

Technická zpráva číslo 185/2017

POPIS VÝVOJE MODELU TRANSPORTU C-14 Z HLUBINNÉHO ÚLOŽIŠTĚ

Autoři: Aleš Vetešník, Dan Reimitz, Dušan
Vopálka

KJCH, FJFI, ČVUT v Praze

Praha, leden 2017



POPIS VÝVOJE MODELU TRANSPORTU C-14 Z HLUBINNÉHO ÚLOŽIŠTĚ

ŘEŠITELÉ:

KJCH, FJFI, ČVUT v Praze

Autoři: Aleš Vetešník, Dan Reimitz, Dušan Vopálka



Obsah

1	Úvod	10
2	Model transportu C-14 z hlubinného úložiště	11
2.1	Konceptuální model transportu C-14 polem blízkých interakcí	11
2.2	Konceptuální model transportu C-14 geosférou	13
2.3	Implementace modelu v GoldSim	13
2.3.1	Vstupní parametry (InputParameters)	14
2.3.2	Materiály (Material)	14
2.3.3	Transportní model (ContaminantTransport)	17
2.3.4	Výsledky (Results)	18
3	Vybrané studie implementace transportu C-14 polem blízkých interakcí v GoldSim	18
3.1	Chování zdrojového členu	19
3.2	Vliv vlastností blízkého pole	25
3.3	Studie s neomezenou rozpustností	31
4	Souhrn a diskuze	36
5	Citace a seznam literatury	37
	Přílohy	38
	Příloha A: Implementace difúze a advekce v GoldSim pomocí konečně objemového přístupu	38
5.1.1	Bilanční rovnice elementu <i>Cell pathway</i>	38
5.1.2	Numerické řešení bilančních rovnic sítě <i>Cell pathway</i>	39
5.1.3	Implementace difúze v GoldSim v částečně saturovaném prostředí	40
	Příloha B: Analytické řešení stacionární difúze dvěma vrstvami	41
5.1.4	Hraniční podmínky: na začátku první vrstvy je udržovaná konstantní koncentrace a na konci druhé vrstvy nulová koncentrace	41
5.1.5	Hraniční podmínka: na začátku první vrstvy je udržovaná konstantní koncentrace a na konci druhé vrstvy je definován ekvivalentní tok do proudící pukliny	42
	Příloha C: Metody neurčitostní a citlivostní analýzy	43

 SÚRAO	Popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště	Evidenční označení:
		185/2017

Seznam obrázků:

Obr. 1 Zjednodušený konceptuální model založený na difúzním transportu homogenními vrstvami.....	12
Obr. 2 Alternativní konceptuální model zohledňující vliv lokalizace zdroje.....	12
Obr. 3 Schéma implementace alternativního konceptuálního modelu v prostředí GoldSim.	13
Obr. 4 Implementace modelu geosféry v GoldSim.....	13
Obr. 5 Grafická reprezentace základní struktury implementovaného modelu v GoldSim.	14
Obr. 6 Záložka PF vstupního Microsoft Excel souboru InputParameters.xlsx.	15
Obr. 7 Záložka GP vstupního Microsoft Excel souboru InputParameters.xlsx.....	16
Obr. 8 Záložka Flags vstupního Microsoft Excel souboru InputParameters.xlsx.....	16
Obr. 9 Struktura transportního modelu.	17
Obr. 10 Časový vývoj koncentrace C-14 (A) a transportu dostupné hmoty C-14 (B) v kontejneru.	21
Obr. 11 Časový vývoj toků na rozhraní jednotlivých částí modelu. F_{C-B1} označuje tok z kontejneru do první cely Backfill1 , F_{B1-B2} tok z poslední cely Backfill1 do první cely Backfill2 , F_{B2-G} tok z poslední cely Backfill2 do první cely Granit , F_{G-P1} tok z poslední cely Granit do první Pipe sítě puklin, F_{P3-B} tok ze třetí Pipe sítě puklin do rezervoáru (jedna cela o objemu 1000 [m ³]) představující biosféru.....	21
Obr. 12 Časový vývoj koncentrací C-14 ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace z Tab. 2.....	22
Obr. 13 Citlivostní analýza časových vývoje koncentrací C-14 ve volné vodě zdrojového členu.	23
Obr. 14 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely Backfill1 a první cely Backfill2 pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 2.....	23
Obr. 15 Citlivostní analýza časových vývoje toků na rozhraní poslední cely Backfill1 a první cely Backfill2 . Největší vliv na průběh toků má rozpustnost.....	24
Obr. 16 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely Backfill2 a první cely Granit pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 2.....	24
Obr. 17 Citlivostní analýza časových vývoje toků na rozhraní poslední cely Backfill2 a první cely Granit . Největší vliv na průběh toků má rozpustnost.....	25
Obr. 18 Časový vývoj koncentrací ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace minimálních a maximálních hodnot parametrů blízkého pole z Tab. 3.	26
Obr. 19 Srovnání hodnot konstantních toků vypočítaných pomocí rovnice (3.2.1) a pomocí numerického modelu v GoldSim.....	27
Obr. 20 Časový vývoj toků na vnějším okraji transportní cesty.	28
Obr. 21 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř.....	28
Obr. 22 Srovnání hodnot konstantních toků vypočítaných pomocí rovnice (3.2.2) a pomocí modelu v GoldSim.	29

Obr. 23 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely Granit a cely modelující vodu v puklině pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 3.	29
Obr. 24 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř.	30
Obr. 25 Hodnoty konstantních toků vypočítaných v numerické studii s válcovou geometrií a radioaktivním rozpadem.	30
Obr. 26 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely Granit a první Pipe pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 3.	31
Obr. 27 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř.	31
Obr. 28 Časový vývoj koncentrací ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace minimálních a maximálních hodnot parametrů blízkého pole z Tab. 4.	33
Obr. 29 Časový vývoj koncentrací ve volné vodě kontejneru A : rychlost loužení $1 \cdot 10^{-10} [a^{-1}]$ a B : rychlost loužení $0,1 [a^{-1}]$	33
Obr. 30 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř časového vývoje koncentrací ve volné vodě kontejneru.	34
Obr. 31 Časový vývoj toků na rozhraní jednotlivých částí modelu pro referenční hodnoty parametrů.	34
Obr. 32 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely Backfill2 a první cely Granit pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 4.	35
Obr. 33 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř toků na rozhraní poslední cely Backfill2 a první cely Granit	35
Obr. 34 Schématické znázornění pravoúhlé (A) a válcové (B) geometrie sítě cel. Objem cel v pravoúhlé síti cel je definován pomocí souřadnic X, Y a tloušťky. Souřadnice X a Y mohou buď ekvidistantně dělit celkovou délku a šířku oblasti nebo mohou být zadány uživatelem. Objem cel ve válcové síti cel je definován pomocí axiálních Z a radiálních R souřadnic, a úhlu, který může být z intervalu $(0^\circ, 360^\circ)$, přičemž úhel 360° náleží celému válci. Stejně jako v případě pravoúhlé sítě Z a R souřadnice mohou buď ekvidistantně dělit celkovou délku a poloměr válcové oblasti nebo mohou být uživatelem zadány. Převzato a upraveno z (GoldSim 2014).	39
Obr. 35 Profily konstantních $C_1(x)$ (Backfill ₂) a $C_2(x)$ (Granite) vypočítané pro $L_1=0,5$ a $L_2=0,4$ [m], $\varepsilon_1 = 0,35$ a $\varepsilon_2 = 0,01$, $D_w = 1 \cdot 10^{-9} [m^2 s^{-1}]$, $G_1 = 0,7$, $G_2 = 0,8$, $A = 1 [m^2]$, $C_0 = 1,4 \cdot 10^{-6} [kg m^{-3}]$	42
Obr. 36. Profily konstantních $C_1(x)$ (Backfill ₂) a $C_2(x)$ (Granite) vypočítané pro $L_1 = 0,5$ a $L_2 = 0,4$ [m], $\varepsilon_1 = 0,35$ a $\varepsilon_2 = 0,01$, $D_w = 1 \cdot 10^{-9} [m^2 s^{-1}]$, $G_1=0,7$, $G_2=0,8$, $A = 1 [m^2]$, $C_0 = 1,4 \cdot 10^{-6} [kg m^{-3}]$ a $Q_{eq} = 0,8 [l a^{-1}]$	43

Seznam tabulek:

Tab. 1 Soubor neurčitých vstupních parametrů pro citlivostní analýzu transportu uhlíku C-14.	19
Tab. 2 Kombinace hodnot čtyř parametrů zdrojového členu uvažovaných ve studii 3.1.	20
Tab. 3 Parametry blízkého pole, jejichž vliv byl studován ve studii 3.2.	26

 SÚRAO	Popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště	Evidenční označení:
		185/2017

Tab. 4 Parametry uvažované ve studii 3.3.....32

Seznam použitých zkratk:

RAO	radioaktivní odpad
HLW	vysoce aktivní odpad (high-level waste)
HÚ	hlubinné úložiště
SA	citlivostní analýza (sensitivity analysis)
UA	neurčitostní analýza (uncertainty analysis)
UOS	ukládací obalový soubor

Abstrakt

Cílem tohoto projektu je neurčitostní a citlivostní analýza modelu transportu C-14, a případně dalších mobilních radionuklidů, z hlubinného úložiště ostatních radioaktivních odpadů (nepřijitelných do přípovrchových úložišť) do biosféry. Cílem těchto analýz je kvantifikovat vliv neurčitosti vybraných vstupních parametrů na celkovou neurčitost sledovaných výstupů a tím identifikovat kritické parametry. Tato výzkumná zpráva obsahuje jednak popis vývoje modelu transportu C-14 v programovém prostředí GoldSim, tak výsledky třech úvodních screeningových studií. Na základě těchto studií jsou navrženy změny v transportním modelu, které budou implementovány v další etapě vývoje modelu.

Navrhli jsme a implementovali 1D model transportu C-14, který soustřeďuje RAO do jednoho elementu *Source*, který reprezentuje jeden sud. Difúzní transport výplňovým materiálem a horninovým prostředím jsme reprezentovali pomocí 1D sítě elementů *Cell Pathway*, advektivní transport v bezprostředním okolí sudu jsme neuvažovali. Abychom zohlednili heterogenní povahu transportní cesty, cesta je složena ze tří částí, každá část reprezentuje různý materiál, přičemž difúzní cesta v každé části je reprezentována vlastní podsítí elementů *Cell pathway* s volně nastavitelnými difúzními délkami a plochami. Tím vznikl flexibilní model umožňující studovat širokou škálu transportních úloh.

