcela horizontální směřování vrtu, ve kterém je experiment instalován (vrt upadá přibližně o deset stupňů).
- Hodnota maxima – zde slepá predikce vykazuje s měřenými daty dobrou shodu.
- Sestupná hrana – parametry horninové matrice mají pro konzervativní stopovač vliv zejména na rychlost poklesu sestupné hrany. Právě na její průběh se proto zaměřují snahy o modelovou reprodukci měřených dat (viz dále).



Obr. 24 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – HTO

Jelikož je HTO konzervativním stopovačem, je jediným simulovaným procesem v horninové matici molekulární difúze. Pro fitování měřených dat tak byly k dispozici jen dva parametry: efektivní difuzivita D_e a porozita n . Ty jsou navíc ve vnitřní logice simulačního software Flow123d provázány vztahem:

$$D_e = D_w \cdot n \cdot \tau = D_w \cdot n^{4/3},$$

kde D_w je koeficient difúze ve volné vodě a τ je geometrický faktor (tortuozita), který je Flow123d bez možnosti uživatelského zásahu počítán jako třetí odmocnina z porozity. Vstupy pro model jsou D_w a n , D_e je na jejich základě dopočítáno interně.

Byla provedena citlivostní analýza, kdy byl měněn jednak parametr porozity na dvojnásobek a na polovinu své výchozí hodnoty a jednak parametr efektivní difuzivity na desetinu a desetinásobek své výchozí hodnoty (změnou D_w). Při změně porozity byla nepřímě měněna také efektivní difuzivita (viz Tab. 13). Výsledky této citlivostní analýzy jsou znázorněny na Obr. 24. Zároveň bylo ověřeno, zda v modelu existuje ekvifinalita v tom smyslu, že nezáleží na tom, měníme-li v zájmu změny efektivní difuzivity (vždy na stejnou výslednou hodnotu) porozitu nebo difuzivitu ve volné vodě. Z Obr. 24 je patrné, že průběh simulované průnikové křivky je výrazně jiný, docílíme-li jedné desetiny výchozí hodnoty efektivní difuzivity změnou D_w (křivka označená „De/10“) nebo změnou n (křivka označená „De/10 změnou porozity“). Změna porozity totiž neznamená jen implikovanou změnu D_e , ale také změnu objemu pórů dostupných pro transport stopovače.

Tab. 13 Vliv změny porozity na efektivní difuzivitu

Změna porozity (multiplikátor)	Implikovaná změna D_e (multiplikátor)
2	2,5198
1/2	$1/(2,5198) = 0,39685$

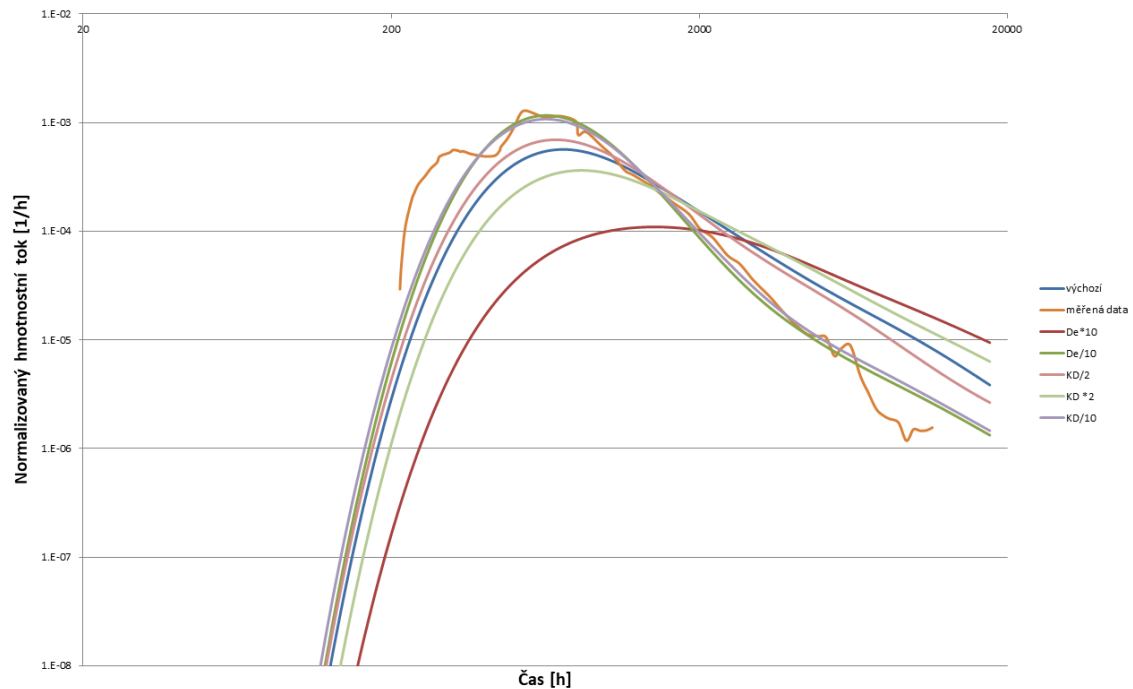
Z Obr. 24 je patrné, že dobré shody s měřenými daty bylo dosaženo tehdy, když byla efektivní difuzivita snížena na jednu desetinu své výchozí hodnoty v celém objemu horninové matrice. Takovou změnu hodnoty, která byla změřena (jakkoli s inherentní nejistotou), by bylo obtížné ospravedlnit. Mohli bychom snadno říci, že reálná hodnota geometrického faktoru (tortuozity) je jiná než její hrubý odhad vypočtený jako třetí odmocnina porozity, což do jisté míry může být pravda. Místo toho byla provedena doplňující řada výpočtů, kdy efektivní difuzivita byla měněna jen v části horninové matrice. Za tímto účelem byla výpočetní síť reprezentující horninovou matici rozdělena do soustředných vrstev, jejichž mocnosti jsou uvedeny v Tab. 14. Celková mocnost simulované části horninové matrice je 250 mm. Ze série realizovaných výpočtů vyplynulo, že pro velmi dobrou shodu s měřenými daty (viz Obr. 24) stačí zadat sníženou hodnotu efektivní difuzivity jen ve čtvrté a páté modelové vrstvě. Změna efektivní difuzivity na desetinu výchozí hodnoty byla realizována změnou porozity, což znamená, že od čtvrté vrstvy dál je porozita přibližně pět a půl krát nižší než v prvních třech vrstvách. Vyšší (změřená) hodnota difuzivity je tak použita jen v prvních dvou a čtvrt milimetrech horninové matrice, což dobře koresponduje s teorií, že kolem vrtu, v němž je experiment umístěn, při jeho konstrukci vznikla zóna narušení (BDZ – Borehole Disturbed Zone), v níž je vyšší porozita a úměrně tomu také vyšší efektivní difuzivita. Hodnota efektivní difuzivity uvedená v zadávací dokumentaci byla měřena na vzorcích z vrtného jádra, tedy ne na neporušené hornině. Realitě by v tomto případě pravděpodobně lépe vyhovoval nikoli skokový, ale plynulý pokles porozity s hloubkou, ale na myšlenku v pozadí by se tím nic nezměnilo.

Tab. 14 WPDE-2 – rozdělení horninové matrice do vrstev

Vrstva	Mocnost [mm]
1	0,5
2	0,7
3	1,05
4	30
5	217,75

Na Obr. 25 je analyzována shoda s měřenými daty pro vybraný ze sorbujících stopovačů. Simulace všech sorbujících stopovačů vychází ve vztahu k měřeným datům obdobně, omezíme se tak v zájmu stručnosti na jediný, Sr-85. Z obrázku je patrné, že oproti konzervativnímu stopovači jsou průnikové křivky daleko citlivější na parametr efektivní difúze. Ten neovlivňuje jen rychlost poklesu sestupné části křivky, ale také hodnotu maxima a čas jeho dosažení. I pro sorbující stopovač bylo snížením efektivní difuzivity na jednu desetinu dosaženo dobré shody s měřenými daty. To je důležité, jelikož by bylo obtížné ospravedlnitelné používat různé hodnoty porozity pro různé stopovače ve stejné horninové matici (přirozeně není-li na místě předpokládat aniontovou exkluzi). Zajímavé je, že velmi dobré shody bylo dosaženo také při simulaci s desetinnou hodnotou distribučního koeficientu lineární sorpce oproti hodnotě výchozí. To by izolovaně bylo možné zdůvodnit tím, že K_D je měřeno na nadrcené části vrtného jádra, v neporušené hornině tak lze předpokládat hodnoty nižší. Zdůvodnění pomocí poklesu porozity (a implikované změny D_e) je nicméně věrohodnější, protože je konzistentní pro všechny stopovače. Stejně jako u HTO, i u Sr-85 má měřená

průniková křivka výrazně rychlejší nástup než křivky simulované. Možná zdůvodnění jsou stejná jako ta, která byla uvedena u analýzy výsledků HTO.

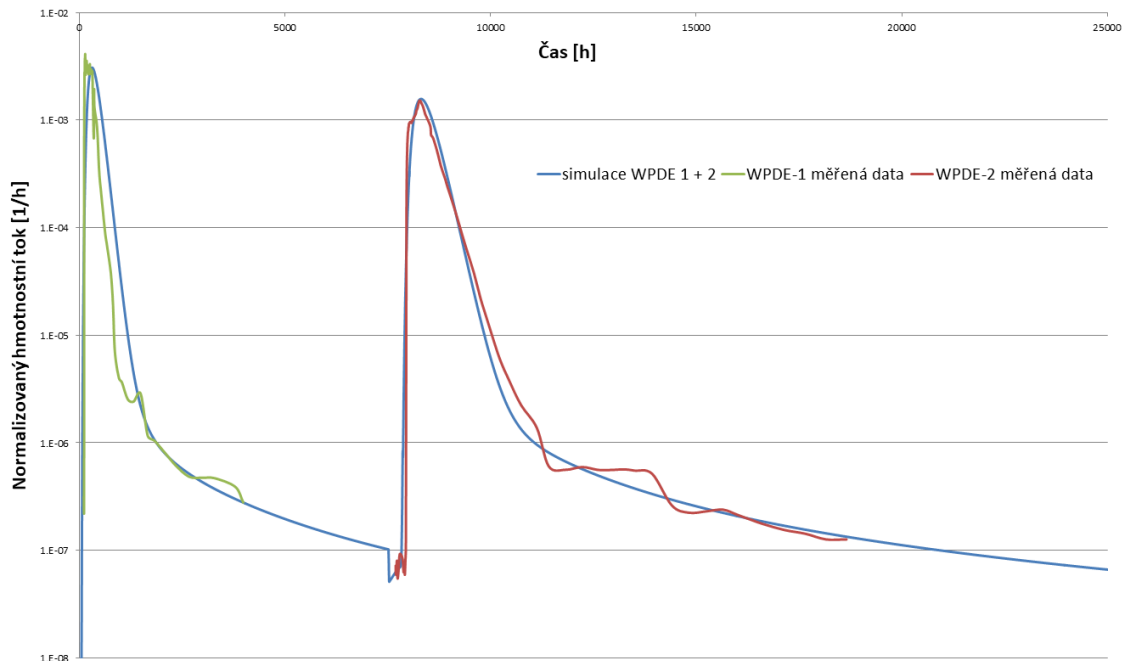


Obr. 25 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – Sr-85

3.6 Doplnující analýzy

3.6.1 Ovlivnění pořadím experimentů

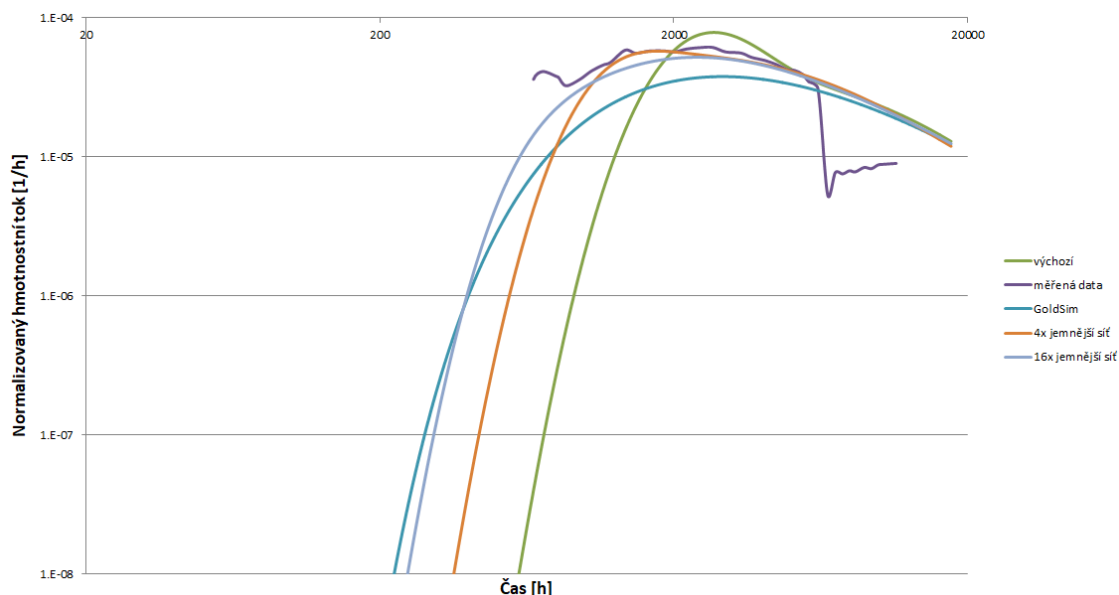
Oba dva experimenty (WPDE-1 i WPDE-2) byly provedeny sekvenčně po sobě ve stejné experimentální sekci. Jelikož všechny tři stopovače z prvního experimentu byly použity i v tom druhém (spolu s dalšími dvěma), je třeba ověřit, jaký vliv na výsledek simulace má jejich zbytkové množství v horninové matici. Na Obr. 26 je znázorněn výsledek tohoto ověření pro HTO spolu s měřenými daty z obou experimentů. Simulace obou experimentů byly provedeny s desetinou hodnotou efektivní difuzivity oproti výchozí hodnotě (v celém objemu horninové matrice). Simulační periody uvedené v zadávací dokumentaci nemohly být dodrženy, jelikož druhý experiment byl reálně zahájen ještě během simulační periody toho prvního. Časová osa tohoto sekvenčního modelu tak vychází z reálné datace s jedinou drobnou nejistotou spočívající v tom, že se nepodařilo dohledat, kdy přesně byl změněn průtok umělou puklinou (ve výsledcích simulace je čas této změny velmi dobře patrný skokovým poklesem výstupu na poloviční hodnotu). Chyba odhadu by však měla být maximálně v řádu jednotek dnů. Z Obr. 26 je patrné, že byla zachována velmi dobrá shoda modelu s měřenými daty a že se navíc podařilo vysvětlit nenulovou hodnotu náběžné hrany na počátku experimentu WPDE-2. Zbytkové množství HTO přítomné v horninové matici před zahájením druhého z experimentů však celkově na výsledky jeho modelu nemělo pozorovatelný vliv.



Obr. 26 WPDE – sekvenční simulace obou experimentů – výsledky – HTO

3.6.2 Vliv diskretizace Flow123d

Výše v textu byl zmíněn silný vliv diskretizace horninové matrice v blízkém okolí pukliny (tedy na rozhraní dvou prostředí s výrazně odlišnými vlastnostmi). Na Obr. 27 je znázorněn tento vliv pro nejsilněji sorbující stopovač, Ba-133. Zelená křivka reprezentuje výsledek simulace provedené na základní variantě výpočetní sítě zahrnující dvě tenké vrstvy elementů horninové matrice obklopující puklinu, která byla použita shodně pro všechny stopovače (porovnání v 3.3). Dále jsou na obrázku reprezentovány výsledky simulací na upravených sítích, kdy jejich postupné zjemňování má za následek posouvání náběžné hrany směrem doleva a zároveň pokles maximální hodnoty hmotnostního toku. Pro srovnání je na obrázku znázorněn také výsledek modelu GoldSim (sekce 3.2.1), jemuž se výsledky modelu Flow123d s postupně se zjemňující výpočetní sítí blíží. Pro simulace slaběji sorbujících stopovačů byla výchozí diskretizace dostačující, zjemnění sítě na ně již nemělo žádný pozorovatelný vliv. Nejlepší shody s měřenými daty bylo dosaženo s 4x jemnější sítí oproti výchozí variantě, tomu ale není na místě přikládat příliš velkou váhu, jelikož prezentované výstupy pocházejí z modelu s parametry použitými pro slepou predikci, tedy bez úpravy efektivní difuzivity, která u zbývajících stopovačů zajistila zlepšení shody modelu s měřenými daty. Z tohoto srovnání lze vyvodit závěr, že na rozhraní puklina/hornina je třeba věnovat zvýšenou pozornost diskretizaci, obzvláště při simulaci transportu silněji sorbujících radionuklidů. Nelze ovšem předem říci, jaká míra diskretizace je dostatečná. Rozhodně není na místě paušálně používat přemršťeně jemnou síť, protože rostoucí počet elementů si při simulaci vybírá svou daň v podobě dlouhých výpočetních časů a paměťové náročnosti.

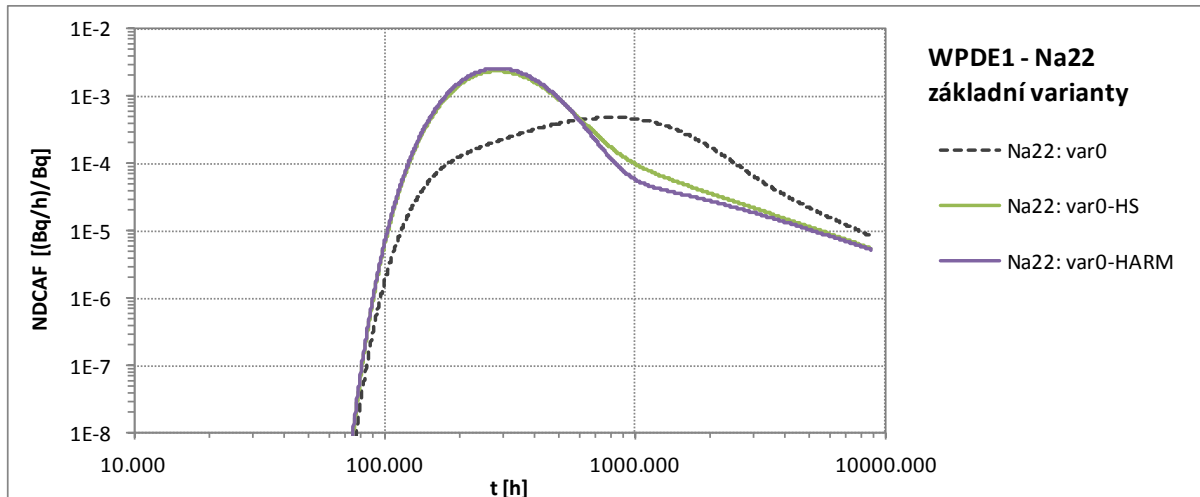


Obr. 27 WPDE-2 – Ba-133 – vliv diskretizace, srovnání s měřenými daty a výsledky modelu GoldSim

3.6.3 Vliv diskretizace a variant v MT3D

Přehled vybraných alternativních modelových variant je uveden v Tab. 15 (redukováno vzhledem ke kompletní sadě v průběžné zprávě Hokr et al, 2016). Zkoumány byly tyto aspekty řešení:

- v programu MT3DMS jsou transportní parametry zadávány výhradně do výpočetních buněk – do numerického řešení transportní rovnice nicméně vstupují některé parametry (např. disperzivita) definované na rozhraní výpočetních buněk,
- ve standardní verzi MT3DMS (simulované varianty bez označení „HARM“) jsou parametry na rozhraní modelových buněk počítány jako vážený průměr hodnot, kde váhou je vzdálenost středů buněk od společného rozhraní,
- základní modelové varianty označené „var0-HARM“ byly simulovány v upravené verzi programu MT3DMS, ve které jsou parametry vstupující do disperzního členu transportní rovnice, tj. disperzivita a difúzní koeficient na rozhraní modelových buněk, počítány jako harmonický průměr hodnot v buňkách,



Obr. 28 Vliv diskretizace modelu na průběh průnikové křivky Na-22 (var0)

Tab. 15 Přehled prezentovaných modifikovaných modelových variant

Stopovač	Označení a popis modelových variant	
HTO	var0	základní varianta s disperzivitou 20 cm a konstantní puklinou, šířka první buňky v hornině 1 mm
	var0_DISP0	varianta s nulovou disperzivitou a konstantní puklinou, šířka první buňky v hornině 1 mm
	var0_DISP100	varianta se sníženou disperzivitou 10 cm a konstantní puklinou, šířka první buňky v hornině 1 mm
	var0_DISP280	varianta se zvýšenou disperzivitou 28 cm a konstantní puklinou, šířka první buňky v hornině 1 mm
	varAPER_DISP0	varianta s nulovou disperzivitou a puklinou s variabilním rozevřením, šířka první buňky v hornině 1 mm, harmonický průměr disperzních parametrů na hranici mezi buňkami
Na-22	var0	základní varianta s disperzivitou 20 cm a konstantní puklinou, šířka první buňky v hornině 1 mm
	var0-HS	základní varianta s disperzivitou 20 cm a konstantní puklinou, zahuštěná výpočetní síť s šířkou první buňky v hornině 0,1 mm
	var0-HARM	základní varianta s disperzivitou 20 cm a konstantní puklinou, šířka první buňky v hornině 1 mm, harmonický průměr disperzních parametrů na hranici mezi buňkami

Komentář k vlivu diskretizace:

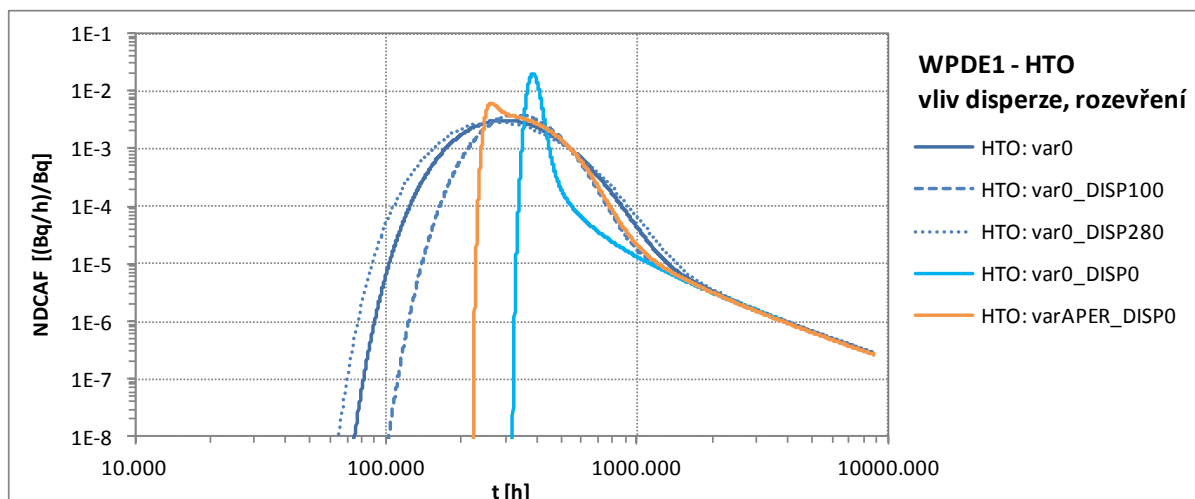
- v případě sorbujících se stopovačů, jako např. Na-22, může být výsledek simulace v programu MT3DMS zatížen významnou chybou, způsobenou nevhodnou diskretizací výpočetní sítě, viz Obr. 28. Ve variantě „var0“ je patrné nadhodnocení transportních procesů probíhajících v horninové matici a významné zpomalení průniku stopovače experimentální sestavou. Toto je způsobeno vzájemnou kombinací několika

jevů – řádové rozdíly hodnot parametrů mezi sousedními buňkami puklinou-horninou, stejná velikost buněk na rozhraní puklina-hornina a numerické řešení transportní rovnice použité v programu MT3DMS. K potlačení této chyby a zpřesnění simulace je potřeba zjemnit (zahustit) výpočetní síť v místech, kde jsou zadány řádové rozdíly hodnot transportních parametrů, tj. na rozhraní puklina-hornina. Zpřesněný výsledek prezentuje varianta „var0-HS“, ve které je 10krát zmenšena velikost výpočetních buněk (na 0,1 mm) na rozhraní horninové matrice s umělou puklinou,

- velmi podobný výsledek jako ve variantě „var0-HS“, ale na modelu s původní nezahuštěnou sítí, byl dosažen v upravené verzi programu MT3DMS s harmonickým průměrováním parametrů – viz průniková křivka varianty „var0-HARM“,

Komentář k vlivu disperze (Obr. 29):

- modifikované varianty jsou prezentovány pro stopovač HTO a pro hodnoty disperzivity 0, 100 a 280 mm ("DISP0", „DISP100“ a „DISP280")
- dle předpokladů způsobuje nižší disperze „zúžení“ průnikové křivky v úvodní „advekčně-disperzní“ části a zvýšení maximální hodnoty (a naopak vyšší disperze vede k rozšíření křivky a nižšímu „píku“),
- dle předpokladů změna disperze neovlivní sklon průnikové křivky v „difúzně-sorpční“ části,
- ve variantě „varAPER_DISP0“ (Obr. 29) byl pro stopovač HTO simulován vliv disperze v puklině pomocí variabilního rozevření pukliny. Disperzivita byla zadána nulovou hodnotou, nerovnoměrné rozevření bylo zjednodušeně simulováno tak, že umělá puklina není zcela symetrická s konstantním rozevřením 1,25 mm – polovina průřezové plochy pukliny byla ponechána s rozevřením 1,25 mm, čtvrtina s menším rozevřením 0,25 mm a čtvrtina s větším rozevřením 2,25 mm. Z výsledků je zřejmý velmi podobný průběh průnikové křivky jako ve variantě se zadanou disperzí „DISP_100“ (variabilita rozevření nahrazuje zadanou disperzi), ale se strmějším nástupem způsobeným preferenčním prouděním v profilu s nižším rozevřením.



Obr. 29 Vliv disperze a rozevření pukliny na průběh průnikové křivky HTO

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

3.7 Závěry z modelování WPDE

Ze simulací experimentů WPDE lze pro modely transportních procesů v rozpukaném porézním prostředí zobecněně vyvodit některé dílčí závěry. Uvažujeme-li, že advektivní tok dominuje v puklinách a že horninová matrice má funkci hlavně retardační mechanismy molekulární difúze a sorpce, pak lze říci že:

- Pro konzervativní stopovače – parametr molekulární difúze nemá výrazný vliv na míru retardace. Je-li zdroj stopovače v modelu reprezentován počátečním rozložením koncentrace nebo časově ohraničeným zdrojovým prvkem, pak je vliv hodnoty efektivní difuzivity významný pro charakter sestupné hrany průnikové křivky.
- Pro sorbující stopovače – parametry molekulární difúze i lineární sorpce mají silný vliv na míru retardace (vyšší efektivní difuzivita i vyšší distribuční koeficient lineární sorpce shodně znamenají vyšší míru retardace). Jsou-li oba tyto parametry použity při kalibraci modelu, je patrná ekvifinalita modelů. Každá případná změna hodnoty parametru musí být fyzikálně odůvodnitelná.
- Hodnoty parametrů – jsou-li při simulaci použity hodnoty tabelované v dostupné literatuře, je třeba vnímat, jakým způsobem byly měřeny. Hodnoty získané z rozdrčených vzorků jader pravděpodobně nebudou stejné jako v neporušené hornině.
- EDZ, BDZ – jsou-li transportní procesy simulovány v prostředí, kde se nacházejí vrty či rozrážky, je pravděpodobné, že v jejich bezprostřední blízkosti bude hornina narušena a že v této zóně narušení bude mít horninová matrice jiné parametry (jak difúzní tak i sorpční).
- Diskretizace – na rozhraní puklina/hornina je třeba věnovat zvýšenou pozornost diskretizaci, obzvláště při simulaci transportu silněji sorbujících stopovačů. Může mít výrazný vliv na přesnost výstupů modelu.

4 Řešení úlohy LTDE-SD (Task 9B)

Tato kapitola popisuje řešení úlohy 9B vycházející z dat experimentu LTDE-SD. Zadání se odkazuje do dokumentace GWFTS, je zaměřeno především na inverzní modelování a podobně jako v případě 9A je jako úvodní krok provedeno porovnání mezi řešiteli na pevně daných datech. Na rozdíl od úloh 9A a 9C byla měřená data publikována SKB před začátkem projektu a tedy řešitelům známá.

Řešení prezentované v této kapitole bylo zpracováno předtím, než byla ze strany koordinátorů úlohy v rámci GWFTS revidována interpretace některých měření (rozlišení relevantních dat a „pozadí“). Revize měřených dat byla distribuována v době, kdy v časovém plánu projektu byla účast řešitelů na dalších podúlohách 9C a 9D. Nové výpočty inverzních úloh nebyly na základě kontrolních dnů požadovány. Aktualizace dat ale byla reflektována v samostatném řešení pomocí konceptu mikroDFN v rámci další kapitoly 5, které trvalo po celou dobu řešení projektu.

4.1 Shrnutí zadání a dat

Experiment LDTE-SD byl realizován v podzemní laboratoři Aspö ve Švédsku (Nilsson et al., 2010, Lofgren a Nilsson 2015). Předmětem je pozorování difúzního transportu radionuklidů v horninové (žulové) matici in-situ v hloubce odpovídající koncepci HÚ. Význačným aspektem je velký počet použitých radioaktivních stopovačů s rozdílnými migračními a geochemickými vlastnostmi a spojení podmínek v matici uvnitř kompaktního bloku a potenciálně porušené nebo alterované matici v sousedství pukliny – v experimentu byly dva objemy koktejlu stopovačů ve dvou takových místech (okolí vrtu a okolí pukliny) vzájemně spojené a promíchávané (Obr. 30). Dostupná data z experimentu jsou časový průběh koncentrace (aktivity) stopovačů v rezervoáru a profily koncentrací (aktivit) stopovačů v hornině získané z různě umístěných vrtných jader od místa kontaktu s roztokem směrem do horniny. Jádra z okolí pukliny („stubb“ sekce) jsou označena A, jádra z okolí vrtu („slim hole“) jsou označena D (Obr. 31).

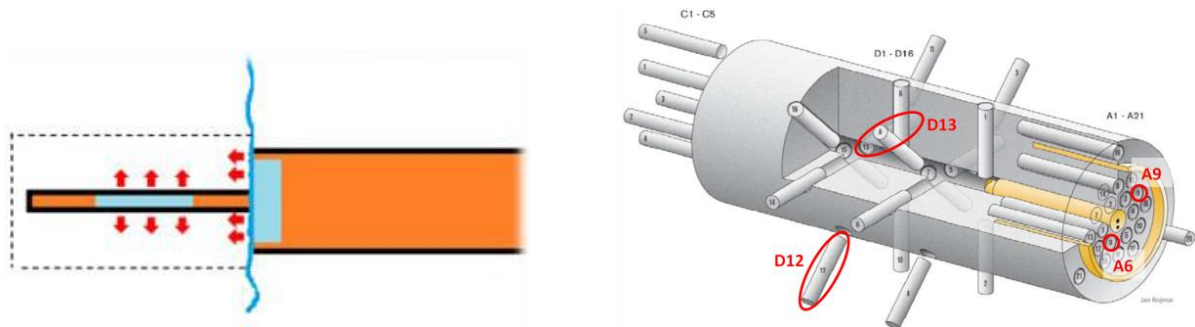
Zadání 9B je definováno zprávou (Lofgren a Nilsson 2015), kde jsou uvedeny i podstatné aspekty experimentu pro modelování. Ty zahrnují konkrétní kroky postupu injektáže roztoku do objemů v kontaktu s horninou, použité materiály, postup odvrtání po ukončení experimentu a plán dělení vzorků (orientačně viz Obr. 32). V metodice ale zůstala řada nejasností ohledně možnosti umělého ovlivnění transportu a detekovaných koncentrací experimentální procedurou (což bylo v průběhu řešení na schůzkách GWFTS diskutováno). Cílem modelování je vysvětlení pozorovaných koncentrací skrze porozumění probíhajícím jevům, s motivací k návrhu alternativních koncepčních modelů nebo k uvážení neplánovaných vlivů v experimentu.

Zadání je rozděleno na dvě fáze, úzce propojené:

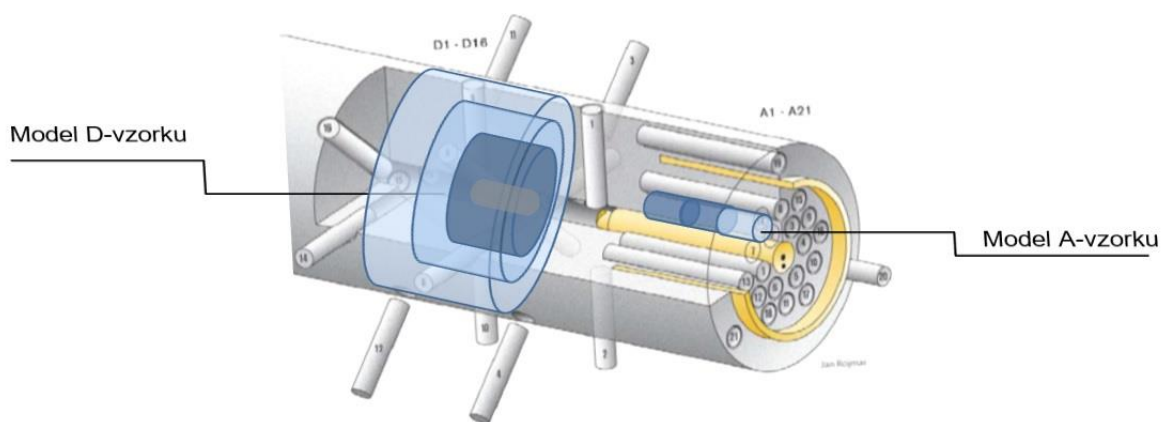
- 9B-1: Modelování transportu 6 radionuklidů ve dvou vybraných A profilech a dvou D profilech, s cílem fitování rozložení koncentrace v hornině po délce profilu po rozebrání, s použitím časového průběhu koncentrace v rezervoáru (tanku) jako vstupu. Popsáno v (Lofgren a Nilsson, 2015).
- 9B-2: Modelování experimentu jako celku, tj. fitování jak profilů, tak časového průběhu, s použitím pouze celkové počáteční aktivity jako vstupu. Zadání také rozšiřuje počet uvažovaných radionuklidů. Popsáno v (Lofgren a Nilsson, 2015a).

- 9B-3 je zaměřeno na predikci rozložení koncentrace v jádrech dosud neanalyzovaných. Popsáno v (Lofgren a Nilsson, 2016).


Druhý případ tedy navíc obsahuje i otázku bilance stopovačů, která se v některých případech ukázala jako problematická (např. detekce jen části injektovaného množství).

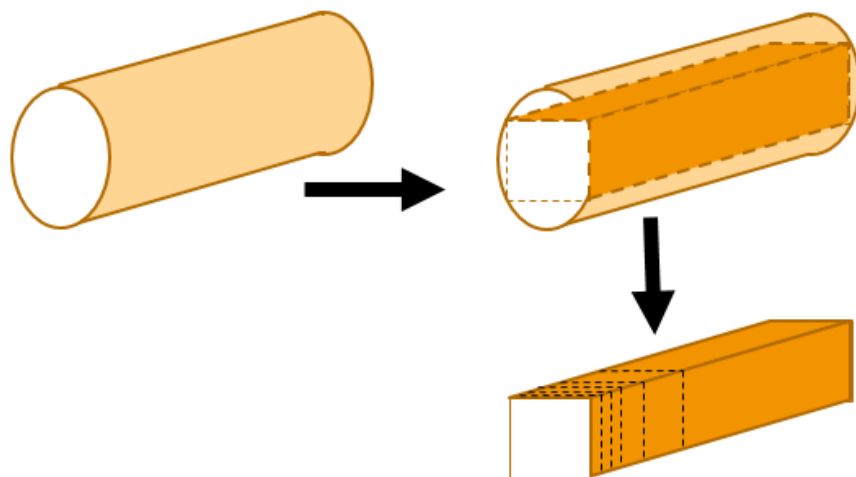


Obr. 30 Konfigurace experimentu LTDE-SD: Vlevo vrty protínající puklinu, umístění objemu s roztokem radionuklidů, směr migrace a poloha obvrtaného bloku. Vpravo konfigurace vzorkování jádra z obvrtání a volba profilů pro modely Task 9B-1 (níže). Žlutě je vyznačena izolace oddělující oblast jádra o průměru 177 mm, která byla v kontaktu s radionuklidy, zatímco vnější měla být teoreticky nezasažena. (Lofgren et al, 2015)



Obr. 31 Konfigurace experimentu LTDE-SD se znázorněním geometrického významu modelů pro dva typy vzorků (axisymetrický pro D a jednorozměrný pro A)

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020



Obr. 32 Schéma přípravy analyzovaných vzorků z vrtného jádra (převzato z Lofgren et al, 2015).

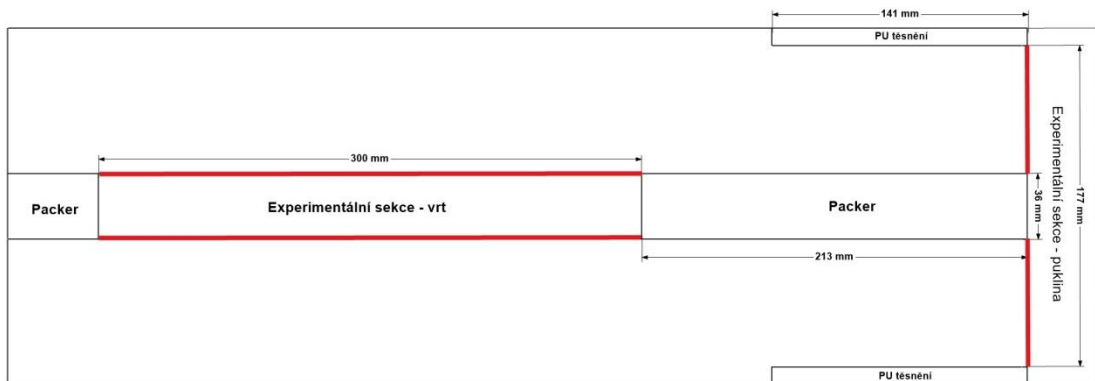
Tab. 16 Parametry použité pro úvodní výpočty porovnání modelů na profilech A a D experimentu LTDE-SD, dle (Nilsson et al. 2010).

	K_d [m ³ /kg]				F_f [1]	Por. [1]
	Na-22	Cl-36	Ni-36	Cs-137		
A-profil (puklina)	1,20E-04	1,00E-08	1,60E-01	4,80E-01	4,80E-04	5,00E-02
D-profil (vrt)	2,90E-04	1,00E-08	1,50E-02	2,20E-02	2,20E-05	2,10E-03

Tab. 17 Výběr klíčových okamžiků experimentu a analýz, jak byly zjištěny z různých zdrojů, a související změny podmínek transportu. Poslední sloupec ukazuje odpovídající možné změny okrajových podmínek modelu (viz část 4.2.1).

		Dní od startu	Dní po ukončení	Údaj v zadání	Výstup výsledků	Okrajová podmínka
Start „koktejl“	27.9.2006					b.c. 1
Konec „koktejl“	12.4.2007	197	0		model bod 1 (ekviv. 196-198d)	
Obvrtání	26.4.2007	211				
Pokrytí epoxy resin	3.8.2007	310			model bod 2	b.c. 2
Oddělení	6.8.2007	313				b.c. 3
Start mikrovrtů	8.8.2007	315				
Konec mikrovrtů	13.8.2007	320	123	120		
Start řezu	1.12.2007	430				konec difúze
Řez	31.12.2007	460	263	240-290 (stř.265)		
Řez	2.1.2008	462	265		model bod 3 (ekviv. 460-470d)	
Konec řezů	31.1.2008	491				

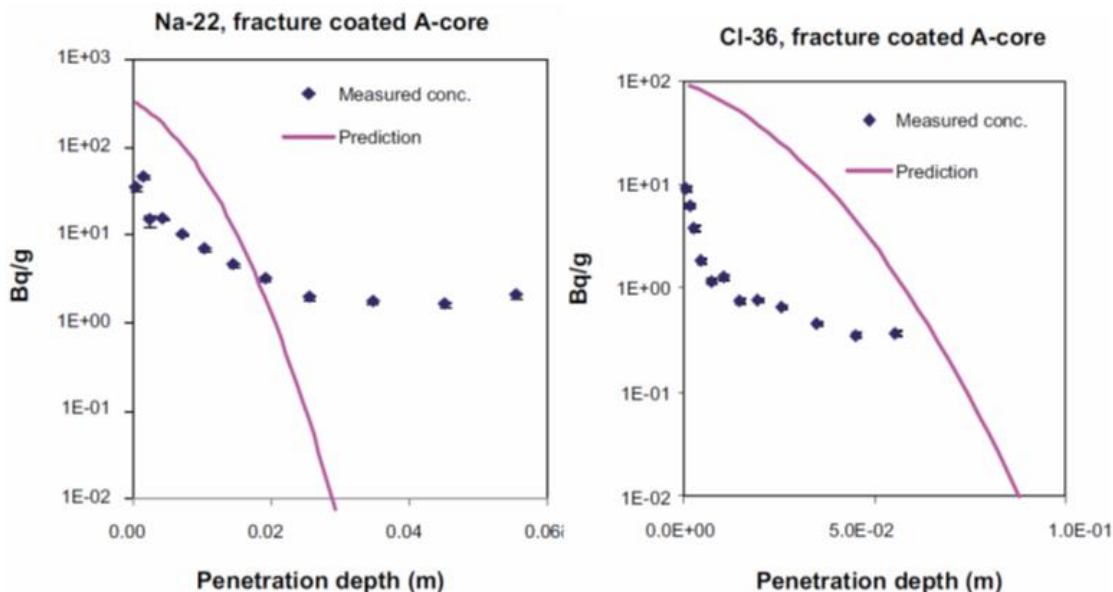
Na Obr. 33 jsou znázorněny rozměry a umístění experimentálních sekcí (jejich kontakt s horninou zvýrazněn červeně) a pakrů. V experimentální sekci „vrt“ byla koaxiálně umístěna ucpávka o průměru 26 mm, objem této experimentální sekce tak činí 146 ml, plocha (povrch pláště válce) jejího kontaktu s puklinou je 0,034 m². Mocnost experimentální sekce „puklina“ je 3,25 mm, její objem tak činí 80 ml a plocha (obsah mezikruží) jejího kontaktu s horninou je 0,0236 m². Experimentální sekce byly vzájemně propojeny, během experimentu v nich probíhala nucená cirkulace. Jejich celkový objem včetně přívodních trubíc a jiných obslužných částí je 1140 ml.



Obr. 33 LTDE-SD – rozměry a umístění experimentálních sekcí

V roztoku, který experimentálními sekcemi po stanovenou dobu cirkuloval, bylo rozpuštěno známé počáteční množství stopovačů. Ty se molekulární difúzí dostávaly do horninové matrice, kde některé z nich navíc sorbovaly. Po ukončení experimentu byla hornina kolem něj obvrtna a vzorky z ní po určité době rozřezány a analyzovány. Tím byly získány profily vývoje aktivity (koncentrace) jednotlivých stopovačů s hloubkou (vzdáleností od kontaktu s roztokem).

Výsledky experimentu jsou zajímavé proto, že změřené koncentrační profily byly jiné, než bylo očekáváno. Ve (Widestrand et al., 2010) je popsán prediktivní model koncentračních profilů a v (Nilsson et al., 2010) je popsán model inverzní. Bez ohledu na zvolené parametry, rozdíl mezi výsledky modelů a naměřenými profily byl značný (Obr. 34). Oba výše zmíněné modely používaly Fickovskou difúzi v homogenním médiu spolu s lineární sorpcí.



Obr. 34 Výsledky in-situ difúzního experimentu LTDE-SD – koncentrační profily pro Na-22 a Cl-36 – měřená data vs. Model. Převzato z (Nilsson et al. 2010, Obrázky 4-1a a 4-2a).

4.2 Porovnání modelů na úvodním příkladu

Koncepce zadání, ve smyslu hledání alternativních koncepčních modelů a kalibrace parametrů vedoucích na optimální shodu modelu s měřením, se nehodí pro konkrétní porovnání softwarů mezi sebou. Pro potřeby SÚRAO v tomto dílčím projektu jsme zadání GWFTS doplnili o „přípravnou“ úlohu s pevně zadanými daty, v jinak identických podmínkách zadání 9B-1. Tím je možné porovnání softwarů při řešení obdobného koncepčního modelu, kontrola správného porozumění fyzikálního významu vstupních parametrů (s ohledem na vstupy softwarů), bez ambice shody výsledku modelu s experimentem.

Výpočet je obdobou prvotního modelování realizačního týmu experimentu LTDE-SD (Nilsson et al. 2010 – kapitola 4), z něhož jsou použita vstupní data a je tak možné porovnání také proti těmto výsledkům.

Model uvažuje difúzi a sorpci v homogenní horninové matici v geometrii buď 1D kolmo na puklinu pro profily A nebo 1D radiálně (osově symetrický model) pro profily D. Délka je zvolena do vzdálenosti přesahující předpokládaný dosah migrace, v rozmezí 100 až 300 mm (volba řešitelů omezená výpočetní náročností). Poloměr vrtu u radiálního modelu je 18 mm. Konkrétní realizace a nastavení v jednotlivých softwarech a použité parametry jsou uvedeny v hlavních rysech, další podrobnosti pak v průběžné zprávě (Hokr et al., 2016) a v souvislosti s řešením inverzního modelu 9B-1, které vychází ze stejného uspořádání (části 4.3 a 4.4).

4.2.1 Vstupní data

Parametry horniny jsou uvedeny v Tab. 16, převzaté ze zprávy (Nilsson et al. 2010). Sorpční koeficienty jsou rozlišené pro radionuklidy, ostatní parametry jsou společné. Původní hodnota u Cl-36 byla o několik řádů vyšší a považujeme ji za chybu. Smysl převzaté hodnoty 10^{-8} chápeme jen jako formální volbu čísla blízkého nule. Difúzní koeficient ve volné vodě je volen jednotně pro všechny radionuklidy $2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, tj. i D_e je pro všechny radionuklidy stejné.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Ukázalo se jako poměrně náročné s řadou nejednoznačností, jak proces rozebírání experimentu po ukončení kontaktu koktejlu stopovačů s horninou ovlivňuje probíhající difúzní transport a smysl výsledných analýz ve vztahu k interpretované difúzi ve fázi in-situ. V Tab. 17 jsou uvedeny časy různého typu manipulace s horninou. Analýza možných vlivů nebyla předmětem tohoto porovnání, ale alespoň bylo jednoduše možné odhadnout, jak moc probíhající difúze po extrakci horniny za ideálních podmínek ovlivní výsledný profil. Proto byly zvoleny okamžiky, které znamenají hlavní změny v teoretické konfiguraci modelu:

- b.c.1: samotný experiment in-situ s kontaktem se stopovačem
- b.c.2: oddělený blok horniny bez kontaktu (izolovaný nebo neizolovaný)
- b.c.3: oddělené jednotlivé mikrovrtvy

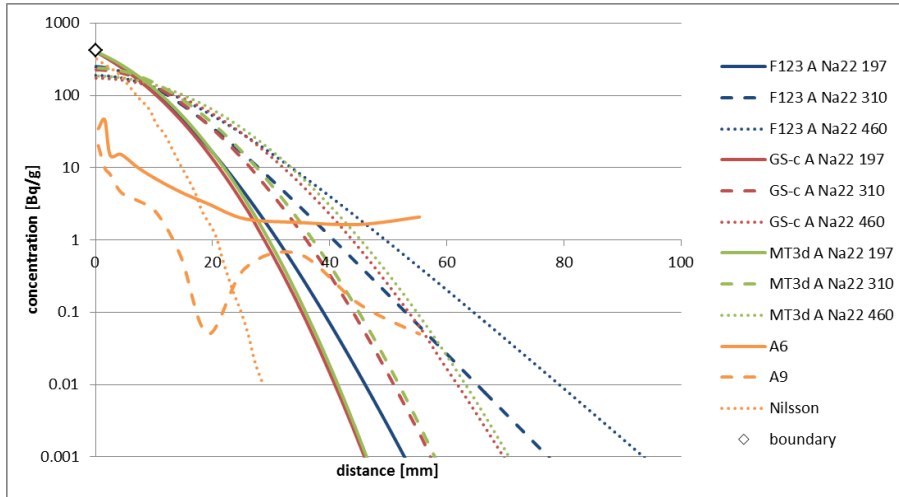
Ve srovnávacím výpočtu byla oddělena jen první fáze a zbývající čas formou okrajové podmínky na ploše kontaktu se stopovačem (neuvažujeme další změny geometrie). Výstupy byly provedeny ve třech bodech, první znamenající faktické porovnání s výpočty Nilsson et al. (2010) tj. cca 200 dní, další dva po dvou fázích další probíhající difúze, kdy lze předpokládat tendenci k měřeným tvarům profilů.

4.2.2 Výsledky porovnání

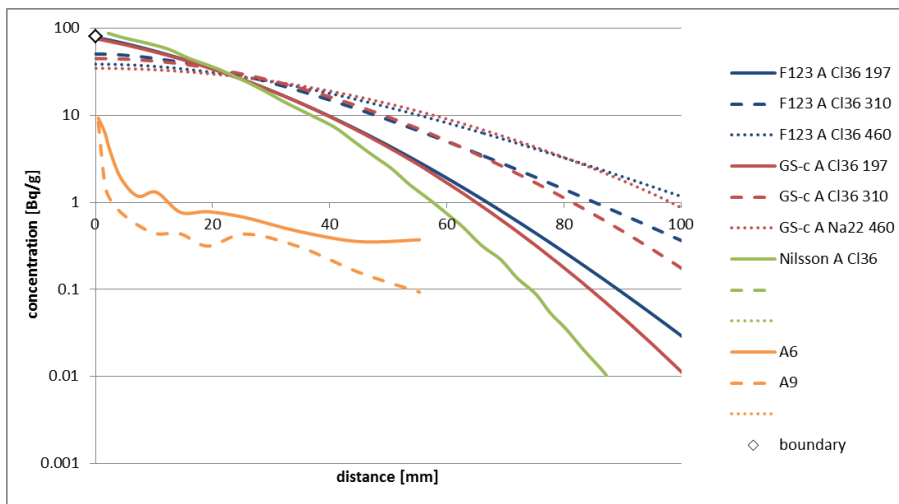
Výpočet byl proveden pro 8 variant – 4 radionuklidy s různými parametry na dvou geometriích odpovídajících skupinám profilů A (kolmo z pukliny) a D (radiálně z vrtu). Z každé varianty jsou tři výstupy pro různé časové okamžiky. Celá sada výpočtů byla provedena softwary Flow123d (TUL) a GoldSim (varianta Cell Net – FJFI), dva vybrané pak také MT3DMS (PROGEO). Výsledky jsou zobrazeny na pozadí měřených dat profilů použitých pro 9B-1 (orientační porovnání) a porovnány s výsledky Nilsson et al. (2010), odpovídajících simulaci v čase 197 dní (data byla jen graficky odečtena z původních obrázků).

Prezentováno je z celkových 8 jen 5 variant, z důvodu podobnosti mezi profily A a D u sorbujících stopovačů. Čtyři případy profilů A jsou na Obr. 35 až Obr. 38. Zároveň zahrnují obě spočtené varianty MT3DMS, druhá je D profil CI-36 (Obr. 39). Výsledky jsou v přiměřené shodě mezi sebou, i když jsou určité rozdíly ve sklonu profilů. Výsledky Nilsson et al. (2010) mají ve většině případů strmější profil, zde ale nemáme plnou kontrolu nad jednotností zadání modelu. U výsledků řešitelů TUL, FJFI a PROGEO, pokud dochází k rozdílu, tak pro část křivky s nižšími hodnotami. Uvědomíme-li si, že jde o čísla o několik řádů menší než maximum (zadaná okrajová podmínka), může být příčinou jen nepřesnost numerického algoritmu, případně efekt rozdílu okrajové podmínky nulového toku a nulové koncentrace, ev. vzdálenosti okrajové podmínky.

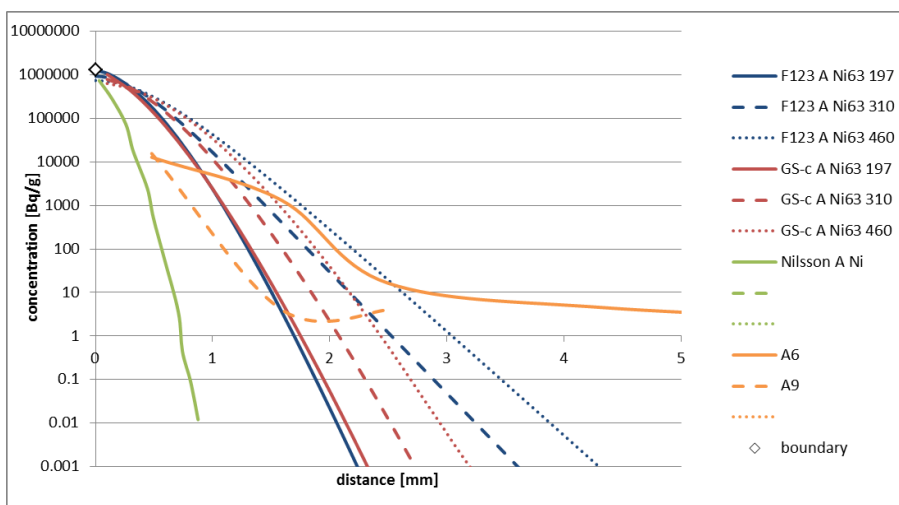
Ve všech případech můžeme dále pozorovat časový vývoj během experimentu (do 197 d) a mezi rozebráním a analýzami (do 460 d). Později probíhající difúze změní profil na tvar blízký k analyzovaným profilům, ale změna zdaleka nestačí na plné vysvětlení rozdílu.



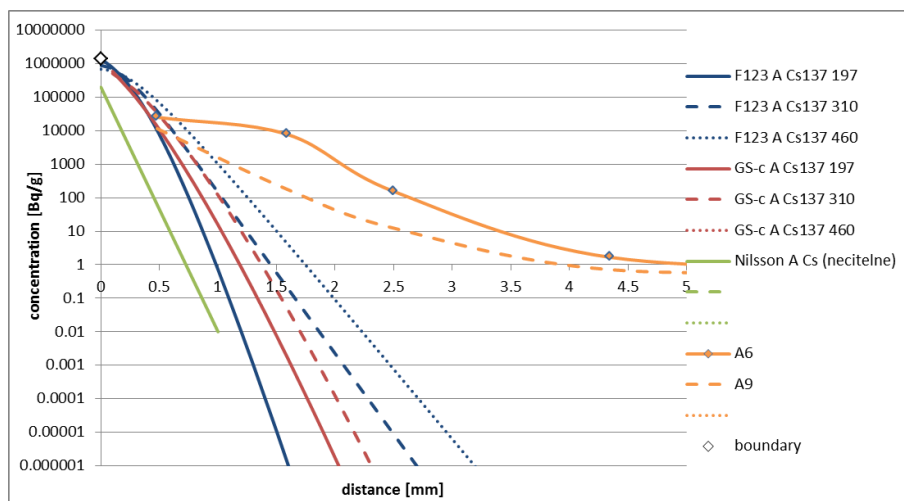
Obr. 35 Porovnání profilů Na-22 spočtených modely Flow123d, GoldSim (Cell net) a MT3DMS pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).



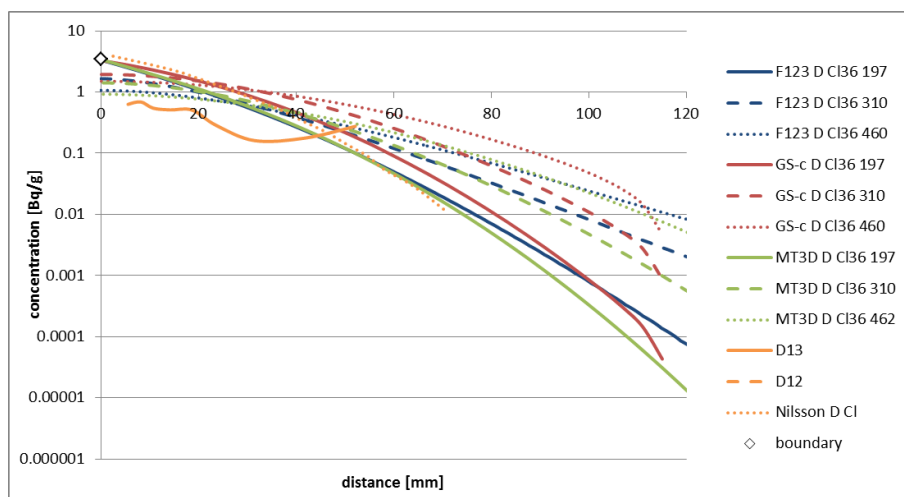
Obr. 36 Porovnání profilů Cl-36 spočtených modely Flow123d a GoldSim (Cell net) pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).



