

Technická zpráva číslo 11/2015

---

**MODELY A VÝPOČETNÍ KÓDY  
PRO URČENÍ TRANSPORTNÍCH  
CEST A HODNOCENÍ  
TRANSPORTU RADIONUKLID  
PŘES HORNINOVÉ PROSTŘEDÍ**

---

Václava Havlová

a kolektiv

ÚJV e0, a. s.

Praha, červenec 2015



## Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b> .....	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>Vstupní předpoklady</b> .....	<b>13</b>
<b>3</b>	<b>Rejvý model pro eýení transportu radionuklid v horninovém prost edí a ur ení transportních cest</b> .....	<b>15</b>
3.1	Zkuzenosti ze zahrani í.....	15
3.1.1	#védsko .....	15
3.1.2	Finsko .....	35
3.1.3	#výcarsko .....	51
3.2	ezení transportu dostupnými SW .....	64
3.2.1	MODFLOW a MT3D.....	64
3.2.2	Výpo etní moduly pro ezení transportu v programech MODFLOW .....	64
3.2.3	Flow123d .....	68
3.2.4	FEFLOW .....	71
<b>4</b>	<b>Záv r</b> .....	<b>73</b>
<b>5</b>	<b>Seznam literatury</b> .....	<b>74</b>

## Seznam obrázk :

Obr. 1 Uvažované lokality k výstavbě finálního hlubinného úložiště ve švédsku .....	15
Obr. 2 Okraje regionálního a lokálního modelového území. Urafování oblasti Laxemar a Simpevarp, bílé - okraj regionálního SDM modelu, modře - okraje modelu proudění a transportu, červená - okraje lokálních SD modelů (Rhén et al. 2009).....	17
Obr. 3 Severozápadní část kandidátní lokality (zelená) byla zvolena jako cílové území pro realizaci kompletních průzkumných prací (Joyce et al. 2010) .....	18
Obr. 4 Deformační zóny a horninové domény v oblasti regionálního SD modelu lokality Simpevarp (Rhén et al. 2009).....	19
Obr. 5 Geologická mapa severozápadní části kandidátní lokality Forsmark (Stephens et al. 2007).....	20
Obr. 6 Schematické zobrazení rozdělení horninového prostředí do 3 hlavních hydraulických domén. V rámci každé domény jsou přiznány ekvivalentní nebo prostorově distribuované parametry. (SKB 2008).....	21
Obr. 7 Ilustrace rozložení hydraulických horninových domén v SD modelu oblasti Laxemar, HRD - horninová hydraulická doména, ZSXXX - trasa deformačních zón (Rhén a Hartley 2009).....	21
Obr. 8 Schéma procesu na úrovni výpočtení buňky a jejich konceptualizace subgridovým modelem FRAME (Svensson et al., 2010).....	23
Obr. 9 PARTRACK - testovací model lokality Äspö HRL. Proudové kanály 100 částic v rychlostním poli vyvozeném gradientem ve směru zleva doprava. Modře vysoký počet trajektorií, červená nízký (Svensson et al. 2010) .....	24
Obr. 10 Startovní pozice jednotlivých částic v oblasti předpokládaného úložiště 500 pod povrchem. Částice jsou barevně odlišeny podle hydraulických horninových domén, HRD_C - modrá, HRD_W - zelená, HRD_EW007 - červená (Rhén a Hartley 2009) .....	25
Obr. 11 Trajektorie pro částice startující z domény HRD_C (modře vlevo) a HRD_W (zeleně vpravo). Červeně jsou dokumentovány výstupní (drenážní) oblasti jednotlivých částic (Rhén a Hartley 2009).....	26
Obr. 12 Histogram dokumentující procento částic, které vstupují do jednotlivých HCD (Rhén a Hartley 2009).....	26
Obr. 13 Plošný pohled (nahore) na cílové území s predikovanými trajektoriemi 300 částic (zelené linie) uvolněných z gridu 100x100 m a umístěných 500 m p.t. Červeně jsou zvýrazněna místa drenáží. Vertikální pohled (dole) na stejný případ (Follin et al. 2008) .....	27
Obr. 14 Vizualizace 447 částic uvolněných z hloubky 450 m uvnitř oblasti lokalizované v centrální části cílové lokality Forsmark. Zeleně - okraj cílové lokality, modře - pobouřené linie, červené body - drenážní výstupní oblasti, červená linie - částice #228 (Follin et al. 2008).....	28
Obr. 15 Detail trajektorie pohybu částice #228, barevně jsou odlišeny strukturní elementy. (Follin et al. 2008).....	28
Obr. 16 Graf hydraulického gradientu podél trajektorie dráhy #228 v ECPM modelu proudění. (Crawford 2008) .....	29
Obr. 17 Kumulativní advektivní transportní čas (rok) jako funkce délky transportní dráhy pro částici #228 (Crawford 2008).....	29

Obr. 18 Ilustrace modelových konceptů využitých v různých měřítkách, systém vložených modelů a transfer dat mezi měřítky (Joyce et al. 2010).....	31
Obr. 19 Ilustrace modelových konceptů v regionálním měřítku (nahore) a v měřítku úložiště (dole) (Joyce et al. 2010).....	32
Obr. 20 Konceptní model geosféry v projektu SR-PSU. V modelu je celkem 420 kompartmentů. Modré boxy reprezentují celkem 21 vodivých puklin s pohybem řízeným advekcí. Bílé kompartmenty reprezentují horninovou matici a difúzní procesy (SKB 2014) .	33
Obr. 21 Propojení modelů a výměna dat v simulacích transportu radionuklidů (SKB 2010)..	34
Obr. 22 Průzkumná území pro hlubinné úložiště ve Finsku. Lokality vybrané pro detailní průzkumy jsou vyznačeny tučnou čarou. (Poteri a Laitinen, 1999) .....	35
Obr. 23 Odkrytá geologická mapa oblasti Olkiluoto (Heikkinen et al., 2011) .....	36
Obr. 24 Zobrazení modelovaných hydrologických (modré) a tektonických (červené) zón (Heikkinen et al., 2011) .....	36
Obr. 25 Potenciální únikové cesty z úložiště do puklinových zón. Uvažované cesty jsou vyznačeny tučnými čarami (Poteri a Laitinen, 1999).....	37
Obr. 26 Zobecněný konceptuální model pukliny pro lokalitu Olkiluoto (Posiva Oy, 2012) .....	40
Obr. 27 Realizace úseku transportní cesty. Jednotlivým segmentům jsou přiřazeny transportní třídy dle určených pravděpodobností. Lokální transportní třídy se podél transportních cest mohou měnit (Posiva Oy, 2012) .....	41
Obr. 28 Konceptce modelů proudění v různých měřítkách a datové toky mezi nimi. Posiva Oy (2012b).....	44
Obr. 29 Jednotlivé uvažované únikové cesty radionuklidů z poškozeného kontejneru. Modré čáry znázorňují tok vody v ukládacím tunelu. Posiva Oy (2012b).....	45
Obr. 30 Zobrazení generovaných transportních cest pro různé realizace. (Nykyri et al., 2008) .....	46
Obr. 31 Tabulka s pohledem rozlišovaných transportních tříd a jejich parametry. (Posiva Oy, 2012).....	47
Obr. 32 Tabulka s ukázkou výsledků proudění pro jeden z modelovaných případů. Celá tabulka obsahuje více než 16 tis. cest. V tabulce jsou zvýrazněné výsledky pro jeden z ukládacích vrtů (3 uvažované únikové cesty). (Posiva Oy, 2012c).....	48
Obr. 33 Využití jednotlivých výpočetních kódů pro analýzu jednotlivých scénářů úniku radionuklidů. Červené jsou podbarvené nástroje použité pro simulace úniku z úložiště, modré nástroje pro analýzu bezpečnosti v biosféře. Posiva Oy (2012b).....	49
Obr. 34 Pohled modelů a datových toků mezi nimi. Zde bílé obdélníky představují modely uvolnění radionuklidů a jejich transportu, modré obdélníky popisují systém, zelené obdélníky klíčové podpůrné modely a modré elipsy stejné výstupy modelů. Posiva Oy (2012b).....	50
Obr. 35 Potenciální lokality navržené NAGRA v roce 2008. WLB . Wellenberg, SR . Suedranden, ZNO . Zuerich Nordost, NL. Noerdlich Laegern, JO . Jura Ost, JS. Jura Suedfuss (Nagra 2014a) .....	51
Obr. 36 Hydrogeologický profil severní části Švýcarska (Gmuender et al. 2014).....	53
Obr. 37 Geologický profil lokalitou Wellenberg (Nagra 1993) .....	54

Obr. 38 Příklad schematizace zájmové oblasti regionálního modelu do diskrétní sítě konečných prvků (Gmuender et al. 2014).....	56
Obr. 39 Příklad metody particle tracking, vlevo zobrazení koncových bodů jednotlivých proudnic, vpravo je pak četnost koncových bodů vyjádřená velikostí červeného kruhu (Nagra 2014a).....	57
Obr. 40 Rozložení rastru bodů na lokalitě Zürich Nordost, ze kterých byly vypouštěny částice při metodě particle tracking (Luo et al. 2014).....	58
Obr. 41 Rozložení infiltračních/drenážních oblastí svrchního kolektoru (kolektor Malm) získaných metodou particle tracking na lokalitě Zürich Nordost (Luo et al. 2014), červené čáry značí drenážní oblasti (forward particle tracking) a modré čáry značí infiltrační oblast (backward particle tracking). Obrázek C1 popisuje zlom se stejnou hydraulickou vodivostí, jako mají okolní modelové vrstvy, obrázek C2 popisuje nepropustný zlom, obrázek C3 popisuje zčásti propustný zlom a obrázek C3a popisuje zlom s vyšší hydraulickou vodivostí, než mají okolní modelové vrstvy.....	58
Obr. 42 Rozložení infiltračních/drenážních oblastí spodního kolektoru (kolektor středního triasu) získaných metodou particle tracking na lokalitě Zürich Nordost (Luo et al. 2014), červené čáry značí drenážní oblasti (forward particle tracking) a modré čáry značí infiltrační oblast (backward particle tracking). Obrázek C1 popisuje zlom se stejnou hydraulickou vodivostí, jako mají okolní modelové vrstvy, obrázek C2 popisuje nepropustný zlom, obrázek C3 popisuje zčásti propustný zlom a obrázek C3a popisuje zlom s vyšší hydraulickou vodivostí, než mají okolní modelové vrstvy.....	59
Obr. 43 Příklady zlomů ližící se jejich hydraulickou funkcí. Obrázek A představuje zlom, který nemá vliv na proudění podzemní vody, obrázek B představuje nepropustný zlom, obrázek C představuje zčásti propustný zlom a obrázek D představuje zlom se zvýšenou hydraulickou vodivostí.....	59
Obr. 44 Příklad tabelárního výstupu metody particle tracking pro jednu částici. ID značí číslo částice, TIME čas, ve kterém jsou veličiny určovány, X, Y a Z jsou prostorové souřadnice polohy bodu v daném směru a VX, VY a VZ jsou složky vektoru rychlosti v daném směru.....	60
Obr. 45 Sestava použitých programů pro výpočet efektivní dávky (Nagra 2014c).....	61
Obr. 46 Příklad sítě transportních cest v programu PICNIC-TD (Nagra 2014c).....	61
Obr. 47 Příklad nestrukturované tvercové výpočetní sítě QuadTree zahrnuté kolem liniových prvků (Muffels et al. 2014).....	65
Obr. 48 Vizualizace transportních cest vypočtených v programech MODPATH/MODFLOW-2005 a mod-PATH3DU/MODFLOW-USG pro modelový případ erpání podzemní vody z tlakové zvodny (Hesch 2014).....	66

## Seznam tabulek:

Tab. 1 Sumární statistika transportních charakteristik vypoítaných pomocí ConnectFlow pro ústice uvolněné z polohy cílové lokality ve 450 m p. t. (Crawford 2008) .....	30
Tab. 2 Pohled horninových typů v kandidátních lokalitách (Nagra 2014a) .....	52
Tab. 3 Parametry vstupující do modelu PICNIC-TD (Nagra 2014c) .....	63

### Seznam použitých zkratk:

3D	třírozměrný
CF	ConnectFlow
CPM	Kontinuální pórové médium (continuous porous medium)
CSI	kompletní průzkum lokality (complete site investigation)
ČR	Česká republika
DFN	Diskrétní puklinová síť (Discrete fracture network)
DT	DarcyTool
DZ	deformační zóny
ECPM	Ekvivalentní kontinuální médium (equivalent continuous porous medium)
EdZ	Engineering disturbed zone
EDZ	Excavation damaged zone
EPM	ekvivalentní pórové médium (equivalent porous medium)
FEM	Metoda konečných prvků (Finite element method)
FWS	smáčený povrch pukliny (flow-wetted surface)
GIS	Geological Information System
HCD	Hydraulická oblast deformačních zón (Hydraulic Conductor Domain)
HG	Hydrogeologické
HRD	Hydraulická oblast v horninové doméně (Hydraulic Rock mass Domain)
HSD	Hydraulická oblast kvartérního pokryvu (Hydraulic soil domain)
ISI	prvotní výzkum lokalit (initial site investigation)
JJV	Jihovýchod
HÚ	Hlubinné úložisko
NAO	Nízko aktivní odpady
NAPSAC	modul pro výpočty v puklinové síti programu ConnectFlow
NAMMU	modul pro výpočty v konceptu kontinuálního pórového kontinua programu ConnectFlow
OMM	Obere Meeresmolasse, kolektor svrchní mořské molasy
PGD	Preconditioned Conjugate-Gradient method
RAO	Radioaktivní odpad
SAMG	System Algebraic Multigrid method
S	Sever
SAO	Středně aktivní odpady
SC	Stochastické kontinuum
SC	Stochastické kontinuum (stochastic continuum)
SDM	popisný model lokality (side descriptive model)
SR	zpráva hodnocení bezpečnosti (safety report)
SW	Software
SKB	Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company
TDS	Celková salinita
UOS	Ukládací obalový soubor
USM	Untere Suesswassermolasse, kolektor spodní sladkovodní molasy
VAO	Vysoce aktivní odpady
VJP	Výhořelé jaderné palivo
VTT	Zkratka finské výzkumné organizace Technical Research Centre of Finland
WL/Q	Transportní odpor (transport resistance), který je ve zprávách finské organizace Posiva používán jako jeden ze základních parametrů simulací transportu v geosféře
ZL	Zadávací list



## Abstrakt

Zpráva se zabývá analýzou zahraničních metodických postupů zpracování transportních modelů pro určení transportních cest a zpracováním modelů pro hodnocení transportu radionuklidů horninovým prostředím. Analýza zahraničních metodických postupů byla založena na studiu zahraničních zpráv publikovaných společnostmi SKB, Posiva a NAGRA popisujících přístupy k řešení problematiky ve Švédsku, Finsku a Švýcarsku. V každé oblasti byla rezerována na popis kandidátní lokality i lokalit, popis horninových typů vyskytujících se na jednotlivých kandidátních lokalitách, popis povětrného programu použitého pro výběr transportních cest, popis metody výběru transportních cest, popis použitého výpočetního programu pro simulaci transportu radionuklidů a způsob napojení těchto programů na hydrogeologické, strukturně geologické modely a na modely hodnocení bezpečnosti.

Autoři hodnocených prací při řešení v závislosti na fázi hodnocení lokality a dostupných datech používají různá měřítka a odpovídající modelový přístup, jako například v regionálním měřítku aplikaci ECPM/CPM modelu, v lokálním měřítku DFN model apod. Transport je obvykle řešen pomocí kombinace metod particle tracking a pomocí advektivních disperzních rovnic (tzv. "úplný" transport). Zajímavá je klasifikace rozpukaného horninového masivu ve finském kontextu, která umožňuje detailně zohlednit heterogenitu v mnoha parametrech. Tento přístup je významný náročný na data o migračních vlastnostech hornin (sorpce, difúze).

Náplní zprávy je dále detailní popis povětrných programů použitých k řešení úkolu v rámci tohoto dílčího projektu, tedy k výběru transportních cest radionuklidů. Transport radionuklidů bude simulován paralelně při využití výpočetních kódů MODFLOW a MT3D, Flow123d a FEFLOW.

Předložená zpráva je základem pro metodické zpracování transportních modelů pro 7 lokalit v České Republice potenciálně vhodných k umístění hlubinného úložiště (Čertovka, Bězový potok, Magdaléna, Říhadlo, Hrádek, Horka, Kraví Hora). Modelové práce budou koncipovány v regionálním a detailním měřítku. V souladu se zahraničními postupy bude transport radionuklidů (a proudění podzemní vody) simulován při využití konceptu ekvivalentního kontinuálního pórového média, kdy zadané modelové parametry budou reprezentovat transport (a proudění) v rozpukaném horninovém masivu.

Identifikace transportních cest bude probíhat v postupném režimu vymezení infiltračních a drenážních oblastí zájmových území při využití metody particle tracking. Návazně budou na základě geometrických informací o situování úložiště vymezeny oblasti možného transportu radionuklidů.

Zpracováním transportních modelů dojde následně ke zpracování popisu hydrogeologické funkce jednotlivých lokalit a výsledky modelových prací přispějí k cílenému zúžení po tu kandidátských lokalit HÚ.

## Klíčová slova

*transport, radionuklidy, transportní cesta, hodnocení bezpečnosti*

## Abstract

The report presents methodologies from foreign countries, using a selection of transport models for identification of transport pathways in the fractured crystalline rock and evaluation of radionuclide transport in the presumed deep geological repository environment. Analysis of the methodologies was based namely on SKB, Posiva and NAGRA reports describing approaches to solve problems in crystalline rock in Sweden and Finland, and in clay sedimentary rock in Switzerland.

The research for each country was focused on description of the candidate site(s), description of rock types present on each candidate sites, description of methods for selecting transport pathways, description of the codes, used transport pathways determination, a description of the computer program to simulate the radionuclide transport and how hydrogeological programs, geological structure models and safety assessment model are interconnected.

The assessed reports clearly showed that, depending on the stage of the site evaluation and available data, the authors used different scales and appropriate modelling approaches, such as ECPM/CPM model for regional scale or DFN model on a local scale etc. Transport is usually solved using a combination of particle tracking method with advection and dispersion equations (i.e., the "complete" transport). The interesting classification of fractured rock mass was introduced in the Finnish context. It allows assessing of the fracture surface heterogeneity in detail, concerning multi-layer system in the direction from the fracture toward undisturbed rock matrix. However, the approach is significantly demanding, concerning migration data (sorption, diffusion).

The report also describes the computer programs that are planned to be used for the main task within the sub-project, i.e., transport of radionuclides under Czech Massif conditions. Transport of radionuclides will thus be simulated using parallel computation codes MODFLOW and MT3D, Flow123d and FEFLOW.

The report should be the basis for the methodical processing of transport models for 7 locations in the Czech Republic potentially suitable for DGR siting (Čertovka, Bězový potok, Magdaléna, Šihadlo, Hrádek, Horka, Kraví Hora). Modelling will be performed both in the regional scale and in detail. The radionuclide transport (and groundwater flow) will be simulated in accordance with international experience using the concept of equivalent continuous porous media. Furthermore, the specified model parameters will represent transport (and flow) in fractured rock mass.

Identifying transport pathways will proceed using particle tracking methods in the sequence of infiltration and drainage area definition for the areas of interest. Following this, the areas of identified possible range of radionuclides will be located on the basis of geometric information about DGR location.

Processing transport models will then enable to gain more detailed description of the hydrogeological function of each site. Moreover, modelling results will contribute significantly to the progressive reduction of the DGR candidate sites.

## Keywords

*transport, radionuclides, transport pathway, safety assessment*

## 1 Úvod

Tato zpráva byla zpracována v rámci projektu SÚRAO s výzkumná podpora bezpečnosti 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, a.s. a jeho subdodavateli: českou geologickou službou, VUT v Praze, Technickou univerzitou v Liberci, Ústavem Geoniky AV ČR, a společnostmi Arcadis CZ a.s., PROGEO, s.r.o. a Chemcomex Praha, a.s. a Centrum výzkumu, s.r.o. o poskytování výzkumné podpory hodnocení dlouhodobé bezpečnosti v následujících oblastech:

- Chování VJP a forem RAO, nepřírodních do přírodních úložišť, v prostředí hlubinného úložiště;
- Chování ukládacích obalových souborů (UOS) VJP a RAO v prostředí hlubinného úložiště;
- Chování tlumičů, výplňových a dalších konstrukčních materiálů v prostředí hlubinného úložiště;
- Účinky úložných vrtů a jejich vliv na vlastnosti obklopujícího horninového prostředí;
- Chování horninového prostředí;
- Transport radionuklidů z úložiště;
- Další charakteristiky lokalit potenciálně ovlivňující bezpečnost úložiště.

Cílem plnění dílčího projektu "Vstupní parametry a procesní modely pro hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí" (oblast Transport radionuklidů z úložiště) je získat vstupní parametry a procesní modely pro hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí pro podporu pracovníků Objednatele v souladu s výše uvedenou oblastí (vi) Transport radionuklidů z úložiště.

Podmínkami úložiště tohoto dílčího projektu je:

- Shrnutí a analýza transportních procesů, modelů a výpočetních kódů pro určení transportních cest a hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí.
- Výběr vhodných procesních modelů pro popis transportu radionuklidů v krystalinickém prostředí a určení transportních cest na kandidátních lokalitách v návaznosti na přípravu 3D struktur -geologických a hydrogeologických modelů v dílčích projektech, aktualizace analýz zahraničních poznatků a určení transportních cest pro vybrané lokality podle požadavků SÚRAO.
- Shrnutí a aktualizace odhadu transportních parametrů horninového prostředí pro vybrané lokality podle požadavků Objednatele ve formě databáze parametrů včetně odhadu jejich nejistot na základě analýzy dosavadních poznatků dosažených při přípravě HÚ v ČR a aktualizace analýz zahraničních poznatků.
- Ověření vybraných modelů a implementace výpočetních kódů pro určení transportních cest v potenciálních lokalitách.
- Ověření a srovnání transportních charakteristik dostupných vzorků z různých horninových prostředí uvažovaných pro HÚ v ČR.

Náplní této dílčí zprávy je shrnutí vybraných programů (výpočetních kódů) a analýza zahraničních metodických postupů zpracování transportních modelů pro určení transportních cest a pro hodnocení transportu radionuklidů horninovým prostředím v různých stádiích posuzování lokalit vybraných k možnému situování HÚ.

Předložená zpráva umožňuje metodické zpracování transportních modelů pro 7 lokalit v ČR potenciálně vhodných k umístění HÚ (Čertovka, Bězový potok, Magdaléna, Jihadlo, Hrádek, Horka, Kraví Hora). Cílem modelování transportu radionuklidů bude porovnání jednotlivých lokalit ČR z hlediska transportní stability (posouzení parametrů namodelovaného transportu radionuklidů na základě vybraných bezpečnostních kritérií). Zpracováním transportních modelů dojde ke zpeřesnění popisu hydrogeologické funkce jednotlivých lokalit a výsledky modelových prací přispějí k cílenému zúžení počtu kandidátských lokalit HÚ.

## 2 Vstupní předpoklady

V ČR se předpokládá, že s ohledem na genezi a členitou geologickou stavbu oblastí českého masivu připadají v úvahu pro výběr finální lokality za účelem ukládání vyhořelého jaderného paliva a vysoceaktivních odpadů v podstatě výlučně plutonická granitická tělesa. Z těchto se pak pozornost soustředila pro rozlohu těles, jejich četnost, homogenitu, složení, příznivé geotechnické parametry, hloubkovou stálost i tektonickou stabilitu hlavně na granitoidy. Předpoklad vybudování HÚ v granitických horninách je obsažen i v Konceptu nakládání s radioaktivními odpady a vyhořelým palivem v ČR, která byla schválena usnesením vlády ČR č. 487 z roku 2002 (Aktualizace referenčního projektu 2011).

Lokalita HÚ musí svými vlastnostmi odpovídat vyhlášce č. 215/1997 Sb., o kritériích na umístění jaderných zařízení a velmi významných zdrojů ionizujícího záření (například z hlediska seismicity a výskytu geodynamických jevů). Horninové prostředí v okolí úložiště pak plní pasivní funkci především bariéry proti úniku radionuklidů do biosféry v případě degradace nebo destrukce inženýrských bariér.

Prokázání bezpečnosti hlubinného úložiště na dobu statisíců až milionů let v prostředí několika set metrů pod povrchem země vyžaduje specifické postupy, metody a nástroje, jejichž připravenost vyžaduje značné nároky, a to jak na čas, tak i na kvalifikaci a technické dovednosti pracovníků zavádějících tyto nástroje.

Vývoj hlubinného úložiště po jeho uzavření je možno rozložit do několika etap. V první fázi po uzavření úložiště budou radionuklidy zcela uzavřeny v ukládacích obalových souborech do doby jejich poškození, která závisí na typu materiálu použitém pro výrobu ukládacího obalového souboru.

Předpokládá se, že ukládací obalové soubory na bázi oceli mohou zůstat nepoškozeny po dobu tisíců až statisíců let a ukládací obalové soubory na bázi mramru po dobu statisíců až milionů let. Po degradaci obalových souborů brání rychlému uvolnění radionuklidů z vyhořelého jaderného paliva povlak paliva a vlastní keramická matrice oxidu uranitého, kde jsou radionuklidy pevně vázány.

Po poškození obalového souboru a povlaku paliva se radionuklidy velmi pomalu začnou uvolňovat z odpadu a začnou migrovat přes tlumivé a výplňové materiály do horninového prostředí a poté puklinami v granitové hornině až do povrchových vodotečí.

Právě určení významných **transportních cest**, tj. trajektorií částic ze zdroje v horninovém prostředí, jež jsou determinovány jednak vlastnostmi prostředí, jednak aktuálními podmínkami v tomto prostředí (hydraulické a transportní charakteristiky), patří k nejvýznamnějším úlohám v rámci popisu migrace radionuklidů směrem k biosféře.

Dominantním faktorem transportu z oblasti hlubinného úložiště směrem k hydrosféře bude advektivně-disperzní tok radionuklidů způsobený prouděním podzemní vody heterogenní puklinovou sítí založenou na existujícím rozpukání horninového masivu. Základní nástroj pro zhodnocení transportu radionuklidů k biosféře v jednotlivých lokalitách poskytnou hydraulické a transportní modely.

Matematický popis transportu v rozpukáném horninovém masivu je v závislosti na zvoleném množství simulací a v závislosti na množství a typu vstupních dat obecně rozvíjen na základě 2 odlišných konceptů, které vychází z principu:

- ekvivalentního pórového kontinua (EPM),
- diskretních puklinových sítí (DFN).

Projektované modelové výpočty v programech MODFLOW, MT3D, Flow123D a FEFLOW budou vycházet z reprezentace horninového prostředí pomocí ekvivalentního pórového

kontinua. Identifikované heterogenity horninového prostředí budou v modelech interpretovány změnami modelových parametrů a zavedením diskrétních modelových prvků

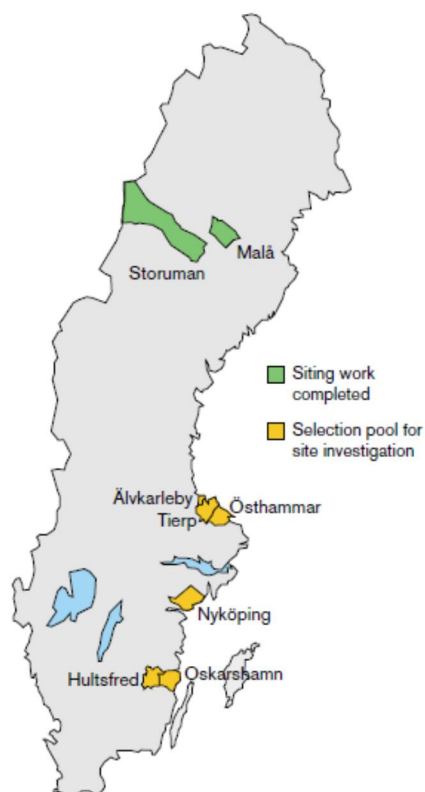
## 3 Rejvýre model pro eýení transportu radionuklid v horninovém prost edí a ur ení transportních cest

### 3.1 Zkuýenosti ze zahrani í

#### 3.1.1 üvédsko

##### **Kandidátní lokality**

Výb ru finální lokality pro ukládání radioaktivního odpadu v lokalit Forsmark p edcházet dlouhodobý proces zhodnocení více než 10 tisíce lokalit na území celého üvédska. P eváon na základ vyhodnocení geologických, ale i negeologických faktor (nap . vlastnických vztah ), bylo vybráno 8 lokalit vhodných pro vrtný pr zkum provedený mezi roky 1976-1983 (Obr. 1). Cílem výzkumu bylo zejména získat data z velkých hloubek z r zných oblastí üvédska (Thegerström a Engström 2013).



Lokalita	Převládající horninové typy	Průměrná nadmořská výška [m n.m.]
Storuman	žula	351
Malå	granit	338
Nyköping	ruľové žuly, sedimentární žilnaté ruly	20
Tierp	granit	41
Hultsfred	žuly (+ žilné horniny)	105
Älvkarleby	ruľové žuly	13
Forsmark	ruľové žuly	22
Laxemar-Simpevarp	granit	8

Obr. 1 Uvařované lokality k výstavb finálního hlubinného úloizt ve üvédsku

V letech 1993-2000 byly na t chto lokalitách provedeny studie proveditelnosti. Výsledkem t chto studií byl výb r 3 lokalit pro detailní terénní výzkum:

- Forsmark v municipalit Östhammar,
- severní oblast municipality Tierp a
- Laxemar-Simpevarp v municipalit Oskarshamn.

Zatímco vedení municipalit v Östhammaru a Oskarshamnu souhlasila s dalším pr zkumem, v Tierpu byl terénní výzkum zamítnut (Thegerström a Engström 2013).



Integrovanou charakteristiku posuzovaných lokalit zahrnují 3D deskriptivní (popisné) modely jednotlivých lokalit doprovázené popisným textem. Základ deskriptivního modelu tvoří geologický model, který poskytuje geometrický popis deformačních zón a horninové matrice mezi jednotlivými zónami. Na základě geologických a geometrických popisných modelů jsou vyvíjeny další modely zahrnující popis:

- hydrogeologie,
- hydrochemie,
- mechaniky hornin,
- teplotních charakteristik a
- transportních charakteristik (Hartley et al. 2005).

Výzkum obou lokalit byl realizován ve dvou fázích:

- prvotním výzkumem lokality (ISI . initial site investigation),
- kompletním průzkumem lokality (CSI . complete site investigation).

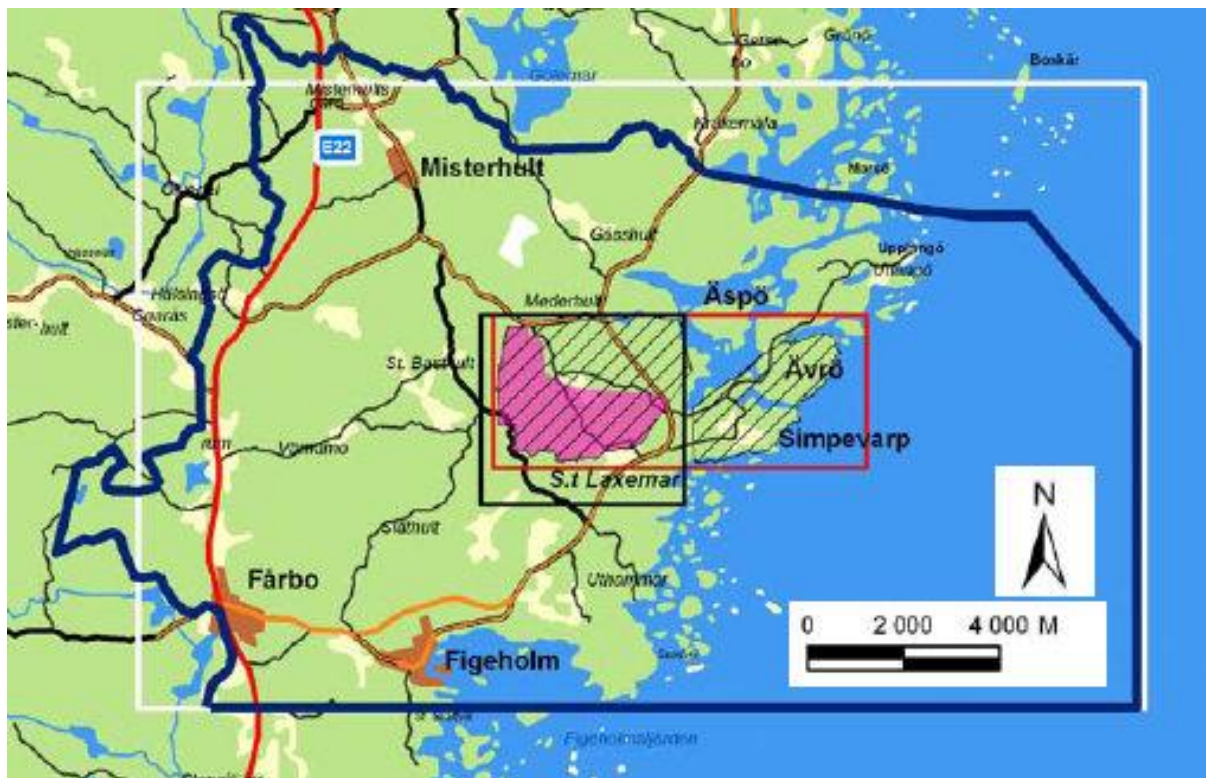
Finální plánování a vybudování hlubinného úložiště vyžaduje zhodnocení jeho dlouhodobé bezpečnosti. Postup a výsledky hodnocení byly součástí takzvaného SR-Site projektu (SR . safety report). SR-Site projekt byl založen na výsledcích kompletního průzkumu a detailního popisu lokality, které byly součástí SDM-Site projektu (SDM . Site descriptive model). Přípravnou fází SR-Site projektu tvořil SR-Can (Can . Canister) projekt. Cílem SR-Can projektu bylo poskytnout první zhodnocení dlouhodobé bezpečnosti úložiště. SR-Can projekt byl založen na datech z počáteční fáze výzkumných prací SDM-Site projektu.