Implementovaný model jsme použili ve třech neurčitostních a citlivostních studiích. První studie byla věnována vlivu čtyř vybraných parametrů zdrojového členu: rychlost loužení, rozpustnost, inventář, volný objem. Studie ukázala, že rozpustnost má největší vliv na časový průběh sledovaných toků. Druhá studie se zaměřila na šest parametrů blízkého pole: K_d výplňového materiálu, K_d horninového prostředí, porozita výplňového materiálu, porozita horninového prostředí, ekvivalentní difúzní tok do proudící vody Q_{eq} , difúzní délka výplňovým materiálem. Třetí studie se zabývala vlivem čtyř parametrů: K_d výplňového materiálu, porozita výplňového materiálu, ekvivalentní difúzní tok do proudící vody Q_{eq} a rychlost loužení. Ve všech případech byly úspěšně identifikovány parametry, které nejvíce přispívají k neurčitostem sledovaných výstupních hodnot.

Na základě screeningových studií navrhujeme tyto úpravy modelu: do modelu budou zavedeny explicitně dvě formy C-14: anorganická a organická, v modelu bude explicitně uvažována možnost difúze v částečně saturovaném prostředí. Jako alternativa bude naprogramován alternativní 2D model ukládací komory a jejího okolí, který bude obsahovat jako zdrojový člen směs RAO – výplňový model.

Klíčová slova

C-14, pole blízkých interakcí, advekce, difúze, sorpce, GoldSim, neurčitostní a citlivostní analýza

Summary

This project is aimed to uncertainty and sensitivity analyses of C-14 transport model, maybe with other potential mobile radionuclides, from deep geological repository for high level waste (unacceptable in near-surface repositories) towards the biosphere. The purpose of these analyses is to quantify the impact of selected input parameters' uncertainty to the total uncertainty of considered outputs. Furthermore, the final goal is to identify the critical parameters. This report consists of an explanation of the development of C-14 transport model in the GOLDSIM programming environment, as well as, of the results of the three initial screening studies. Based on these studies we proposed changes in the transport model that would be implemented in the next stage of model development.

We have proposed and implemented a 1D model of C-14 transport that concentrates HLW in the one *Source* element. The element represents one canister. 1D network of elements *Cell Pathway* represents diffusive transport through BackFill and Rock material. The advective transport is not considered in the vicinity of the canisters. In order to take into account the heterogeneous nature of the transport path, the path was composed of three parts, each part representing different material. The diffusion path in each section is represented by its own subnet of elements *Cell pathway*, enabling freely programmable diffusion lengths and surfaces. Implemented model provides a flexible model to study a wide range of transport tasks.

Implemented model was used for three analyses of uncertainty and sensitivity. The first study was dedicated to the effect of four selected parameters of source element: the leaching rate, solubility, inventory and free volume. The study showed that the solubility has the most important influence on the time course of the computed flows. The second study focused on six parameters of the near field: K_d backfill material, K_d granite, the porosity of backfill material, the porosity of granite, equivalent diffusion flow into the flowing water Q_{eq} , diffusion length of backfill material. The third study examined the effect of four parameters: K_d backfill material, the porosity of backfill material, equivalent diffusion flow into the flowing water Q_{eq} and leaching rate. In all cases we identified successfully the parameters that mostly contribute to the uncertainties of computed flows.

Based on performed screening studies we propose the following modifications to the model: two forms of C-14: organic and inorganic will be included; the model will represent explicitly diffusion in partially saturated environment. As an alternative a 2D model of storage chamber and its surroundings will be develop in GoldSim that will include a mixture of radioactive waste and backfill material as a source.

Keywords

C-14, near field, advection, diffusion, sorption, GoldSim, uncertainty and sensitivity analysis

1 Úvod

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

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

Cílem tohoto dílčího projektu *Hodnocení nejistot transportu radionuklidů z hlubinného úložiště* je provedení neurčitostní analýzy (UA), citlivostní analýzy (SA) a zhodnocení vlivu neurčitosti parametrů ovlivňujících transport C-14 a případně dalších mobilních radionuklidů z hlubinného úložiště ostatních radioaktivních odpadů (RAO), nepřijatelných do přípovrchových úložišť.

Cílem této zprávy je popsat vývoj modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště a úvodní screeningové UA & SA. Při vytváření modelu jsme vyšli z následujícího ukládacího konceptu: RAO s C-14 budou uloženy v kovových sudech, které mohou být ještě vloženy do vnějších kovových sudů, přičemž meziprostor mezi pláští sudů bude v těchto případech vyplněn betonem nebo jiným výplňovým materiálem. Sudy budou uloženy do ukládací komory, která bude vybudována v granitickém horninovém prostředí. Stěny ukládací komory budou případně vyspraveny, aby se zabránilo bezprostřednímu průsaku vody z okolních puklin s proudící vodou. Po uložení sudů do takto připravené komory bude prostor mezi sudy zalit betonem nebo jiným výplňovým materiálem.

Předpokládáme konzervativně, že po selhání kovového obalu dojde k proniknutí vody do volného prostoru v sudu. C-14 se následně vyloučí a bude difúzí migrovat v pórové vodě výplňového materiálu až do pukliny v horninovém prostředí s proudící vodou. Odtud bude C-14 migrovat advekcí systémem puklin až na povrch do biosféry, přičemž migrace bude zpomalena difúzí a sorpcí do horniny. V první fázi vytváření modelu jsme zjednodušeně předpokládali 100% nasycení výplňového materiálu vodou a nepřítomnost proudící vody přímo v ukládací komoře; degradací výplňového materiálu mohou vzniknout v ukládací komoře pukliny s proudící vodou.

Následující druhá kapitola je věnovaná popisu modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště. Nejdříve je uveden konceptuální model a potom je podrobně popsána jeho implementace

v programovém prostředí GoldSim. Ve třetí kapitole jsou uvedeny výsledky třech úvodních screeningových studií. V závěrečné čtvrté kapitole jsou navrženy úpravy modelu, které budou provedeny v následující etapě.

2 Model transportu C-14 z hlubinného úložiště

2.1 Konceptuální model transportu C-14 polem blízkých interakcí

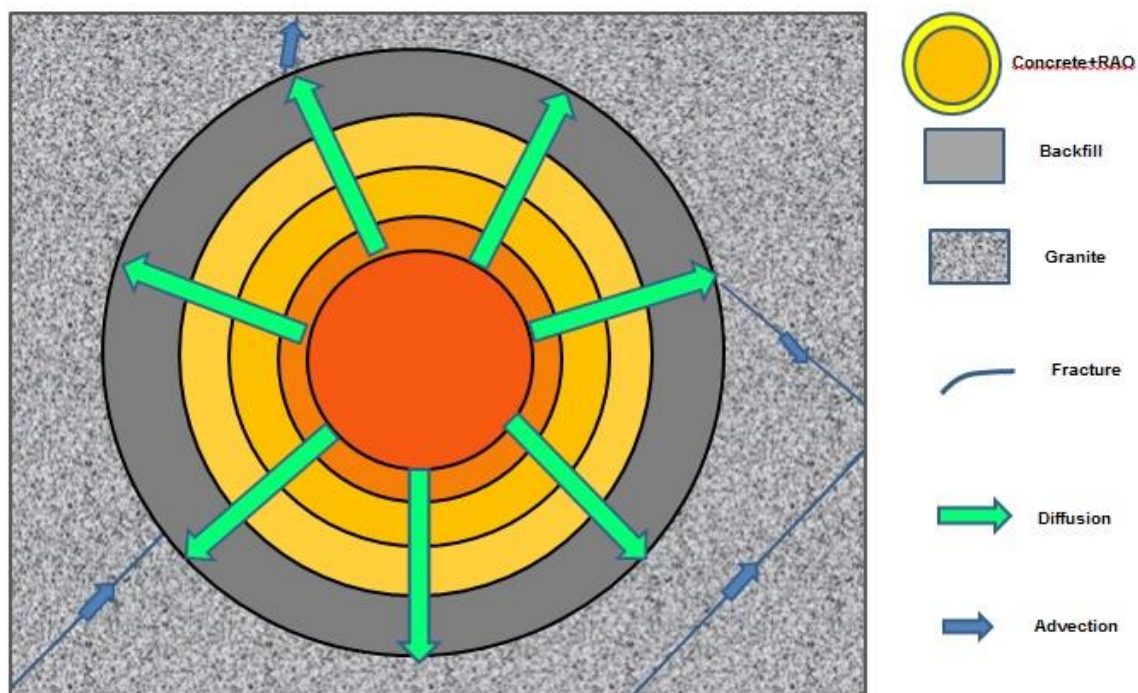
Po selhání obalu vnitřního kovového sudu dojde k transportu C-14, který bude z hlubinného úložiště ostatních RAO migrovat v kapalně a plynné fázi do biosféry. Příspěvek jednotlivých fází k celkovému toku C-14 bude záviset na saturaci hostitelského prostředí vodou, chemickém složení horniny a podzemní vody, termodynamických a případně dalších podmínkách. Jak již bylo zmíněno v úvodu, v první části projektu jsme se omezili na modelování transportu v kapalně fázi, jelikož v této fázi se předpokládá výskyt naprosté většiny C-14. Do plynné fáze se C-14 může dostat ve formě CO₂, který bude ale za daných chemických podmínek silně retardován v poli blízkých interakcí. Dalším způsobem přechodu C-14 do plynné fáze je biologická degradace uloženého odpadu a inženýrských bariér, která může vést k produkci metanu CH₄, což by způsobilo zvýšení transportu C-14 (Heikola 2014).

Pro navržení konceptu transportního modelu bylo nutné přihlídnout k možnostem programového prostředí GoldSim (verze 11.1.6), který používá k řešení difúzního transportu konečně objemový přístup (5.1.2); elementární objemy jsou v GoldSim prezentovány pomocí elementů *Cell pathway*. GoldSim sice řeší evoluční rovnice sítě cel pomocí optimalizovaného algoritmu, který je možno použít na běžné PC stanici k řešení soustavy rovnic pro rozsáhlejší síť. GoldSim ovšem bohužel nenabízí vhodné uživatelské prostředí, které by umožnilo efektivně vytvořit takovou rozsáhlou síť elementů *Cell pathway*.