Obr. 37 Porovnání profilů Ni-63 spočtených modely Flow123d a GoldSim (Cell net) pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).



Obr. 38 Porovnání profilů Cs-137 spočtených modely Flow123d a GoldSim (Cell net) pro typ A a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů A6 a A9 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).




Obr. 39 Porovnání profilů Cl-36 spočtených modely Flow123d, GoldSim (Cell net) a MT3DMS pro typ D a časy 197 d, 310 d a 460 d, proti měření profilů D12 a D13 a původnímu výpočtu v (Nilsson et al. 2010).

4.3 Inverzní model Flow123d

Při simulaci experimentu jsme nejprve použili model s difúzí a lineární sorpcí v homogenním médiu. Výstupy modelu (koncentrační profily) se kvalitativně shodovaly s průběhy znázorněnými fialově na Obr. 34, jak bylo možné očekávat a je též prezentováno v předcházející sekci 4.2. Potvrdilo se tak, že chceme-li vylepšit shodu s měřenými daty, je třeba zanést do modelu určitou míru heterogenity.

V souladu s instrukcemi koordinátorů pracovní skupiny GWFTS byly simulace rozděleny do dvou etap:

- Etapa 1 – úkolem bylo replikovat změřené profily koncentrací (aktivit) v horninové matici. Koncentrace stopovačů v roztoku (jejich časový vývoj) převzaty ze zadávací dokumentace (Lofgren a Nilsson, 2015) – měřené hodnoty jako vstup.
- Etapa 2 – převezme parametry z Etapy 1. Model byl rozšířen o simulaci vývoje koncentrací stopovačů v roztoku, byla sledována hmotnostní bilance.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

4.3.1 Etapa 1

Bylo simulováno 6 stopovačů (Na-22, Cl-36, Co-57, Ni-63, Ba-133 a Cs-137). Pro každý z nich byly využity 4 měřené profily, dva odvrtané z experimentální sekce – puklina (jádra A) a dva z experimentální sekce – vrt (jádra D). Pro kalibraci modelu v první etapě jsme použili jen profily z jader A, jelikož jejich simulace bylo možno provádět v 1D, což při mnohačetném spouštění modelu spojeném s kalibrací znamenalo významnou časovou úsporu. Charakter měřených profilů koncentrací je pro jádra A i D shodný, z čehož jsme vyvodili, že parametry modelu získané při kalibraci jader A budou přenositelné i pro jádra D.

Snahu o modelové postižení měřených profilů jsme založili na předpokladu přítomnosti zóny narušení v blízkosti vrtu (BDZ). Horninu jsme tak uvažovali heterogenní ve smyslu parametrů měnících se spojitě s rostoucí hloubkou (vzdáleností od vrtu/roviny pukliny).

Geometrií modelu je linie dlouhá 0,1475 m. Její výpočetní síť je ekvidistanční s krokem 0,1 mm. Modelová doména byla rozdělena do tří subdomén (fyzických skupin), abychom měli více stupňů volnosti při předepisování parametrů modelu. Hranice mezi subdoménami byly definovány v hloubce 3 a 25 mm (respektive 3 a 30 mm pro Cl-36).

Simulovány byly procesy difúze a lineární sorpce.

Simulační perioda byla 434 dní. Horninová matrice byla v kontaktu s roztokem prvních 189 dní. Ve zbytku periody je simulována jen difúze v samotné matrici s nulovým hmotnostním tokem přes hranici (celková hmotnost jednotlivých stopovačů v matrici se již nemění). Tím je postižen jak samotný experiment, tak i čas mezi ukončením experimentu a analýzou vzorků, během něž byla jádra zabalena a uskladněna.

Transport stopovačů (radionuklidů) v horninové matrici je řízen třemi parametry (porozita, efektivní difuzivita a distribuční koeficient lineární sorpce). Jejich hodnoty byly předmětem kalibrace, která byla prováděna manuálně s cílem postihnout trend měřených koncentračních profilů spíše než jejich přesné hodnoty, v kterémžto případě by byla vhodnější kalibrace automatická.

Radioaktivní rozpad nebyl uvažován, jelikož všechny změřené aktivity uvedené v zadávací dokumentaci byly přepočteny na hodnoty, jaké by odpovídaly nerozpadajícímu se stopovači.

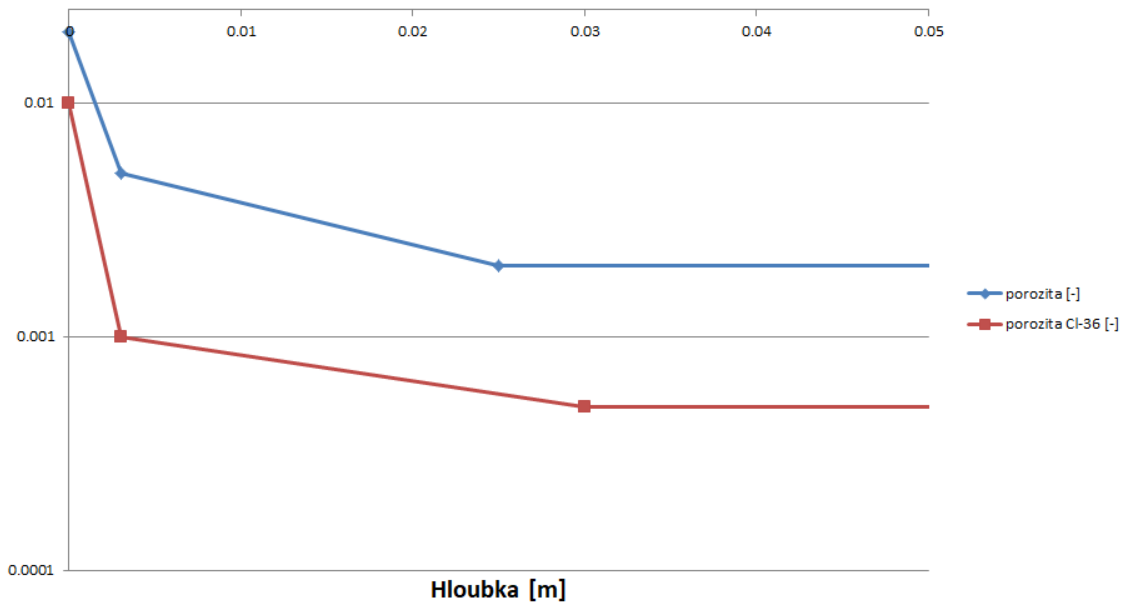
Porozita byla uvažována jako lineárně klesající s rostoucí hloubkou (vzdáleností od stěny vrtu) v prvních dvou fyzických skupinách, v té třetí již zůstává konstantní. Její hodnoty, již jako výsledky kalibrace, jsou uvedeny v Tab. 18 a znázorněny na Obr. 40. Podstatné je, že pro všechny stopovače byla použita stejná hodnota porozity. Výjimkou je Cl-36, u něhož předpokládáme projevující se aniontovou exkluzi.

Distribuční koeficient lineární sorpce také klesá s rostoucí hloubkou: strmě v první fyzické skupině, pomaleji (nebo také vůbec) ve druhé, ve třetí pak zůstává konstantní. Cl-36 je simulován jako konzervativní stopovač. Jeho hodnoty (výsledky procesu kalibrace) jsou znázorněny na Obr. 41 (v závislosti na hloubce, pro první dvě fyzické skupiny).

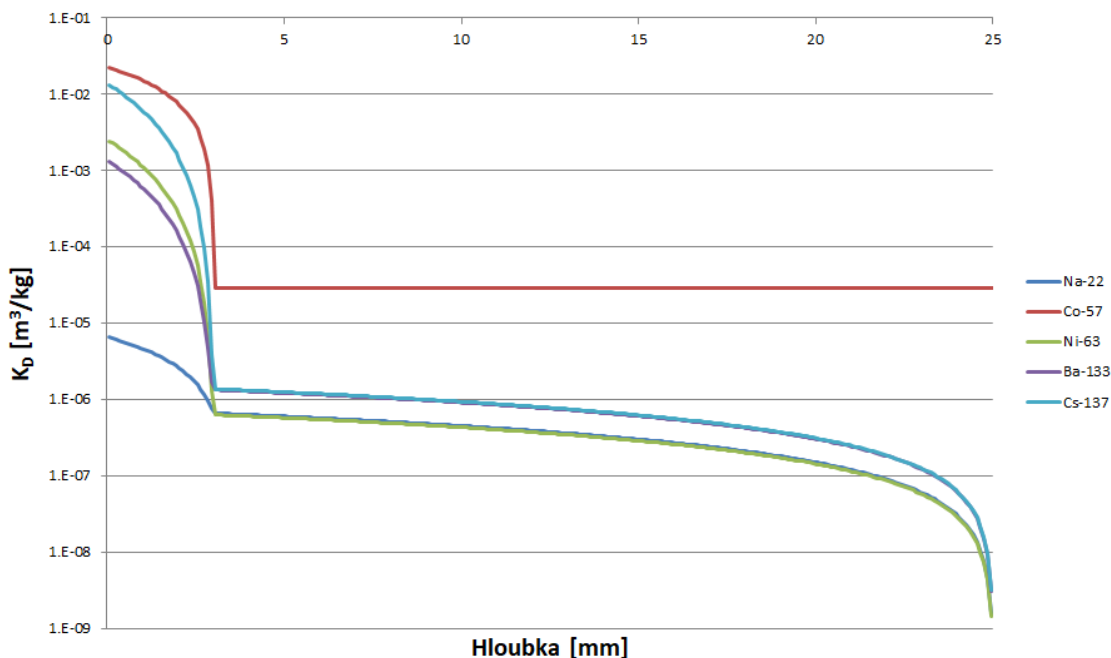
Tab. 18 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)

Hloubka [m]	Porozita [-]	Hloubka [m]	Porozita Cl-36 [-]
-------------	--------------	-------------	--------------------

0	0,02	0	0,01
0,003	0,005	0,003	0,001
0,025	0,002	0,03	0,0005
0,1475	0,002	0,1475	0,0005



Obr. 40 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)



Obr. 41 LTDE-SD – závislost hodnoty distribučního koeficientu lineární sorpce na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)

Posledním parametrem je efektivní difuzivita, která je počítána z difuzivity ve volné vodě, geometrického faktoru a porozity. Hodnota difuzivity ve volné vodě je pro každý ze stopovačů vždy konstantní v celé výpočetní oblasti (Tab. 19, výsledky procesu kalibrace). Jelikož hodnota

efektivní difuzivity je závislá na porozitě, jejíž hodnota se mění s hloubkou, mění se s hloubkou i hodnota efektivní difuzivity.

Tab. 19 LTDE-SD – hodnoty difuzivity ve volné vodě pro jednotlivé stopovače

Stopovač	Difuzivita ve volné vodě [m ² /s]
Na-22	5e-10
Cl-36	1,462e-9
Co-57	2e-9
Ni-63	5e-10
Ba-133	2e-9
Cs-137	2e-9

Na Obr. 42, Obr. 43, Obr. 44, Obr. 45, Obr. 46 a Obr. 47 jsou znázorněny simulované koncentrační profily (výsledky zkalibrovaného modelu) spolu s profily naměřenými na jádrech A6 a A9. Na každém z obrázků jsou vlevo profily v lineární škále, které lépe dokumentují vývoj (strmý pokles) koncentrace v prvních několika milimetrech horninové matrice, a vpravo ve škále logaritmické, kde je lépe vidět shoda modelu s měřenými daty ve větší vzdálenosti od kontaktu horniny s roztokem stopovačů. Měřené koncentrační profily byly tabelovány v jednotkách [Bq/g]. Výstupy modelu, koncentrace v kapalně fázi, tak bylo třeba pro srovnání přepočíst dle vztahu:

$$c = c_l \cdot a \cdot \frac{n + K_D \cdot \rho_s}{\rho_l \cdot n + \rho_s},$$

kde c [Bq/g] je výsledná koncentrace, c_l [kg/m³] je koncentrace v kapalně fázi (výstup Flow123d), a [Bq/g] je specifická aktivita, K_D [kg/m³] je distribuční koeficient lineární sorpce, n [-] je porozita, ρ_s [kg/m³] je hustota horniny a ρ_l [kg/m³] je hustota kapaliny (vody).

Lze říci, že bylo dosaženo relativně dobré shody s měřenými daty. Lepší shody by bylo lze docílit další kalibrací nebo rozdělením výpočetní domény na více než tři fyzické skupiny, což by zvýšilo počet stupňů volnosti modelu (kalibrovatelných parametrů). Jelikož ale přesnost, s jakou byly profily změřeny, je diskutabilní (to je patrné například na oscilacích v měřených datech), nedávalo by valný smysl snažit se docílit dokonalejší shody. Podstatnou věcí je vystižení trendu.

Otevřenou otázkou zůstává realističnost použitých parametrů, které byly získány procesem manuální kalibrace. Pokles porozity a distribučního koeficientu lineární sorpce v prvních vrstvách simulační domény je vysvětlitelný přítomností BDZ – v blízkosti kontaktu s roztokem stopovačů může být hornina rozrušena pracemi provázejícími přípravu experimentu. To mohlo způsobit zvýšení porozity a v souvislosti s tím také nárůst sorpčního koeficientu způsobený vyšším dostupným sorpčním povrchem.

Je třeba zmínit, že, jak plyne z principu ekvifinality, nalezená kombinace parametrů pravděpodobně není jediná, která poskytne dobrou shodu mezi modelem a měřenými daty. Je například možné, že pokles porozity by měl být strmější, přičemž pokles parametru sorpce má být naopak mírnější.

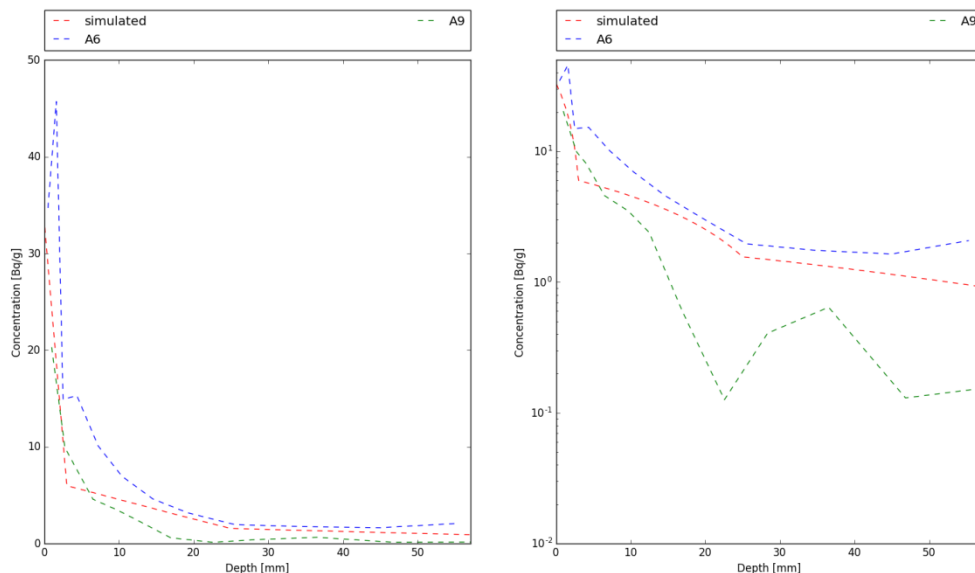
S cílem ověřit, nejsou-li v modelu použité parametry nesmyslné, byla pro každý stopovač spočtena zdánlivá difuzivita (včetně jejího vývoje v závislosti na hloubce) dle vztahu:

$$D_a = D_w \cdot \frac{\tau}{R} = D_w \cdot \frac{\tau}{1 + \frac{\rho_s \cdot K_D}{n}}$$

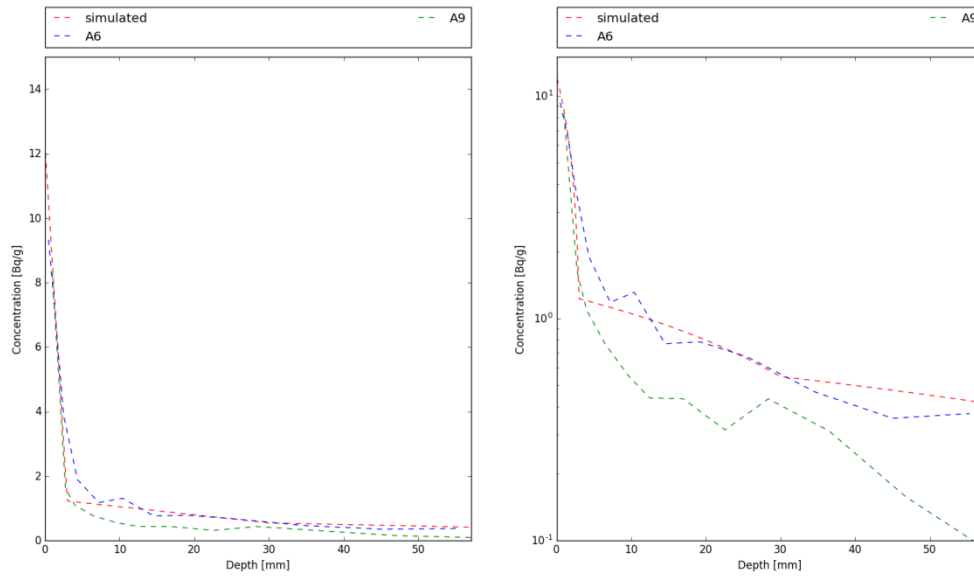
kde $R[-]$ je retardace. Pro žádný ze stopovačů v libovolné hloubce nesmí být zdánlivá difuzivita vyšší než difuzivita ve volné vodě. Potvrzení splnění tohoto kritéria je uvedeno v Tab. 20. To přirozeně nedokazuje, že použité parametry jsou správné, jen to, že nejsou v rozporu s fyzikálními.

Tab. 20 LTDE-SD – srovnání maximální hodnoty zdánlivé difuzivity s difuzivitou ve volné vodě

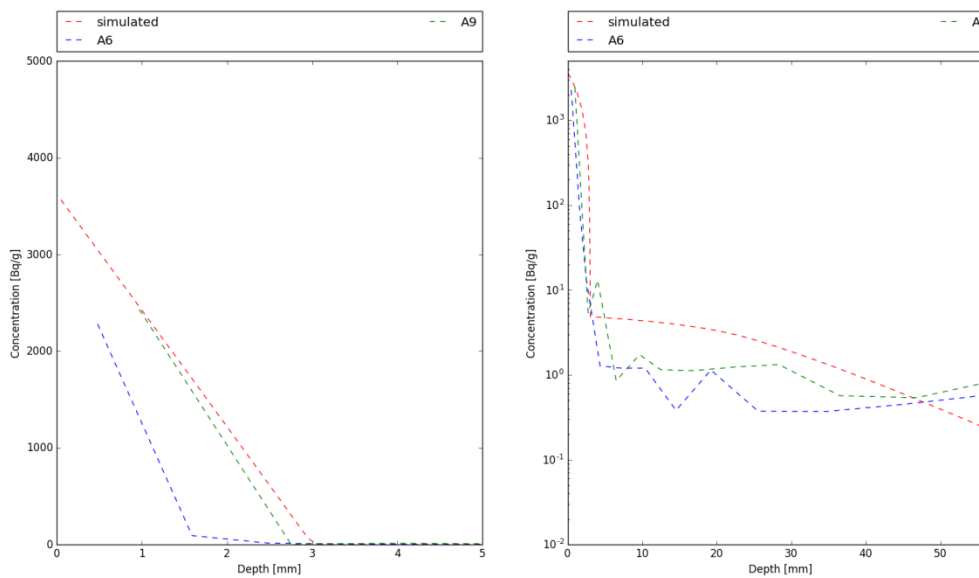
Stopovač	Difuzivita ve volné vodě [m ² /s]	Zdánlivá difuzivita [m ² /s] – maximum
Na-22	5e-10	7,21e-11
Cl-36	1,462e-9	3,13e-10
Co-57	2e-9	6,48e-12
Ni-63	5e-10	6,30e-11
Ba-133	2e-9	2,52e-10
Cs-137	2e-9	2,52e-10



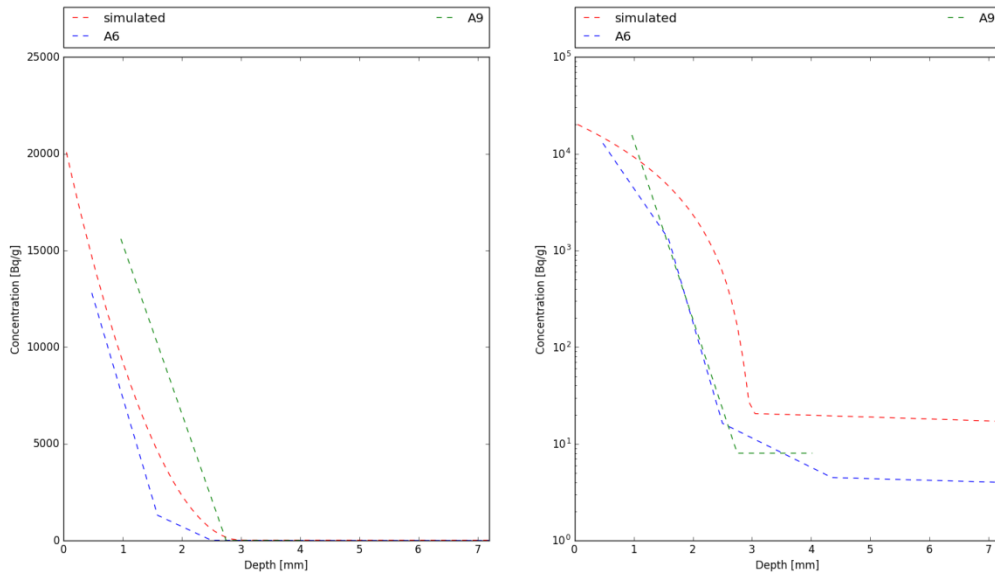
Obr. 42 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Na-22



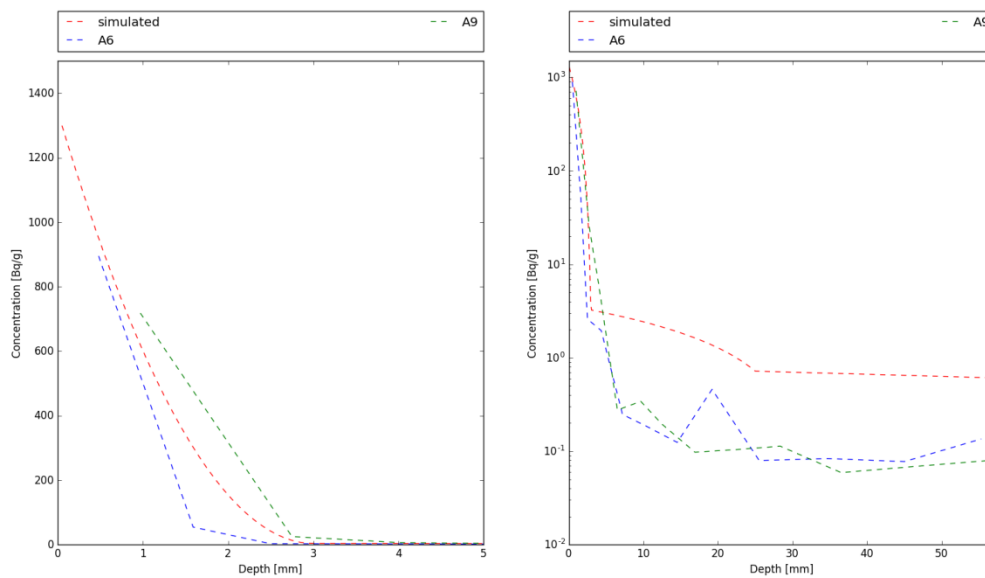
Obr. 43 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cl-36



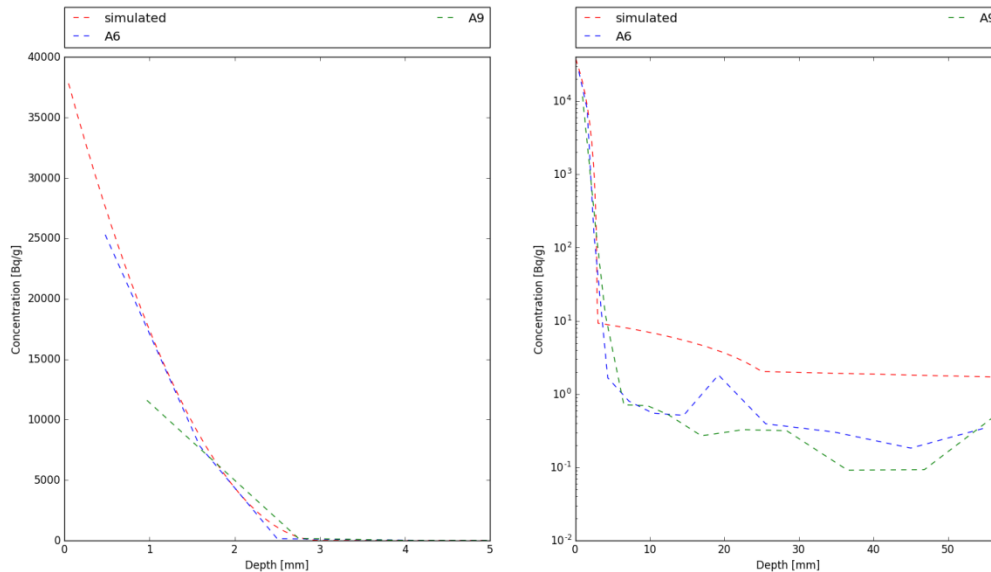
Obr. 44 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Co-57



Obr. 45 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63



Obr. 46 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ba-133



Obr. 47 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cs-137

4.3.2 Etapa 2

Druhá etapa modelování experimentu LTDE-SD spočívá v rozšíření modelu o simulaci vývoje koncentrace v roztoku stopovačů (radionuklidů). Tyto koncentrace jsou používány jako okrajové podmínky transportu na rozhraní roztok – hornina.

Model roztoku je nadřazen modelu Flow123d – zajišťuje jeho spouštění, modifikaci jeho vstupů a vyhodnocení jeho výstupů.

Počáteční stav roztoku byl odvozen z údajů uvedených v zadávací dokumentaci: počáteční objem roztoku je 1150 ml, počáteční koncentrace jednotlivých stopovačů byly spočteny na základě injektované aktivity.

Změny stavu roztoku byly způsobeny:

1. Odebíráním vzorků – ze zadávací dokumentace známy odebrané objemy spolu s časy, kdy k odběrům došlo. Nezpůsobují změnu koncentrace, ale změnu objemu roztoku spolu s hmotností stopovačů v roztoku rozpuštěných.
2. Hmotnostní tok do/z horninové matrice – počítán na základě výstupů (hmotnostní bilance) Flow123d.

Model roztoku sleduje čas, objem roztoku a hmotnosti stopovačů v něm rozpuštěných. Počítá okrajovou podmínku pro simulace transportu, které opakovaně spouští se simulační periodou 1 den (1 hodina během prvního dne). Po každém jednotlivém běhu transportního modelu, model roztoku vyhodnotí výstupy Flow123d (hmotnostní tok přes hranici reprezentující rozhraní roztok – hornina) a na jejich základě přepočte hmotnosti stopovačů v roztoku. Před každým během transportního modelu, model roztoku zkontroluje, zda nedošlo k odběru vzorků. Pokud ano, náležitě upraví objem roztoku a hmotnosti stopovačů v něm rozpuštěných.

Vývoj koncentrace v roztoku je popsateľný diferenciální rovnicí prvního řádu. Model roztoku ji numericky řeší, ve své podstatě explicitní jednokrokovou metodou. Simulační perioda dílčích

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

transportních modelů je tak krokem časové diskretizace modelu roztoku, který má jednak vliv na přesnost numerického řešení a jednak je důležitý pro jeho stabilitu (Anderson, 1995).

Geometrie experimentu je komplikovaná, její reprezentace 3D výpočetní sítě byla obtížně použitelná kvůli vysokým nárokům na jemnost výpočetní sítě v blízkosti rozhraní roztok – hornina (vytvořená síť měla desítky miliónů elementů). Přistoupili jsme proto ke zjednodušení, které by mělo mít žádný nebo zanedbatelný dopad na přesnost výstupů (obzvláště v kontextu jiných nejistot s modelem spojených). Experiment byl reprezentován dvěma samostatnými geometriemi:

1. 1D geometrie – pro výpočet interakce mezi horninou a experimentální sekcí – puklina. Jak geometrie, tak výpočetní síť jsou identické s těmi použitými a popsány v Etapě 1. Plocha rozhraní roztok – hornina je 0,0236 m².
2. 2D geometrie – pro výpočet interakce mezi horninou a experimentální sekcí – vrt. Vytvořena jako výseč mezikruží (s úhlem výseče $\pi/90$ radiánů). Reprezentace celého mezikruží by zbytečně zvýšila výpočetní nároky. Plocha rozhraní roztok – hornina je 0,034/180 m² (při vyhodnocení výstupů Flow123d je hmotnostní tok násoben 180).

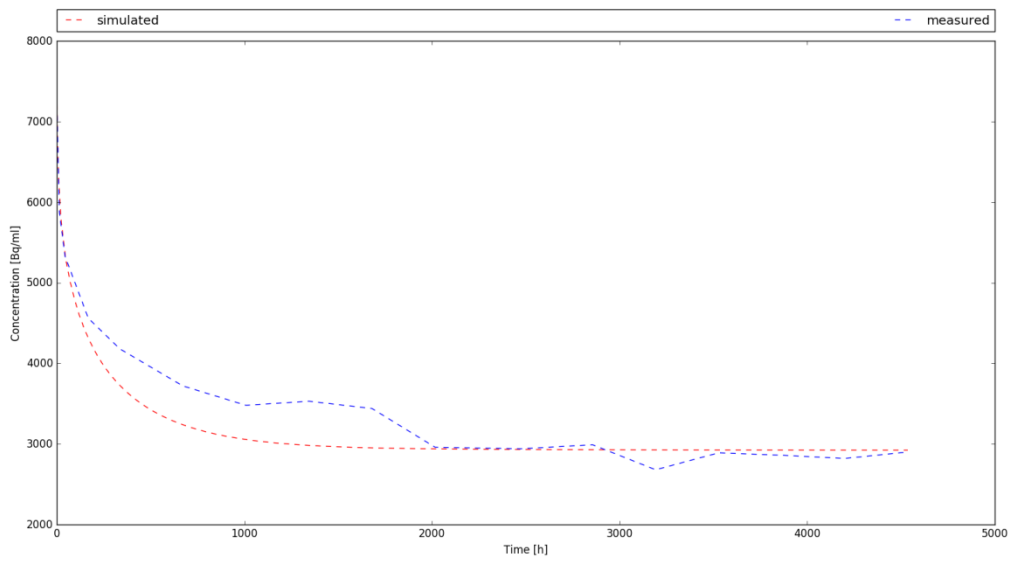
Kdykoli model roztoku volá Flow123d, spouští dvě jeho instance (jednou pro každou geometrii) a vyhodnotí výstupy obou.

Vyjma okrajové podmínky transportu jsou všechny parametry modelu shodné s Etapou 1 (včetně celkového časového rámce simulace). Niže jsou prezentovány vybrané výsledky simulací Etapy 2.

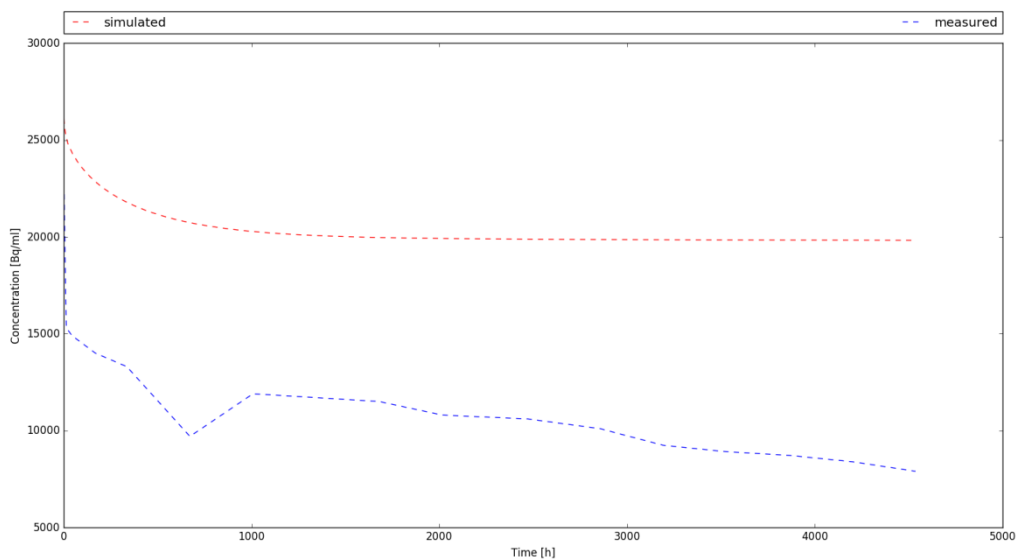
Nejlepší shody s měřeními hodnotami koncentrace v roztoku bylo dosaženo pro Cs-137 (viz Obr. 48).

U ostatních stopovačů byla shoda horší, jak je ukázáno pro Ni-63 (Obr. 49). Z obrázku je patrný velmi rychlý pokles měřené koncentrace během prvních hodin experimentu. V důsledku rozdílné okrajové podmínky se přirozeně zhoršila také shoda simulovaného a měřených koncentračních profilů v hornině (viz Obr. 50, srovnej s Obr. 45). Kdybychom se snažili vylepšit shodu měřeného a simulovaného časového vývoje koncentrace v roztoku, museli bychom zvýšit celkovou hmotnost stopovače v horninové matici na přibližně dvojnásobek, což by shodu profilů v ní ještě výrazně zhoršilo. Výsledek tak ukazuje nikoli na chybu v parametrech horninové matrice, ale na chybu hmotnostní bilance, která může být způsobena buď chybami měření aktivit ať už v roztoku (kde nejistoty měření jsou velmi dobře patrné z oscilací v některých časových řadách) nebo v matici nebo chybou experimentu, kdy některé stopovače se mohli vázat na experimentální vybavení.

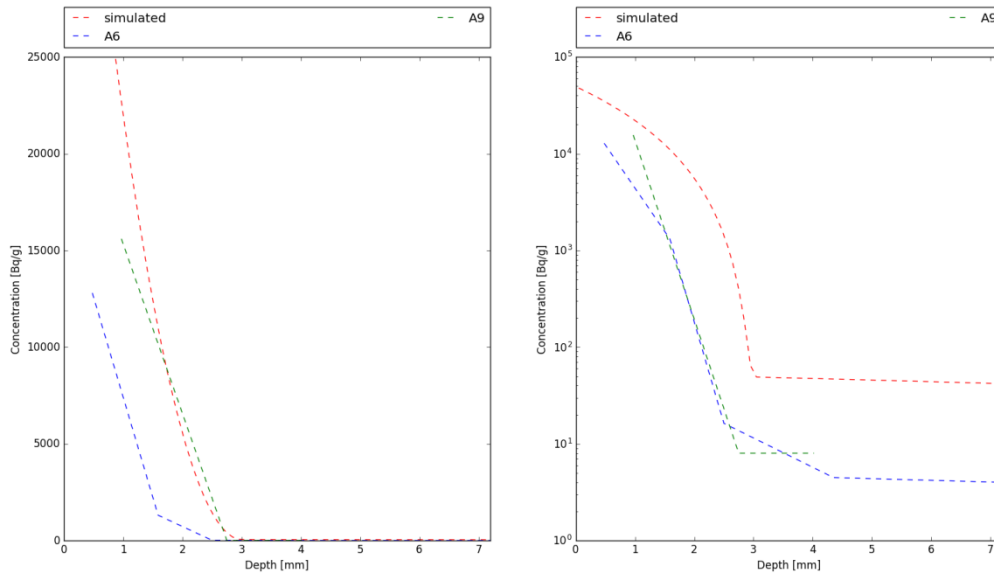
Dílčím závěrem je, že je lépe použít počáteční injektované množství stopovačů a simulovat koncentrační vývoj v roztoku (sledovat hmotnostní bilanci) než jako okrajovou podmínku používat chybou zatížená měření. Přestože simulované a měřené časové vývoje koncentrace stopovačů v roztoku nejsou shodné pro všechny stopovače, z toho plynoucí rozdíly v okrajové podmínce transportu na rozhraní roztok – hornina nezhoršují kvalitativní shodu koncentračních profilů v hornině, jakkoli shoda kvantitativní se může zhoršit. Právě kvalitativní shoda znamená, že validita předpokladu poklesu parametrů horniny s hloubkou zůstává, zlepšení shody kvantitativní může být dosaženo dodatečnou kalibrací parametrů.



Obr. 48 LTDE-SD – model roztoku – Cs-137



Obr. 49 LTDE-SD – model roztoku – Ni-63

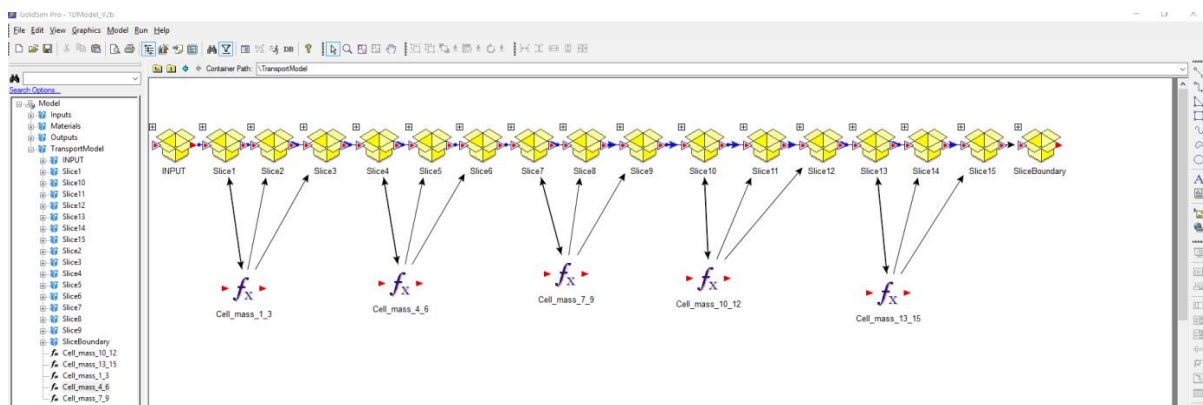


Obr. 50 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63

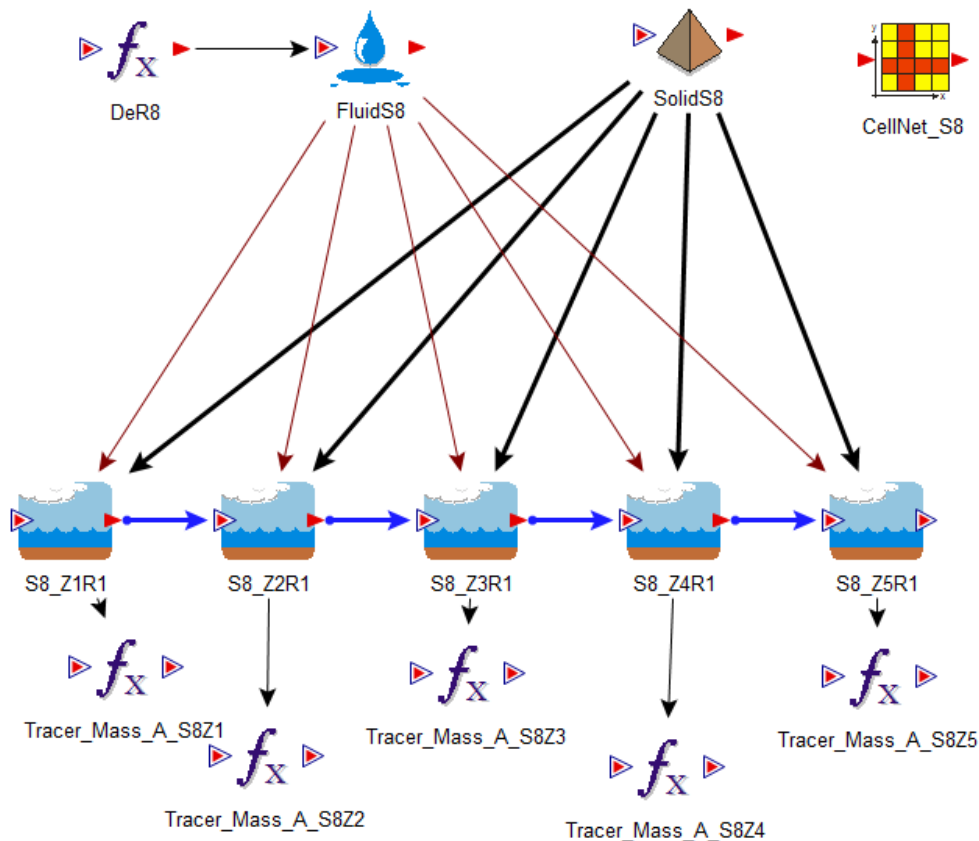
4.4 Inverzní model Goldsim

4.4.1 Etapa 1

Pro interpretaci naměřených dat z *in-situ* experimentů LTDE-SD byl vytvořen model v programovém prostředí GoldSim. Využita byla komerční licence (GoldSim + RT (Enterprise)) ve verzi 12.0. Tento model reprezentuje difúzi do horniny pomocí 1D sítě konečných objemů (element Cell). Aby bylo možné modelovat heterogenní povahu horninového prostředí, byla 1D síť rozdělena stejně jako v *in-situ* experimentu do 16 částí (Obr. 51), přičemž každá část obsahovala svoje horninové prostředí a její transportní cesta byla rozdělena na 5 částí (Obr. 52). Okrajová podmínka na vstupu byla definována na základě experimentálních dat o koncentracích (část INPUT). Tento model byl použit k optimalizaci vybraných vstupních parametrů tak, aby vypočítané průnikové křivky co nejvěrněji reprezentovaly tvary detekovaných křivek.



Obr. 51 Rozdělení 1D sítě do 15 oddělených částí v grafickém rozhraní GoldSim.



Obr. 52 Jedna z 15 oddělených částí 1D sítě v grafickém rozhraní GoldSim. V oddělené části jsou definovány vlastní hodnoty transportních parametrů pomocí elementů FluidS8 a SolidS8. Vlastní podsítí konečných objemů byla tvořena pěti elementy Cell (S8_Z1R1- S8_Z5R1), přičemž difúzní délky se lišily pro jednotlivé oddělené části podobně, jako se měnily tloušťky jednotlivých řezů odebraných z horniny.

Optimalizace hodnot vybraných parametrů je založena na hledání minima účelové funkce, což v našem případě byla suma druhé mocniny rozdílů koncentrací mezi modelovými a experimentálními hodnotami v daném místě horniny (pouze v místech, kde byla měřena experimentální data, nedochází tak k interpolaci naměřených hodnot), vydělená experimentálními hodnotami (Obr. 53). Účelová funkce se minimalizuje vzhledem k vybraným parametrům. Pro každý z těchto parametrů je třeba v GoldSim zadat počáteční hodnotu a horní a dolní mez. Samotná optimalizace se provádí v GoldSim pomocí „Box’s complex method“ popsané v (Box 1965). Tato metoda je založena na vytvoření tzv. „initial complex“ pro každý z optimalizovaných parametrů. „Initial complex“ je množina možných hodnot sledovaných výstupů pro vstupní parametry s hodnotami v mezích nadefinovaných uživatelem. Tento „initial complex“ obsahuje minimálně dvojnásobný počet hodnot, než je počet optimalizovaných parametrů. Algoritmus poté prohledává parametrický prostor a zaměřuje nejnevhodnější řešení za nová, dokud program nedokonverguje k optimálnímu řešení. Pokud nedojde ke konvergenci v určitém počtu kroků, objeví se chybová hláška. GoldSim umožňuje definovat přesnost optimalizace. Dává na výběr ze čtyř možností přesností: „Low“, „Medium“, „High“ a „Maximum“. Přesnost udává, jakým způsobem bude vygenerován „initial complex“. Pro přesnost „Low“ je vygenerováno minimální množství hodnot parametru, tedy $2n$ hodnot, kde n je počet optimalizovaných parametrů. Pro přesnost „Medium“ je vygenerováno n a pro „High“ a „Maximum“ $10n$ hodnot a do „initial complex“ je z nich vybráno

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

2 n nejhodnějších. Stupeň přesnosti se také liší ukončením optimalizace. Při přesnosti „Low“ je optimalizace ukončena poté, co se nová hodnota optimalizované funkce od předchozí neliší o více než 1 %, nebo po 100 pokusech. Při přesnosti „Medium“ jsou tyto podmínky 0,1 % a 1000, při „High“ 0,001 % a 10 000, při „Maximum“ 0 % a 1 000 000.

Nejdříve byla heterogenita v modelu reprezentována jednou proměnou hodnotou, a to difúzním koeficientem D_e , jehož hodnota rostla se vzdáleností od zdroje. Řešit optimalizační úlohu, ve které by se v každé oddělené části volily specifické koeficienty D_e , K_d , ε není možné, protože pro každou z oddělených částí máme pouze jednu experimentální hodnotu. Optimalizovány byly tři parametry (D_{e0} , α , n) námi zvolené funkce pro růst D_e

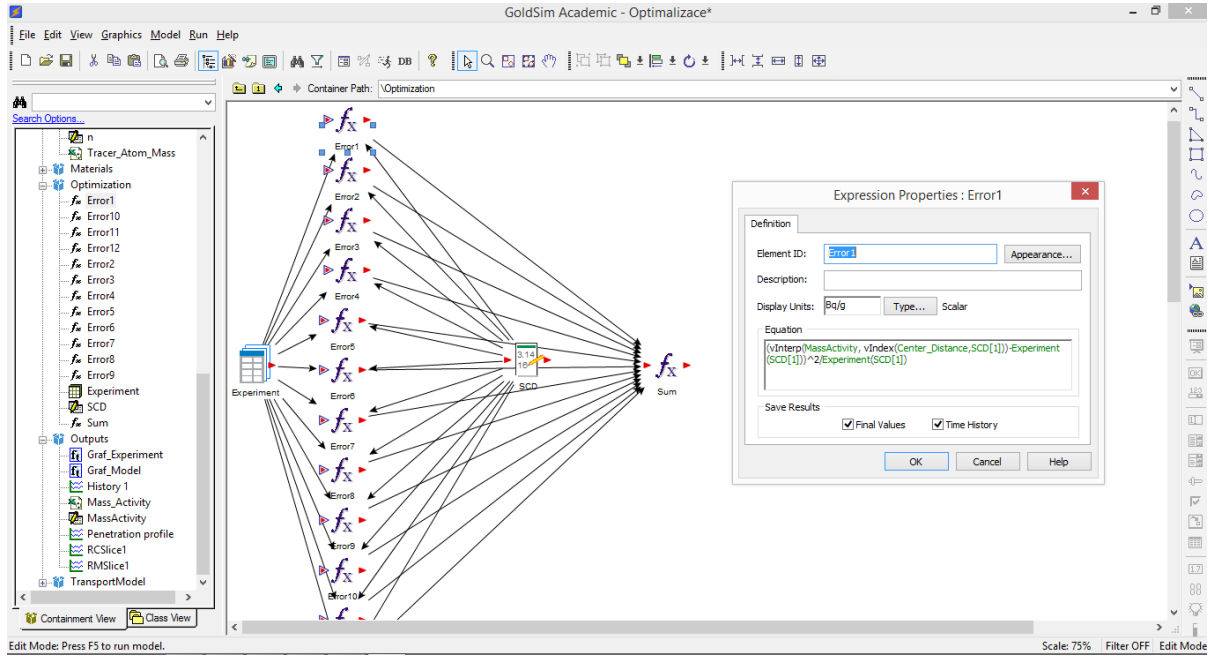
$$D_e = D_{e0} + \alpha d^n, \quad (3.1)$$

kteřé bodu horniny ve vzdálenosti d přiřadí danou hodnotu D_e .

Na Obr. 53 je ilustrováno, jak se v grafickém prostředí GoldSim nadefinuje účelová funkce. V pravém okně je vidět předpis pro výpočet sumy druhých mocnin rozdílů koncentrací v 1. experimentálním bodě. Model si načte vzdálenosti, ve kterých se stanovovala koncentrace a najde modelovou hodnotu ve stejné vzdálenosti od zdroje. Funkce Sum (účelová funkce) poté sečte tyto rozdíly pro všechny měřené body.

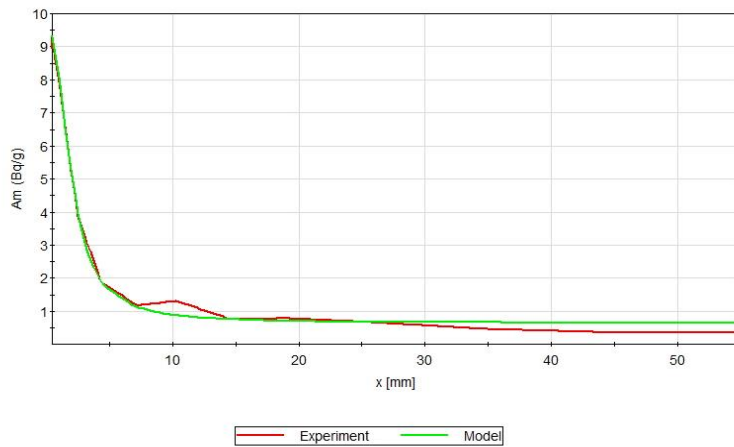
Na Obr. 54 jsou vidět průnikové křivky pro Cl-36 v jádru A6, kde červená křivka odpovídá experimentálním hodnotám a zelená křivka modelovým hodnotám s optimalizovanými parametry vzdálenostní závislosti D_e . Minimální hodnoty rozdílu experimentálních a modelových dat bylo dosaženo pro $D_{e0} = 1,002 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$, $\alpha = 3,18 \cdot 10^{-6}$, $n = 3,13$. Ostatní parametry modelu byly načteny z Excel souboru (např. $K_d = 10^{-8} \text{ m}^3/\text{kg}$, $\varepsilon = 0,03$). Pro tuto funkční závislost, D_e od vzdálenosti 10 cm limituje k hodnotě difúzního koeficientu ve volné vodě (viz Obr. 55), což je z fyzikálního hlediska nemožné. To hovoří o tom, že použitý model nemusí obsahovat všechny procesy, které se na vzniku transportní křivky podílely.

Stejný model byl použit i pro experimentální data v jádru A6 pro sorbující iont, konkrétně Na-22. Byla použita stejná závislost koeficientu D_e na vzdálenosti od zdroje. Koeficienty α a n této závislosti byly stejné, jako v případě Cl-36, jiná byla jen hodnota $D_{e0} = 5,314 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$. Další parametry, pro které byla dosažena nejlepší shoda modelových výsledků s experimentálními, byly $K_d = 2,72 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{kg}$, $\varepsilon = 0,03$. Vypočítané a naměřené průnikové křivky pro Na⁺ jsou na Obr. 56.

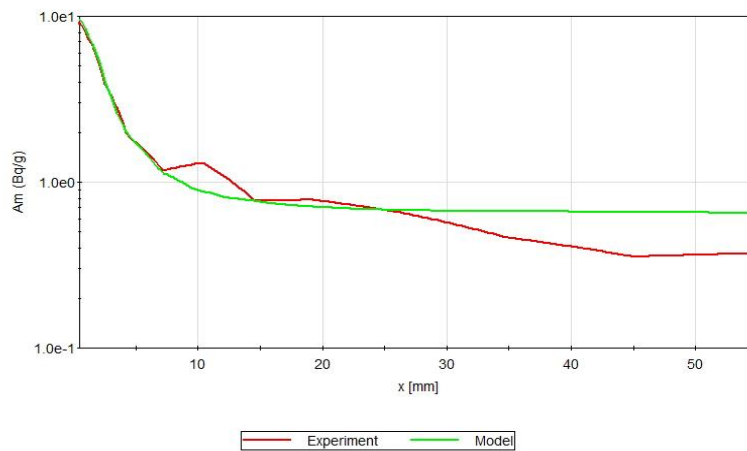


Obr. 53 Zadání objektové funkce pro optimalizaci v grafickém prostředí GoldSim.

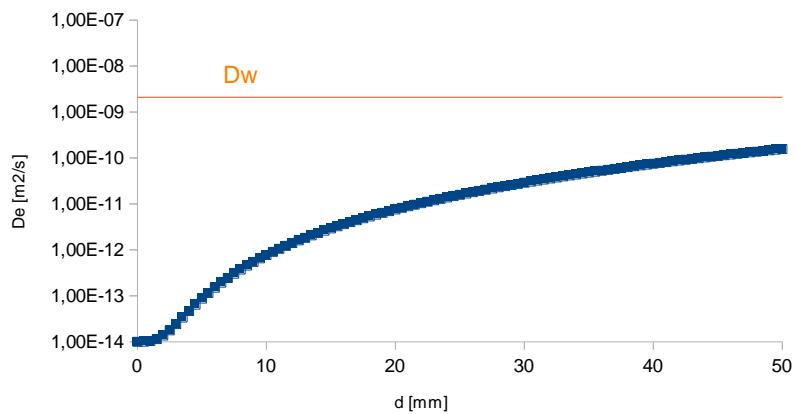
Penetration profile



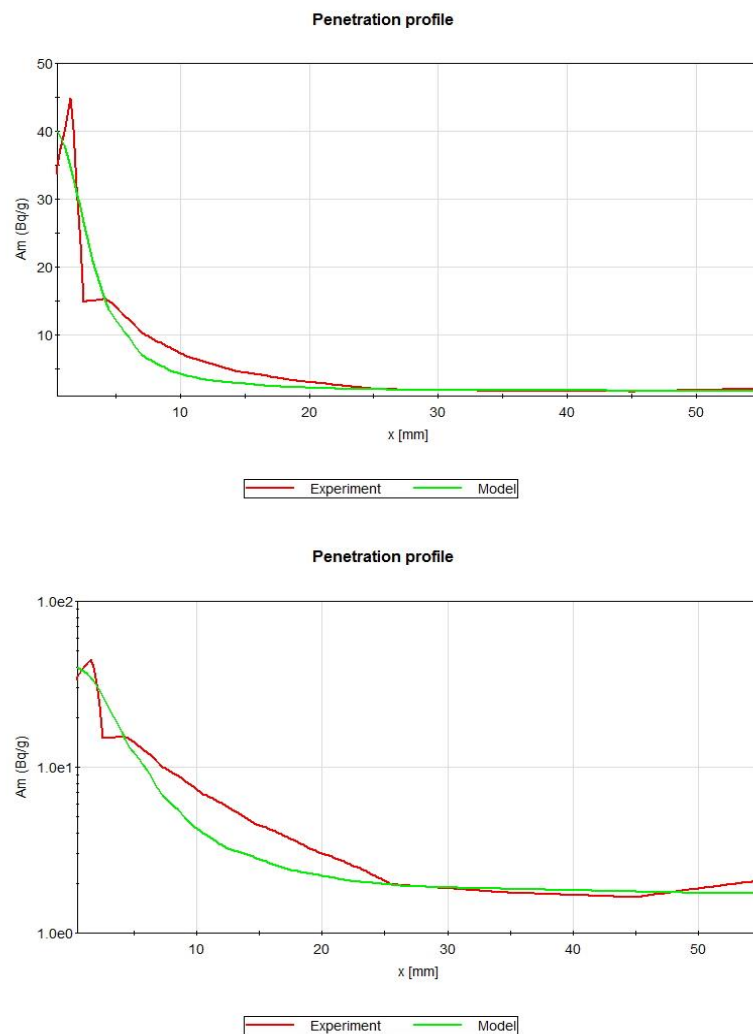
Penetration profile



Obr. 54 Srovnání experimentálního a modelového průběhu aktivity ^{137}Cs v horninové vrstvě.