Součástí vývoje deskriptivních (popisných) modelů lokalit bylo využití numerických modelů proudění podzemní vody a simulací transportu z předpokládaných oblastí umístění úložiště. SDM-Site projekty byly zaměřeny na podrobný popis prostředí, zatímco SR-Site a SR-Can projekty byly zaměřeny na technologii ukládání, design finálních úložišť, zhodnocení vlivu úložiště na životní prostředí a byly využity jako podklady pro analýzu bezpečnosti (Safety Analysis . SA; Hartley et al. 2006).

### ***Lokalita Laxemar-Simpevarp***

Kandidátní lokalita Simpevarp je rozdělena do dvou částí (Obr. 2), oblasti Simpevarp na poloostrov stejného jména a oblasti Laxemar lokalizované na pevnině západně od poloostrova. Podrobná charakteristika oblasti Simpevarp je součástí deskriptivního modelu, jehož popis byl publikován v dokumentech SKB (2004b) a SKB (2005b). Deskriptivní model oblasti Laxemar je popsán v dokumentu SKB (2006a). Na základě deskriptivních modelů lokalit a předložené bezpečnostní analýzy (SKB 2006b) byla pro detailní popis vybrána oblast Laxemar.



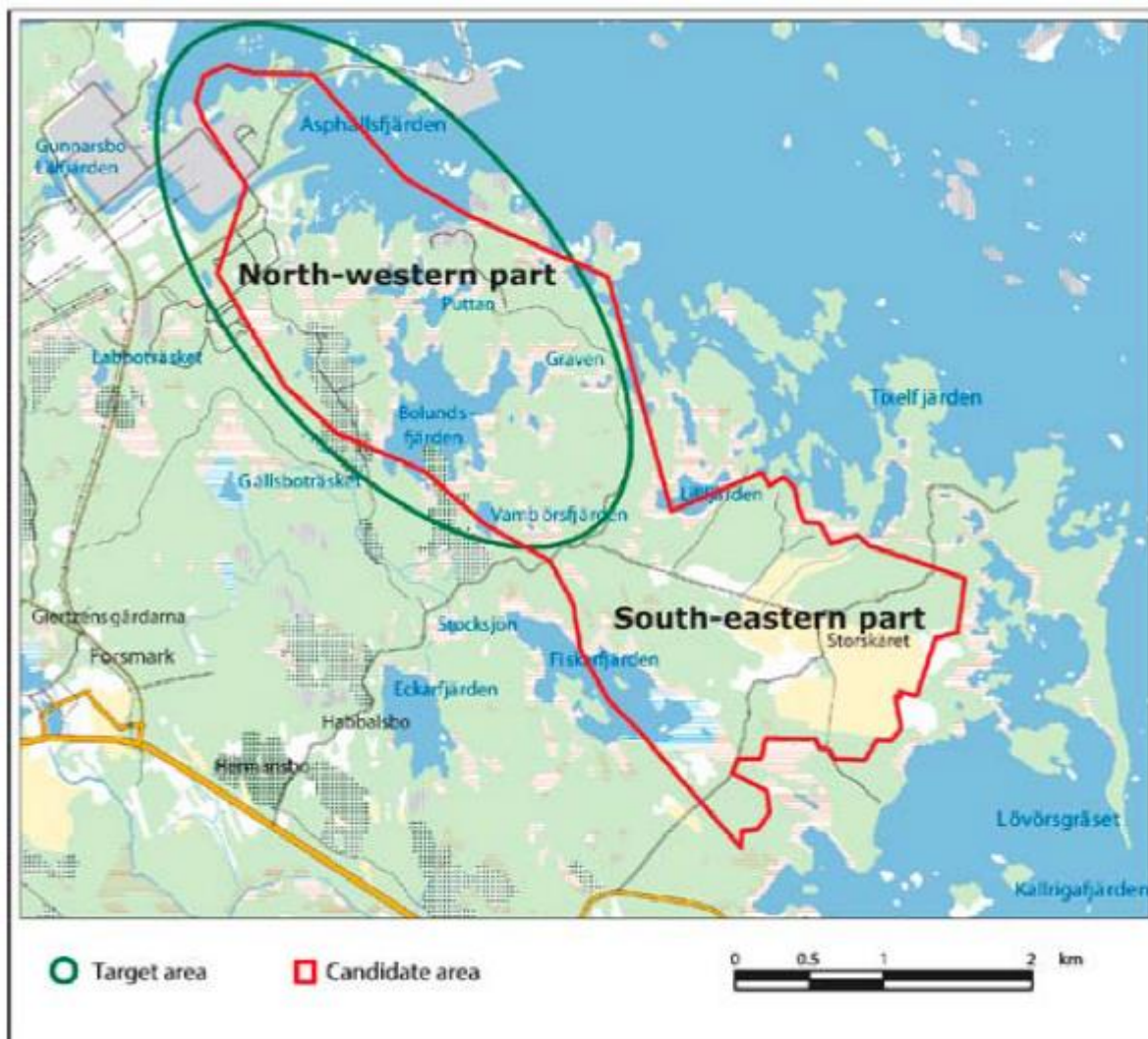


Obr. 2 Okraje regionálního a lokálního modelového území. Červená - oblasti Laxemar a Simpevarp, bílá - okraj regionálního SDM modelu, modrá - okraje modelu proudění a transportu, černá a zelená - okraje lokálních SD modelů (Rhén et al. 2009).

Numerické modely proudění a transportu v oblasti Laxemar v regionálním měřítku (stovky kilometrů) sloužily zejména k pochopení režimu proudění podzemní vody v lokalitě. Transportní modely navazovaly na modely proudění. Metodou particle tracking byly identifikovány potenciální drenážní oblasti pro podzemní vodu odtékající z hloubek ve kterých je plánováno uložení. Numerické modely s detailním rozlišením modelového gridu v lokálním měřítku byly využity pro stanovení dráhy odtoku z oblastí plánovaného uložení (Hartley et al. 2005).

### **Lokalita Forsmark**

Zájmové území Forsmark se nachází cca 120 km severně od Stockholmu. Území určené pro stavbu hlubinného uložení (candidate area) leží v pruhu podél pobřeží dlouhém cca 6 km a širokém 2 km (Obr. 3). V jeho severo-západní části bylo vybráno cílové území (target area) pro provedení kompletních průzkumných prací a pro následné vybudování uložení.

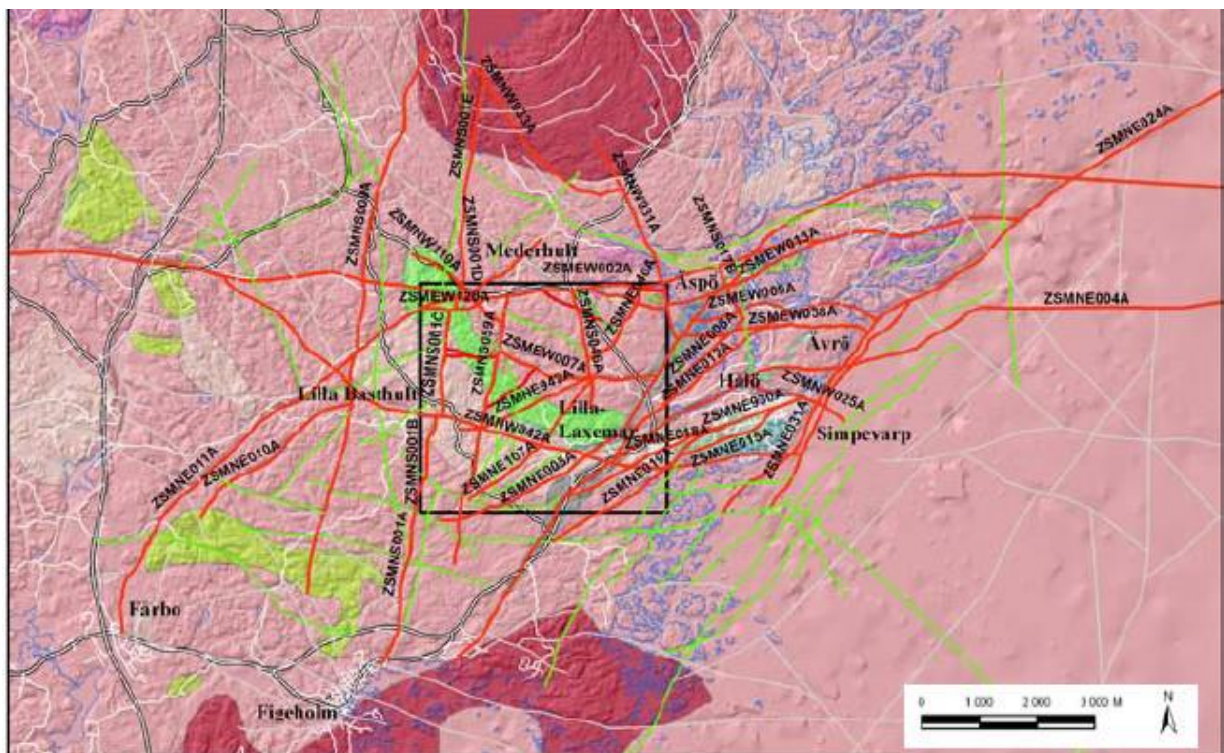


Obr. 3 Severozápadní část kandidátní lokality (zelená) byla zvolena jako cílové území pro realizaci kompletních průzkumných prací (Joyce et al. 2010)






### Typ horniny

Geologii oblasti Laxemar-Simpervarp detailně popisuje Wahlgren et al. (2005 a 2008). Dominantně převládající horninou v oblasti Simpervarp je granit typu Ävrö. V jižní a jihozápadní části převládá křemenný monzodiorit. V centrální části se vyskytuje Ävrö granit s vysokou frekvencí gabra a dioritu (Obr. 4). Oblasti Laxemar a Simpevarp jsou odděleny dvěma podlouhlými doménami, pro které je charakteristická vysoká frekvence menších vrás.





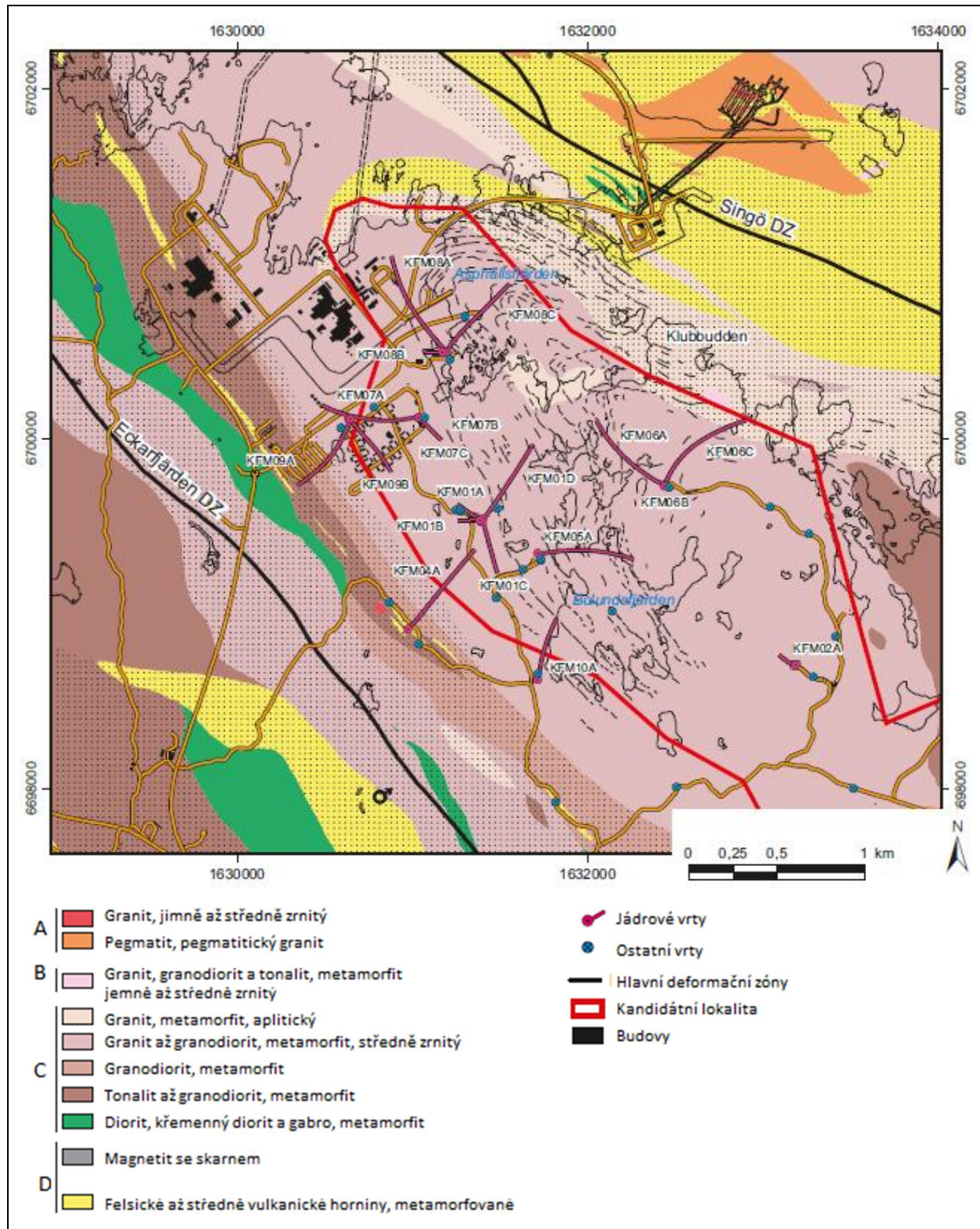
	A-Åvrö Granit
	B-Jemnozrný diorit
	C-Mix A a D
	D-Křemenný monzodiorit
	E-Diorit/gabro
	F-Granit, jemno až střednězrnitý
	G-Granit, jemně a středně až hrubo zrnitý granit
	M-Åvrö Granit s dioritem/gabrem
	P-Vysoká frekvence tažných deformačních zón

	Deformační zóny, vysoce potvrzené
	Deformační zóny, středně potvrzené
	Deformační zóny, málo potvrzené
	SDM-Site Laxemar, okraje lokálního modelu
	Komunikace

Obr. 4 Deformační zóny a horninové domény v oblasti regionálního SD modelu lokality Simpevarp (Rhén et al. 2009)

Geologie lokality Forsmark je zpracována v Stephens et al. (2007). Podrobně je geologická mapa podloží zahrnující horninové typy a vrásové struktury prezentována v dokumentu SKB (2005a). Podloží je tvořeno krystalinickými horninami, které jsou ovlivněny vrásovými i zlomovými deformacemi (Obr. 5). Tzv. deformační zóny (DZ) mají výrazný vliv na hydrogeologické podmínky v lokalitě. Oblasti mezi DZ tvoří horninový masiv v různém stupni rozpukání a na proudění podzemní vody se podílí minimálně. Podloží horniny jsou kryty několikametrovou vrstvou kvartérních sedimentů (SKB 2004a).

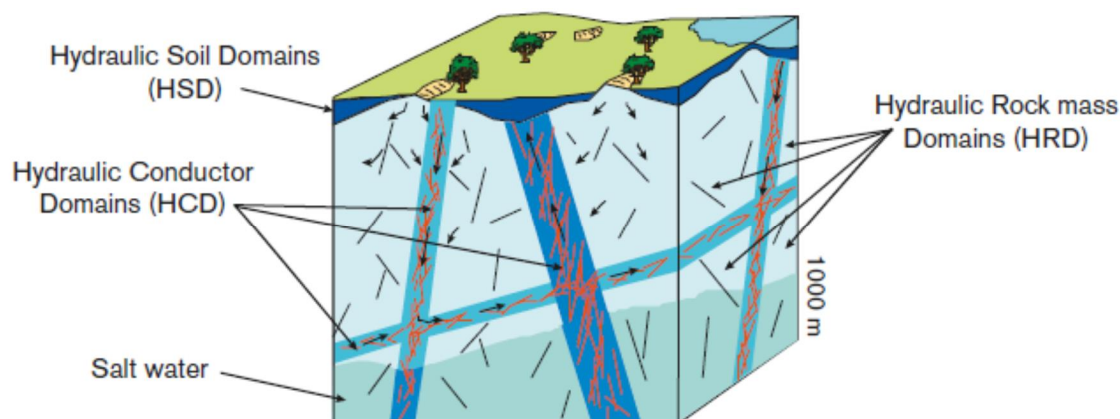




Obr. 5 Geologická mapa severozápadní části kandidátní lokality Forsmark (Stephens et al. 2007)

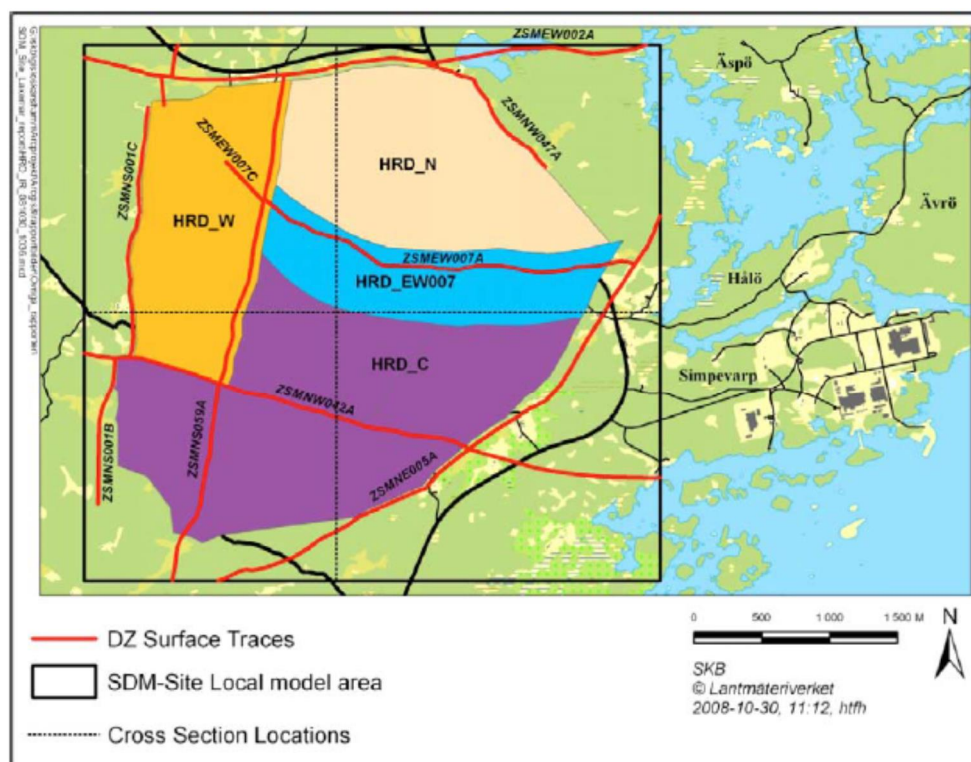
Z hydrogeologického hlediska je území rozděleno do těchto hlavních hydraulických domén (Obr. 6):

- HSD (Hydraulic Soil domain) reprezentující hydrauliku v kvartérním pokryvu podloží,
- HCD (Hydraulic Conductor Domain) reprezentující hydrauliku deformačních zón a
- HRD (Hydraulic Rock mass Domain) reprezentující hydrauliku v puklinové doméně mezi deformačními zónami.



Obr. 6 Schematické zobrazení rozdělení horninového prostředí do 3 hlavních hydraulických domén. V rámci každé domény jsou přiznány ekvivalentní nebo prostorově distribuované parametry. (SKB 2008)

Horninové domény jsou na základě podobnosti prostorově rozložených hydraulických vlastností převedeny na jednotlivé hydraulické domény. Hydraulická vodivost v horninových doménách je cca desetkrát menší než v deformovaných zónách (Rhén a Hartley 2009).



Obr. 7 Ilustrace rozložení hydraulických horninových domén v SD modelu oblasti Laxemar, HRD - horninová hydraulická doména, ZSXXX - trasa deformovaných zón (Rhén a Hartley 2009)

### Použitý software pro výběr transportní cesty

Numerické modely proudění a transportu byly realizovány ve výpočetním kódu ConnectFlow (CF) (Serco 2009a, 2009b, 2009c) a DarcyTools (DT) (Svensson et al. 2010, Svensson 2010, Svensson a Ferry 2010). Zaměření obou skupin bylo zčásti odlišné, ovšem odpovídalo shodnému požadavku zadání regionálního modelu (Follin et al. 2005). CF tým



se více zaměřil na otázky spjaté s potřebami bezpečnostní analýzy úložit, DT tým se zabýval potvrzením úvah spjatých s obecným hydrogeologickým zadáním modelu, například velikosti modelové domény, stanovením okrajových podmínek atd.

V programu ConnectFlow (CF) je možné konstruovat modely s využitím diskrétní puklinové sítě (DFN - program NAPSAC), kontinuálního pórového kontinua (CPM - program NAMMU) nebo kombinací obojího. Příklad ekvivalentního kontinuálního pórového média (ECPM) byl využit pro modelování regionálního proudění podzemní vody a transportu rozpustných látek. Příklad ECPM používá hydraulické parametry, které reprezentují diskrétní pukliny elementární výpočetní sítě modelu. Velikost elementární výpočetní sítě dosahuje 40-120 m.

Simulace transportu v programu NAPSAC předpokládá migraci stopové (nereagující látky) v diskrétní puklinové síti. Výpočet transportu je založen na algoritmu particle-tracking. Dominantním transportním procesem je advekce. Disperze stopové je důsledkem existence různých potenciálních proudových cest v propojené puklinové síti. Předpokládá se, že rozvěvené pukliny jsou dostatečně malé, takže stopová může v puklině rychle difundovat například rozvěvením. Do výpočtu může být zahrnutý vliv difúze a sorpce do horninové matrice, který se projeví prodloužením doby pohybu částice v puklině, tj. jedná se o retardační procesy, které nemají geometrii transportních cest. V programu NAMMU lze exportovat transport látek rovněž metodou particle tracking (možnost napojení na model NAPSAC) nebo lze ve výpočetní síti simulovat transport advekční-disperzní rovnicí se zahrnutím procesů (s různou mírou podrobnosti):

- advekce,
- molekulární difúze,
- hydrodynamická disperze,
- difúze do horninové matrice (eženo modulem MATDIF),
- sorpce (lineární),
- aniontová exkluze (zahrnuto zjednodušením pomocí faktoru exkluze),
- efekt organických komplexantů (pomocí redukčního faktoru lineární sorpce),
- radioaktivní rozpad a přeměna na radionuklid dle rozpadové řady.

Problém transportu v puklinové síti řešený metodou particle trackingu se rozpadá na dvě části. Nejprve je řešen transport jednotlivou puklinou a následně transport puklinovou sítí. Pro každou puklinovou plochu je spočten reprezentativní počet proudnic mezi prasečky dané plochy s ostatními puklinami. Prasečky (linie) jsou diskreditovány transportními uzly a proudnice jsou vypočteny pro každou transportní uzel. K dispozici jsou dva algoritmy pro vypočtení proudnic. První algoritmus představuje tzv. skutečný particle-tracking. Proudové pole pro každou individuální puklinu je vypočteno na základě diskretizace ploch pukliny pomocí trojúhelníkových konečných prvků. Proudnice jsou počítány v každé puklině po jednotlivých krocích přes celou síť puklin. Při dosažení prasečky je trajektorie částice ukončena. Druhý algoritmus poskytuje metodu tzv. přibližného particle trackingu. Program NAPSAC je schopen vytvářet databázi, do které zaznamenává prasečky mezi vzájemnými uzly pro řešení proudění. Tato síť propojeného toku spojuje stědkou prasečky dané pukliny s každým jiným stědkem prasečky pukliny. Transportní vlastnosti jsou založeny na této proudové databázi a částice jsou pomocí ní transportovány mezi prasečkami. Tato metoda je robustnější, protože nevyžaduje tak přesné vyřešení proudění díky dobré rovnováze toku v prasečích sítích, navíc je výpočet efektivnější. Jedinou nevýhodou je, že tato metoda nedokáže dostatečně přesně modelovat disperzi v jednotlivé puklině. Protože je ale v dostatečně husté puklinové síti významná část disperze důsledkem konektivity

samotné síti, je nepříslušnost vznikající použitím této metody málo významná a tato metoda je vhodná pro řízení transportu pro velké síti.

DarcyTools (DT) je výpočetní kód určený pro simulaci proudění a transportu v porézním i puklinovém prostředí. DT umožňuje generovat diskrétní síť puklin, výpočet proudění, respektive transportu ale probíhá ve výpočetním gridu (koncept ekvivalentního kontinua). Vlastnosti puklinové sítě (konduktivních elementů) jsou v algoritmu GEHYCO transformovány do příslušných výpočetních buněk. Klíčovou simulací objektů (vrty, tunel) je možné využít lokální zjemnění sítě a diskretizaci do nerovnoměrného gridu (je používán nestrukturovaný QuadTree grid).

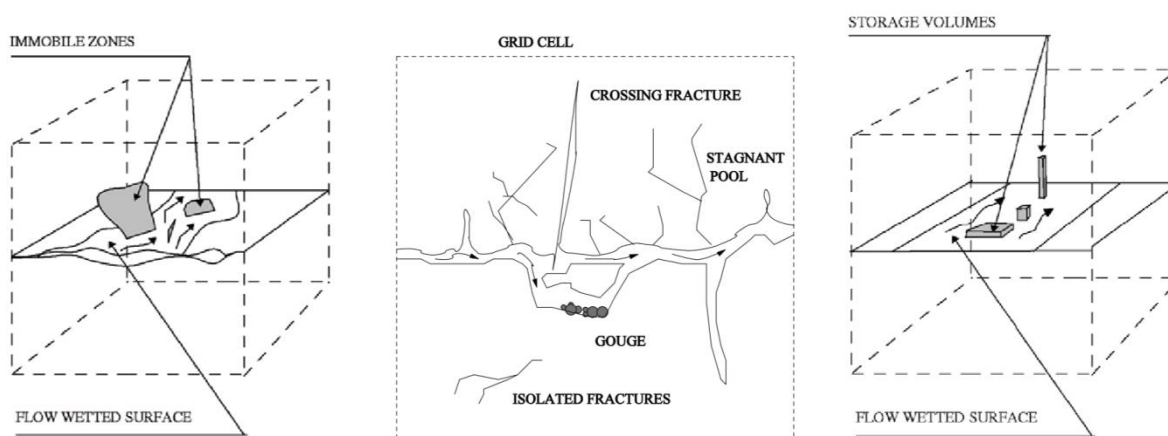
DarcyTools umožňuje simulovat transport dvěma způsoby:

- metodou particle trackingu (algoritmus PARTRACK),
- pomocí advektivních disperzních rovnic ("úplný" transport).

Pro vodu, jsou potřeby dvě metody, jsou založeny na několika předpokladech:

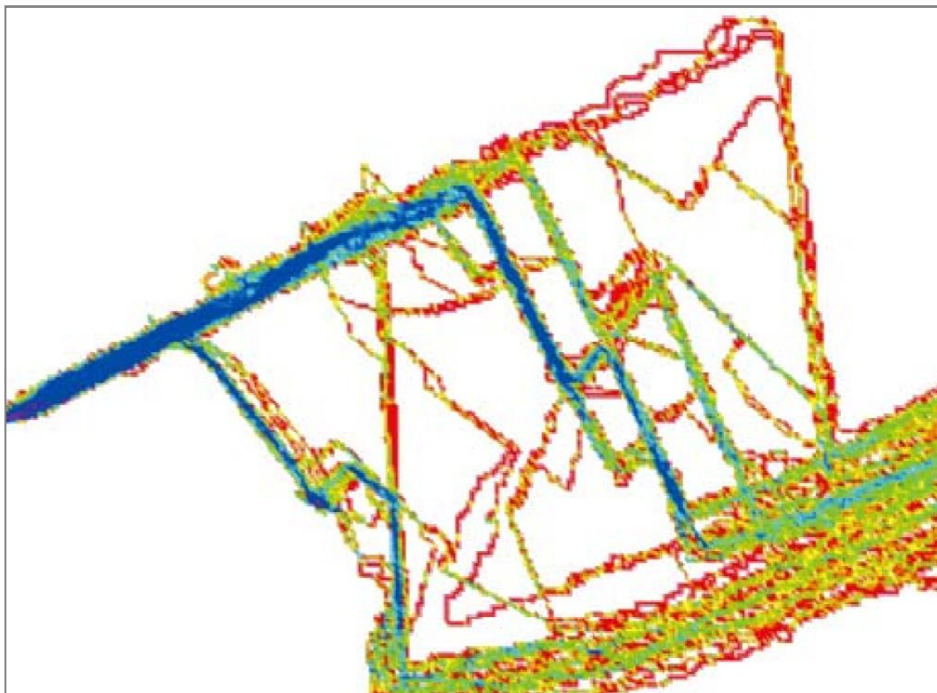
- pole proudění je silně ovlivněno salinitou (vliv proměnného hustotního pole), kterou je třeba popsat sadou částic a lepší volbou je v tomto případě popis transportu advektivními disperzními rovnicí,
- obdobně je tomu u ovlivnění proudění teplotou (kondukcí), kde je opět vhodné použít advektivní disperzní rovnice,
- naopak pro transport stopovačů (radionuklidů) je vhodné použít metodu particle trackingu, která není ovlivněna numerickou disperzí.

K disperzi stopovačů dochází především díky propojení puklin (makrodisperze) a výměn s imobilní zónou (mikrodisperze). Při analýze transportu látek je nutné uvažovat také další procesy v měřítku difúze do horninové matrice, sorpci atd. DarcyTools proto obsahuje subgridový model FRAME (FRactal scaling laws and Multirate Equations), který umožňuje řešit transportní procesy na úrovni menší než je výpočetní buňka modelu (Obr. 8). Imobilní zóny jsou v modelu FRAME reprezentovány sadou boxů, každý se svou vlastní velikostí, objemem a difúzním koeficientem.



Obr. 8 Schéma procesů na úrovni výpočetní buňky a jejich konceptualizace subgridovým modelem FRAME (Svensson et al., 2010)

Model FRAME je použitelný jak s advektivními disperzními rovnicí, tak s particle tracking metodou PARTRACK (Obr. 9), která umožňuje simulovat zároveň Taylorovu disperzi, sorpci a difúzi do horninové matrice v rozsáhlých 3D sítích ( $> 10^6$  buněk).



Obr. 9 PARTRACK . testovací model lokality Äspö HRL. Proudové kanály 100 částic v rychlostním poli vyvozeném gradientem ve směru zleva doprava. Model vysoký počet trajektorií, červená nízký (Svensson et al. 2010)

### Metoda výpočtu transportních cest

V průběhu hodnocení lokalit Forsmark a Laxemar-Simpevarp byla pro stanovení proudnic podzemní vody z prostoru plánovaného úložiště využita metoda particle-tracking. Výpočet transportu pomocí metody particle-tracking během fáze průzkumu a popisu lokality (SDM-Site) sloužil zejména k testování různých hydrogeologických nejistot a ke stanovení nutnosti dalšího výzkumu vzdáleného pole (jak parametry na okrajích modelového území ovlivní trajektorie?). Simulace a vizualizace trajektorií pohybu částic z předpokládané oblasti úložiště byly důležité k analýze modelovaných hydrogeologických podmínek v oblasti cílové lokality a stanovení do jaké míry je proudění z cílové lokality ovlivněno zadáním parametrů regionálního modelu (okrajových podmínek, modelovým územím, parametrizací). Jedním ze základních úkolů simulace proudnic podzemní vody ve fázi SDM-Site bylo stanovení drenážních a infiltračních oblastí spojených s proudem podzemní vody v hloubce plánovaného úložiště a ověření dostatečné velikosti modelového území (Follin et al. 2005).

Pro porovnání lokalit a jednotlivých modelových variant byly vybrány a porovnány ty hlavní funkce popisující chování částic během transportu z úložiště, detailně popsané například v Hartley et al. (2005):

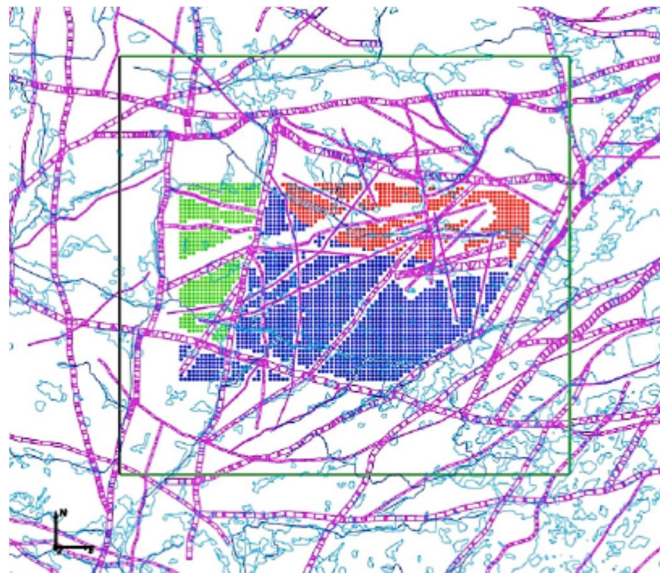
- doba transportu [rok],  $t_r$  . travel time,
- specifický průtok [m/rok],
- $U_r$  . canister flux,
- délka cesty [m],  $L_r$  . path length a
- transportní rezistence, F-faktor [rok/m],  $F_r$ .