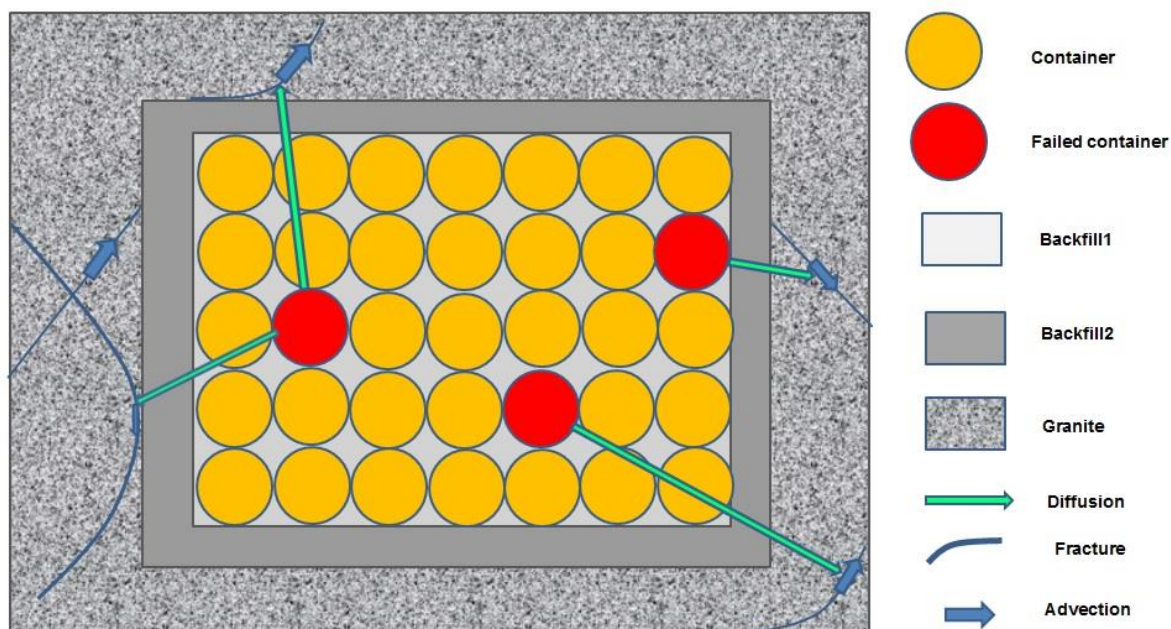
Jedním z možných zjednodušení vedoucích k redukcí počtu potřebných konečných objemů je reprezentovat vhodnou část objemu ukládaného RAO pomocí soustavy homogenních vrstev vzájemně propojených difúzním transportem, viz Obr. 1, (Haverkamp *et al.* 2005). Tento koncept předpokládá, že na začátku simulace dojde k uvolnění veškerého RAO do celého vnitřního objemu ukládacích komor. Uspořádání homogenních vrstev na Obr. 1 umožňuje modelovat 2D úlohy s kulovou nebo válcovou symetrií pomocí 1D sítě a tím významně redukovat počet potřebných elementů *Cell pathway*.

Ačkoliv se může zdát uvolnění veškerého RAO na začátku simulace v konceptu na Obr. 1 dostatečně konzervativním předpokladem, homogenizace RAO v rámci velkých objemů může vést k zředění lokalizovaných zdrojů kritických radionuklidů a tím podhodnocení toků, které závisí na rozdílu koncentrací. Proto jsme navrhli alternativní koncept, který je zobrazen na Obr. 2. V tomto konceptu je RAO soustředěno do jednoho elementu *Source*, který reprezentuje jeden sud. Po selhání obalu sudu radionuklidy postupně migrují difúzí do okolního výplňového materiálu směrem k puklinám v horninovém prostředí. Tento difúzní transport jsme reprezentovali pomocí 1D sítě elementů *Cell Pathway*. Abychom zohlednili heterogenní povahu této transportní cesty, cesta je složena ze tří částí, každá část reprezentuje různý materiál, přičemž difúzní cesta v každé části je reprezentována vlastní podsítí elementů *Cell pathway* s volně nastavitelnými difúzními délkami a plochami. Na Obr. 3 je zobrazeno schéma implementovaného modelu. Žluté šipky označují směr difúzního toku, horní přemosťující šipky označují možnost vynechání transportu v částech transportní

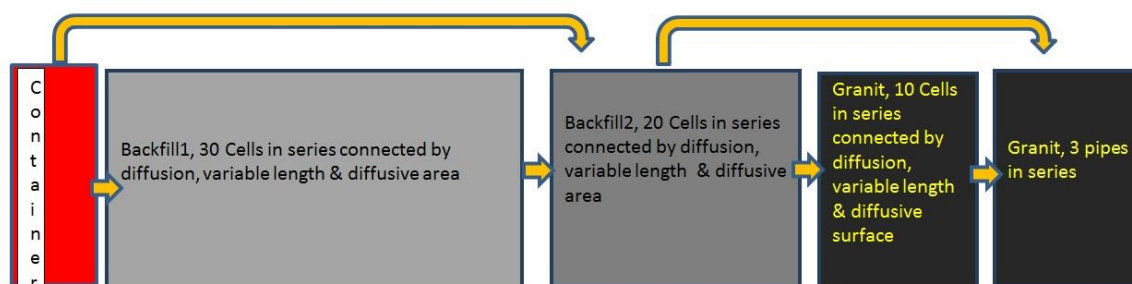
cesty BackFill1 a nebo Granit. Tím vznikl flexibilní model umožňující studovat širokou škálu transportních úloh.



Obr. 1 Zjednodušený konceptuální model založený na difúzním transportu homogenními vrstvami.



Obr. 2 Alternativní konceptuální model zohledňující vliv lokalizace zdroje.



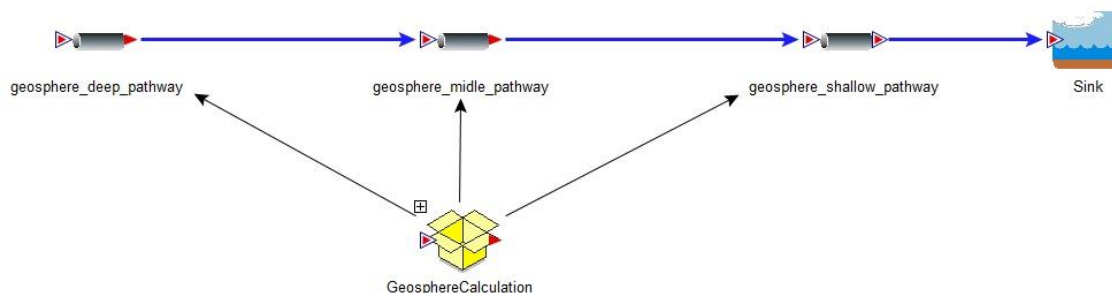
Obr. 3 Schéma implementace alternativního konceptuálního modelu v prostředí GoldSim.

2.2 Konceptuální model transportu C-14 geosférou

Konceptuální model transportu C-14 geosférou jsme převzali z prací Landa (2012) a Landa *et al.* (2015). Tento model reprezentuje geosféru pomocí třech hydraulických kolektorů, v GoldSim reprezentovaných pomocí elementů *Pipe*, spojených v sérii (Obr. 4). Hlavními vstupními parametry tohoto modelu jsou (Landa 2012):

- doba toku podzemní vody od úložného prostoru na rozhraní geosféra – biosféra
- průtok podzemní vody
- celkové zředění.

Tyto vstupní parametry jsou použity k výpočtu základních charakteristik elementu *Pipe*, jako je plocha, smáčený obvod a objemový tok. Převodní rovnice je možno nalézt v Landa (2012).

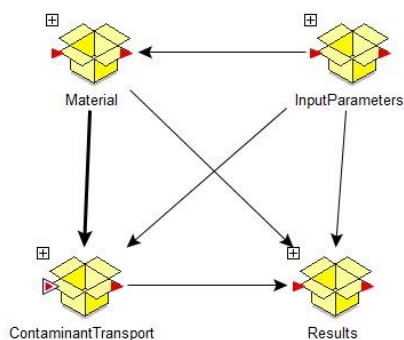


Obr. 4 Implementace modelu geosféry v GoldSim.

Tok z pole blízkých interakcí do geosféry byl v modelu reprezentován pomocí konceptu ekvivalentní rychlosti (Neretnieks *et al.* 2010). Tato rychlost reprezentuje difúzní tok z výplňového materiálu nebo granitu do proudící vody v puklině.

2.3 Implementace modelu v GoldSim

Na Obr. 5 je zobrazena základní struktura implementovaného modelu v GoldSim. Model je logicky rozdělen na čtyři části pomocí grafických elementů *Container*. V následujících podkapitolách bude každá z těchto čtyř složek modelu popsána zvlášť.



Obr. 5 Grafická reprezentace základní struktury implementovaného modelu v GoldSim.

2.3.1 Vstupní parametry (InputParameters)

Vybrané vstupní parametry modelu jsou do modelu zadány pomocí vstupního Microsoft Excel souboru *InputParameters.xlsx*; model implicitně předpokládá, že vstupní soubor je umístěn do stejného adresáře jako soubor modelu (*MC14_Vxy.gsm* nebo *MC14_Vxy.gsp*, *xy* označuje verzi modelu). Složka *InputParameters* obsahuje čtyři elementy *Spreadsheet*: *FyzikalniParametry*, *GeometrickeParametry*, *Flags*, *ParametryToku*. Elementy *FyzikalniParametry* a *ParametryToku* se odkazují na hodnoty uvedené v záložce *PF*, element *GeometrickeParametry* se odkazují na záložku *GP*, a na konec element *Flags* na stejnojmennou záložku *Flags*.

2.3.2 Materiály (Material)

Složka *Material* obsahuje dva elementy, *Species* a *Fluid* (ID v modelu *Water*). V první verzi implementace modelu element *Species* reprezentoval pouze jednu formu C-14, v následné verzi byly do modelu zavedeny explicitně dvě formy: anorganická a organická. Pomocí elementu *Fluid* je do modelu zadána referenční difuzivita a rozpustnost, a tento element představuje v modelu referenční tekutinu.