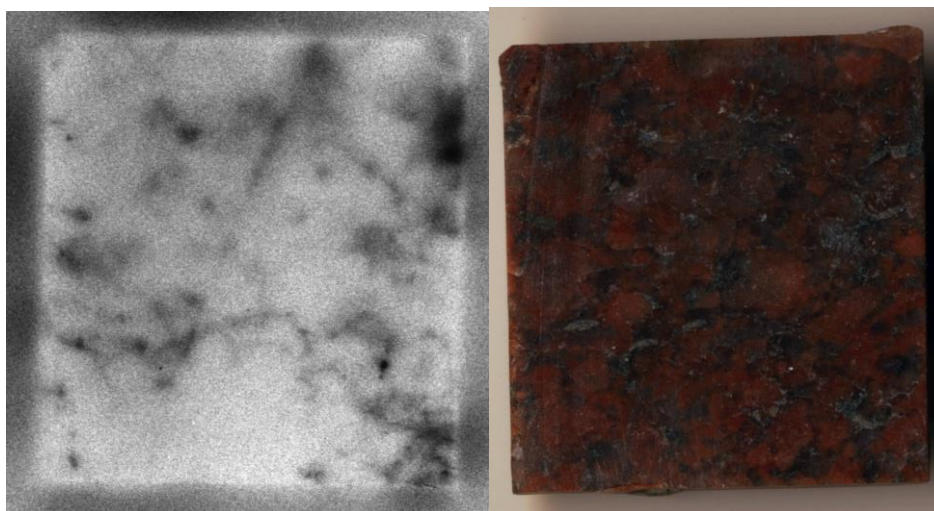
Obr. 55 Závislost D_e rovnice (3.1) na vzdálenosti od zdroje pro Cl-36 pro optimální hodnoty parametrů $D_{e0} = 1,002 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$, $\alpha = 3,18 \cdot 10^{-6}$, $n = 3,13$. Oranžová úsečka označuje limitní hodnotu difúzního koeficientu ve vodě.



Obr. 56 Srovnání experimentálního a modelového průběhu aktivity Na-22 v horninové vrstvě.

4.4.2 Etapa 2

V následující etapě byl v programovém prostředí GoldSim vypracován rozšířený model, který současně obsahuje oba typy vzorků (A, D). Na Obr. 31 je znázorněno umístění modelů obou vzorků; poloha vzorku A je náhodná, díky nastavitelné ploše průřezu válce může model vzorku reprezentovat celý objem horniny, ze které byly vzorky odebrány. Dále rozšířený model umožňuje současné simulování transportu více radionuklidů. Pro obecnější popis heterogenního horninového prostředí bylo zavedeno v každém elementu *Cell* druhé „horninové prostředí“. Tato druhé horninové prostředí představuje síť mikropuklin (Obr. 57), které mají odlišné transportní vlastnosti a můžou představovat preferenční transportní cestu. Následuje podrobnější popis implementovaných změn. Nakonec model umožňuje řešit transportní úlohu pouze na základě počátečních aktivit radionuklidů.



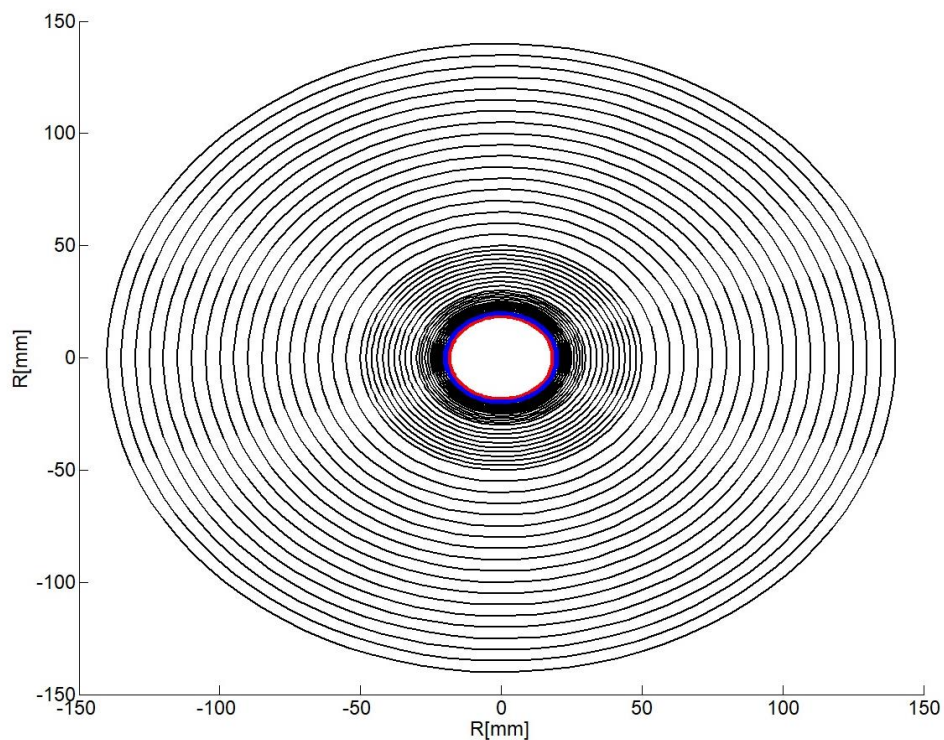
Obr. 57 Autoradiograf (nalevo) a fotografie (napravo) řezu vzorku A.9. Černě zbarvené části v autoradiografu je možné interpretovat jako síť mikropuklin, které představují preferenční transportní cesty. Převzato z (Löfgren et al. 2015).

Uvažované radionuklidy

Rozšířený model řeší paralelně transport těchto pěti radionuklidů: Na-22, Cl-36, Ni-63, Ba-133 a Cs-137. Vstupní množství těchto radionuklidů je zadáno buď ve formě časových průběhů koncentrací, kdy se v každém časovém kroku interpoluje koncentrace ve vstupním elementu *Cell* z experimentálních dat pomocí elementu *Time Series* a nebo je zadána pouze počáteční hmotnost radionuklidů ve vstupním elementu *Cell*.

Model D vzorku


Model D vzorku byl sestaven pomocí 1D sítě konečných objemů (element *Cell*) s cylindrickou geometrií (Obr. 58) s konstantní *Z* souřadnicí rovnou 300 mm, a s *R* souřadnicemi, které jsou uvedeny v Tab. 21 pro všech 76 elementů *Cell*. Těchto 76 elementů *Cell* bylo rozděleno do tří skupin (na Obr. 31 zobrazeno pomocí různých odstínů modré, na Obr. 58 pomocí různých barev), první skupina obsahuje deset elementů s poloměrem v intervalu 18-19 [mm], následuje druhá skupina obsahující pět elementů s poloměrem 19-20 [mm] a zbývající třetí skupina obsahuje 61 elementů s poloměrem 20-160 [mm]. Každá skupina má vlastní dvě modelová horninová prostředí (preferenční zóna mikropuklin a objem zrn).



Obr. 58 Detail geometrie cylindrické sítě modelu D vzorku, barevně jsou odlišeny oblasti různých modelových hornin (prostorově proměnné parametry).

Tab. 21 R- souřadnice cylindrické sítě reprezentující D vzorky.

Index	R [mm]	Index	R [mm]	Index	R [mm]	Index	R [mm]	Index	R [mm]
R1	18	R17	20,5	R33	34	R48	85	R64	175
R2	18,1	R18	21	R34	36	R49	90	R65	180
R3	18,2	R19	21,5	R35	38	R50	95	R66	185
R4	18,3	R20	22	R36	40	R51	100	R67	190
R5	18,4	R21	22,5	R37	42	R52	105	R68	200
R6	18,5	R22	23	R38	44	R53	110	R69	210
R7	18,6	R23	23,5	R39	46	R54	115	R70	220
R8	18,7	R24	24	R40	48	R55	120	R71	230
R9	18,8	R25	24,5	R41	50	R56	125	R72	240
R10	18,9	R26	25	R42	55	R57	130	R73	250
R11	19	R27	26	R43	60	R58	135	R74	260
R12	19,2	R28	27	R44	65	R59	140	R75	270
R13	19,4	R29	28	R45	70	R60	145	R76	280
R14	19,6	R30	29	R45	75	R61	150	R77	300
R15	19,8	R31	30	R46	80	R62	155		

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

R16	20	R32	32	R47	34	R63	160		
-----	----	-----	----	-----	----	-----	-----	--	--

Horninová prostředí

Základní vlastnosti horninového prostředí jsou v modelu definovány pomocí hustoty, porozity a K_d . Hustota byla uvažována v provedených studii stejná pro všechna horninová prostředí, rovna 2700 kg/m³; hodnoty porozity a K_d byly uvažovány různé a byly optimalizovány tak, aby se modelované profily, tj. prostorová rozložení, co nejvíce podobaly detekovaným. Každý element *Cell*, který je součástí transportních cest reprezentujících A a D vzorky, obsahuje dvě horninová prostředí (označeno jako solid1 a solid2). Relativní zastoupení těchto dvou horninových prostředí je v modelu řízeno vstupním parametrem, který byl optimalizován stejně jako hodnoty porozity a K_d vzhledem k detekovaným profilům – v tabulce s výsledky je označen jako „solid2/solid“, tj. poměr druhého prostředí k celku.

Výsledky vybrané studie

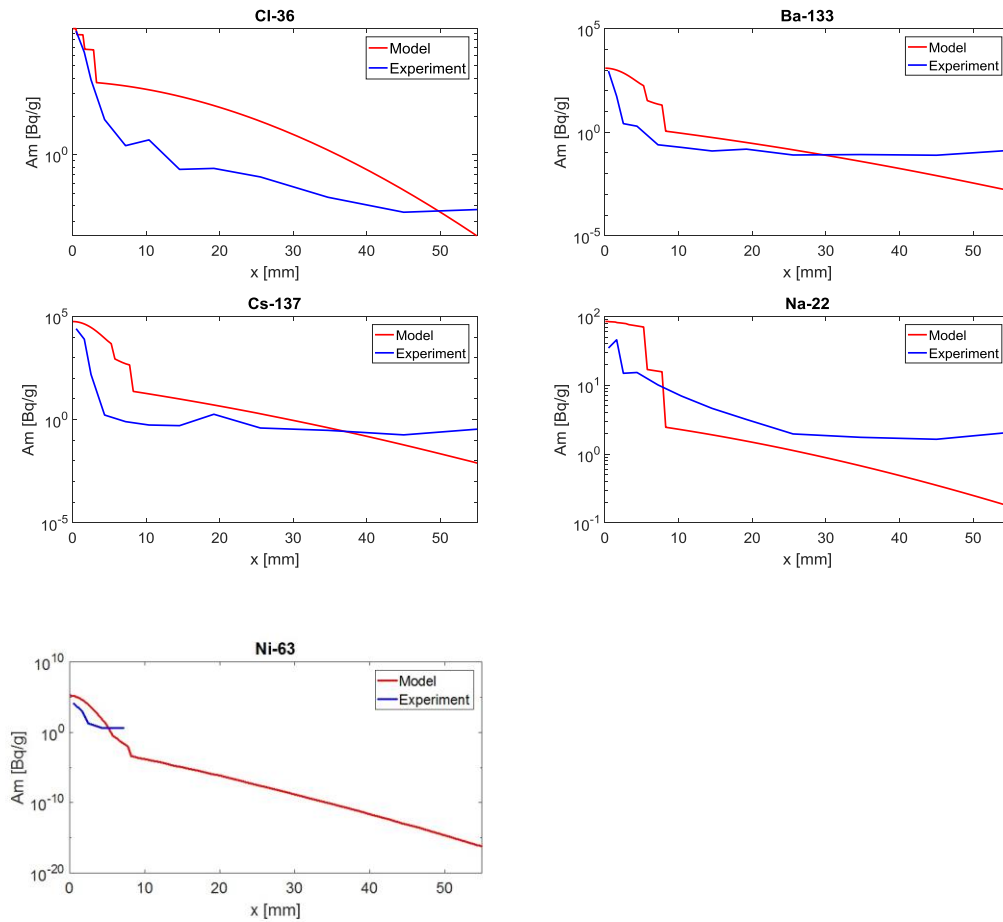
Pro sorbující radionuklidy Ni-63, Ba-133 a Cs-137 jsme použili vstup ve formě časových průběhů koncentrací a použili jsme také výsledky ze stejného vzorku (A6). Na rozdíl od studie pro Na-22 a Cl-36 (kde byla dosažena poměrně dobrá shoda na základě prostorově proměnné hodnoty difúzního koeficientu D_e) jsme použili konstantní $D_e \equiv D_{e0}$ a optimalizovali jsme kromě D_{e0} i K_d a relativní zastoupení horninových prostředí. Abychom dosáhli shody mezi simulovanými a experimentálními profily, museli jsme uvažovat vyšší hodnoty efektivního difúzního koeficientu D_{e0} pro sorbující radionuklidy než pro Cl-36 (Tab. 22) a hlavně velké zastoupení horniny s nulovou sorpcí (pro $d > 10$ mm 99 % nesorbující horniny viz Tab. 23). Výsledné profily jsou na Obr. 59.

Souhrn doposud získaných výsledků

Výsledky provedených studií ukazují, že pro reprezentaci pozvolné části profilů je nutné uvažovat vysoké difúzní koeficienty u nesorbujících radionuklidů a v případě sorbujících radionuklidů sorpci radionuklidů na velmi omezené části objemu horniny. To lze interpretovat tak, že detekované profily nelze vysvětlit pomocí modelu, který zahrnuje pouze transport řízený Fickovými zákony. Z rozboru experimentu vyplývá, že nelze vyloučit, že během experimentu mohlo dojít k advektivnímu toku díky tlakovým gradientům, nebo k osmóze díky vysoušení. Na druhé straně autoradiografy řezů vzorků kvalitativně odpovídají závěru, že transport stopovačů byl omezen na malý objem horniny.

Tab. 22 Vybrané parametry, které byly použity pro simulaci profilů zobrazených na Obr. 59. Hodnoty parametrů byly optimalizovány vzhledem k detekovaným profilům.


Parametr	Cl-36	Ba-133	Cs-137	Na-22	Ni-93
K_d [m ³ /kg] - solid1	1,0E-14	2,5E-03	4,0E-02	5,0E-05	4,0E-02
K_d [m ³ /kg] - solid2	1,0E-14	1,0E-10	1,0E-10	1,0E-14	1,0E-10
D_{e0} [m ² /s]	4,1E-14	8,0E-13	1,0E-11	1,0E-13	2,0E-12



Obr. 59 Srovnání experimentálních a modelových průběhů aktivity pěti radionuklidů v horninové vrstvě.

Tab. 23 Relativní zastoupení hornin a jejich porozity, které byly použity pro simulaci profilů zobrazených na Obr. 59 (výsledek optimalizace).

Modelová vrstva	1	2	3	4	5	6	7	8
solid2/solid	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,99	0,99	0,99
ϵ_1	0,009	0,008	0,006	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003
ϵ_2	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003
Modelová vrstva	9	10	11	12	13	14	15	Hranice
solid2/solid	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99
ϵ_1	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003
ϵ_2	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003	0,003

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

4.5 Závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře

Ze simulací LTDE-SD experimentu plynou závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře následující závěry:

- V blízkosti vrtů a rozrážek je třeba počítat s přítomností zóny narušení (EDZ, BDZ), jejíž mocnost a vlastnosti pochopitelně závisí na zvolené metodě těžby/vrtání. Parametry zóny narušení mohou být velmi odlišné od parametrů neovlivněné horniny. Konkrétně lze v zóně narušení očekávat vyšší porozitu a s ní spojenou nižší míru sorpce.
- In-situ experimenty přinášejí kvalitativně novou informaci. Experimenty laboratorní vždy probíhají na vzorcích, které byly ovlivněny. Inverzní modely in-situ experimentů mohou poskytnout parametry postihující transportní procesy v rostlém masívu.
- Míra sorpce v neporušené a neovlivněné hornině může být až o několik řádů nižší, než odpovídá parametrům zjištěným v laboratoři.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

5 Modelování LTDE-SD pomocí konceptu mikro-DFN

Mikro-DFN/CPM transportní modely jsou zpracovány v návaznosti na řešení Task 9B. V této kapitole je shrnuta obecná metodika přípravy mikro-DFN/CPM modelů, která byla aplikována na konkrétní zadání a výsledky experimentu LTDE-SD. Jsou shrnuty použité vstupní podklady na úrovni mikroměřítko horninové matrice, je popsán výpočetní software a metodický postup při sestavení a realizaci transportního modelu.

Difuzní experiment LTDE-SD (viz kapitola 4) byl realizován v horninovém prostředí bez otevřených puklin, ve kterém je transport stopovačů vázán na mikropórový prostor matrice – ten je u granitických hornin tvořen výhradně sítí vzájemně propojených mikrotrhlin (mikropuklin), které mají charakter plošných diskretních prvků s velmi malým rozevřením. Objemové mikropóry charakteristické pro porézní prostředí se u granitických hornin prakticky nevyskytují (pokud existují, tak jsou vždy napojeny na mikropuklinovou síť, která předurčuje odporové charakteristiky prostředí).

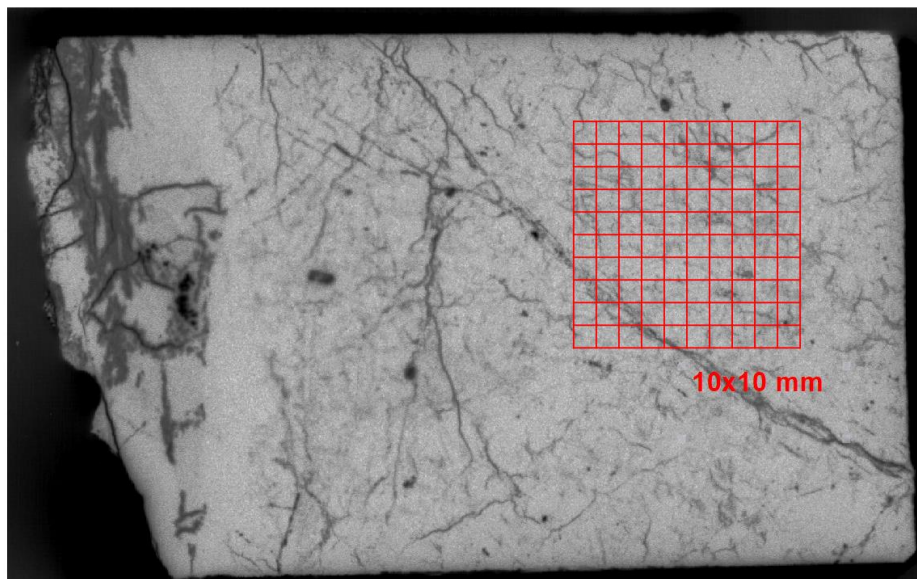
Rozdíl mezi simulací difuzních experimentů pomocí klasického konceptu (lze označit jako makro-CPM) a mikro-DFN konceptu je především v charakterizaci parametrů horninové matrice. Zatímco u obvyklého přístupu pomocí makro-CPM koncepce jsou transportní parametry horninové matrice zadány víceméně homogenní a průměrné pro celý simulovaný objem, u mikro-DFN přístupu vycházejí modelové parametry reprezentující horninovou matici z pozorované mikrostruktury simulované horniny a jsou proto v prostoru velmi heterogenní. Makro-CPM model je pak svými parametry srovnatelný s určitým (větším) reprezentativním objemem mikro-DFN domény (mikro-DFN model po upscalingu do většího měřítka a zprůměrování hodnot).

Mikro-DFN transportní modely byly zpracovány v návaznosti na řešení Task 9B a aplikovány na zadání a výsledky experimentu LTDE-SD. Při řešení byly využity také některé modelovací postupy aplikované při řešení jiných projektů (např. PAMIRE – Havlová et al., 2017) a výsledky laboratorních difuzních experimentů realizovaných na vzorcích z lokality Grimsel (projekt LTD – Havlová et al, 2016). Výsledky realizovaných transportních experimentů poukázaly na některé aspekty chování radioaktivních stopovačů v granitických horninách, které nelze popsat na základě zjednodušené představy pomocí homogenních vlastností horninové matrice (nejlépe jednou hodnotou difuzního koeficientu, pórovitosti atd.). Mikrostruktura horninové matrice je velmi komplexní a prostorově vysoce heterogenní.

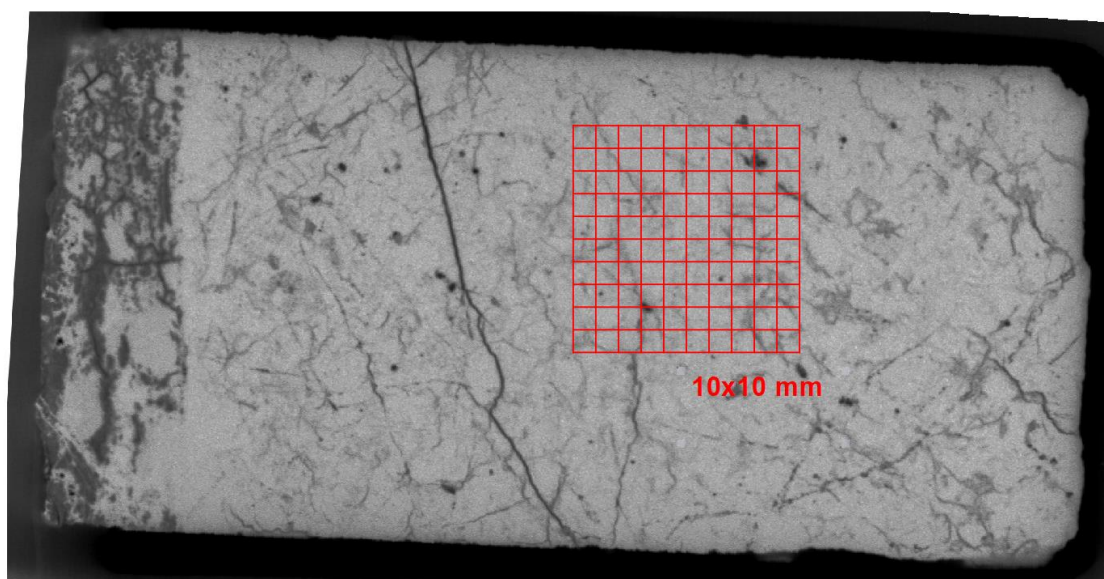
Hlavním cílem mikro-DFN modelování bylo aplikovat naměřená mikrostrukturní data (která zahrnují mikropukliny v milimetrovém měřítku a postihují celkovou heterogenitu neporušené horninové matrice), navrhnou a vypracovat postupy, jak modelovat experimenty na úrovni mikroměřítko, a pokusit se lépe pochopit difuzní a sorpční procesy probíhající v horninové matici pro jednotlivé radionuklidy.

5.1 Shrnutí vstupních dat

V rámci řešení Task9 bylo k dispozici omezené množství vstupních podkladů popisujících mikrostrukturu studované horniny – jedná se o autoradiografy dvou vzorků z lokality Äspö impregnovaných C-14-PMMA. Mikrosnímky horniny v rozlišení 25 $\mu\text{m}/\text{pixel}$ nebyly pořízené na vzorcích přímo z testovaných úseků experimentu LTDE-SD, ale na vzorcích z blízkého okolí. Charakter mikrostruktury horninové matrice s výraznými mikropuklinami přes celý vzorek je patrný z mikrosnímků na Obr. 60 a Obr. 61.



Obr. 60 Snímek mikrostruktury získaný metodou C-14-PMMA – vzorek LTDE-SD1 (DD18, 2017).



Obr. 61 Snímek mikrostruktury získaný metodou C-14-PMMA – vzorek LTDE-SD2 (DD18, 2017).

Na úrovni mikroměřítko horninové matrice byly dále k dispozici vyhodnocené 3D snímky z mikrotomografie vzorků, které dokumentují prostorové rozložení minerálních zrn. Rozlišení metody nicméně neumožňuje vizualizovat prostorovou síť mikropuklin – rozevření mikrotrhlin je výrazně menší než rozlišovací schopnost použité metody mikrotomografie. Z hlediska generování modelové mikropuklinové sítě nebyla v rámci řešení Task9 k dispozici žádná konkrétní (číselná) vstupní data využitelná pro zadání DFN modelů, např. statistické vyhodnocení délek nebo počtu mikropuklin ze snímků, distribuce rozevření mikropuklin ze snímků nebo Hg porozimetrie atd.

5.2 Metodika mikro-DFN modelování

Základní metodika použitá při mikro-DFN modelování v rámci řešení projektu Transport 4 je shrnuta v následujících bodech:

- 1) zpracování a analýza snímků mikrostruktury horninové matrice – vyhodnocení podkladů a stanovení geometrických parametrů mikropuklin (především vyhodnocení délek mikropuklin, počtu a hustoty mikropuklin atd.),
- 2) vygenerování mikro-DFN modelu, tj. stochastické 3D mikropuklinové sítě – v modelu jsou zahrnuty pouze významnější mikropukliny s minimální velikostí 10 mm; velikost domény je 10x10x20 cm; tvar generovaných mikropuklin je čtvercový; prostorová a směrová distribuce, četnost mikropuklin a jejich rozměr jsou generovány náhodně dle zvolených parametrů a statistických funkcí (mocninná závislost mezi počtem a velikostí mikropukliny); rozevření mikropuklin je rovněž generováno náhodně dle zadaných parametrů, má ale přímou vazbu na velikost mikropukliny (se zvětšující se velikostí mikropuklin dochází ke zvýšení hodnoty rozevření), rozevření je konstantní na celé ploše mikropukliny,
- 3) převod (upscaling) mikro-DFN modelu na mikro-CPM model s velikostí výpočetního elementu 1x1x1 mm – při upscalingu jsou vypočteny transportní parametry pro elementy, ve kterých probíhá generovaná mikropuklinová síť; ostatní elementy mimo tuto síť tvoří „pozadí“ a zahrnují méně významné a málo otevřené mikropukliny (spolu s významnějšími mikropuklinami ale tvoří vzájemně propojenou síť a rovněž se podílí na transportu), které jsou v modelu reprezentovány jako spojitě homogenní prostředí. Takto sestavený mikro-CPM model je do jisté míry jednodušší než mikro-DFN, zachovává si ale heterogenitu a vlastnosti mikro-DFN modelu a je vhodnější pro simulace transportu,
- 4) výpočet transportní úlohy na sestaveném mikro-CPM modelu, průběžné hodnocení modelových výsledků, porovnání s měřenými daty a optimalizace (kalibrace) transportních parametrů.

Při řešení mikro-DFN modelů byly využity následující programy:

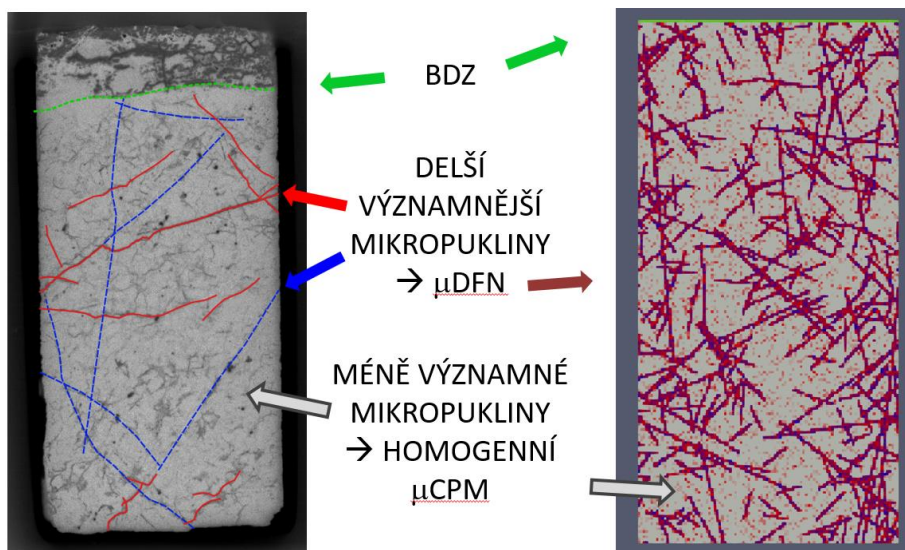
- ConnectFlow (v11.5.2 a v12.0) – program byl využit jako uživatelské prostředí (GUI) pro pre/postprocessing vstupních/výstupních souborů, pro generování mikropuklinové DFN sítě na základě zvolené statistické distribuce vstupních parametrů a upscaling mikro-DFN do mikro-CPM modelu,
- Groundwater Vistas (v6 a v7) – program byl použit jako preprocessor (GUI) pro sestavení transportního mikro-CPM modelu a generování vstupních textových souborů pro program MT3DMS,
- MT3DMS (v5.3) – program byl použit pro výpočet transportních úloh na upscalingovaných CPM modelech,
- ParaView (v5.3.0) – program byl použit pro prostorovou vizualizaci modelové geometrie a modelových výsledků,
- scripty v jazyce Python (v2.7.3) pro pre/postprocessing vstupních a výstupních dat – uživatelské prostředí používaných softwarů ConnectFlow a Groundwater Vistas je připraveno především pro realizaci hydraulických modelů a některé potřebné funkce nejsou dostupné pro poměrně specifické zadání transportních difuzních úloh řešených v rámci Task9B. Pro obsluhu a dávkové zpracování transportních modelů byla proto připravena a použita řada účelových scriptů (pro sestavení a spouštění variantních

transportních mikro-DFN/CPM modelů a pro zpracování a vyhodnocení modelových výstupů).

5.3 Výsledky mikro-DFN modelování

V úvodní fázi sestavení mikro-DFN modelu byly analyzovány snímky horninové matrice vzorků ze studované lokality. Práce byly soustředěny na vyhodnocení charakteru tří základních složek (viz Obr. 62), které se objevují prakticky ve všech typech vzorků (v různých granitických horninách z různých lokalit):

- porušená BDZ zóna na okraji vzorku způsobená vrtáním – na mikrosnímku vlevo není BDZ patrná, protože studované vzorky byly odebrány z horniny na kontaktu s otevřenou makropuklinou (do BDZ by teoreticky bylo možné zahrnout celou část vzorku nad zelenou linií, což je materiál výplně pukliny nebo mineralizovaného povlaku s velmi vysokou pórovitostí, nejedná se o horninovou matici; vzorek tak svým charakterem odpovídá spíše testovacímu intervalu A experimentu LTDE, kde měl ale povlak pukliny tloušťku maximálně několik milimetrů a nebyl souvislý) a nikoliv z horniny na kontaktu se stěnou vrtu (testovací interval D). Na mikrosnímcích pořízených v rámci jiných projektů byla nicméně pozorována porušená zóna maximálně v řádu stovek mikrometrů, v modelu je proto BDZ zadána pouze do krajní řady výpočetních buněk, tj. s tloušťkou 1 mm,
- delší významnější mikropukliny – může se jednat o nevyplněné mikrotrhliny (praskliny) přes několik minerálních zrn nebo o alterované zóny hustě propojených velmi krátkých mikropuklin. Tyto mikropukliny představují propojení horninové matrice na větší vzdálenost a v modelu jsou generovány jako mikro-DFN síť,
- méně významné mikropukliny s malým rozevřením, které jsou pro daný typ snímkování těžko rozeznatelné (hustě propojená síť nebo šedé pozadí snímku) – v modelu zadáno jako spojitě homogenní prostředí.



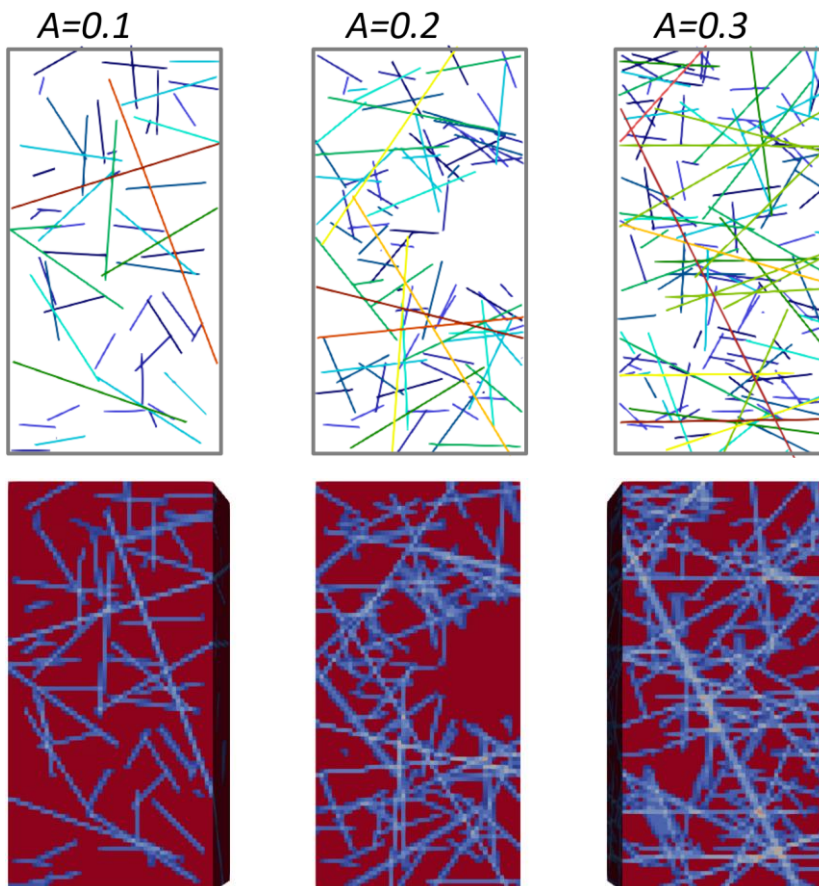
Obr. 62 Vymezení základních prvků charakteristických pro horninovou matici – BDZ, delší významnější mikropukliny a méně významné mikropukliny tvořící pozadí snímku. Vlevo mikrosnímek horninové matrice (vzorek LTDE-SD2) a vpravo řez sestaveným mikro-CPM modelem s náhodně generovanou sítí mikropuklin.

5.3.1 Optimalizace hustoty mikropuklin

V rámci generování mikro-DFN sítě významnějších mikropuklin byl testován vliv parametru A mocninné funkce definující vztah mezi počtem puklin $n(L)$ a jejich velikostí L na výslednou hustotu mikropuklin v modelu:

$$n(L) = A \cdot L^{-3}.$$

Pro vybrané hodnoty parametru A jsou v Obr. 63 vykresleny řezy generovanými sítěmi, na kterých je patrný rozdíl v hustotě mikropuklin. Hodnocení výstupů bylo provedeno pouze zjednodušenou formou vizuálním porovnáním generovaných modelových sítí a skutečných mikropuklin na snímcích. Pro další modelové práce byly použity nižší hodnoty 0.1-0.2 parametru A , pro které modelová síť počtem mikropuklin lépe odpovídá mikrosnímškům.



Obr. 63 Řezy generovanými mikropuklinovými sítěmi pro různé hodnoty parametru A mocninné funkce. Nahoře řezy mikro-DFN modelem, dole modely převedené na mikro-CPM.

Tab. 24 Zadané variantní hodnoty transportních parametrů pozadových mikropuklin

Varianta	D_p (mm ² .s ⁻¹)	pórovitost (-)	K_d (m ³ .kg ⁻¹)
VAR_444	1,0E-4	1,0E-4	1,0E-4
VAR_446	1,0E-4	1,0E-4	1,0E-6
VAR_556	1,0E-5	1,0E-5	1,0E-6
VAR_638	1,0E-6	1,0E-3	1,0E-8

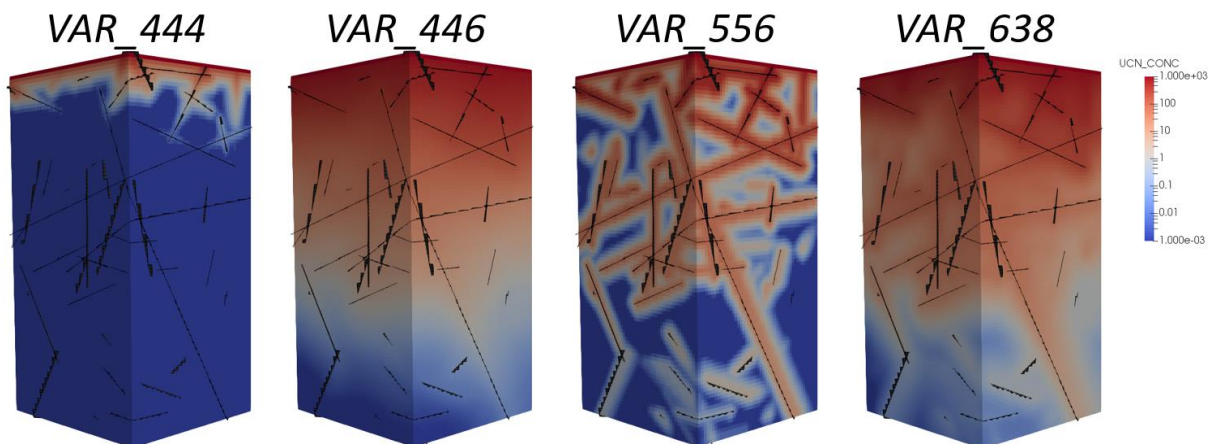
5.3.2 Vliv pozad'ových mikropuklin na výsledky transportu

Na úloze s jednotnou mikro-DFN sítí byl zkoumán vliv pozad'ových méně významných mikropuklin na průnik stopovače do horninové matrice. Transportní parametry významnějších mikropuklin byly zadány shodně pro všechny varianty úlohy:

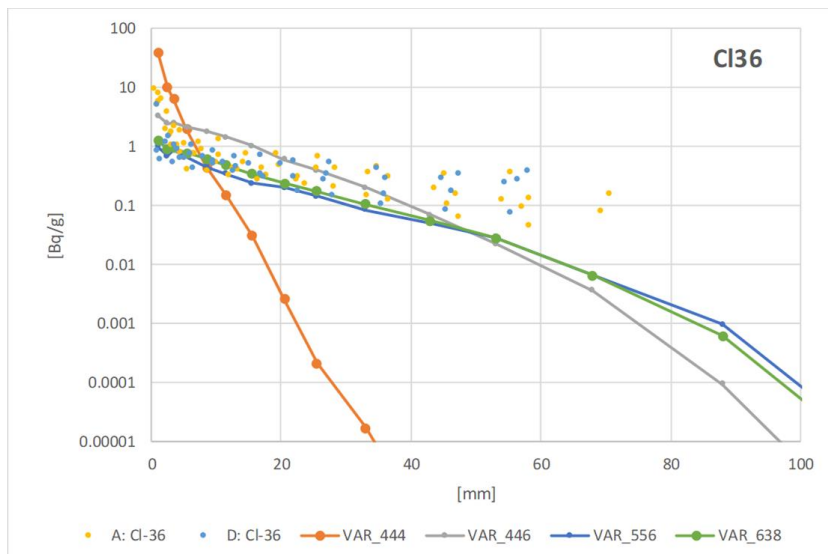
- pórový difuzní koeficient (D_p) na úrovni koeficientu ve volné vodě, tj. $1.2E-3 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$,
- pórovitost mikropuklin je přepočtena ze zadaného (generovaného) rozevření $0.1-0.3 \text{ } \mu\text{m}$,
- sorpce v mikropuklinách je zanedbatelná, tj. reprezentují preferenční cestu.

Transportní parametry menších mikropuklin na pozadí byly zadány variantně a jsou uvedeny v Tab. 24.

V Obr. 64 je vykresleno rozložení modelových aktivit pro jednotlivé kombinace transportních parametrů. V Obr. 65 je vykreslen průběh množství stopovače v závislosti na hloubce penetrace (pro porovnání jsou v grafu zobrazeny také měřené hodnoty CI-36 experimentu LTDE). Z grafu je patrný rozdílný průběh ve variantě VAR_444, která má zadanou nejvyšší hodnotu sorpčního koeficientu, viz průnik stopovače do malé hloubky na obrázku rozložení koncentrací. Zajímavý je relativně malý rozdíl ve velikosti penetrace pro zbylé 3 varianty, přestože např. VAR_556 má velmi odlišné rozložení aktivit v prostoru (kombinace vyššího sorpčního a difuzního koeficientu, ale nižší pórovitosti než ve variantě VAR_638).



Obr. 64 Variantní simulace průniku stopovače pro různá nastavení transportních parametrů menších mikropuklin na pozadí – prostorová distribuce aktivity ve 3D doméně.



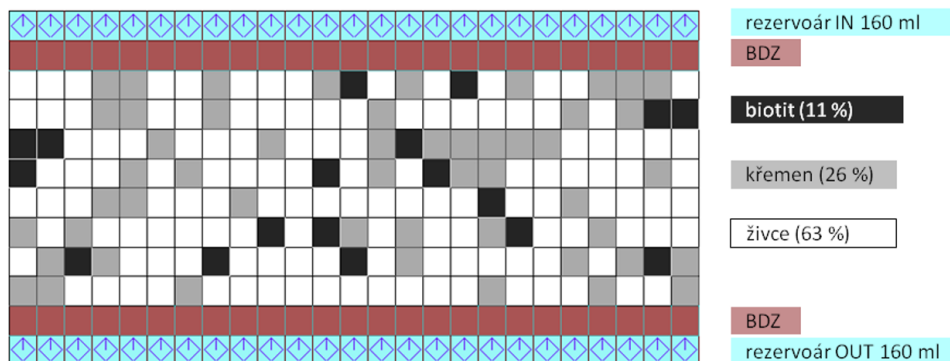
Obr. 65 Variantní simulace průniku stopovače pro různá nastavení transportních parametrů menších mikropuklin na pozadí – množství stopovače v řezech modelovou doménou.

5.3.3 Simulace difuze sorbujícího se stopovače

V rámci mikro-DFN modelování byla provedena simulace laboratorního měření difuzního koeficientu stopovače Cs-134 v difuzní cele pro vzorek Aarského granitu (měřeno v rámci experimentu LTDIII). Pro experiment LTDE (Task9B) nebyly k dispozici detailní výsledky měření difuzních koeficientů – průnikové křivky z difuzních cel – tato data jsou velmi cenná jako kalibrační údaj, především pro sorbující se stopovače, kdy lze ke kalibraci modelu použít průnikové křivky nejen z výstupní, ale i ze vstupní cely.

Simulace difuzního experimentu (jednorozměrná difuze skrz 1 cm široký disk horniny umístěný v difuzní cele) byla provedena pro mírně upravenou koncepci mikroměřítko horninové matrice, viz Obr. 66. Pro Aarský granit nebylo provedeno snímkování mikrostruktury metodou C14-PMMA, na druhou stranu byla k dispozici data z poměrného zastoupení minerálů spolu s výsledky měření sorpčních koeficientů pro jednotlivé minerály – byl pozorován významný podíl sorpce na biotit. Horninová matrice byla koncepčně rozdělena na 2 zóny:

- 1) BDZ na obou podstavkách vzorku,
- 2) náhodně generované rozložení hlavních minerálů „uvnitř“ vzorku.

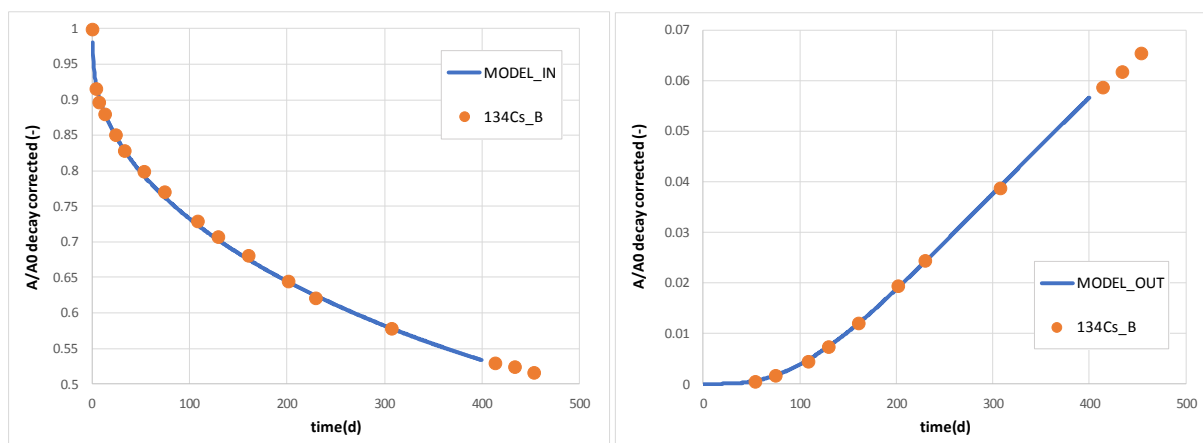


Obr. 66 Laboratorní difuzní experiment LTDIII – koncepce horninové matrice bez významných mikropuklin s rozdělením domény dle procentuálního zastoupení minerálů (Aarský granit)

V modelu nebyly zahrnuty preferenční mikro-DFN cesty (je otázkou, jakým způsobem a zda vůbec jsou u sorbentních stopovačů významné). Kalibrovalo bylo celkem 12 parametrů –

pórovitost, porézní difuzní koeficient a sorpční distribuční koeficient pro BDZ, biotit, křemen a živce. Průnikové křivky byly velmi přesně nafitovány, viz porovnání měřených a modelových křivek v grafu na Obr. 67. V Tab. 25 jsou uvedeny výsledné kalibrované hodnoty:

- v modelu byla shodně s měřením vyhodnocena nejvyšší hodnota sorpčního koeficientu u biotitu,
- zajímavé jsou velmi podobné hodnoty všech parametrů u BDZ a živců (u BDZ jsou hodnoty mírně vyšší) – vzhledem k dominantnímu zastoupení živců ve vzorku (63%) by to mohlo signalizovat, že velikost a vliv BDZ na transport v horninové matici nebude tak významný.



Obr. 67 Laboratorní difuzní experiment LTDIII – porovnání měřených průnikových křivek s výsledky kalibrovaného modelu (vlevo vstupní rezervoár, vpravo výstupní rezervoár difuzní cely)

Tab. 25 Laboratorní difuzní experiment LTDIII – kalibrované hodnoty transportních parametrů jednotlivých minerálů a BDZ vrstvy

	por [-]	D_p [$m^2 \cdot s^{-1}$]	K_p [$m^3 \cdot kg^{-1}$]
biotit	0.0026	1.76E-10	4.10E-2
křemen	0.0061	4.20E-10	9.58E-3
živce	0.0163	1.12E-9	2.41E-3
BDZ	0.0195	1.56E-9	3.34E-3

5.3.4 Simulace experimentu LTDE – vyhodnocení výsledků

Při finálním zpracování mikro-DFN modelu LTDE experimentu bylo realizováno celkem 2400 simulací s variantním zadáním transportních parametrů BDZ, mikropuklinové domény (významnější delší mikropukliny reprezentované DFN) a homogenní spojitě domény (kratší méně významné pukliny na pozadí snímku horninové matrice). Transportní parametry, tj. pórovitost, pórový difuzní koeficient a distribuční sorpční koeficient, byly pro jednotlivé varianty modelu voleny náhodně v předem zvolených mezích hodnot (meze byly zadány s přesahem do hodnot vyšších i nižších než reálně měřených – je nutné mít neustále na paměti, že se jedná o modelové zjednodušení mikroprostoru horninové matrice, pro které nejsou k dispozici detailní data takového charakteru, aby bylo možné model sestavit s větší mírou přesnosti –

neréálné hodnoty parametrů na úrovni mikroměřítká mohou v modelu nahrazovat např. složité propojení mikropuklin, vysokou variabilitu rozevření a výplní mikropuklin atd.). Celý modelový postup od zadání náhodně generovaných hodnot transportních parametrů, přes provedení výpočtu a export modelových výsledků variant byl zautomatizován pomocí skriptů v jazyce Python – simulace tak bylo možné realizovat paralelně na více počítačích.

Vyhodnocení simulace bylo provedeno formou grafického porovnání měřených a modelových dat pro řezy modelovou doménou a průnikové křivky ve zdrojovém rezervoáru. Nebyla provedena klasická kalibrace modelu, kdy jsou postupně zpřesňovány parametry modelu (tento postup by byl extrémně časově náročný, celkem by bylo potřeba kalibrovat 9 parametrů pro každý ze tří stopovačů CI-36, Na-22 a Cs-137), ale byl použit postup, kdy ze všech simulovaných variant byly vybrány jen ty kombinace modelových parametrů, pro které modelové výsledky odpovídají měření.

Hodnoty kalibrovaných parametrů jsou pro jednotlivé stopovače shrnuty v Tab. 26 až Tab. 29 (hodnota ID označuje číslo modelu pro propojení parametrů s výsledky modelu), v grafech na Obr. 68 až Obr. 70 je vykresleno porovnání měřených dat a modelových výsledků. Hodnoty parametrů u jednotlivých stopovačů a jednotlivých domén mají relativně velký rozptyl – důležitá je proto vzájemná kombinace všech parametrů. Na kalibrovaných parametrech jednotlivých domén lze pozorovat jisté trendy, jednoznačné zhodnocení výsledků mikro-DFN modelů ale není úplně jednoduché:

- Obecně jsou na kalibrovaných datech patrné relativně nízké hodnoty pórovitosti (u některých variant i o několik řádů nižší než měřené) – podobný závěr (nízké modelové hodnoty pórovitosti) byl nicméně zjištěn i u simulací Task9D (kapitola 7.5).
- Naopak byly většinou kalibrovány poměrně vysoké hodnoty pórového difuzního koeficientu D_p (v některých případech dokonce vyšší než difuzní koeficient ve volné vodě) – toto chování modelu by vyžadovalo hlubší analýzu. Např. kombinace vyššího D_p a nízké pórovitosti u BDZ může souviset s diskretizací modelu, kdy je předpokládána BDZ do vzdálenosti 1 mm – zmíněná kombinace by pak nasvědčoval na výrazně nižší mocnost BDZ.
- Výsledky modelu potvrdily zanedbatelné hodnoty distribučního koeficientu K_d u CI-36 a výrazně vyšší význam sorpce u Cs-137.
- Poměrně velkým problémem, který ovlivnil směřování mikro-DFN modelování v rámci řešení Task9B, byl vývoj ohledně měřených dat Cs-137 – původní data vykazovala silné preferenční chování tohoto stopovače (nízké aktivity se měly dostat do relativně velké vzdálenosti) – vysvětlení tohoto chování byla jedna z hlavních motivací, proč bylo použito mikro-DFN modelování s možností zachytit heterogenitu horninové matrice. Po několika letech byla nicméně měřená data Cs-137 revidována a bylo vydáno doporučení, že měřené hodnoty pod 1 Bq/g (právě tyto hodnoty byly naměřeny v hlubších částech vzorků) nejsou reprezentativní. Naměřené výsledky u všech stopovačů tak mají relativně dobře predikovatelný průběh, který by zřejmě bylo možné dobře postihnout i jednodušším modelem založeným čistě na konceptu CPM.
- U stopovače Na-22 nebylo možné najít optimální kombinaci parametrů, pro kterou by byly současně nafitovány jak aktivity v řezech, tak aktivity ve zdroji – problém je velmi pravděpodobně v chybných datech, kde nesedí celková bilance stopovače v experimentu – po extrapolaci naměřených aktivit v jednotlivých řezech do celého zasaženého objemu horniny je aktivita Na-22 v hornině výrazně nižší než úbytek aktivity ve zdroji.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

- Z pohledu získání přesnějších výsledků a hodnocení by bylo vhodné zahrnout do celého procesu také simulace laboratorního stanovení difuzních koeficientů na vzorcích (např. kalibrace měření v difuzních celách) – pro tyto modely ale nebyly ze strany SKB k dispozici žádná data (pouze vyhodnocené parametry, což je pro model nedostačující).

Míra dosažené shody je srovnatelná s výsledky v kapitolách 4.3 a 4.4 pomocí modelu nehomogenního kontinua z několika subdomén. Přímé porovnání ale nebylo účelné, vzhledem jiným vybraným případům a jiné interpretaci nejnižších koncentrací v měřených datech.

Tab. 26 CI-36 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu

ID	porosity [-]			D_p [m ² .s ⁻¹]			K_d [m ³ .kg ⁻¹]		
	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX
#593	1.6E-3	2.9E-5	1.6E-7	4.8E-12	3.9E-8	4.3E-11	1.6E-8	1.8E-8	2.4E-2
#1533	2.8E-5	7.8E-4	1.1E-7	8.3E-8	3.6E-11	1.0E-6	3.0E-6	1.7E-7	1.4E-8
#876	2.1E-7	2.0E-3	6.3E-3	7.7E-9	1.7E-12	3.8E-8	1.2E-7	2.7E-7	7.5E-8

Tab. 27 Na-22 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu pro řezy modelovou doménou

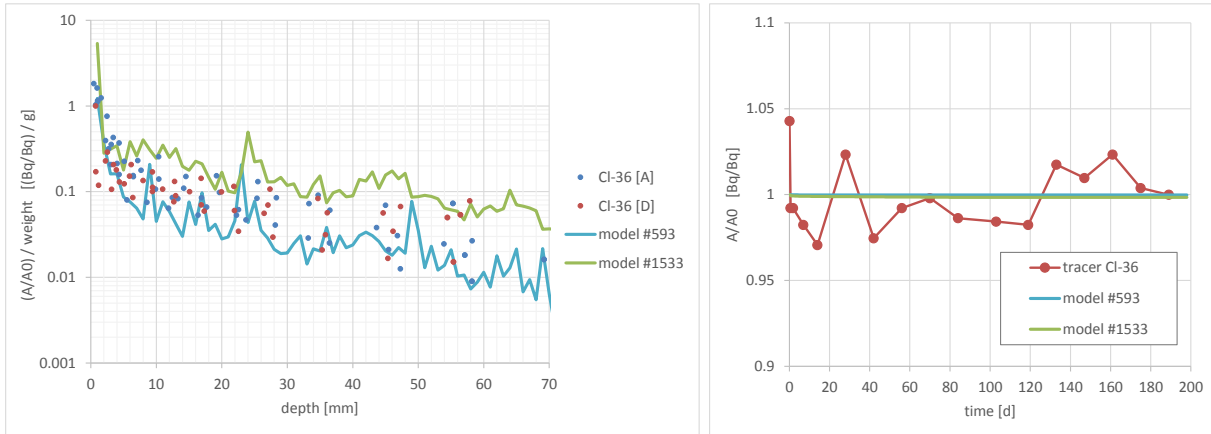
ID	porosity [-]			D_p [m ² .s ⁻¹]			K_d [m ³ .kg ⁻¹]		
	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX
#959	1.1E-5	2.2E-8	5.0E-4	3.4E-9	4.8E-6	5.1E-6	4.8E-4	5.2E-7	5.8E-5
#22	1.5E-6	5.7E-2	6.1E-6	7.9E-9	2.9E-8	3.1E-11	1.9E-5	4.7E-5	3.4E-3
#545	2.3E-8	1.2E-2	5.6E-2	3.2E-7	9.5E-11	1.0E-7	3.2E-4	5.5E-2	2.7E-7
#1065	2.2E-7	5.1E-7	2.5E-5	5.3E-8	1.4E-9	8.6E-6	1.5E-4	3.6E-2	9.6E-6
#1925	3.3E-3	1.3E-4	3.6E-6	3.8E-9	6.5E-12	7.1E-7	2.4E-5	9.6E-4	4.5E-8

Tab. 28 Na-22 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu pro průnikovou křivku ve vstupním rezervoáru

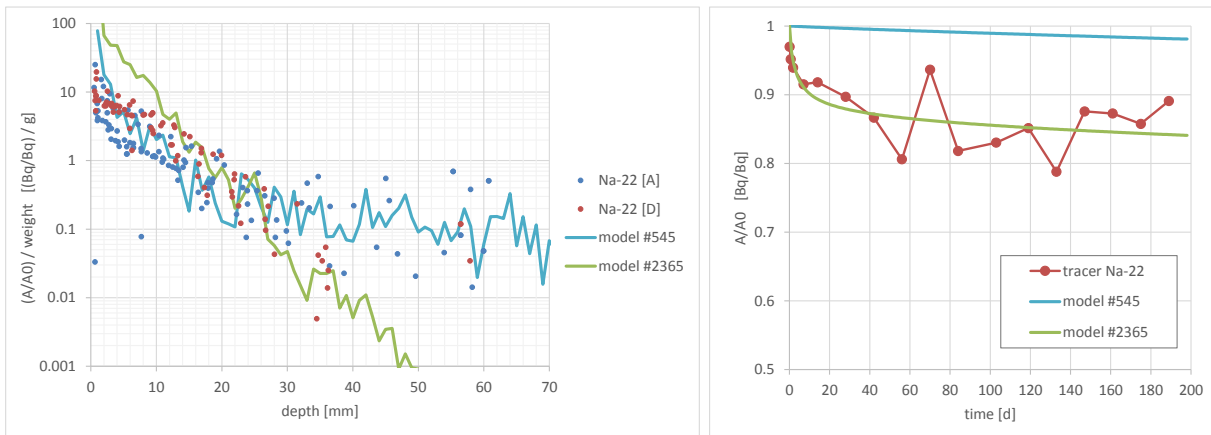
ID	porosity [-]			D_p [m ² .s ⁻¹]			K_d [m ³ .kg ⁻¹]		
	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX
#640	3.5E-5	1.7E-4	7.3E-4	1.9E-7	2.4E-10	3.0E-10	3.7E-4	5.5E-5	2.9E-6
#2365	4.0E-2	6.1E-7	1.0E-3	1.3E-10	1.7E-7	4.1E-10	5.3E-4	1.9E-4	7.7E-8
#985	2.5E-7	6.8E-5	5.0E-3	7.1E-6	8.2E-11	5.7E-8	1.2E-3	1.5E-2	8.7E-8
#508	1.1E-5	3.1E-2	8.3E-5	1.2E-7	5.7E-11	1.1E-6	3.6E-4	8.0E-5	3.1E-8
#2359	2.2E-4	5.0E-7	1.0E-2	1.6E-9	1.7E-7	3.1E-8	2.7E-4	5.1E-4	1.7E-5

Tab. 29 Cs-137 – kalibrované transportní parametry mikro-DFN modelu

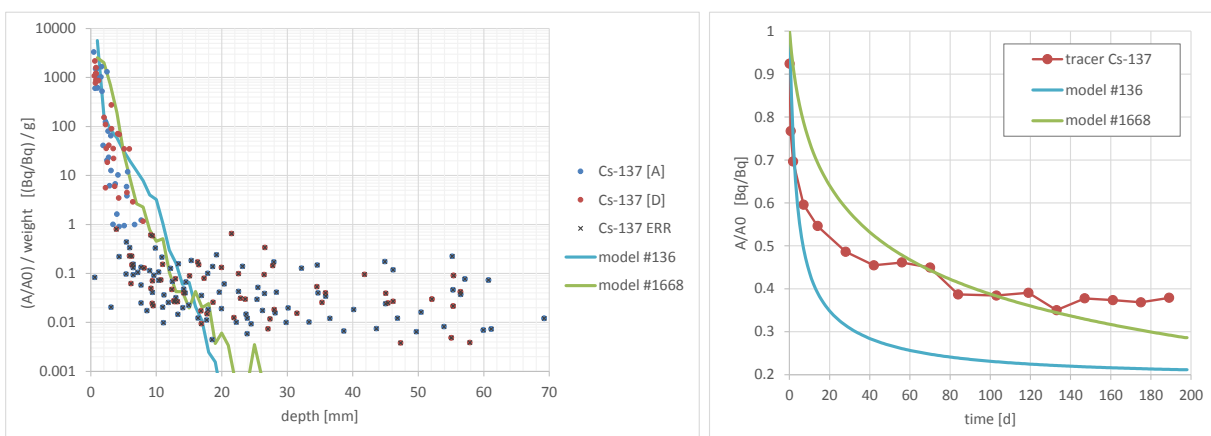
ID	porosity [-]			D_p [m ² .s ⁻¹]			K_d [m ³ .kg ⁻¹]		
	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX	BDZ	FRAC	MATRIX
#136	3.4E-6	3.8E-5	3.3E-3	3.1E-6	1.4E-10	3.9E-10	1.2E-2	2.0E-5	7.4E-4
#1668	3.7E-6	4.4E-6	9.6E-5	5.9E-7	2.6E-6	4.5E-9	8.3E-3	1.0E-1	1.3E-5
#2182	3.4E-2	5.1E-7	1.6E-2	5.0E-10	3.2E-10	6.6E-10	2.7E-3	5.3E-2	5.2E-3



Obr. 68 Cl-36 – porovnání měřených dat a modelových výsledků – vlevo řezy vzorkem a modelovou doménou, vpravo průběh aktivity ve zdrojovém rezervoáru



Obr. 69 Na-22 – porovnání měřených dat a modelových výsledků – vlevo řezy vzorkem a modelovou doménou, vpravo průběh aktivity ve zdrojovém rezervoáru



Obr. 70 Cs-137 – porovnání měřených dat a modelových výsledků – vlevo řezy vzorkem a modelovou doménou, vpravo průběh aktivity ve zdrojovém rezervoáru

6 Řešení úlohy TDE (Task 9C)

Tato podúloha je zaměřena na prediktivní modelování probíhajícího in-situ difúzního experimentu (TDE, Through Diffusion Experiment), který je součástí projektu REPRO realizovaného společností POSIVA v Onkalo v Olkiluoto ve Finsku.