Transport rozpustných látek se v puklinových horninách primárně odehrává podél advektivních proudových drah (advective flow paths) v puklinových a deformačních zónách. Difúze do matrice společně s sorpcí byla identifikována jako hlavní retardační proces, který



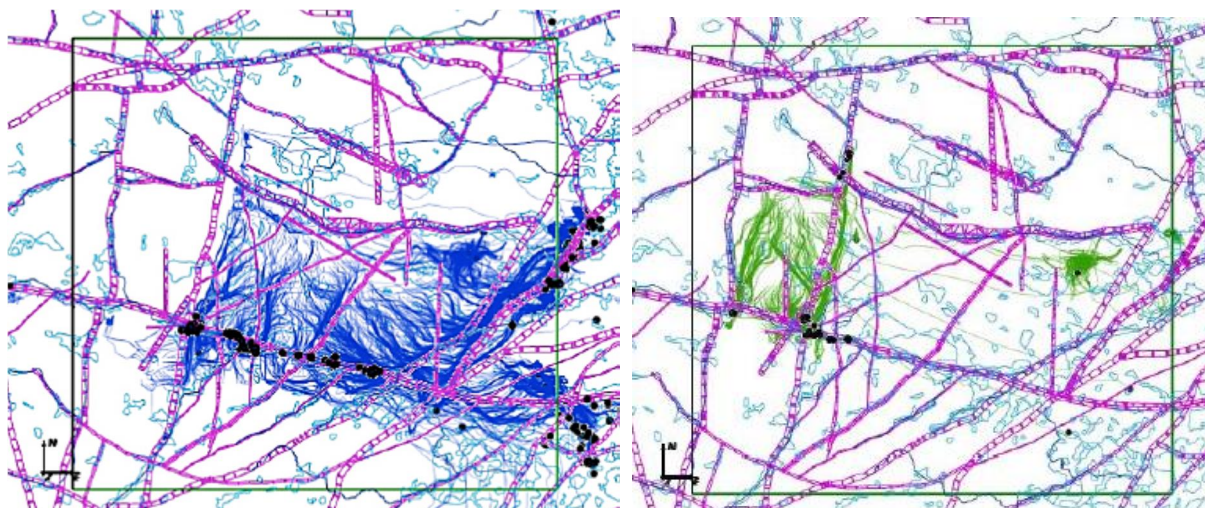
limituje množství rozpustné látky (případně radionuklidu) transportované proudem podzemní vody. Obecně, čím větší povrch pukliny je pro určitý průtok v kontaktu s proudící vodou (FWS - flow-wetted surface), tím větší interakce mezi povrchem pukliny a následně matricí nastane. Poměr FWS ( $m^2$ ) a průtoku ( $m^3 \cdot s^{-1}$ ) je označován jako F-faktor ( $rok \cdot m^{-1}$ ) nebo hydrodynamická transportní resistance. Jedná se o klíčový parametr řídící transport radionuklidů vnitřním puklinovým systémem (Crawford 2008).

Při hodnocení lokality Laxemar byly proudnice simulovány pro částice uvolněvané z HRD\_C, HRD\_EW007 a HRD\_W (Obr. 10) z hloubky -500 m (předpokládané umístění úložiště). Částice byly zadány v gridu 40x40 m s výjimkou oblastí vodivých zón (HCD). Celkem byly simulovány transportní cesty pro 2412 částic.



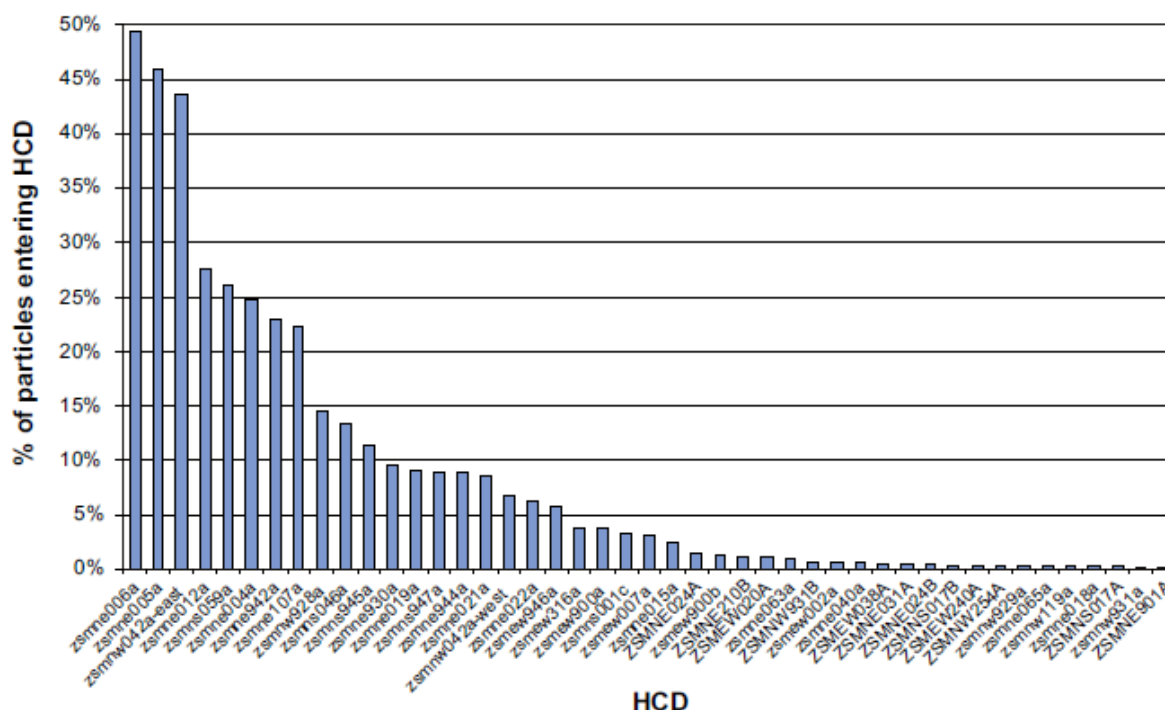
Obr. 10 Startovní pozice jednotlivých částic v oblasti předpokládaného úložiště 500 pod povrchem. Částice jsou barevně odlišeny podle hydraulických horninových domén, HRD\_C - modrá, HRD\_W - zelená, HRD\_EW007 - červená (Rhén a Hartley 2009)

Na Obr. 11 jsou liniemi dokumentovány trajektorie uvolněných částic z HRD\_C a HRD\_W. Místa výstupu na povrch (drenáž) jsou zvýrazněny červenými body. Trajektorie částic byly vypočítány pro částice uvolněvané z jednotlivých HRD. Částice uvolněné z HRD ve vztahu k případně smýšlené a východně k výrazným vodivým zónám (HCD), v obrázku dokumentovaných fialovými liniemi.



Obr. 11 Trajektorie pro částice startující z domény HRD\_C (modře vlevo) a HRD\_W (zeleně vpravo). Černé jsou dokumentovány výstupní (drenážní) oblasti jednotlivých částic (Rhén a Hartley 2009)

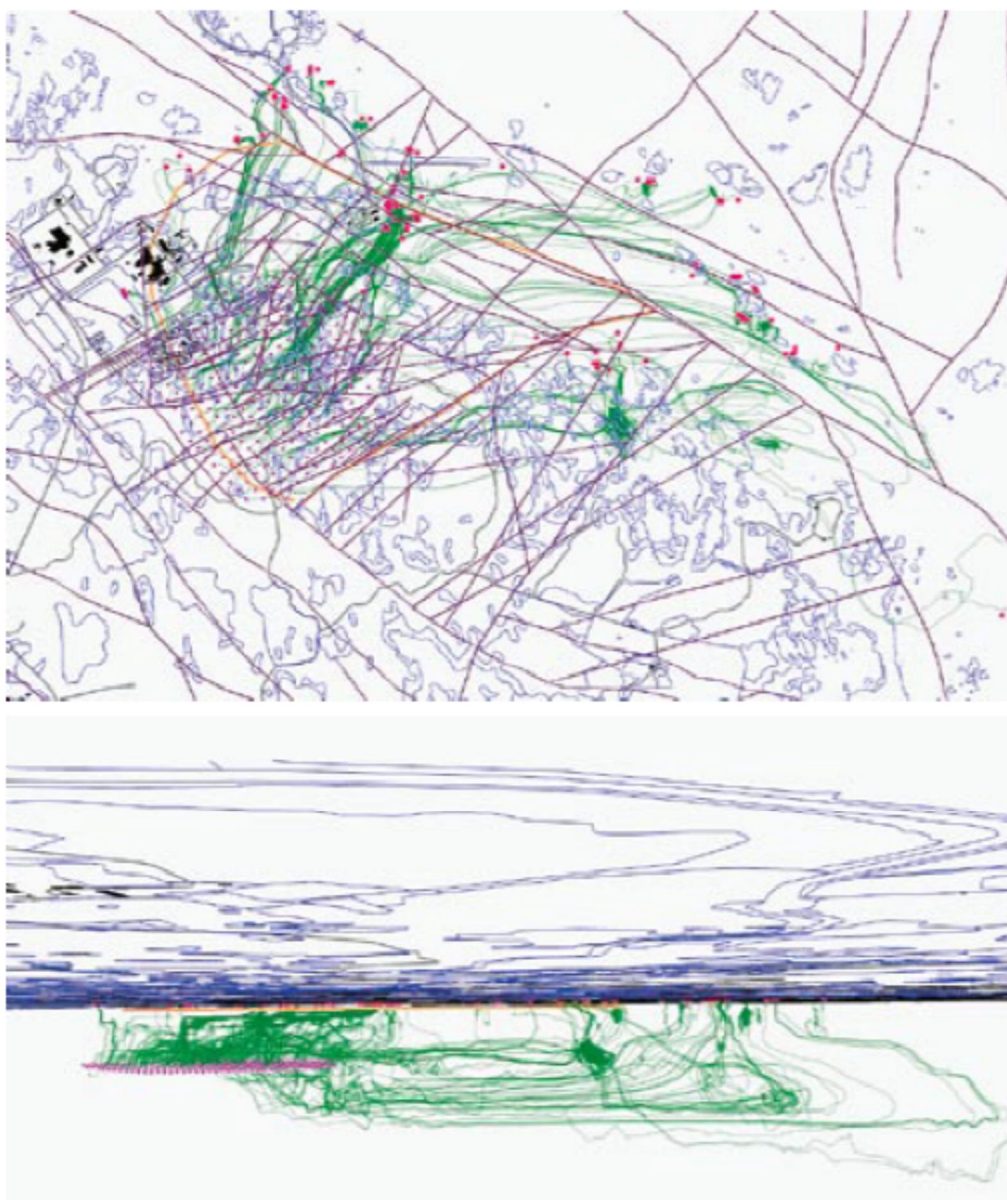
V SDM jsou popsány všechny vodivé HCD domény vlastním kódem. Ke stanovení, které HCD jsou pro transport nejdležitější, byly zaznamenány počty částic vstupující do jednotlivých HCD a následně seřazeny podle velikosti (Obr. 12).



Obr. 12 Histogram dokumentující procento částic, které vstupují do jednotlivých HCD (Rhén a Hartley 2009)

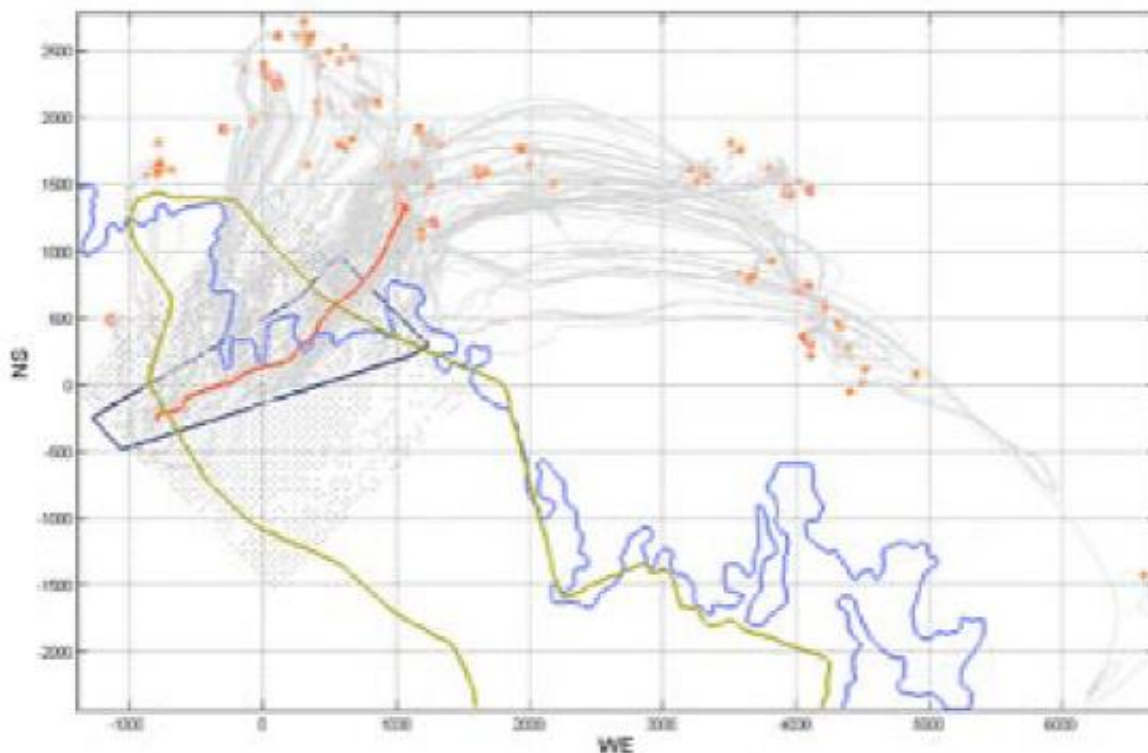
Stanovení drenážních a infiltračních oblastí pomocí finálního modelu proudění a transportu, který byl součástí výsledného SDM-Site modelu lokality Forsmark, dokumentuje Follin et al. (2008). V Obr. 13 jsou zobrazeny simulované dráhy pohybu částic z oblasti předpokládaného úložiště (500 m p.t.). Lze identifikovat dva hlavní skupiny tras pohybu a drenáže částic. První kratší, severním směrem, s drenáží na pobřeží Baltského moře a druhý delší, s tendencí horizontálního nebo sestupného proudění po uvolnění z prostoru předpokládaného úložiště. Kratší set tras je spojen s částicemi uvolněnými ze západní oblasti úložiště, delší s částicemi uvolněnými spíše z jeho východní části.



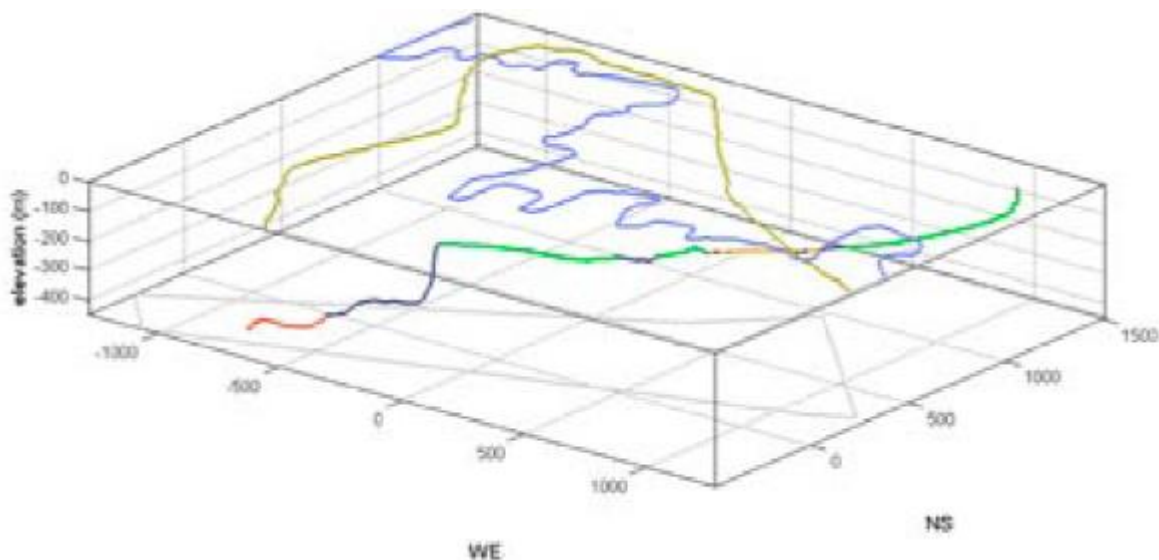


Obr. 13 Plozný pohled (nahore) na cílové území s predikovanými trajektoriemi 300 částic (zelené linie) uvolněných z gridu 100x100 m a umístěných 500 m p.t. červeně jsou zvýrazněna místa drenáží. Vertikální pohled (dole) na stejný případ (Follin et al. 2008)

V Obr. 14 jsou dokumentovány dráhy 447 částic v gridu 40x40 m uvolněných z hloubky 450 m p.t. v centrální části plánovaného úložiště. Částice označená #228 je červeně zvýrazněna a její trajektorie pohybu dokumentována v perspektivním pohledu v Obr. 15. Různé barvy trajektorie částice #228 reprezentují strukturní elementy, kterými se částice pohybuje během dráhy z úložiště do drenážní oblasti (puklinové domény, deformace zóny, kvartérní sedimenty atd.).



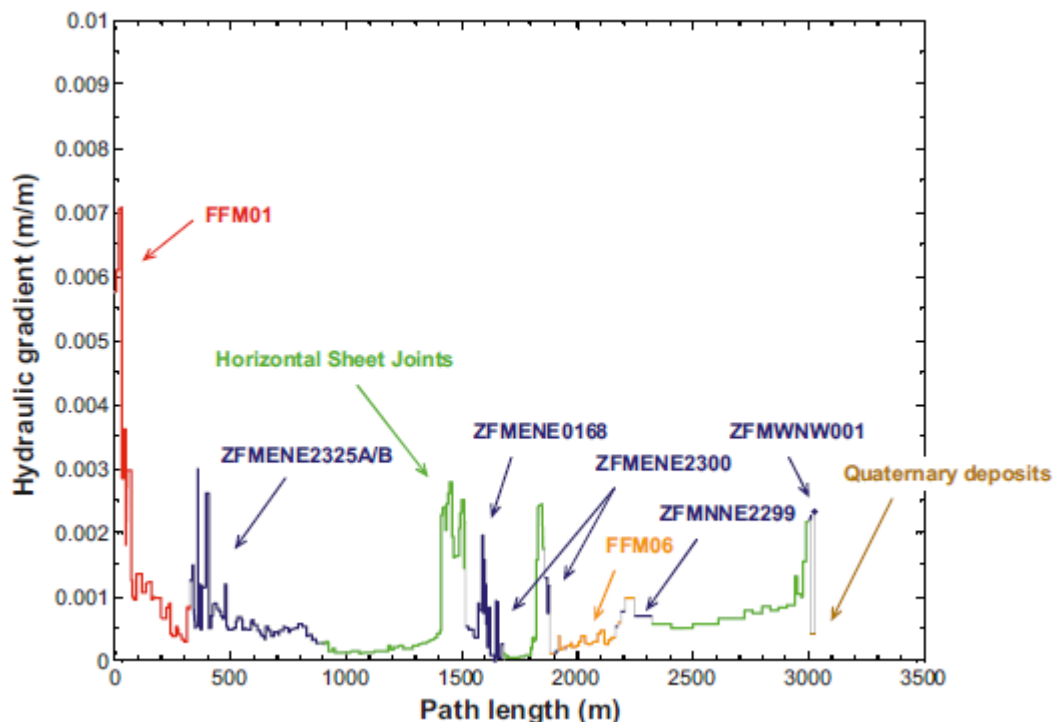
Obr. 14 Vizualizace 447 částic uvolněných z hloubky 450 m uvnitř oblasti lokalizované v centrální části cílové lokality Forsmark. Zelená okraj cílové lokality, modrá pobřežní linie, červené body - drenážní výstupní oblasti, červená linie - částice #228 (Follin et al. 2008)



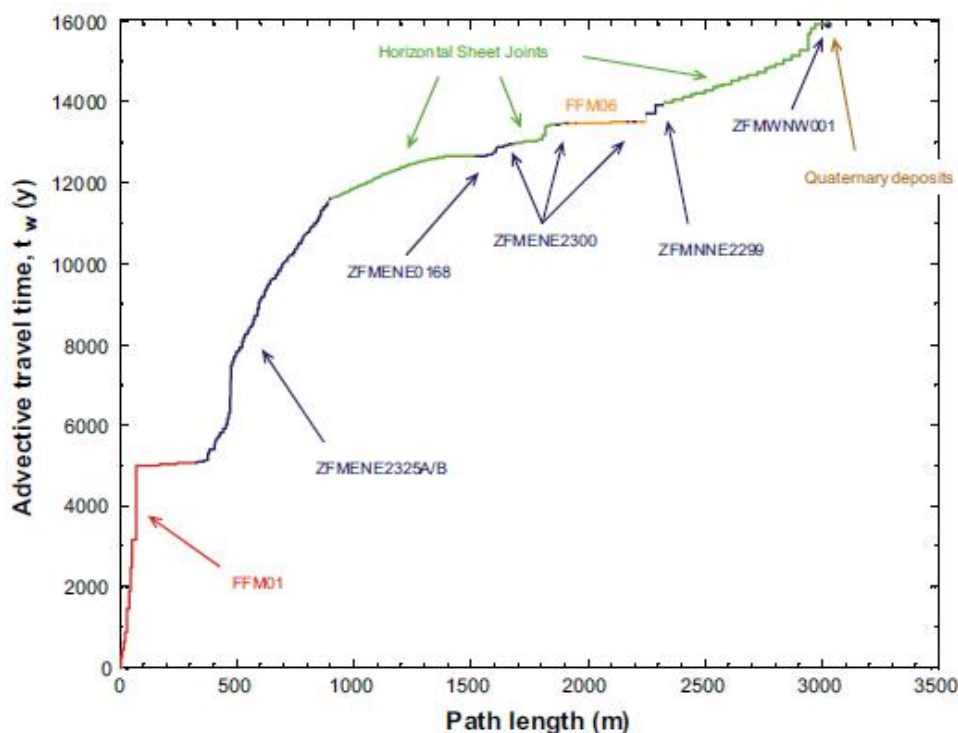
Obr. 15 Detail trajektorie pohybu částice #228, barevné jsou odlizeny strukturální elementy. (Follin et al. 2008)

Obr. 16 dokumentuje hydraulický gradient v modelu proudění podél trajektorie pohybu částice #228. Gradient je obarven v návaznosti na barvy linií dokumentované v Obr. 15. Červená a žlutá je zobrazena pro tok puklinovými zónami, modrá deformacími zónami, zelená plošnými rozsáhlými puklinovými poli a hnědá kvartérními sedimenty. Nejvyšší hodnoty hydraulického gradientu jsou v blízkosti málo propustných puklinových domén (červená a žlutá), kde je nízká hydraulická vodivost (řádově  $10^{-11}$  m.s<sup>-1</sup>). Nejmenší gradient je v blízkosti plošných puklinových systémů, kde je simulována vysoká hydraulická vodivost

( $10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ). Obr. 17 dokumentuje obdobným způsobem kumulativní transportní čas částice #228.



Obr. 16 Graf hydraulického gradientu podél trajektorie dráhy #228 v ECPM modelu proud ní. (Crawford 2008)



Obr. 17 Kumulativní advektivní transportní čas (rok) jako funkce délky transportní dráhy pro částici #228 (Crawford 2008)

Statistika všech částic uvolněných z prostoru úložiště je dokumentována v následující tabulce (Tab. 1), kde jsou uvedeny výsledky pro F-faktor (F), advektivní transportní čas ( $t_w$ ) a transportní vzdálenost ( $L_p$ ).

Tab. 1 Sumární statistika transportních charakteristik vypouštěných pomocí ConnectFlow pro částice uvolněné z polohy cílové lokality ve 450 m p. t. (Crawford 2008)

Parameter	$\log_{10}F$ (y/m)	$\log_{10}t_w$ (y)	$\log_{10}L_p$ (m)
Mean	7.93	4.90	3.51
Median	7.96	4.89	3.48
5th percentile	7.14	4.31	3.17
10th percentile	7.35	4.46	3.26
25th percentile	7.66	4.64	3.36
75th percentile	8.22	5.14	3.63
90th percentile	8.46	5.41	3.84
95th percentile	8.62	5.54	3.94
Std. deviation	0.44	0.39	0.23
Variance	0.19	0.15	0.05
Min value	6.43	3.20	3.06
Max value	9.32	6.66	4.92
Skew	-0.39	0.24	1.02
Kurtosis	3.23	4.09	5.12
# Released particles	3,014	3,014	3,014

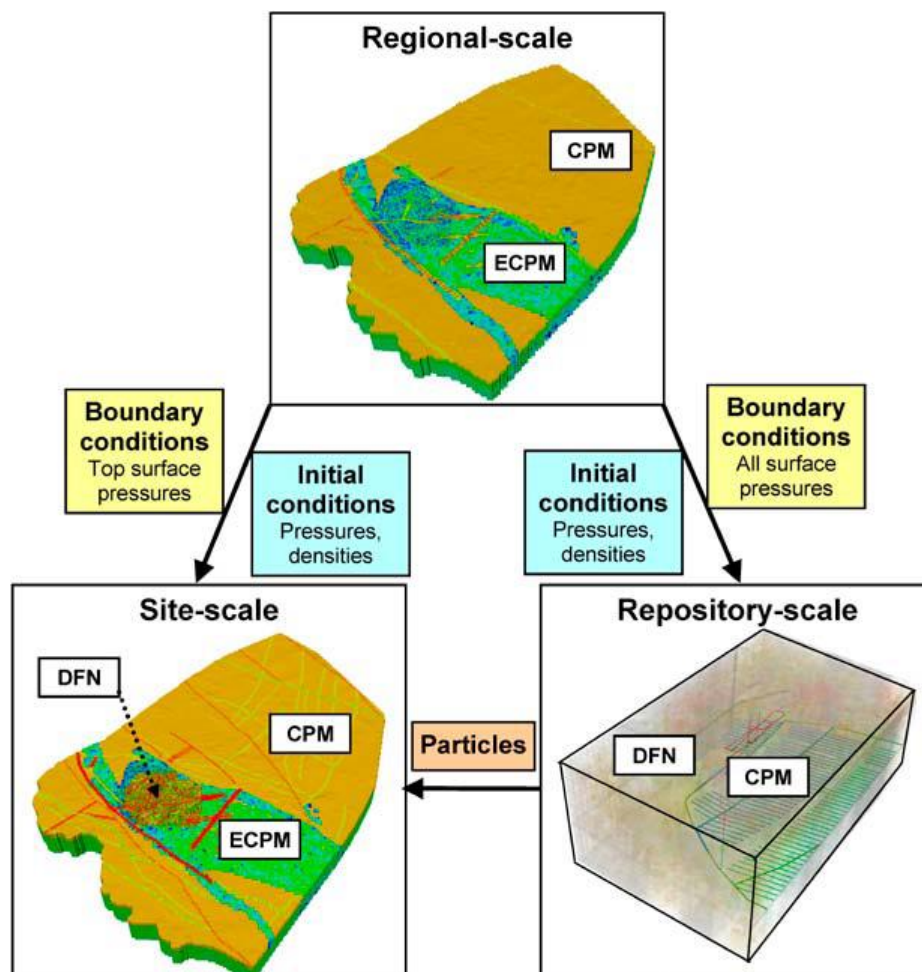
Hlavním úkolem modelování v rámci SR-Site projektu (posouzení bezpečnosti lokality Forsmark), který navazoval na SDM-Site projekt (části se překrývaly), byl výpočet trajektorií částic z jednotlivých deponičních otvorů (celkem 6916 otvorů) projektovaného hlubinného úložiska na povrch. Zvoleným přístupem bylo sledování částic pohybujících se advektivním tokem z bodu uvolnění (okolo deponičních otvorů) k zemskému povrchu. V rámci SR-Site projektu byly využity složitější numerické modely proudění vycházející z kompletního průzkumu lokality (Joyce et al. 2010).

V SR-Site projektu byla použita řada modelových sítí s odpovídajícím modelovým přístupem:

- regionální . ECPM a CPM model,
- lokální . DFN model,
- model úložiska . DFN a CPM model.

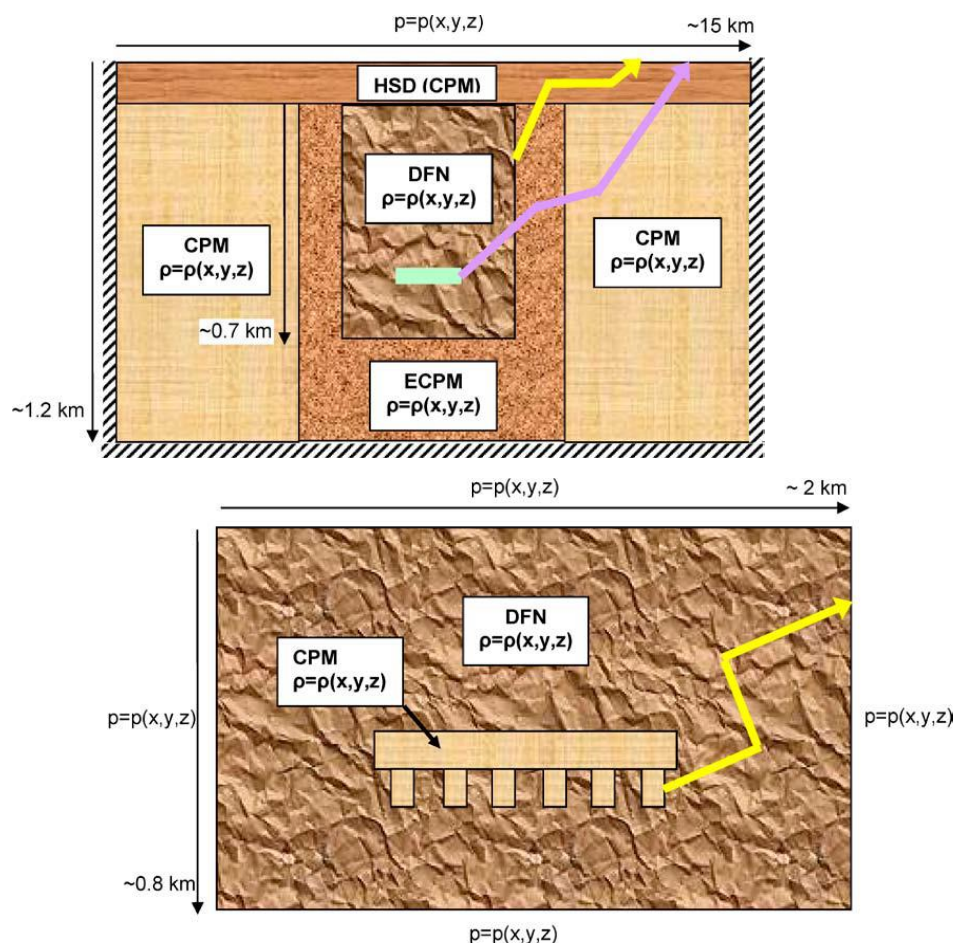
Mezi jednotlivými modely pak dochází k přenosu informace o modelových proměnných a transportu částic. Obr. 18 dokumentuje relaci mezi jednotlivými modely, použitou koncepcí horninového prostředí a výměnu dat mezi jednotlivými modely.





Obr. 18 Ilustrace modelových konceptů využitých v různých měřítkách, systém vložených modelů a transfer dat mezi měřítky (Joyce et al. 2010)

Model v měřítku vlastního úložiště nahrazuje část regionálního ECPM modelu explicitně vloženým DFN modelem reprezentující HRD, ve které bude úložiště umístěno. V horizontální rovině byla velikost DFN modelu zvolena tak, aby bylo možné zahrnout všechny prvky úložiště. Vertikálně je DFN shora omezen bází HSD a zdola rovinou několik stovek metrů pod bází úložiště. Puklinová síť je shodná s tou, která byla využita pro upscaling hydraulických charakteristik využitých v regionálním ECPM modelu. Přidány byly pukliny menšího měřítko do blízkosti vlastního úložiště (pro detailní particle-tracking). Okrajové podmínky jsou importovány mezi jednotlivými modely. Schéma regionálního a lokálního měřítko je uvedeno v Obr. 19.



Obr. 19 Ilustrace modelových konceptů v regionálním měřítku (nahore) a v měřítku úložiště (dole) (Joyce et al. 2010)

### **Použitý výpočetní program pro simulaci transportu radionuklidů**

Výsledky model proudění jsou využity jako vstupy do modelů transportu radionuklidů. Klíčové výstupy model proudění jsou:

- stanovení velikosti průtoku podzemní vody prostorem plánovaného úložiště,
- definice dráhy podzemní vody z prostoru úložiště k biosféře,
- parametry charakterizující transport radionuklidů podél jejich proudnic.

Základem simulace migrace radionuklidů je kolekce kódů využitých pro výpočet konsekvence migrace radionuklidů v blízkém poli, vzdáleném poli a biosféře, s využitím standardizovaných metod pro transfer dat a výsledků mezi navazujícími submodely. Transport radionuklidů z kontejnerů s vyhořelým palivem k biosféře je simulován s využitím kódu pro výpočet transportu radionuklidů ve vzdáleném poli FARF31 (Lindgren et al. 2002) nebo MARFA 3.2.2 (Painter a Mancillas 2009) a kódu simulujícího migraci v blízkém poli COMP23 (Vahlund a Hermansson 2006).

FARF31 je kód využitelný pro výpočet migrace radionuklidů ve vzdáleném poli interakcí (v geosféře). Je založen na matematickém modelu řízeném jednorozměrnou advekcí - disperzní rovnicí s možností výpočtu difuze v kolmém směru k proudnici.