Fyzikalni parametry		
Half-life time	a	5700
Reference diffusivity	m ² ·s ⁻¹	2,00E-09
Solubility (mez rozpustnosti)	mol/l	1,00E-04
Parametry backfill1		
Partition coefficient	m ³ ·kg ⁻¹	1,00E-05
Porosity	-	0,35
Bulk density	kg·m ⁻³	1800
Tortuosity/Geometric factor		8,E-01
Relative diffusivity	-	1,00
Parametry backfill2		
Partition coefficient	m ³ ·kg ⁻¹	1,00E-05
Porosity	-	0,35
Bulk density	kg·m ⁻³	1800
Tortuosity/Geometric factor		8,E-01
Relative diffusivity	-	1,00
Parametry granitu		
Partition coefficient	m ³ ·kg ⁻¹	1,00E-05
Porosity	-	0,01
Bulk density	kg·m ⁻³	2660
Tortuosity/Geometric factor		7,E-01
Relative diffusivity	-	1,00
Parametry matrice		
τ (rychlost loužení)	a ⁻¹	1,00E-01
Parametry kontejneru		
μ (životnost)	a	31
Inventář v jednom UOS	Bq	5,00E+13
Volny objem vody v jednom UOS	l	150,00
Parametry puklin		
Q _{eq}	l/a	1,00E-01
Geo ^{IN}	m ³ /a	1,E+00
Geo ^T	a	3,16E+02
Geo ^D		1,00E+02
Geo ^{α}		1,00E-02
Parametry backfill1A		
Scale Factor for Geometric Factor time dependence	yr	2,00E+06
Parametry backfill2A		
Scale Factor for Geometric Factor time dependence	yr	2,00E+06

Obr. 6 Záložka PF vstupního Microsoft Excel souboru InputParameters.xlsx.

Geometrické parametry					
L_B1 [m]	S_B1 [m2]	L_B2 [m]	S_B2 [m2]	L_G [m]	S_G [m2]
0,000666667	2,45044227	0,079	2,51327412	0,04	7,476991
0,000666667	2,452536665	0,079	2,76145994	0,04	7,602654
0,000666667	2,45463106	0,079	3,00964576	0,04	7,728318
0,000666667	2,456725455	0,079	3,25783158	0,04	7,853982
0,000666667	2,45881985	0,079	3,5060174	0,04	7,979645
0,000666667	2,460914245	0,079	3,75420322	0,04	8,105309
0,000666667	2,46300864	0,079	4,00238904	0,04	8,230973
0,000666667	2,465103036	0,079	4,25057486	0,04	8,356636
0,000666667	2,467197431	0,079	4,49876068	0,04	8,4823
0,000666667	2,469291826	0,079	4,7469465	0,04	8,607964
0,000666667	2,471386221	0,079	4,99513232		
0,000666667	2,473480616	0,079	5,24331814		
0,000666667	2,475575011	0,079	5,49150396		
0,000666667	2,477669406	0,079	5,73968978		
0,000666667	2,479763801	0,079	5,9878756		
0,000666667	2,481858196	0,079	6,23606142		
0,000666667	2,483952591	0,079	6,48424724		
0,000666667	2,486046987	0,079	6,73243306		
0,000666667	2,488141382	0,079	6,98061888		
0,000666667	2,490235777	0,079	7,2288047		
0,000666667	2,492330172				
0,000666667	2,494424567				
0,000666667	2,496518962				
0,000666667	2,498613357				
0,000666667	2,500707752				
0,000666667	2,502802147				
0,000666667	2,504896542				
0,000666667	2,506990938				
0,000666667	2,509085333				
0,000666667	2,511179728				

Obr. 7 Záložka GP vstupního Microsoft Excel souboru InputParameters.xlsx.

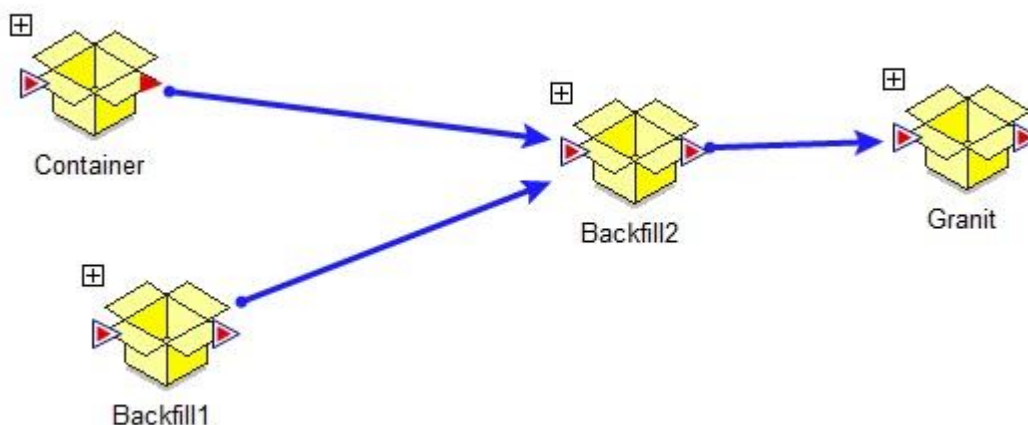
Přepínače

Backfill1	(0)-bez backfill1, (1)-s backfill1	1
Granit	0)-bez granitu, (1)-s granitem	1

Obr. 8 Záložka Flags vstupního Microsoft Excel souboru InputParameters.xlsx.

2.3.3 Transportní model (ContaminantTransport)

Základní struktura transportního modelu je zobrazena na Obr. 9. Model se skládá ze čtyř částí: Container, Backfill1, BackFill2 a Granit.



Obr. 9 Struktura transportního modelu.

- **Container**

Složka *Container* obsahuje zdrojový člen, který je v modelu reprezentovaný pomocí jednoho elementu *Source*. Vstupní aktivita C-14 je zadaná pomocí vlastnosti *Species Mass* tohoto elementu, model zdrojového členu dále předpokládá, že C-14 je vázáno v matici s rychlostí degradace zadanou pomocí vstupního parametru rychlosti loužení. Volná voda obsažená ve zdrojovém členu je zadána pomocí elementu *Cell pathway* (ID elementu Cell1), který je spojený s elementem *Source*. Cell1 je spojena difúzním transportem s prvním elementem sítě BackFill1 a Backfill2, přepnutí mezi variantami je zajištěno vynásobením difúzní plochy hodnotou přepínače *BackFill1*: difúzní plocha Cell1 - BackFill1 vynásobena hodnotou *BackFill1* a difúzní plocha Cell1 – BackFill2 vynásobena hodnotou $(1-BackFill1)$.

- **BackFill1**

Složka **BackFill1** obsahuje dvě podsložky **MaterialB1** a **TransportB1**. Podsložka **MaterialB1** obsahuje element *Fluid* (FluidBackFill1) a element *Solid* (BackFill1M), které definují vlastnosti transportního prostředí. Podsložka **TransportB1** obsahuje vlastní transportní 1D síť složenou z 30 elementů *CellPathway*. Poslední element této sítě je spojen difúzním transportem s prvním elementem sítě Backfill2, difúzní plocha je vypočítaná jako součin první difúzní plochy sítě Backfill2 a hodnoty přepínače *BackFill1*.

- **BackFill2**

Složka **BackFill2** také obsahuje dvě podsložky: **MaterialB2** a **TransportB2**. Podsložka **MaterialB2** obsahuje element *Fluid* (FluidBackFill2) a element *Solid* (BackFill2M), které definují vlastnosti transportního prostředí. Podsložka **TransportB2** obsahuje vlastní transportní 1D síť složenou z 20 elementů *CellPathway*. Poslední element této sítě je spojen difúzním transportem s prvním elementem sítě *Granit*, difúzní plocha je vypočítaná jako součin první difúzní plochy sítě *Granit* a hodnoty přepínače *Granit*. Poslední element této sítě je spojen

 SÚRAO	Popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště	Evidenční označení:
		185/2017

advektivním transportem s prvním elementem *Pipe* (ID elementu *geosphere_deep_pathway*) modelu geosféry, příslušný objemový tok je vypočítán jako součin hodnoty ekvivalentního toku a opačné logické hodnotě přepínače *Granit*) (1-hodnota přepínače *Granit*).

- **Granit**

Složka **Granit** má o něco složitější strukturu než předcházející dvě složky **BackFill1** a **BackFill2**, obsahuje totiž tři podsložky **MaterialG**, **DTransportG**, **ATransportG**. Podsložka **MaterialG** obsahuje stejně jako předchozí materiálové podsložky dva elementy: element *Fluid* (ID elementu *FluidGranit*) a element *Solid* (ID elementu *GranitM*). Podsložka **DTransportG** obsahuje 1D síť deseti elementů *Cell pathway*. Tato síť modeluje difúzní transport horninovým prostředím a reprezentuje vrstvu horniny mezi vnější stěnou ukládací komory a puklinou s proudící vodou. Vrstvu je možné vyloučit z transportní cesty zadáním hodnoty přepínačem *Granit=0* (Obr. 8). Poslední element této sítě je spojen advektivním transportem s prvním elementem *Pipe* (ID elementu *geosphere_deep_pathway*) modelu geosféry. Objemový tok tohoto advektivního transportu je vypočítán jako součin hodnoty ekvivalentního toku a hodnoty přepínače *Granit*. Podsložka **ATransportG** obsahuje model geosféry složený ze třech elementů *Pipe* spojených v sérii. Vnější hraniční podmínka modelu geosféry je modelována pomocí elementu *CellPathway* (ID elementu *Sink*) (Obr. 4).

2.3.4 Výsledky (Results)

Složka **Results** se skládá ze dvou podsložek **ActivityOutflows** a **ConcentrationHistories**. Podsložka **ActivityOutflows** obsahuje element *Time history (OutFlows)*, který zaznamenává časový vývoj toku aktivity z pěti míst modelu, ze zdrojového členu, z poslední cely **BackFill1**, z poslední cely **BackFill2**, z poslední cely **Granit**, a posledního elementu *Pipe* modelu geosféry. Výsledky jsou automaticky po dokončení simulace vyexportovány do výstupního Microsoft Excel souboru *OutFlows.xlsx*, který se nachází ve stejném adresáři jako soubor modelu. Podsložka **ConcentrationHistories** obsahuje elementy *Time history* (B1C, B2C, GC), které zaznamenávají časový vývoj koncentrací ve vybraných celách transportních cest **TransportB1** (B1C – koncentrace v každém třetím elementu *CellPathway*, dohromady deset), **TransportB2** (B2C – koncentrace v každém druhém elementu *CellPathway*), **DTransportG** (GC – koncentrace v každém elementu *CellPathway*).