Formálně byla obsahem 9C jen predikce, ale po uzavření etapy řešení a odevzdání výsledků modelů jednotlivých řešitelů, a jejich zveřejnění na schůzkách projektu, byla uvolněna data experimentu (ten reálně běžel v době zpracování modelů a pokračuje i v době zpracování této zprávy). Součástí zprávy je jednak následné vyhodnocení shody a rozdílů mezi modely a měřeními, jednak je nad rámec zadání Task 9 GWFTS (ale v souladu s jeho obecným zaměřením) provedena kalibrace modelu (inverzní model). Řešitelské týmy se jednotlivých částí zúčastnily v různé míře, což se promítá do struktury podkapitol a prezentovaných porovnáání.

6.1 Shrnutí zadání a dat

Experiment TDE byl zahájen v listopadu roku 2015. Informace pro potřeby modelového řešení v rámci GWFTS jsou uvedeny v zadání Tasku (Löfgren et al. 2017), níže citovaná čísla tabulek a obrázků ve formátu s pomlčkou jsou v rámci tohoto dokumentu. Experiment probíhá mezi třemi paralelními subhorizontálními vrty uspořádanými do pravoúhlého trojúhelníka (Obr. 71 – č. 324, 326 a 327, celé označení je ONK-PP324 atd.). Vrt 326 slouží jako injektážní a zbylé dva jako monitorovací. Geometrie experimentu je motivována snahou postihnout migraci stopovače ve směru kolmém i rovnoběžném ve vztahu k foliaci horniny. Poloměr vrtů 28,25 mm je jednotný.

V rámci vrtů jsou otevřeny úseky délky 1 m, příčná vzdálenost je 10-15 cm mezi stěnami vrtů a vzájemný rozdíl lícování úseků mezi vrty ve směru osy je v jednotkách až prvních desítkách centimetrů (Tab. 30). Otevřené úseky jsou ve vzdálenosti 11-12 m od stěny tunelu a vedle nich jsou dalšími pakry oddělené tzv. ochranné sekce (guard section), vnitřní a vnější navzájem propojené, snižující hydraulický gradient v okolí experimentu. Úseky pakrů jsou propojeny s aparaturou v podzemní laboratoři cirkulačním systémem s dokumentovanými objemy jeho jednotlivých částí (Tab. 31). Je používáno zařízení prezentované v rámci experimentu WPDE, tj. výplň prostoru vrtu válcem a průtok roztoku štěrbinou mezi válcem a stěnou vrtu.

Injektován byl tzv. „koktejl“ obsahující následující stopovače: HTO, Na-22, Cl-36, Ba-133 a Cs-134. Jsou sledovány jak klesající koncentrace v injektážním vrtu 326 tak i nárůst koncentrací ve vrtech monitorovacích 324 a 327. Koncentrace jsou měřeny jednak online detekcí celkové gama aktivity uvnitř vrtů a jednak na základě odebíraných vzorků dokumentovaného objemu, které jsou během experimentu nahrazeny syntetickou podzemní vodou stejného objemu bez stopovače. V tabulce 3-1 v zadání (Löfgren et al. 2017) jsou uvedeny celkové injektované aktivity a metody detekce.

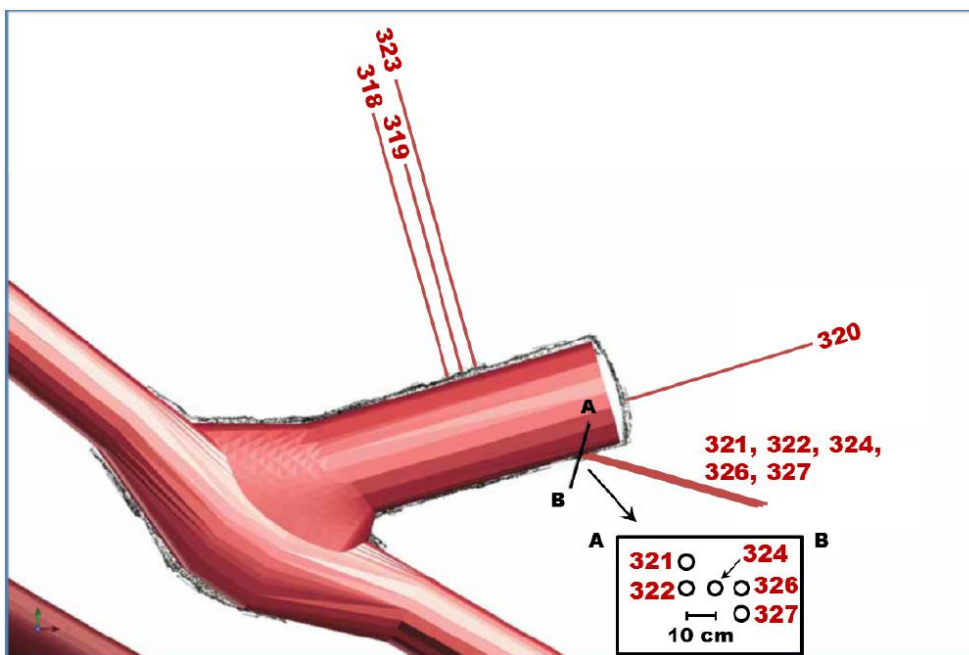
Cílem modelování je predikovat průběhy aktivity resp. koncentrací ve vrtech v periodě 10 let, i když průnik silněji sorbujících stopovačů se nepředpokládá. Model měl zahrnovat plnou bilanci stopovačů v jednotlivých formách v hornině i jednotlivých částech experimentální aparatury. Vyhodnocovány měly být aktivity korigované o rozpad, tj. koncentrace odpovídající konzervativnímu stopovači, tímto způsobem jsou zpracovány i níže prezentované výsledky.

Parametry pro model (Tab. 32) jsou nastaveny společně v případě údajů čerpaných ze zadání (Löfgren et al. 2017): porozita na základě tabulky 5-4 jako průměr z 13 vzorků

z experimentálních úseků vrtů, efektivní difúzní koeficient tricia z tabulky 5-5 jako průměr ze 3 vzorků a sorpční koeficient pro Na-22 a Ba-133 z tabulky 5-8 (hodnota pro horninu VGN). V zadání chyběly efektivní difuzivity pro sodík a bariem, které byly převzaty ze zadávací dokumentace Tasku 9A (experiment realizovaný ve stejné hornině). Dále pak jsou použité parametry pro Cs-134 převzaty z dat experimentu LTD-III (Havlová et al. 2016). Rozdílne byla interpretována data pro Cl-36, buď s uvažováním aniontové exkluze (TUL, ÚJV) dle dat 9A, nebo s referenční porozitou (FJFI).

Technické údaje experimentu v zadání byly v průběhu řešení revidovány. Modely byly následně upraveny. Prezentovaná data v této zprávě odpovídají finální verzi a mohou se tedy lišit od prezentovaných na kontrolních dnech a v průběžných zprávách. Hlavní změny vstupních parametrů jsou součástí Tab. 30 a Tab. 31.

V měření byly některé problematické aspekty – problémy s cirkulací v PP324 vynutily proplach vrtu a reinstalaci hadiček, což vede na nejednoznačnou interpretaci příchodu HTO: kontinuální nárůst začíná až po čase 1000 dní ale kvalitativně je možné považovat za první příchod HTO už čas kolem 300 dní, ovšem bez realistických hodnot koncentrací.



Obr. 71 Schéma sestavy vrtů v místě a okolí experimentu TDE – injekční vrt má číslo 326 a monitorovací vrty jsou 324 a 327 (převzato z Löfgren et al. 2017).

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Tab. 30 Task 9C – souřadnice středů otevřených úseků vrtů a vzájemná vzdálenost vrtů

Vrt	X [m]	Y [m]	Z [m]	Vzdálenost od ONK-PP326 [m]		
				střed-střed Původní verze zadání	stěna-stěna Původní verze zadání	stěna-stěna Revize zadání 11/2018
ONK-PP324	0,43	0,48	-0,31	0,2665	0,153	0,15
ONK-PP326	0,34	0,23	-0,29			
ONK-PP327	0,33	0,27	-0,45	0,1652	0,119	0,115

Tab. 31 Task 9C – objemy roztoků ve vrtech včetně přívodních hadiček (detailní rozlišení jednotlivých příspěvků k celkovému objemu jsou součástí zadávací dokumentace Löfgren et al. 2017).

Vrt	Objem roztoku ve vrtu [ml]	
	Původní zadání	Revize 11/2018
ONK-PP324	268	291
ONK-PP326	252	290
ONK-PP327	268	313

Tab. 32 Modelové transportní parametry použitých stopovačů.

	$\varepsilon(-)$	$K_d (m^3.kg^{-1})$	$D_e (m^2.s^{-1})$	$D_w (m^2.s^{-1})$
H-3	0,0094	0	3,90E-13	2,30E-09
Na-22	0,0094	0,0013	4,65E-13	1,33E-09
Cl-36 (TUL, ÚJV)	0,000175	0	5e-13	2,03E-09
Cl-36 (FJFI)	0,0094	0	3,40E-13	2,03E-09
Ba-133	0,0094	0,060	1,47E-13	1,69E-09
Cs-134	0,0094	0,031	3e-13	2,07E-09

6.2 Realizace modelů

6.2.1 Řešení pomocí Flow123d

Jedná se o ad hoc vytvořený bilanční model s Flow123d ve svém jádru. Model sleduje koncentrace ve vrtech, které jsou následně využívány jako okrajové podmínky simulace transportu ve Flow123d. Vstupem modelu jsou injektované aktivity (respektive hmotnosti) jednotlivých stopovačů spolu s objemy roztoků (efektivní části experimentální sekce spolu s přívody) v každém z vrtů. Model spouští Flow123d s daným časovým krokem, vyhodnocuje hmotnostní bilanci (výstup Flow123d) a přepočítává koncentrace ve vrtech. Zároveň nastavuje

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

poslední známé rozložení koncentrace v horninové matici jako počáteční podmínky pro další krok výpočtu. Model dále obsahuje přípravu na simulaci odběru vzorků.

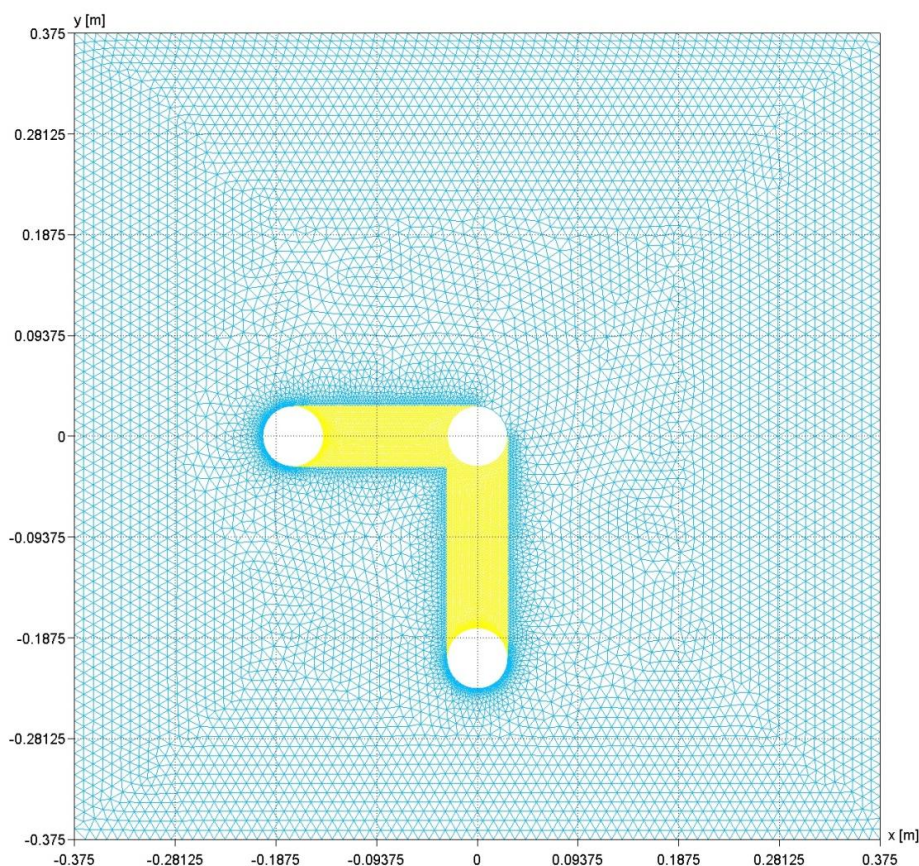
Ve Flow123d je simulována difuze (migrační proces) a lineární sorpce (retardační proces). Advekce je uvažována jen v rámci testovacích výpočtů (viz kapitola 6.4).

V rámci přípravy modelu bylo přistoupeno k některým zjednodušením:

- Horninová matrice je simulována jako homogenní. Případné do modelu zanesené heterogenity musí mít oporu v datech, tj. jsou uvažovány až v inverzním modelu.
- Nejsou uvažovány experimentální artefakty (např. úniky koncentrace během experimentu). Přítomnost těchto artefaktů je známa, leč zatím nedostatečně zdokumentována. Jejich vynechání ze stávajících simulací bylo provedeno na doporučení zadavatelů tasku.
- Zanedbáno vzorkování.
- Geometrie modelu (a tedy i výpočetní síť je jen 2D). Toto zjednodušení bylo přijato v zájmu umenšení výpočetní náročnosti.
- Nulový hmotnostní tok jako okrajová podmínka transportu předepsaná na vnější hranici simulované domény. Tato okrajová podmínka je nutně nesprávná, jelikož modelová doména je konečná a její okraje nejsou výrazně vzdáleny od experimentální sekce. Alternativou by bylo předepsat na hranici nulovou koncentraci, což arci není o nic správnější. Řešením by bylo rozšířit modelovou doménu, čímž by se vliv okrajové podmínky umenšil (za cenu zvýšených výpočetních nároků).
- Předpoklad ideálního mísení stopovačů v roztocích.
- Zanedbán tlakový gradient a spolu s ním i advektivní transport. Mezi jednotlivými vrty byl v průběhu experimentu měřen rozdíl tlaků. Vliv tlakového spádu na výsledky modelu byl testován samostatně (viz dále).

Geometrie modelu je dána polohou tří vrtů dle Tab. 30. Pro 2D geometrii je irelevantní, v jaké hloubce jednotlivých vrtů se nacházejí experimentální sekce, u případného 3D modelu by k tomu bylo třeba přihlížet.

Výpočetní oblast byla diskretizována trojúhelníkovými elementy s lokálním zjemněním v okolí vrtů (0,25 mm) a na jejich spojnicích (2,5 mm), v rámci zbytku oblasti s krokem 10 mm. Výsledná výpočetní síť se skládá z 39 325 elementů (Obr. 72).



Obr. 72 Task 9C – Flow123d – výpočetní síť modelu

Naším cílem bylo simulovat transport, kdy jedinou hnací silou šíření koncentrace je molekulární difúze. Parametry modelu proudění byly proto nastaveny tak, aby byly minimalizovány gradienty tlaků a tedy i rychlosti proudění. Hydraulická vodivost horninové matrice je v celé oblasti konstantní $K = 2,8731 \cdot 10^{-12}$ m/s (dopočteno z průměrné permeability $k = 3,825 \cdot 10^{-19}$ m²). Jako okrajová podmínka na okraji injektážního vrtu je předepsána nulová piezometrická výška, na zbylých hranicích modelu je použita homogenní Neumanova okrajová podmínka (nulový tok). Parametry modelu transportu jsou shrnuty v Tab. 32.

Okrajové podmínky transportu jsou na obvodech vrtů dány koncentrací stopovačů v roztoku (mění se v čase). Na vnější hranici modelu je předepsána homogenní Neumanova okrajová podmínka. Počáteční objemy roztoků v jednotlivých vrtech jsou uvedeny v Tab. 31 (varianta před revizí). Objemy roztoků se v průběhu experimentu mění vlivem vzorkování. To nicméně v úvodní simulaci a porovnání není zahrnuto a je použito v inverzním modelu.

Celková simulační perioda byla dle požadavků zadavatelů tasku nastavena na 10 let. Vnitřní krok bilančního modelu byl různý pro různé stopovače (0,1 roku pro HTO, 0,01 roku pro Na-22 a Cl-36 a 0,005 roku pro Ba-133 a Cs-134). Silněji sorbující stopovače potřebovali kratší časový krok, aby se zabránilo oscilacím (dáno mezí stability explicitní metody). Ve Flow123d byla pro výpočet transportu v jednotlivých krocích použita nespojitá Galerkinova metoda (implicitní v čase).

Výsledky simulací jsou uvedeny v kapitole 6.3 v rámci srovnání výsledků jednotlivých řešitelů.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

6.2.2 Řešení pomocí Goldsim (ÚJV)

Předmětem experimentu v prvotní fázi řešení byla simulace transportu radionuklidů H-3, Na-22, Cl-36, Ba-133, Cs-134 od vymezeného úseku v injekčním vrtu k vymezenému úseku na každém ze dvou monitorovacích vrtů. Byly uvažovány následující předpoklady:

1. Zanedbání neustálých tlakových poměrů ve vymezených úsecích vrtů,
2. Zanedbání změny aktivity radionuklidů ve vrtech vlivem vzorkování (odběr určitého množství vody o dané aktivitě, následné nahrazení tohoto objemu vodou bez stopovače),
3. Zanedbání radioaktivního rozpadu.

Vlivem těchto předpokladů je tedy simulován transport difúzí, kdy průnik radionuklidů horninovým prostředím je retardován jejich sorpcí na horninovou matici.

Při řešení úlohy Task 9C byl použit program GoldSim (komerční licence, verze 12.0), v rámci něho byla zvolena komponenta „Cell pathway“. Použití komponenty „Cell pathway“ představuje tzv. konečně objemový přístup, kdy modelová oblast je reprezentována sítí vzájemně propojených cel (*Cell net*). Hmotnost radionuklidu v jedné cele se může změnit jak difúzním a/nebo advekčním transportem mezi sousedními celami, tak radioaktivním rozpadem samotného radionuklidu, popřípadě i mateřského radionuklidu obsaženého uvnitř cely. Řídící rovnice pro komponentu „Cell pathway“ byly popsány v průběžné zprávě (Hokr et al. 2015) při řešení úlohy Task 9A.

Z výsledků porovnání mezi dvěma variantami 1D radiálního modelu (Průběžná zpráva Hokr et al., 2017) bylo patrné, že přítomnost (pozice) monitorovacího vrtu ovlivňuje ve všech případech vývoj aktivity v injekčním vrtu. Ve variantě 1 je navíc vidět ovlivnění aktivity v monitorovacích vrtech pozicí okrajové podmínky $c = 0$, která je v nedostatečné vzdálenosti. Pro další řešení byla použita nová podoba modelu.

Úloha je řešena jako 2D, diskretizace modelové oblasti byla řešena zvlášť pro nesorbující se radionuklidy (H-3, Cl-36) a zvlášť pro silně se sorbující radionuklidy (Ba-133, Cs-134). V případě simulace transportu Na-22 by nebylo potřeba tak detailní diskretizace jako v případě silně se sorbujících radionuklidů, na druhou stranu míra diskretizace použitá pro nesorbující se radionuklidy byla nedostatečná. Diskretizace u silně se sorbujících radionuklidů má zásadní vliv na modelové výsledky, při zachování transportních parametrů jsou získávány v případě nedostatečně detailní diskretizace různé výsledky pro různé diskretizace modelové oblasti. Z toho důvodu byla volbě diskretizace věnována velká pozornost.

Pro nesorbující se radionuklidy byly testovány dvě diskretizace s rozdílným dělením mezi injekčním (IV) a monitorovacím (MV) vrtem (10 resp. 20 dílů mezi IV a MV), výsledky jsou pro oba případy velmi obdobné. Modelová oblast se skládá z 37 buněk ve směru osy x a 37 buněk ve směru osy y, celkem je v modelu 1369 buněk. Pro silně se sorbující nuklidy byla hledána vhodná diskretizace tak dlouho, aby bylo výsledné šíření nuklidů v modelové oblasti závislé pouze na změně modelových parametrů. V případě silně se sorbujících nuklidů neobsahuje modelová oblast monitorovací vrt z důvodu transportu sledovaných nuklidů na výrazně kratší vzdálenost, než která je mezi injekčním a monitorovacím vrtem. Geometrie modelové oblasti pro nesorbující se radionuklidy je uvedena na Obr. 73 a Obr. 74, pro nesorbující je pak na Obr. 75 a Obr. 76, tabulárně pak v Tab. 33 až Tab. 35. Pro silně se sorbující nuklidy byly testovány dvě diskretizace modelové oblasti, rovnoměrná a nerovnoměrná. Rovnoměrná se skládá ze 41 buněk ve směru osy x a 41 buněk ve směru osy y, celkem je v modelu 1681

buněk, nerovnoměrná se skládá ze 51 buněk ve směru osy x a 51 buněk ve směru osy y, celkem je v modelu 2601 buněk.

Jako okrajová podmínka na vnějších stranách modelové oblasti je nulový tok radionuklidů přes hranici, z toho důvodu je pro nesorbující se radionuklidy zvolena oblast zasahující výrazně za monitorovací vrt. Na vnější hranici modelové oblasti jsou ve všech modelech přítomny kontrolní vrty, ve kterých je sledován nárůst aktivity radionuklidů pro potvrzení platnosti zvolené krajové podmínky.

Injekční a případný monitorovací vrt jsou simulovány jako čtvercové oblasti o velikosti 4,44 x 4,44 cm a délce 100 cm, rozměry kruhového vrtu o průměru 5,65 cm byly přepočítány na zmíněné rozměry čtvercového vrtu s ohledem na zachování stejné velikosti plochy, přes kterou dochází k difúzi, jako je tomu u kruhového vrtu.

Tab. 33 Diskretizace modelové oblasti pro nesorbující se nuklidy, údaje jsou v cm

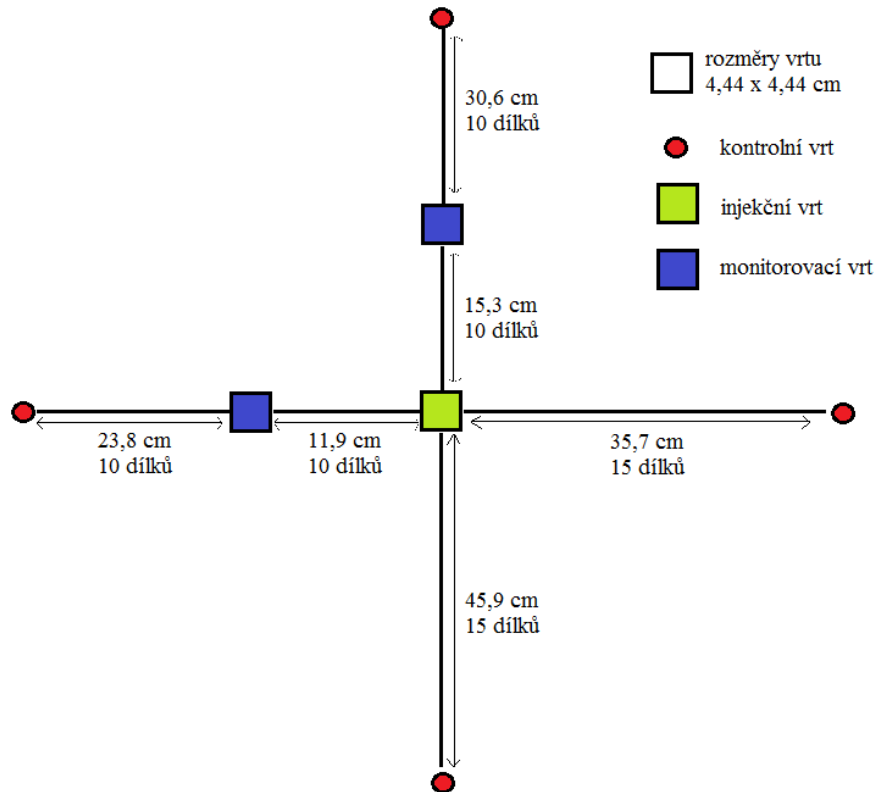
Nesorbující se nuklidy				
Název modelu	Krok ve směru x mezi IV - MV	Krok ve směru y mezi IV - MV	Délka oblasti ve směru x	Délka oblasti ve směru y
Diskretizace hrubší	1,19	1,53	80,28	100,68
Diskretizace jemnější	0,595	0,765	80,28	100,68

Tab. 34 Rovnoměrná diskretizace modelové oblasti pro sorbující se nuklidy, údaje jsou v cm

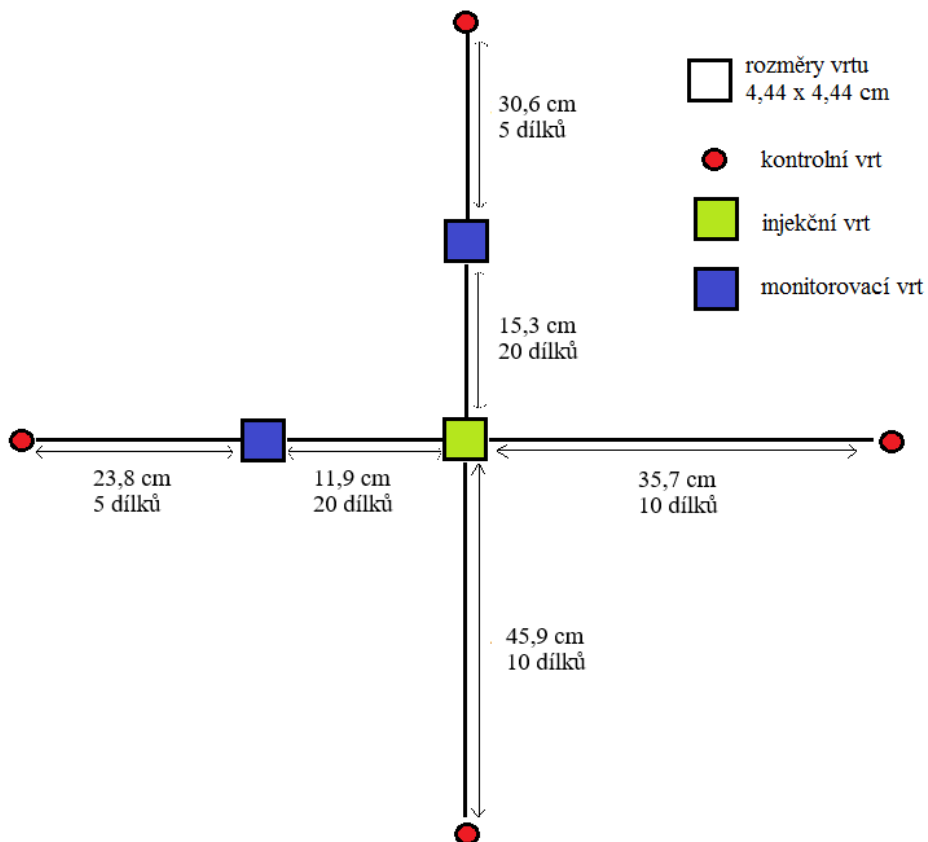
Sorbující se nuklidy				
Název modelu	Krok ve směru x	Krok ve směru y	Délka oblasti ve směru x	Délka oblasti ve směru y
Diskretizace hrubší	0,595	0,595	28,24	28,24
Diskretizace jemnější	0,2975	0,2975	16,34	16,34
Diskretizace nejjemnější	0,149	0,149	10,39	10,39

Tab. 35 Nerovnoměrná diskretizace modelové oblasti pro sorbující se nuklidy, údaje jsou v cm

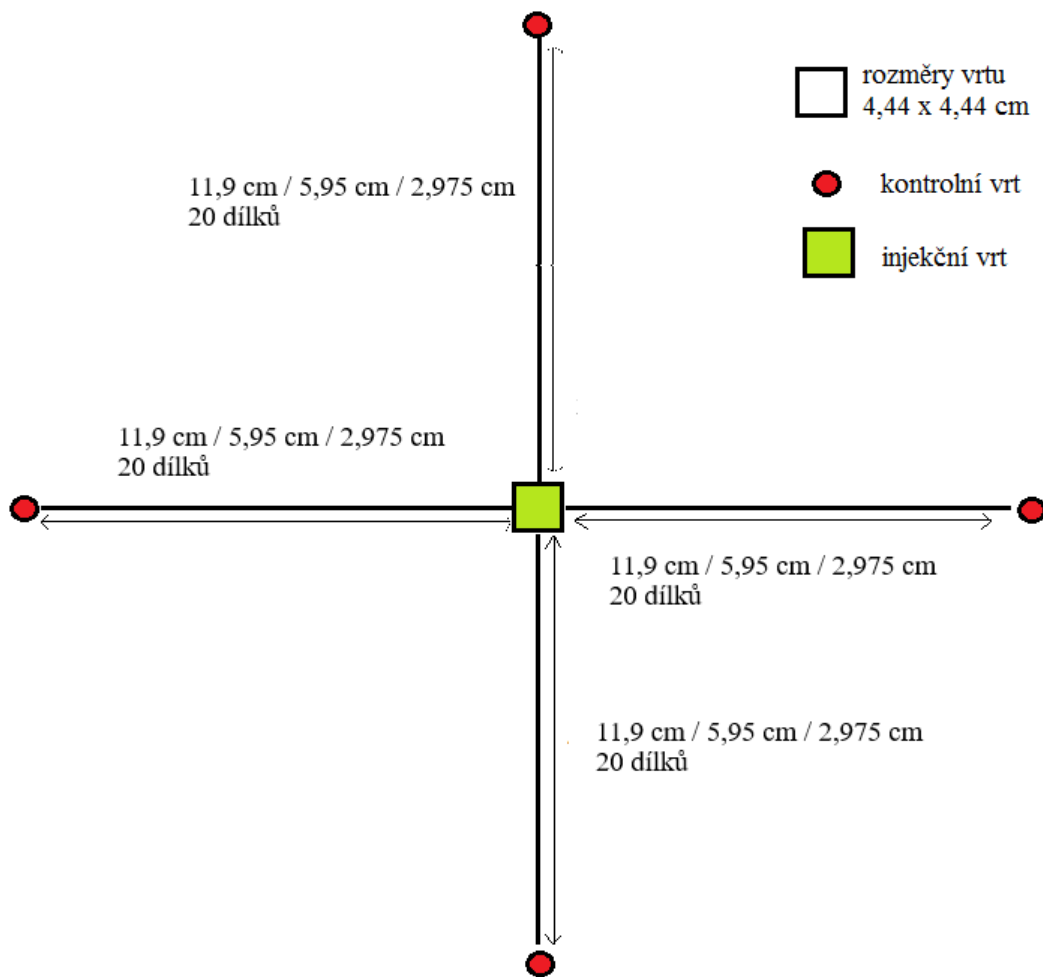
Sorbující se nuklidy				
Název modelu	Krok ve směru x	Krok ve směru y	Délka oblasti ve směru x	Délka oblasti ve směru y
Diskretizace nerovnoměrná_1	0,01/0,02/0,05/0, 1/0,2	0,01/0,02/0,05/0, 1/0,2	8,24	8,24
Diskretizace nerovnoměrná_2	0,01/0,04/0,08/0, 16/0,32	0,01/0,04/0,08/0, 16/0,32	10,54	10,54



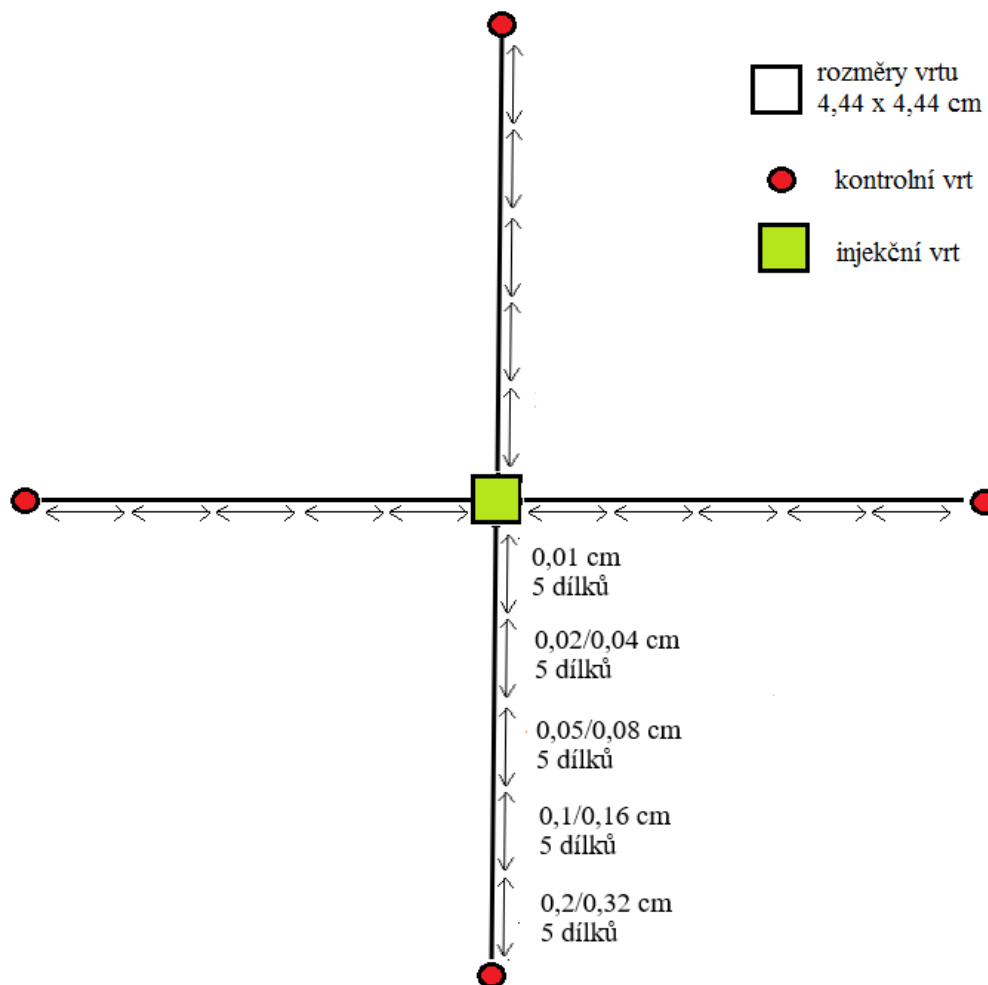
Obr. 73 Znáornění diskretizace pro nesorbující se nuklidy, hrubší dělení modelové oblasti mezi monitorovacím a injekčním vrtem.



Obr. 74 Znáornění diskretizace pro nesorbující se nuklidy, detailnější dělení modelové oblasti mezi monitorovacím a injekčním vrtem.



Obr. 75 Znáornění rovnoměrné diskretizace pro sorbující se nuklidy, velikost a diskretizace modelové oblasti byla dělána ve třech variantách.



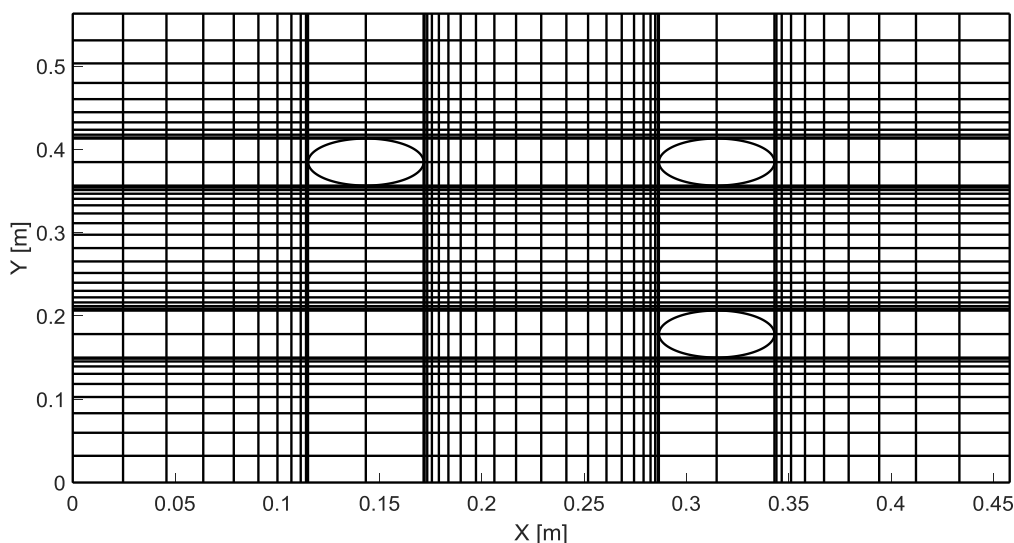
Obr. 76 Znáornění nerovnoměrné diskretizace pro sorbující se nuklidy, diskretizace modelové oblasti byla dělána ve dvou variantách, diskretizace ve směru osy x je shodná jako diskretizace ve směru osy y .

Po zkušenostech s úlohou Task 9A nebyla použita frakce porozity, která předpokládá, že ne všechny póry jsou dostupné pro transport kontaminantu, vzhledem k faktu, že výsledky ÚJV poté nebyly vzájemně porovnatelné s výsledky ostatních řešitelských skupin. V úloze Task 9C byla zvolena pouze jiná porozita pro CI-36, obdobně jako tomu bylo při řešení úlohy Task 9A. Použité modelové parametry jsou uvedeny v Tab. 32 a komentovány v úvodu (sekce 6.1).

Výsledky vyhodnocení vlivu diskretizace jsou prezentovány jako součást porovnání s ostatními modely (kapitola 6.3).

6.2.3 Řešení FJFI (varianta Goldsim a analytické)

Na FJFI byl nejdříve vytvořen model, který reprezentoval vrtý a okolní horninu pomocí planární sítě elementů *Cell*. Schéma sítě je zobrazeno na Obr. 77. Síť byla navržena tak, aby umožnila simulaci pěti radionuklidů s hodnotami K_d z intervalu $K_d = [0,1 \cdot 10^{-3}]$ [$\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$]. Proto jsme zvolili neekvidistantní síť zjemněnou v okolí vrtů, kde se dá očekávat největší koncentrace sorbujících radionuklidů. Síť byla vygenerována automaticky, objemy a difúzní plochy elementů odpovídajících vrtům byly manuálně upraveny tak, aby odpovídaly cylindrickému tvaru vrtů.



Obr. 77 Planární 2D síť použitá v GoldSim pro úlohu 9C.

Model neumožňuje modelovat advektivní tok, který mohl vzniknout díky gradientům tlaků mezi vrty, které se mohly objevit během experimentu. Pro kontrolu byl vytvořen model s jemnější sítí. Z výsledků a porovnání mezi dvěma diskretizacemi bylo patrné, že radionuklidy H-3 a Cl-36 jsou schopny ve sledovaném časovém intervalu proniknout díky difúzi do pozorovacích vrtů. Naopak pro sorbující radionuklidy, zejména Ba-133, Cs-134, nedojde k průniku a zároveň výsledky transportu pro pozorovací vrt jsou citlivé na diskretizaci. Proto jsme navrhli jako alternativu pro sorbující radionuklidy použít 1D radiální model v okolí injektážního vrtu. Abychom odhadli při návrhu modelu poloměr domény, ve které je možné uvažovat 1D model v okolí injekčního vrtu, použili jsme analytické řešení problému difúzního transportu dutým válcem s okrajovými podmínkami definovanými uvnitř a na okraji pláště válce. Difúzní rovnici v radiální souřadnici r lze zapsat ve 1D tvaru

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rD \frac{\partial C}{\partial r} \right).$$

Pokud je na vnitřní ploše ($x=a$) udržovaná konstantní koncentrace $C_a > 0$, a na vnější ploše, ($r=b$), konstantní nulová koncentrace, $C_b = 0$, a pokud byla koncentrace uvnitř vrstvy na počátku ($t=0$) nulová, $C_0 = 0$, tak koncentraci ve vrstvě lze vyjádřit pomocí řady (Huank et al. 2002)

$$C(r, t) = C_a \left\{ -\frac{\ln\left(\frac{r}{b}\right)}{\ln\left(\frac{b}{a}\right)} + \pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2(b\alpha_n) [J_0(r\alpha_n)Y_0(a\alpha_n) - Y_0(r\alpha_n)J_0(a\alpha_n)]}{J_0^2(a\alpha_n) - J_0^2(b\alpha_n)} e^{-D\alpha_n^2 t} \right\},$$

kde J_0 je Besselova funkce prvního druhu, Y_0 je Besselova funkce druhého druhu a α_n jsou kořeny rovnice

$$J_0(a\alpha)Y_0(b\alpha) - J_0(b\alpha)Y_0(a\alpha) = 0.$$

Pro stacionární případ se jednorozměrná difúzní rovnice zjednoduší na

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{dC}{dr} \right) = 0.$$

Řešení rovnice pro uvažované okrajové podmínky má tvar

$$C(r) = -\frac{C_a \ln(r/b)}{\ln(b/a)}.$$

Tok vrstvou ve stacionárním případě má tvar

$$J_{\infty} = -D \frac{dC}{dr} = \frac{DC_a}{\ln\left(\frac{b}{a}\right)} \frac{1}{r}$$

Tok vnější plochou ($r = b$) je tedy

$$J_{\infty}^b = -D \left(\frac{dC}{dr} \right)_{r=b} = \frac{DC_a}{b \ln(b/a)}$$

Na základě porovnání analytického a numerického řešení jsme navrhli a implementovali jednotnou ne-ekvidistanční 1D radiální síť, kterou jsme použili pro všechny tři uvažované radionuklidy. Vzdálenosti elementů v intervalu délky 115 mm počínaje poloměrem 28,25 mm tvoří geometrickou posloupnost. Při počtu 100 elementů je krok u vrtu cca 0,4 mm a krok na opačném konci cca 2,2 mm. Pomocí tohoto modelu jsme získali výsledky pro Na-22, Ba-133 a Cs-134.

6.3 Porovnání řešení referenční varianty

Zpracování modelů třemi řešitelskými institucemi na základě dohodnuté jednotné volby vstupních dat umožnilo přímé porovnání výsledků a vzájemnou verifikaci, v některých případech pak stanovení hypotéz ohledně vlivů na přesnost výpočtu. Prezentované výsledky odpovídají finálním variantám poté, co na základě dílčích porovnání na kontrolních dnech byly korigovány, zejména úpravou diskretizace.

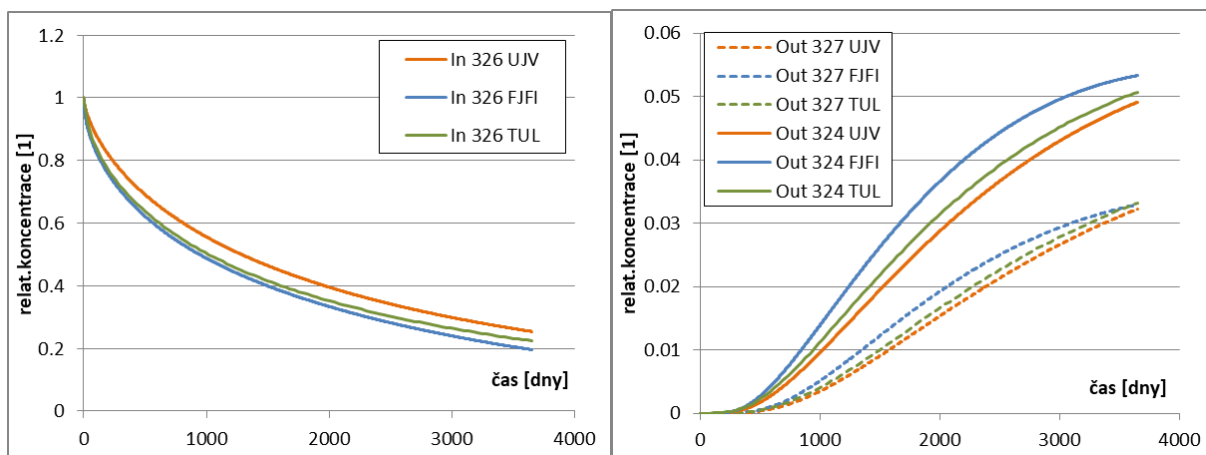
Na Obr. 78 jsou pro HTO vyneseny jak průběhy koncentrace v injektážním vrtu, tak průběhy v obou detekčních vrtech. Trendem se všechny výsledky shodují, drobné odchylky hodnot jsou přiměřené různému zpracování aproximace geometrie (oba výpočty GoldSim) a odlišnostem v numerickém schématu. Nižší nárůst koncentrace ve vrtu 327 proti vrtu 324 odpovídá jejich různé vzdálenosti od injektáže.

Porovnání Cl-36 je provedeno pouze mezi Goldsim (ÚJV) a Flow123d (FJFI), kde byla stejným způsobem (jednotnými parametry) aplikována aniontová exkuze. Rozdíly jsou podobně jako u HTO přiměřené odlišnostem geometrie a vlivům numerického schématu.

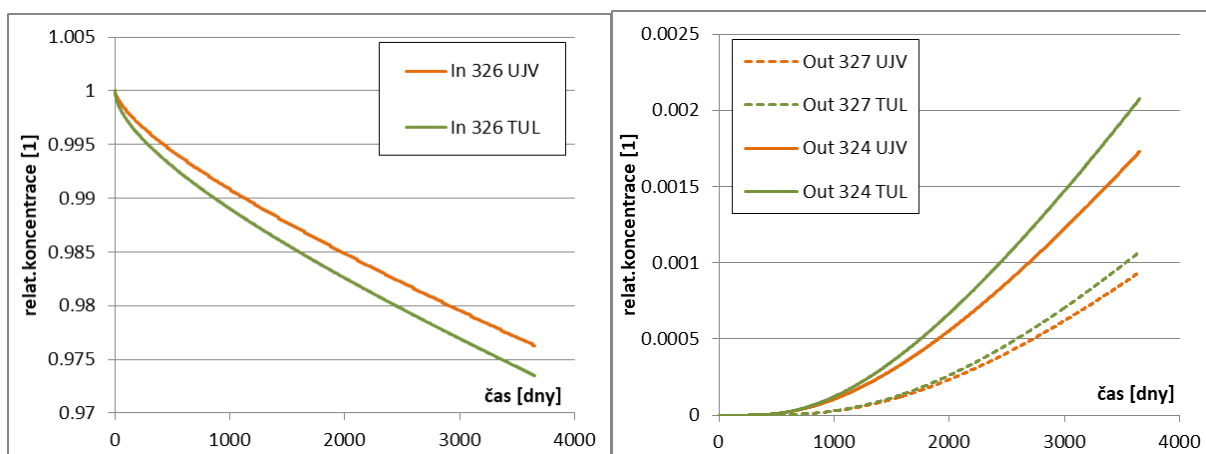
Výsledky pro Na-22 jsou uvedeny pouze v podobě poklesu v injektážním vrtu (spočtené koncentrace v detekčních, ev. v kontrolním vrtu modelu ÚJV, byly mnoho řádů pod úroveň detekce laboratorních měření) na Obr. 80. V tomto případě se již výrazně projevovala diskretizace v okolí injektážního vrtu, podobně jako u předchozích úloh. Uvedeny jsou již výsledky s nejjemnější diskretizací, v případě ÚJV pak v rovnoměrné a nerovnoměrné variantě. Rozdíly jsou hlavně u směrnice počátečního poklesu a lze je vysvětlit právě diskretizací, vzhledem k vymezení oběma variantami modelu ÚJV. I přes určité rozdíly lze modely s dostatečnou přesností použít na interpretaci měřených dat, které jsou samy o sobě zatíženy srovnatelně velkou chybou. Ve výsledcích není zahrnut 1D model FJFI, kde se pravděpodobně projevil vliv vnější okrajové podmínky.

Pro silně sorbující stopovače Ba-133 a Cs-134 (Obr. 81 a Obr. 82) jsou již rozdíly mezi modely výrazně větší, u dlouhodobého trendu jsou výsledky až v rozmezí jednoho řádu. Na druhou

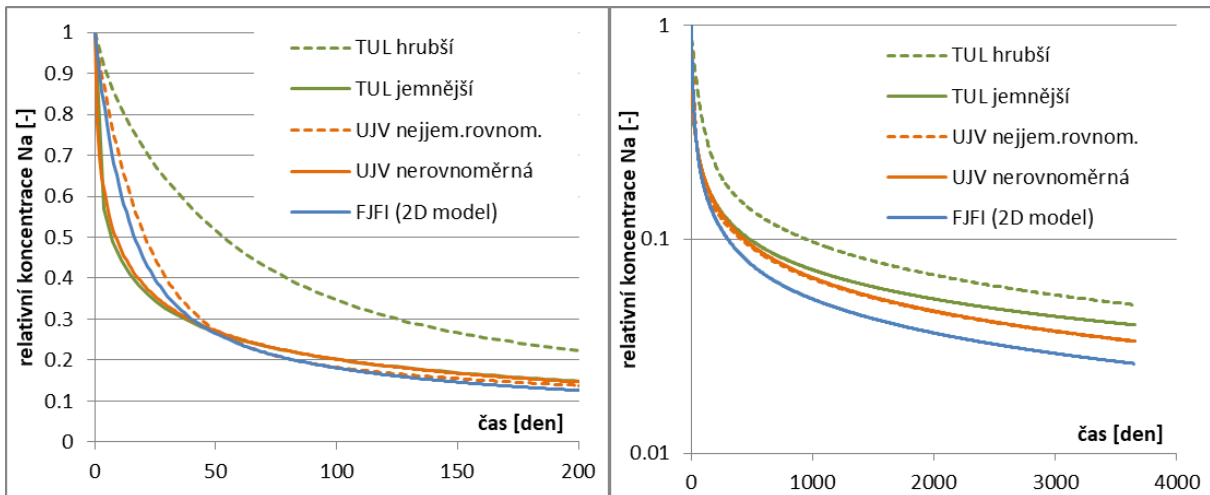
stranu, křivky tvoří něco jako systematickou řadu a lze tedy usuzovat, že se jedná o nějaký kvantitativně stupňující se jev, nikoli o „hrubou“ chybu v zadání vstupních dat. To opět nasvědčuje vlivu diskretizace. S uvážením, že Flow123d používá stále stejnou diskretizaci pro všechny případy, je shoda s plně zjemněným 1D modelem adekvátní.



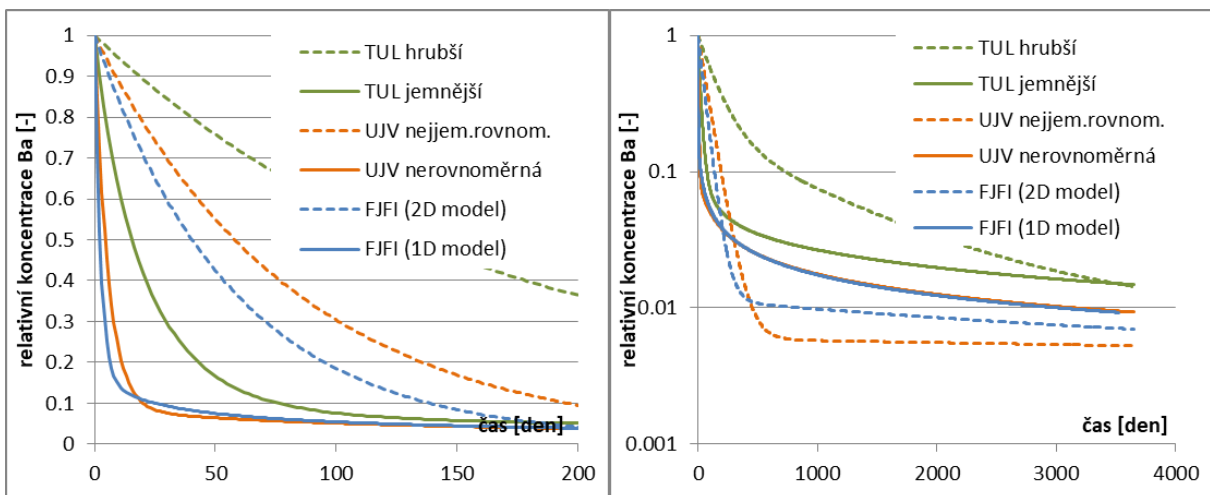
Obr. 78 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač HTO, průběh v injektážním vrtu vlevo a v obou detekčních vrtech vpravo.