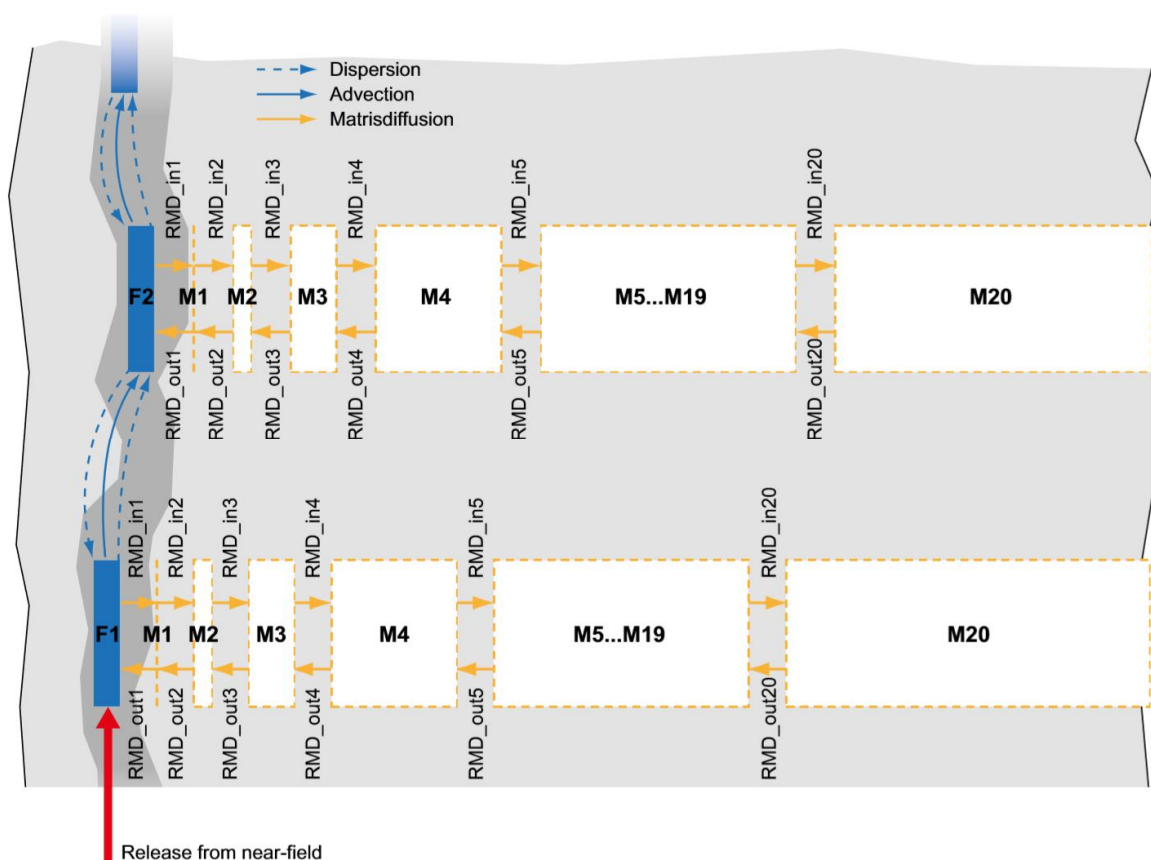
Výpočetní kód MARFA využívá k simulaci transportu radionuklidů v puklinových i nepuklinových formacích metodu Monte Carlo. Proudnicí stanovené metodou particle tracking reprezentují transportní dráhy, ve kterých MARFA řeší transport radionuklidů.



K pohybu radionuklidů dochází s uvažováním difúze do matrice, sorpce, podélné disperze, rozpadu a vzniku druhotných radionuklidů.

FAFR31 i MARFA používají uvolněné množství radionuklidů za časovou jednotku. Tyto uvolněné dávky jsou konvertovány na efektivní dávku vynásobením konverzním faktorem (LDF - Dose Conversion Factor), zprůměrovány a získány průměrné roční dávky. Podrobnou metodiku dokumentuje Avila et al. (2010).

V rámci projektu SR-PSU (SKB 2014) byl pro výpočet transportu radionuklidů použit kompartmentový model Ecolego. Model Ecolego (koncept viz Obr. 20) je podobný kódu FAFR31, umožňuje deterministické i stochastické simulace a provedení citlivostních analýz. Důvodem, proč byl pro řešení projektu SR-PSU vybrán program Ecolego, bylo zahrnutí nestacionárního proudění do výpočtu transportu, což program FAFR31 neumí.



Obr. 20 Konceptní model geosféry v projektu SR-PSU. V modelu je celkem 420 kompartmentů. Modré boxy reprezentují celkem 21 vodivých puklin s pohybem řízeným advekcí. Bílé kompartmenty reprezentují horninovou matici a difúzní procesy (SKB 2014)

COMP23 je kód využitelný pro výpočty migrace radionuklidů v blízkém poli (v kontejnerech a inženýrských systémech v jejich okolí). COMP23 umožňuje modelovat procesy uvolnění radionuklidů, transport uvnitř UOS, v jejich bentonitovém obalu a vyplněných tunelech. Do simulace je možné zahrnout radioaktivní rozpad, korozi kovu, rozpouštění paliva, difúzi, sorpci, advekci a další procesy. Podrobně je aplikace COMP23 dokumentována v příloze G dokumentu SKB (2010).

### ***Napojení na HG a strukturní geologické modely, případně na modely hodnocení bezpečnosti***

Migrace radionuklidů pod povrchem je primárně determinována prouděním podzemní vody (SKB 2010). Modely proudění jsou součástí SDM-site modelu lokality, jehož podstatnou část tvoří strukturní geologické modely. Geometrie model proudění je zadána podle strukturní geologických modelů. Výsledky model proudění a particle trackingu z programů ConnectFlow a DarcyTools jsou využity jako vstupy pro stanovení transportu radionuklidů s využitím kódu pro výpočet transportu ve vzdáleném poli FARF31 (Lindgren et al. 2002) nebo MARFA 3.2.2 (Painter a Mancillas 2009) a v blízkém poli COMP23 (Vahlund a Hermansson 2006).

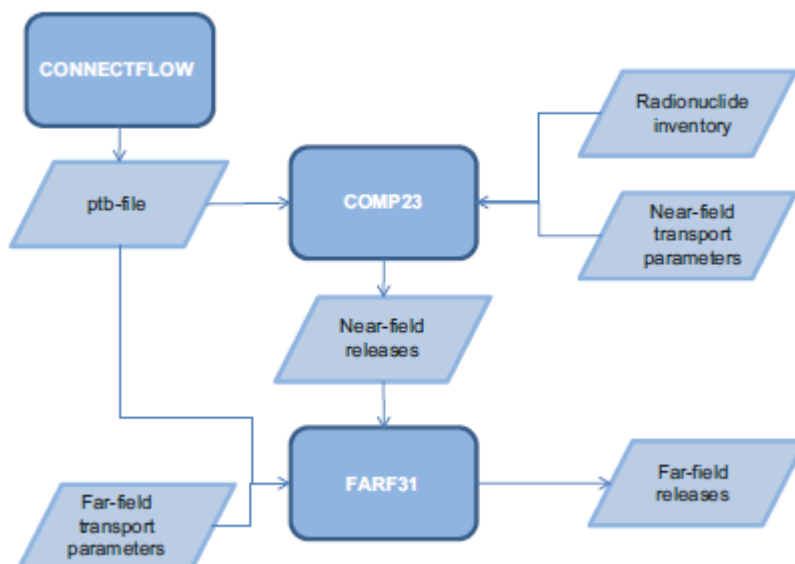
Klíčové výstupy model proudění jsou:

- stanovení velikosti průtoku podzemní vody prostorem plánovaného úložiště,
- definice dráhy podzemní vody z prostoru úložiště k biosféře,
- parametry charakterizující transport radionuklidů podél proudnic.

Postup výměny dat a návaznost jednotlivých programů je dokumentována v Obr. 21. Hlavními vstupy do výpočtu transportu radionuklidů (výstupy proudových cest z model proudění) jsou:

- ekvivalentní průtok kontejnerem  $Q_{eq}$ ,
- advekční transportní čas  $t_w$  a
- parametr transportní resistance  $F$ .

Podrobná definice parametrů, popis propojení modelů a výměny dat v simulacích transportu radionuklidů, dokumentace výstupních, respektive vstupních souborů jsou k dispozici v publikovaných dokumentech Joyce et al. (2010), SKB (2010).



Obr. 21 Propojení modelů a výměny dat v simulacích transportu radionuklidů (SKB 2010)

### 3.1.2 Finsko

#### Lokalita Olkiluoto

Ve Finsku byly pro situování HÚ uvažovány 4 lokality: Romuvaara v Kuhmo, Kivetty v Äänekoski, Olkiluoto v Eurajoki a Hästholmen v Loviisa (Obr. 22). Z nich byla lokalita *Olkiluoto* vybrána v roce 2000 jako finální. K této lokalitě se pak vztahuje vztah model pro hodnocení transportu.

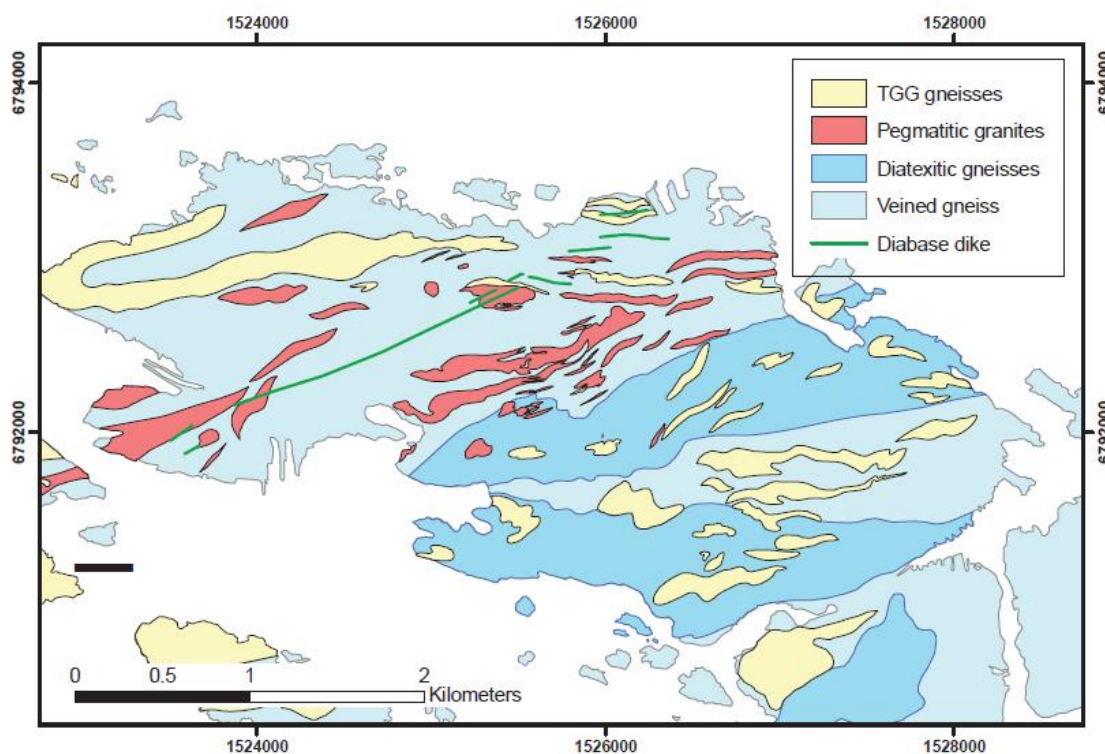


Obr. 22 Pr zkumná území pro hlubinné úložení ve Finsku. Lokality vybrané pro detailní pr zkumy jsou vyznaeny tu n . (Poteri a Laitinen, 1999)

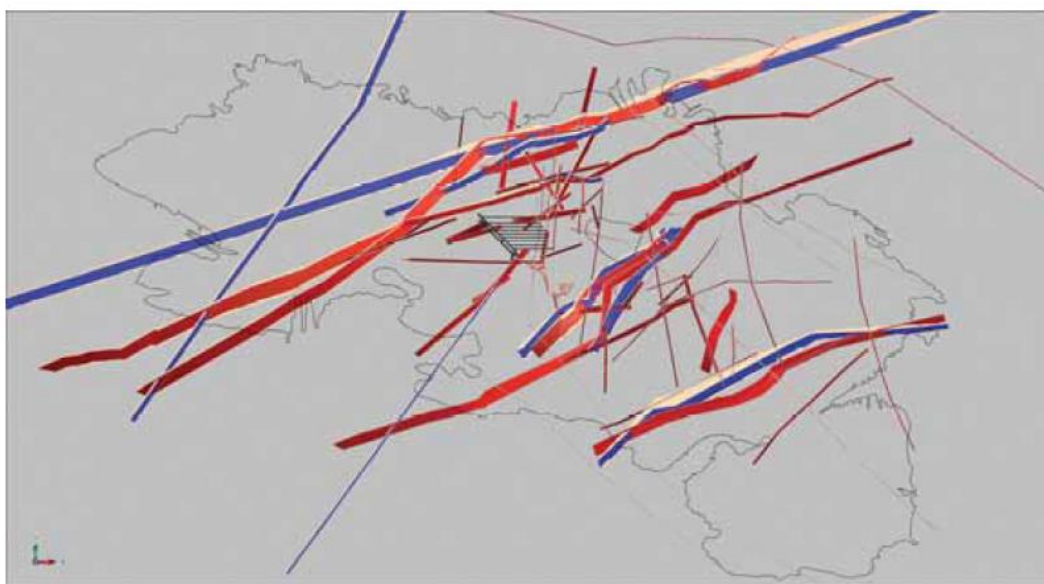
Základní geologickou a hydrogeologickou charakteristiku oblasti Olkiluoto popisuje Anttila et al. (1999). Aktualizovaný geologický a hydrogeologický model poskytuje Posiva (2012).

Podloží oblasti Olkiluoto je tvořeno migmatitovou slídovou rulou, která je pronikána hlubinnými horninami, tonality, granodiority, granity a pegmatity. Hydraulická vodivost neporušené horniny je  $8 \cdot 10^{-13}$  m/s, transmisivita okolní rozpukané horniny je řádově  $1 \cdot 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s. V masivu byl zjištěn zřejmý pokles hydraulické vodivosti s hloubkou. Přítomnost vodivých puklin byla zjištěna především ve svrchní vrstvě horniny (100-200 m). Vztah zaznamenaných puklin ze vzorků jádra vrt je vyplněná nebo sevřená. Typické minerály vyplující pukliny jsou: kalcit, pyrit, pyrotin, kaolinit, illit, vermikulit a montmorillonit. Otevřené pukliny jsou vzácné a jsou koncentrovány ve svrchní části podloží (100-200 m hluboko) s výjimkou pegmatit, které obsahují otevřené pukliny i ve větších hloubkách.

Pevládají pukliny horizontální nebo mírně upadající (0-40°) k JJV (160-165°). Strmě upadající rozpukání je málo četné.



Obr. 23 Odkrytá geologická mapa oblasti Olkiluoto (Heikkinen et al., 2011)



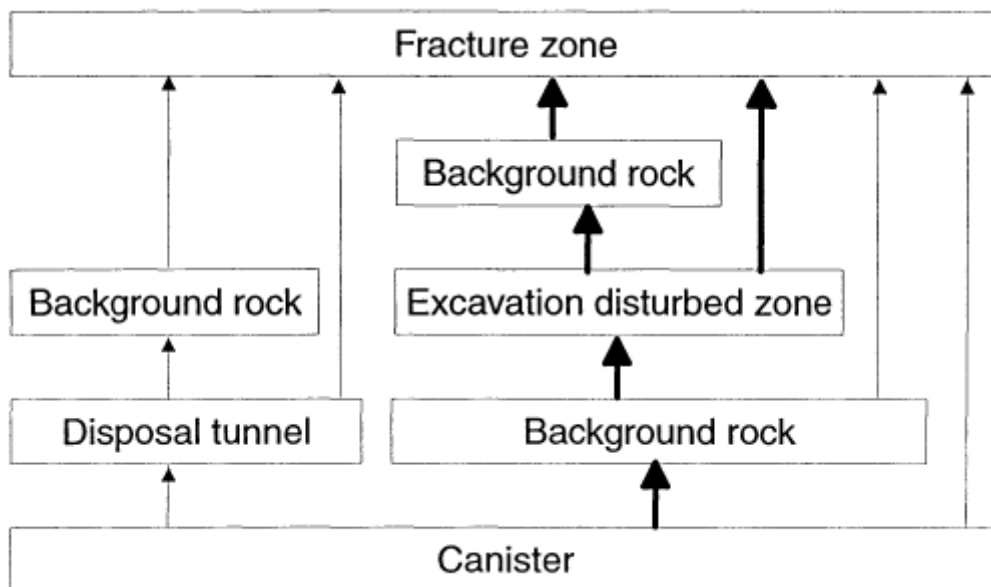
Obr. 24 Zobrazení modelovaných hydrologických (moder) a tektonických (deformačních) zón (Heikkinen et al., 2011)

## Metody modelování a hodnocení transportu

Základní modely proudění a transportu v oblastech Hästholmen, Kivetty, Olkiluoto a Romuvaara v měřítku lokality i úložiště uvádí Poteri a Laitinen (1999). Okrajové podmínky

byly přeneseny z modelu ve větším měřítku do modelu o menším měřítku (není však popsán konkrétní způsob přenesení, pouze je uvedena poznámka, že díky rozdílným konceptům obou modelů mohou být okrajové podmínky nepřesné). Simulace proudění podzemní vody je založena na použití porézního média (CPM) v kombinaci s diskretní puklinovou sítí (DFN).

Transportní vlastnosti byly odhadovány pro potenciální únikové cesty z úložiště. To zahrnuje posouzení očekávaných transportních vlastností jak pro jednotlivé části cest proudění vody, tak pro celou transportní cestu z úložiště. Uvažovány jsou tyto potenciální bariéry: tunel vyplněný tlumícím a výplňovým materiálem, okolní hornina, EDZ a puklinové zóny. Studované potenciální cesty z úložiště do puklinových zón jsou uvedeny na Obr. 25. Simulované transportní cesty z úložiště byly konstruovány spojením jednotlivých segmentů těchto cest (založeno na simulacích proudění podzemní vody a metodou particle tracking, kde byly sledovány částice z různých počátečních bodů, dokud nedosáhly povrchu nebo jinak neopustily doménu modelu). Pro parametrizaci transportních cest je použit koncept transportního odporu (transport resistance,  $WL/Q$ ). Transportní odpor je parametr, který charakterizuje rychlost proudění podél transportní cesty. Tok tak závisí na jednom parametru, který zahrnuje advekční-difúzní a retardační vlastnosti horninové matrice. Transportní odpor je pak následně použit v transportním modelu geosféry ke stanovení retardace radionuklidů v geosféře.



Obr. 25 Potenciální únikové cesty z úložiště do puklinových zón. Uvažované cesty jsou vyznačeny tučnými šipkami (Poteri a Laitinen, 1999)

Modely popisované v Poteri a Laitinen (1999) jsou zaměřené na proudění podzemní vody a na parametry transportu v blízkosti úložného souboru a podél potenciálních transportních cest z úložiště do biosféry. Jsou zde popsány výsledky odhadů podzemního proudění v regionálním a lokálním měřítku a detailní analýza proudění v puklinové síti v blízkosti úložného souboru. Tato syntéza zahrnuje rovněž odhad parametru transportního odporu z kontejneru do biosféry a rychlosti proudění v okolí uložení kontejneru. Zdržení bylo pořízeno pro transportní cesty s nejhorším vlivem na bezpečnost úložiště.



Modely transportu jsou založeny na předpokladu proudění podzemní vody v puklinách a transportu látky difúzí do horninové matrice (hydrodynamická disperze ani různé transportní cesty paralelními cestami nejsou brány v úvahu). Při modelování transportu bylo postupováno podle následujících bodů :

- výběr nkolika cest přes DFN model (vybrán byl nejmenší počet jednotlivých propojených puklin s nejvyšší propustností). S využitím analýzy z teorie grafů,
- výpočet proudění ve vybraných cestách,
- určení distribuce toků podél jednotlivých cest (vzorkováno rovinami kolmými na směr toku),
- rozdělení toků na prasebních jednotlivých cestách a vzorkovacích rovinách,
- vyhodnocení transportního odporu  $\text{transport resistance} = \frac{WL}{Q}$ ,
- určení celkového toku únikovou cestou.

Z hlediska proudění je výsledkem prací distribuce toků v horninách, v EDZ a v puklinových zónách. V oblasti transportu je jedním ze základních výsledků vyhodnocený transportní odpor.

K simulaci a přípravě modelů (Potter a Laitinen, 1999) bylo použito několik programů. Program FLOWPW byl použit pro generování puklinové sítě, MeshMonster pro generování sítí a program MAFIC pro řešení hydraulického pole v puklinových sítích. Dále byly použity programy FRATE (součást FEFTRA, vyvinutý pro tuto studii) pro výpočet velikosti toků, FLOWRATE a HETFRA (program pro generování puklinových polí s heterogenní vodivostí).

*Sdružený model neustáleného proudění podzemní vody s výpočtem transportu rozpustných látek na lokalitě Olkiluoto* popisuje Löfman (1999), v doplněné formě potom Löfman (2000). Model je řešen jako konečnoprvková simulace, hornina je přitom modelována jako ekvivalentní kontinuum, které je rozděleno ploznými puklinovými zónami (explicitně vyjádřené jako 2D konečné prvky). Vstupy do modelu jsou založeny na soudobých hydrogeologických a hydrogeochemických výzkumech lokality (topografie a hladiny podzemních vod, konceptuální geometrie puklinových zón, hydraulické vlastnosti podloží). Okrajová podmínka na povrchu modelu je určována na základě současné pozice hladiny podzemní vody, topografie a matematického modelu popisujícího postglaciální zdvih terénu. Výpočet je proveden do času 10 000 let. Výpočetní síť se skládá z 18 000 rovinných elementů a 47 000 prostorových elementů. Počáteční koncentrace a okrajové podmínky pro úlohu transportu rozpustných látek byly převzaty přímo z hydrochemických výzkumů ve vrtech. Hodnoty koncentrace v této lokalitě závisí na hloubce (do 100 m uvažována lineární závislost, od 100 do 900 m exponenciální závislost a pro hloubku větší než 900 m byla použita konstantní hodnota koncentrace). Model je řešen programem FEFTRA.

Z hlediska simulace transportu zde byly uvedeny především následující výsledky:

- dominantní cesty pro proudění vody (analýzy provedeny ve 100, 1000 a 10 000 letech),
- výsledné koncentrace TDS (Total Dissolved Solids),
- vyhodnocený transportní odpor  $\text{transport resistance} = \frac{WL}{Q}$ .

*Model uvolnění radionuklidů a jejich transportu* uvádí Nykyri et al. (2008). Analýza pokrývá cestu od uvolnění radionuklidů z vyhořelého jaderného paliva přes geosféru. Byly zde

aplikovány dvě koncepce. Koncepce ekvivalentního porézního média (EPM) byla použita pro model proudění podzemní vody v geosféře a v tunelech úložných a diskretní puklinová síť (DFN) pro proudění podzemní vody a transport rozpustných látek výlučně v geosféře (kromě tunelů úložných). Oba přístupy pak poskytují vstupy pro analýzu transportu v geosféře. EPM simulace poskytly střední rychlosti proudění, zatímco DFN analýza byla použita pro stanovení retenční schopnosti geosféry (parametru  $WL/Q$  podél potenciálních transportních cest). Transportní cesty byly stanoveny metodou *particle tracking* z různých startovacích bodů. Transport v geosféře je modelován pomocí jednotlivých transportních cest charakterizovaných pomocí parametru *integrated transport resistance*. Radionuklidy jsou zdrženy difúzí do matrice a sorpcí na plochy pórů v horninách. Simulace byly řešeny numericky pomocí konečnoprvkového programového balíku FEFTRA.

Posiva Oy (2012) je tvrdou verzí zprávy poskytující *základní charakteristiky a popisné modely lokality Olkiluoto* (Olkiluoto Site Report zahrnuje Site Descriptive Model). Zpráva obsahuje modely popisující geologickou a hydrogeologickou strukturu lokality, vlastnosti horninového podloží, proudění podzemní vody a sdružené procesy a mechanismy. Kapitola 8 této rozsáhlé zprávy pojednává o transportním modelu vyvinutém pro účely analýzy migrace radionuklidů. Transport rozpustných látek v měřítku lokality je modelován v prostředí popsaném jako ekvivalentní porézní médium (EPM), kde jsou aplikovány přímé transportní vlastnosti na bloky horniny o velikosti metrů až desítek metrů. Modely, které analyzují transportní cesty radionuklidů, jsou naopak založeny na koncepci diskretní puklinové sítě (DFN). Oba uvažované koncepty zahrnují stejné transportní procesy: advekci, hydrodynamickou disperzi a difúzi do horninové matrice (model EPM s duální porózitou). Model s DFN neřeší difúzi radionuklidů přímo, ale využívá  $WL/Q$  jako vstupní parametr výpočtu, který se zabývá určením vlivu difúze do matrice v rámci transportu radionuklidů. Simulace proudění podzemní vody a transportních procesů byly provedeny pomocí kódu Connectflow, který sestává z modulů NAMMU a NAPSAC.

Hlavní charakteristiky transportních vlastností horninového prostředí jsou v Posiva Oy (2012) určovány z charakterizace rozpukání horniny. Typickou vlastností je velká heterogenita propustnosti a tím také velká variabilita ve velikostech lokálních toků. Tok je charakterizován třemi hlavními vlastnostmi:

- pukliny jsou hlavními cestami pro proudění a transport,
- tok probíhá po oddělených cestách,
- tok závisí na konektivitě sítě.

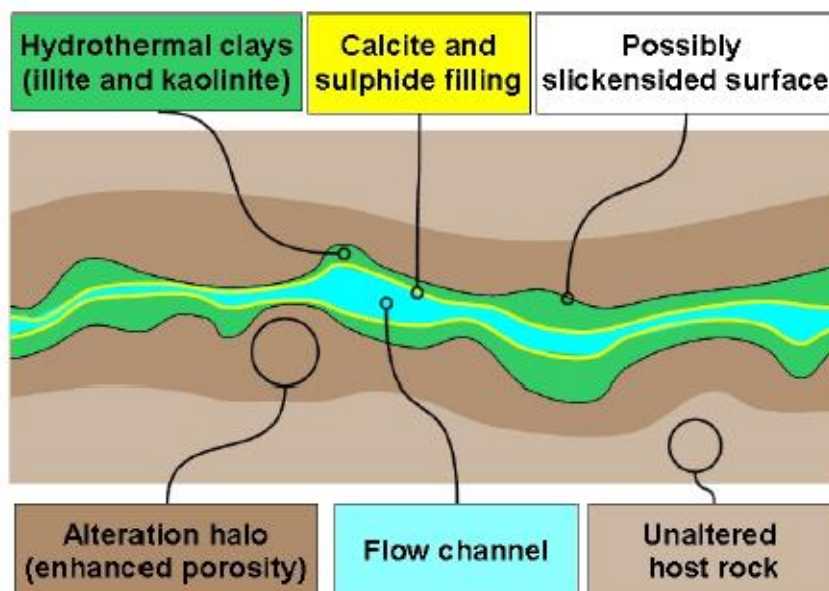
Ve zprávě Posiva Oy (2012) je rovněž zavedena klasifikace puklin podle jednotlivých transportních tříd. Tyto třídy charakterizují pukliny na základě geologických a transportních vlastností a jsou zahrnuté do databáze DFN modelu. Pukliny se liší ve svých charakteristikách (tloušťka, porozita, efektivní difúzní koeficient a pokrytí minerály) a jsou rozděleny podle hlavních minerálů identifikovaných na jejich vnitřním povrchu při geologickém mapování ve vrtech (viz Obr. 26). Podle nich jsou puklinám přiřazeny jednotlivé transportní třídy:

- **TC2** . pukliny, jejichž povrch je pokryt kalcitem nebo dolomitem,
- **TC3** . pukliny pokryté jílovými minerály (kaolinit, illit, montmorillonit, smektit),
- **TC4** . ostatní pukliny (puklinové zóny ve zvětralé hornině, jednotlivé zlomy, smykové zóny, ale také pukliny pokryté lehkými minerály . tzv. slickensided pukliny),

- **TC1** – všechny ostatní pukliny, které nelze zařadit do tříd TC2-TC4 (např. pukliny, které jsou pokryty více minerály, případně pukliny, jejichž charakteristika je obtížné reprezentovat jednou imobilní zónou).

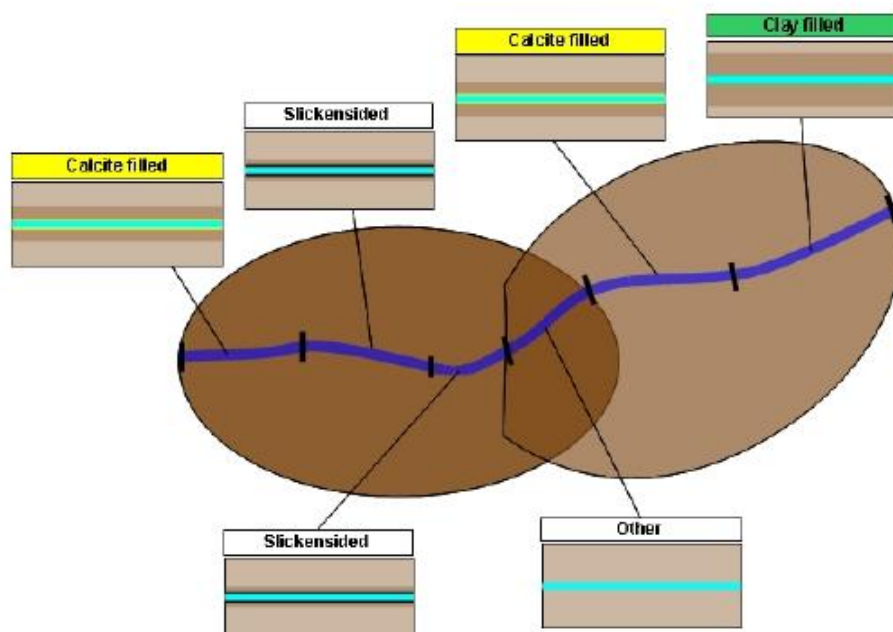
Na lokalitě Olkiluoto bylo popsáno pro potřeby modelování 48 puklinových zón, ke každé byla určena pravděpodobnost přispělosti k jednotlivým transportním třídám, viz Posiva Oy (2012), str. 707. Všechny puklinové zóny v oblasti vykazovaly shodný trend: snížení porůvka u puklin pokrytých kalcitem (třída TC2) a zvýšení porůvka u puklin třídy TC4 s rostoucí hloubkou.

Transportní třídy puklin jsou využity při modelování transportu radionuklidů. Na výsledky modelu proudění pomocí DFN je aplikován částicový transport (particle tracking method) pro každý segment transportní cesty. Při výpočtu transportu jsou data jednotlivých segmentů z proudění kombinována s informacemi o transportních třídách. Každému segmentu transportní cesty je přiřazena konkrétní transportní třída, vybraná náhodně, ale v souladu s pravděpodobnostmi výskytu jednotlivých transportních tříd. Takto jsou vytvořeny různé realizace transportních tříd podél daných transportních cest. Lokální transportní třídy se mohou měnit i podél jednotlivé pukliny, která je součástí transportní cesty, viz Obr. 27.



Obr. 26 Zobecný konceptuální model pukliny pro lokalitu Olkiluoto (Posiva Oy, 2012)





Obr. 27 Realizace úseku transportní cesty. Jednotlivým segmentem jsou přírůžky transportní trasy dle určených pravděpodobností. Lokální transportní trasy se podél transportních cest mohou množit (Posiva Oy, 2012)

Doplňující simulace a analýzy transportu radionuklidů v blízkém a vzdáleném poli úložit uvádí Poteri et al. (2014). Zpráva prezentuje model úniku radionuklidů z poškozeného kontejneru a následné migrace v blízkém i vzdáleném poli s využitím Monte Carlo simulací. Modelování migrace radionuklidů v blízkém poli úložit je zde založeno na simulaci toků v blízkosti ukládacích vrtů a tunelů. Migrace přes geosféru je založena na simulaci transportních cest a transportních vlastností podél těchto cest.

Zpráva mimo jiné obsahuje i analýzu vlivu poškození náhodně vybraného kontejneru a vlivu podélné disperze na rychlost uvolňování při zadaných velmi pesimistických odhadech retenčních vlastností geosféry (oproti alternativním DFN realizacím). Vliv rychlosti uvolňování dominantních nuklidů zapííný podélnou disperzí a realizace transportních trás podél únikových cest v geosféře se podle provedených simulací zdá být zanedbatelný.

Modely byly zpracovány v programech GoldSim a MARFA (zahrnují procesy advekce, podélné disperze, difuze do horninové matrice, rovnovážnou sorpci a rozpad). Uvedené modely byly zároveň verifikovány proti migračním modelům vytvořeným dříve (REPCOM, FTRANS).

## Použitý software

Pro simulace proudění v oblasti Olkiluoto jsou užití softwarové nástroje ConnectFlow (umožuje propojit koncepci ekvivalentního porézního média a diskrétní puklinové sítě) a FEFTRA.