3 Vybrané studie implementace transportu C-14 polem blízkých interakcí v GoldSim

SÚRAO vymezilo na začátku projektu soubor vstupních neurčitých parametrů, které měly být uvažovány v rámci UA & SA. Tab. 1 obsahuje tento soubor parametrů spolu s jejich minimálními, maximálními a středními hodnotami. Z tohoto souboru byly pro úvodní studie vybrány podsoubory parametrů.

 SÚRAO	Popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště	Evidenční označení:
		185/2017

Tab. 1 Soubor neurčitých vstupních parametrů pro citlivostní analýzu transportu uhlíku C-14.

Parametr	unit	Min	Max	Mean
μ (životnost)	a	10	100	31
τ (rychlost loužení)	a ⁻¹	1·10 ⁻⁵	0,1	0,001
L	m	0,5	5	1,58
Porosity (backfill)		0,2	0,5	0,35
Reference diffusivity	m ² s ⁻¹	2·10 ⁻⁹	2·10 ⁻⁹	2·10 ⁻⁹
Relative diffusivity (backfill)		1	10*	
Tortuosity		0,5	1	0,75
Porosity (granite)		0,005	0,02	0,01
Relative diffusivity (granite)	m ² s ⁻¹	1	5*	
Solubility	mol l ⁻¹	0,1	1E-4	1E-7
K_d (backfill)	m ³ kg ⁻¹	0	0,001	1E-5
K_d (geosphere)	m ³ kg ⁻¹	0	0,001	1E-5
Geo^{IN}	m ³ a ⁻¹	0,01	100	1
Geo^T	a	10	1·10 ⁴	316
Geo^D		1	1·10 ⁴	100
Geo^a	%	0,1	10	1
<i>Inventář v jednom UOS</i>	Bq	5·10 ¹²	5·10 ¹³	1,6·10 ¹³
<i>Objem uložště (pouze odpady)</i>	m ³	160	800	480
<i>Celkový počet UOS</i>	ks	40	200	120
<i>Maximální aktivita ve všech UOS</i>	Bq	1·10 ¹⁴	1·10 ¹⁵	3,2·10 ¹⁴


* hodnota je pro případ difúze C-14 v plynné fázi

3.1 Chování zdrojového členu

Tato studie byla věnována vlivu čtyř vybraných parametrů zdrojového členu:

- rychlost loužení,
- rozpustnost,
- inventář,
- volný objem,

ostatní parametry z Tab. 1 měly nejvíce pravděpodobné hodnoty (sloupec Mean).

 SÚRAO	Popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště	Evidenční označení:
		185/2017

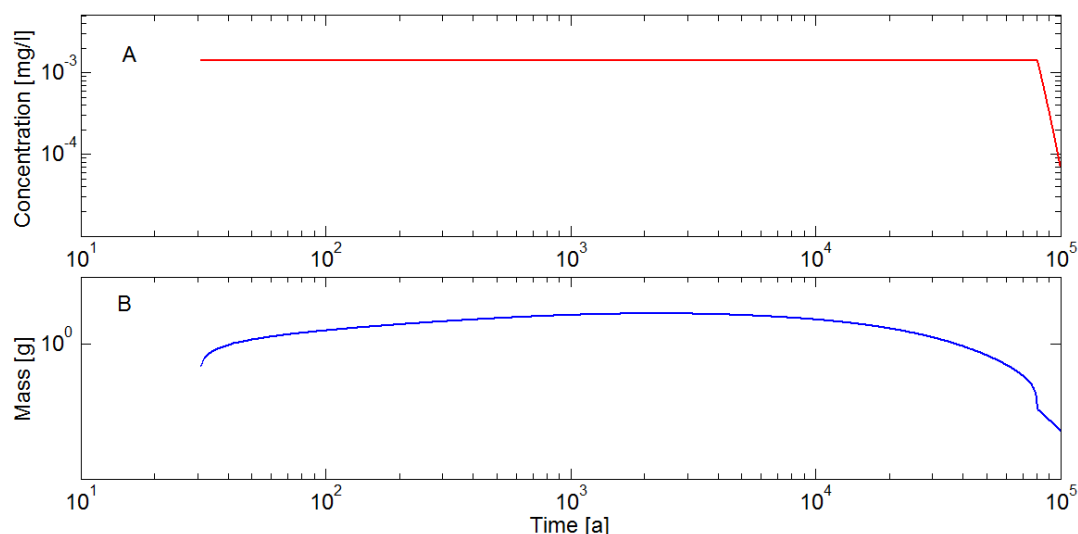
Tab. 2 Kombinace hodnot čtyř parametrů zdrojového členu uvažovaných ve studii 3.1.

Č. kombinace	rychlost loužení [a^{-1}]	rozpustnost [mol/l]	inventář [Bq]	volný objem [l]
S1_1	0,001	$1 \cdot 10^{-7}$	$1,6 \cdot 10^{13}$	100
S1_2	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{12}$	50
S1_3	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{12}$	150
S1_4	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{13}$	50
S1_5	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{13}$	150
S1_6	$1 \cdot 10^{-5}$	0,0001	$5 \cdot 10^{12}$	50
S1_7	$1 \cdot 10^{-5}$	0,0001	$5 \cdot 10^{12}$	150
S1_8	$1 \cdot 10^{-5}$	0,0001	$5 \cdot 10^{13}$	50
S1_9	$1 \cdot 10^{-5}$	0,0001	$5 \cdot 10^{13}$	150
S1_10	0,10	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{12}$	50
S1_11	0,10	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{12}$	150
S1_12	0,10	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{13}$	50
S1_13	0,10	$1 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{13}$	150
S1_14	0,10	0,0001	$5 \cdot 10^{12}$	50
S1_15	0,10	0,0001	$5 \cdot 10^{12}$	150
S1_16	0,10	0,0001	$5 \cdot 10^{13}$	50
S1_17	0,10	0,0001	$5 \cdot 10^{13}$	150

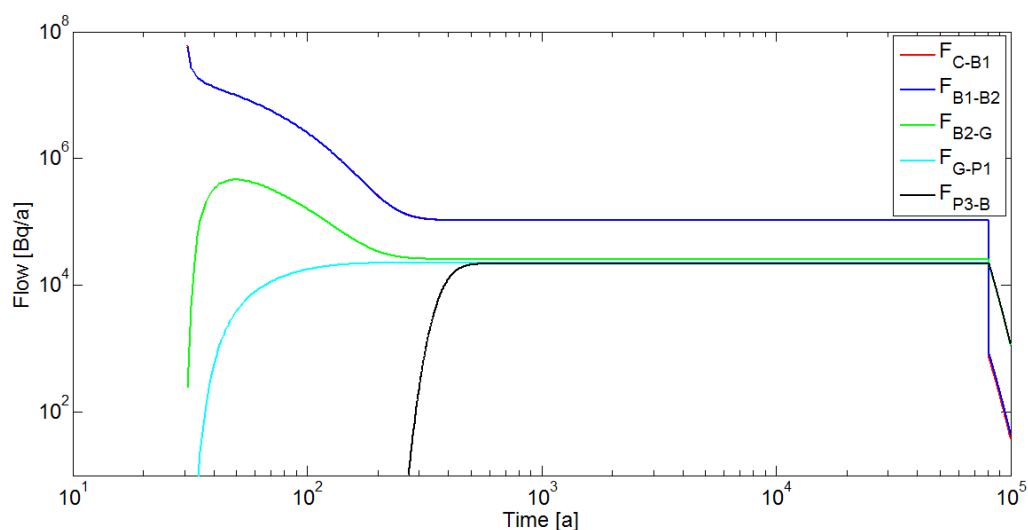
Tab. 2 obsahuje kombinace hodnot čtyř parametrů zdrojového členu použitých ve studii.

První žlutě označený řádek obsahuje nejvíce pravděpodobné hodnoty (referenční případ), další řádky jsou pak kombinacemi minimálních a maximálních hodnot vybraných parametrů, celkový počet těchto kombinací je $2^4=16$. Kombinace jsou uspořádány tak, že se hodnoty parametrů na druhém řádku liší od hodnot na desátém pouze o hodnotu parametru v prvním sloupci, hodnoty ostatních parametrů zůstávají stejné. To samé platí mezi hodnotami na třetím a jedenáctém řádku, čtvrtém a dvanáctém atd. V případě parametru v druhém sloupci platí stejná relace mezi druhým a šestým řádkem, třetím a sedmým atd.; v případě parametru v třetím sloupci pak mezi druhým a čtvrtým atd. Toto uspořádání odpovídá transformační metodě (viz. Příloha C: Metody neurčitostní a citlivostní analýzy). Na Obr. 10 a Obr. 11 jsou zobrazeny výsledky z výpočtu pro referenční případ. Na Obr. 10 **A** je zobrazen časový vývoj koncentrace C-14 ve volné vodě zdrojového členu. Koncentrace dosáhne díky omezené hodnotě rozpustnosti ($1 \cdot 10^{-7}$ [mol/l]) a rychlosti loužení ($1 \cdot 10^{-3}$ [a^{-1}]) velmi rychle konstantní hodnoty po okamžiku selhání obalu kontejneru (30 [a]). Konstantní hodnota zůstává nezměněna prakticky na celém uvažovaném časovém intervalu, kontejner lze v tomto případě považovat za zdroj s konstantní koncentrací. Na Obr. 10 **B** je zobrazen časový vývoj transportu dostupné hmoty ve zdrojovém členu. Na rozdíl od koncentrace není hmotnost dostupné hmoty konstantní. Nárůst hmoty na časovém intervalu (30, 1200) [a] je způsoben relativně rychlým loužením (na tomto intervalu je uvolněno z matrice cca 90% celkového množství C-14 v kontejneru) a pomalým odtokem z kontejneru díky omezené rozpustnosti. Pokles v následujícím intervalu, když už se hmota díky loužení prakticky

neuvolňuje, je dán jednak odtokem z kontejneru a také i radioaktivním rozpadem (poločas rozpadu C-14 byl uvažován jako 5700 [a]).



Obr. 10 Časový vývoj koncentrace C-14 (A) a transportu dostupné hmoty C-14 (B) v kontejneru.