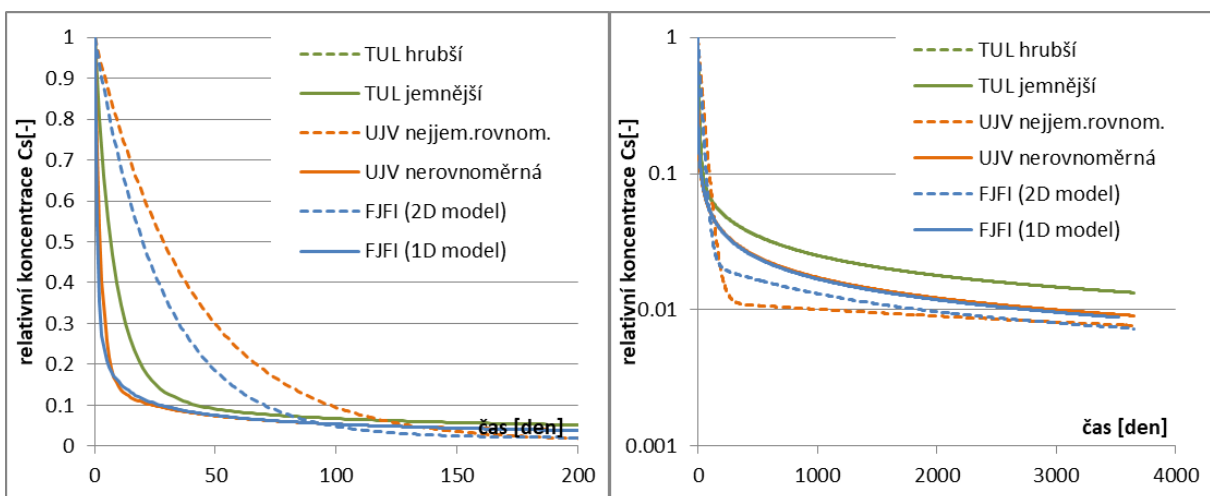
Obr. 79 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Cl-36, průběh v injektážním vrtu vlevo a v obou detekčních vrtech vpravo.



Obr. 80 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Na-22, průběh v injektážním vrtu ve dvou různých měřících os.

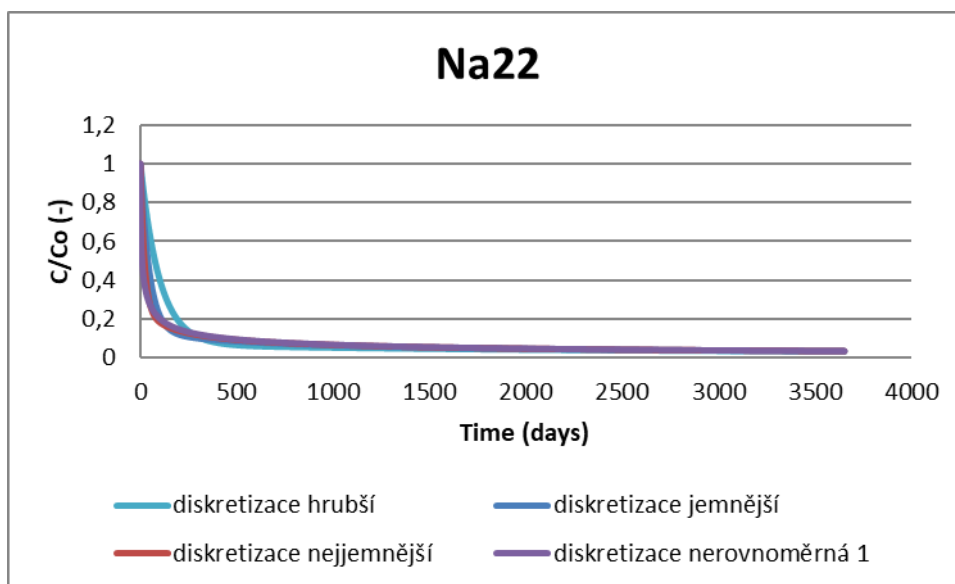


Obr. 81 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Ba-133, průběh v injektážním vrtu.

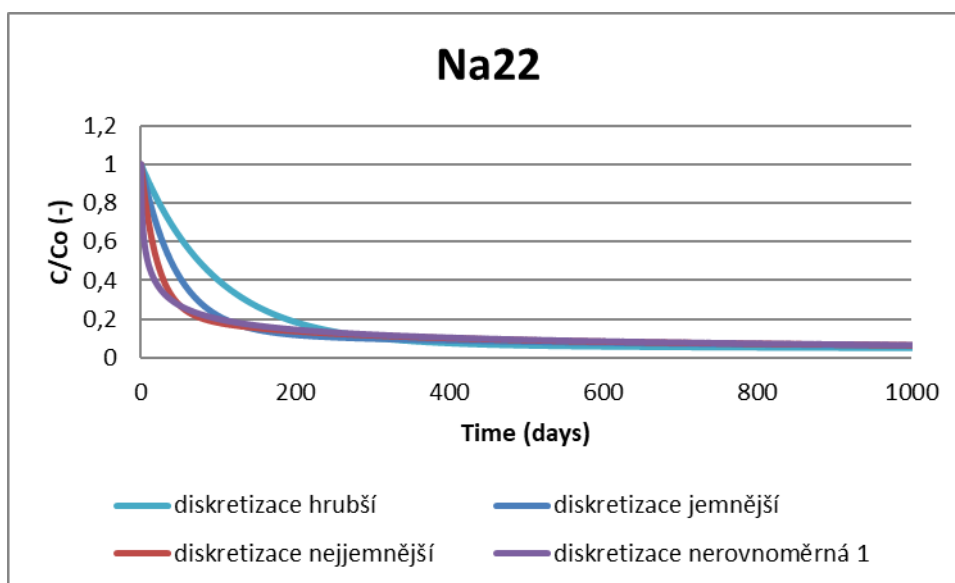


Obr. 82 Porovnání výsledků jednotlivých řešitelů/softwareů pro referenční parametry – stopovač Cs-134, průběh v injektážním vrtu.

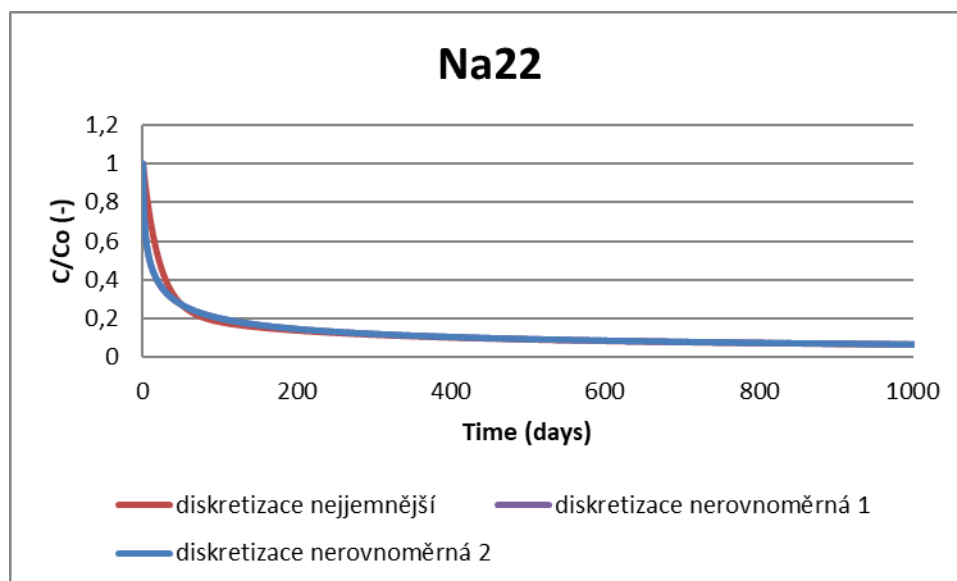
Dílčí porovnání vlivu diskretizace je pak provedeno v rámci modelů jednotlivých řešitelů. U modelu ÚJV byly pro H-3 a Cl-36 varianty jemnější a hrubší, pro ně byly rozdíly nepatrné pro zdrojový i detekční vrt. Z Obr. 83, Obr. 84 a Obr. 85 je vidět zásadní vliv diskretizace modelové oblasti pro sorbující se radionuklidy. Ačkoli ve verzích modelů diskretizace nejjemnější a diskretizace nerovnoměrná_2 je obdobná velikost modelové oblasti, detailnější dělení kolem monitorovacího vrtu u verze diskretizace nerovnoměrná_2 přináší jiné výsledky než rovnoměrné dělení ve verzi diskretizace nejjemnější. Při porovnání modelových verzí diskretizace_nerovnoměrná_1 a diskretizace_nerovnoměrná_2 (Tab. 35) je patrné, že dalším snižováním velikosti kroku dělení modelové oblasti již nejsou získávány jiné výsledky, míra diskretizace je tedy ve variantě diskretizace nerovnoměrná_2 dostatečná. To se potvrdilo pro další stopovače, Ba-133 a Cs-134.



Obr. 83 Vývoj aktivity Na-22 v injekčním vrtu pro čtyři uvažované diskretizace modelu ÚJV-Goldsim.



Obr. 84 Detail vývoje aktivity Na-22 v injekčním vrtu pro čtyři uvažované diskretizace modelu ÚJV-Goldsim.



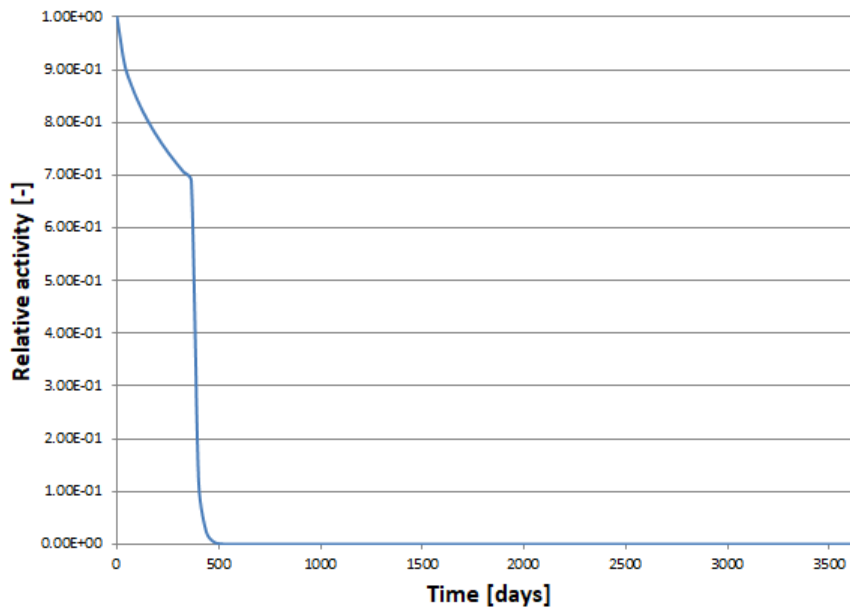
Obr. 85 Detail vývoje aktivity Na-22 v injekčním vrtu dle modelu ÚJV-Goldsim – porovnání rovnoměrného a nerovnoměrného rozdělení modelové oblasti, křivky pro nerovnoměrné dělení oblasti se překrývají

6.4 Analýza vlivu advekce

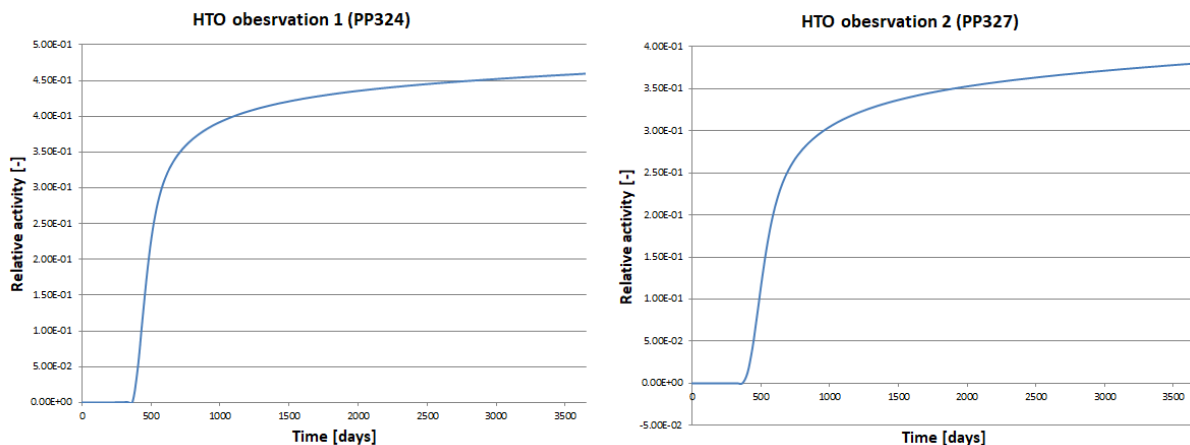
Jelikož byl mezi experimentálními sekcemi jednotlivých vrtů dokumentován tlakový spád, lze předpokládat, že vedle difuze a sorpce bude důležitým transportním procesem rovněž advekce.

Byly provedeny tři simulace, dvě založené na umělém konstantním tlakovém spádu v daném směru, třetí pak založená na tlakových poměrech převzatých ze zadávací dokumentace. Všechny tři simulace byly realizovány pro konzervativní stopovač HTO.

V první simulaci byl tlakový spád nastaven tak, aby docházelo k advekci od injektážního vrtu směrem k vrtům monitorovacím. Během prvního roku simulační periody byly tlaky vyrovnané, po zbytek simulace (do času 10 let) byla na hranici injektážního vrtu předepsána okrajová podmínka proudění ve formě piezometrické výšky rovné 10 m. Na hranici monitorovacích vrtů byla předepsána piezometrická výška nulová. To odpovídá tlakovému rozdílu 0,1 MPa. Vývoj relativní aktivity v jednotlivých vrtech je znázorněn na Obr. 86 a Obr. 87.

HTO injection (PP326)


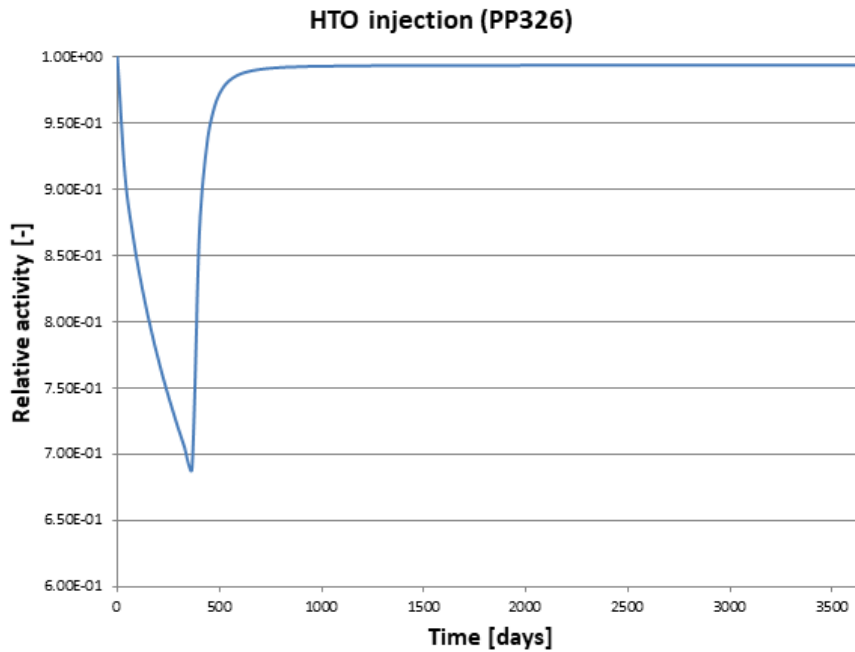
Obr. 86 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem od injektážního vrtu – závislost relativní aktivity na čase v injektážním vrtu



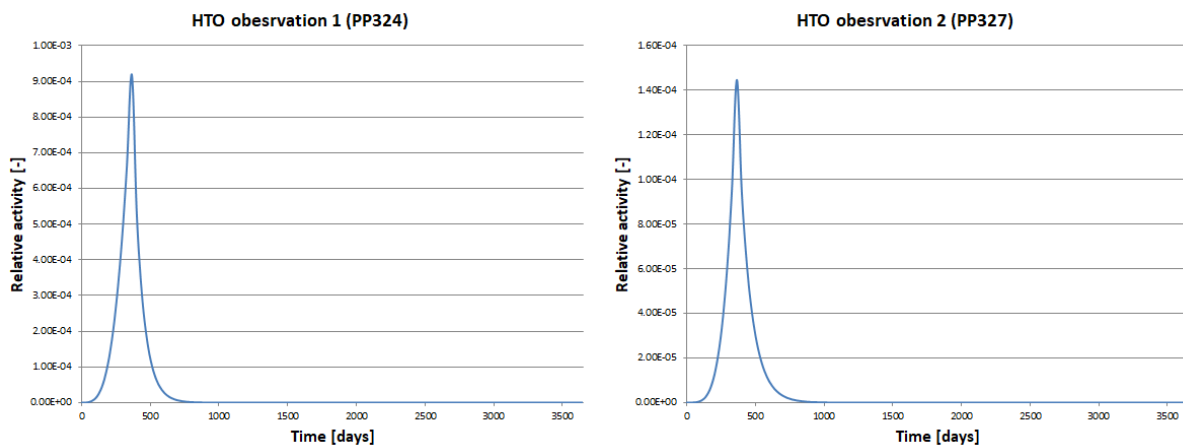
Obr. 87 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem od injektážního vrtu – závislost relativní aktivity na čase v monitorovacích vrtech

Z výsledků je patrné, že po „sepnutí“ advekce dojde k výraznému urychlení transportu stopovače směrem k monitorovacímu vrtu.

V druhé simulaci byl tlakový spád nastaven tak, aby docházelo k advekci od monitorovacích vrtů směrem k vrtu injektážnímu. Během prvního roku simulační periody byly tlaky vyrovnané, po zbytek simulace (do času 10 let) byla na hranici monitorovacích vrtů předepsána okrajová podmínka proudění ve formě piezometrické výšky rovné 10 m. Na hranici injektážního vrtu byla předepsána piezometrická výška nulová. To odpovídá tlakovému rozdílu 0,1 MPa. Vývoj relativní aktivity v jednotlivých vrtech je znázorněn na Obr. 88 a Obr. 89.

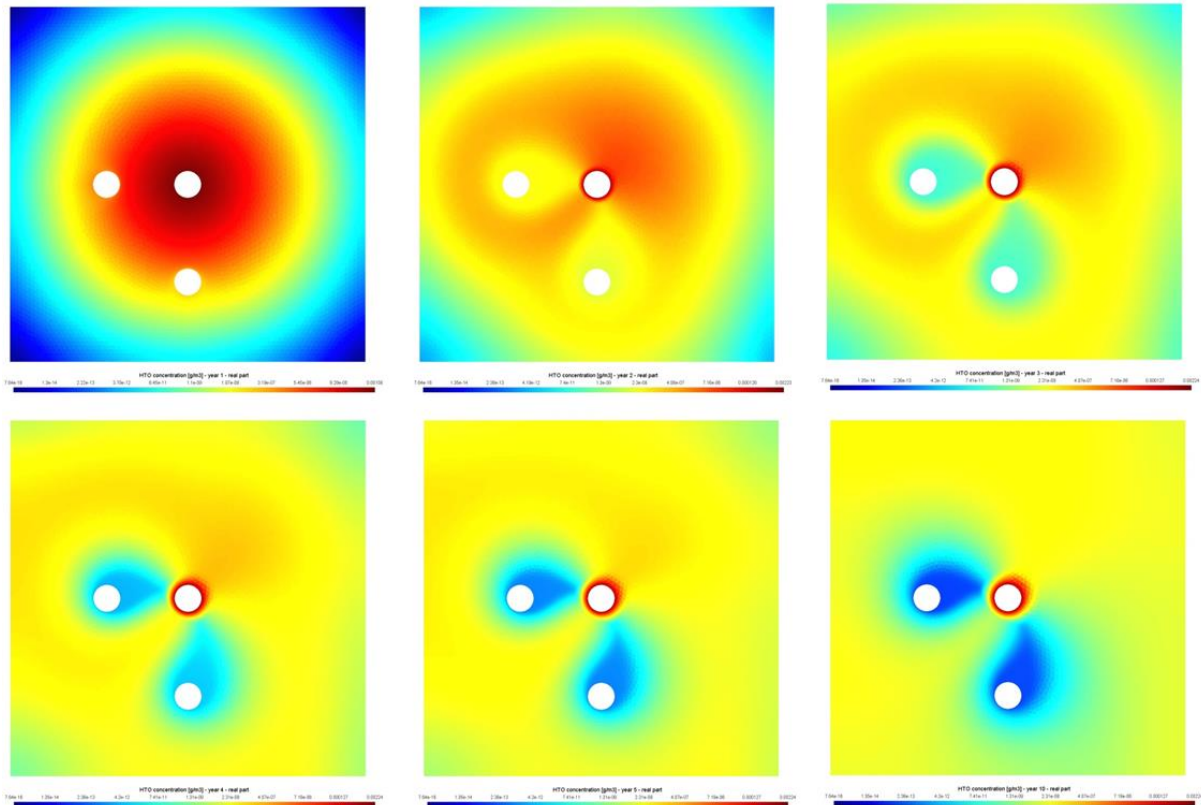


Obr. 88 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem k injektážnímu vrtu – závislost relativní aktivity na čase v injektážním vrtu



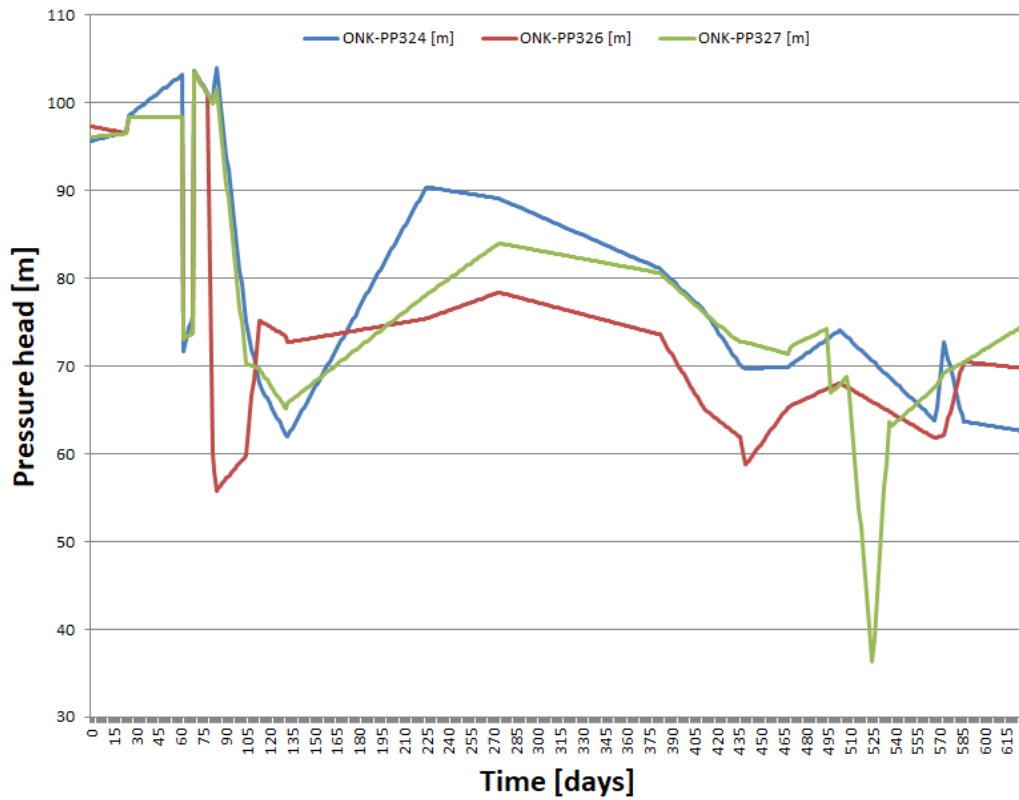
Obr. 89 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem k injektážnímu vrtu – závislost relativní aktivity na čase v monitorovacích vrtech

Z výsledků je patrné, že po „sepnutí advekce“ dojde k rychlému obrácení směru migrace stopovače zpět směrem k injektážnímu vrtu. To je dokumentováno také vizualizací koncentračního pole na Obr. 90.

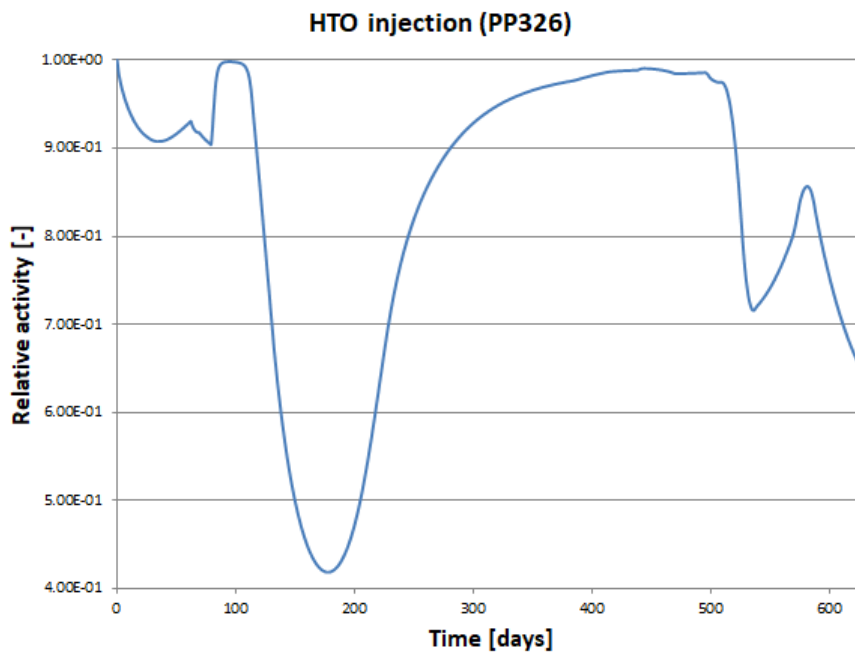


Obr. 90 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – umělý tlakový spád – advekce směrem k injektážnímu vrtu – vývoj koncentračního pole (v časech 1, 2, 3, 4, 5 a 10 let)

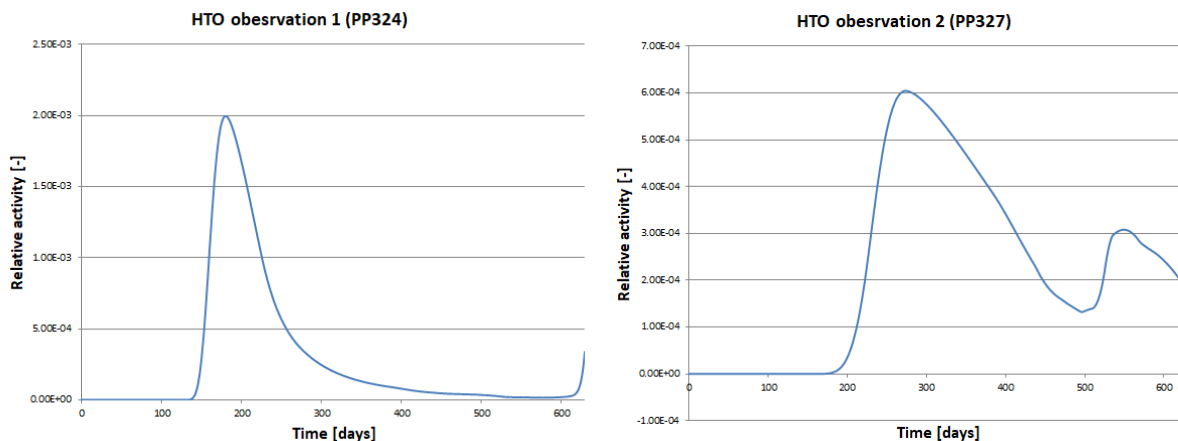
Ve třetí simulaci byl tlakový spád dán měřenými daty (tlaky ve vrtech), která byla součástí zadávací dokumentace. Model v každém kroku upravuje okrajové podmínky proudění na základě měřených dat (Obr. 91). V časech mezi dvěma měřeními jsou tlaky dopočteny metodou lineární interpolace. Simulační perioda byla zkrácena na rozsah měřených dat (629 dní).



Obr. 91 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – měřený tlakový spád – vývoj okrajové podmínky proudění



Obr. 92 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – měřený tlakový spád – závislost relativní aktivity na čase v injektážním vrtu



Obr. 93 Task 9C – Flow123d – vliv tlakového spádu – měřený tlakový spád – závislost relativní aktivity na čase v monitorovacích vrtech

Vývoj relativní aktivity v jednotlivých vrtech je znázorněn na Obr. 92 a Obr. 93. Z výsledku je patrné, že s tím, jak se mění směr tlakového spádu, mění se i směr migrace stopovače.

Závěrem budiž, že tlakový spád a jím indukovaná advekce mohou mít výrazný vliv na výsledek simulací. Je nicméně diskutabilní, zda tlaky ve vrtech změřené reflektují skutečné hydraulické podmínky v místě experimentu nebo zda se jedná jen o experimentální artefakt.

6.5 Inverzní model Flow123d (TUL)

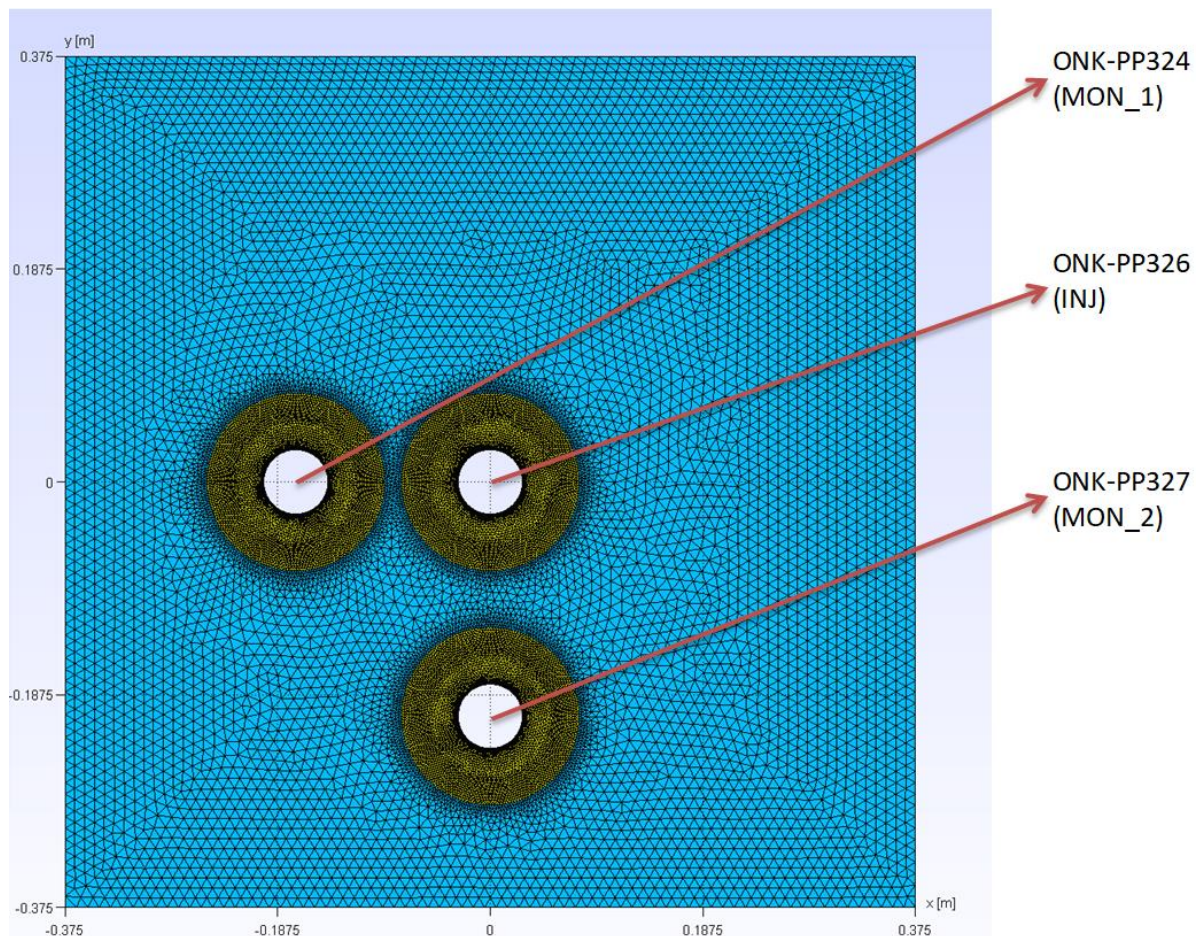
Cílem inverzního modelu bylo dosažení shody mezi výsledky simulací a měřenými daty pomocí změny parametrů. Konkrétně byly vyhodnocovány časové průběhy koncentrací jednotlivých stopovačů především v injektážním vrtu. V monitorovacích vrtech nedosahovaly koncentrace některých stopovačů v době trvání experimentu měřitelných hodnot, shoda simulace s měřeními je v nich proto hodnocena omezeně.

Oproti slepé predikci popsané výše byly v modelu provedeny některé změny. Ty byly zčásti motivovány aktualizací zadávací dokumentace a z části potřebou upravit model tak, aby byla proveditelnější a flexibilnější kalibrace jeho parametrů. Těmito změnami jsou:

- Aktualizace objemů vody (roztoku) v experimentálních sekcích (dle nové verze zadávací dokumentace):
 - ONK-PP324 (monitorovací č. 1): 240 ml,
 - ONK-PP326 (injektážní): 254 ml,
 - ONK-PP327 (monitorovací č. 2): 262 ml.
- Nová výpočetní síť uvažující zónu narušení kolem každého z vrtů.
- Implementace odběru vzorků – v průběhu experimentu jsou z experimentálních sekcí odebírána nezanedbatelná množství roztoku, který je nahrazován čistou vodou, což má patrný vliv na výsledky simulací.
- Implementace výměny vody/roztoku ve vrtu ONK-PP324 v čase 1 028 dní (pro HTO a Cl-36, jinde nemá význam).

Na Obr. 94 je znázorněna aktualizovaná výpočetní síť. Sestává se z 38 868 trojúhelníkových elementů s tím, že nejjemnější diskretizace je v blízkosti vrtů. Z obrázku je patrný rozsah

uvažované zóny narušení, který je 5 cm od stěny každého z vrtů. Velikosti kroku sítě jsou 1 mm při stěně vrtu, 2,5 mm na rozhraní BDZ a 10 mm ve zbytku modelu.



Obr. 94 Task 9C – Flow123d – aktualizovaná výpočetní síť pro inverzní model

Pro kalibraci modelu na měřená data byl přijat koncept lineárního poklesu porozity od stěny vrtu směrem k rozhraní BDZ/neporušená hornina. Na Obr. 95 je znázorněno rozložení porozity v modelové oblasti tak, jak vzešlo z procesu manuální kalibrace modelu.

Dalšími parametry modelu, jež lze využít při kalibraci na měřená data, jsou efektivní difuzivita, která závisí také na porozitě, a distribuční koeficient lineární sorpce (vyjma konzervativních stopovačů HTO a Cl-36). Parametry vzešlé z manuální kalibrace modelu jsou uvedeny v Tab. 36 pro přehlednost společně s parametry použitými při slepé predikci. Pro efektivní difuzivitu v zóně narušení je v tabulce uvedena vždy maximální hodnota (při stěnách vrtů), minimální hodnotou je pak efektivní difuzivita v neporušené hornině. Charakter poklesu kopíruje pokles porozity, nikoli však lineárně, jelikož koeficient efektivní difuzivity je ve Flow123d úměrný porozitě umocněné na $\frac{4}{3}$. Z tabulky je patrné, že kromě přijatého konceptu lineárního poklesu porozity s hloubkou, jenž implikuje rovněž drobné změny efektivní difuzivity, byl předmětem kalibrace především distribuční koeficient lineární sorpce, který se změnil až o několik řádů oběma směry (oproti hodnotám použitým při slepé predikci).

Na Obr. 96 jsou výsledky inverzního modelu pro HTO. Z obrázku je patrné, že užitím parametrů uvedených v Tab. 36 se podařilo docílit velmi dobré shody v injektážním vrtu. Oproti

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

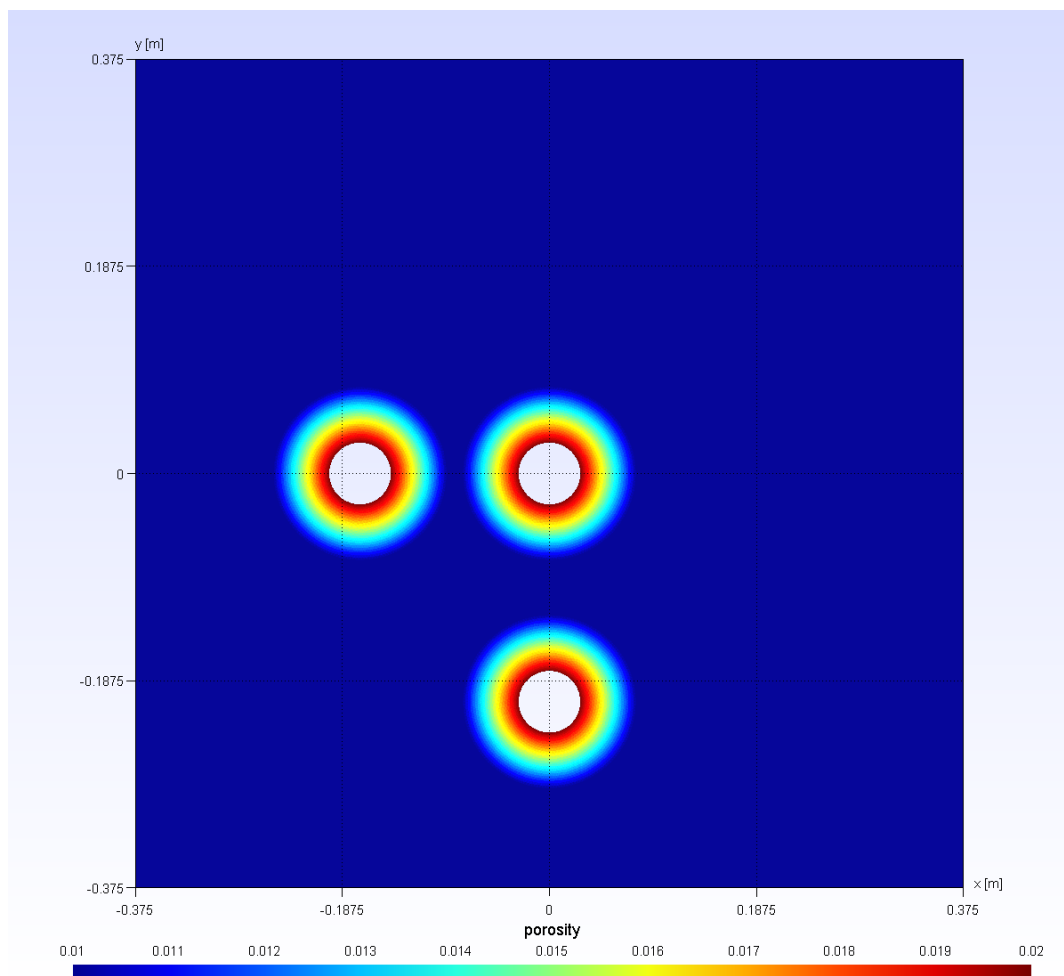
tomu simulované koncentrace ve vrtech monitorovacích jsou výrazně vyšší než koncentrace měřené. Na Obr. 97 jsou výsledky modelu s týmiž parametry vyjma efektivní difuzivity v neporušené hornině, která je čtyřicetkrát nižší. Je vidět lepší shoda obzvláště v monitorovacím vrtu PP327, zhoršila se naopak shoda ve vrtu injektážním. Z obrázku je patrné (stejně jako z Obr. 98), že současná koncepce modelu neumožňuje adekvátně postihnout měřené profily v monitorovacích vrtech, jelikož měřené hodnoty vykazují dřívější nástup ve vrtu PP327, který je od injektážního vrtu vzdálenější než vrt PP324. Je navíc situován kolmo na směr foliace, neizotropní tenzor koeficientu molekulární difúze, který by akcentoval směr PP326-PP327, by tak byl těžko obhajitelný.

Na Obr. 98 jsou výsledky inverzního modelu pro Cl-36. Opět vidíme dobrou shodu v injektážním vrtu a slabou shodu ve vrtech monitorovacích. Platí zde tytéž závěry diskutované v předešlém odstavci.

Na Obr. 99 jsou výsledky inverzního modelu pro Na-22. Shoda v injektážním vrtu je relativně dobrá s tím, že křivka reprezentující výsledky simulace klesá prudčeji než křivka měření. Aby bylo možné dosáhnout aspoň takovéto shody, bylo třeba snížit distribuční koeficient lineární sorpce o tři řády. Shoda v monitorovacích vrtech opět není dobrá; křivky reprezentující výsledky simulací jsou zřetelně zubaté, což velmi dobře dokumentuje vliv odběru vzorků.

Pro Ba-133 a Cs-134 nebyla v době trvání experimentu v monitorovacích vrtech detekována žádná aktivita. Stejně tak v nich nebyla zjištěna aktivita ve výstupech modelů. Pro oba stopovače jsou tak vizualizovány jen profily v injektážním vrtu, na Obr. 100 pro Ba-133 a na Obr. 101 pro Cs-134, v obou případech pro přehlednost s logaritmickou škálou osy y. V obou případech je patrné, že simulovaný profil má počátek zřetelně výše než profil měřený (to je ostatně pravda pro všech 5 stopovačů). Počáteční hodnota simulované koncentrace v injektážním vrtu je spočtena ze známého objemu experimentální sekce a známé hodnoty injektovaného množství (aktivity) stopovače. Přijmeme-li tato měření jako paradigma, pak simulovaná křivka ani jinak vypadat nemůže. Měřené křivky by pak byly zatíženy experimentální chybou, o jejímž původu se můžeme jen dohadovat. V případě Ba-133 není rozdíl počátečních hodnot profilů řádový, kalibrační modelu se tak podařilo měřený profil ve výsledku relativně dobře postihnout. U Cs-134 je ale rozdíl velký, cílem kalibrace tak bylo postihnout trend, nikoli docílit úplné shody.

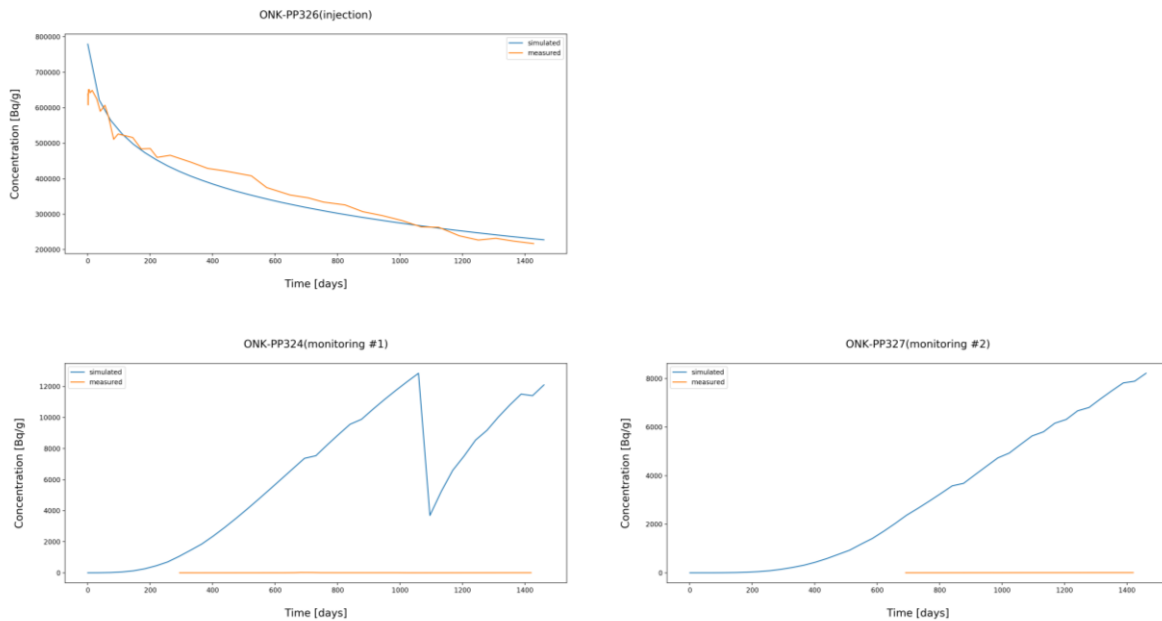
Závěrem můžeme shrnout, že zvolená modelová koncepce není schopna postihnout měřené profily v monitorovacích vrtech (z důvodů popsaných výše). V injektážním vrtu pak model dokáže postihnout trend, otevřenou nicméně zůstává otázka počáteční hodnoty koncentrace, kdy měřená hodnota neodpovídá injektovanému množství. Alternativně by tak modelový koncept mohl jako počáteční hodnotu koncentrace uvažovat první změřenou hodnotu. Výsledné parametry zkalibrovaného modelu by pak byly jistě jiné. Konečně nelze nezmínit, že podobných výsledků modelu by bylo možno docílit i jinou kombinací parametrů. Zvolené parametry (viz Tab. 36) jsou fyzikálně podložené – realistické.



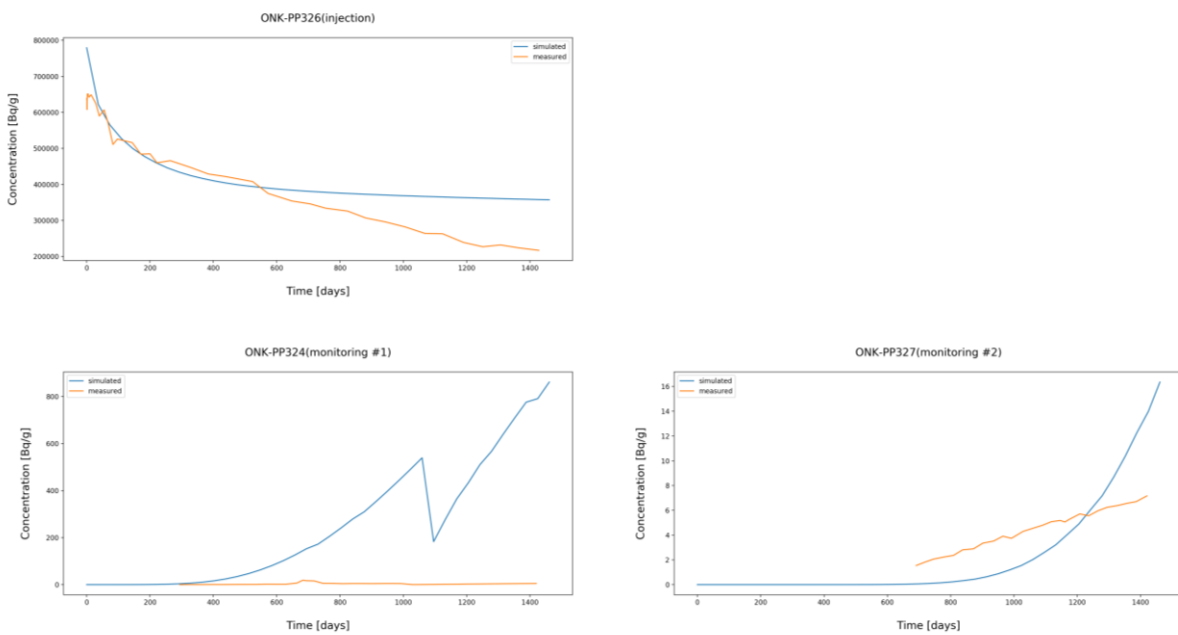
Obr. 95 Task 9C- Flow123d – rozložení porozity v modelové oblasti

Tab. 36 Task 9C – Flow123d – parametry vzešlé z kalibrace společně s parametry slepé predikce

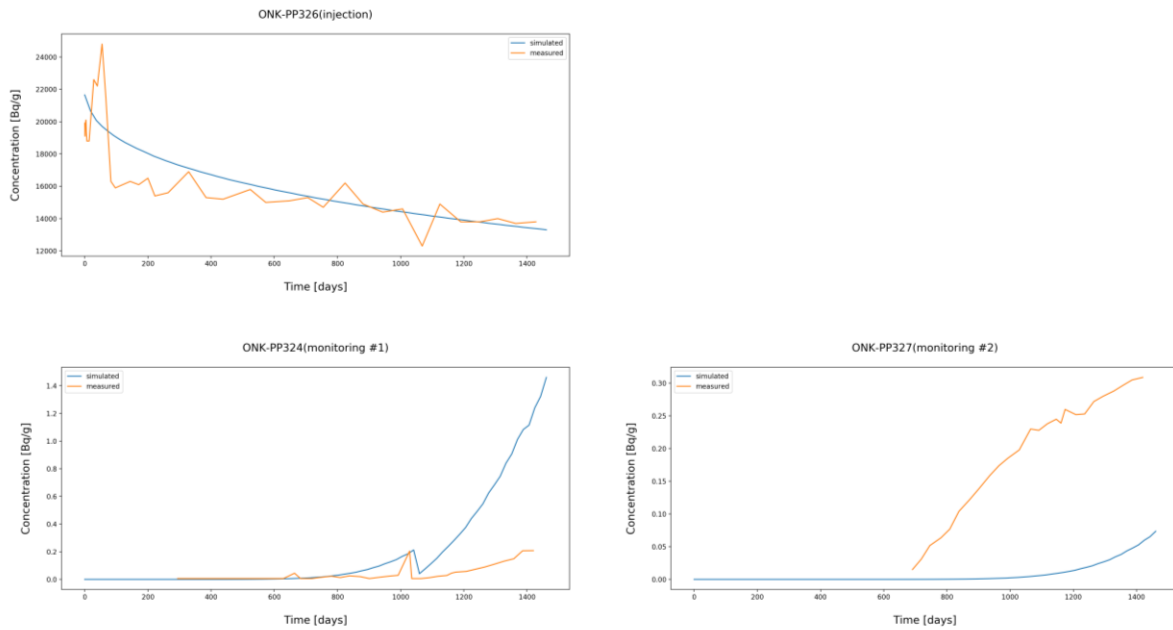
Stopovač	Porozita [-]	D_e BDZ max [m ² /s]	D_e hornina [m ² /s]	K_D BDZ [m ³ /kg]	K_D hornina [m ³ /kg]
PŮVODNÍ (slepá predikce)					
HTO	0,0094	-	3,90e-13	-	0
Cl-36	1,75e-4	-	5,00e-15	-	0
Na-22	0,0094	-	4,65e-13	-	0,0013
Ba-133	0,0094	-	3,00e-13	-	0,06
Cs-134	0,0094	-	3,00e-13	-	0,031
ZMĚNĚNÉ (výsledek procesu manuální kalibrace)					
HTO	0,01-0,02	1,07e-12	4,24e-13	0	0
Cl-36	0,01-0,02	1,26e-13	5,02e-14	0	0
Na-22	0,01-0,02	1,27e-12	5,05e-13	1,3e-6	1,3e-6
Ba-133	0,01-0,02	8,20e-13	3,25e-13	0,6145	0,0307
Cs-134	0,01-0,02	8,20e-13	3,25e-13	0,6191	0,03095



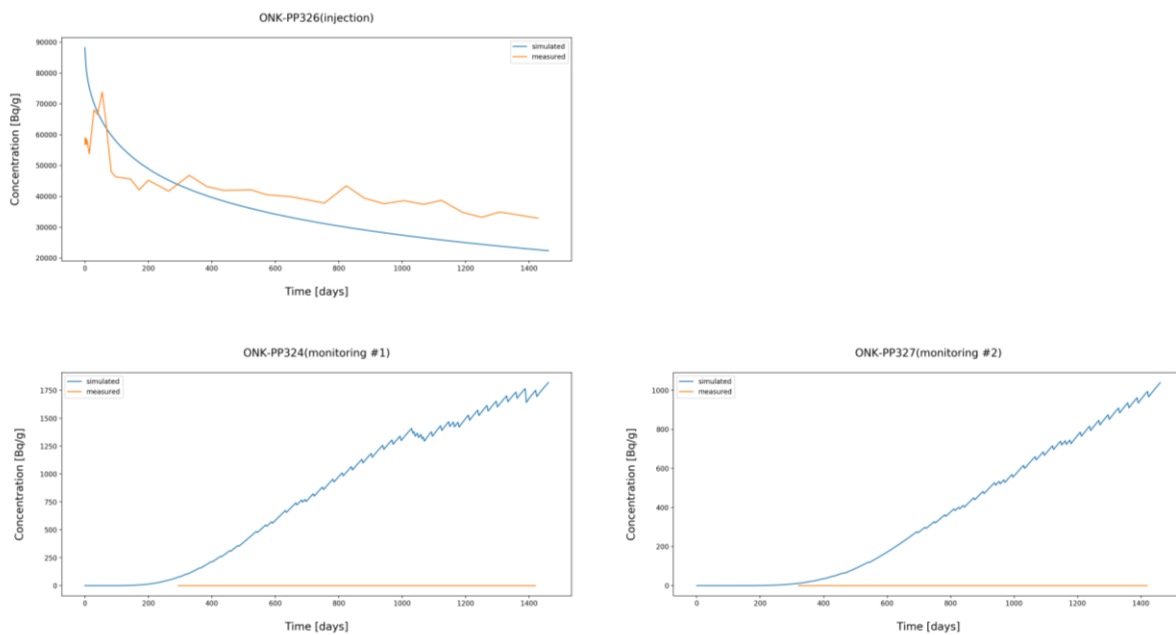
Obr. 96 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, HTO



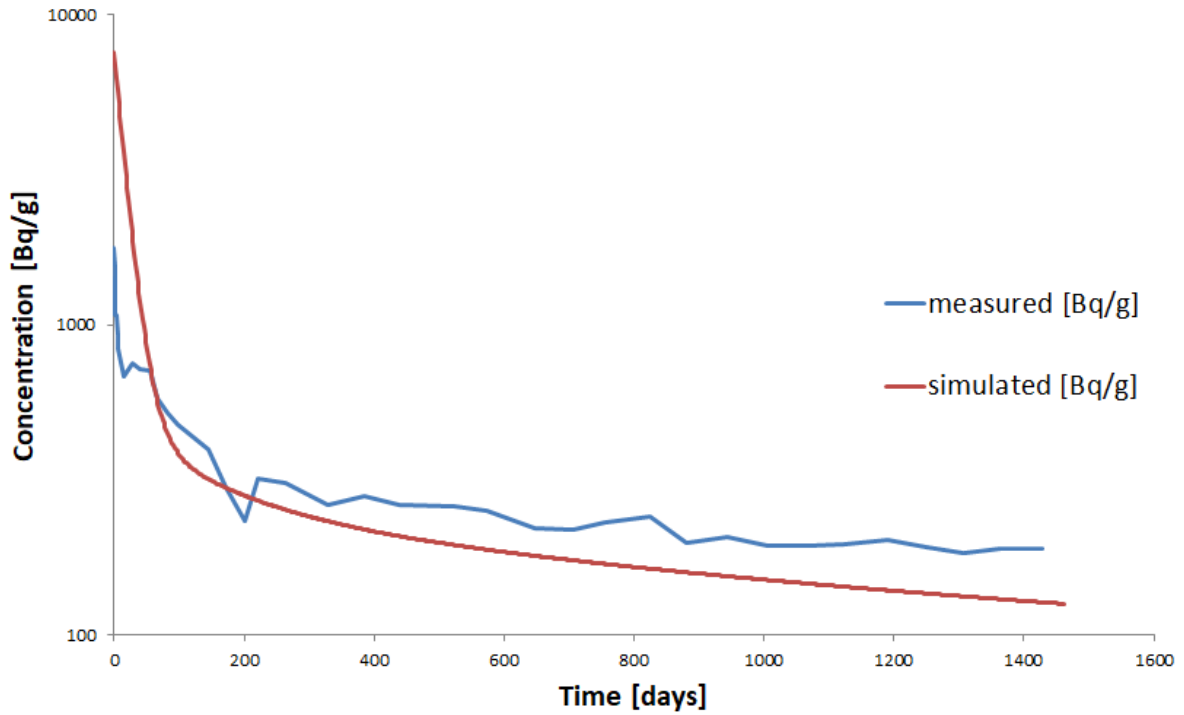
Obr. 97 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, HTO varianta 2



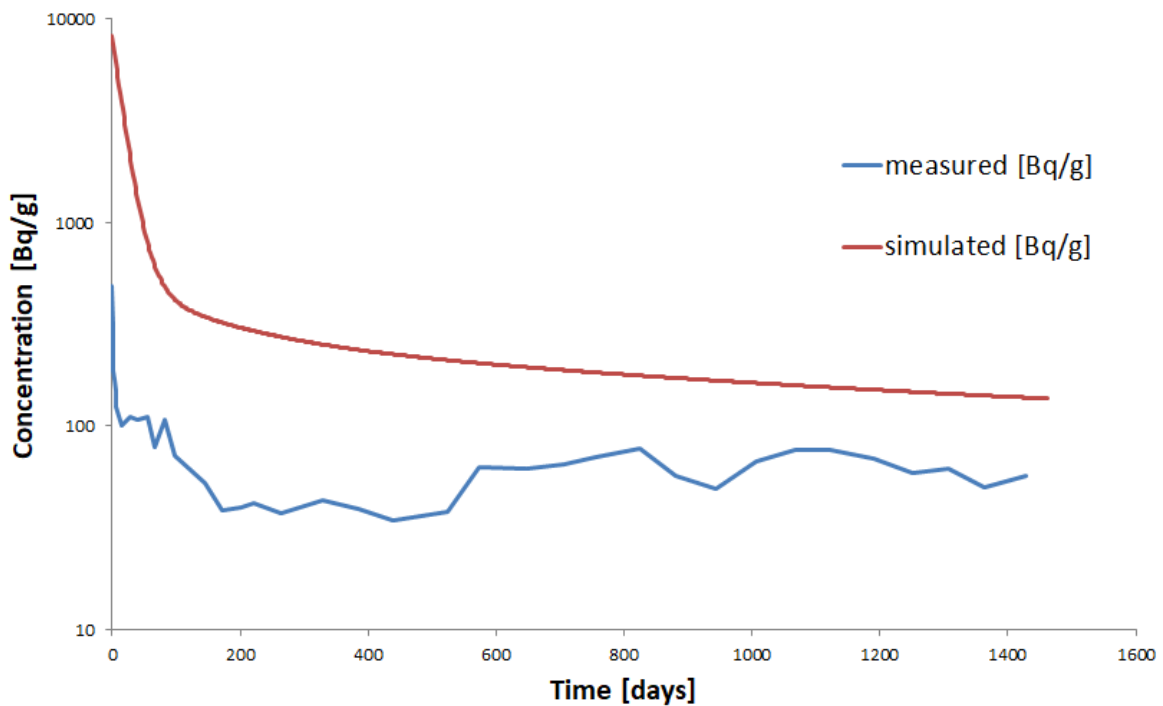
Obr. 98 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, CI-36



Obr. 99 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, Na-22



Obr. 100 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, Ba-133



Obr. 101 Task 9C – Flow123d – výsledky inverzního modelu, Cs-134

6.6 Inverzní model GoldSim (ÚJV)

Po uvolnění experimentálních dat organizátorem bylo přistoupeno k inverznímu modelování, kdy se měnily modelové parametry za účelem dosažení co největší shody mezi modelovými a měřenými výsledky. Pro nesorbující se nuklidy byla použita diskretizace s označením „diskretizace jemnější“ (Tab. 33, Obr. 74), pro sorbující se pak diskretizace s označením „nerovnoměrná_1“ (Tab. 35, Obr. 76). Modelová oblast zůstala homogenní, není rozdělena na bližší a vzdálenější zónu kolem vrtu.