V dřívějších bezpečnostních studiích byly uvolňování radionuklidů z úložit a jejich transport do biosféry simulovány převážně pomocí modelů v kódu REPCOM a transportních modelů geosféry v kódu FTRANS. V projektu TURVA-2012 byl pak kód REPCOM pro všechny simulace uvolňování a transportu radionuklidů v blízkém poli nahrazen kódem GoldSim

(Posiva Oy, 2012c). Monte Carlo simulace zahrnující retenci a transport v geosféře byly rovněž realizovány v GoldSim. Kód MARFA je používán pro deterministické výpočty transportu v geosféře. REPCOM a FTRANS pak byly použity pro vzájemné porovnání kódů. Porovnání kódů (porovnávány dvojice kódů REPCOM. FTRANS, GoldSim. FTRANS a MARFA. FTRANS) uvádí v příloze Poteri et al. (2014). Srovnávací testy REPCOM uvádí Poteri et al. (2012).

Pro nahrazení kódu REPCOM kódem GoldSim bylo několik důvodů: Modul transportu radionuklidů v GoldSim umožňuje v nich některým směrům realistickyjší simulace ve srovnání s REPCOM. GoldSim je pak dobře připravený pro pravděpodobnostní výpočty s využitím Monte Carlo metody a poskytuje některé užitečné nástroje postprocesingu. Dalšími důvody byly i možnost využití jediného kódu alespoň pro některé analýzy blízkého pole a geosféry a přehlednější a příjemnější uživatelské rozhraní GoldSim oproti REPCOM (Pulkkanen a Nordman (2010).

Dále je uvedena stručná charakteristika hlavních kódů používaných pro simulace proudění a transportu v zirkóblastii i v blízkém okolí úložiště.

Software **ConnectFlow** (<http://www.connectflow.com/>, software britské firmy AMEC, <http://www.amec.com/services/specialist-services/connectflow>) obsahuje moduly NAMMU a NAPSAC. Modul NAMMU je konečným prvkovým softwarovým balíkem pro modelování proudění podzemní vody a transportních procesů v porézním kontinuu (ustálené a neustálené proudění, včetně proudění v nesaturovaném prostředí, transportu látek a tepla, transportu a rozpadu radionuklidů). Modul NAPSAC slouží pro modelování proudění a transportu rozpuknou horninou reprezentovanou DFN modelem. Puklinové sítě jsou generovány stochasticky (podle nastavených požadavků). Stejně jako modul NAMMU je založen na konečným prvkové implementaci. ConnectFlow pak umožňuje v rámci jediného modelu propojit oba moduly NAPSAC a NAMMU.

Software **FEFTRA** (program vyvinutý VTT, Technical Research Centre of Finland) je konečným prvkový nástroj pro řešení proudění podzemní vody, přenosu tepla a transportu rozpukných látek. Umožňuje řešení ustálené i neustálené difúze, v transportu difúzi do matrice, případně i podélnou disperzi.

**FTRANS** je určený pro simulace transportních a retardovaných procesů v puklinách a horninové matici. V praxi to umožňuje modelovat proudění, advekční transport a podélnou disperzi; v horninové matici difúzi a sorpci.

**PORFLOW** (<http://www.acricfd.com/software/porflow/>) je komerční kód implementovaný v programovacím jazyku Python. Používá se k řešení problémů z oblastí ustáleného a neustáleného proudění tekutin, vedení tepla a transportu ve vícefázovém či saturovaném porézním nebo rozpukném prostředí. Zde je použit k simulacím transportu radionuklidů i ustáleném proudění v saturovaném prostředí.

**REPCOM** (program vyvinutý VTT, Technical Research Centre of Finland) pro bezpečnostní analýzy v okolí úložiště vyhořelého jaderného paliva. Kód umožňuje simulovat především: uvolnění radionuklidů z různých typů odpadu s různě definovaným přeběhem uvolnění, advekční a difúzní transport systémem inženýrských bariér, sorpci, omezenou rozpustností a radioaktivní rozpad a vznik.

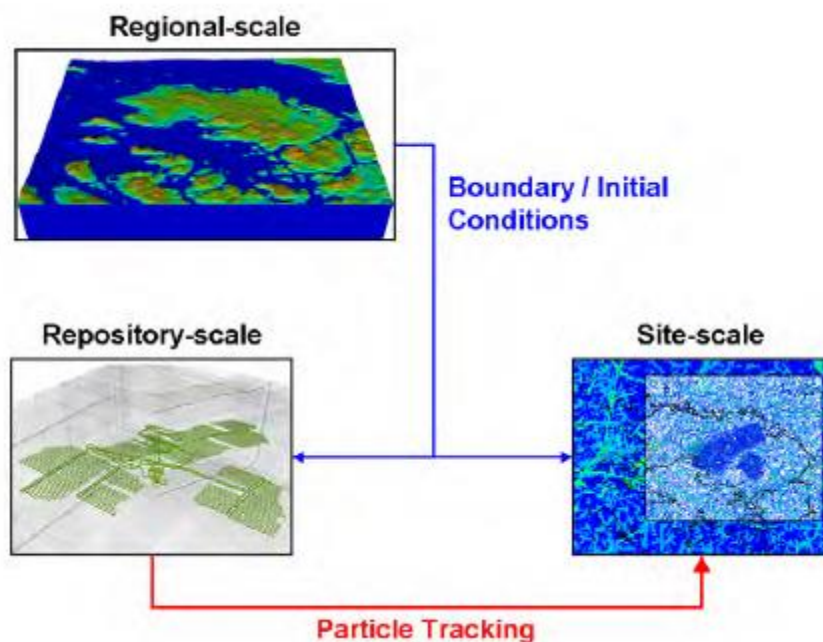
**MARFA** (Migration Analysis of Radionuclides in the Far Field) implementuje částicovou založenou Monte Carlo metodu pro simulace transportu radionuklidů v rozpukném horninovém prostředí. Podporované procesy zahrnují advekci, podélnou disperzi, difúzi,

rovnovážnou sorpci, rozpad a vznik, v etn bifurkací v rozpadových adách. Migrační a retenční procesy jsou omezené pouze na ty, které jsou lineárně závislé na koncentracích. Například srážení a omezená rozpustnost nejsou podporované. Vstup může být generovaný z modelu proudění s využitím koncepce DFN, CPM nebo kombinované EPM/DFN. Software je připravený pro načítání transportních cest získaných výpočtem proudění v ConnectFlow. MARFA podporuje libovolný počet trajektorií a vstupních bodů.

**GoldSim** je software umožňující Monte Carlo simulace a analýzy v různých oborech lidské činnosti (obchod, inženýrské práce, vědecké studie). Obsahuje specializovaný modul pro simulace transportu radionuklidů (GoldSim RT), který je používán pro řešení problémů v oblasti hlubinného ukládání. Modul transportu umožňuje reprezentovat: uvolnění látky ze zdroje, transport látek podél vícenásobných transportních cest zahrnující advektivní i difúzní mechanismy. Transport umožňuje zohlednit omezenou rozpustnost a radioaktivní rozpad. Pro modely blízkého pole byla využita metoda konečných objemů. Konečným objemem v programu GoldSim odpovídají bloky nazývané *cells* (buněk). Model je potom sestaven ze sítě takovýchto buněk. Hmotnostní bilance v jednotlivých buňkách je ovlivněna difúzí a advekcí mezi sousedními buňkami a radioaktivním rozpadem. V jednotlivých buňkách dochází k míšení a sorpci. Při tvorbě modelu úložného vrtu je použita cylindrická geometrie sítě buněk. Model geosféry (vzdáleného pole) v GoldSim využívá bloky *pipe* (pro sestavení transportní cesty (pipe pathways)). Pro výpočet transportu je pak použita Laplaceova transformace poskytující analytické řešení advektivního transportu, který může zahrnovat advekci, podélnou disperzi, retardaci, rozpad a vznik látek. V případě dlouhé doby transportu a časových proměnných parametrů v rámci jediného bloku může výpočet daného bloku končit chybou. V případě uvedených podmínek je pak vhodné delší úseky transportní cesty rozdělit na sérii krátkých dílčích segmentů tak, aby doba transportu v jednotlivých blocích pipe byla krátká. V programu GoldSim je rovněž možné vytvářet modely přenosu radionuklidů v biosféře, tato možnost není v pracích Posiva využívána.

## Napojení na HG a strukturní geologické modely

Proudění podzemní vody v oblasti Olkiluoto se děje především v hydraulicky aktivních deformačních zónách (hydrogeologické zóny) a po jednotlivých puklinách. Hydrogeologické zóny jsou rozsáhlejší než pukliny a v hlubším podloží oblasti obsahují převažující objemy vody. Hydrogeologické zóny a jednotlivé vodivé pukliny jsou souhrnně označovány jako vodivé zóny. V souladu s tím bylo připraveno ke zpracování modelů proudění podzemní vody v oblasti. Pro reprezentaci modelů proudění podzemní vody v oblasti byla použita tři různé úrovně: regionální model, model lokality a model úložného vrtu s různými stupni zohlednění jednotlivých detailů při reprezentaci rozpukané horniny, hydrogeologických zón a tunelů (modely a datové toky mezi nimi jsou patrné z Obr. 28). (Posiva Oy, 2012c)



Obr. 28 Koncepte model proudění v různých měřítkách a datové toky mezi nimi. Posiva Oy (2012b)

Model celé oblasti (regionální) je implementovaný v kódu ConnectFlow. Tento model je založený na koncepci ekvivalentního porézního média (EPM) Hydraulické a transportní parametry tohoto modelu byly získané z modelu vodivých zón. Hydraulická vodivost horniny mimo hydrogeologické zóny se výrazně snižuje s hloubkou.

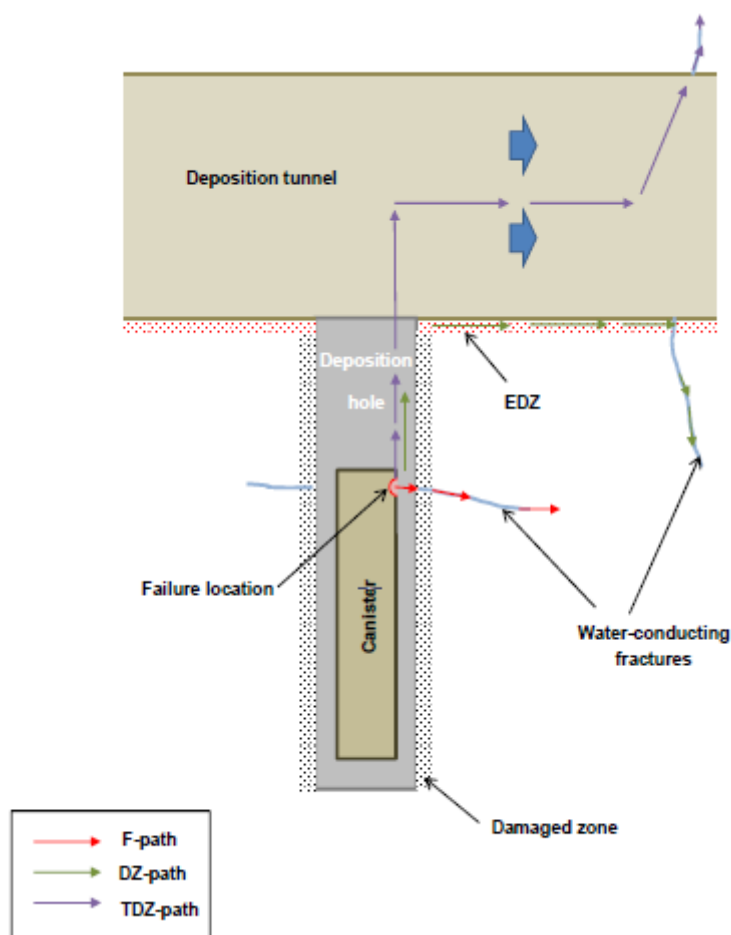
Model lokality zabírá stejnou doménu jako regionální model, je pak realizovaný s využitím koncepce diskretních puklinových sítí (DFN) pro reprezentaci rozpukaného horninového masivu. Poskytuje tak realističtější reprezentaci diskontinuálních charakteristik puklinového systému. Účelem modelu je stanovení transportních cest z úložiště na povrch oblasti. Model obsahuje explicitní reprezentaci hydrogeologických zón a stochastickou reprezentaci puklinového systému mimo tyto zóny. V reálných podmínkách je pozorovaná výrazná prostorová variabilita v hydrogeologických zónách, není tak možné poskytnout přesnou distribuci transmisivity. Z toho důvodu je v některých případech volen stochastický přístup při stanovení parametrů hydrogeologických zón v modelu. Okrajové a počáteční podmínky modelu lokality jsou generované z regionálního modelu.

Model proudění v úložišti a jeho okolí kombinuje ekvivalentní porézní médium pro reprezentaci tunelů a diskretní puklinovou síť pro reprezentaci okolní hostitelské horniny. Modelovaná oblast je menší než v modelu lokality. Okrajové a počáteční podmínky jsou přeneseny z regionálního modelu.

### Metoda výberu transportní cesty

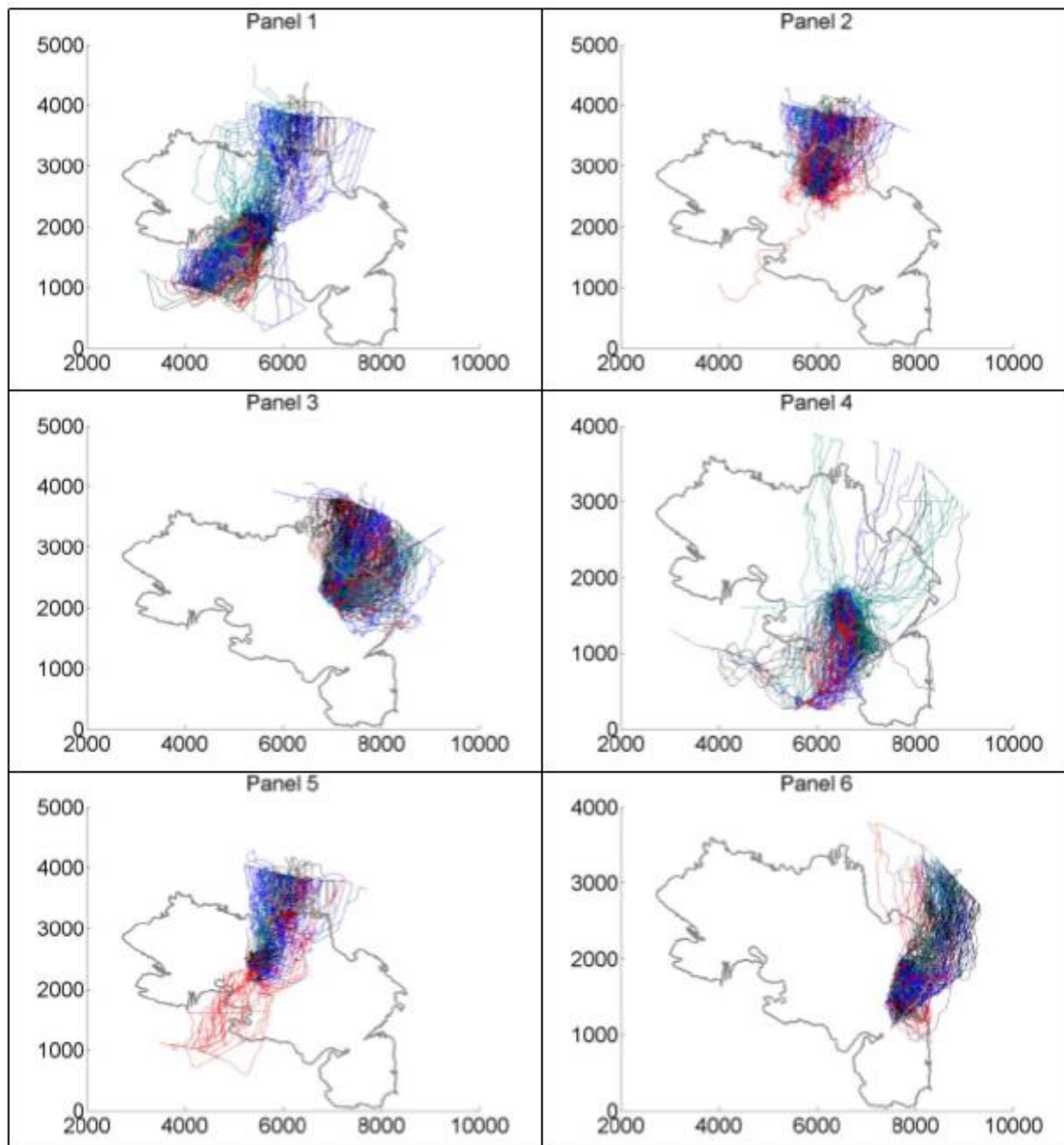
Modely transportu v geosféře jsou založeny na simulaci transportu v transportních cestách, které jsou generované na základě výsledků proudění. Pro výpočet proudění podzemní vody a analýzu potenciálních transportních cest v geosféře je používán kód ConnectFlow. Advektivní transport v tomto kódu je simulován metodou particle tracking. ConnectFlow rovněž podporuje vyhodnocení tzv. F-faktoru podél transportní cesty, který odpovídá transportnímu odporu ( $WL/Q$ , kde  $W$  je šířka/rozevření transportní cesty,  $L$  je délka

cesty a  $Q$  je rychlost proudění) a který je v navazujících modelech transportu geosférou používán. Transportní cesty v geosféře jsou přímým pokračováním transportních cest v blízkém poli. V blízkém poli jsou identifikovány tři možné cesty transportu radionuklidů (Posiva Oy, 2012c). Tyto cesty jsou označovány jako F, DZ a TDZ (viz Obr. 29). Radionuklidy uvolněné z úložiště jsou v geosféře transportovány proudící podzemní vodou. Výsledky simulace proudění podzemní vody jsou použity pro identifikaci transportní cesty (metoda particle tracking), která přímo navazuje na F, DZ a TDZ cesty transportu v úložišti. Jedna částice je použita pro sledování F cesty, jedna pro DZ cestu a jedna pro TDZ cestu. Takto každý kontejner má tři potenciální výstupní body částic v drenážní oblasti na povrchu modelované oblasti. Identifikováno je tak mnoho možných trajektorií postupu radionuklidů z úložiště puklinovou sítí geosféry. Výsledkem je prostorová i časová distribuce úniku radionuklidů na zemský povrch (disperze cest). Příklad zobrazení generovaných transportních cest získaných metodou particle tracking uvádí například Nykyri et al. (2008), viz Obr. 30. Ukázka konkrétních dat generovaných podél transportních cest je na Obr. 32.



Obr. 29 Jednotlivé uvažované únikové cesty radionuklidů z poškozeného kontejneru. Modré žipky znázorňují tok vody v ukládacím tunelu. Posiva Oy (2012b)





Obr. 30 Zobrazení generovaných transportních cest pro různé realizace. (Nykyri et al., 2008)

### Použití 1D kompartmentových model

Pro analýzu retence a transportu radionuklidů v geosféře jsou používány softwary MARFA a GoldSim. Simulují únik radionuklidů z jednotlivých vstupních/početních bodů přes puklinovou síť. Vstupy jsou převzaty z hydrogeologických modelů (Connectflow) a data o výsledných únicích radionuklidů z blízkého pole získaná simulacemi v GoldSimu. Schéma využití jednotlivých výpočetních kódů pro analýzu scénářů úniku radionuklidů je na Obr. 33.

Transportní cesty a jejich vlastnosti (velikost toku, část transportního toku náležícího konkrétnímu typu pukliny a výtokové oblasti) jsou generované z modelů proudění podzemní vody podpořené analýzou jednotlivých scénářů úniku radionuklidů (Posiva Oy, 2012c). Pukliny jsou členěny na jednotlivé typy/třídy (Posiva Oy, 2012) podle informací z lokality Olkiluoto. Puklinové typy se liší ve svých charakteristikách (tloušťka, porozita, efektivní

difúzní koeficient), předpokládaném typu pokrytí jejího vnitřního povrchu, a také stupněm retence vlivem difúze do matrice a sorpce migrujících radionuklidů. Klíčovým parametrem získaným z výpočtu proudění je transportní odpor geosféry,  $WL/Q$ .  $WL/Q$  hodnoty jsou získány pro jednotlivé části transportních cest při azených jednotlivým transportním tládám. Ve zprávě Posiva Oy (2012c) je od str. 98 komentován výstup modelu proudění v kontextu požadovaných vstupů do modelů transportu GoldSim a MARFA. Parametry proudění jsou získávány jako výsledky simulací proudění podzemní vody realizovaných v kódu ConnectFlow. Rozhraní mezi modely tvoří spathline file%o(jeden z výstupních souborů ConnectFlow). Pro každý ukládací vrt jsou uvažované tři možné únikové cesty. Na str. 100 Posiva Oy (2012c) uvádí tabulku s ukázkou vybraných výsledků proudění pro jeden ze simulovaných případů. Význam parametrů v jednotlivých sloupcích je pak uveden dále v této zprávě.

<b>Clay (and possibly Sulphide) coated fractures, 30.9% of drillhole fractures</b>			
	<b>Layer 1</b>	<b>Layer 2</b>	<b>Layer 3</b>
	Illite and Kaolinite	Alteration halo	Unaltered host rock
<b>Thickness</b>	0.2 mm	10 mm	-
<b>Porosity</b>	6%	4%	0.5%
<b>Effective diffusivity</b>	$1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$	$7 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$	$6 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$
<b>Calcite (and possibly Clay and Sulphide) coated fractures, 19.4% of drillhole fractures</b>			
	<b>Layer 1</b>	<b>Layer 2</b>	<b>Layer 3</b>
	Calcite (and Sulphides)	Alteration halo	Unaltered host rock
<b>Thickness</b>	0.2 mm	5 mm	-
<b>Porosity</b>	6%	2%	0.5%
<b>Effective diffusivity</b>	$1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$	$3 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$	$6 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$
<b>Slickensided fractures, 18.5% of drillhole fractures</b>			
	<b>Layer 1</b>	<b>Layer 2</b>	<b>Layer 3</b>
	Slickensided surface	Alteration halo	Unaltered host rock
<b>Thickness</b>	2 mm	3 mm	-
<b>Porosity</b>	1%	5%	0.5%
<b>Effective diffusivity</b>	$1 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$	$1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$	$6 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$
<b>Other fractures, 31.2% of drillhole fractures</b>			
	<b>Layer 1</b>		
	Unaltered host rock		
<b>Thickness</b>	-		
<b>Porosity</b>	0.5%		
<b>Effective diffusivity</b>	$6 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$		

Obr. 31 Tabulka s pohledem rozlišovaných transportních tlád a jejich parametrů. (Posiva Oy, 2012)

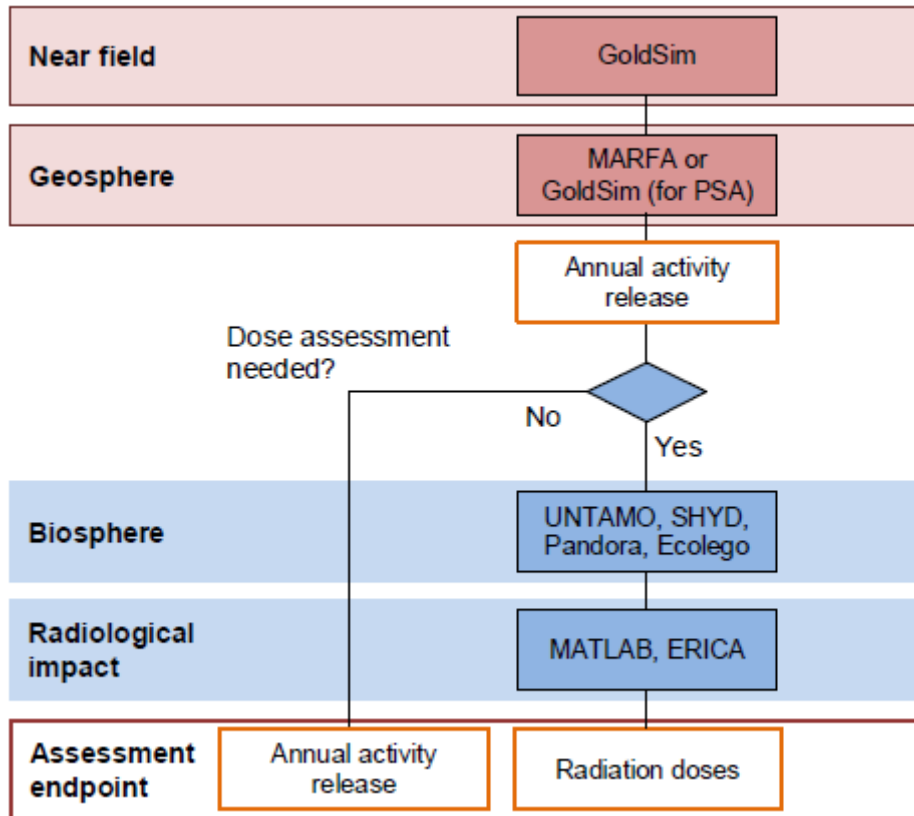
Particle Number	Realisation Number	Deposition Hole Number	Pathway Type	Near-field QF	Near-field ODZ	Near-field QTFD	Near-field UF	Near-field UDZ	Near-field UDFD	Near-field QTDZ	Number of Fractures	FPC	Tunnel Path length	Transport Aperture	F calcite	F clay	F other	F slickenside	Travel time	RSC inflow	Geosphere path length	
1138	0	380 F		6.65E-03	0.00E+00	0	1.10E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	4	1	0	3.25E-04	1.17E+04	1.01E+04	8.20E+03	1.49E+04	1.25E+01	1.20E-01	1.88E+03	
1139	0	380 DZ		0.00E+00	2.03E-03	0	0.00E+00	3.25E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	2.53E+04	2.08E+04	1.54E+04	2.35E+04	2.51E+01	0.00E+00	2.38E+03	
1140	0	380 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.79E-03	0.00E+00	0.00E+00	2.01E-02	1.31E-04	0	0	0	1.13E+01	3.25E-04	1.99E+05	1.07E+05	1.39E+05	1.99E+05	6.22E+01	0.00E+00	2.04E+03
1141	0	381 F		6.14E-03	0.00E+00	0	1.03E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	2	0	0	3.25E-04	1.48E+04	2.19E+04	1.08E+04	3.16E+04	1.81E+01	4.89E-02	1.96E+03	
1142	0	381 DZ		0.00E+00	2.69E-04	0	0.00E+00	1.58E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	2.46E+04	1.95E+04	1.72E+04	3.16E+04	1.48E+01	0.00E+00	1.90E+03	
1143	0	381 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.39E-03	0.00E+00	0.00E+00	1.48E-02	2.65E-05	0	0	0	5.84E+00	3.25E-04	2.02E+04	1.66E+04	1.94E+04	2.50E+04	1.74E+01	0.00E+00	2.00E+03
1144	0	382 F		5.25E-03	0.00E+00	0	8.82E-03	0.00E+00	0.00E+00	0	5	0	0	3.25E-04	1.36E+04	1.18E+04	9.76E+03	1.92E+04	1.33E+01	3.53E-02	1.99E+03	
1145	0	382 DZ		0.00E+00	2.24E-03	0	0.00E+00	1.46E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	9.66E+03	8.94E+03	7.02E+03	1.50E+04	8.90E+00	0.00E+00	2.00E+03	
1146	0	382 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.39E-03	0.00E+00	0.00E+00	1.48E-02	1.68E-05	0	0	0	1.07E+01	3.25E-04	9.71E+03	8.56E+03	6.98E+03	1.45E+04	7.89E+00	0.00E+00	2.01E+03
1147	0	383 F		3.35E-03	0.00E+00	0	1.13E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	3	0	0	3.25E-04	1.11E+05	7.18E+04	6.37E+04	6.48E+04	5.97E+01	2.24E-02	2.17E+03	
1148	0	383 DZ		0.00E+00	2.35E-03	0	0.00E+00	2.11E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	2.41E+04	1.64E+04	1.49E+04	2.42E+04	1.34E+01	0.00E+00	2.01E+03	
1149	0	383 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	1.62E-03	0.00E+00	0.00E+00	6.81E-03	2.25E-05	0	0	0	1.09E+01	3.25E-04	1.23E+05	6.76E+04	8.03E+04	9.29E+04	5.11E+01	0.00E+00	2.30E+03
1150	0	384 F		2.65E-03	0.00E+00	0	1.18E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	2	1	0	3.25E-04	1.17E+04	1.07E+04	8.56E+03	1.83E+04	1.08E+01	1.90E-02	2.01E+03	
1151	0	384 DZ		0.00E+00	1.89E-03	0	0.00E+00	2.60E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	1.03E+04	8.94E+03	7.44E+03	1.52E+04	9.42E+00	0.00E+00	2.00E+03	
1152	0	384 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.99E-03	0.00E+00	0.00E+00	2.31E-02	1.59E-04	0	0	0	4.27E+00	3.25E-04	1.05E+04	8.95E+03	7.55E+03	1.52E+04	9.68E+00	0.00E+00	2.04E+03
1153	0	385 F		2.21E-03	0.00E+00	0	1.44E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	4	0	0	3.25E-04	7.38E+04	4.77E+04	5.13E+04	8.32E+04	2.55E+01	1.31E-02	2.02E+03	
1154	0	385 DZ		0.00E+00	1.69E-03	0	0.00E+00	1.59E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	1.28E+05	8.61E+04	9.49E+04	1.74E+05	3.70E+01	0.00E+00	2.07E+03	
1155	0	385 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.94E-03	0.00E+00	0.00E+00	2.23E-02	1.17E-04	0	0	0	9.21E+00	3.25E-04	2.14E+04	1.33E+04	1.31E+04	2.00E+04	1.30E+01	0.00E+00	1.80E+03
1156	0	386 F		4.12E-03	0.00E+00	0	1.45E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	5	0	0	3.25E-04	1.92E+05	9.33E+04	1.22E+05	1.45E+05	6.93E+01	1.52E-02	2.36E+03	
1157	0	386 DZ		0.00E+00	2.09E-03	0	0.00E+00	2.23E-03	0.00E+00	0	0	0	0	3.25E-04	8.94E+04	6.88E+04	5.80E+04	9.61E+04	5.32E+01	0.00E+00	2.11E+03	
1158	0	386 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.88E-03	0.00E+00	0.00E+00	2.14E-02	6.49E-05	0	0	0	3.30E+00	3.25E-04	1.92E+04	1.41E+04	1.30E+04	2.35E+04	1.51E+01	0.00E+00	2.27E+03
1159	0	387 F		6.18E-03	0.00E+00	0	1.31E-02	0.00E+00	0.00E+00	0	2	0	0	3.25E-04	1.08E+04	9.44E+03	7.94E+03	1.66E+04	9.32E+00	1.04E-02	1.64E+03	
1160	0	387 DZ		0.00E+00	3.08E-03	0	0.00E+00	3.65E-03	0.00E+00	0	0	0	0	4.99E-05	1.63E+05	9.38E+04	1.17E+05	1.91E+05	3.77E+01	0.00E+00	1.79E+03	
1161	0	387 TDZ		0.00E+00	0.00E+00	2.60E-03	0.00E+00	0.00E+00	1.75E-02	5.09E-05	0	0	0	2.71E+00	3.25E-04	1.14E+04	1.14E+04	8.22E+03	1.78E+04	1.14E+01	0.00E+00	2.09E+03

Obr. 32 Tabulka s ukázkou výsledk proud ní pro jeden z modelovaných p ípad . Celá tabulka obsahuje více ne0 16 tis. cest. V tabulce jsou zvýrazn é výsledky pro jeden z ukládacích vrt (3 uva0ované únikové cesty). (Posiva Oy, 2012c)

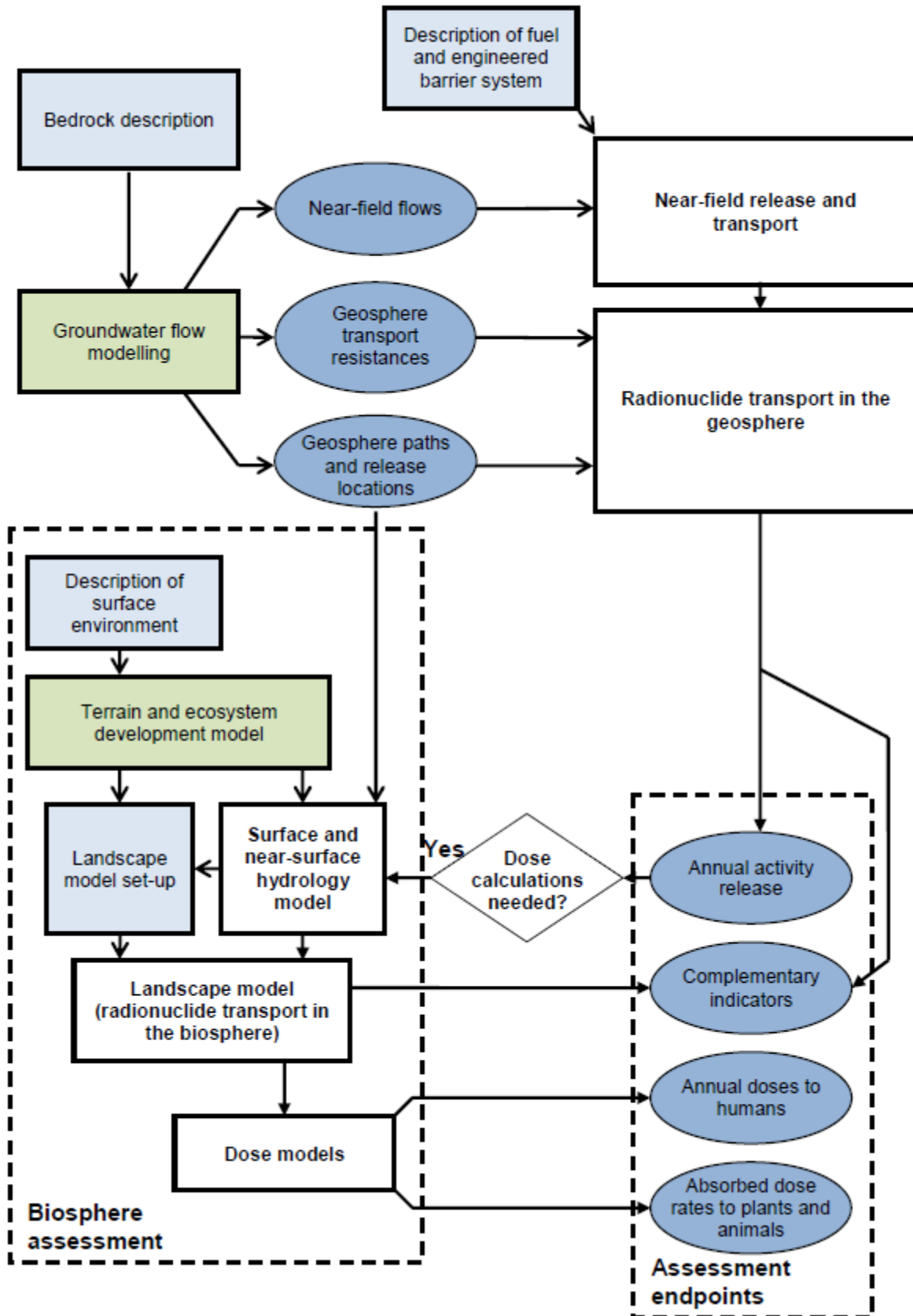
## eýené procesy

Simulace transportu radionuklid z úlo0izt jsou provád ny ve dvou po sob následujících krocích (Posiva Oy, 2012c). Nejprve je modelován únik, retence a transport v blízkém poli úlo0izt , následn jsou retence a transport simulovány v geosfé e. Jednotlivé modely a vým ny informací mezi nimi jsou uvedeny na Obr. 34. P í modelování transportu radionuklid v geosfé e jsou uva0ovány procesy advekce, jako dominantní transportní proces, a difúze a sorpce, jako reten ní procesy).