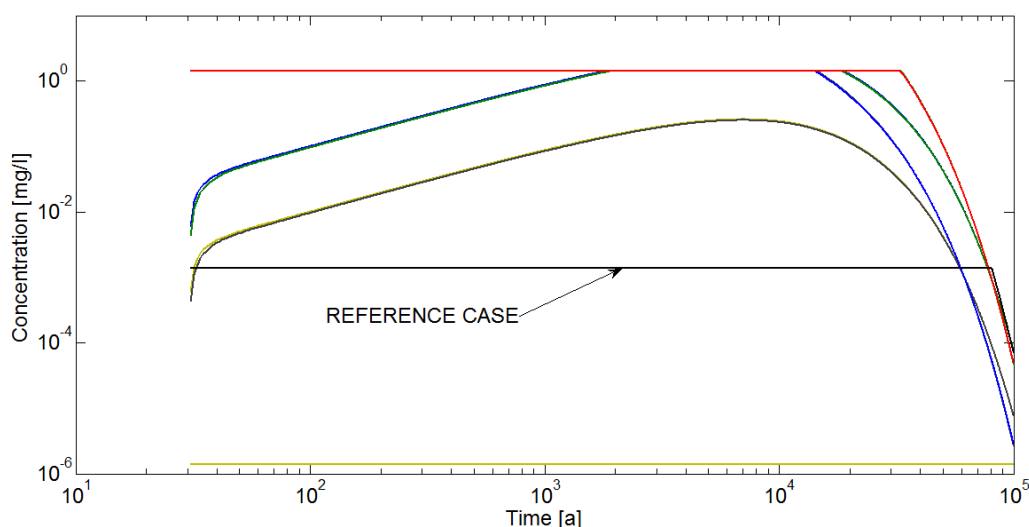


Obr. 11 Časový vývoj toků na rozhraní jednotlivých částí modelu. F_{C-B1} označuje tok z kontejneru do první cely **Backfill1**, F_{B1-B2} tok z poslední cely **Backfill1** do první cely **Backfill2**, F_{B2-G} tok z poslední cely **Backfill2** do první cely **Granit**, F_{G-P1} tok z poslední cely **Granit** do první Pipe sítě puklin, F_{P3-B} tok ze třetí Pipe sítě puklin do rezervoáru (jedna cela o objemu 1000 [m³]) představující biosféru.

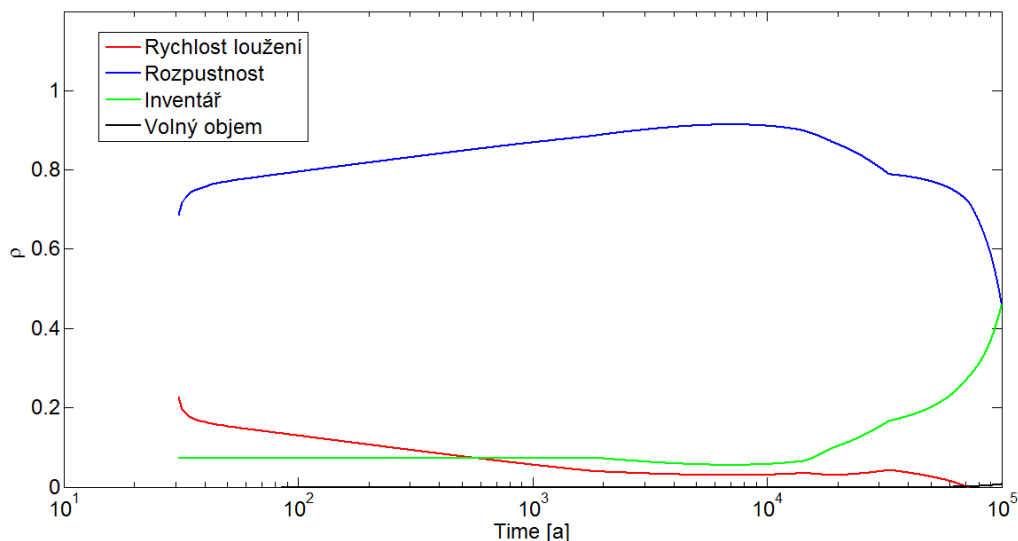
Z Obr. 11 je patrné, že během krátké doby 200-300 [a] se toky v pěti vybraných místech stanou konstantní. Toky F_{C-B1} , F_{B1-B2} , F_{B2-G} dosahují svého maxima v počáteční fázi, což je způsobeno velkým koncentračním gradientem v těchto vrstvách. Zpoždění F_{P3-B} je dáno hodnotami parametrů sítě puklin ($Geo^T = 316$ [a]). Rozdíl mezi konstantními hodnotami toků pokrývá úbytek C-14 díky radioaktivnímu rozpadu, celková hmotnost C-14 (tj. hmotnost v kapalně a pevně fázi) je v ustáleném stavu konstantní. Velikost rozdílů konstantních toků je jednak dán transportními charakteristikami vrstev **Backfill1**, **Backfill2**, **Granit** (např. K_d , porozita, geometrické charakteristiky), tak i okrajovou podmínkou na rozhraní **Granit** - první

Pipe definované ekvivalentním tokem $Q_{eq} = 0,1$ [l/a]. Na tomto místě je dobré si připomenout, že v případě jednorozměrného difúzního toku za sebou jdoucími rovinnými vrstvami, při konstantní koncentraci C_s na jednom konci a nulové koncentraci na druhém konci je v ustáleném stavu tok stejný ve všech vrstvách.

Na Obr. 12 jsou zobrazeny časové vývoje koncentrací ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace z Tab. 2. Menší počet křivek než je počet kombinací v Tab. 2 je způsoben blízkostí nebo totožností hodnot některých kombinací, které vedou k překryvu na logaritmické škále. Časový průběh referenčního případu je vykreslen černou barvou. Průběh vykreslený žlutou barvou odpovídá případům S1_2,3,4,5,10,11,12,13 s nejnižší hodnotou rozpustnosti ($1 \cdot 10^{-10}$ [mol/l]), průběh vykreslený červenou barvou odpovídá případům S1_14,15,16,17 s rozpustností (0,0001 [mol/l]) a rychlosti loužení (0,1 [a⁻¹]). V těchto případech se zdroj chová od okamžiku selhání kontejneru jako zdroj s konstantní koncentrací. Hnědá křivka odpovídá případům S1_6,7 s rozpustností (0,0001 [mol/l]), rychlosti loužení ($1 \cdot 10^{-5}$ [a⁻¹]) a inventářem ($5 \cdot 10^{12}$ [Bq]). Modrá a zelená křivka odpovídá případům 8,9 se stejnými hodnotami rozpustnosti a rychlosti loužení, ale s vyšší hodnotou inventáře ($5 \cdot 10^{13}$ [Bq]). Obr. 13 graficky reprezentuje výsledky citlivostní analýzy. Normalizovaná citlivostní míra byla vypočítaná pomocí rovnice (C.4), největší vliv na hodnoty a průběh koncentrací C-14 ve volné vodě kontejneru má rozpustnost, a zanedbatelný vliv má její objem v uvažovaném rozsahu hodnot (50,150) [l]. Výsledek odpovídá rozložení křivek na Obr. 12 Časový vývoj koncentrací C-14 ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace z .

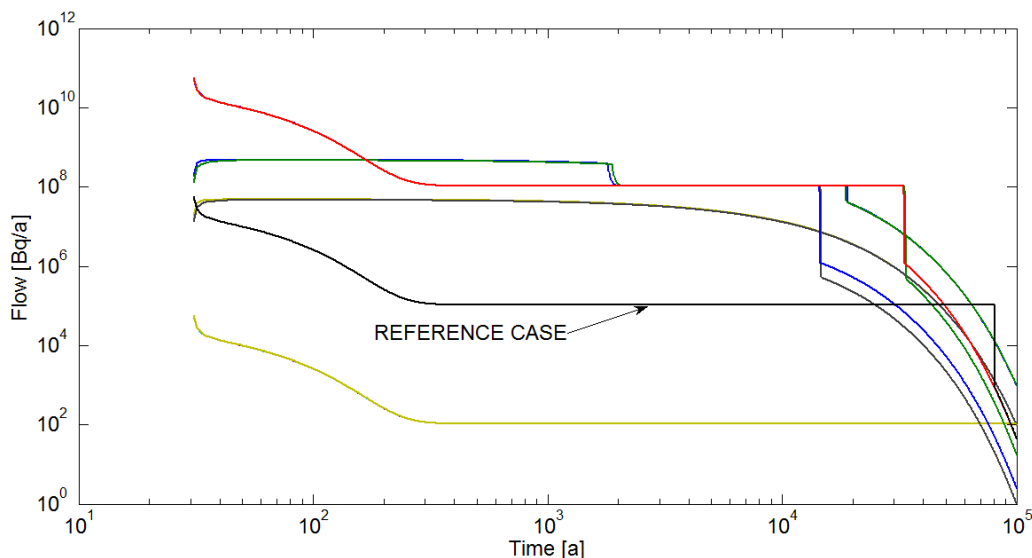


Obr. 12 Časový vývoj koncentrací C-14 ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace z Tab. 2

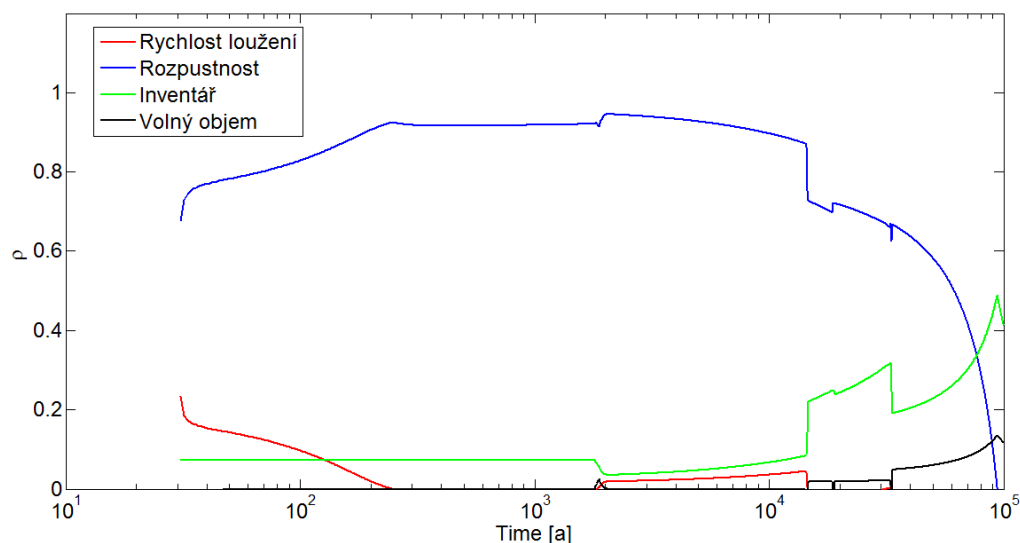


Obr. 13 Citlivostní analýza časových vývoji koncentrací C-14 ve volné vodě zdrojového členu.