Během inverzního modelování byla vedle kalibrace materiálových parametrů věnována pozornost i kritickému posouzení měřených dat. V řadě případů (především při absenci dat z monitorovacích vrtů) bylo dosaženo podobných modelových křivek pro různou kombinaci modelových parametrů. Výsledné modelové parametry jsou uvedeny v Tab. 37, další možné kombinace pak v Tab. 38.

Tab. 37 Finální kalibrované parametry

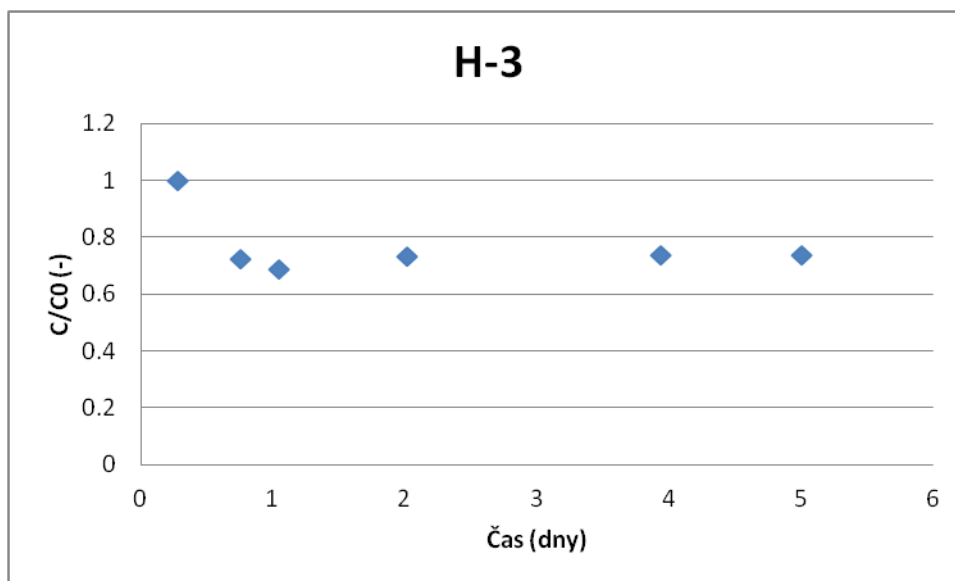
	Porozita	Kd (m3/kg)	De (m2/s)	Dw (m2/s)
H-3	9,40E-03	0,00E+00	7,00E-13	2,30E-09
Na-22	9,40E-03	5,00E-05	9,00E-14	1,33E-09
Na-22 ořez	9,40E-03	9,00E-05	3,00E-14	1,33E-09
Cl-36	9,40E-03	0,00E+00	2,00E-13	2,03E-09
Cl-36 ořez	9,40E-03	0,00E+00	3,50E-14	2,03E-09
Ba-133	9,40E-03	2,00E-03	1,47E-13	1,69E-09
Cs-134	9,40E-03	5,00E-03	3,00E-13	2,07E-09

Tab. 38 Variantní modelové parametry

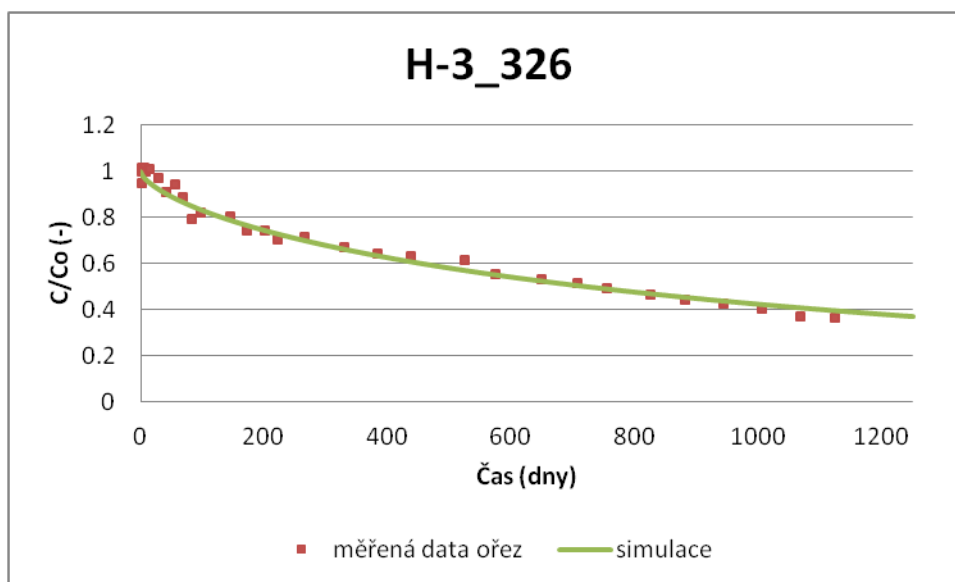
	Porozita	Kd (m3/kg)	De (m2/s)	Dw (m2/s)
Na-22 var 1	9,40E-03	5,00E-05	9,00E-14	1,33E-09
Na-22 var 2	9,40E-03	9,00E-05	9,00E-14	1,33E-09
Na-22 var 3	9,40E-03	1,00E-05	2,00E-13	1,33E-09
Na-22 ořez var 1	9,40E-03	9,00E-05	3,00E-14	1,33E-09
Na-22 ořez var 2	9,40E-03	1,00E-05	6,00E-14	1,33E-09
Ba-133 var 1	9,40E-03	2,00E-03	1,47E-13	1,69E-09
Ba-133 var 2	9,40E-03	3,00E-03	1,47E-13	1,69E-09
Cs-134 var 1	9,40E-03	5,00E-03	3,00E-13	2,07E-09
Cs-134 var 2	9,40E-03	3,10E-02	5,00E-14	2,07E-09

H-3

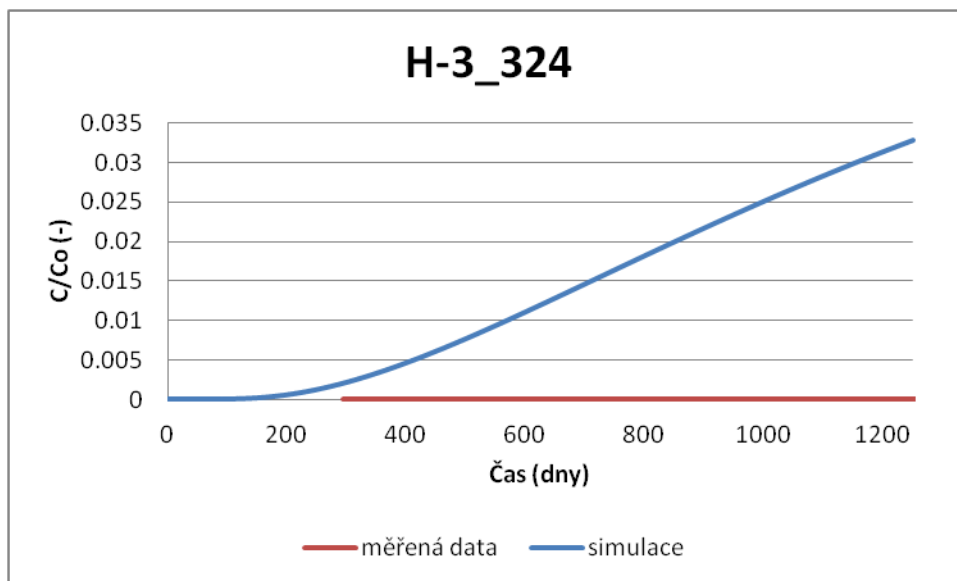
Porovnání mezi měřeními a modelovými výsledky včetně vlastních měřených výsledků je uvedeno na obr. Obr. 102 - Obr. 105. Na Obr. 102 je patrný strmý pokles aktivity v injekčním vrtu. Tento pokles přičítáme geometrii experimentu, nejedná se o vlastnost horniny, která je charakterizována kalibrovanými materiálovými parametry. Z toho důvodu byla data oříznuta a počáteční aktivita byla o tento ořez ponížena, počáteční hodnota injektovaného množství tedy není 891 000 Bq/g, ale 647 000 Bq/g.



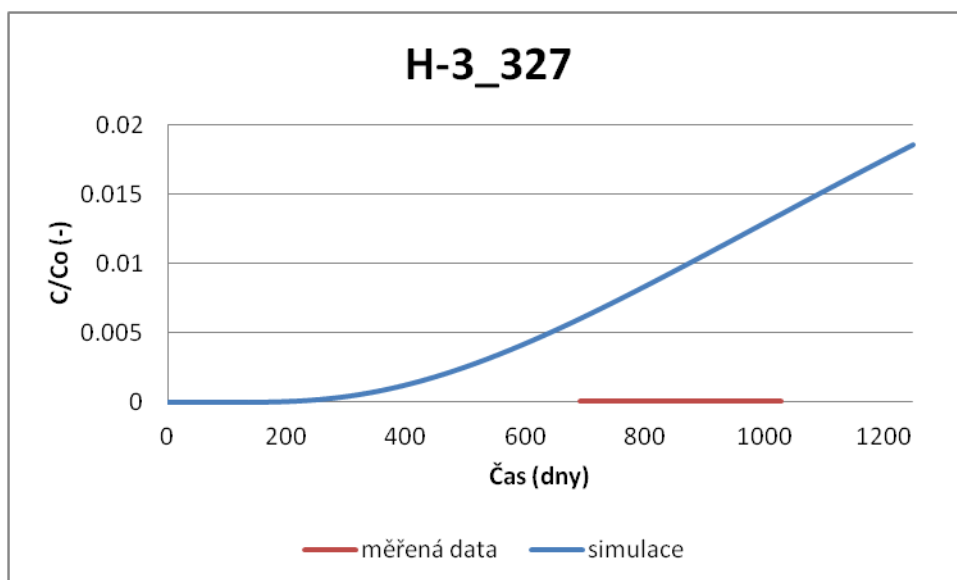
Obr. 102 Původní měřená data, strmý pokles během prvního dne přičítán nastavení vlastního experimentu



Obr. 103 Vývoj aktivity v injekčním vrtu



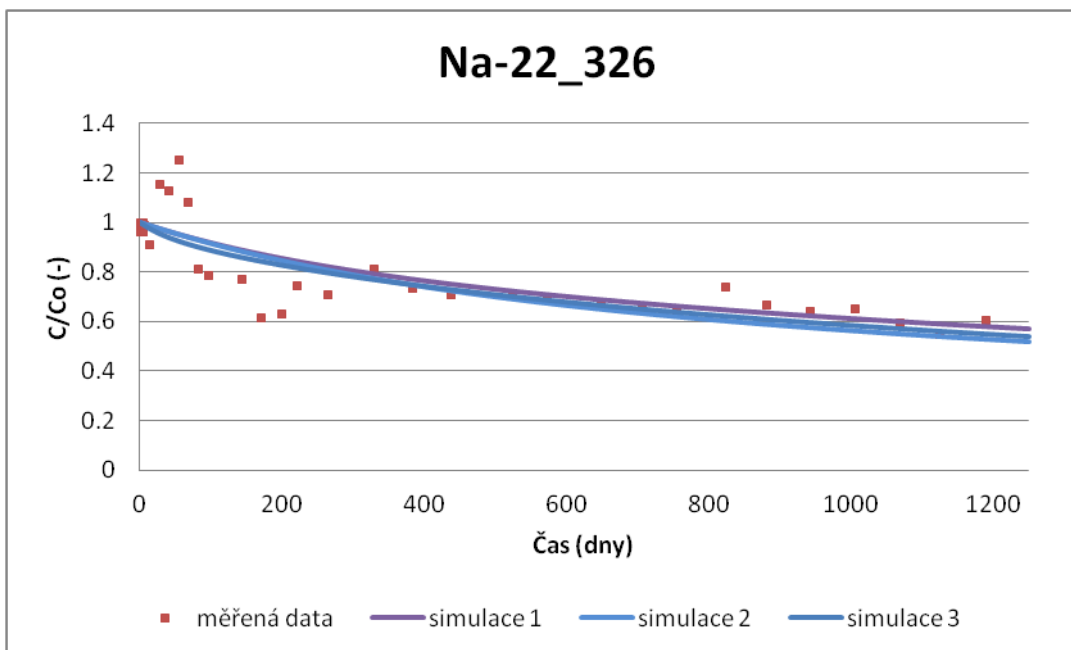
Obr. 104 Vývoj aktivity v monitorovacím vrtu



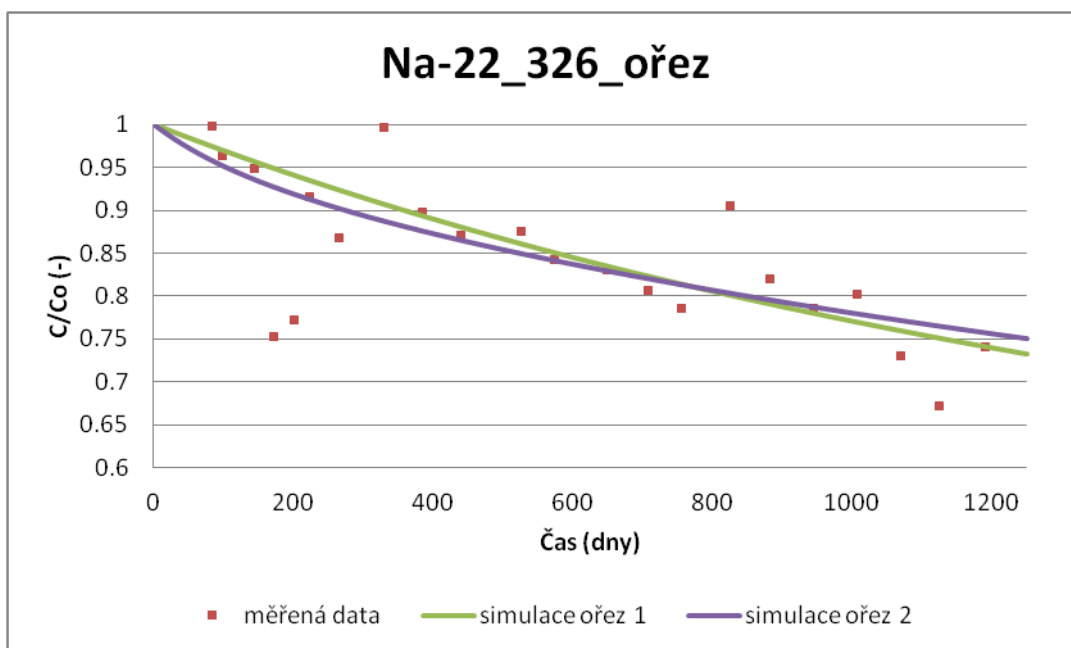
Obr. 105 Vývoj aktivity v monitorovacím vrtu

Na-22

U Na-22 byly simulovány dvě varianty měřených dat. Jednak původní publikovaná data (Obr. 106) a jednak data ořezaná (Obr. 107). Na grafech znázorňující neořezaná data je vidět experimentální artefakt, kdy aktivita v injekčním vrtu v průběhu měření narůstá nad počáteční injektovanou aktivitu. Z toho důvodu bylo ve druhé (ořezané) variantě zanedbáno prvních 80 dní, během kterých k tomuto artefaktu docházelo, a počáteční aktivita byla nastavena na hodnotu aktivity odpovídající 80 dní, tedy injektované množství látky 48 000 Bq/g (oproti původní publikované hodnotě 58 900 Bq/g). V obou variantách jsme se dále potýkali s větším stupněm volnosti úlohy z důvodu absence dat z monitorovacích vrtů, kdy při kombinaci různých parametrů dostáváme velmi podobné modelové křivky.



Obr. 106 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro původní publikovaná data pro různou kombinaci modelových parametrů

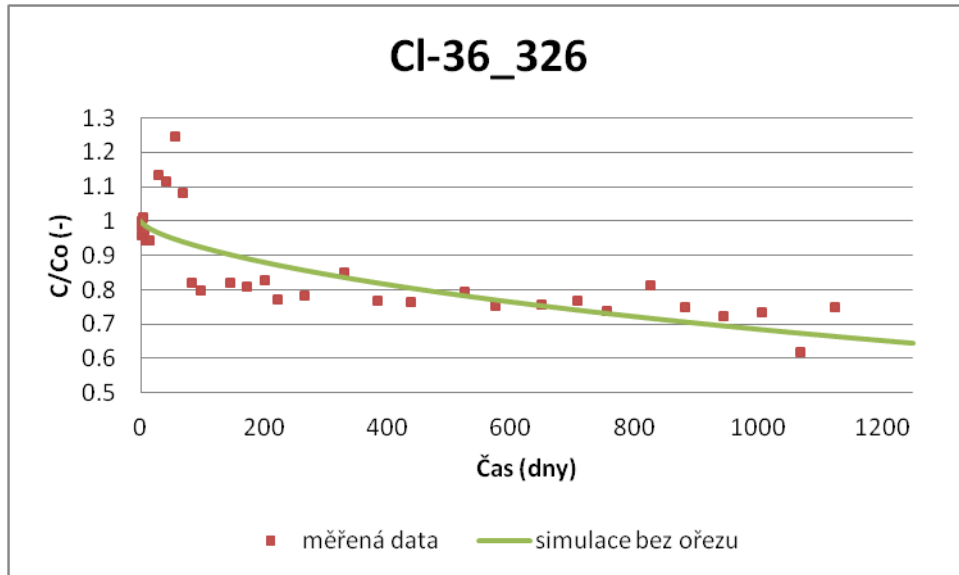


Obr. 107 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro ořezaná data pro různou kombinaci modelových parametrů

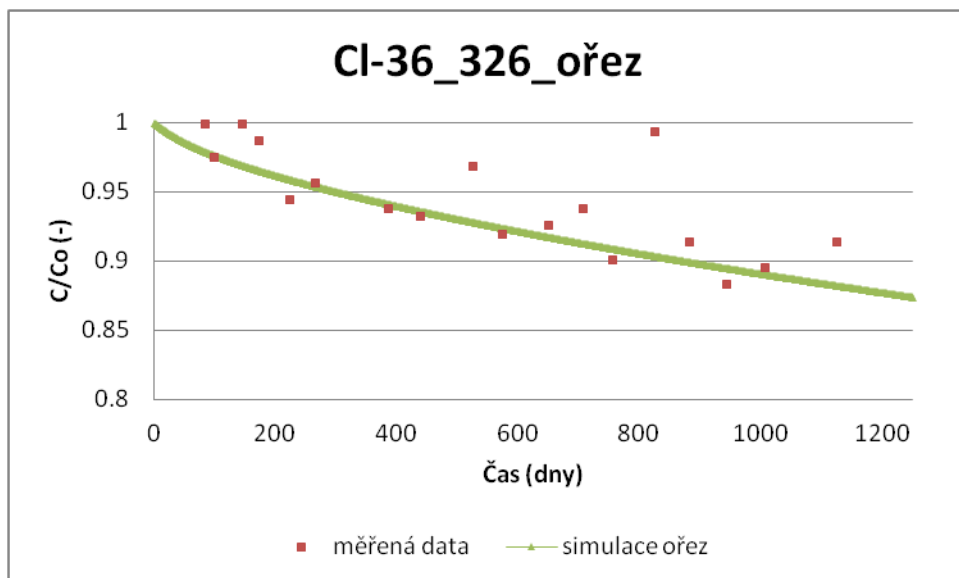
CI-36

U CI-36 byl stejný problém s větší aktivitou v injektážním vrtu během měření než byla původní injektovaná aktivita jako u Na-22, vnikly tedy také dvě sady dat, původní publikovaná a ořezaná data, kdy počáteční injektované množství látky je 16 300 Bq/g (oproti původní publikované hodnotě 19 900 Bq/g). Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky pro původní publikovaná data je znázorněna na Obr. 108, Obr. 110 a Obr. 111 a shoda pro ořezaná data pak na Obr. 109, Obr. 110 a Obr. 111. Díky přítomnosti monitorovacích vrtů nebylo dosaženo stejné shody v modelových křivkách pro různé kombinace modelových parametrů, data z monitorovacích

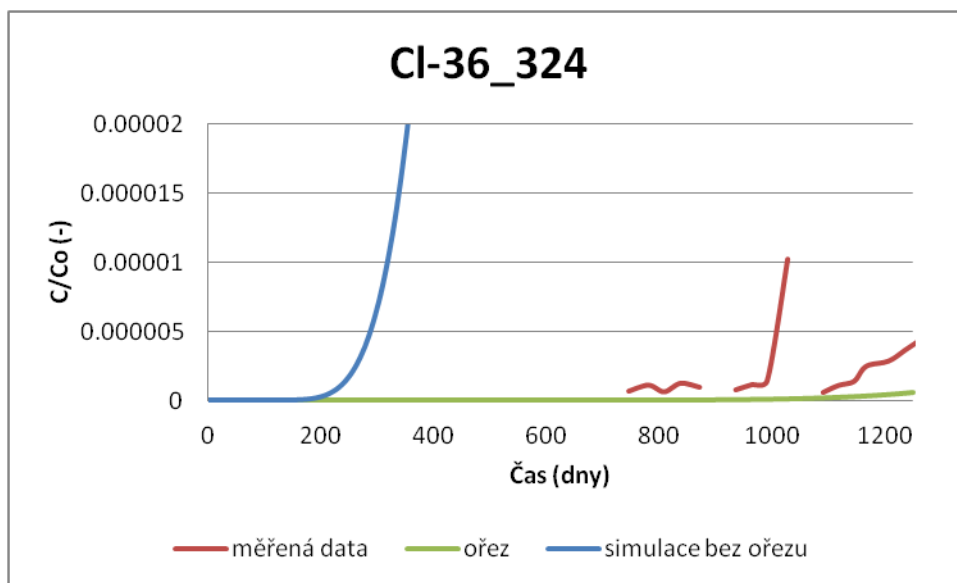
tak snižují stupeň volnosti matematického modelu. Z porovnání vývoje v monitorovacím vrtu je patrné, že blíže horninové prostředí popisují parametry získané po ořezu původních modelových parametrů.



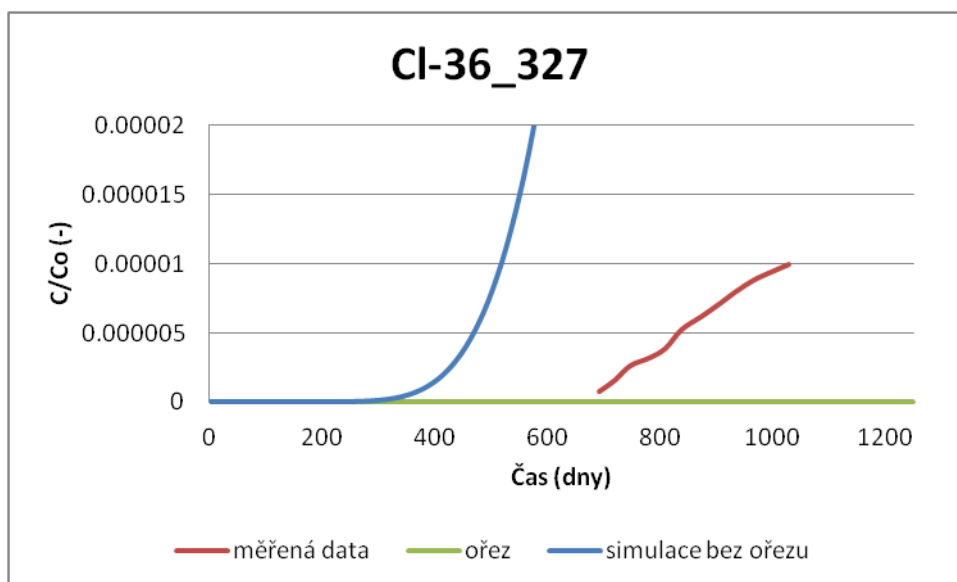
Obr. 108 Shoda mezi měřenými a modelovými výsledky pro původní publikovaná data, vývoj aktivity v injekčním vrtu



Obr. 109 Shoda mezi měřenými a modelovými výsledky pro ořezaná data, vývoj aktivity v injekčním vrtu



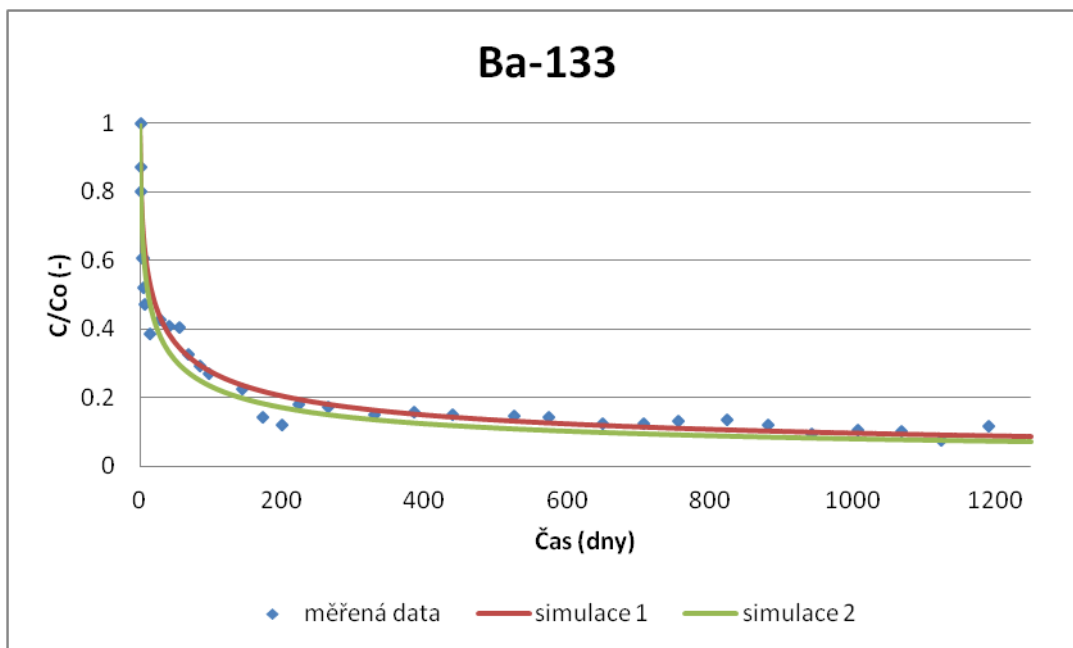
Obr. 110 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky v monitorovacím vrtu



Obr. 111 Shoda mezi měřeními a modelovými výsledky v monitorovacím vrtu

Ba-133

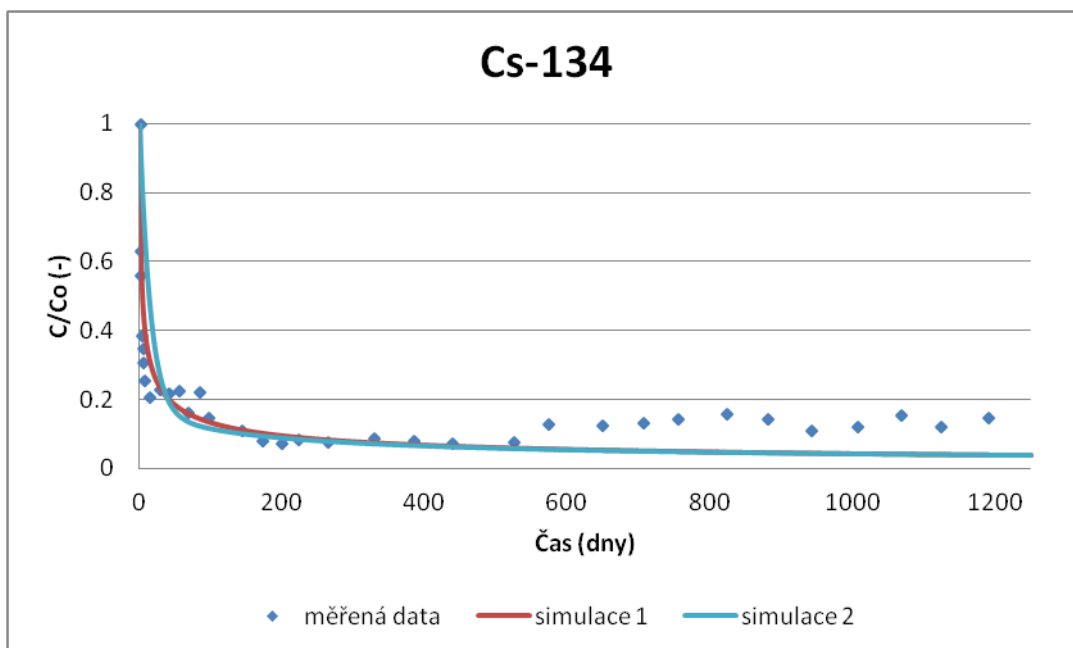
Porovnání vývoje měřené a modelované aktivity v injektážím vrtu pro nuklid Ba-133 je uvedeno na Obr. 112. Z důvodu absence dat z monitorovacích vrtů je opět dosaženo podobných modelovacích křivek pro různou kombinaci parametrů.



Obr. 112 Shoda mezi měřenými a modelovými výsledky pro různou kombinaci modelových parametrů, vývoj aktivity v injektážním vrtu

Cs-134

Porovnání vývoje měřené a modelované aktivity v injektážním vrtu pro nuklid Cs-134 je uvedeno na Obr. 113. Z důvodu absence dat z monitorovacích vrtů je opět dosaženo podobných modelovacích křivek pro různou kombinaci parametrů. Při kalibraci matematického modelu byla věnována pozornost datům přibližně do 500. dne, nárůst aktivity po tomto čase je přičítán ne chování horninového prostředí, ale nastavení experimentu.



Obr. 113 Shoda mezi měřenými a modelovými výsledky pro různou kombinaci modelových parametrů, vývoj aktivity v injektážním vrtu

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Pro konkretizaci modelových parametrů je doporučeno následné převrtání horniny kolem experimentálních vrtů, čímž se sníží stupeň volnosti matematických modelů. Dále u sorbujících se nuklidů je třeba mít ověřené, že výsledné modelové křivky nejsou závislé na diskretizaci oblasti, kdy by změnou diskretizace oblasti bylo dosaženo jiných modelových křivek při stejných materiálových parametrech (Obr. 84).

6.7 Inverzní model MT3D a vyhodnocení PROGEO

Řešení úlohy 9C na pracovišti PROGEO nebylo původně plánováno. Motivací pro řešení úlohy 9C nad rámec objemu prací realizovaných v projektu Transport 4 bylo několik:

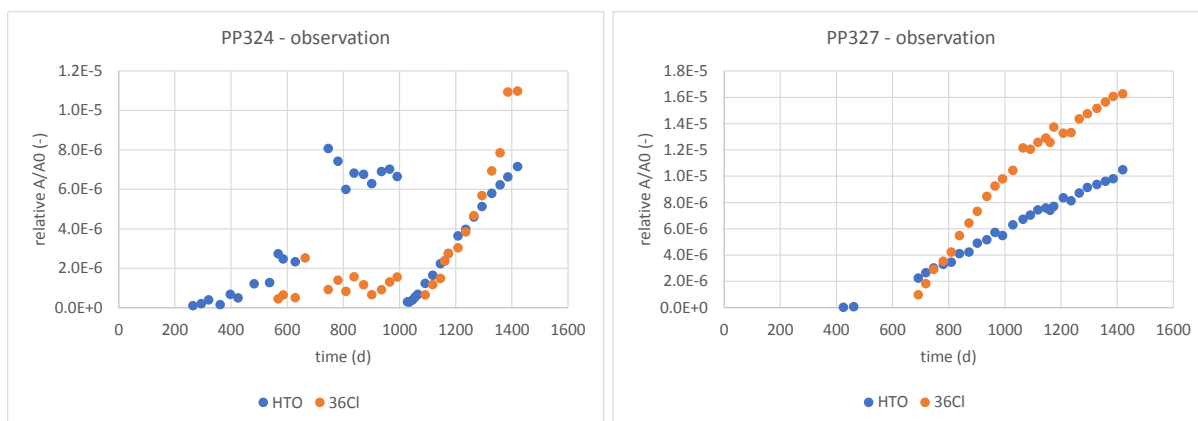
- 1) detailnější seznámení se s realizací a výsledky experimentu TDE, analýza instrumentace a chyb při provádění experimentu, analýza měřených dat – experiment má souvislost s realizovanými podobnými projekty spoluřešitele PROGEO (PAMIRE, Transport 1, Puklinová konektivita),
- 2) aplikace programu MT3DMS na simulaci čistě difuzní úlohy, možnosti využití, analýza chování softwaru a výpočetních solverů,
- 3) aplikace heterogenních vlastností horninové matrice ve větším měřítku – zadání mikrokonektivity dle metodiky použité při simulaci laboratorních difuzních experimentů v projektu Transport 1 (využití mikrosnímků C14-PMMA) a vliv na výsledky simulace,
- 4) kalibrace (fitování) měřených dat a modelové zhodnocení jednoho vybraného stopovače - HTO (velmi podobné měřené aktivity v pozorovacích vrtech byly nicméně měřeny pro oba nesorbentní stopovače HTO a Cl-36).

Poznámky a komentáře k provedení a výsledkům experimentu získané analýzou zadávací dokumentace úlohy 9C a dodaných naměřených výsledků – při realizaci experimentu došlo k několika relativně významným a problematickým událostem, které velmi pravděpodobně ovlivnily průběh a výsledky experimentu a komplikují tak modelovací práce:

- prvním problémem byl únik zhruba 40 ml roztoku z injektážního vrtu PP326 v čase 60 až 90 dní od zahájení experimentu a skokový pokles zdrojové aktivity všech stopovačů o 15 % (uniklé množství roztoku bylo doplněno „čistou“ vodou),
- únik roztoku byl doprovázen poklesem a úplným „rozhozením“ tlakových poměrů mezi vrty po zbytek experimentu – poměrně významný je tlakový rozdíl mezi „nepovedenými“ propojenými vrty PP321/PP322 a nejbližším vrtem PP324 (vzdálený cca 10 cm), respektive i ostatními experimentálními vrty PP326 a PP327 – tlak v PP321/PP322 je o 100 kPa vyšší než v ostatních vrtech (!), přesto v prezentacích ani předaných datech se tomuto rozdílu nevěnuje žádná pozornost (je věnována pouze výrazně menším tlakovým rozdílům mezi trojicí testovaných vrtů). Vliv těchto tlakových gradientů na průběh experimentu je samozřejmě neznámý, čistě teoreticky zde ale vychází pro hydraulickou vodivost horninové matrice $10^{-12} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ a pórovitost 0,005 advektivní rychlost proudění stopovače v řádu desítek centimetrů za rok (!) ve směru proti difuznímu šíření stopovače,
- doporučení pro případné podobné experimenty realizované v PVP Bukov – z pohledu instrumentace a výše zmíněných nejasností týkajících se tlakových rozdílů se jeví mnohem výhodnější situovat vrty do kříže se středovým zdrojovým vrtem,
- experimentální problémy se nevyhnuly ani pozorovacím vrtům PP324 a PP327 – problémy s tlaky, cirkulací, hadičkami atd. – reprezentativní průnikové křivky byly

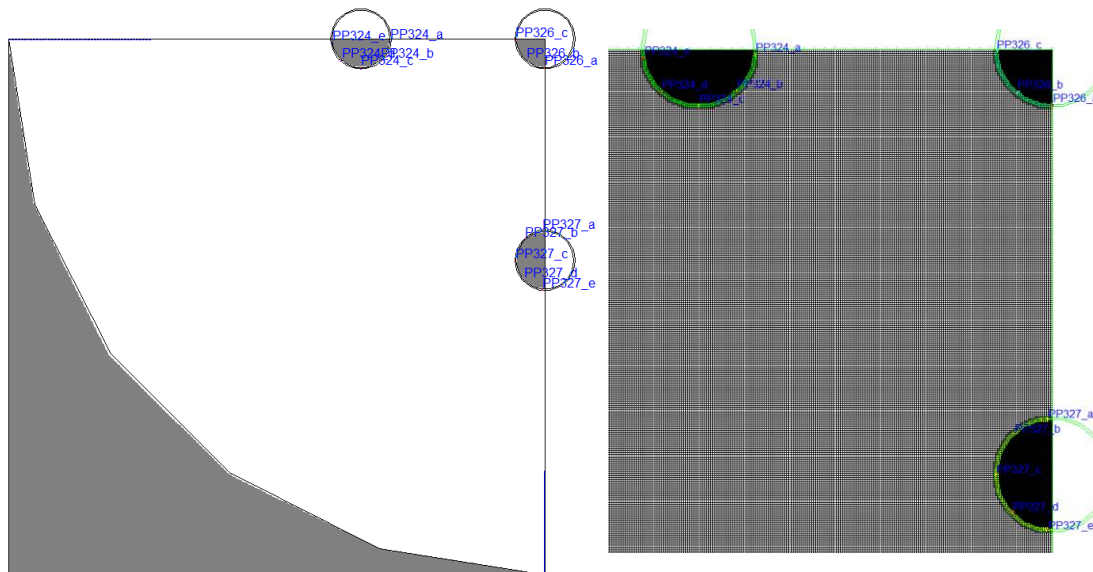
získány až od času zhruba 1000 dní pro PP324 (po úplné reinstalaci testovaného úseku) a 700 dní pro PP327,

- i přes experimentální problémy měřená data celkem jednoznačně ukazují poměrně rychlý příchod stopovačů HTO a Cl-36 do pozorovacích vrtů – cca 300 dní do PP324 (bližší vrt; 12 cm) a 400 dní do PP327 (15 cm),
- poměrně zajímavě a nečekaně vychází porovnání průběhu průnikových křivek relativních aktivit HTO a Cl-36 v pozorovacích vrtech (viz Obr. 114) – lineární průběh pravděpodobně signalizuje již ustálený tok mezi zdrojovým a pozorovacími vrty, efektivní difuzní koeficient reprezentovaný sklonem průnikové křivky pak dokonce naznačuje nižší hodnotu pro HTO než Cl-36 (!),
- velmi nízké relativní aktivity HTO a Cl-36 v pozorovacích vrtech (o 5 řádů nižší než ve zdrojovém vrtu) velmi dobře korelují s prakticky nulovým poklesem Cl-36 ve zdrojovém vrtu. Nejednoznačný (a problematický z pohledu stanovení celkové bilance) je nicméně vysoký pokles aktivity HTO ve zdrojovém vrtu o 70%, který je dále komentován v části výsledků modelu.



Obr. 114 Task 9C – měřené relativní aktivity HTO a Cl-36 v pozorovacích vrtech PP324 a PP327

Při řešení transportní úlohy Task 9C byl použit program MT3DMS, podobně jako při řešení ostatních úloh Task 9. Úloha je řešena zjednodušeně jednovrstevným modelem ve 2D s modelovou doménou tvořenou pravoúhelnou sítí výpočetních buněk 1×1 mm, viz Obr. 115. Je využita osová symetrie úlohy a je simulován pouze čtvrtkruhový výřez horninové matrice o poloměru 500 mm. Mocnost modelové vrstvy je 1 m a odpovídá testovanému úseku vrtu. Zdrojový a pozorovací vrty jsou zadány „volnou“ puklinou s odpovídající pórovitostí (zhruba jednotkovou) tak, aby objem vody ve vrtech (celkový objem v puklině a hadičkách) odpovídal zadání. Pro zdrojový a pozorovací vrty tak nejsou předepsány žádné okrajové podmínky, ale jsou definovány pouze počáteční hodnoty aktivity ve zdrojovém objemu (dle aktivit v roztoku) a nulové počáteční aktivity v horninové matici a pozorovacích vrtech.



Obr. 115 Tack 9C – MT3DMS – diskretizace modelové domény – vlevo celý model o velikosti 500x500 mm, vpravo výřez s vyznačenou výpočetní sítí modelových buněk 1x1 mm

Úloha 9C byla řešena jako čistě difuzní (nulový hydraulický gradient, nulová sorpce) s radioaktivní přeměnou s poločasem rozpadu HTO 12,3 let. Hodnoty pórovitosti a pórového difuzního koeficientu byly kalibrovány v průběhu simulací tak, aby bylo dosaženo přiměřené shody mezi měřenými a modelovými průnikovými křivkami. V modelech byly zadány homogenní (stejně) hodnoty transportních parametrů v celém prostoru horninové matrice. V omezeném dosahu 1 mm od stěny vrtu byla uvažována porušená zóna (BDZ) s mírně vyššími hodnotami parametrů (velikost dosahu 1 mm byla zadána na základě zkušeností z dřívějších modelovacích prací). Je potřeba zdůraznit, že z pohledu geometrie úlohy a vzájemné vzdálenosti vrtů 10-15 cm nepředpokládáme výraznější vliv BDZ na transport nesorbentních stopovačů HTO a Cl-36 (má ale význam u sorbujících se Na-22, Cs-134 a Ba-133).

Úloha byla nakonec řešena celkem ve 3 variantách, protože se pro HTO nepodařilo nakalibrovat zároveň křivku v injektážním vrtu a v pozorovacím vrtu (vrtech):

- 1) varianta kalibrace aktivity v injektážním vrtu PP326 – porovnání modelových a měřených průnikových křivek v injektážním vrtu i v pozorovacích vrtech je vykresleno v Obr. 116. Kalibrované hodnoty parametrů horninové matrice jsou:
 - pórovitost (n) – 0,009 – hodnota poměrně dobře odpovídá měřené pórovitosti na vzorcích a hodnotám zadávaným ostatními spoluřešiteli,
 - pórový difuzní koeficient (D_p) – $4,63 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ – efektivní difuzní koeficient ($D_{eff} = D_p \cdot n$) $4,17 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ opět odpovídá měřeným hodnotám a výsledným hodnotám u ostatních řešitelů.

Z grafu je patrná velmi dobrá shoda průběhu aktivity v injektážním vrtu, naopak velmi problematická je ale měřená a modelová aktivita v pozorovacích vrtech. Modelové hodnoty sice sledují trend měřených hodnot, jsou ale vyneseny na vedlejší ose a jsou o 3 řády vyšší než měřené (!). Problém je zde především z pohledu bilance aktivity HTO – vysoký pokles v injektážním vrtu za měřené období 1500 dní (o 70%, respektive 55% po odečtení úniku 15%) a prakticky nulovou aktivitu v pozorovacích vrtech nelze jednoduše vysvětlit pouze množstvím HTO v pórovém prostoru horninové matrice.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

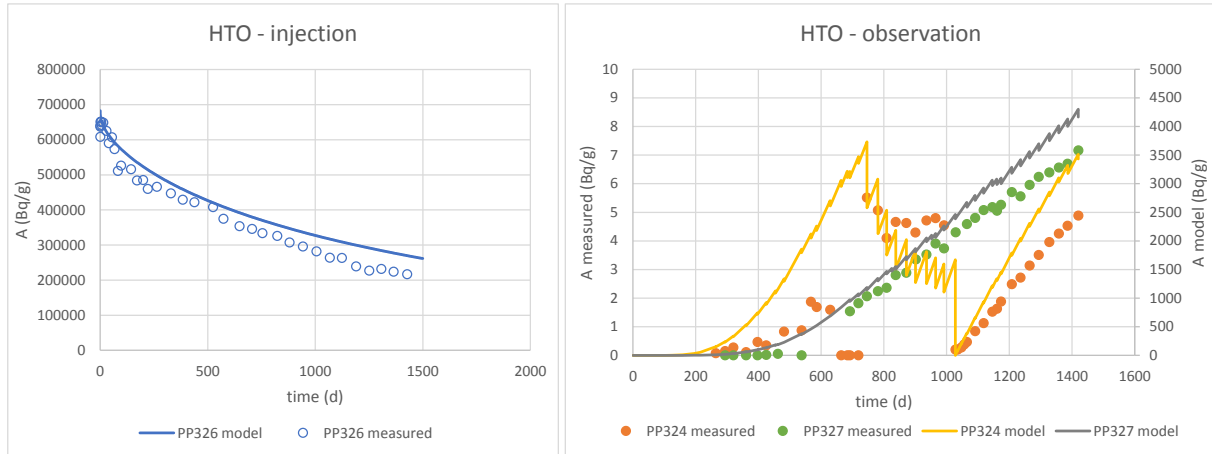
2) varianta kalibrace aktivity v pozorovacích vrtech PP324 a PP327 – porovnání modelových a měřených průnikových křivek v injektážním vrtu i v pozorovacích vrtech je vykresleno v Obr. 117. Kalibrované hodnoty parametrů horninové matrice jsou:

- pórovitost (n) – 0,000003 – extrémně nízká kalibrovaná hodnota o více než 3 řády nižší (!) než měřená,
- pórový difuzní koeficient (D_p) – $7,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ – srovnatelná hodnota jako v předchozí variantě, nicméně efektivní difuzní koeficient ($D_{eff} = D_p \cdot n$) $2,3 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ o 3 řády nižší daný nízkou pórovitostí. Hodnota v řádu 10^{-16} nicméně odpovídá hodnotě stanovené analytickým výpočtem v části 6.8.

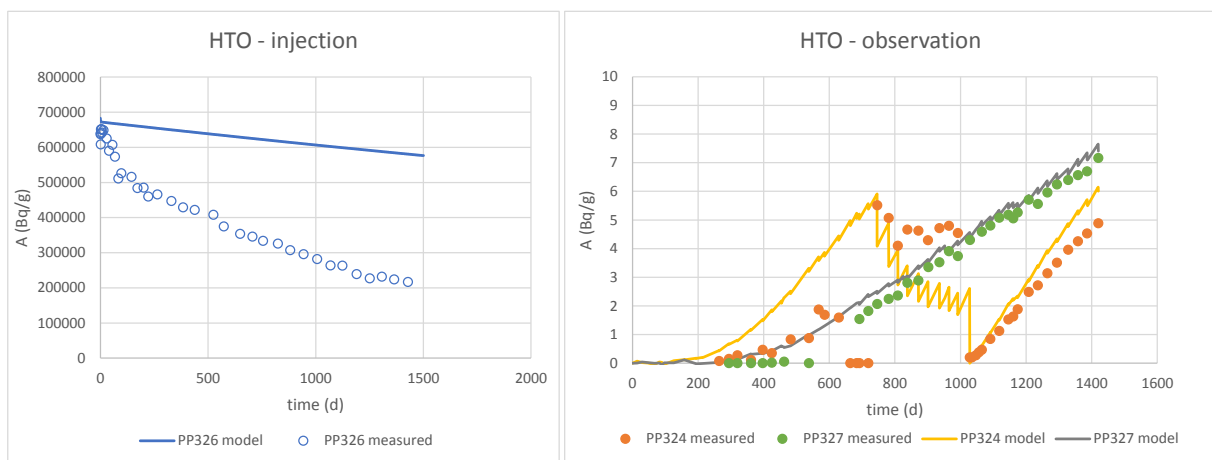
Z grafu je patrná velmi dobrá shoda průběhu aktivity v obou pozorovacích vrtech PP324 i PP327 (vzhledem k téměř stejným měřeným relativním aktivitám HTO a Cl-36 platí uvedené kalibrované hodnoty pro oba stopovače). S velmi nízkou hodnotou aktivity v pozorovacích vrtech souvisí modelový velmi nízký pokles aktivity ve zdrojovém vrtu, který sice neodpovídá měřenému poklesu aktivity HTO, ale velmi dobře odpovídá minimálnímu poklesu měřené aktivity Cl-36.

Průběh Cl-36 lze tedy poměrně dobře simulovat v injektážním i pozorovacích vrtech pomocí nízké hodnoty pórovitosti. Otázkou je, jak modelově vysvětlit nepoměr mezi nízkou aktivitou HTO v pozorovacích vrtech a vysokým poklesem aktivity ve zdrojovém vrtu (případně zda se nejedná o chybu měření, vliv tlakových rozdílů mezi vrty a advektivní proudění apod.).

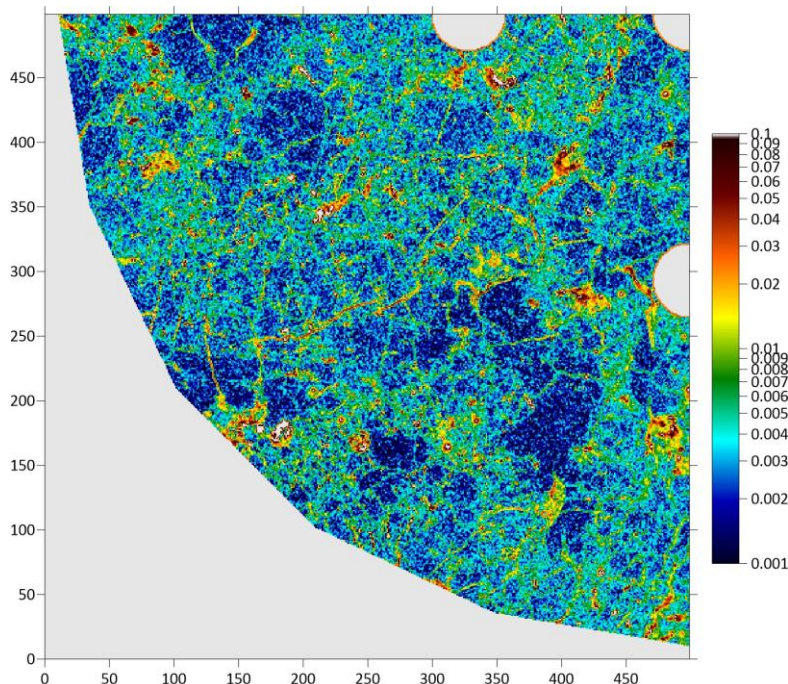
3) varianta s mikroporozitou – při hledání vysvětlení nejasností v měřených hodnotách HTO byla simulována varianta s heterogenním rozložením mikropórovitosti horninové matrice dle snímku získané metodou C14-PMMA. Tato varianta byla pouze testovací, skutečný snímek z dané lokality pro takto velkou modelovou doménu (0,5 m) nebyl k dispozici, použit byl upravený mikrosnímek zpracovávaný v rámci řešení dílčího projektu Transport 1, viz Obr. 118. Cílem bylo ověřit, zda by se dal průběh aktivity HTO vysvětlit heterogenitami v prostředí horninové matrice. Model v této variantě nebyl kalibrován, nicméně výsledky simulací poukázaly na velmi podobné závěry, jako v předchozích dvou variantách s homogenním rozložením pórovitosti – u stopovače HTO lze kalibrovat model buď na hodnoty z injektážního vrtu, nebo na hodnoty z pozorovacích vrtů, bohužel ne současně. Přestože jsou v této variantě vlastnosti horninové matrice mezi jednotlivými vrty zadány s vysokou mírou heterogenity, má celkové „chování“ takto zadané domény na vzdálenost mezi vrty 11-15 cm víceméně homogenní charakter.



Obr. 116 Task 9C – simulace HTO v MT3DMS – varianta kalibrace aktivity v injektážním vrtu PP326. Vlevo porovnání měřené a modelové průnikové křivky v injektážním vrtu, vpravo v pozorovacích vrtech.



Obr. 117 Task 9C – simulace HTO v MT3DMS – varianta kalibrace aktivity v pozorovacích vrtech PP324 a PP327. Vlevo porovnání měřené a modelové průnikové křivky v injektážním vrtu, vpravo v pozorovacích vrtech.



Obr. 118 Task 9C – heterogenní pórovitost zadaná na základě mikrosnímku horninové matrice

6.8 Zjednodušené analytické řešení (TUL)

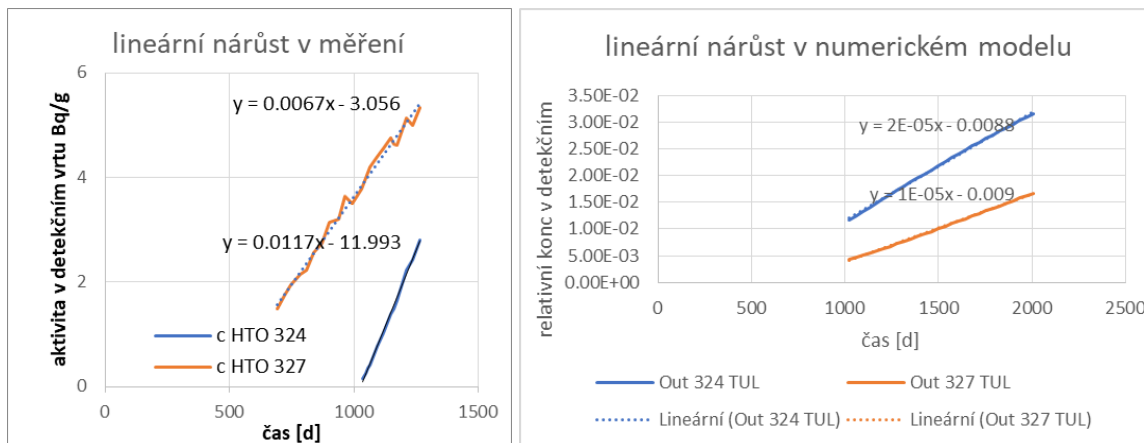
Vzhledem k tomu, že průběh měřené koncentrace v detekčních vrtech je v poměrně dlouhém úseku lineární (Obr. 119), lze to interpretovat jako konstantní tok látky do vrtu. Tedy je možné uvažovat tento stav jako kvazi-ustálené pole koncentrace mezi zdrojovým a detekčním vrtem, při zjednodušení geometrie do radiální symetrie (ředění v detekčním vrtu rozložené do celého obvodu) a předpokladu neměnné koncentrace v zdrojovém a cílovém vrtu (což při daných objemech rezervoárů a v přiměřeně krátkém časovém úseku platí). Pro tok v segmentu odpovídajícím rozměrům detekčního vrtu platí

$$Q_c = \varphi d D_e \frac{c_1 - c_2}{\ln r_2 / r_1}$$

což musí být zároveň v souladu s bilancí v monitorovacím vrtu, tj. rychlostí nárůstu koncentrace, následovně

$$\frac{dc}{dt} = \frac{Q_c}{V}$$

Sklony křivek jsou znázorněny na Obr. 119 a číselně uvedeny v Tab. 39. Na základě prvního vztahu je pak určen odpovídající efektivní difúzní koeficient (další sloupce Tab. 39). Je zřejmé, že hodnota je nerealisticky nízká. Jinak ale nelze pomalý nárůst vysvětlit, bez existence alespoň části objemu takto řádově nízkým koeficientem. Zároveň ale tato hodnota nekoresponduje s rychlostí poklesu ve zdrojovém vrtu (při velmi nízkém D_e by k poklesu prakticky nedošlo), tedy lze očekávat, že část zasažené horninové matrice bude mít hodnotu blízkou predikované, ale kromě toho bude někde v sledovaném prostoru existovat bariéra s o několik řádů nižším koeficientem.