V tzina prací zabývajících se modelováním a hodnocením transportu pro hlubinné ukládání ve Finsku je zam éna na finální lokalitu Olkiluoto. Základním p edpokladem transportních model jsou výpo ty proud ní podzemní vody provád né ve tech r zných m ítkách. Na základ model proud ní jsou metodou particle tracking generované transportní cesty. Transportní modely geosféry pak p ímo navazují na transportní modely blízkého pole hlubinného úlo0izt , transport v geosfé e je ezen v generovaných transportních cestách. V pr b hu sledovaného období se áste né m ní (respektive bylo dopln é) portfolio simula ních kód pou0itých v procesu modelování proud ní a transportu v blízkém poli i v geosfé e. Mimo prací zabývajících se p ímo modelováním existence úlo0izt v konkrétních podmínkách jsou zastoupené i práce, které mají za cíl ukázat mo0nosti, výhody, pop ípad nedostatky jednotlivých simula ních kód .



Obr. 33 Využití jednotlivých výpočetních kódů pro analýzu jednotlivých scénářů úniku radionuklidů. Červeně jsou podbarvené nástroje použité pro simulace úniku z úložiště, modře nástroje pro analýzu bezpečnosti v biosféře. Posiva Oy (2012b)



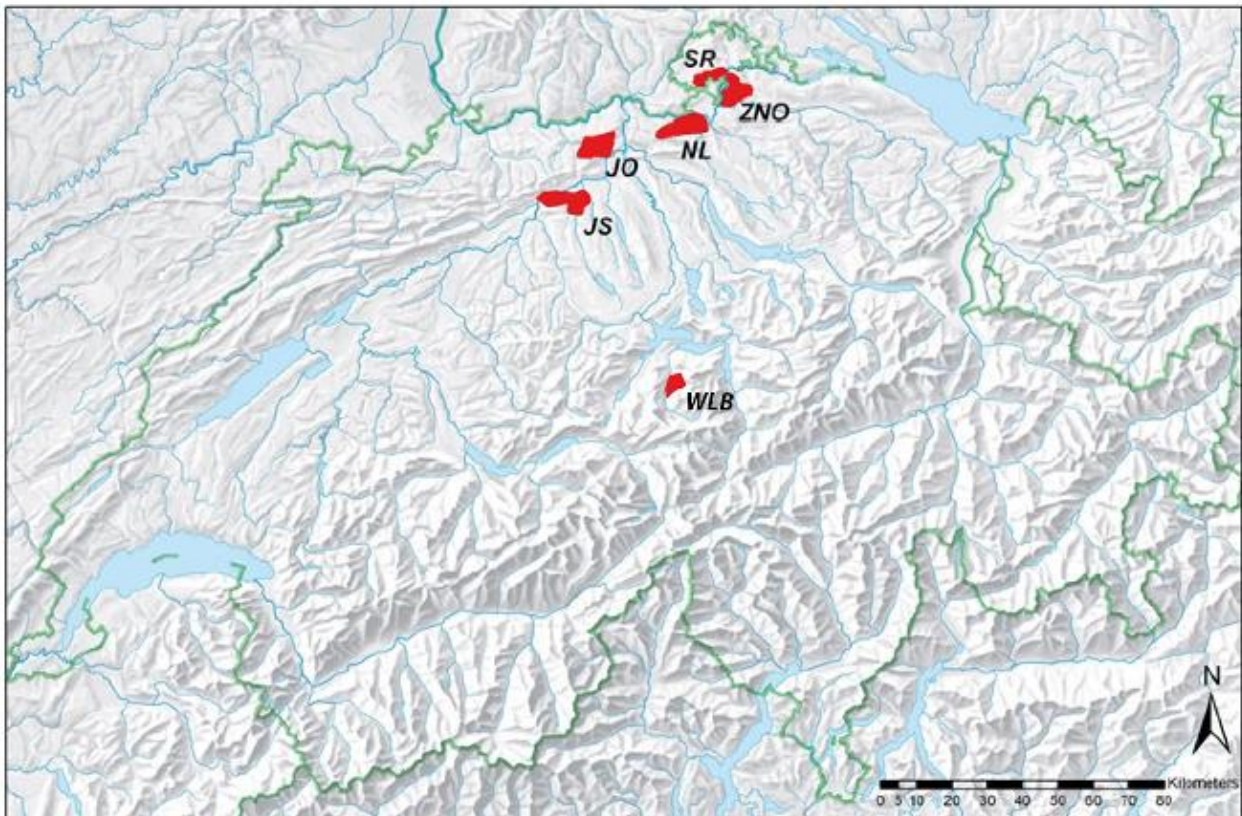
Obr. 34 Pohled modelů a datových toků mezi nimi. Zde bílé obdélníky představují modely uvolňování radionuklidů a jejich transportu, modré obdélníky popisují systém, zelené obdélníky klíčové podpůrné modely a modré elipsy stavební výstupy modelů. Posiva Oy (2012b)



### 3.1.3 Úvčarsko

#### Kandidátní lokality

V listopadu 2008 navrhla NAGRA zest lokalit pro hlubinné úložizt nízko a středn aktivních odpad (NAO a SAO) a ti lokality pro úložizt vysoce aktivních odpad (VAO), z toho ti lokality byly navr0eny pro společné ukládání obou typ odpad (Obr. 35). Tyto lokality byly vybrány na základ bezpečnostních kritérií a kritérií proveditelnosti. Z zesti lokalit pak byly v roce 2014 vybrány dv lokality pro ka0dý typ odpad , a to Zuerich Nordost a Jura Ost. V obou úložiztích se uva0uje o kombinovaném (společném) ukládání obou typ odpad (Nagra 2014a).



Obr. 35 Potenciální lokality navr0ené NAGRA v roce 2008. WLB . Wellenberg, SR . Suedranden, ZNO . Zuerich Nordost, NL. Noerdlich Laegern, JO . Jura Ost, JS. Jura Suedfuss (Nagra 2014a)

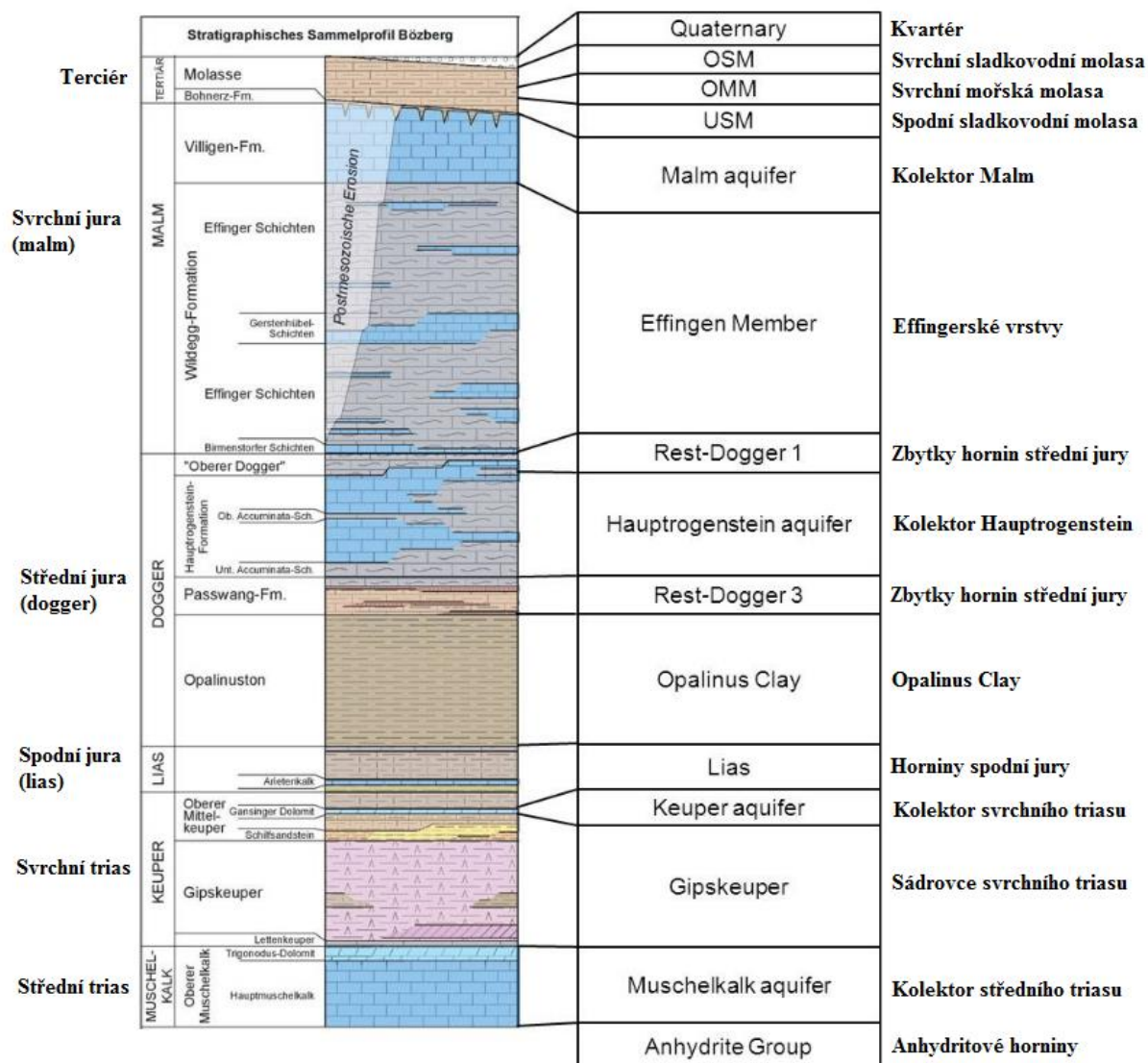
Z p vodních kandidátních lokalit se vzechny lokality, krom lokality Wellenberg, nachází v sedimentárních jílových horninách. Pouze lokalita Wellenberg se nachází v rozpukaných slínovcových horninách, které jsou chováním podobné horninám krystalickým, tedy horninám uva0ovaných v eském konceptu ukládání VJP a VAO do hlubinného úložizt (Tab. 2).

**Typ horniny**
*Tab. 2 Přehled horninových typů v kandidátních lokalitách (Nagra 2014a)*

Typ úložiště	Geologická lokalita	Hostitelská hornina	Nadložní horniny	Podložní horniny
VAO	Zuerich Nordost	Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Noerdlich Laegern	Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Jura Ost	Opalinus clay	Bazální kolektor Hauptrogenstein až svrchní Opalinus clay	Svrchní lias
NAO, SAO	Suedranden	Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Zuerich Nordost	Braunerský Dogger	Effingerské vrstvy	Opalinus clay, Svrchní lias
		Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Noerdlich Laegern	Braunerský Dogger	Effingerské vrstvy	Opalinus clay, Svrchní lias
		Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Jura Ost	Opalinus clay	Bazální kolektor Hauptrogenstein až svrchní Opalinus clay	Svrchní lias
	Jura Suedfuss	Effingerské vrstvy	-	Svrchní lias
		Opalinus clay	Bazální kolektor Hauptrogenstein až svrchní Opalinus clay	Svrchní lias
Wellenberg	Slínovcová formace Helvetika	-	Svrchní lias	
Kombinované úložiště	Zuerich Nordost	Braunerský Dogger	Effingerské vrstvy	Opalinus clay, Svrchní lias
		Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Noerdlich Laegern	Braunerský Dogger	Effingerské vrstvy	Opalinus clay, Svrchní lias
		Opalinus clay	Effingerské vrstvy, Braunerský Dogger	Svrchní lias
	Jura Ost	Opalinus clay	Bazální kolektor Hauptrogenstein až svrchní Opalinus clay	Svrchní lias

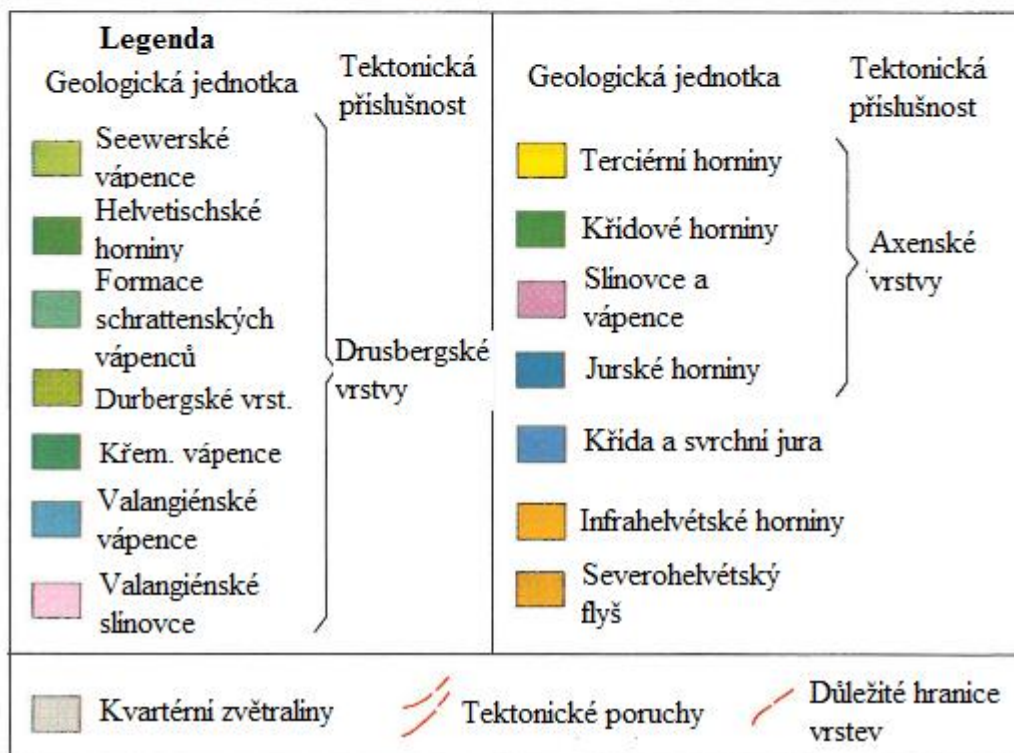
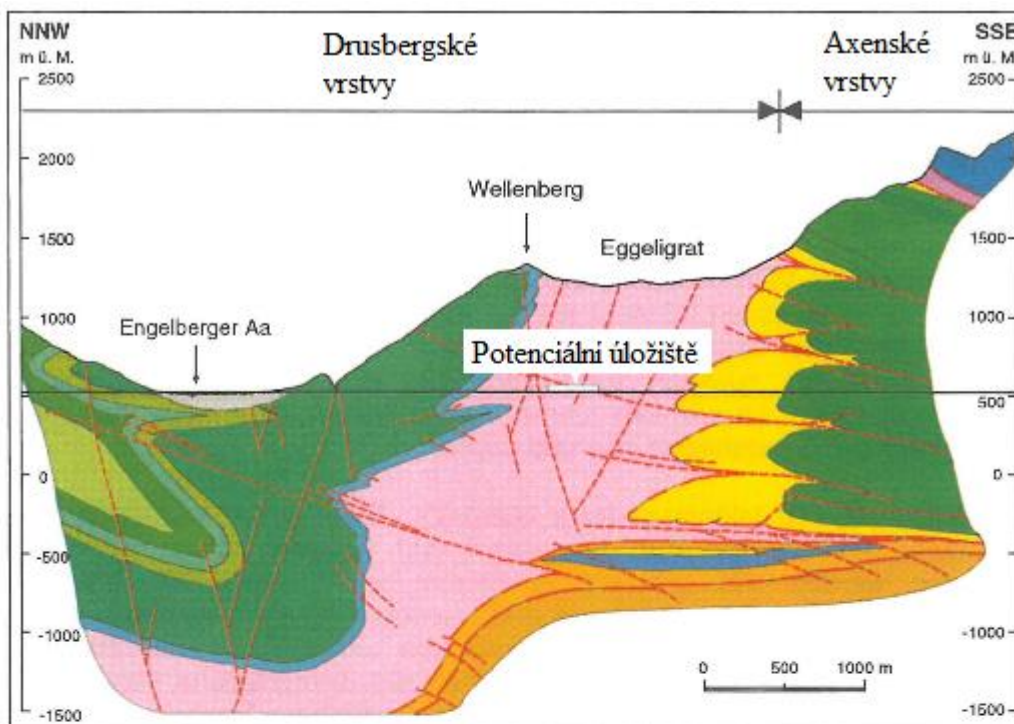
Na Obr. 36 je znázorněn hydrogeologický profil a významné kolektory v sedimentární oblasti v severní části Švýcarska, na Obr. 37 je pak geologické členění lokality Wellenberg. V části severního Švýcarska jsou zastoupeny horniny druhohorního, třetihorního a čtvrthorního stáří. Nejstarší přítomné jednotky uvažované v hloubkách souvisejících s umístěním hlubinného úložiště odpovídají periodě triasu, epoke pak střednímu triasu (německy

Muschelkalk, není český překlad) a svrchnímu triasu (německy Keuper, není český překlad). V nadloží leží horniny jurského stáří, odpovídající epoze spodní jura (Lias), střední jura (Dogger) a svrchní jura (Malm). Nad nimi dále leží horniny třetihor (terciér) a izolované výchozy čtvrťohor (kvartér). Významnými kolektory jsou kolektor středního triasu, kolektor svrchního triasu, kolektor Hauptrogenstein, kolektor Malm, kolektor USM, spodní sladkovodní molasy, kolektor OMM, svrchní mořské molasy a kolektor OSM, svrchní sladkovodní molasy. Významnými izolátory jsou effingerské vrstvy, opalinus clay a horniny spodní jury.



Obr. 36 Hydrogeologická profil severní části ěvýcarska (Gmuender et al. 2014)






Obr. 37 Geologický řez lokalitou Wellenberg (Nagra 1993)

Hostitelskou horninou potenciální lokality Wellenberg je tektonická akumulace slínovcové formace Helvetika, ze severu ohraničená vápenci Drusbergských vrstev a z jihu vápenci a pískovci Axenských vrstev. Hostitelskou horninu lze rozdělit do tří nad sebou ležících oblastí s rozdílnou hydraulickou vodivostí (Nagra 1993):

- svrchní oblast se střední hydraulickou vodivostí  $10^{-9}$  m/s, transmisivitou cca  $10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s a mocností cca 100-200 m,

 <b>SÚRAO</b>	<b>Modely a výpočetní kódy pro určení transportních cest</b>	Evidenční označení:
		<b>SURAO TZ 11/2015</b>

- střední oblast s hydraulickou vodivostí cca  $10^{-11}$  m/s, transmisivitou  $10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s a mocností 50-250 m,
- spodní oblast s hydraulickou vodivostí  $10^{-12}$  m/s a transmisivitou  $10^{-10}$  m<sup>2</sup>/s.

Z hydrogeologického hlediska (hydrogeologické vlastnosti stejné i přes jiné geologické vlastnosti) se prostě dále dělí na:

- horninový pokryv a zvrstvený plátek. Tato část je tvořena především kvartérními horninami, její mocnost je maximálně 100-200 m. Tato oblast má nejvyšší hydraulickou vodivost.
- terciérní slínovce a břidlice s velmi malou hydraulickou vodivostí
- subhelvetické elementy. V oblasti byly ve dvou vrtech zastřešeny jednotky Valanginských slínovců s převládajícími karbonátovými horninami, jejich mocnost činila až 300 m, s vysokou hydraulickou vodivostí a až artézským chováním

### **Použitý software pro výběr transportní cesty**

Pro řešení výpočtu proudění podzemní vody a tedy i výběr transportních cest byl použit software FEFLOW, konkrétně ve verzi FEFLOW 6.1 (DHI-Wasy 2012). FEFLOW byl zvolen s následujícími důvody:

- byl již v minulosti použit v úlohách vyžadujících velký počet elementů (Abbey et al. 2009)
- využívá numerické algoritmy, které zkracují čas výpočtu úlohy
- vzhledem k tomu, že se jedná o kód založený na konečných prvcích, dovoluje oproti ostatním komerčním programům v reálnou aproximaci geologických struktur (Gmuender et al. 2014)

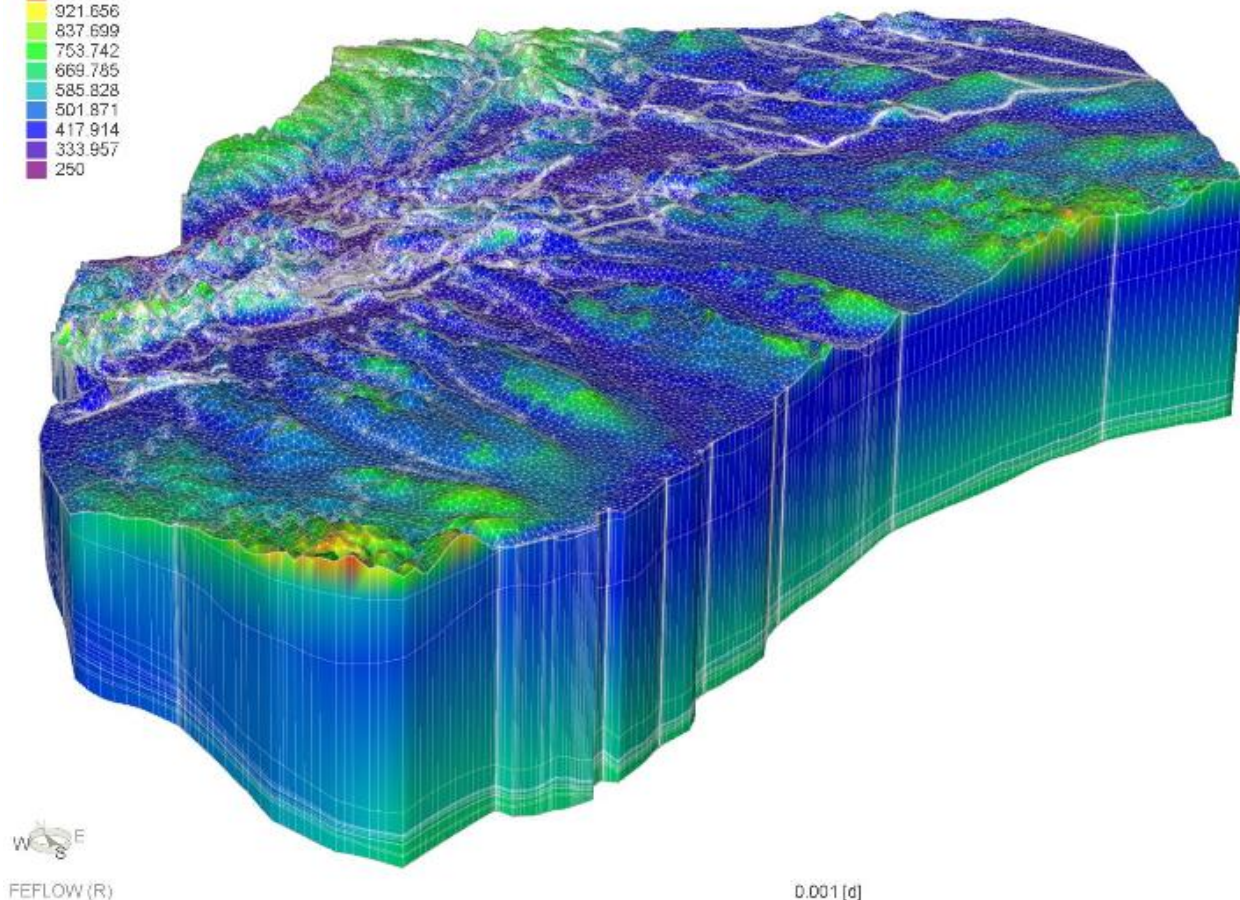
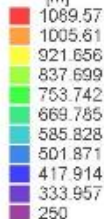
FEFLOW obsahuje dva numerické solvery, jednak solver PGD (a Preconditioned Conjugate-Gradient method) a solver SAMG (Systém Algebraic Multigrid method). V regionálním modelu byl použit solver SAMG, vzhledem k tomu, že se tato metoda hodí více pro rozsáhlé nerovnoměrné síť, což vzhledem k velké variabilitě v mocnostech vrstev a etnému zjemnění kroku sítě kolem poruch, bylo pro problematiku regionálních modelů významné (Obr. 38).



Hydraulic head

- Continuous -

[m]

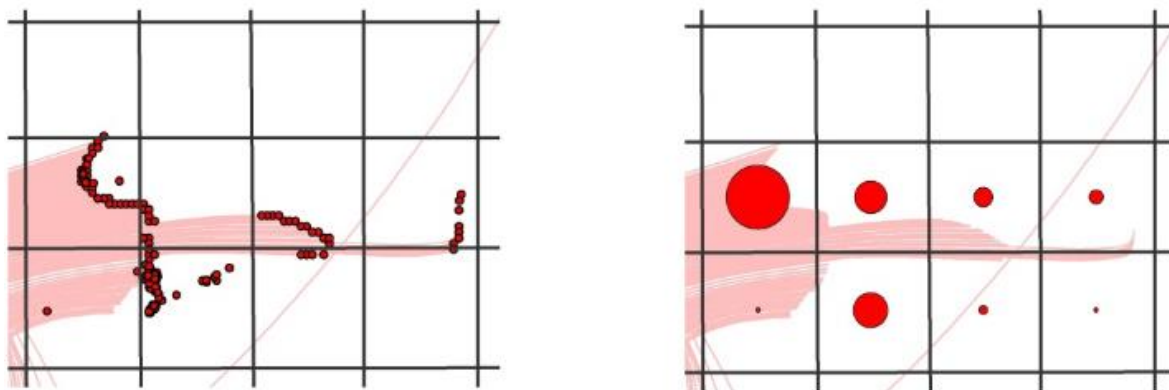


Obr. 38 Příklad schematizace zájmové oblasti regionálního modelu do diskrétní sítě konečných prvků (Gmuender et al. 2014)

### Metoda výběru transportní cesty

Po výpočtu rozložení hydraulických výšek v modelové oblasti a tedy vyřešení problematiky proudění podzemní vody, byla použita metoda particle tracking pro rozdělení oblastí na infiltrační a drenážní. Metoda particle tracking byla také použita pro studium potenciálních cest z hostitelské horniny (hlubinného úložiště), kdy pro každou zájmovou lokalitu byl vytvořen grid (pomocná mřížka) pro přesnou lokalizaci uvolnění částic. Z každé lokality bylo vypuštěno 20 částic na km<sup>2</sup> a byla sledována dráha každé částice. Dráhy částic byly tedy pořízeny v programu FEFLOW a dále exportovány jako mapová vrstva do programu GIS.

Pro vytvoření infiltračních/drenážních oblastí byly zobrazeny souřadnice koncových bodů transportních drah jednotlivých částic v mřížce a byla stanovena četnost koncových bodů v každém poli mřížky. Na základě toho byly získány semikvantitativní údaje o velikosti infiltračních/drenážních zón. V regionálním mřížku vizualizace byly použity pouze pole s více než 10 koncovými body. Tato mezní hodnota vysvětluje, proč rozsáhlé plochy s rovnoměrně rozloženou infiltrací nejsou identifikovány pomocí metody particle tracking (Obr. 39).



Obr. 39 Příklad metody *particle tracking*, vlevo zobrazení koncových bodů jednotlivých proudnic, vpravo je pak hustota koncových bodů vyjádřená velikostí červeného kruhu (Nagra 2014a)

Výsledné výpočtené dráhy částic získané touto metodou pro oba hlavní kolektory – kolektor Malm a kolektor středního triasu (jako příklad je zvolena jedna z kandidátních lokalit Zuerich Nordost) v etn. gridu bodů (pomocné měřítky), ze kterých byly částice vypuštěny, jsou zobrazeny na Obr. 40 a Obr. 42. V souvislosti s výskytem dvou a více kolektorů v zájmové oblasti je třeba zmínit jednu z odlišností zürichského konceptu od českého konceptu. Zürichský koncept předpokládá uložení v sedimentárních horninách, kdy jsou jednotlivé kolektory odděleny izolátory. Český koncept naopak předpokládá uložení v krystalinických horninách, kde vodivost klesá s hloubkou, ale jednotlivé vrstvy jsou v přímém hydraulickém spojení.

Při řešení výberu transportních cest na lokalitě byla také testována hydraulická funkce přelhlých zlomů, která má vliv na proudění podzemní vody v zájmové oblasti a tedy na geometrii výsledných transportních cest. Zlom je simulován těmi modelovými vrstvami a změnou jejich hydraulických vlastností se mění hydraulická funkce zlomu (Obr. 43). Byly testovány následující hydraulické funkce zlomů :

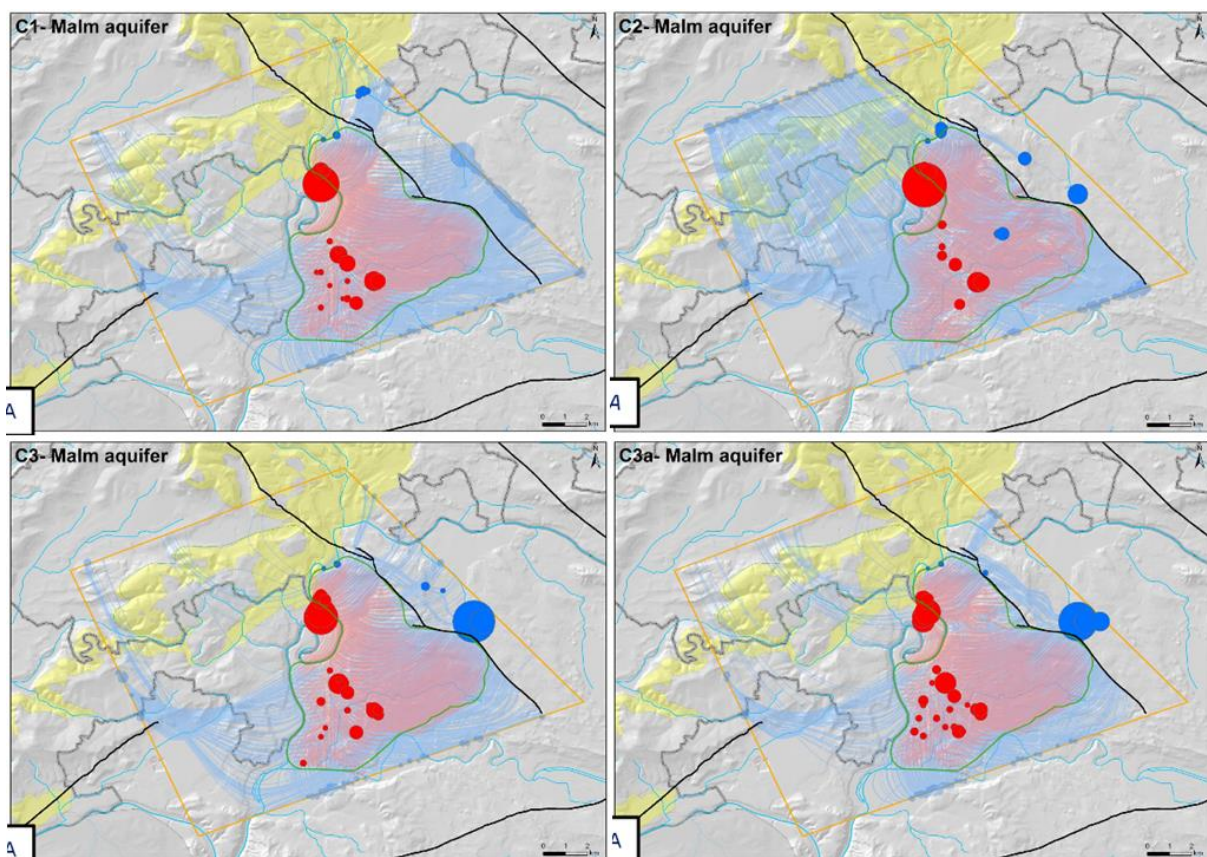
- Příklad C1 . zlom způsobuje pouze posun horninových vrstev, uvažuje se jako propustný, jednotlivé modelové vrstvy zlomu mají stejnou hydraulickou vodivost jako modelové vrstvy v okolí zlomu (Obr. 43, část A),
- Příklad C2 . všechny modelové vrstvy zlomu mají velmi nízkou hydraulickou vodivost tak, aby byla simulována nepropustná funkce zlomu (Obr. 43, část B),
- Příklad C3 . vnitřní modelové vrstvy zlomu jsou dobře propustné, vnitřní modelová vrstva zlomu je nepropustná, hydraulická vodivost vnitřní modelové vrstvy je velmi nízká (Obr. 43, část C),
- Příklad C3a . všechny modelové vrstvy zlomu mají vysokou hydraulickou vodivost, vyžítí ne0 okolní horniny (Obr. 43, část D).