Na Obr. 14 jsou zobrazeny časové vývoje toků na rozhraní poslední cely **Backfill1** a první cely **Backfill2** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 2. Stejně jako na Obr. 12 tok označený černou barvou odpovídá časovému průběhu referenčního případu. Průběhy toků jsou determinovány vývoji koncentrace C-14 ve volné vodě kontejneru. Žlutá křivka odpovídá kombinacím parametrů na řádcích S1_2,3,4,5,10,11,12,13 v Tab. 2; červená křivka kombinacím na řádcích S1_14,15,16,17; hnědá křivka odpovídá případům S1_6,7; modrá a zelená křivka případům S1_8,9. Výsledky citlivostní analýzy jsou reprezentovány na Obr. 15 ve formě časových průběhů standardizovaný koeficientů ρ_i . Stejně jako v případě koncentrace C-14 ve volné vodě zdrojového členu, největší vliv na tok rozhraním **Backfill1** - **Backfill2** má rozpustnost.

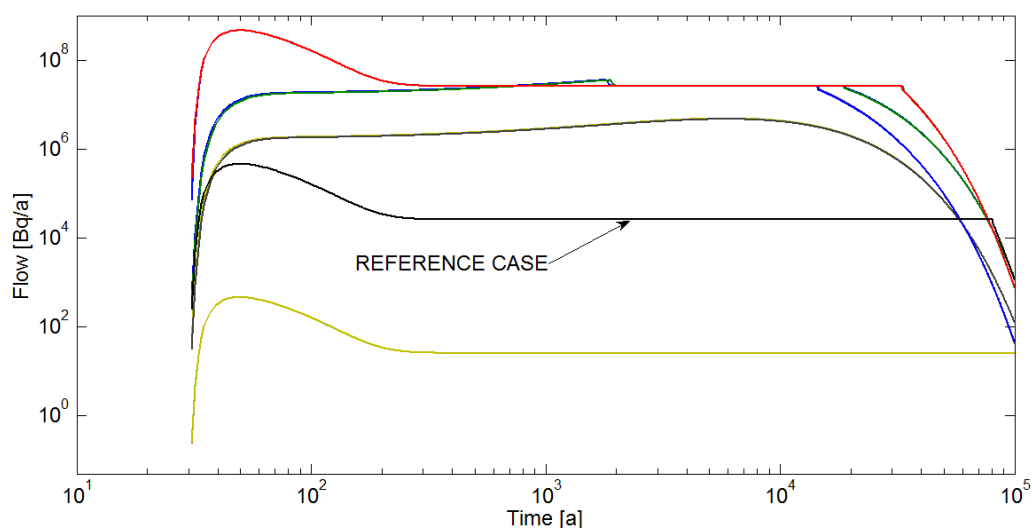


Obr. 14 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely **Backfill1** a první cely **Backfill2** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 2.

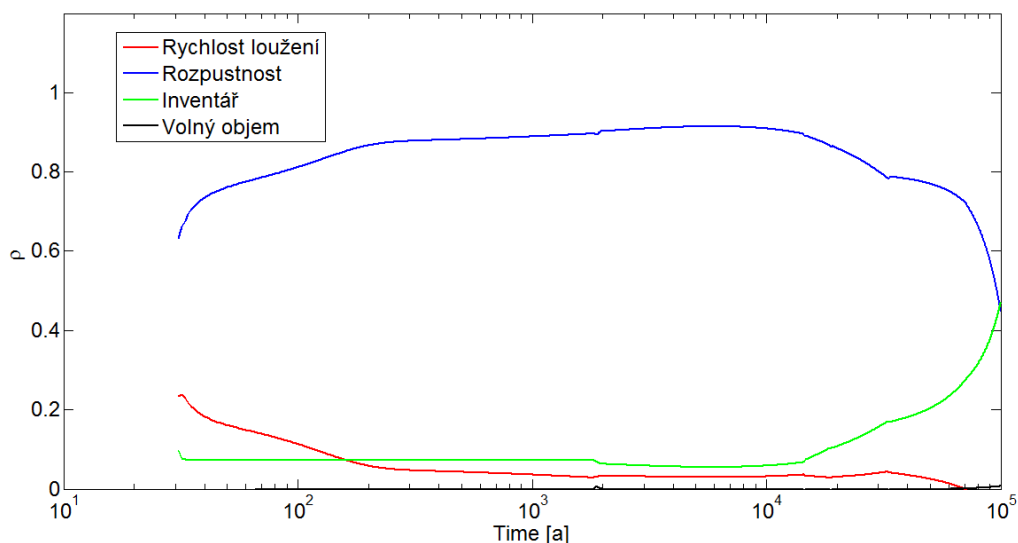


Obr. 15 Citlivostní analýza časových vývojů toků na rozhraní poslední cely **Backfill1** a první cely **Backfill2**. Největší vliv na průběh toků má rozpustnost.

Na Obr. 16 jsou zobrazeny časové vývoje toků na rozhraní poslední cely **Backfill2** a první cely **Granit** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 2, na Obr. 17 jsou výsledky citlivostní analýzy. Stejně jako na Obr. 12 tok označený černou barvou odpovídá časovému průběhu referenčního případu. Stejně jako v případě toků na rozhraní **Backfill1 - Backfill2** jsou průběhy toků na Obr. 16 determinovány vývoji koncentrace C-14 ve volné vodě kontejneru. Žlutá křivka odpovídá kombinacím parametrů na řádcích S1_2,3,4,5,10,11,12,13 Tab. 2; červená křivka kombinacím na řádcích S1_14,15,16,17; hnědá křivka odpovídá případům S1_6,7; modrá a zelená křivka případům S1_8,9.



Obr. 16 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely **Backfill2** a první cely **Granit** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 2.



Obr. 17 Citlivostní analýza časových vývoju toků na rozhraní poslední cely **Backfill2** a první cely **Granit**. Největší vliv na průběh toků má rozpustnost.

Závěrem lze říct, že pro hodnoty rozpustnosti $1 \cdot 10^{-10} \div 1 \cdot 10^{-7}$ [mol/l] se kontejner chová jako zdroj s konstantní koncentrací, a že rozpustnost má největší vliv na časový průběh sledovaných toků. Pro největší uvažované hodnoty rozpustnosti (0,0001 [mol/l]) dochází k postupnému nárůstu koncentrace C-14 ve volné vodě a uplatňují se i ostatní parametry, zejména inventář v kontejneru. Zanedbatelný vliv má objem volné vody v uvažovaném rozsahu hodnot (50,150) [l].

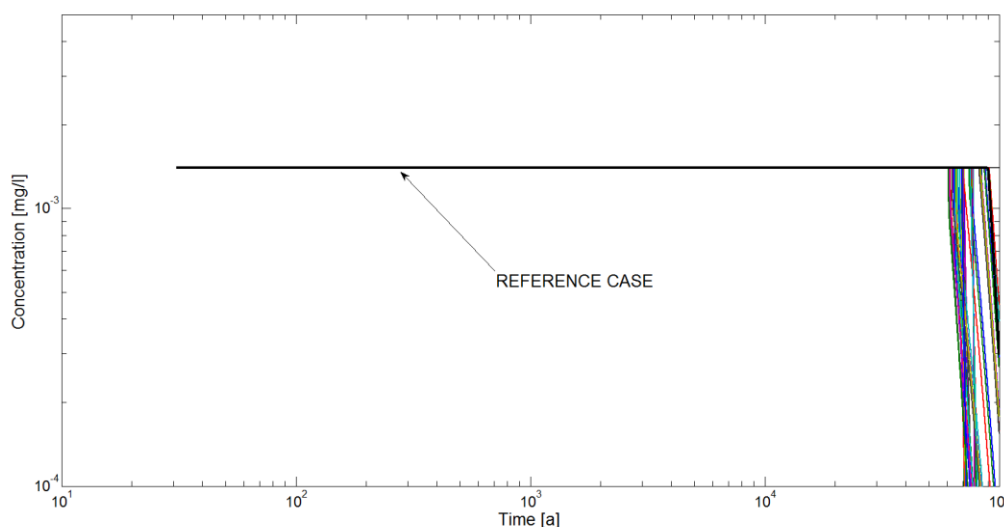
3.2 Vliv vlastností blízkého pole

Tato studie byla věnována vlivu šesti vybraných parametrů blízkého pole na časové průběhy koncentrací ve volné vodě kontejneru a toků na rozhraní vrstev **Backfill1**, **Backfill2**, **Granit**, a první *Pipe* modelu geosféry. Tyto parametry jsou spolu s jejich minimálními, maximálními a středními hodnotami uvedeny v Tab. 3. Na základě zadání SÚRAO (Tab. 1), byly K_d pro prostředí **Backfill1,2** a **Granit** uvažovány stejné, ačkoliv cement bude sorbovat C-14 více než granit. Ostatní parametry měly nejvíce pravděpodobné hodnoty z Tab. 1, vyjma parametrů zdrojového členu, které měly tyto hodnoty: rychlost loužení 0,1 [a^{-1}]; rozpustnost $1 \cdot 10^{-7}$ [mol/l], inventář $5 \cdot 10^{13}$ [Bq], volný objem 150 [l]. Studie zahrnovala všechny kombinace maximálních a minimálních hodnot, celkový počet simulací byl $2^6 + 1 = 65$, včetně referenčního případu. Kombinace byly uspořádány stejně jako ve studii 3.1, aby bylo možné použít výpočet normalizované citlivostní míry podle vzorce (C.4).

Tab. 3 Parametry blízkého pole, jejichž vliv byl studován ve studii 3.2.