Obr. 119 Ověření předpokladu lineárního růstu koncentrace a souvisejícího konstantního toku hmoty.

Tab. 39 Výsledky analytického řešení a interpretace rychlosti toku mezi vrtů.

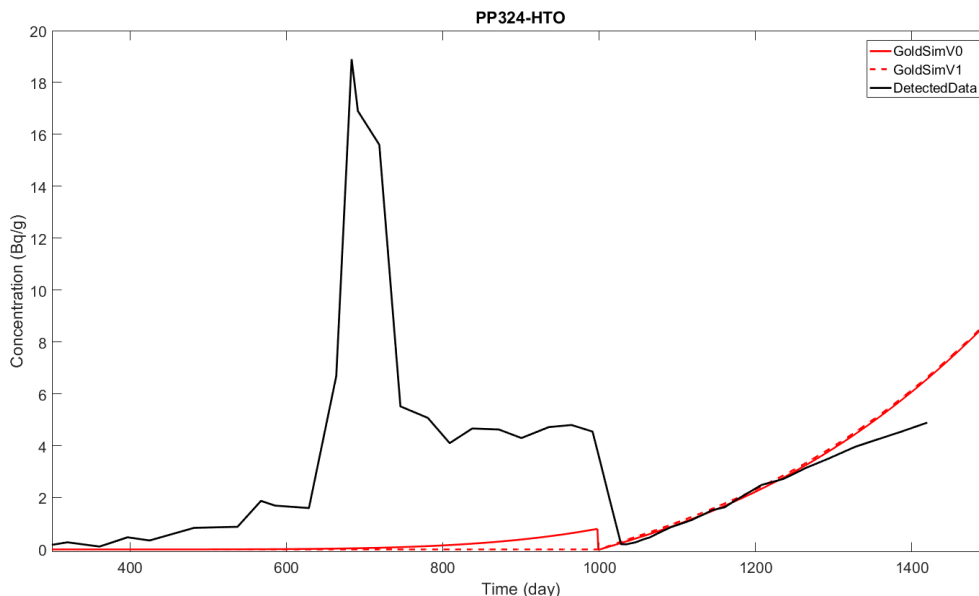
	dc/dt měření [1/s]	D_e fit analyticky [m^2/s]	D_e s korekcí poklesu injektážní vrt [m^2/s]
vrt324	2,14E-13	4,7E-16	9,4E-16
vrt327	1,19E-13	2,55E-16	4,6E-16

6.9 Alternativní vyhodnocení (FJFI)

Časový průběh relativních koncentrací v PP324 je nemonotónní, po výměně vody v čase okolo 1000 dnů je nárůst koncentrace v čase lineární. Pro analýzu a interpretaci tohoto průběhu bylo provedeno na FJFI několik výpočtů za pomoci 2D modelu vytvořeném v GoldSim.

Na základě pilotních výpočtů bylo zjištěno, že není možné 2D modelem současně popsat data naměřené v injekčním vrtu (PP326) a pozorovacích vrtech (PP324 a PP327). Proto jsme pro výpočet časových průběhů v PP324 použili jako hraniční podmínky v PP326 naměřené koncentrace v injekčním vrtu. Konkrétně jsme do modelu zavedli element GoldSim *Lookup Table* pomocí kterého jsme v každém kroku interpolovali koncentraci v elementech Cell Pathway, které reprezentovaly PP326. Protože 2D model je homogenní, hledali jsme optimální hodnoty D_e pro každý z pozorovacích vrtů zvlášť.

Na Obr. 120 je srovnání časových průběhů koncentrací v PP324, černá plná čára odpovídá detekovaným datům, červená čára pak vypočteným hodnotám pro model bez okrajové podmínky v PP324. Simulace byla získána pro $D_e=4,35E-14 m^2/s$, což je o řád nižší, než bylo očekáváno (porosita 0,0094). V časovém intervalu do výměny vody, tj. do cca 1000 dnů, byla detekovaná koncentrace vyšší, po výměně je naopak simulovaný nárůst prudší. Lze očekávat, že větší koncentrace v prvním intervalu vedla na difúzi z pozorovacího vrtu PP324 do matrice, což následně může ovlivnit difúzní tok do PP324 po výměně, tj. po 1000 dnech. Abychom tuto hypotézu ověřili, sestavili jsme alternativní model, který měl na časovém intervalu 1-1000 dnů v PP324 hraniční podmínku na základě detekovaných dat (červená čerchovaná čára na Obr. 120). Výsledky simulace ukazují, že vliv okrajové podmínky nemá pozorovatelný vliv na průběh nárůstu koncentrace v PP324 po čase výměně.



Obr. 120 Srovnání časových průběhů koncentrací v PP324 pro model s PP324 bez hraniční podmínky.

6.10 Závěry

Transportní úloha řešená v rámci Task 9C je z pohledu modelování důležitá svou vazbou na probíhající in-situ difúzní experiment TDE (projekt REPRO). Simulace úlohy, kde jsou k dispozici konkrétní měřená data, je vždy vhodnější pro komplexní ověření metodiky modelovacích postupů, analýzu, zpracování a vyhodnocení vstupních a výstupních dat, než simulace hypotetické úlohy (pouze se vstupními transportními parametry, např. Task 9D). Zajímavý je již samotný experiment, protože z něj lze čerpat zkušenosti pro případný návrh vlastních transportních experimentů, např. v podzemní laboratoři Bukov.

7 Řešení úlohy transportu v měřítku SA (Task 9D)

Podúloha 9D má za cíl extrapolaci modelů a výsledků z měřítka in-situ experimentů do měřítka a podmínek uvažovaných v bezpečnostní analýze (safety assessment, SA). Konfigurace modelu vychází z podúlohy 9A a v dílčích variantách jsou postupně přidávány vlastnosti a jevy důležité při reálné SA. V původním plánu vydaném GWFTS byly prezentovány základní myšlenky čtyř variant, nakonec byly realizovány dvě, 9D-1 a 9D-2, jak českými týmy, autory této zprávy, tak v projektu jako celku.

Z důvodu omezeného zapojení dalších týmů GWFTS do 9D nebylo provedeno koordinátorem porovnání, které by bylo možné zahrnout do této zprávy. Porovnání je podrobně zpracováno mezi spoluautorskými týmy této zprávy.

7.1 Shrnutí zadání a dat

Úloha je postavena na syntetické zjednodušené geometrii (Obr. 121), ale s realistickými parametry odpovídajícími podmínkám transportu z úložiště na „rozhraní s biosférou“, konkrétně s délkou „pukliny“ 1 km. Uvažován je transport (advekce a hydrodynamická disperze) jednou puklinou, retenční procesy v horninové matici (difúze, sorpce) a radioaktivní rozpad. Právě rozpad je kromě měřítka hlavní změnou proti úloze 9A. Dvě varianty pak rozlišují případy fiktivních jednotlivých stopovačů a zjednodušené rozpadové řady uranu. Zadání je podrobně dáno zprávou (Crawford, 2019).

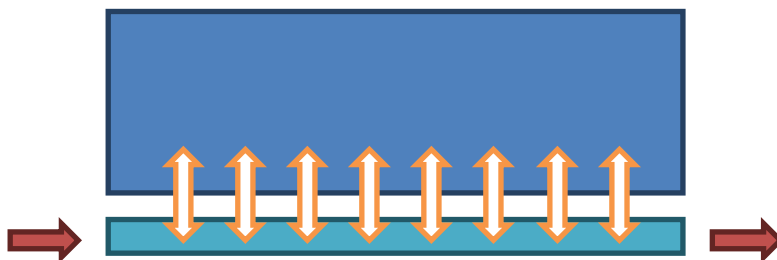
Vztah úloh v různém měřítku, in-situ experimentu WPDE (9A) a bezpečnostní analýzy (9D) je vyjádřen parametry v Tab. 40. Efekt retardace na transport je vyjádřen „F faktorem“, což je poměr smáčeného povrchu pukliny a průtoku vyjádřený v (a/m). Úloha 9D je specifikována s hodnotou F faktoru dle studie SR-Site, který je cca o dva řády vyšší než u experimentu WPDE. Příčná plocha pukliny v WPDE (mezikruží) je $2,17 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$, což pro „plošnou“ konfiguraci úlohy 9D odpovídá:

- při difúzi do matrice jen na jedné straně pukliny ekvivalentní šířce pukliny 177 mm a rozevření 1,22 mm (použito pro modely TUL a PROGEO s explicitně vyjádřenou geometrií),
- při difúzi do matrice na obou stranách pukliny ekvivalentní šířce 88 mm a rozevření 2,44 mm (použito pro modely FJFI a ÚJV, s využitím „zabudovaného“ analytického řešení difúze v prvku Pipe v GoldSim).

Zadání nspecifikuje konkrétní způsob modelování disperze v puklině, jako výchozí je navržena hodnota Pecletova čísla $Pe=10$, což odpovídá při standardním modelu hydrodynamické disperze a rozměru úlohy podélné disperzivitě 100 m.

Příčný rozměr domény matrice rovněž není specifikován – volba konečné nebo nekonečné vzdálenosti je podmíněna použitým modelem, případná konkrétní vzdálenost je ověřena ve vztahu k vzdálenosti průniku ve výsledcích modelu.

Parametry horninové matrice vycházejí z úlohy 9A a uvažována je hornina VGN jako dominantní typ v experimentální sérii REPRO. Konkrétní parametry jsou uvedeny zároveň pro jednotlivé stopovače pro varianty 9D-1 a 9D-2 v podkapitolách níže. V obou případech je uvažována aniontová exkluze, tj. řádově nižší efektivní difúzní koeficient a odpovídající nižší „transportní porozita“ (objem pórů dostupný pro částice stopovače).



Obr. 121 Schéma úlohy transportu s difúzí do matrice v měřítku odpovídajícím bezpečnostnímu výpočtu.

Tab. 40 Parametry toku a interakce hornina-matrice pro Task 9D v kontextu Task 9A (WPDE).

	WPDE-1	WPDE-2	SA Task 9D
q (m ³ /a)	1,05×10 ⁻²	5,26×10 ⁻³	3,55×10 ⁻³
v (m/a)	48,48	24,24	16,36
t _w (a)	0,0393	0,0786	61,12
F (a/m)	32,14	64,29	5×10 ⁴

7.1.1 Krok 9D-1 – fiktivní stopovače

Úloha dle konfigurace uvedené výše je definována dle (Crawford, 2019) pro 4 fiktivní stopovače (reprezentující svými parametry modelové případy skutečných radionuklidů) označené A-D (Tab. 41) a 4 varianty dalších parametrů označené a-d (Tab. 43). Z těchto variant byly fakticky uvažovány jen první dvě (a) s pulsním vstupem (tok 1 mol/a) trvání 1000 let a bez rozpadu, (b) kontinuální vstupní tok 1 MBq/a a s rozpadem. Hodnoty toku jsou jen technické, vzhledem k uvažované linearitě modelu neovlivňují kvalitativně výsledek.

Stopovače reprezentují primárně případy různě velké sorpce (Tab. 41), zároveň nesorbující stopovač A odpovídá aniontu, s parametry uvažovanými pro chlor v úloze 9A. Dostupná porozita pro stopovač A je uvažována stejně jako dříve v 9A jako 0,000436, nikoli jen podle poměru hodnot D_e , jak je komentováno v zadávací zprávě (Crawford, 2019). Stopovače mají zároveň v pořadí A-D rostoucí poločas rozpadu. Hustota horniny byla zadána 2 741 kg/m³.

Jako výstupy jsou předepsány normalizované průnikové křivky (časový průběh hmotnostního toku nebo toku aktivity na výstupu normalizovaný vstupním tokem) a příčné profily v polovině délky úlohy, v časech, které jsou pro jednotlivé stopovače rozdílné (Tab. 42). Profil má být určen jako celková koncentrace (varianta „a“) nebo aktivita (varianta „b“) v bodech profilu zahrnující rozpuštěnou i sorbovanou formu. Práce řešitelů v podobě analýzy prvních verzí modelů přispěly k výběru uvedených časů, které jsou vhodnější než původně určené (bylo již zahrnuto v citované revizi zadání).

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Tab. 41 Parametry modelových stopovačů A-D dle zadání, porozita odpovídá relativnímu objemu pórů horniny dostupných pro daný stopovač.

Stopovač	K_d (m ³ /kg)	D_e (m ² /s)	$T_{1/2}$ (a)	porozita (-)
A (nesorbující)	0	$5 \cdot 10^{-15}$	20	0,000436
B (slabě sorbující)	10^{-4}	$1,83 \cdot 10^{-13}$	1000	0,0065
C (středně sorbující)	10^{-3}	$1,83 \cdot 10^{-13}$	10000	0,0065
D (silně sorbující)	0,1	$1,83 \cdot 10^{-13}$	1000000	0,0065

Tab. 42 Časy pro výstup profilu

Stopovač	Čas pro výstup profilu [a]
A (nesorbující)	500
B (slabě sorbující)	5000
C (středně sorbující)	50000
D (silně sorbující)	500000

Tab. 43 Varianty modelu dle zadání (výpočty jsou provedeny pro první dvě).

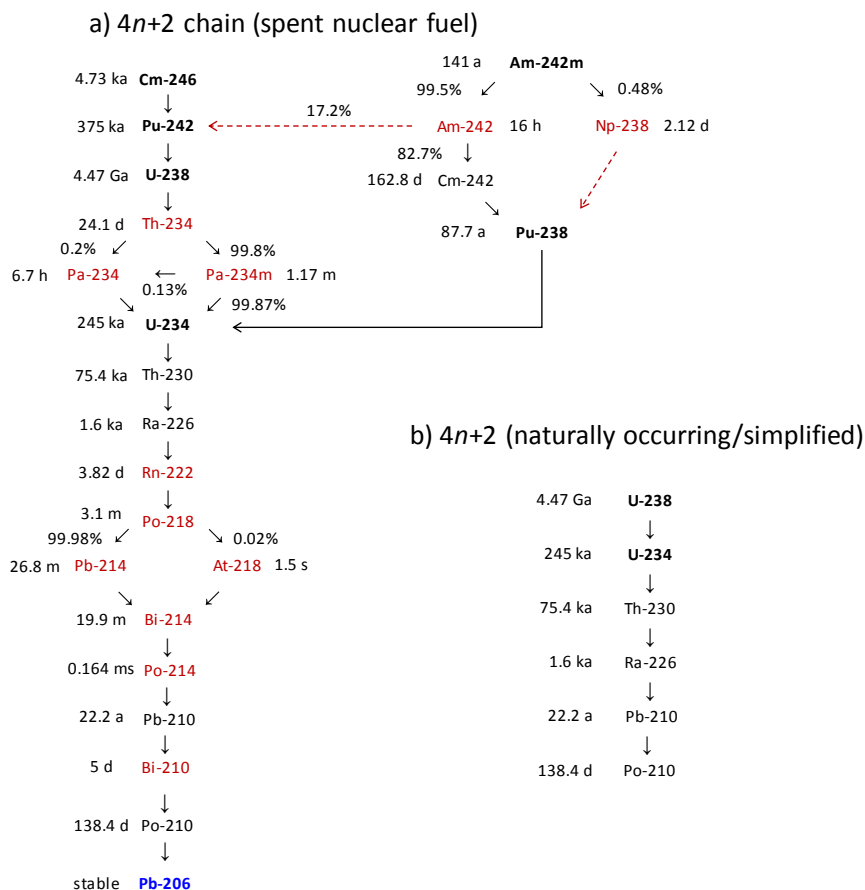
Varianta	Rozpad	Vstupní okrajová podmínka	Parametry
„a“	N	Puls	Konstantní
„b“	A	Kontinuální	Konstantní
„c“	N	Puls	Variabilní
„d“	A	Kontinuální	Variabilní

7.1.2 Krok 9D-2 – rozpadová řada

Druhá varianta 9D-2 uvažuje reálné radionuklidy, vzájemně svázané rozpadovou řadou. Pro potřeby modelové úlohy byla navrhovatelem úlohy zkonstruována zjednodušená řada 6 radionuklidů začínajících U-238, souvislost s obecným procesem rozpadů je znázorněn na převzatém Obr. 122. Poločas rozpadu se u produktů postupně zkracuje, takže lze předpokládat ustavení rovnováhy vzniku a zániku částic.

Zadán je kontinuální přítok pouze U-238, s tokem aktivity 1 MBq/a (opět jde jen o technickou volbu). Radionuklidům jsou přiřazeny transportní parametry dle Tab. 44.

Jako výstup jsou opět požadovány průnikové křivky toku aktivity jednotlivých stopovačů normalizované vstupním tokem U-238 a příčné profily, vyhodnocené v polovině délky modelu v čase 100 ka.



Obr. 122 Odvození zjednodušené rozpadové řady (převzato z Crawford, 2019).

Tab. 44 Zadané parametry uvažovaných radionuklidů (dle (Crawford, 2019), kde je také vysvětlen původ dat).

Nuklid	Dominantní specie	K_d (m^3/kg)	D_e (m^2/s)	$t_{1/2}$ (a)
U-238	$Ca_2UO_2(CO_3)_3$	$8,0 \times 10^{-2}$	$1,83 \times 10^{-13}$	$4,47 \times 10^9$
U-234	$Ca_2UO_2(CO_3)_3$	$8,0 \times 10^{-2}$	$1,83 \times 10^{-13}$	$2,45 \times 10^5$
Th-230	$Th(OH)_2(CO_3)_2^{2-}$	8	5×10^{-15}	$7,54 \times 10^4$
Ra-226	Ra^{2+}	$6,0 \times 10^{-2}$	$1,83 \times 10^{-13}$	$1,6 \times 10^3$
Pb-210	$PbCl^+$	2	$1,83 \times 10^{-13}$	$2,22 \times 10^1$
Po-210	$PoO(OH)_2$	2	$1,83 \times 10^{-13}$	$3,79 \times 10^{-1}$

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

7.2 Řešení Flow123d (TUL)

Koncept modelu je založen na kombinaci 1D pukliny a 2D horninové matrice. Myšlený třetí rozměr horninové matrice (vstup Flow123d) je roven 0,177 m, což zajišťuje korektní hodnotu smáčeného povrchu (dle zadávací dokumentace). Průtočná plocha pukliny je 217 mm², což odpovídá rozevření 1,226 mm.

Délka pukliny je 1000 m, mocnost horninové matrice 1 m (10 m v některých výpočtech). Horninová matrice je rozdělena do vrstev o různé mocnosti. Nejtěsnější vrstva je nejbližší puklině, směrem od ní mocnost vrstev roste. Toto bylo zavedeno s cílem zajistit jemnější diskretizaci v blízkosti rozhraní puklina/hornina.

Hydraulická vodivost v puklině byla spočtena z kubického zákona. Hydraulická vodivost v horninové matrici byla spočtena ze známé hodnoty permeability (převzaté ze zadávací dokumentace Tasku 9A). Parametry a okrajové podmínky proudění jsou shrnuty v Tab. 45. Z tabulky je patrné, že výsledná rychlost (tok) v puklině odpovídá hodnotám uvedeným v zadávací dokumentaci.

7.2.1 Úloha 9D-1

Parametry modelu transportu jsou použity dle Tab. 41 a další parametry specifické pro model Flow123d jsou shrnuty v Tab. 45 a Tab. 46 (navíc rozlišena puklina a matrice). Okrajovou podmínkou transportu byl konstantní hmotnostní tok 1 kg/rok na vtoku do pukliny, což na normalizované průnikové křivky nemá vliv a pro příčné profily byl použit přepočtený tok na ekvivalent toku dle zadání.

Tab. 45 Task9D – Flow123d – parametry a OKP modelu proudění

Hydraulická vodivost v puklině	39,447e6 m/a
Hydraulická vodivost v hornině	3,096e-5 m/a
OKP "vtok"	Celkový tok 16,36 m/a
OKP "odtok"	Dirichlet $\Phi = 0$ m
OKP "zbytek"	Homogenní Neumannova (nulový tok)
Tok/rychlost	$3,55e-3 \text{ m}^3/\text{a} \sim 16,36 \text{ m/a}$

Tab. 46 Task9D – Flow123d – parametry modelu transportu

	Horninová matrice	Puklina
Porozita	0,0065 (4,3637e-4 pro stopovač A)	1
Podélná disperzivita	0 m	100 m
Příčná disperzivita	0 m	10 m

Výsledky simulací transportu ve formě normalizovaných průnikových křivek a koncentračních profilů ve stanovených časech v linii kolmé na puklinu v polovině její délky jsou součástí vzájemného srovnání v kapitole 7.6.

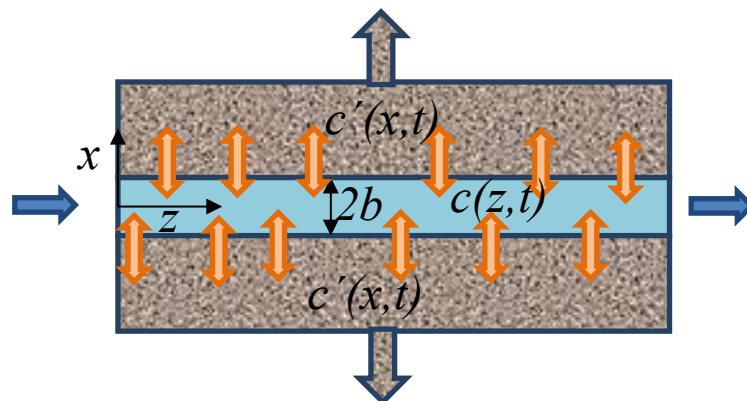
7.2.2 Úloha 9D-2

Parametry modelu transportu jsou shrnuty v Tab. 44. Výsledky simulací transportu ve formě normalizovaných průnikových křivek jsou součástí vzájemného srovnání v kapitole 7.6.

Průnikové křivky nejsilněji sorbujících členů rozpadové řady jsou výrazně odlišné od průnikových křivek ostatních řešitelů. Vylučovací metodou jsme určili, že je to důsledek prostorové diskretizace horninové matrice v blízkosti rozhraní puklina/hornina.

7.3 Varianty řešení FJFI

Úloha 9D byla na FJFI chápána jako úloha, která měla aplikovat výsledky získané z modelování in-situ experimentů analyzovaných v předešlých úlohách na řešení transportní úlohy odpovídající scénáři a měřítkům typickým pro bezpečnostní analýzy. V souladu se zadávací dokumentací jsme jako úvodní model uvažovali model zidealizované pukliny ve tvaru rovinných desek ohraničených z obou stran homogenní izotropní horninovou maticí neomezené tloušťky (Obr. 123).



Obr. 123 Schéma transportu v zidealizované puklině s rozevřením $2b$; modré šipky označují směr advektivního toku, oranžové šipky difúzi do matrice, $c(z,t)$ označuje koncentraci radionuklidu v proudící vodě, $c'(x,z,t)$ koncentraci v pórové vodě horninové matrice.

7.3.1 Analytické řešení

Transport radionuklidů v této zidealizované puklině je možné popsat pomocí dvou souborů parciálních diferenciálních rovnic (Sudicky et al. 1982). První soubor rovnic popisuje advektivní transport podél pukliny ve směru osy z

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + v \frac{\partial c_1}{\partial z} + \lambda_1 c_1 - \frac{\varepsilon D_{p,1}}{b} \frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=b} = 0 \quad (7.1)$$

⋮

$$\frac{\partial c_n}{\partial t} + v \frac{\partial c_n}{\partial z} + \lambda_n c_n - \lambda_{n-1} c_{n-1} - \frac{\varepsilon D_{p,n}}{b} \frac{\partial c_n}{\partial x} \Big|_{x=b} = 0, 0 \leq z \leq \infty.$$

kde x, z jsou prostorové proměnné, t časová proměnná, $c_i = c_i(z, t)$ je koncentrace i -tého radionuklidu ($i \in [1, n]$) ve vodném prostředí pukliny, $c'_i = c'_i(x, z, t)$ je koncentrace i -tého radionuklidu v pórové vodě horninové matrice, v je rychlost proudění v puklině, λ_i rozpadová

konstanta i -tého radionuklidu, ε je porozita horninové matrice, $2b$ je rozevření pukliny, $D_{p,i} = \tau D_{w,i}$ je difúzní koeficient i -tého radionuklidu v pórech, τ je tvarový/geometrický faktor, $D_{w,i}$ je difúzní koeficientu i -tého radionuklidu ve vodě.

Druhý soubor rovnic popisuje difúzi a sorpci v horninové matici v kolmé směru, ve směru osy x

$$\frac{\partial c'_1}{\partial t} - \frac{D_{p,1}}{R_1} \frac{\partial^2 c'_1}{\partial x^2} + \lambda_1 c'_1 = 0 \quad (7.2)$$

⋮

$$\frac{\partial c'_n}{\partial t} - \frac{D_{p,n}}{R_n} \frac{\partial^2 c'_n}{\partial x^2} + \lambda_n c_n - \frac{R_{n-1} \lambda_{n-1} c'_{n-1}}{R_n} = 0, b \leq x \leq \infty,$$

kde $R_i = 1 + (\rho_d / \varepsilon K_{d,i})$ je retardační koeficient i -tého radionuklidu, ρ_d je objemová hmotnost materiálu, $K_{d,i}$ je rovnovážný distribuční koeficient i -tého radionuklidu.

Byly uvažovány následující počáteční a okrajové podmínky

$$c_i(z, 0) = 0, c_i(0, t) = c_{o,i} \delta(t) \quad (7.3)$$

$$c'_i(x, z, 0) = 0, c'_i(b, z, t) = c_i(z, t), c'_i(\infty, z, 0) = 0.$$

Analytické řešení této transportní úlohy pro koncentraci c_1 prvního radionuklidu rozpadové řady lze zapsat ve tvaru (Sudicky et al. 1982)

$$c_1(z, t) = \theta(t - T) c_{0,1} \frac{\gamma_1 z}{2\pi^{1/2} T^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\gamma_1 z)^2}{4T} - \lambda_1 t\right) \quad (7.4)$$

$$T = t - \frac{z}{v}, \gamma_1 = \frac{\varepsilon \sqrt{R_1 D_{p,1}}}{bv},$$

kde $\theta(t)$ označuje Heavisideovu skokovou funkci ($\theta(t) = 0$, pro $t \leq 0$; $\theta(t) = 1$ pro $t > 0$). Pro další členy rozpadové řady není možné vyjádřit, v důsledku složitosti výpočtu inverzní Laplaceovy transformace, explicitně závislost c_i na z a t .

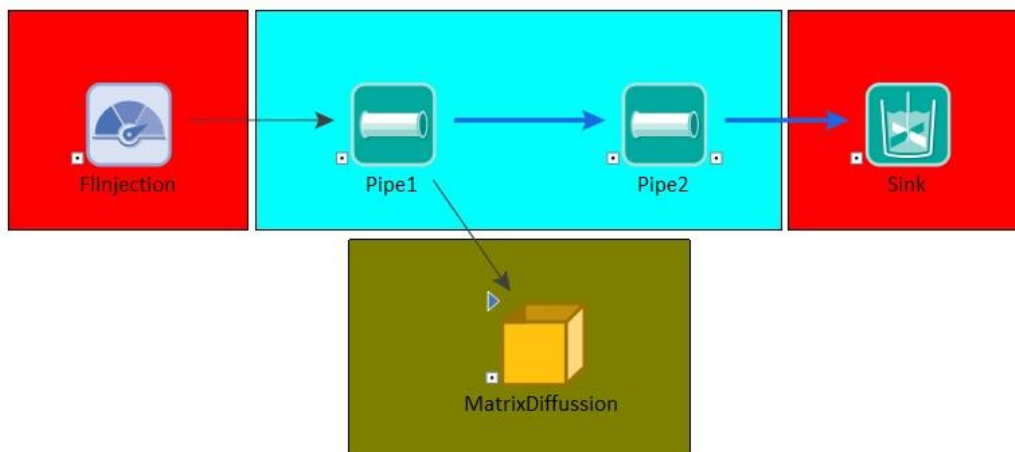
Vztah (7.4) pro c_1 jsme využili pro validaci modelu v GS, konkrétně jsme řešili transportní úlohy pro čtyři fiktivní radionuklidy. Vztah (7.4) popisuje časovou závislost koncentrace na konci pukliny jako odpověď na Diracův jednotkový impuls (počáteční a okrajová podmínka 7.3). Abychom vypočítali odezvu pro pulsní tok po dobu 1000 let, v MATLAB® (R2016b) jsme vytvořili funkci, která nejdříve spočítala rovnici (7.4) pro zadané transportní parametry a potom spočítala konvoluci (MATLAB funkce *conv*) s obdélníkovou funkcí

$$U(t) = \begin{cases} 1; & \text{pro } 0 \leq t \leq 1000, \\ 0; & \text{pro } t < 0, \text{ a nebo } t \geq 1000. \end{cases}$$

Analytické řešení jsme dále použili při návrhu dalšího rozšíření modelu transportu v rámci úlohy 9D. V (Barten, 1996) bylo ukázáno, že transport systémem puklin spojených za sebou (v sérii) je možné také popsat rovnicí (7.4), ve které parametry T a γ_1 jsou dány jako součet parametrů dílčích puklin. Proto si myslíme, že heterogenní povaha sítě puklin by měla být reprezentována pomocí složitějšího systému puklin, který se bude skládat ze vzájemně propojených paralelních cest.

7.3.2 Model v GoldSim

Na Obr. 124 je znázorněno schéma modelu úlohy 9D v GoldSim. Transportní část modelu se skládá z pěti komponent. Komponenta *Selector* (FlInjection) slouží k zadání časově omezeného pulsního toku, dvě komponenty *Pipe pathway* (Pipe1 a Pipe2), představují puklinu s horninovou maticí, komponenta *Container* (Matrix Diffusion) obsahuje planární síť 98×1 *Cell pathway* a slouží k výpočtu příčných profilů koncentrací radionuklidů v horninové matici v polovině délky pukliny. Komponenta *Pipe pathway* obsahuje jako výstup koncentraci radionuklidů ve vodě na konci pukliny, neumožňuje explicitně vypočítat koncentrační profil v horninové matici. Proto jsme rozdělili puklinu na dvě stejně dlouhé části a koncentraci na výstupu první komponenty *Pipe pathway* (Pipe1) jsme použili jako okrajovou podmínku pro síť *Cell pathway*. Abychom mohli zároveň použít model pro nesorbující a sorbující radionuklidy, zvolili jsme pro výpočet koncentračního profilu síť 98 elementů *Cell pathway* na intervalu (0,10) [m] s nekvidistantní krokem, zvětšujícím se od pukliny směrem do matrice. Celkem jsme vytvořili dva modely v GoldSim, první umožňuje řešit transportní úlohu pro čtyři fiktivní radionuklidy, druhý model umožňuje řešit úlohu pro uran-radiovou (4n+2) rozpadovou řadu.



Obr. 124 Schéma transportní části modelu úlohy 9D v GoldSim.

7.4 Řešení Goldsim (ÚJV)

Pro řešení úlohy Task9D na pracovišti ÚJV Řež, a. s. byl použit počítačový program GoldSim ve verzi 12.0. Horninové prostředí je uvažováno jako homogenní, jeho vlastnosti jako izotropní. Pro řešení úlohy byla použita komponenta *Pipe pathway*, puklina o rozměrech 1000 m x 0,088 m x 0,00244 m (délka x šířka x transportní rozevření) byla simulována jako celek (Obr. 125). Puklina je simulována jako volná, bez minerální výplně. V puklině byla uvažována disperze 10% z měřítka úlohy.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020



Obr. 125 Způsob simulace pukliny v programu GoldSim, schéma matematického modelu

V puklině jsou simulovány následující procesy:

- Advektivní transport
- Podélná disperze
- Difúze do horninové matrice (výměna mezi mobilní a imobilní zónou)
- Sorpce
- U vybraných stopovačů radioaktivní rozpad

Vstup byl simulován dvěma způsoby, jednak jako pulz trvající 1000 let a dále jako konstantní vstup trvající po celou dobu simulace. V puklině byl uvažován průtok podzemní vody o hodnotě 0,00355 m³/rok, viz Tab. 40. Parametry transportního modelu byly převzaty ze zadávací dokumentace a jsou uvedeny v Tab. 41.

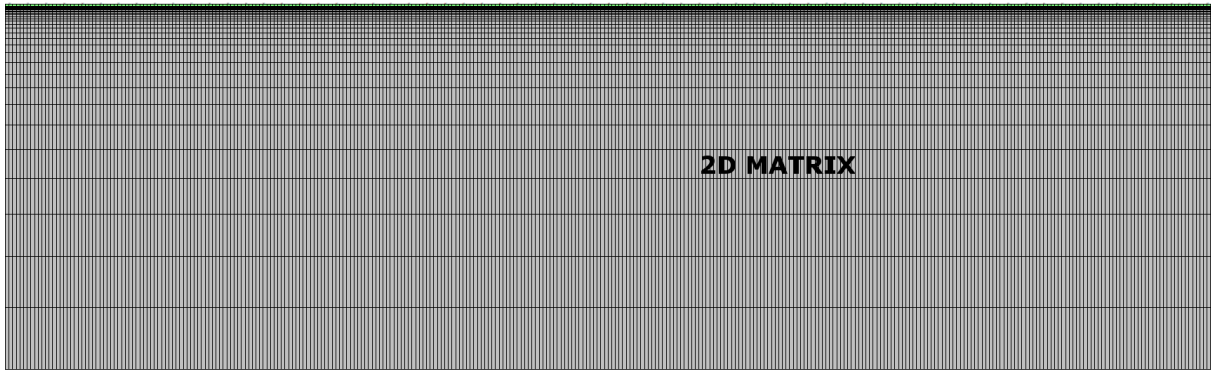
Úloha Task 9D-2 navazuje na úlohu Task 9D, geometrie modelu, liší se pouze uvažovaný zdroj, kterým je U-238, přičemž byly simulovány jeho rozpadové produkty dle Obr. 122. Injektované množství U-238 bylo 1 Bq/rok. Parametry transportního modelu byly převzaty ze zadávací dokumentace a jsou uvedeny v Tab. 44.

7.5 Řešení MT3D (PROGEO)

Na pracovišti PROGEO byla v rámci řešení Task 9D simulována vybraná část úloh:

- úloha 9D-1 pro stopovače A a C a pro dvě okrajové podmínky „a“ (pulz), „b“ (konstantní zdroj s radioaktivní přeměnou),
- úloha 9D-2 s rozpadovou řadou U-238.

Při řešení transportní úlohy Task 9D byly použity programy MODFLOW2005 (pro výpočet proudění) a MT3DMS, respektive MT3D-USGS (pro výpočet transportu), stejně jako při řešení úlohy Task 9A, ze které zadání 9D vychází. Obdobný je i konceptuální model použitý při řešení 9D. Úloha 9D je řešena jednovrstevným modelem ve 2D prostoru s modelovou doménou tvořenou pravoúhlu sítí výpočetních buněk, viz Obr. 126. Puklina je zadána v horní řadě výpočetních buněk, tj. je orientovaná ve směru osy x, difuze do horninové matrice je ve směru osy y. Délka modelové domény je 1000 m (odpovídá délce pukliny), šířka modelové domény je 1 m (odpovídá mocnosti horninové matrice) a tloušťka jednovrstevného modelu je 0,177 m (odpovídá koncepci TUL, kdy je matrice zadaná pouze na jedné straně pukliny). Délka výpočetních buněk ve směru pukliny je konstantní 1 m (tj. celkem 1000 sloupců). Šířka první řady výpočetních buněk reprezentujících puklinu je 1,22 mm (odpovídá rozevření pukliny). Šířka výpočetních buněk reprezentujících horninovou matrici se ve směru od pukliny do horniny postupně zvětšuje z 0,1 mm na 170 mm (celkem 41 řad). Velmi malá šířka buněk horninové matrice při kontaktu s puklinou byla použita na základě zkušeností z řešení úlohy 9A, protože poskytuje přesnější výsledky simulace transportu především u sorbujících se stopovačů. Časové kroky jsou nastaveny v geometrické řadě, počínající 0,001 roku a zvětšující se s kvocientem 1,05, při změně koncentrace na vstupu je krokování restartováno.

1D FRACTURE


Obr. 126 Task 9D - diskretizace modelové domény v řešení PROGEO

Hodnoty průtoku puklinou a transportní parametry horninové matrice (pórovitosti, difuzní koeficienty, sorpční koeficienty, poločas rozpadu) jsou převzaty ze společného zadání a shodné s ostatními spoluřešiteli.

Hlavním cílem simulace úlohy 9D-1 v programech MODFLOW2005 a MT3DMS bylo ověření možnosti realizovat tento typ úlohy (kombinace proudění v puklině a difuze do horninové matrice) v programech, které jsou na pracovišti PROGEO dlouhodobě používány a se kterými máme velmi dobré zkušenosti při řešení reálných hydrogeologických úloh. Vzhledem k návaznosti na úlohu 9A, která byla na pracovišti PROGEO také řešena, bylo cílem ověřit konzistenci výsledků simulace v malém měřítku (úloha 9A s délkou pukliny 1,9 m) a při upscalingu na úlohu v regionálním měřítku (byť zjednodušenou na jednu puklinu; úloha 9D s délkou pukliny 1000 m).

Motivací řešení úlohy 9D-2 bylo ověření a porovnání výsledků simulace rozpadové řady radionuklidu v programu MT3D-USGS – simulace rozpadových řad je nová funkce přidaná do tohoto programu až v roce 2016 (dřívější verze programu, např. MT3DMS, toto řešení neumožňovaly).

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

7.6 Porovnání řešení

7.6.1 Úloha 9D-1

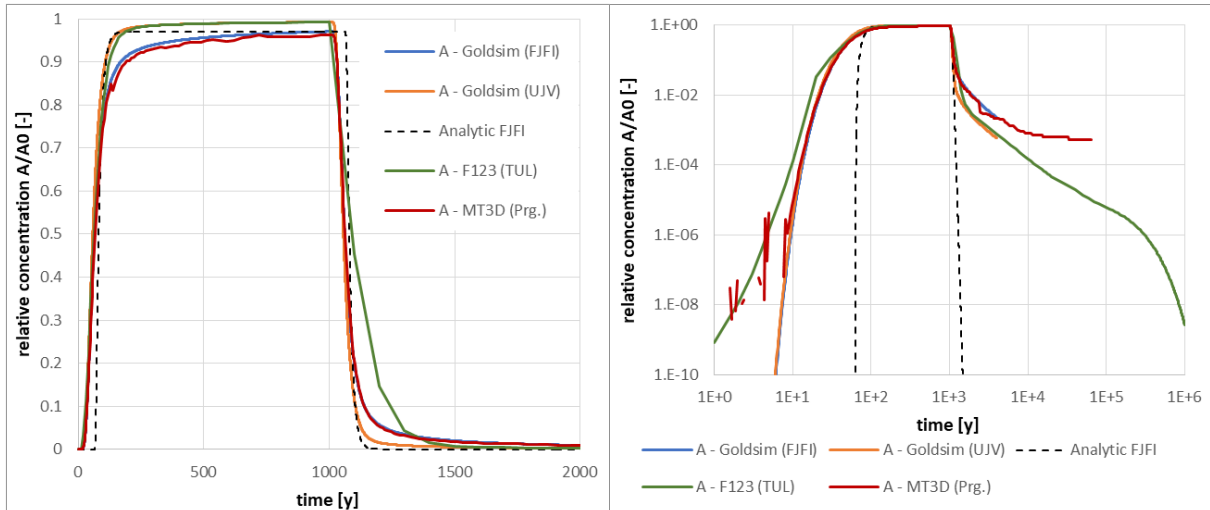
Průnikové křivky pro varianty s pulsním vstupem jsou zobrazeny jak v lineární ose koncentrace, tak v logaritmické, aby byl vidět tvar poklesové části charakteristický pro difúzi do matrice. Pro jednotlivé stopovače A-D jsou grafy na Obr. 127, Obr. 128, Obr. 129, Obr. 130. V porovnání jsou zahrnuty tři (B,D) nebo čtyři (A,C) numerické výpočty, analytické řešení bez disperze, případně model bez disperze (B,D), což umožňuje více dílčích vyhodnocení.

Průběhy jsou ve všech případech kvalitativně správné. Některé odchylky se projeví buď u jen u lineární osy nebo jen u logaritmické osy. Nejvíce je patrný efekt hrubé diskretizace Flow123d, zatímco MT3D na stejném koncepčním modelu se v lepší míře shoduje s předpokládaným přesnějším GoldSim. Odchyly trendu u poklesové části křivky v logaritmické ose souvisí s rozdílnou mocností matrice u jednotlivých modelů, což je doloženo porovnáním v části 7.7, i podobným porovnáním u úlohy 9A.

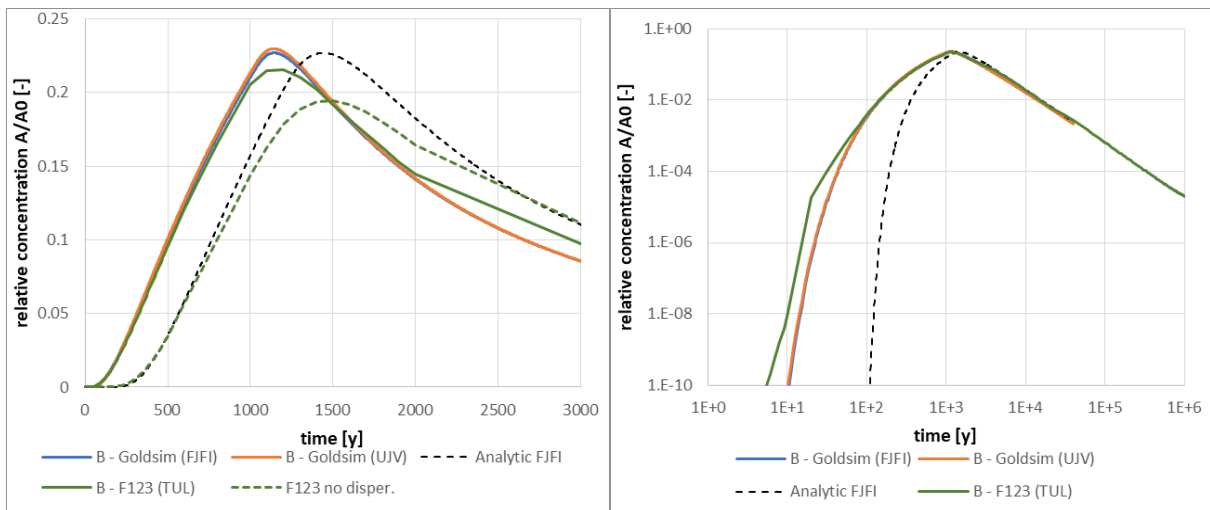
Posun analytického řešení proti všem modelům u sorbujících stopovačů B,C,D se může zdát překvapivý, ale tento jev byl pozorován i u úlohy 9A v rámci citlivosti na disperzi v puklině. Efekt disperze je zde rovněž doložen porovnáním přes řešení Flow123d s nulovou disperzí u stopovačů B a D, kde nastává stejný posun jako u analytického řešení (projeví se však numerické difúze na rozdílné výšce píku).

Pro varianty s kontinuálním vstupem dojde asymptoticky k ustálenému stavu, výstupy jsou vykresleny v jedné formě s lineární osou, za všechny stopovače na Obr. 131. Opět je vidět efekt disperze u pozice náběhové části křivky všech numerických modelů proti analytickému řešení. Jsou vidět mírné rozdíly asymptotické hodnoty aktivity, výraznější jsou u stopovače A, kde každý ze čtyř modelů dává jinou hodnotu. V tomto případě byl potvrzen dominantní efekt časové diskretizace, zřejmě související se současným výpočtem transportu a rozpadu, kdy pro rychlý rozpad se diskretizace projeví více (část 7.7).

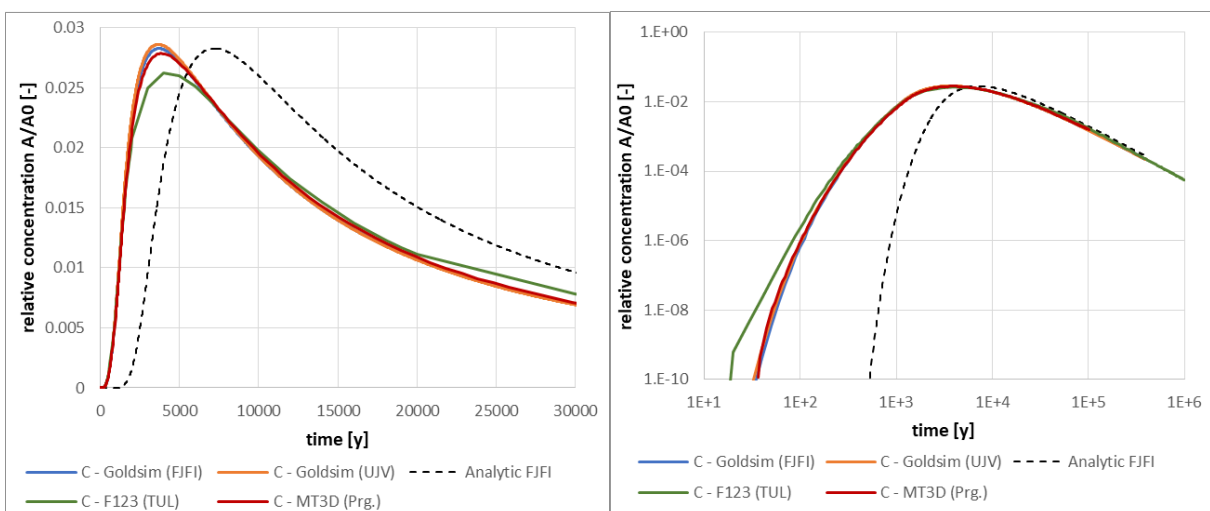
Porovnání profilů na Obr. 132 je provedeno pouze pro modely Goldsim (FJFI) a Flow123d (TUL). Výchozí body profilů u pukliny se mírně liší (v souladu s drobnými rozdíly průnikových křivek) a trendy jsou kvalitativně shodné. U výsledků Flow123d je patrná nehladkost křivek, což je zřejmě dáno hrubou diskretizací a efektem interpolace bodů s řádově odlišnými hodnotami.



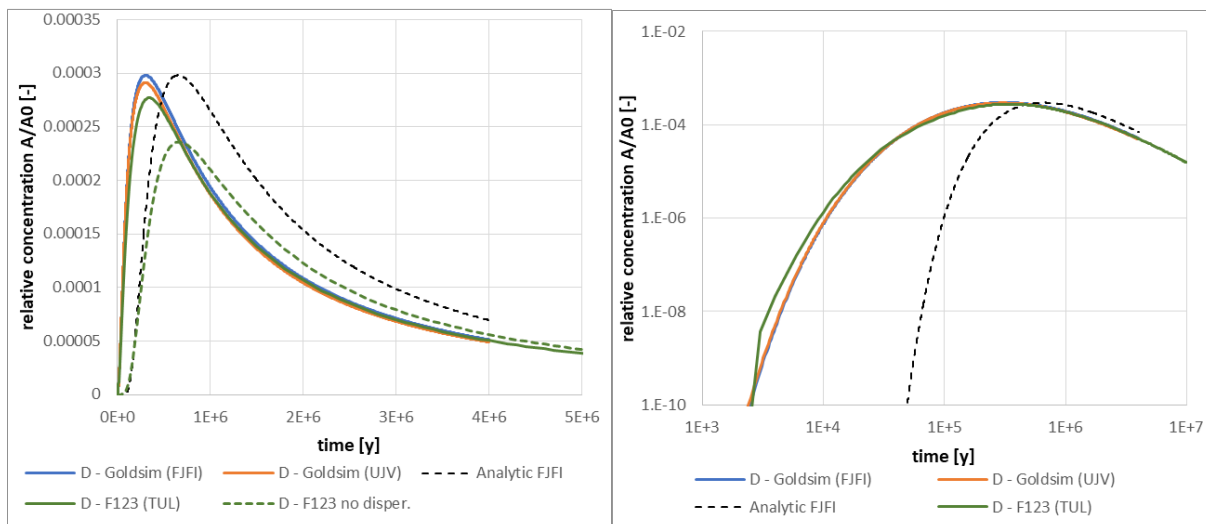
Obr. 127 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer A ve (4 modely).



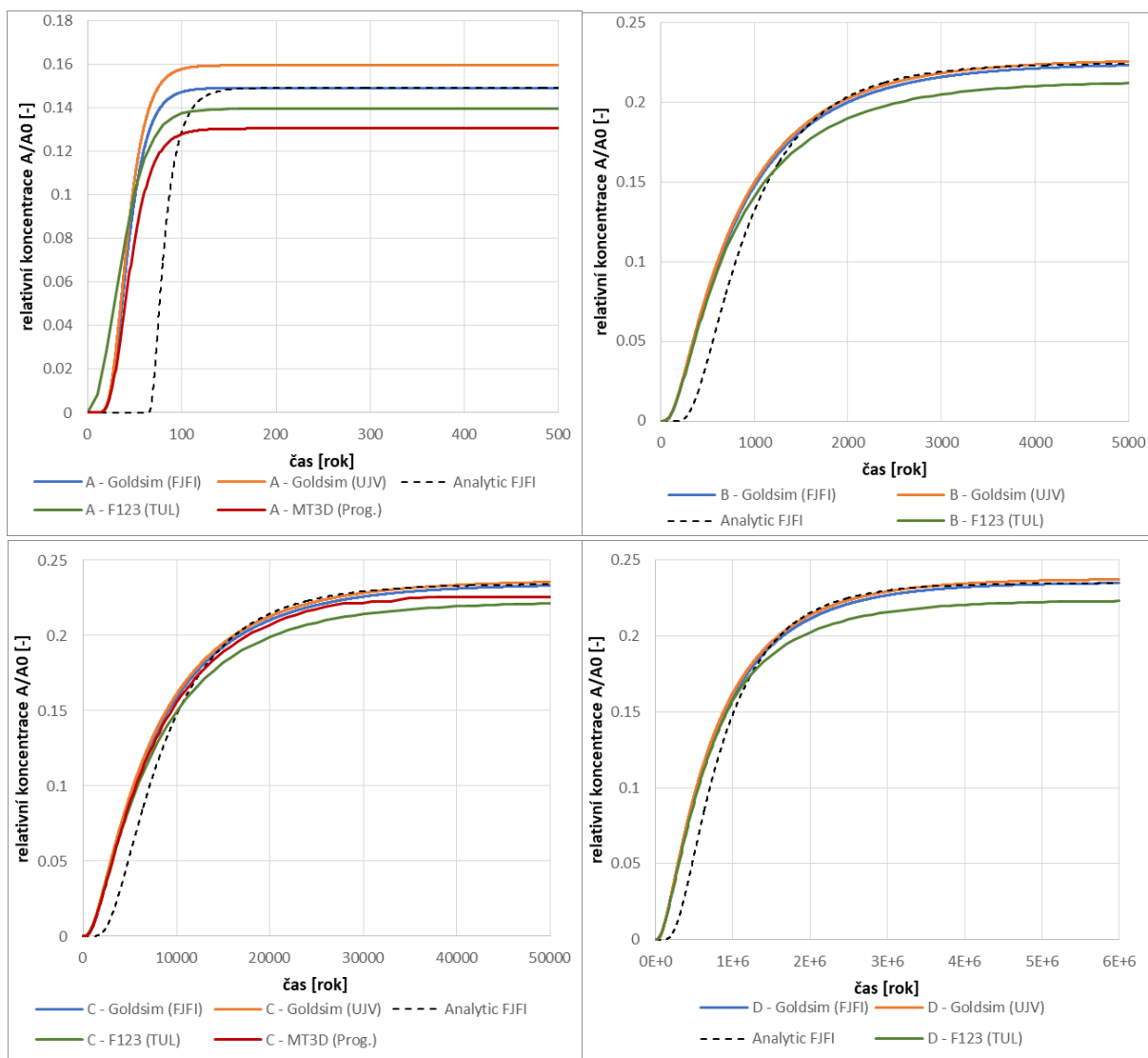
Obr. 128 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer B (3 modely a varianta bez disperze korespondující s analytickým řešením).



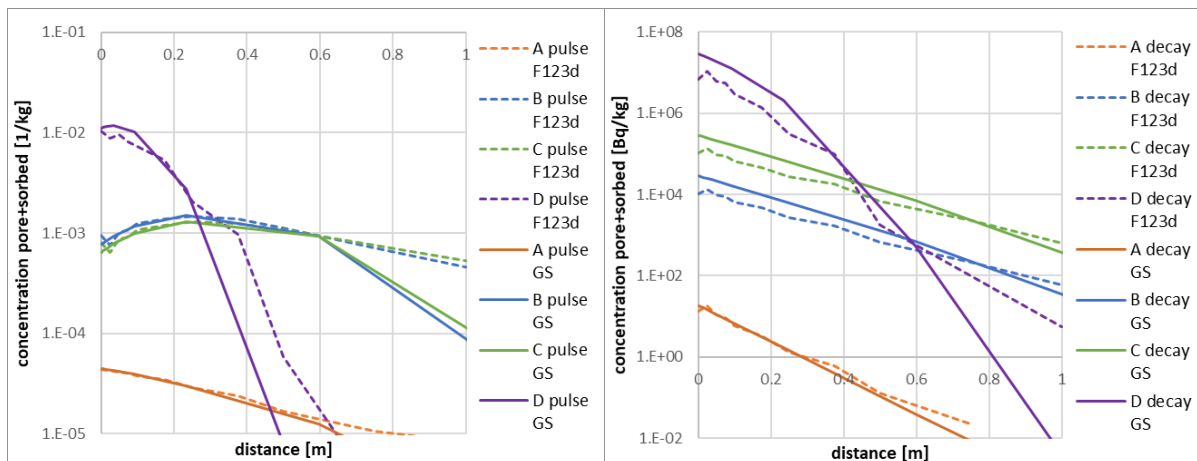
Obr. 129 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer C (4 modely).



Obr. 130 Porovnání řešení 9D-1-a průnikových křivek ve dvou typech měřítka os pro tracer D (3 modely a varianta bez disperze korespondující s analytickým řešením).



Obr. 131 Porovnání řešení 9D-1-b průnikových křivek pro všechny tracers (A – 4 modely, B – 3 modely, C – 4 modely, D – 3 modely).



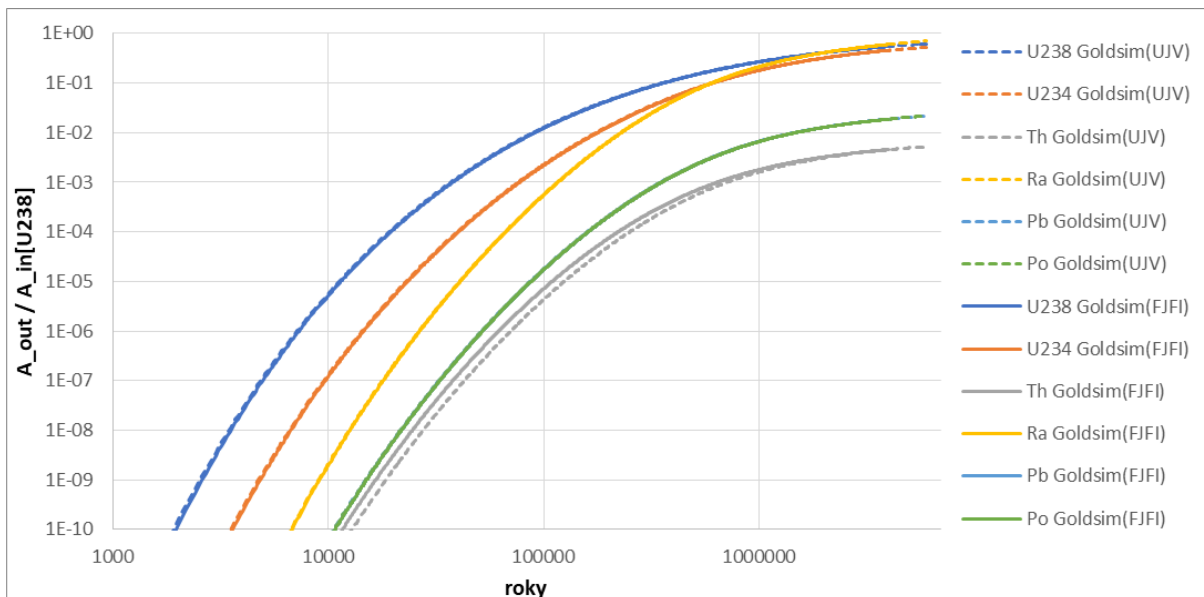
Obr. 132 Porovnání řešení 9D-1 příčných profilů dvěma modely (Flow123d a GoldSim – GS) pro všechny tracery, vlevo pulsní přítok bez rozpadu (varianta a), vpravo kontinuální přítok s rozpadem (varianta b).