Z Obr. 41 je možné pozorovat, že hydraulická funkce zlomu nemá výrazný vliv na výskyt drenážních oblastí ve svrchním kolektoru, ale má vliv na výskyt infiltračních oblastí v obou kolektorech a drenážní oblasti ve spodním kolektoru. Hydraulická funkce zlomu tak může ovlivňovat situování hlubinného úložiště, kdy je preferováno umístění úložiště do infiltrační oblasti (z důvodu maximalizace dráhy od úložiště na zemský povrch).

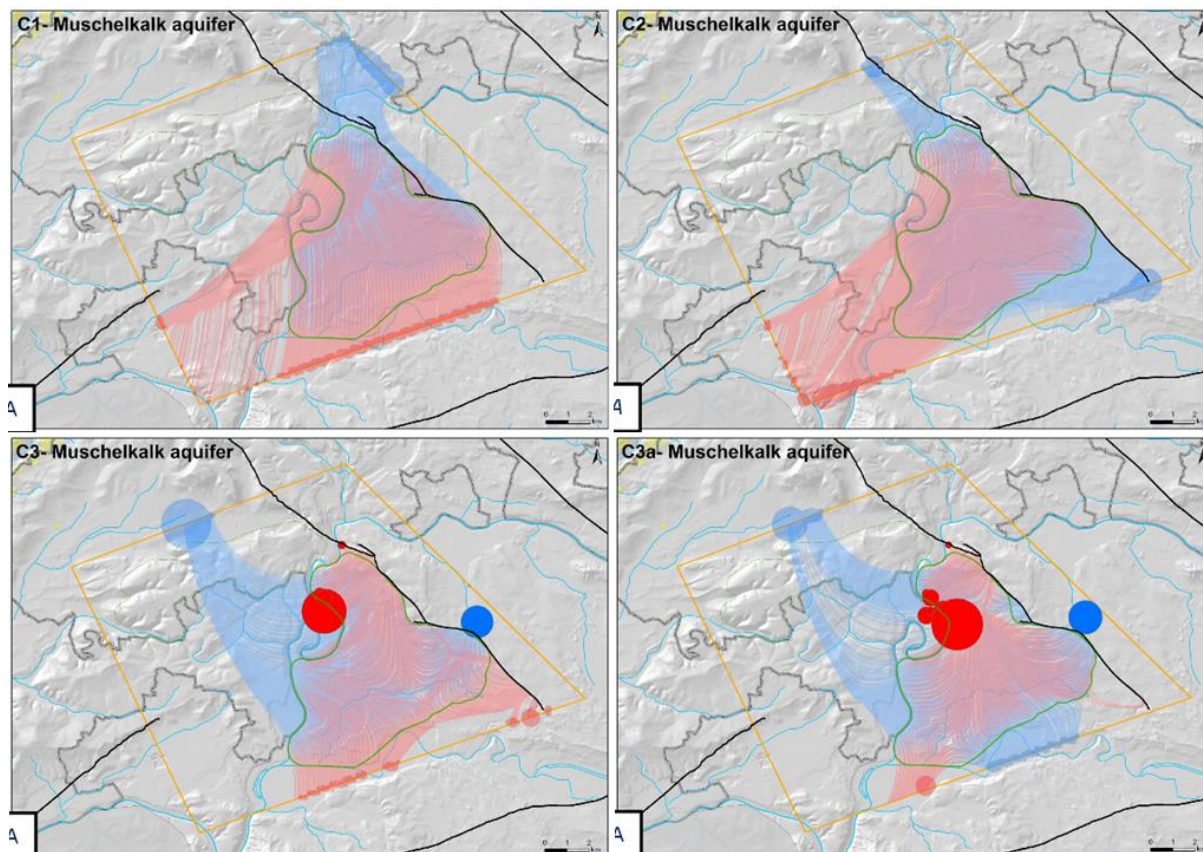




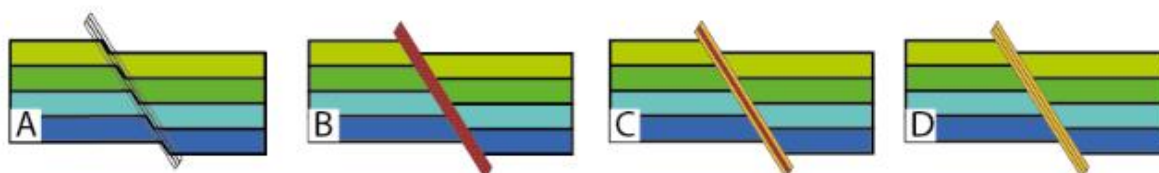
Obr. 40 Rozložení rastru bodů na lokalitě Zürich Nordost, ze kterých byly vypouštěny částice při metodě particle tracking (Luo et al. 2014)



Obr. 41 Rozložení infiltračních/drenážních oblastí svrchního kolektoru (kolektor Malm) získaných metodou particle tracking na lokalitě Zürich Nordost (Luo et al. 2014), červené kruhy značí drenážní oblasti (forward particle tracking) a modré kruhy značí infiltrační oblast (backward particle tracking). Obrázek C1 popisuje zlom se stejnou hydraulickou vodivostí, jako mají okolní modelové vrstvy, obrázek C2 popisuje nepropustný zlom, obrázek C3 popisuje zčásti propustný zlom a obrázek C3a popisuje zlom s vyšší hydraulickou vodivostí, než mají okolní modelové vrstvy



Obr. 42 Rozložení infiltračních/drenážních oblastí spodního kolektoru (kolektor středního triasu) získaných metodou particle tracking na lokalitě Zürich Nordos (Luo et al. 2014), červené kruhy značí drenážní oblasti (forward particle tracking) a modré kruhy značí infiltrační oblast (backward particle tracking). Obrázek C1 popisuje zlom se stejnou hydraulickou vodivostí, jako mají okolní modelové vrstvy, obrázek C2 popisuje nepropustný zlom, obrázek C3 popisuje zčásti propustný zlom a obrázek C3a popisuje zlom s vyšší hydraulickou vodivostí, než mají okolní modelové vrstvy



Obr. 43 Příklady zlomů lišících se jejich hydraulickou funkcí. Obrázek A představuje zlom, který nemá vliv na proudění podzemní vody, obrázek B představuje nepropustný zlom, obrázek C představuje zčásti propustný zlom a obrázek D představuje zlom se zvýšenou hydraulickou vodivostí

Výstupem metody particle tracking je vizualizace jednotlivých transportních drah sledovaných částic v obrazové podobě a poloha každého bodu a vektor rychlosti jeho pohybu v jednotlivých časových krocích v tabulkové podobě (Obr. 44).



 <b>SÚRAO</b>	<b>Modely a výpočty etní kódy pro určení transportních cest</b>	Evidenční označení:
		<b>SÚRAO TZ 11/2015</b>

ID	TIME	X	Y	Z	VX	VY	VZ
1	0.00000000	64.5718445121	28.5311446563	25.00000000	-0.10074490	0.00539052	-0.00000453
1	1.53900941	64.0557912122	28.5589018596	24.99997666	-0.10089198	0.00545916	-0.00000456
1	3.09592747	63.5354500142	28.5872134159	24.99995295	-0.10007804	0.00548040	-0.00000457
1	3.66821965	63.3449219069	28.5977197792	24.99994419	-0.09995132	0.00549742	-0.00000458
1	7.08931600	62.2089708700	28.6605575190	24.99989179	-0.09921765	0.00552522	-0.00000460
1	7.30974547	62.1363007180	28.6646258303	24.99988840	-0.09917039	0.00552697	-0.00000460
1	7.43244302	62.0958750412	28.6668920618	24.99988652	-0.09914302	0.00552815	-0.00000460
1	10.87192707	60.9640118519	28.7305420510	24.99983363	-0.09839730	0.00556988	-0.00000461
1	13.57954298	60.0792180790	28.7807161540	24.99979197	-0.09779699	0.00555224	-0.00000461

Obr. 44 Příklad tabulárního výstupu metody *particle tracking* pro jednu částici. ID značí číslo částice, TIME čas, ve kterém jsou veličiny určovány, X, Y a Z jsou prostorové souřadnice polohy bodu v daném *ase* a VX, VY a VZ jsou složky vektoru rychlosti v daném *ase*

## Použitý výpočetní program pro simulaci transportu radionuklidů

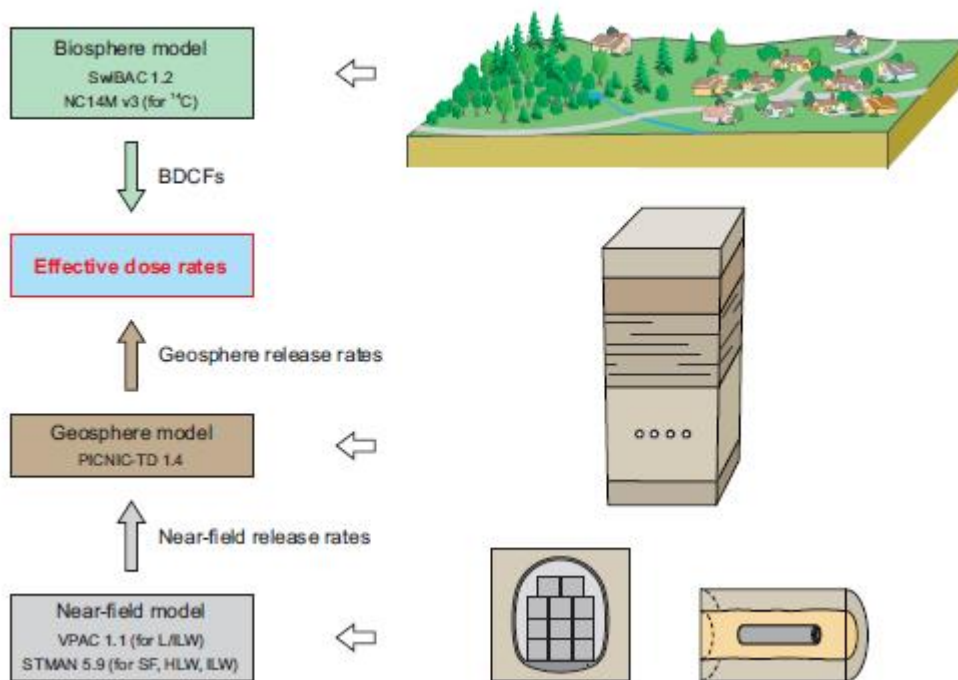
Všechny kalkulace transportu radionuklidů v geosféře z hlubinného úložiště jsou prováděny programem PICNIC-TD 1.4 (Obr. 45, Nagra 2014c). Způsob simulace transportu radionuklidů v programu PICNIC-TD je obdobný způsobu simulace transportu v programu GoldSim.

PICNIC je počítačový kód pro simulaci transportu rozpustných radionuklidů v plně nasyceném porézním prostředí podél 1D transportní cesty. Tyto jednotlivé transportní cesty mohou být propojeny do rozsáhlé sítě transportních cest. V programu PICNIC se jednotlivé části transportní cesty označují termínem *segment* a mohou představovat buď homogenní porézní prostředí i horninové jednotky s diskretními puklinami. Díky této flexibilitě je program schopen modelovat poměrně heterogenní proudový a transportní systém.

P vodní verze programu PICNIC (Barten a Robinson 2001) využívala solver založený na metodě Laplaceovy transformace a nevyžadovala žádnou prostorovou diskretizaci podél *segmentu*. Nejnovější verze programu s označením PICNIC-TD, která umožňuje nestacionární proudění podzemní vody a transport radionuklidů v matici paralelně k diskretním puklinám, již prostorovou diskretizaci vyžaduje.

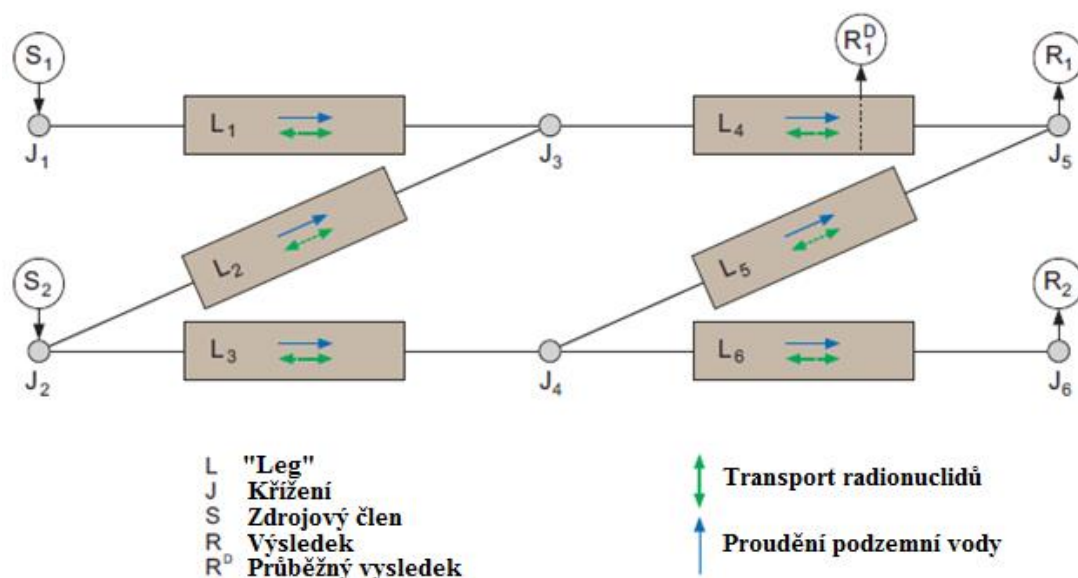
Program PICNIC-TD (a PICNIC) je vhodný na řešení pro simulaci transportu radionuklidů podél jednorozměrné transportní cesty. Ve většině případů je však předpoklad jednorozměrných transportních cest podstatné zjednodušení skutečnosti např. v důsledku nerovnoměrného rozložení radioaktivních odpadů v úložišti. Nicméně, pro bezpečnostní analýzy, které jsou často založené na zjednodušení a pesimistických předpokladech (zejména v raných fázích plánování úložiště) je zjednodušující předpoklad jednorozměrné transportní cesty považován za adekvátní (Nagra 2014c).






Obr. 45 Metodický zrcadlo použitých programů pro výpočet efektivní dávky (Nagra 2014c)

Program PICNIC-TD se používá především pro reprezentaci jednorozměrných transportních cest segmentů v heterogenní geosféře, ale může být také použit pro modelování různých podzemních struktur hlubinné úložnice jako tunely, chodby a těsnění. Každý segment má spodní a horní okraje označované jako vstupní a výstupní, kde může dojít k připojení k dalším segmentům nebo jiných modelových funkcích. Některé segmenty nemají napojení na jiné segmenty systému, ale jsou připojeny ke zdrojovému členu (typicky výstupy programu STMAN nebo VPAC) a poskytují výsledek (Obr. 46).



Obr. 46 Příklad sítě transportních cest v programu PICNIC-TD (Nagra 2014c)

 <b>SÚRAO</b>	<b>Modely a výpočetní kódy pro určení transportních cest</b>	Evidenční označení:
		<b>SURAO TZ 11/2015</b>

Každá složka simuluje prostorově odlišné prvky: diskretní tok v puklinách, a již ve volných i vyplněných, okolní matici (tzv. dvojí pórovitost). Mohou být simulovány jak rovinné prvky (např. zlomy), tak válcové prvky (např. vstupní tunely). V obou případech je kolem těchto prvků přítomná horninová matrice.

V programu PICNIC-TD jsou zahrnuty následující procesy:

- radioaktivní rozpad a přeměna neomezeného počtu radionuklidů a bez omezení délky přeměny nové rady, (dřívejší termín rozpadu je nahrazován novějším přeměnou termín rozpadu tedy není vyložen nesprávný, ale nepoužívá se termín setovacího termínu sady)
- jednorozměrný advektivní / disperzní / difúzní transport rozpustných látek,
- difúzní přestup radionuklidů z diskretní pukliny do horninové matrice
- difúzní transport radionuklidů v matici kolmo ke směru proudění a advektivní / disperzní / difúzní transport radionuklidů paralelně ke směru proudění, a
- specifické sorpční rovnováha radionuklidů mezi pevnou a kapalnou fází, program umožňuje jak lineární, tak nelineární sorpční rovnováhu. V prozatímních bezpečnostních analýzách je zatím využívána pouze lineární sorpční rovnováha.

Detailní popis způsobu transportu radionuklidů v programu PICNIC-TD je uveden v příložené zprávě za zakázkový list PB-2014-ZL-S2303-006-Transport2 (Landa et al. 2015).

## **Napojení na HG a strukturní geologické modely, případně na modely hodnocení bezpečnosti**

Vstupní parametry vstupující do programu PICNIC-TD jsou uvedeny v

Tab. 3, program PICNIC-TD navazuje na výstupy programu FEFLOW (Nagra 2014a) a na výsledky laboratorních experimentů.

Tab. 3 Parametry vstupující do modelu PICNIC-TD (Nagra 2014c)

Parametr	Symbol	Jednotka	Příslušnost k prvku (P) i nuklidu (N)	časová závislost
<b>Parametry nuklid</b>				
Poločas přeměny	$\ln^2/a^N$	T	N	ne
Poměr přeměnových konstant	$\sigma^{EN}$	-	N	ne
<b>Parametry jednotlivých "leg"</b>				
Délka	$l$	L	-	ne
Průtočný profil	$A$	L <sup>2</sup>	-	ne
Darcyovská rychlost	$q_L, q$	L.T <sup>-1</sup>	-	ano
Pecletovo číslo	$Pe$	-	-	ne
Pórový difúzní koeficient	$D_L$	L <sup>2</sup> .T <sup>-1</sup>	-	ne
Efektivní difúzní koeficient	$\varepsilon_{\square}^{\square} / \square_{\square}$	L <sup>2</sup> .T <sup>-1</sup>	P	ne
<b>Parametry horninového prostředí</b>				
Efektivní porozita	$\varepsilon_L$	-	-	ne
Specifický povrch	$\delta_L$	L <sup>-1</sup>	-	ne
Hloubka proniku	$B-b$	L	-	ne
<b>Parametry pro transportní zóny (oblast rychlého proudění)</b>				
Retardační faktor	$\square_{\square}^{\square}$	-	P	ne
<b>Parametry pro matici (oblast pomalého proudění)</b>				
Retardační faktor	$R^E$	-	P	ne
Porozita matrice	$\varepsilon$	-	-	ne
Faktor porozity	$n^E$	-	P	ne
Pórový difúzní koeficient matrice kolmý na směr proudění	$\square_{\square}^{\square}$	L <sup>2</sup> .T <sup>-1</sup>	P	ne
Efektivní difúzní koeficient v matici	$\square_{\square}^{\square} \cdot \square_{\square}^{\square}$	L <sup>2</sup> .T <sup>-1</sup>	P	ne
součinitel anizotropie difúze v matici	$\square_{\square}^{\square} / \square_{\square}^{\square}$	-	P	ne

## 3.2 ešení transportu dostupnými SW

### 3.2.1 MODFLOW a MT3D

#### 3.2.2 Výpočetní moduly pro ešení transportu v programech MODFLOW

Pro programy MODFLOW-2005/2000/96/88 (Harbaugh 2005) a MODFLOW-USG (Panday et al. 2013), které simulují trojrozměrné proudění podzemní vody v hominovém prostředí (CPM přístup), je k dispozici sada výpočetních modulů určených pro řešení transportu látek. Lze je rozdělit do dvou skupin podle metodiky výpočtu a simulovaných transportních procesů:

- programy MODPATH a mod-PATH3DU simulující proudové/transportní dráhy metodou particle trackingu. Výstupem jsou 3D trajektorie částic pohybujících se v advektivním proudovém poli bez zahrnutí dalších transportních procesů
- programy MT3DMS, RT3D, SEAM3D, PHT3D simulující splyný transport se zahrnutím advekce, disperze, difúze, sorpce, radioaktivní přeměny atd.). Výstupem je 2D/3D pole koncentrací látek v podzemní vodě

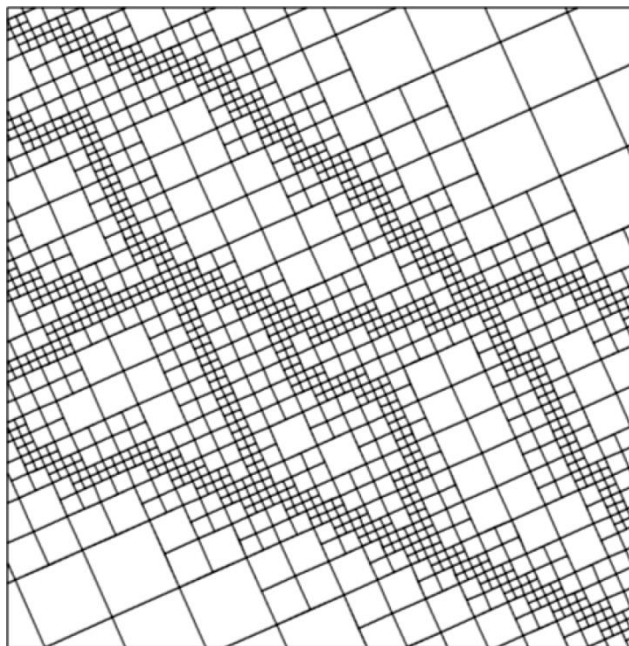
Pro uvedené transportní modely jsou používány stejné pre- a post-procesory, jako pro programy MODFLOW, například komerční rozhraní Groundwater Vistas, Visual MODFLOW, GMS a další. Samozřejmostí je možnost exportu výsledků do textových souborů nebo gridů pro další zpracování, hodnocení a vizualizaci výpočetných dat.

#### **MODPATH moduly pro ešení transportu metodou particle tracking**

Pro výpočet proudnic metodou particle tracking v programech MODFLOW jsou vyvíjeny dva moduly:

- MODPATH (Pollock 2012) pro programy MODFLOW-2005/2000/96/88,
- mod-PATH3DU (Muffels et al. 2014) pro použití v programu MODFLOW-USG s nestrukturovanou sítí (je zřejmě kompatibilní také s ostatními verzemi MODFLOW)

Oba moduly umožní výpočet trojrozměrných trajektorií pohybu částic v d sledku advektivního proudění podzemní vody. Hlavní rozdíl mezi mod-PATH3DU a MODPATH je ve výpočetním schématu metody particle tracking. V mod-PATH3DU jsou implementovány dvě metody. Metoda Pollock (1989) používaná rovněž v MODPATH a nově vyvinutá metoda SSP&A, která je nezávislá na geometrii výpočetní sítě a je tedy vhodná pro MODFLOW-USG. Semi-analytické schéma Pollockovy metody vyhodnocuje rychlostní pole pomocí lineární interpolace rychlostí v jednotlivých buňkách výpočetní sítě. Trajektorie je pak tvořena pohybem částice z jedné buňky do druhé dokud nedosáhne okrajové podmínky nebo jiného výpočetního kritéria (například omezení dané délkou simulace). Pro nestrukturovanou síť (příklad sítě viz Obr. 47), které poskytují větší flexibilitu diskretizace, nelze lineární interpolaci použít. Metoda SSP&A proto používá rychlostní pole z distribuce hydraulické výšky vypočtené v MODFLOW-USG a použitím metody krigingu. Ke sledování částice v nestrukturované síti je použito numerické schéma Runge-Kutta vyššího řádu nebo Eulerova metoda.



Obr. 47 Příklad nestrukturované čtvercové výpočetní sítě QuadTree zahusťované kolem liniových prvků (Muffels et al. 2014)

Základním podkladem pro výpočet trajektorií částic je výpočetný model proudění podzemní vody, respektive vstupní binární soubory obsahující distribuci toků mezi výpočetními buňkami a distribuci hydraulické výšky ve výpočetní síti. Dalšími vstupními parametry jsou:

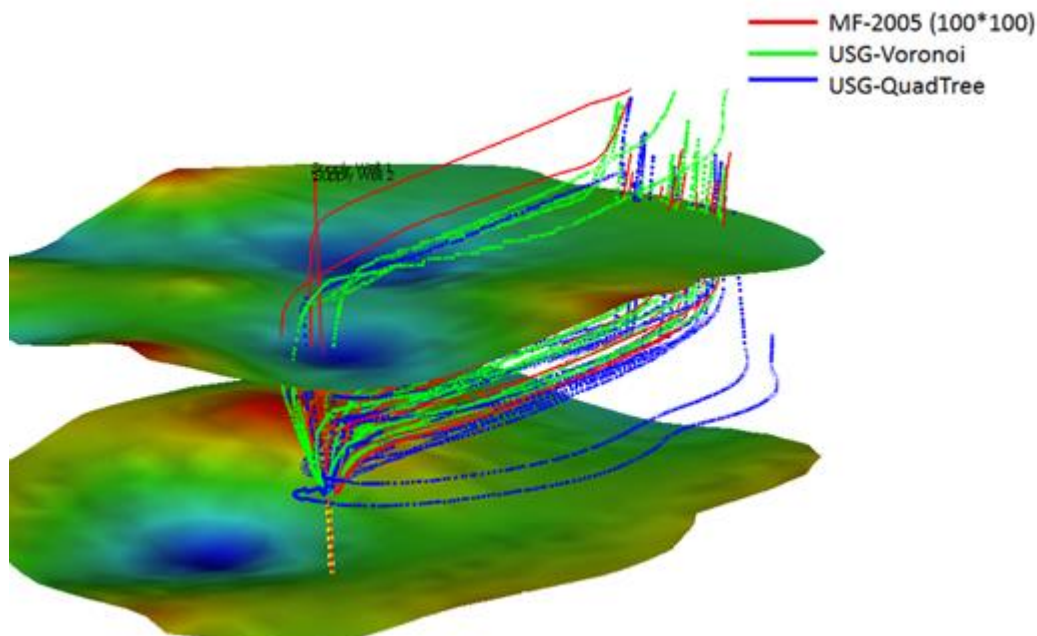
- počet a umístění částic,
- geometrie výpočetní sítě,
- distribuce pórovitosti,
- nastavení particle tracking metody (numerická metoda, délka simulace atd.)

Uvedené MODFLOW particle tracking moduly simulují pouze transport částic řízený advekcí, tj. v dle sledku pohybu podzemní vody. Použitý výpočetní schéma neumožňuje simulaci dalších procesů ovlivňujících směr a rychlost pohybu částice (disperze, difúze a sorpce do nemobilní domény). Výsledkem simulace jsou trajektorie pohybu částic v několika textových výstupních formátech, které obsahují údaje (lze se podrobností výstupních informací):

- počáteční a koncové  $x, y, z$  souřadnice částice,
- dobu pohybu částice,
- geometrii trajektorie.  $x, y, z$  souřadnice, kumulativní čas, odpovídající ID výpočetní buňky atd.

Vizualizace trajektorií částic je možná ve specializovaných programech sloužících jako grafické rozhraní pro programy založené na kódu MODFLOW (např. Visual MODFLOW Flex, Obr. 48). Díky textovým výstupním souborům je možný jednoduchý export výsledků do libovolného formátu, a to i pro vizualizaci výstupů v externích programech nebo jako vstup pro modely hodnocení bezpečnosti (např. GoldSim).





Obr. 48 Vizualizace transportních cest vypočtených v programech MODPATH/MODFLOW-2005 a mod-PATH3DU/MODFLOW-USG pro modelový případ erpání podzemní vody z tlakové zvodny (Hesch 2014)

### **MT3DMS a odvozené transportní modely**

MT3DMS (Zheng 2010, Zheng a Wang 1999) je modulární třídídimenzionální transportní model vyvíjený od roku 1990 (naposledy aktualizovaný v roce 2010) pro simulaci pohybu rozpustných látek v hydrogeologických podmínkách. Původně byl tento program označován pouze jako MT3D (modular 3-D transport model), během svého vývoje byl ale rozšířen o aditivní reakční modul pro simulace transportu víceprvkových směsí. Aktuální verze MT3DMS v5.3 (MS označuje multi-species a lze v ní tedy simulovat také transport víceprvkových roztoků a směsí látek) je schopna simulovat pohyb látek v podzemní vodě způsobený advekcí, disperzí, difúzí, sorpcí (rovnovážná lineární nebo nelineární sorpce), radioaktivní přeměnou a dalšími chemickými reakcemi (vrátně a nevrátně kinetické reakce prvního řádu). Základní chemické reakce zahrnuté v MT3DMS lze rozšířit speciálními reakčními moduly RT3D (Clement 1997, 2003) nebo SEAM3D (Widdowson 2002), které umožňují simulovat složitější chemické a biologické reakce ve víceprvkových směsích. Program SEAWAT (Langewin et al. 2007) kombinuje MODFLOW a MT3DMS do společného výpočetního kódu určeného pro řešení proudění a transportu v podmínkách s variabilní hustotou a viskozitou. Komplexním nástrojem pro řešení hydrogeochemických procesů je program PHT3D (Prommer a Post 2010), který propojuje MT3DMS s programem PHREEQC-2 (Parkhurst a Appelo 1999).

Kód MT3DMS je vyvinut pro použití s libovolným softwarem simulujícím proudění podzemní vody pomocí metody konečných diferencí s blokově centralizovanou sítí, například pro použití s modelem MODFLOW (aktuálně je vyvíjena verze pro MODFLOW-USG). Transport pomocí MT3DMS je řešen nezávisle na hydraulickém modelu proudění podzemní vody, jeho výpočetné proudové pole je základním vstupem transportního modelu. MT3DMS lze použít k simulaci změny koncentrace rozpustných látek v podzemní vodě s různými typy okrajových podmínek a externích zdrojů i propadů. Program MT3DMS není určen pro vícefázové proudění.

Program MT3DMS řeší transport látek se zahrnutím všech základních transportních procesů:

- advekce – transport rozpuštěné látky stejnou rychlostí, jakou se pohybuje proudící podzemní voda popsáný advekčním členem transportní rovnice,
- disperze (hydrodynamická disperze) jako suma mechanické disperze a molekulární difúze,
- lineární nebo nelineární sorpce,
- reakce prvního řádu reprezentující radioaktivní rozpad nebo biodegradaci.

Základními zadávanými transportními parametry horninového prostředí, respektive transportované látky jsou:

- efektivní pórovitost,
- koeficient molekulární difúze pro porézní prostředí,
- objemová hmotnost horninového prostředí,
- koeficienty podélné, příčné a transverzální disperzivity,
- distribuční sorpční koeficient,
- poločas přeměny radionuklidu, případně další reakční koeficienty.

Program MT3DMS umožňuje konceptualizovat transport 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 zvlášť 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 umožněn pomocí koeficientu přestupu hmoty (mass transfer coefficient). Advekční-difúzní model založený na konceptu duálního prostředí je vhodný pro modelování transportu v puklinovém prostředí (konceptem ekvivalentního porézního prostředí) nebo silně heterogenním porézním prostředí než klasický advekční-disperzní model. Samozřejmě za předpokladu, že jsou vhodné charakterizovány obě hodnoty pórovitosti a přestupové koeficienty ve výpočetních buňkách.

Program MT3DMS obsahuje i numerické metody řešení transportních rovnic (kombinace těchto metod řešení, z nichž každá má své silné a slabé stránky, umožňuje řešit transportní problémy s požadovanou účinností a přesností):

- standardní metodu konečných diferencí,
- metody particle-tracking založené Euler-Lagrangeovými metodami,
- TVD (total-variation-diminishing) metodu konečných rozdílů vyžšího řádu.

### **Transport v programu MODFLOW-USG**

Program MODFLOW-USG (modifikovaná verze MODFLOW vyvíjená pro řešení proudění podzemní vody v nestrukturovaných sítích) má k dispozici vlastní transportní modul BCT (Block-Centered Transport Package; Panday 2015). Program MODFLOW-USG je navíc rozšířen o modul CLN (Connected Linear Network), který umožňuje zadání 1D diskrétních prvků do výpočetní sítě (modul pro 2D prvky se upravuje) a je možné řešit proudění podzemní vody souasně v diskrétní síti (DFN) a horninové matici (CPM).

MODFLOW-USG umožňuje řešení základních transportních procesů obdobně jako program MT3DMS – advekci, disperzi, difúzi, sorpci a radioaktivní přeměnu. Transport látek je řešen na stejné výpočetní síti (strukturované nebo nestrukturované doplněné o diskrétní prvky) jako model proudění podzemní vody. Komunikaci CLN domény s diskrétními prvky a GWF maticí řeší speciální přechodový člen transportní rovnice.

K řešení advekce - disperzní rovnice je použita plně implicitní CVFD metoda (Control Volume Finite Difference). TVD schéma (Total Variation Diminishing) je použito pro řešení advekčního členu. K numerickému řešení matic jsou použity solvery GMRES, GCG, ORTOFEM a XMD.

### 3.2.3 Flow123d

#### Základní charakteristika

Program Flow123d je vyvíjen kolektivem pracovníků Technické univerzity v Liberci. Současná stabilní verze má označení Flow123d 1.8.2. Informace o programu v uživatelském manuálu (Béza et al. 2015) a možnosti stažení jsou k dispozici z webové adresy <https://flow123d.github.io/>.