7.6.2 Úloha 9D-2

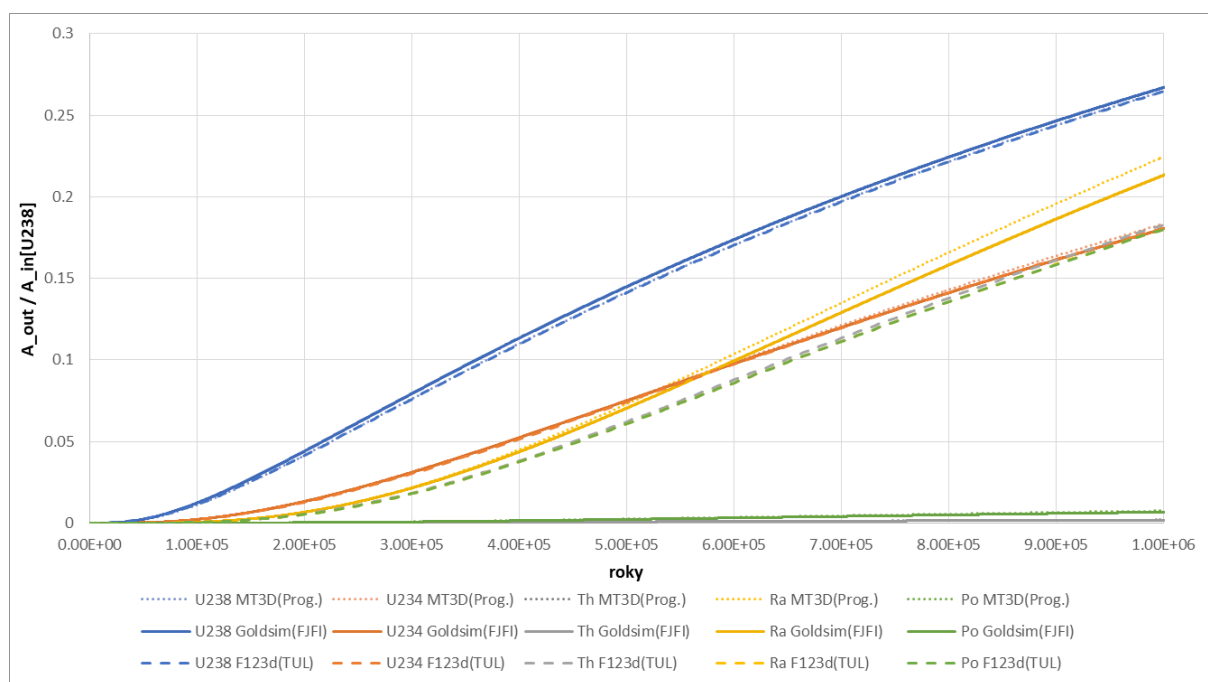
Porovnání průnikových křivek je uspořádáno tak, že nejprve jsou v logaritmických osách za delší časový úsek prezentovány dvě zpracování modelu GoldSim (FJFI a ÚJV) na Obr. 133 a na dalším Obr. 134 pak v lineárních osách za kratší časový úsek tři modely mezi sebou: Goldsim, Flow123d a MT3D. V první případě je vidět přesná shoda až na nepatrnou odchylku v náběžné hraně křivky Th (jde o hodnoty řádově menší než maximum) a zároveň jsou vidět řádově odstupy mezi hodnotami aktivit jednotlivých radionuklidů, které nejsou vidět u lineární osy. Výsledky Po a Pb jsou identické díky rovnováze při krátkém poločasu rozpadu a stejných transportních parametrech.

V druhém případě Obr. 134 pak je vidět shoda modelů u U-238, U-234 a Ra, zatímco u zbylých radionuklidů, Th, Pb a Po je výsledek Flow123d výrazně jiný – v podobném řádu jako ostatní radionuklidy, zatímco GoldSim a MT3D se shodují na cca o dva řády nižších hodnotách. To je přesněji kvantifikováno v Tab. 47 hodnotami aktivit v čase 1 Ma, tj. vybranými body na křivkách – tam je vidět, že u zmíněných tří radionuklidů, případů s vyšší sorpcí, je i při řádově shodě odchylka modelů GoldSim a MT3D zřetelná. Hypotéza směřuje opět k vlivu diskretizace v souvislosti s velkou sorpcí.

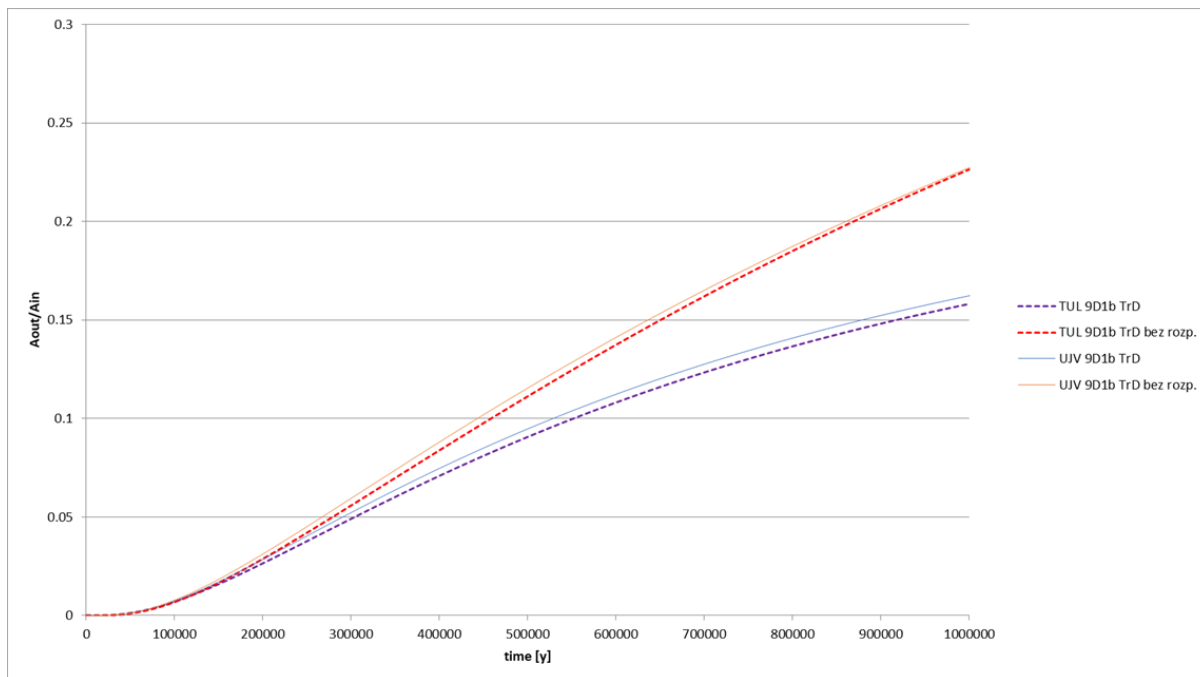
Pro kontrolu bylo provedeno jednak porovnání U-238 s uvažovaným rozpadem proti stopovači D bez rozpadu (Obr. 135). Druhé pomocné porovnání je pak uvedeno v následující části.



Obr. 133 Porovnání řešení 9D-2 průnikových křivek pro 6 radionuklidů v rozpadové řadě (Pb je graficky nerozlišitelné od Po) – dva nezávisle zpracované výpočty Goldsim.



Obr. 134 Porovnání řešení 9D-2 průnikových křivek pro 5 radionuklidů v rozpadové řadě (Pb není vyneseno, je graficky nerozlišitelné od Po) – výpočty 3 různými softwary.



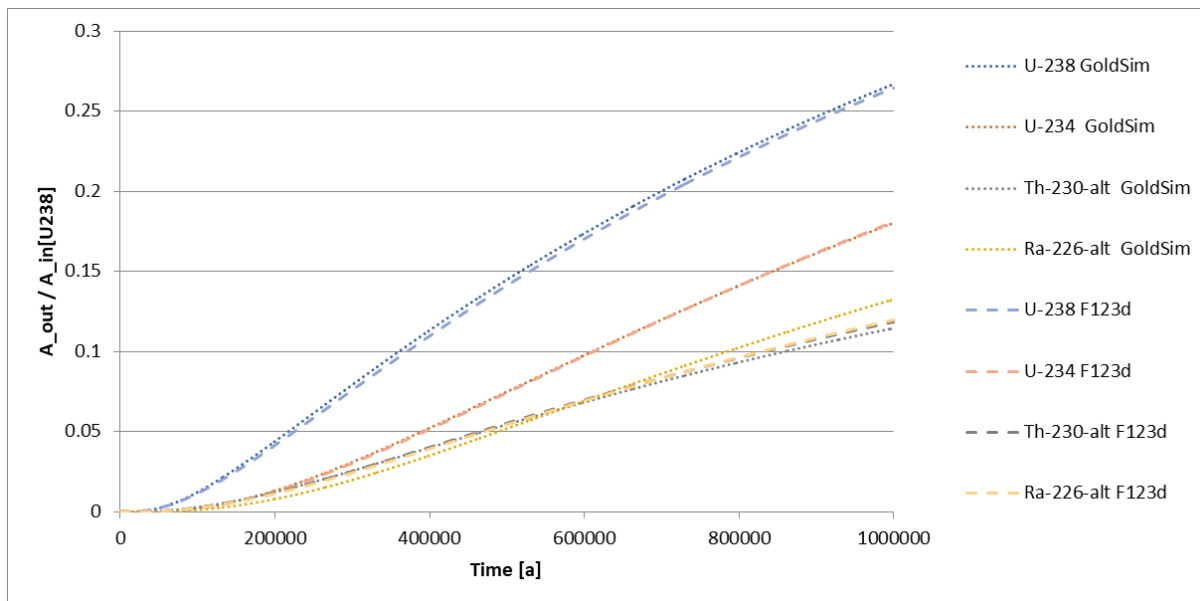
Obr. 135 Kontrolní porovnání průnikových křivek 9D-1 (tracer D) a 9D-2 (uran) mezi Flow123d(TUL) a GoldSim (ÚJV).

Tab. 47 Porovnání hodnot na průnikové křivce v čase 1 Ma (aktivita normalizovaná vstupní aktivitou U-238).

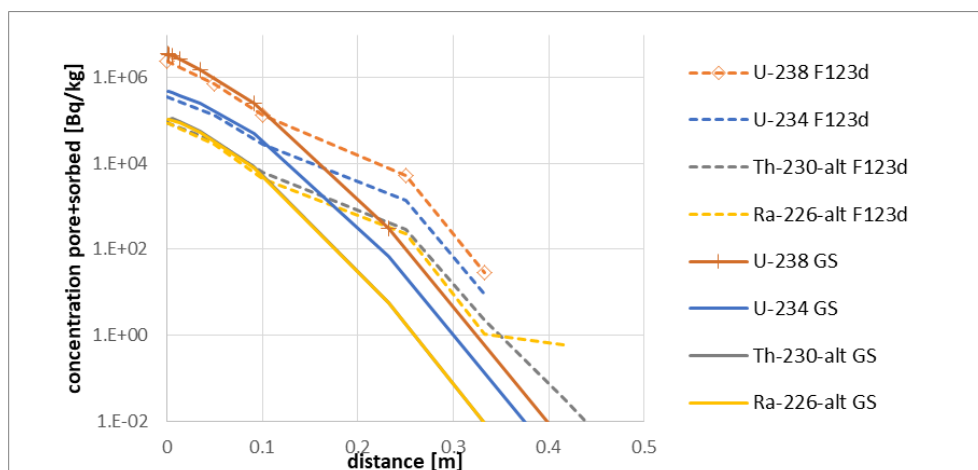
	U-238	U-234	Th-230	Ra-226	Pb-210	Po-210
GoldSim (FJFI)	0,267	0,180	0,00179	0,213	0,00665	0,00662
GoldSim (ÚJV)	0,270	0,182	0,00161	0,213	0,00665	0,00662
MT3D-USGS	0,265	0,183	0,00185	0,224	0,00777	0,00748
Flow123d	0,265	0,181	0,183	0,180	0,180	0,180

7.6.3 Pomocná úloha s jednotnou sorpcí

Z důvodu velkých rozdílů průnikových křivek silněji sorbujících radionuklidů u 9D-2 a pozorovaného problematického chování při velké sorpci u předchozích úloh byla definována pomocná úloha, lišící se nastavením jednotného sorpčního koeficientu $K_d = 8,0 \times 10^{-2} \text{ m}^3/\text{kg}$ u všech radionuklidů v rozpadové řadě. To odpovídá parametrům uranu, ostatní „fiktivní“ radionuklidy jsou označeny „-alt“. Porovnání průnikových křivek je provedeno na Obr. 136, kde je již vidět dobrá shoda mezi modely GoldSim a Flow123d, což potvrzuje zmiňovanou příčinu rozdílu výsledků původního 9D-2 zadání. V Tab. 48 jsou dále porovnány konkrétní hodnoty aktivit na průnikové křivce.



Obr. 136 Průnikové křivky u pomocného modelu (profily Po a Pb jsou identické s Ra u obou modelů).



Obr. 137 Příčné profily u pomocného modelu (profily Po a Pb jsou identické s Ra u obou modelů).

Profily aktivit v příčném směru v horninové matici jsou vykresleny na Obr. 137 – shoda částí křivek v blízkosti pukliny je dobrá, místo s oddělením průběhu křivek odpovídá změně diskretizace u Flow123d modelu, což opět potvrzuje kombinaci diskretizace a velké sorpce jako hlavní příčinu rozdílů.

Tab. 48 Porovnání hodnot na průnikové křivce v čase 1 Ma (aktivita normalizovaná vstupní aktivitou U-238) pro upravenou úlohu s jednotnou sorpcí.

	U-238	U-234	Th-230	Ra-226	Pb-210	Po-210
GoldSim	0,267	0,18	0,114	0,132	0,132	0,132
Flow123d	0,265	0,181	0,119	0,12	0,12	0,12

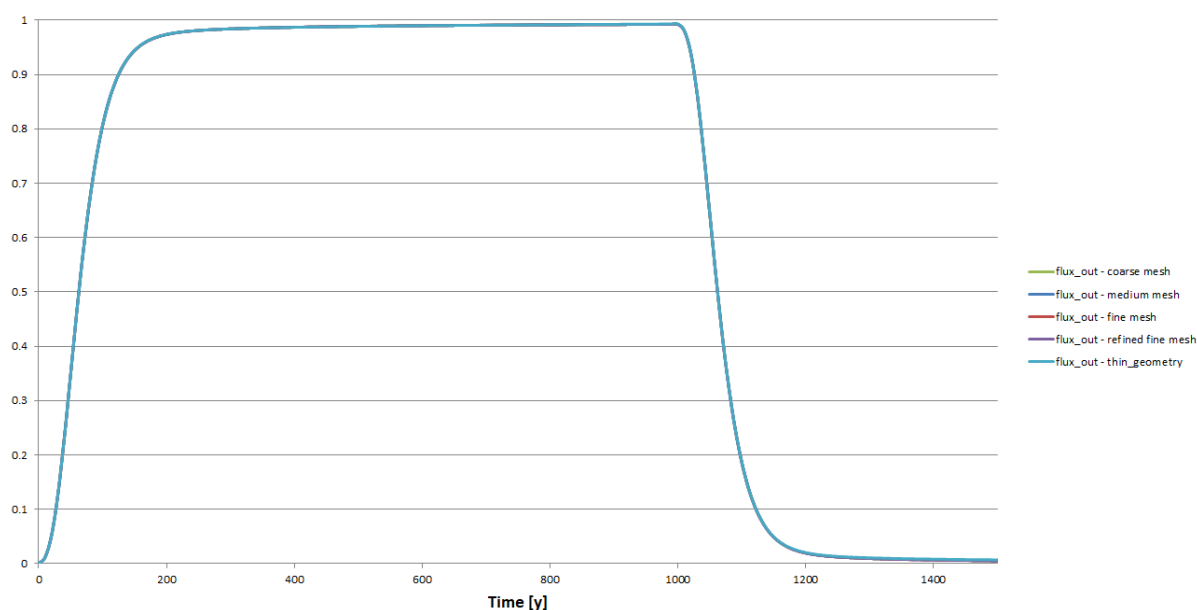
7.7 Ověření vlivů ve výpočtu

Citlivost na prostorovou diskretizaci

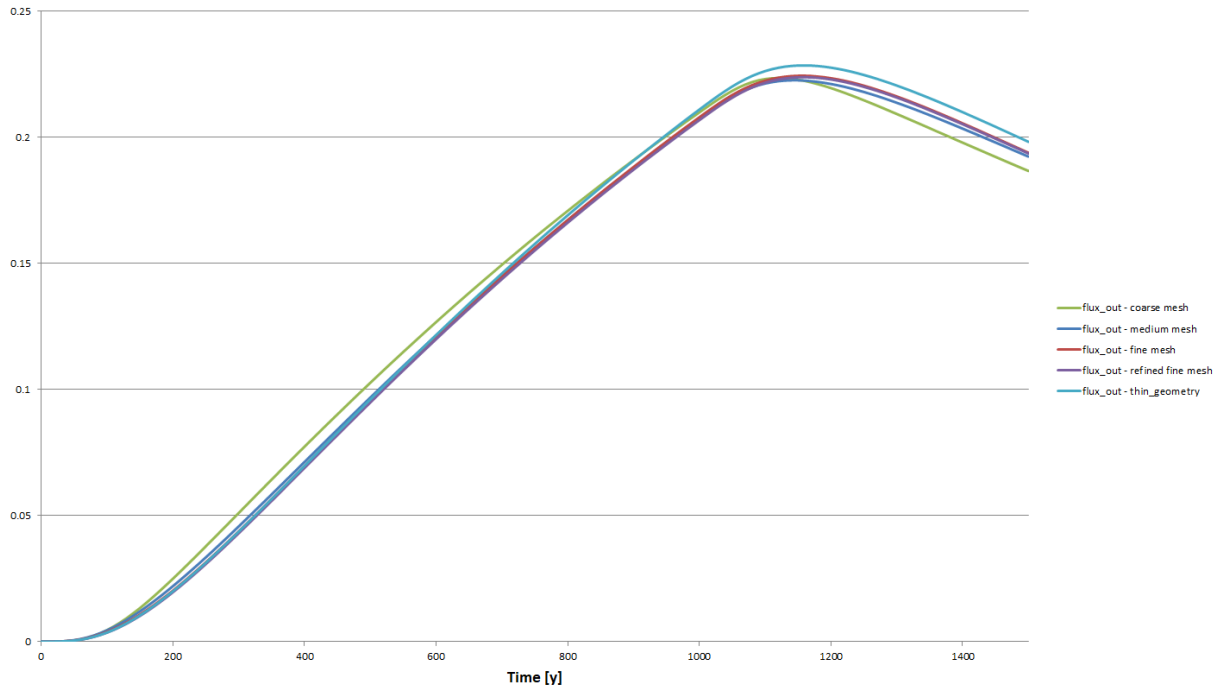
Bylo testováno, jak moc jsou průběhy průnikových křivek citlivé na prostorové diskretizaci modelu (především v blízkosti rozhraní puklina/hornina). Za tímto účelem bylo vytvořeno 5 variant výpočetní sítě, kdy jednotlivé vrstvy horninové matrice měly různou mocnost. Jednotlivé varianty sítě jsou popsány v Tab. 49, kde jednotlivé sloupce udávají, v jaké hloubce (vzdálenosti od pukliny) jednotlivé vrstvy končí. Varianta sítě označená „Refined fine“ vznikla ze sítě označené „Fine“ tak, že každý její trojúhelníkový element byl rozdělen na 4 trojúhelníky. Výsledky analýzy jsou znázorněny na Obr. 138, Obr. 139, Obr. 140 a Obr. 141 (scénář 9D-1a: bez rozpadu, OKP ve formě 1 000 let trvajících pulzu). Je patrné, že pro konzervativní stopovač nejsou výsledky na prostorové diskretizaci závislé, s rostoucí mírou sorpce je pak závislost čím dál tím výraznější. Docházíme tak ke stejným závěrům jako v případě Tasku 9A, kde jsme konstatovali, že v blízkosti rozhraní puklina/hornina je pro silně sorbující stopovače třeba velmi jemná síť.

Tab. 49 Task9D – Flow123d – varianty sítě

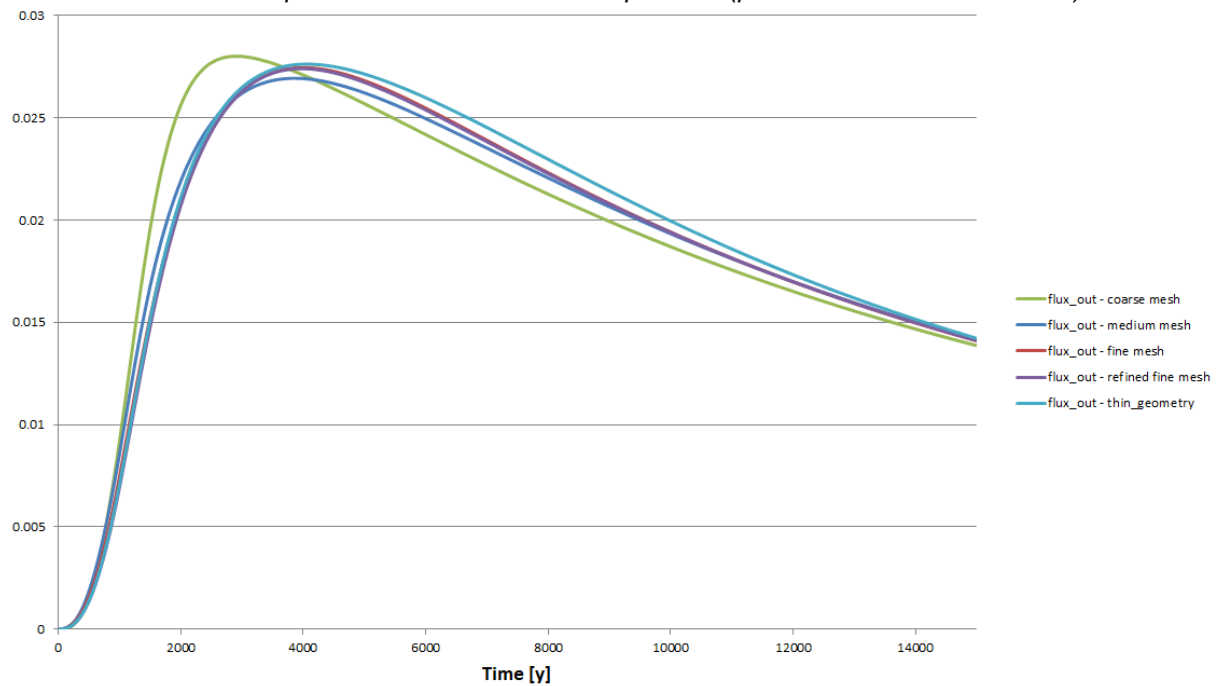
Označení sítě	Vrstva 1 [m]	Vrstva 2 [m]	Vrstva 3 [m]	Vrstva 4 [m]	Vrstva 5 [m]
„Coarse“	0,2	0,4	1	2	10
„Medium“	0,1	0,2	0,5	1	10
„Fine“	0,05	0,1	0,25	0,5	10
„Refined fine“	0,05	0,1	0,25	0,5	10
„Thin“	0,005	0,01	0,03	0,1	1



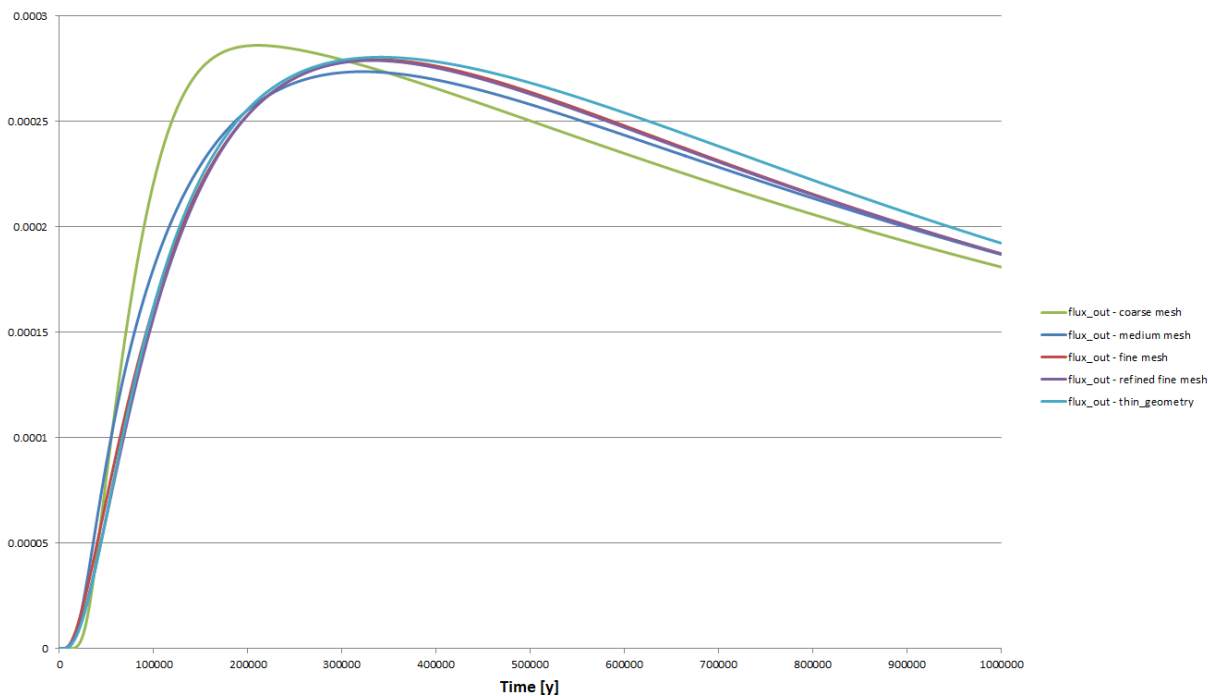
Obr. 138 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač A (průběh relativní koncentrace)



Obr. 139 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač B (průběh relativní koncentrace)



Obr. 140 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač C (průběh relativní koncentrace)

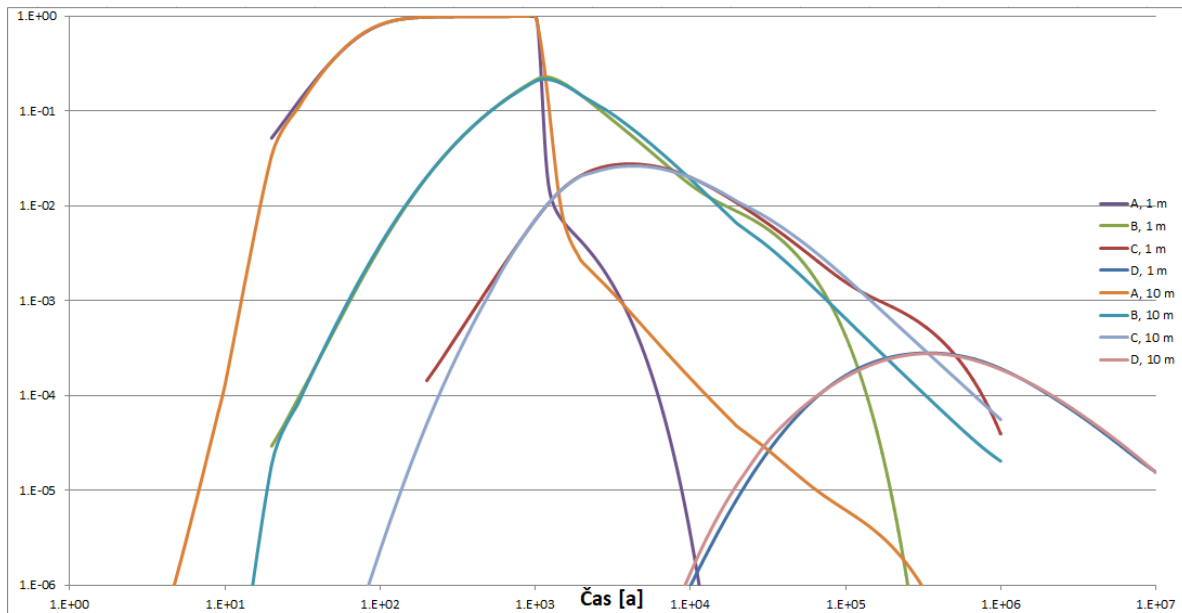


Obr. 141 Task9D – vliv prostorové diskretizace – stopovač D (průběh relativní koncentrace)

Byla testována také citlivost na časovou diskretizaci. Bylo zjištěno, že především v počátku simulace je vhodné volit jemnější časový krok, v pozdějších fázích je možno krok postupně prodlužovat. Délku časového kroku je třeba volit také s ohledem na poločas rozpadu jednotlivých stopovačů, je-li ovšem v daném scénáři s radioaktivním rozpadem počítáno.

Vliv mocnosti horninové matrice

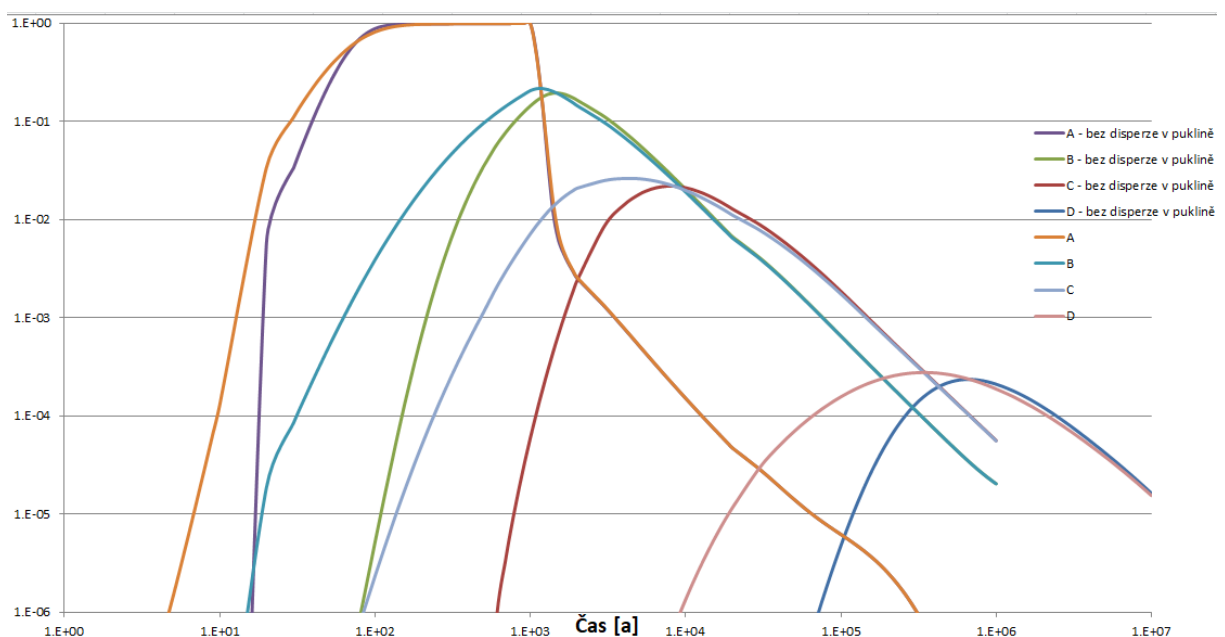
Bylo testováno, jaký vliv na průnikové křivky má mocnost horninové matrice (a tedy v přeneseném slova smyslu okrajové podmínky nulového hmotnostního toku přes vnější hranici modelu). Simulační perioda byla 1e6 let (1e7 pro stopovač D). Na Obr. 142 jsou znázorněny normalizované průnikové křivky pro každý ze stopovačů vždy pro horninovou matici o mocnosti 1 m a 10 m. „Zvlněnost“ průnikových křivek pro horninovou matici s vyšší mocností je dána v čase proměnným krokem výpočtu. Z obrázku je patrné, že vliv mocnosti matrice (blízkosti OKP) je významnější pro konzervativní a málo sorbující stopovač. Vliv se projevuje na průběhu sestupné části průnikové křivky.



Obr. 142 Task9D-1a – vliv mocnosti horninové matrice – normalizované průnikové křivky

Vliv hydrodynamické disperze v puklině

Byl testován vliv přítomnosti hydrodynamické disperze v puklině na výsledky modelu – normalizované průnikové křivky. Testy proběhly na výpočetní síti s horninovou maticí o mocnosti 10 m. Simulační perioda byla 1e6 let (1e7 pro stopovač D). Na Obr. 143 jsou znázorněny normalizované průnikové křivky pro každý ze stopovačů vždy s hydrodynamickou disperzí a bez ní. Z obrázku je patrné, že hydrodynamická disperze má velký vliv především na tvar náběžné hrany průnikové křivky a také na polohu maxima. Vliv na tvar sestupné hrany je zanedbatelný.



Obr. 143 Task9D-1a – vliv disperze v puklině – normalizované průnikové křivky

8 Závěr

Řešení projektu přineslo pokrok v porozumění retenčním procesům v mnoha ohledech, a to zejména původu nejistot ve výpočtech, jejichž analog může být součástí hodnocení bezpečnosti.

V dalším textu jsou shrnuty konkrétní závěry hodnotící použitelnost a omezení různých koncepčních modelů a simulačních algoritmů a zároveň poznatky vyplývající z experimentálních dat, které mají obecný přesah, tj. zejména se vztahují k prostředí krystalických hornin bez vazby na konkrétní lokalitu.

Mezinárodní spolupráce přispěla jak formou dostupnosti velkého množství dat, tak hodnocením metodik a výsledků v širším kolektivu, včetně přímého porovnání výsledků většího počtu modelů různých řešitelů. Dle požadavků zadání bylo dosaženo v potřebné míře verifikace použitých simulačních kódů Flow123d a GoldSim pro uvažované jevy transportu radionuklidů v poměrně rozmanitých konfiguracích a zároveň detekovány kritické situace vyžadující pozornost a kontrolu řešení.

8.1 Zhodnocení modelů

Porovnání výsledků prediktivních výpočtů přineslo primárně verifikaci simulačních kódů jako takových ale i korektního způsobu zadání vstupních dat v různých formách transformovaných z dodaných podkladů. Ověřeny byly v rámci všech úloh 9A-9D mezi sebou modely českých řešitelů (spoluřešitelů dílčího projektu k němuž se váže tato zpráva). Porovnání mezinárodní bylo nejširší v rámci Task 9A, zatímco u ostatních úloh nebylo koordinátory provedeno z důvodu menšího počtu účastníků (9D) nebo větší variability způsobu řešení a vyhodnocení (9B,9C). Porovnání v rámci 9A je předmětem vydané zprávy a zasláního článku, které jsou elektronickými přílohami (zprávu SKB R-17-10 vydanou SKB má SÚRAO rovněž ve fyzické podobě). Modely založené na stejných řídicích rovnicích a výchozích předpokladech dávaly konzistentní výsledky, dílčí rozdíly byly vysvětleny.

Byť se jednalo o zdánlivě jednoduché úlohy (lineární rovnice, pravidelná geometrie), ukazuje se, že numerické algoritmy se mohou chovat komplikovaně a nepředvídatelně. Typické příčiny známé v numerické matematice lze identifikovat i v těchto úlohách: velké kontrasty koeficientů (projevuje se v případě sorpce nepřímo až v podobě prostorové bilance hmoty), prostorovém měřítku (dosah pronikání do matrice) a časovém měřítku (rychlost rozpadu versus rychlost transportu).

Výhodou výpočtu s prvky Pipe v GoldSim (resp. algoritmu založeného na analytickém řešení příčné difúze do matrice) je eliminace vlivu diskretizace, a tedy obvykle nejpřesnější řešení, za cenu omezení v geometrii oblasti a prostorové nehomogenitě – postup nelze použít jinak, než pro příčný směr z pukliny a za předpokladu homogenní matrice (bez BDZ apod.). Nepřesností vlivem diskretizace při silně sorbujících látkách trpí všechny modely založené na diskretizaci (GoldSim-CellNet, Flow123d i MT3D). V případě pravidelné sítě (GS-CellNet a MT3D) bylo snadněji dosaženo zjemnění dostatečného pro „konvergenci“ řešení. Naopak nestrukturovaná síť Flow123d nabízí plnou flexibilitu při nepravidelné geometrii, což byl případ experimentu TDE se třemi vrty, kde pro GS-CellNet bylo třeba uvažovat různá koncepční zjednodušení.

Stejně jako u původních vyhodnocení experimentu LTDE-SD (Nilsson et al, 2010), i podobných mimo tento projekt (Havlová et al., 2016) se potvrdilo, že měřená data charakterizující difúzní transport se sorpcí nelze v mnoha případech vysvětlit použitím

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		<i>SÚRAO TZ 481/2020</i>

standardních rovnic a laboratorně určených koeficientů. Na základě dříve navrženého konceptu BDZ (zóny ovlivněné vrtáním) byly inverzní modely realizovány v podobě nehomogenní matrice s různými koeficienty v závislosti na vzdálenosti od stěny vrtu. Takto bylo možné ve většině případů získat výsledky modelu v souladu s měřením, ovšem s mnoha omezeními: často je určení nejednoznačné a zároveň získané koeficienty a polohy rozhraní nejsou přenositelné pro jiné případy.

Metodika mikro-DFN rovněž dokáže úspěšně vysvětlit měřená data, a to v principu „koncepčnějším“ způsobem, kdy původ dat nehomogenity je dán skutečnými daty mikrostruktury horniny. Omezením je naopak to, že taková data jsou vázána na konkrétní vzorek a nelze tak se současnými postupy získání a zpracování vstupních dat použít obecně pro predikci. Dále není vyzkoušená metoda pro „upscaling“ do měřítka odpovídajícího hodnocení bezpečnosti. Z realizace projektu tedy vyplývá prostor pro další výzkum v tomto směru.

8.2 Přínosy spolupráce

Experimentální dat z podzemních laboratoří ve Švédsku a Finsku byla v plné míře předána celému mezinárodnímu kolektivu účastníků což umožnilo širokou diskusi nad interpretací procesů jako takových a nad použitelností různých typů modelů. Pro další činnost SÚRAO z toho vyplývá řada technických záležitostí provedení experimentů (které nejsou přímo předmětem tohoto „modelářského“ dílčího projektu a vyplývají přímo z materiálů dostupných na portálu GWFTS) a podnětů pro získávání transportních parametrů jednotlivých radionuklidů pro potřeby hodnocení bezpečnosti.

Diskuse ve velké míře směřovaly k rozlišení zájmových fyzikálních jevů a artefaktů experimentů. Zejména pro experiment LTDE-SD (Task 9B) bylo zjištěno mnoho nesrovnalostí. Zároveň byly prezentovány i protichůdné analogy – případy kdy „rychlé“ pronikání stopovače v malé koncentraci do větší hloubky lze pozorovat jako reálný jev i případy např. kontaminace vzorků. Ostatní řešitelé Task 9 pracovali s modely za některého z obou předpokladů a nebylo dosaženo jednoznačných závěrů.

Pro použití modelů je podstatné zajištění podmínek laboratorních a in-situ měření, které umožní získání souvislostí mezi transportními parametry v různém měřítku, např. efekt porušení u stěny vrtu a od opracovaného povrchu laboratorního vzorku.

Dále se potvrdila nezbytnost současného měření koncentrace (aktivity) jak v rezervoáru injekčního vrtu (ev. pukliny apod.), tak v samotné hornině (alespoň ve fázi rozebírání). Modely založené na jednom typu dat vedou na nejednoznačnou interpretaci a neumožňují určit transportní parametry přenositelné do jiných podmínek. S tím souvisí doporučení řešitelského týmu plánovat experimenty in-situ výhradně po zhodnocení navržené geometrie prediktivním modelem tak, aby bylo možno v plánovaném čase trvání experimentu sledovat vývoj koncentrace stopovače v monitorovacím vrtu.

9 Reference

- BARTEN W. (1996): Linear Response Concept Combining Advection and Limited Rock Matrix Diffusion in a Fracture Network Transport Model. *Water Resources Research* 32, 3285-3296.
- BEDEKAR, V., MORWAY, E.D., LANGEVIN, C.D., AND TONKIN, M. (2016a), MT3D-USGS version 1: A U.S. Geological Survey release of MT3DMS updated with new and expanded transport capabilities for use with MODFLOW: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A53, 69 p., <http://dx.doi.org/10.3133/tm6A53>
- BEDEKAR, V., MORWAY, E.D., LANGEVIN, C.D., AND TONKIN, M. (2016b), MT3D-USGS version 1.0.0: Groundwater Solute Transport Simulator for MODFLOW: U.S. Geological Survey Software Release, 30 September 2016, <http://dx.doi.org/10.5066/F75T3HKD>
- BERNHARD G., GEIPEL G., REICH T., BRENDLER V., AMAYRI S., NITSCHKE H. (2001): Uranyl (VI) carbonate complex formation: Validation of the $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3(\text{aq.})$ species, *Radiochim. Acta* 89, 511-518.
- BOX M.J. (1965): A new method of constrained optimization and a comparison with other methods, *The Computer Journal*, str. 42-52, doi: 10.1093/comjnl/8.1.42.
- CRAWFORD J. (2019): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD – Task Description – 9D1 AND 9D2, SKB TF GWFTS, update 2019-05-06.
- GOLDSIM (2014): GoldSim Contaminant Transport Module User's Guide. GoldSim Technology Group, version 6.4.
- HAVLOVÁ, V., HOFMANOVÁ, E., KOLOMÁ, K., TRPKOŠOVÁ, D. (2016): Realizace a vyhodnocení LTD etapa III. experiment v Grimsel Test Site. Průběžná zpráva projektu 2016. ÚJV Řež, a.s.
- HAVLOVÁ V., BRÁZDA L., GVOŽDÍK L., KOLOMÁ K., MILICKÝ M., SOSNA K., SOUČEK K., STAŠ L., SVOBODA S., TRPKOŠOVÁ D., VEČERNÍK P., ZUNA M. (2017): Přenos hodnot migračních PArmetrů granitických hornin z Mikroměřítká do REálného měřítká horninového masivu (PAMIRE). Závěrečná výzkumná zpráva. ÚJV Řež.
- HARTLEY, L. J.(1998) NAPSAC Release 4.1 Technical Summary Document, AEA-R&R-0271, AEA Technology, 1998.
- HOKR M. A KOL. (2015): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů, Zpráva SÚRAO, č. 33/2015.
- HOKR M. ET AL. (2016): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů, Zpráva SÚRAO, č. 77/2016.
- HOKR M. ET AL. (2017): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů, Zpráva SÚRAO, č. 172/2017.
- HUANG I.B., YEN S.K. (2002): Diffusion in hollow cylinders for some boundary conditions: I. Mathematical treatment. *Materials Chemistry and Physics* 74, 289–299.
- KAUKONEN V., HAKANEN M. AND LINDBERG A. (1997) Diffusion and Sorption of HTO, Np, Na and Cl in rocks and minerals of Kivetty and Olkiluoto, Posiva Report-97-07, Finland, 101 p.
- LÖFGREN M., NILSSON K., LANYON G.W. (2015): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, Task description, SKB TF GWFTS, revision 2015-11-22.
- LÖFGREN M., NILSSON K. (2015): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, Task description – 9B-1, SKB TF GWFTS, 2015-11-26.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

- LÖFGREN M., NILSSON K. (2016): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, Task description – 9B-2, SKB TF GWFTS, 2016-06-18.
- LÖFGREN M., NILSSON K. (2016a): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, Task description – 9B-3, SKB TF GWFTS, 2016-12-21.
- LÖFGREN M., ANDERSSON P., NILSSON K. (2017): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, Task description – 9C, SKB TF GWFTS, 2017-.11-14.
- NILSSON K., BYEGÅRD J., SELNERT E., WIDESTRAND H., HÖGLUND S., GUSTAFSSON E. (2010): Long Term Sorption Diffusion Experiment (LTDE-SD). Results from rock sample analyses and modelling. R-10-68.
- PARKHURST D.L., APPELO C.A.J. (2013): Description of input and examples for PHREEQC version 3--A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations: U.S. Geological Survey Techniques and Methods, book 6, chap. A43, 497 p., available only at <http://pubs.usgs.gov/tm/06/a43>.
- PRESS W.H. *et al.*: The Art of Scientific Computing, Third Edition (2007), 1256 s. - Cambridge University Press.
- SKAGIUS K., PETTERSSON M., WIBORGH M. (1999) Compilation of data for the analysis of radionuclide migration from SFL 3-5, SKB Report R-99-13, Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company, Stockholm, Sweden, 116 p.
- SUDICKY E.A., FRIND E.O. (1982): Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solutions for a system of parallel fractures. Water Resources Research 20, 1021-1029.
- THE ÄSPÖ HARD ROCK LABORATORY SWEDEN (ASPO, 2020), SKB Task Force on Modelling of Groundwater Flow and Transport of Solutes, website <https://www.skb.se/taskforce/>
- TUL, (2015) FLOW123d version 1.8.2, Documentation of file formats and brief user manual, NTI TUL, Online: <http://flow123d.github.io/>
- VANÝSEK P. (2009): Ionic conductivity and diffusion at infinite dilution. In: Lide D. R. edit.: CRC handbook of chemistry and physics 90th edition. CRC Press, 2009.
- VILKS P., MILLER N.H., STANCHELL F.W. (2005): Laboratory program supporting SKB's Long Term Diffusion experiment. Report No: 06819-REP-01300-10111-R00.
- WIDESTRAND H., BYEGAARD J., CVETKOVIC V., TULLBORG E.-L., WINBERG A., ANDERSSON P., SIITARI-KAUPPI M. (2007), Sorbing tracer experiments in a crystalline rock fracture at Aspo (Sweden): 1. Experimental setup and microscale characterization of retention properties, Water Resour. Res., 43.
- WIDESTRAND, H., BYEGÅRD, J., NILSSON, K., HÖGLUND, S., GUSTAFSSON, E., KRONBERG, M. (2010): Long Term Sorption Diffusion Experiment (LTDE-SD), Performance of main *in situ* experiment and results from water phase measurements, R-10-67, December 2010, SKB - Svensk Kärnbränslehantering AB, Report.
- WOOD (2018) ConnectFlow Technical Summary. Release 12.0. 2018.
- ZHENG, CH. (2010) MT3DMS v5.3 Supplemental User's Guide, Technical Report to the U.S. Army Engineer Research and Development Center, Department of Geological Sciences, University of Alabama, 51 p, 2010.
- ZHENG, CH., WANG, P. P. (1999) MT3DMS, A modular three-dimensional multi-species transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user guide, U.S. Army Engineer Research and Development Center Contract Report SERDP-99-1, Vicksburg, MS, 202 p., 1999.

 SÚRAO	Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – Závěrečná zpráva	Evidenční označení:
		SÚRAO TZ 481/2020

Příloha 1 – Tabulka distribuovaných dat v rámci platformy GWFTS přes webový portál SKB (<https://www.skb.se/taskforce/>).

Veškeré zde odkazované soubory jsou nahrány na datové úložiště SIEVERT do podsložky v rámci složky projektu „(...)/01_podklady/data, v podobě ZIP archivů. Data byla distribuována i po skončení účasti řešitelů v projektu, předávaná data byla po odevzdání zprávy aktualizována k 22.5.2020.

Delivery number	Description	Note	File
1	Task 9A Description	Updated and delivered by the Technical Committee of Task 9, November 22, 2015	Download (pdf)
	Task 9B-1 Description	Delivered by the Technical Committee of Task 9, November 26, 2015	Download (word)
2	Data for Task Description 9A	Delivered by the Technical Committee of Task 9, May 12, 2015	Download (xls)
3	Description of the fluid inlet device in REPRO		Download (pdf)
	WPDE Photographs with higher resolution than earlier distributed	Delivered by the Technical Committee of Task 9, May 25, 2015	Download (Word)
4	Template for reporting of Task 9A		Download (word)
	Template for delivering results of Task 9A	Delivered by the Technical Committee of Task 9, June 15, 2015	Download (xls)
5	Task Description 9B-1 Appendix 1	November 25, 2015	Download (word)
6	Lab program supporting LTDE-SD, Vilks et al., 2005	Additional files for Task 9B-1	Download (pdf)
	Evolution of pH and Eh in LTDE-SD	Additional files for Task 9B-1	Download (xls)
	Template for delivering data Task 9B-1 15-11-23	Additional files for Task 9B-1	Download (xlsx)
7	Errata for Task Description 9B-1 of 2015-11-26	Delivered by Task 9 Technical Committee, April 21, 2016	Download (pdf)
8	Updated information (time line, core storage, and decay correction) on the Task Description 9B-1 of 2015-11-26.	Delivered by Task 9 Technical Committee, April 25, 2016	Download (pdf)
9	Draft Task Description for Task 9B-2.	Delivered by Task 9 Technical Committee, May 2, 2016	Download (word)

Delivery number	Description	Note	File
10	Experimental data of Repro WPDE 1 and 2, i.e. Task 9A.	Delivered by Task 9 Technical Committee, June 16, 2016	Download 1 (xlsx) Download 2 (xlsx) Download 3 (xlsx) Download 4 (xlsx)
11	Updated Task Description for Task 9B-2, and the associated data.	Data delivered by Task 9 TC, June 22, 2016	Download 1 (xlsx) Download 2 (xlsx) Download 3 (xlsx) Download 4 (word)
12	Appendices to Task Description for Task 9B-2: Pictures of A and D cores, and geological characterization.	Data delivered by Task 9 TC, September 30, 2016	Download 1 (word) Download 2 (word)
13	SKB General report template and instructions.	Delivered by TF GWFTS Secretariat, October 5 2016.	Download 1 (word), Download2 pdf
14	Task 9B -Geological description of a piece of rock from the LTDE-SD site.	Report by Henrik Drake, Linnaeus University, Sweden. Delivered by Task 9 TC October 7 2016.	Download (pdf)
15	Task 9A Evaluation material for the Task 9A Evaluation report	Data delivered by the Task 9 Evaluator, December 2 2016	Download 1 (Evaluation draft, word), Download 2 (Figures, pdf), Download 3 (Compilation draft, pdf)
16	Task Description for Task 9B-3 including separate Appendix with high resolution pictures of A and D cores.	Data delivered by Task 9 TC, December 21, 2016	Download 1 (pdf, 1 Mb) , Appendix pdf 9MB, Appendix Word 43MB
17	Clarification of data for Task 9A (REPRO) and Task 9B (LTDE-SD)	Data delivered by the Principal Investigators of Task 9, April 13 2017	Download 1 (word), Download 2 (word)
18	The data package includes the results from C-14-PMMA autoradiography and X-ray tomography on samples from REPRO and LTDE-SD. The total size of all of the files is about 11.5 GB, however when compressed they take only about 0.6 GB.		Download the data package from the ftp-server: Task 9/Additional Data Deliveries.

Delivery number	Description	Note	File
	Also, there is information included about conversion of gray values from C-14-PMMA image to porosities. There is also a program for opening the *.raw images and short instruction how to open the files.	Data delivered by University of Helsinki, March 29 2017	Download instructions for the ftp-server.
19	Supporting lab tests with dyes (Uranine and Potassium permanganate) in flowing water around a core from REPRO – WPDE in a tube of plexiglass. The control widgets of the videos may appear when hovering over the individual pictures in slides 3, 4, 6 and 7.	Data delivered by HYRL, and presented at TF GWFTS meeting 35.	Download (pptx, 77 Mb)
20	An update on the tracer cocktail densities in Task 9A.		Download (pdf)
21	An update on various artefacts that have been discussed in Task 9B.		Download (pdf)
22	Task description of Task 9C		Download (pdf, 5 Mb)
	Template for result predictions of Task 9C	Delivered by the Principal Investigators of Task 9, November 14, 2017.	Download (xlsx)
23	Task 9C: Update on pressure gradients in REPRO TDE	Delivered by Task 9 PI May 25, 2018	Download (pdf)
24	Task 9B2: Accompanying data (revised PEEK data compared to DD11).	Delivered by Task 9 PI July 25, 2018	Download (pdf)
25	Task 9C: Additional updated pressure data of REPRO TDE, and clarifications.	First delivered July 31, updated September 7, 2018 by Task 9 TC.	Download (pdf)
26	Task description of Task 9D1 and 9D2	Delivered by the Principal Investigators of Task 9, September 12, 2018.	Download (pdf)
27	Final draft SKB P-16-12 - Long Term Sorption Diffusion Experiment (LTDE-SD) Over-core Drilling and Extraction of Core Samples	Delivered by Task 9 PIs September 27, 2018.	

Delivery number	Description	Note	File
28	LTDE-SD (Task 9B): Revised background tracer concentrations, preliminary memo	Delivered by Task 9 Principal Investigator Kersti Nilsson November 5, 2018	Download (Word)
29	LTDE-SD (Task 9B): Memo; Updated detection and reporting limits and risk of contamination for Co-57, Ba-133, Cs-137 and Ra-226, revised due to potential contamination during the sample preparation, Part 1	Delivered by Kersti Nilsson and Johan Byegård, January 21, 2019.	Download (pdf)
30	Task 9C data: Updated caliper volumes.	Data delivered by Kersti Nilsson and Johan Byegård, February 13, 2019.	Download (pdf)
31	Task 9C data: Experimental activity and pressure values.	Data delivered by Kersti Nilsson and Johan Byegård, March 8, 2019	Download (xlsx)
32	Updated Task Description for Task 9D1-2. Updated text in the TD is marked with yellow.	The updated TD is delivered by James Crawford, May 6, 2019.	Download (pdf)
33	Task 9B data: Updated information on core concentrations in LTDE-SD.	Data delivered by Kersti Nilsson and Johan Byegård, June 13, 2019	Download (xlsx)
34	Task 9C data: Updated experimental values for REPRO TDE.	Data delivered by Kersti Nilsson and Johan Byegård, June 18, 2019	Download (xlsx)
35	Task 9B Memo Part 2 on potential contamination levels in LTDE-SD.	Delivered by Kersti Nilsson and Johan Byegård, July 11, 2019	Download (pdf)
36	Tentative Task Description for Task 9C Extension (migration of Rn and Ra).	The tentative TD is delivered by Johan Byegård and James Crawford, July 16, 2019.	Download (pdf)
37	Updated Task Description for Task 9C Extension (migration of Rn and Ra).	This data delivery is replacing Data Delivery 36. The updated TD is delivered by Johan Byegård and James Crawford, August 27, 2019.	Download (pdf)
38	Task 9C data: Updated experimental values for REPRO TDE, II	Data delivered by Kersti Nilsson, December 18, 2019	Download (pdf)

Delivery number	Description	Note	File
39	Template for reporting Task 9C contributions for the joint Modelling and Evaluation Task 9C report		Template for reporting Task 9C (word)
	Generic template for Task 9 report e.g. Task 9B modelling reports, Task 9C joint M & E report, Task 9C Extension report	Templates delivered by TF GWFTS Secretariat February 26, 2020	Task 9 Manuscript Public report – Template Generic (word)
40	Updated Rock Matrix Data Draft P-17-30 Task Description for Task 9B		Rock Matrix data (xls)
	Updated info of 9B	Delivered by Kersti Nilsson and Björn Gylling, March 10, 2020	Draft P-17-30 (word)
41	On-line gamma measurement values for the observation holes and pressure data		Data delivery TDE (xls)
	Draft P-17-31 – Task descriptions of Task 9C	Data delivered by Kersti Nilsson, Geosigma, March 26, 2020	Draft SKB P-17-31 Task descriptions Task 9C (word, 16 MB)
42	Template for reporting Task 9D contributions for the joint Modelling and Evaluation Task 9D report	Template delivered by TF GWFTS Secretariat May 15, 2020.	Template for reporting Task 9D (word)

NAŠE BEZPEČNÁ BUDOUCNOST



SÚRAO

Správa úložišť radioaktivních odpadů

Dlážděná 6, 110 00 Praha 1

Tel.: 221 421 511, E-mail: info@surao.cz

www.surao.cz