Program Flow123d je softwarový nástroj pro simulaci termálních, hydrologických a chemických (THC) procesů v rozpukaném porézním prostředí. Podporované fyzikální modely zahrnují: Darcyovské proudění, transport látek, jejich reakce, fyzikální a chemické interakce s horninou a vedení tepla. Program je schopen popsat explicitně procesy v 3D médiu, 2D puklinách a 1D liniích a komunikaci mezi těmito doménami různých dimenzí. Tento přístup umožňuje výpočty v regionálním měřítku se zahrnutím vlivu jemných struktur s výrazně odlišnými materiálovými parametry, například geologických zlomů. Zejména je vhodný pro modelování transportních procesů v úložných masivech s komplexní geologickou strukturou.

Aktuálně používaná verze Flow123d 1.8.2 byla vydaná v roce 2014. K dispozici jsou verze pro systémy Windows 32-bit, Windows 64-bit a Linux. Samotný simulátor je program spuštěný z příkazové řádky. Pro přípravu sítí, vizualizaci výsledků a další podpůrné funkce související s přípravou a analýzou konkrétních modelů jsou pak využívány softwary druhých stran, jako jsou GMSH (Geuzaine a Remacle, GMSH, online), SALOME (SALOME home, online) ParaView (ParaView home, online) a další. Simulační software Flow123d je založen na metodě konečných prvků. Vzhledem k tomu, že pro výpočet proudění je využívána smíšená hybridní metoda zajistí tento SW, oproti jiným konečným prvkovým kódům, lokální hmotovou bilanci a umožňuje hmotovými bilancovat jednotlivé části modelované oblasti.

#### řešené procesy transportu

##### **Advekce - difúzní model transportu rozpuklinových látek**

Model transportu látky rozpuklinové v podzemní vodě ve Flow123d vychází z rovnice advekce-difúze

$$\partial_t(\delta \mathcal{G} c^i) + \text{div}(\mathbf{q} c^i) - \text{div}(\delta \mathcal{G} \mathbf{D} \nabla c^i) = F_s^i + F_c^i(c^i), \quad (1)$$

kde horní index  $i$  představuje identifikátor transportované/rozpuštěné látky;

$c^i$  [kg m<sup>-3</sup>] je koncentrace  $i$ -té látky, tj. hmotnost látky na jednotku objemu vody;

$\delta$  [m<sup>3-k</sup>] je rozevnění, tj.  $\delta = \delta_3 = 1$  [.] pro 3D doménu,  $\delta = \delta_2$  [m<sup>1</sup>] je rozevnění pukliny pro

2D doménu a  $\delta = \delta_1$  [m<sup>2</sup>] je průřez kanálu pro 1D doménu;

$\mathcal{G}$  [.] je porozita;

$\mathbf{q}$  je vektorové pole makroskopické rychlosti proudění vody;

$\mathbf{D}^i$  [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ] je tenzor hydrodynamické disperze; model obecně předpokládá pro každou látku jinou hydrodynamickou disperzi, nicméně v praxi je často uvažováno, že je určena pouze vlastnostmi porézního média;

$F_S^i$  [ $\text{kg}\text{m}^{-k}\text{s}^{-1}$ ] ( $k$  značí dimenzi příslušné domény) reprezentuje hustotu zdroj látky;

$F_C^i(c^i)$  [ $\text{kg}\text{m}^{-k}\text{s}^{-1}$ ] ( $k$  značí dimenzi příslušné domény) je hustota zdroj koncentrace vzniklá výměnou látky mezi příslušnými oblastmi různých dimenzí.

Tenzor hydrodynamické disperze  $\mathbf{D}^i$  [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ] má tvar

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

reprezentující (izotropní) molekulární difuzi a mechanickou disperzi v podélném, respektive příčném směru k proudění. Zde  $D_m^i$  [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ] je molekulární difuze  $i$ -té látky,  $\tau = \mathcal{D}^{1/3}$  [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ] je tortuozita,  $\alpha_L^i$  [m] a  $\alpha_T^i$  [m] je podélná, respektive příčná disperzivita a  $\mathbf{v}$  [ $\text{m}\text{s}^{-1}$ ] je mikroskopická rychlost vody daná vztahem  $\mathbf{q} = \mathcal{D}\mathbf{v}$ .

Neznámými jsou koncentrace  $c^i$  jednotlivých látek rozpustných v podzemní vodě. Pro řešení konkrétní úlohy je nutné zadat počáteční podmínku a okrajové podmínky. Možné je zadat Dirichletovu, Neumanovu nebo Robin/Newtonovu okrajovou podmínku.

### **Zobecný reakční člen**

Zobecný reakční člen zahrnuje společně s transportem rozpustných látek výpočet sorpce, duální porozity a jednoduchých reakcí. Pro tyto procesy je použita metoda ztenčení operátoru s možností kombinovat jednotlivé dílčí modely. V jednom časovém kroku se nejprve spočítá transport látky bez dalších vlivů a následně jsou v každém elementu spočteny modely reakčního členu: nerovnováhná výměna s duálními póry, rozpady a jednoduché reakce v primárních i duálních pórech v rozpustné i sorbované fázi a nakonec je spočtena rovnováhová sorpce v primárních i duálních pórech. Tyto modely je možno kombinovat.

### **Duální porozita**

Model duální porozity umožňuje popsat retenční vlastnosti slepých pórů a puklin, které se efektivně projevují při simulacích ve velkém měřítku. Porézní médium je rozděleno na mobilní zónu, mobilní porozita  $\mathcal{G}_m$  [.] ( $\mathcal{G}_m$  odpovídá porozitě  $\mathcal{G}$  pro výpočet transportu), a imobilní zónu, imobilní porozita  $\mathcal{G}_i$  [.]. Mezi póry mobilní a imobilní zóny nedochází k proudění vody, ale dochází k výměně látky difúzí. Tato nerovnováhná výměna je řízena jednoduchou lineární soustavou obyčejných diferenciálních rovnic:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_m \partial_t c_m &= D_{dp} (c_i - c_m) \\ \mathcal{G}_i \partial_t c_i &= D_{dp} (c_m - c_i), \end{aligned} \quad (3)$$

kde  $c_m$  [ $\text{kg}\text{m}^{-3}$ ] je koncentrace látky v mobilní zóně,  $c_i$  [ $\text{kg}\text{m}^{-3}$ ] je koncentrace látky v imobilní zóně a  $D_{dp}$  [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ] je koeficient difúze mezi oběma zónami (mobilní a imobilní).

### Sorpce

Výpočet rovnovážné sorpce pro jednu látku spoívá v řešení soustavy rovnic sestávající z bilance hmoty,

$$\vartheta \rho_l c_l + (1 - \vartheta) \rho_s M_s c_s = c_T = \text{const} \quad (4)$$

a z empirického vztahu nazývaného sorpní izoterma:

$$c_s = f(c_l). \quad (5)$$

V těchto rovnicích jsou neznámé hmotnostní koncentrace látky v roztoku  $c_l$  [.] a molární koncentrace látky v hornině  $c_s$  [mol·g<sup>-1</sup>], další veličiny jsou hustota roztoku (vody)  $\rho_l$  [kg·m<sup>-3</sup>], hustota horniny  $\rho_s$  [kg·m<sup>-3</sup>], molární hmotnost sorbující látky  $M_s$  [mol·g<sup>-1</sup>] a celková koncentrace  $c_T$  [kg·m<sup>-3</sup>]. Po výpočtu transportu látky je porušena sorpní rovnováha, z rovnice bilance hmoty se vypočte celková koncentrace (celková hustota hmotnosti látky) a pak se naleznou nové rovnovážné hodnoty  $c_s$ ,  $c_l$ .

Momentálně jsou implementovány lineární, Langmuierova a Freundlichova izoterma. Použitá implementace umožňuje počítat i nelineární sorpce stejně efektivně jako lineární. Použitá metoda respektuje možnost zadávat všechny parametry pomocí 2D-prostorových polí, nicméně pro případ parametrů konstantních na dílčích regionech je implementován výpočet pomocí předpočítaných interpolací, který umožňuje efektivní výpočet jak pro lineární tak nelineární sorpní izotermy.

### Metoda výberu transportní cesty

Transportní model ve Flow123d implementuje plný transport (transport koncentrace). Výsledkem výpočtu transportu je časový vývoj koncentrace v bodech sítě (i v jejích elementech). Simulátor nezahrnuje částicový transport (particle tracking method) a nelze tak přímo generovat transportní cesty (flowpath) ze zadaného umístění. Pro generování transportních cest je nutná následná analýza výpočtu proudění v jiných softwarech nebo případná analýza výpočtu proudění a advekčního transportu prostřednictvím skriptu vytvořeného pro tyto účely. Metodu particle tracking pak zahrnuje například software ParaView (ParaView home, online), který je běžně používaný pro vizualizaci výsledků poskytovaných Flow123d simulátorem. Na Technické univerzitě v Liberci je mimo zakázkový list vyvíjen software Flow123d-PT, který bude využíván právě pro hledání transportních cest s využitím výstupů Flow123d (výsledků transportu). Pro tento software jsou paralelně rozpracovávány dva možné přístupy k řešení dané problematiky. První z přístupů je založen na výpočtu hladin významnosti na základě výstupů výpočtu proudění a transportu (rychlosti a koncentrace na elementech). Druhý z přístupů je založen na opakovaném spouštění výpočtu transportu ve Flow123d a vyhodnocování jeho výstupů. Konkrétně ve své stávající podobě, která není aktuálně konečná, funguje tak, že na vybraný element (zdroj kontaminace) je nadefinována jednotková počáteční koncentrace. Následně je spuštěn výpočet transportu s předem krátkou simulační periodou a jsou vyhodnoceny výsledky v tom smyslu, že je hledán ten element sítě, na kterém je koncentrace nejvyšší (kromě elementu zdrojového). Následně je ověřeno, že tento element sousedí s elementem zdrojovým. Je-li tomu tak, pak je tento element přidán do transportní cesty a označen jako zdrojový pro další krok výpočtu (je na něm nastavena jednotková koncentrace a výpočet



je opatřeno spuštěním). Takto je postupováno do doby, kdy transportní cesta vyústí na hranici modelované oblasti. Výstup je dostupný jak ve formě posloupnosti ID elementů transportní cesty, tak ve formě vizualizace v rámci výpočetní sítě. Výhodou tohoto postupu je jeho aplikovatelnost na plný transport (včetně difuze, sorpce, atd.). Předpokládaný termín dokončení tohoto programu je třetí čtvrtletí roku 2015.

### Shrnutí

Simulátor Flow123d je nástroj využitelný pro výpočty proudění a transportu v horninovém prostředí. Základními implementovanými procesy jsou: ustálené i neustálené proudění, advekce, difúze a mechanickou disperze, sorpce, radioaktivní rozpad a vznik látek, difúze do slepých pórů. Jedná se o software, který realizuje zadané simulace. Pro přípravu vstupních dat a analýzu a vizualizaci výsledků je nutné zajistit pomocí dalších podpůrných softwarových nástrojů. Obdobně generování transportních cest není integrováno interně ve Flow123d, nicméně lze z výsledků simulací stanovit.

### 3.2.4 FEFLOW

Pro výběr preferenční cesty bude v průběhu řešení projektu použit počítačový program FEFLOW ve verzi 6.0.

FEFLOW (současná verze 6.2) je program pro numerickou simulaci proudění podzemní vody a transportu látek a tepla v horninovém prostředí. Program je založen na metodě konečných prvků. Umožňuje simulovat procesy jako je ustálené i vase proměnlivé proudění podzemní vody, procesy v proměnlivě nasyceném porézním prostředí (příemopí simulaci v nenasyčeném prostředí je možno zohlednit hysterezi retenční křivky), hustotně závislé proudění jako funkce teploty a koncentrace, proudění tepla a rozpouštění látek a procesy v rozpukaném horninovém prostředí. Program umožňuje simulovat a zobrazovat procesy jak v dvourozměrné, tak třírozměrné dimenzi. Transport látek může zahrnovat mechanismy pohybu jako je advekce, disperze, sorpce, retardace, v průběhu transportu může docházet k chemickým reakcím a degradaci látek (DHI-Wasy GmbH 2012).

Program obsahuje pokročilé algoritmy pro generování sítě konečných prvků, síť může být jak strukturovaná (obdélníkové elementy) i nestrukturovaná (trojúhelníkové elementy). Program umožňuje řešit procesy v rozsáhlých oblastech se složitou geologickou stavbou a topografií povrchu, model může obsahovat více než 1 milion uzlů.

Program podporuje řadu formátů pro načítání vstupních dat, jako jsou výstupy z programu GIS (.shp), rastrové mapové vrstvy, podklady z programu AutoCAD atd. Rovněž materiálové parametry mohou být načteny jako vstupní soubory z databáze i přímo zadávány v programu FEFLOW.

Horninové prostředí je charakterizováno pomocí materiálových parametrů, příemopí pro proudění podzemní vody je nejdůležitějším parametrem hydraulická vodivost, která může vykazovat anizotropii. Ostatní parametry jsou uvažovány jako izotropní. Materiálové parametry, stejně jako okrajové podmínky, mohou být vase proměnné. Program umožňuje také odhad parametrů, například pro řešení transportu tepla (sorpční křivky) i proudění v proměnlivě nasyceném prostředí (retenční křivky).

Horninové prostředí může být nahrazeno ekvivalentním porézním médiem i může obsahovat 1D a 2D strukturní prvky, jako jsou zlomy, trhliny nebo inženýrské prvky (tunely,

zachty). Proudění je v porézním prostředí řízeno Darcyho zákonem, v 1D/2D strukturních prvcích pak Darcyho zákonem, Hagen-Poiseuilleovým zákonem i Manning-Stricklerovým zákonem.

Výsledkem úlohy výpočtu proudění je rozložení hydraulické výšky v modelové oblasti, výsledkem řešení transportu látek pak rozložení koncentrací. Na základě výpočtu proudění podzemní vody pak program metodou particle tracking zobrazuje proudnice (transportní cesty) jednotlivých částic, kdy výsledkem je poloha bodu a vektor rychlosti pohybu v jednotlivých časových krocích (Obr. 44). Pokud je k výpočtu transportu látek použit přístup výpočtu rozložení koncentrací v modelové oblasti, shodují se výsledky metody particle tracking s metodou odečtu transportní dráhy z maximálních koncentrací v daném místě modelové oblasti. Výsledky mohou být zobrazovány přímo v programu FEFLOW nebo exportovány do specializovaných programů (GIS, AutoCAD, Excel, Surfer, Geac, ...).

## 4 Závěr

Tato zpráva se zabývá rezervními zahraničními pracemi, které jsou určeny k výběru transportních cest a k popisu transportu radionuklidů v horninovém prostředí v souvislosti s umístěním HÚ. Vzhledem k předpokládané hostitelské hornině (granit) pro uložení vyhořelého jaderného odpadu a vysoko-aktivního odpadu, vycházely rezervované práce zejména z prací SKB (Švédsko), Posiva (Finsko) a NAGRA (Švýcarsko). Jedinou u Švýcarska se hostitelská hornina ličila (sedimentární hornina), nicméně metodika použitá v tomto případě je přenosná i na krystalické horniny. Pro každou zemi jsou rezervy zaměřeny na popis kandidátní lokality i lokalit, popis přítomných horninových typů, popis počítačového programu použitého pro výběr transportních cest, popis metody výběru transportních cest, popis použitého výpočetního programu pro simulaci transportu radionuklidů a způsob napojení těchto programů na hydrogeologické, strukturně-geologické modely a na modely hodnocení bezpečnosti.

Z hodnocených prací jasně vyplývá, že autoipiezení v závislosti na fázi hodnocení lokality a dostupných datech používají různá a odpovídající modelové přístupy, jako například v regionálním měřítku aplikaci ECPM/CPM modelu, v lokálním měřítku DFN model apod. Transport je obvykle řešen pomocí kombinace metod particle tracking a pomocí advektivních disperzních rovnic (tzv. "úplný" transport). Zajímavá je klasifikace rozpukaneho horninového masivu ve finském kontextu, která umožňuje detailně zohlednit heterogenitu v mnoha parametrech. Tento přístup je významným náročným na data o migračních vlastnostech hornin (sorpce, difúze).

Pro modelování transportu radionuklidů na 7 lokalitách českého masivu jsou modelové práce koncipovány v regionálním i detailním měřítku. V souladu s rezervovanými zahraničními postupy bude transport radionuklidů (a proudění podzemní vody) simulován především při využití konceptu ekvivalentního kontinuálního pórového média, kdy zadané modelové parametry budou reprezentovat transport (a proudění) v rozpukaneho horninového masivu. Modelová charakterizace rozpukání, odvozená z dostupných dat a z předpokladů o náchylnosti jednotlivých litotypů k vytváření protočných puklin, je pro výsledky modelových prací zásadní.

Významná část vstupních modelových informací bude získána pomocí expertního úsudku utvářeného i na předpokladech analogie s jinými hlubinně prozkoumanými lokalitami. V úvodních fázích zpracování transportních modelů budou využita nově interpretovaná archivní data prostředí 3D strukturně-geologických modelů jednotlivých lokalit. V průběhu zpracování transportních modelů je projektováno doplnit vstupní informace modelových území prostředí povrchového průzkumu.

Obdobně jako v dokumentovaných zahraničních pracích bude identifikace transportních cest provedena v postupném režimu vymezení infiltračních a drenážních oblastí zájmových území při využití metod particle tracking. Návazně budou na základě geometrických informací o situování úložiště vymezeny oblasti možného dotoku radionuklidů. Doplnující informace o rychlosti, hmotnostním toku a časové distribuci koncentrací radionuklidů budou stanoveny pomocí zvolených simulací advektivně-disperzivního transportu vybraných radionuklidů v horninovém prostředí.

Porovnání výsledků transportních modelů jednotlivých lokalit proběhne na základě hodnocení odsouhlaseného zadavatelem. Modelové výsledky budou interpretovány v souvislosti s nejistotami vstupních dat. Transport radionuklidů bude simulován paralelně při využití výpočetních kódů založených na MODFLOW a MT3D, Flow123d a FEFLOW.

## 5 Seznam literatury

- ABBEY D., ZHANG B., GABRIEL C., MARTIN P., JAMES S., ARNOLD W., ANDREACHEK R., WOESSNER W. (2009): Application of singular value decomposition and regularization techniques for optimization of a highly parametrized FEFLOW model. Proc. Of the 2nd FEFLOW User Conference, Postdam.
- ANTTILA P., AHOKAS H., FRONT K., HINKKANEN H., JOHANSSON E., PAULAMÄKI S., RIEKKOLA R., SAARI J., SAKSA P., SNELLMAN M., WIKSTRÖM L., ÖHBERG A. (1999): Final Disposal of Spent Nuclear Fuel in Finnish Bedrock . Olkiluoto Site Report, POSIVA 99-10. 206 s. . Posiva Oy, Olkiluoto, Finsko, ISBN 951-652-065-0
- AVILA R., EKSTRÖM P.-A., ÅSTRAND P.-G. (2010): Landscape dose conversion factors used in the safety assessment SR-Site. SKB TR-10-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- BARTEN W., ROBINSON P.C (2001): Contaminant transport in fracture networks with heterogeneous rock matrices: The PICNIC code. Nagra Technical Report NTB 01-03. Nagra, Wetingen, Switzerland.
- B EZINA J., STEBEL J., FLANDERKA D., EXNER P., HNÍDEK J. (2015): Flow123d, version 1.8.2, Documentation of file formats and brief user manual. 102 s. . Faculty of Mechatronics Informatics and Interdisciplinary Studies, Technical University of Liberec, Liberec. . [online] 2. 4. 2015 [cit. 2015-04-08] Dostupné z: <http://flow123d.github.io/>
- CLEMENT, T.P. (1997): A modular computer model for simulating reactive multi-species transport in three-dimensional ground water systems. Draft Report, PNNL-SA-28967. Richland, Washington: Pacific Northwest National Laboratory.
- CLEMENT, T.P. (2003): RT3D v2.5 Updates to User's Guide. Richland, Washington: Pacific Northwest National Laboratory.
- CRAWFORD J. (2008): Bedrock transport properties Forsmark. Site descriptive modelling, SDM-Site Forsmark. SKB R-08-48, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- DHI-WASY GMBH (2012): DHI- Wasy software FEFLOW 6.1 Finite Element Subsurface Flow and Transport Simulation System, User manual. Berlin, 116s.
- FOLLIN S., HARTLEY L., JOYCE S., MARSIC N. (2008): Regional hydrogeological modelling for Forsmark stage 2.3: Conceptual model development and numerical modelling using CONNECTFLOW. SKB R-08-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- FOLLIN S., STIGSSON M., SVENSSON U. (2005): Regional hydrogeological simulations for Forsmark . numerical modelling using DarcyTools. Preliminary site description Forsmark area . version 1.2. SKB R-05-60, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- GEUZAINÉ C., REMACLE J-F. (2015): GMSH . a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, Version 2.9.2, 2015. GMSH web. [online] 31. 3. 2015 [cit. 2015-04-08] Dostupné z: <http://geuz.org/gmsh/>
- GEUZAINÉ C., REMACLE J-F. (2015): GMSH Reference Manual, The documentation for Gmsh 2.9, A finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. 284 s. . [online] 1. 4. 2015 [cit. 2015-04-08] Dostupné z: <http://geuz.org/gmsh/doc/texinfo/gmsh.pdf>
- GMUENDER C., MALAGUERRA F., NUSCH S., TRABER D. (2014): Arbeitsbericht NAB 13-23, Regional Hydrogeological Model of Northern Switzerland, August 2014
- HAKANEN M., ERVANNE H., PUUKKO E. (2014): Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto: Radionuclide Migration Parameters for the Geosphere, POSIVA-2012-41. 378 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-221-3.



- HARBAUGH, A.W. (2005): MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey modular groundwater model, The Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16. Reston, Virginia.
- HARTLEY L, HOCH A, JACKSON P, JOYCE S, MCCARTHY R, SWIFT B, GYLLING B, MARSIC N, (2006): Groundwater flow and transport modelling during the temperate period for the SR-Can assessment. Laxemar subarea . version 1.2. SKB R-06-99, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- HARTLEY L., HOCH A., HUNTER F., JACKSON P., MARSIC N. (2005): Regional hydrogeological simulations . Numerical modelling using Connectflow, Preliminary site description Simpevarp subarea . version 1.2, SKB R-05-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- HEIKKINEN, E., HEINONEN, S., RAVIMO, I. (2011): Semi-Automated Fracture Classification Procedure Based on Geophysical Drillhole Logging Data, Working Report 2011-88. 125 s. . Posiva Oy, Olkiluoto, Eurajoki, Finland.
- HESCH, W. (2014): Particle tracking for MODFLOW-USG: A demonstration of mod-PATH3DU runs using Visual MODFLOW Flex. [online blog]. 30 July 2014 [cit. 2014-07-30]. Dostupné z: <http://www.novametrixgm.com/blogs/particle-tracking-for-modflow-usg-a-demonstration-of-mod-path3du-runs-using-visual-modflow-flex>
- JOYCE S, SIMPSON T, HARTLEY L, APPLGATE D, HOEK J, JACKSON P, SWAN D, MARSIC N, FOLLIN S. (2010): Groundwater flow modelling of periods with temperate climate conditions . Forsmark. SKB R-09-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- LANDA J., TRPKOŇOVÁ D., HAVLOVÁ V., GONDOLLI J. (2015): Analýza stávajícího modelu hlubinného úložiště, PB-2014-PZ-S2303-006-Transport2, ÚJV e0, a. s., 154 str.
- LANGEVIN, C.D., THORNE D.T., DAUSMAN A.M., SUKOP M.C., GUO W. (2007): SEAWAT version 4, A computer program for simulation of multi-species solute and heat transport. U.S. Geological Survey Techniques and Methods Book 6, chap. A22, 39p. Reston, Virginia.
- LINDGREN M., GYLLING B., ELERT M. (2002): FARF31 Version 1.2 . User's guide. SKB TS-02-03, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- LÖFMAN J. (1999): Site Scale Groundwater Flow in Olkiluoto, POSIVA 99-03. 121 s. . Posiva Oy, Helsinki, Finsko, ISBN 951-652-058-8.
- LÖFMAN J. (2000): Site Scale Groundwater flow in Olkiluoto . Complementary Simulations, POSIVA 2000-07. 34 s. . Posiva Oy, Helsinki, Finsko, ISBN 951-652-093-6.
- LUO J., MONNINGKOFF B., BECKER J. K (2014): Hydrogeological model Zürich Nordost and Sudranden- Modelling and Interpretation. Nagra Arbeitsbericht NAB 13-24
- LUO J., MONNINGKOFF B., BECKER J. K (2014): Hydrogeological model Zurich Nordost and Sudranden- Modelling and Interpretation. Nagra Arbeitsbericht NAB 13-24
- MUFFELS, C., WANG X., TONKIN M., NEVILLE C. (2014): User's Guide for mod-PATH3DU, A groundwater path and travel-time simulator. S.S. Papadopoulos & Associates Inc. Bethesda, Maryland. Waterloo, Ontario.
- NAGRA (1993): Endlager für kurzlebige schwach- und mittelaktive Abfälle (Endlager SMA), Beurteilung der Langzeitsicherheit des Endlagers SMA am Standort Wellenberg (Gemeinde Wolfenschiessen), Nagra Technischer Bericht 93-26.
- NAGRA (2014a): Technischer Bericht 14-02, SGT Etappe 2: Vorschlag weiter zu untersuchender geologischer Standortgebiet mit zugehörigen Standortarealen fuer die Oberflaechenanlage, Geologische Grundlagen, Dossier V, Hydrogeologische Verhaeltnisse, Dezember 2014
- NAGRA (2014b): Technical report 14-09, Provisional Safety Analyses for SGT Stage 2, Model, Codes and General Modelling Approach, Dezember 2014

- NAGRA, 2014c. Provisional Safety Analyses for SGT Stage 2. Models, Codes and General Modelling Approach. TR-14-09, Dezember 2014.
- NYKYRI M., NORDMAN H., MARCOS N., LÖFMAN J., POTERI A., HAUTOJÄRVI. A. (2008): Radionuclide Release and Transport . RNT-2008, POSIVA 2008-06. 164 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-166-3.
- PAINTER S., MANCILLAS J. (2009): MARFA version 3.2.2 user's manual: migration analyses of radionuclides in the far-field. SKB R-09-56, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- PANDAY, S. (2015): MODFLOW-USG Transport. Nепublikováno.
- PANDAY, S., LANGEVIN, C.D., NISWONGER, R.G., IBARAKI, M., HUGHES, J.D. (2013): MODFLOW-USG version 1: An unstructured grid version of MODFLOW for simulating groundwater flow and tightly coupled processes using a control volume finite difference formulation: U.S. Geological Survey, Techniques and Methods 6 A45. Reston, Virginia.
- ParaView home. ParaView. [online] 8. 4. 2015 [cit. 2015-04-08] Dostupné z <http://www.paraview.org/>
- PARKHURST, D.L., APPELO C.A.J. (1999): User's guide to PHREEQC (Version 2), A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. U.S. Geological Survey WaterResources Investigations Report 99-4259. Reston, Virginia, USGS.
- POLLOCK, D.W. (1989): Documentation of a computer program to compute and display pathlines using results from the U.S. Geological Survey modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model: U.S. Geological Survey Open-File Report 89. 381.
- POLLOCK, D.W. (2012): User's guide for MODPATH version 6, A particle-tracking model for MODFLOW: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6. A41, 58p. Reston, Virginia.
- POSIVA OY (2012): Olkiluoto Site Description, POSIVA 2011-02. 1029 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-179-7.
- POSIVA OY (2012b): Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto . Synthesis 2012, POSIVA 2012-12. 277 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-193-3.
- POSIVA OY (2012c): Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto . Assessment of Radionuclide Release Scenarios for the Repository System 2012, POSIVA 2012-09. 443 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-190-2.
- POTERI A., LAITINEN M. (1999): Site-to-Canister Scale Flow and Transport in Hästholmen, Kivetty, Olkiluoto and Romuvaara, POSIVA 99-15. 156 s. . Posiva Oy, Helsinki, Finsko, ISBN 951-652-070-7.
- POTERI A., NORDMAN H., PULKKANEN V.-M., HAUTOJÄRVI A., KEKÄLÄINEN P. (2012): Representing solute transport through the multi-barrier disposal system by simplified concepts, POSIVA 2012-20. 100 s. . Eurajoki, Finland: Posiva Oy. ISBN 978-951-652-201-5.
- POTERI A., NORDMAN H., PULKKANEN, V.-M., SMITH P. (2014): Radionuclide Transport in the Repository Near-Field and Far-Field, POSIVA 2014-02. 336 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-240-4.
- PROMMER, H., POST V. (2010): PHT3D, A Reactive Multicomponent Transport Model for Saturated Porous Media, User's Manual v2.10.
- PULKKANEN V.-M., NORDMAN H. (2010): Modelling of Near-Field Radionuclide Transport Phenomena in a KBS-3V Type of Repository for Nuclear Waste with Goldsim Code . and Verification Against Previous Methods, POSIVA 2010-14. 37 s. . Posiva Oy, Eurajoki, Finsko

- RHÉN I., FORSMARK T., HARTLEY L., JACKSON C. P., JOYCE S., ROBERTS D., SWIFT B., MARSIC N., GYLLING B. (2009): Bedrock Hydrogeology: model testing and synthesis, Site descriptive modelling. SDM-Site Laxemar. SKB R-08-91, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- RHÉN I., HARTLEY L., (2009): Bedrock hydrogeology Laxemar, Site descriptive modelling, SDM-Site Laxemar. SKB R-08-92, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SALOME home. SAMOME . the Open Source Integration Platform for Numerical Simulation. [online] 15. 6. 2015 [cit. 2015-06-15]
- SERCO (2009a): CONNECTFLOW Release 9.7 Technical Summary Document, Serco Technical and Assurance Services report SA/ENV/CONNECTFLOW/15.
- SERCO (2009b): NAMMU Release 9.7 Technical Summary Document, Serco Technical and Assurance Services report SA/ENV/CONNECTFLOW/8.
- SERCO (2009c): NAPSAC Release 9.7 Technical Summary Document, Serco Technical and Assurance Services report SA/ENV/CONNECTFLOW/12.
- Severýn O. (2002): Model proudění a transportu látek v puklinovém prostředí, disertační práce. 115 s. . Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Liberec.
- SKB (2004a): Preliminary site description Forsmark area. version 1.1. SKB R-04-15, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2004b): Preliminary site description Simpevarp area . version 1.1. SKB R-04-25, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2005a): Preliminary site description. Simpevarp subarea . version 1.2. SKB R-05-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2005b): Preliminary site description Forsmark area - version 1.2. SKB R-05-18, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2006a): Preliminary site description. Laxemar subarea . version 1.2. SKB R-06-10, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2006b): Preliminary safety evaluation for the Laxemar subarea. Based on data and site descriptions after the initial site investigation stage, SKB TR-06-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2008): Site description of Forsmark at completion of the site investigation phase. SDM-Site Forsmark. SKB TR-08-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2010): Radionuclide transport report for the safety assessment SR-Site. SKB TR-10-50, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB (2014): Radionuclide transport and dose calculations for the safety assessment SR-PSU. TR-14-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- STEPHENS M. B., FOX A., LA POINTE P. R., ISAKSSON H., SIMEONOV A., HERMANSON J., ÖHMAN J. (2007): Geology . Site descriptive modelling Forsmark stage 2.2. SKB R-07-45, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SVENSSON U. (2010): DarcyTools Version 3.4 . Verification, validation and demonstration. SKB R-10-71, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SVENSSON U., FERRY M. (2010): DarcyTools Version 3.4 . User's Guide. SKB R-10-72, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SVENSSON U., FERRY M., KUYLENSTIERNA H-O. (2010): DarcyTools Version 3.4 . Concepts, methods and equations. SKB R-07-38, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- THEGERSTRÖM C., ENGSTRÖM S., L. (2013): Deep geological disposal of nuclear waste in the Swedish crystalline bedrock. atw Vol. 58 Issue 6. pp. 359-363

Úvod do JSON. JSON. [online] 24. 3. 2015. [cit. 2015-04-08] Dostupné z: <http://json.org/json-cz.html>

VAHLUND F., HERMANSSON H. (2006): Compulink. Implementing the COMP23 model in Simulink. SKB R-06-86, Svensk Kärnbränslehantering AB.

WAHLGREN C-H., CURTIS P., HERMANSON J., FORSSBERG O., ÖHMAN J., FOX A., LA POINTE P., DRAKE H., TRIUMF C-A., MATTSSON H., THUNEHED H., JUHLIN C., (2008): Geology Laxemar. Site descriptive modelling. SDM-Site Laxemar. SKB-R-08-54, Svensk Kärnbränslehantering AB.

WAHLGREN C-H., HERMANSON J., CURTIS P., FORSSBERG O., TRIUMF C-A., DRAKE H., TULLBORG E.-L. (2005): Geological description of rock domains and deformation zones in the Simpevarp and Laxemar subareas. Preliminary site description, Laxemar subarea, version 1.2. SKB P-05-69, Svensk Kärnbränslehantering AB.

WIDDOWSON, M.A. (2002): SEAM3D, A numerical model for three-dimensional solute transport coupled to sequential electron acceptor-based biological reactions in groundwater. Documentation and user's guide. Vicksburg, Mississippi: U.S. Army Engineer Research and Development Center.

WWW stránky

ZHENG, C. (2009): Recent Developments and Future Directions for MT3DMS and Related Transport Codes. *Groundwater*, 47: 620-625. doi: 10.1111/j.1745-6584.2009.00602.x.

ZHENG, C. (2010): MT3DMS v5.3, A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; 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.

ZHENG, C., 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's guide. U.S. Army Engineer Research and Development Center Contract Report SERDP-99-1, Vicksburg, MS, 202 p.



# NAŠE BEZPEČNÁ BUDOUCNOST



**SÚRAO**

Správa úložišť radioaktivních odpadů

Dlážděná 6, 110 00 Praha 1

Tel.: 221 421 511, E-mail: [info@surao.cz](mailto:info@surao.cz)

[www.surao.cz](http://www.surao.cz)