Parametr	K_d [m^3/kg] <i>Backfill</i> _{1,2}	K_d [m^3/kg] <i>Granite</i>	porosita <i>Backfill</i> _{1,2}	porosita <i>Granite</i>	Q_{eq} [l/a]	L_1 [m]
Mean	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	0,35	0,01	0,1	1,58
Min	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$	0,20	0,005	0,002	0,5
Max	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	0,50	0,02	10	5

V předchozí studii (3.1) jsme ukázali, že pro hodnoty vstupních parametrů zdrojového členu, které byly uvažovány v této studii, koncentrace C-14 ve volné vodě kontejneru dosáhne velmi rychle konstantní hodnoty, která je stejná pro všechny kombinace uvažovaných šesti parametrů blízkého pole. Na Obr. 18 jsou zobrazeny v jednom grafu časové vývoje koncentrace C-14 ve volné vodě kontejneru pro všechny kombinace vybraných šesti parametrů blízkého pole. Z grafu je patrné, že na časovém intervalu (1 000 – 1 000 000) [a] je koncentrace C-14 zdroje konstantní, do času okolo 10 000 [a] není koncentrace ve volné vodě ovlivněna hodnotami sledovaných parametrů blízkého pole. Simulace ve studii (3.1) dále ukázaly, že v takovém případě dojde poměrně rychle k ustanovení konstantních toků ve všech sledovaných bodech transportní cesty. Abychom lépe pochopili závislost hodnot těchto konstantních toků na sledovaných šesti parametrech blízkého pole, analyzovali jsme nejdříve dva zjednodušené případy, které dovolují vyjádřit závislost toku na sledovaných parametrech analyticky.



Obr. 18 Časový vývoj koncentrací ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace minimálních a maximálních hodnot parametrů blízkého pole z Tab. 3.

V obou zjednodušených případech jsme zanedbali radioaktivní rozpad a uvažovali jsme migraci konstantní difúzní plochou. Také jsme zanedbali vliv vrstvy **Backfill1**, v uvažované studii jsou hodnoty transportních parametrů **Backfill1** totožné s vlastnostmi **Backfill2**. Oba případy se liší vnější hraniční podmínkou. V případě maximální uvažované hodnoty Q_{eq} (10 [l/a]), Q_{eq} nemá vliv na hodnotu konstantního toku, který je podle analýzy zejména omezen

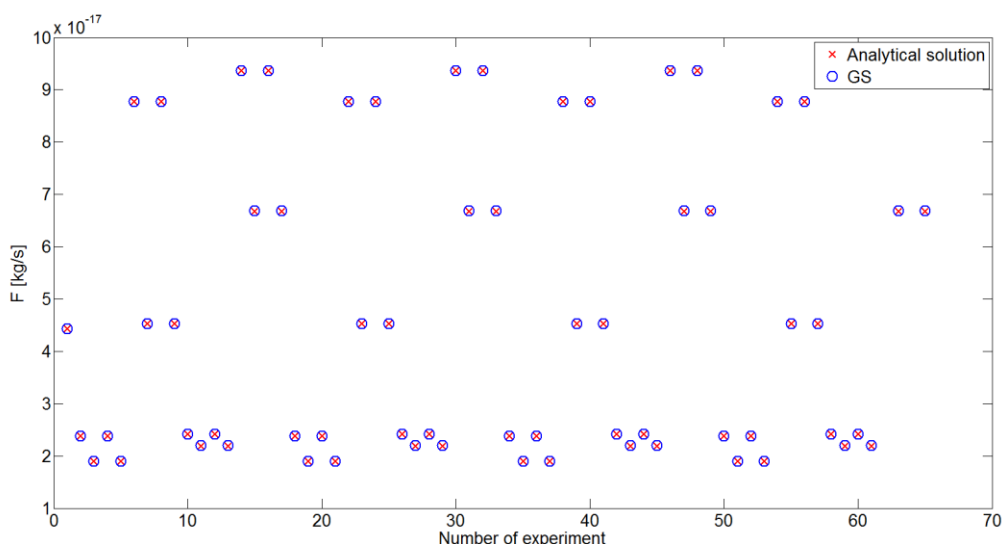
hodnotami transportních parametrů vrstvy **Granit**. V tomto případě jsme uvažovali nulovou koncentraci na konci druhé vrstvy. Jako druhý případ jsme studovali případ, kdy Q_{eq} omezuje hodnotu konstantního toku. V tomto případě jsme na konci druhé vrstvy uvažovali definovaný ekvivalentní tok do proudící pukliny. V obou případech jsme ověřili výsledky analýzy pomocí numerických simulací v GoldSim.

V prvním případě jsme analyzovali stacionární difúzi dvěma vrstvami, přičemž na začátku první vrstvy byla udržovaná konstantní koncentrace C_0 a na konci druhé vrstvy nulová koncentrace. V tomto případě můžeme difúzi popsat pomocí dvou homogenních diferenciálních rovnic druhého řádu s konstantními koeficienty. Analytické řešení vede na konstantní tok ve tvaru (5.1.4)

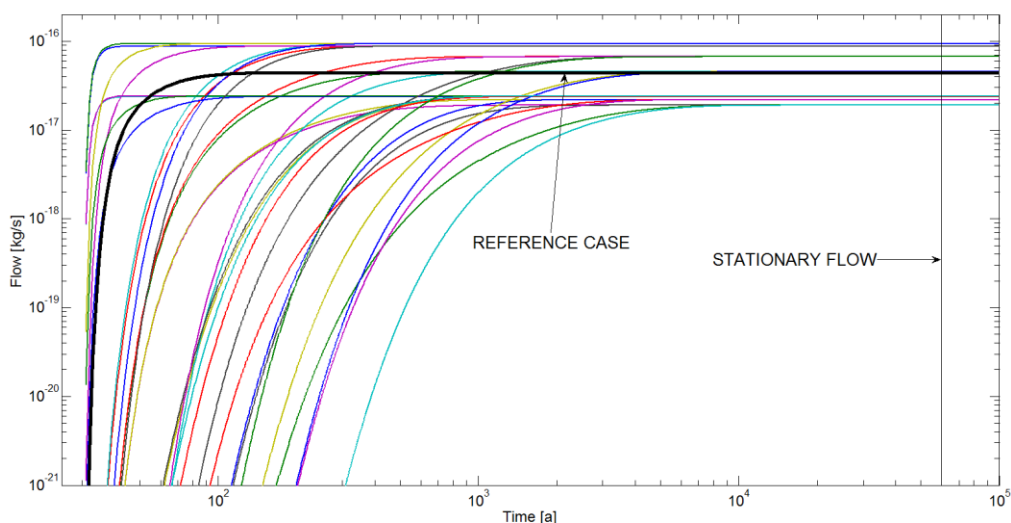
$$F = AC_0 \frac{\epsilon_1 D_1 \epsilon_2 D_2}{\epsilon_1 D_1 L_2 + \epsilon_2 D_2 L_1}. \quad (3.2.1)$$

Protože pro uvažované rozmezí hodnot platí, že $\epsilon_1 D_1 L_2 > \epsilon_2 D_2 L_1$ tok F je determinovaný zejména porozitou prostředí **Granit**; granitová vrstva je díky své malé porozitě hlavním omezujícím činitelem difúzního toku. Dalším důležitým parametrem ovlivňujícím F je pak ϵ_1 a nepatrný vliv může mít L_2 .

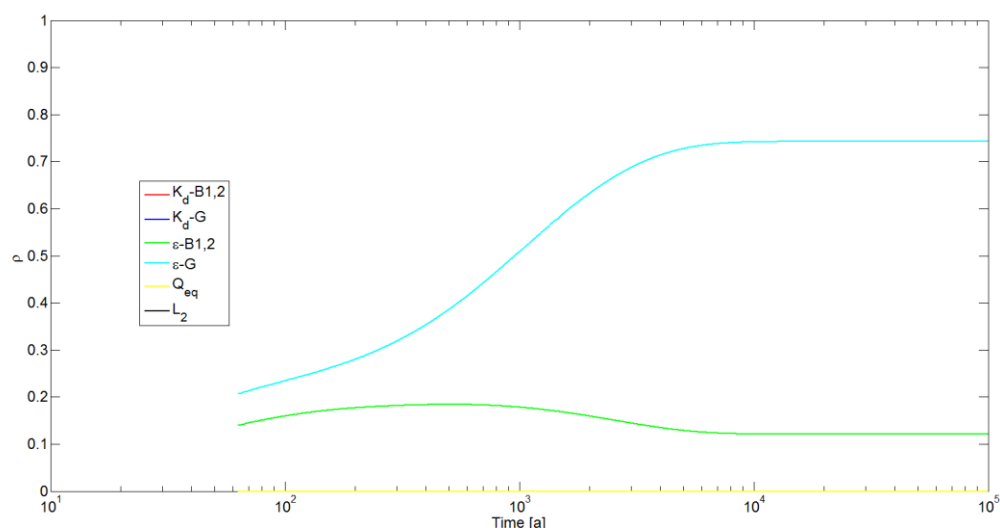
Na Obr. 19 jsou porovnány konstantní hodnoty toků vypočítané pro všech 65 kombinací parametrů pomocí rovnice (3.2.1) (červené křížky) a pomocí modelu v GoldSim (modré kolečka) upraveného pro tento případ. Je patrné, že oba výpočty poskytují stejné hodnoty. Dále, pro všech 65 kombinací parametrů nabývá konstantní tok šesti hodnot, přičemž pouze čtyři hodnoty se od sebe významně liší. To odpovídá rozboru analytického řešení (3.2.1), která předpokládá dominantní závislost pouze na třech parametrech. Na Obr. 20 jsou ukázány časové závislosti toků na rozhraní pro všechny kombinace parametrů. Tok označený tlustou černou barvou odpovídá časovému průběhu referenčního případu. Vertikální čára označuje čas, ve kterém byly získány hodnoty stacionárních toků. Na Obr. 21 jsou zobrazeny normalizované citlivostní míry ρ_i . Největší vliv na rozptyl hodnot toku má ϵ_2 (okolo 70% pro konstantní tok) a ϵ_1 (30% pro konstantní tok).



Obr. 19 Srovnání hodnot konstantních toků vypočítaných pomocí rovnice (3.2.1) a pomocí numerického modelu v GoldSim



Obr. 20 Časový vývoj toků na vnějším okraji transportní cesty.



Obr. 21 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř.

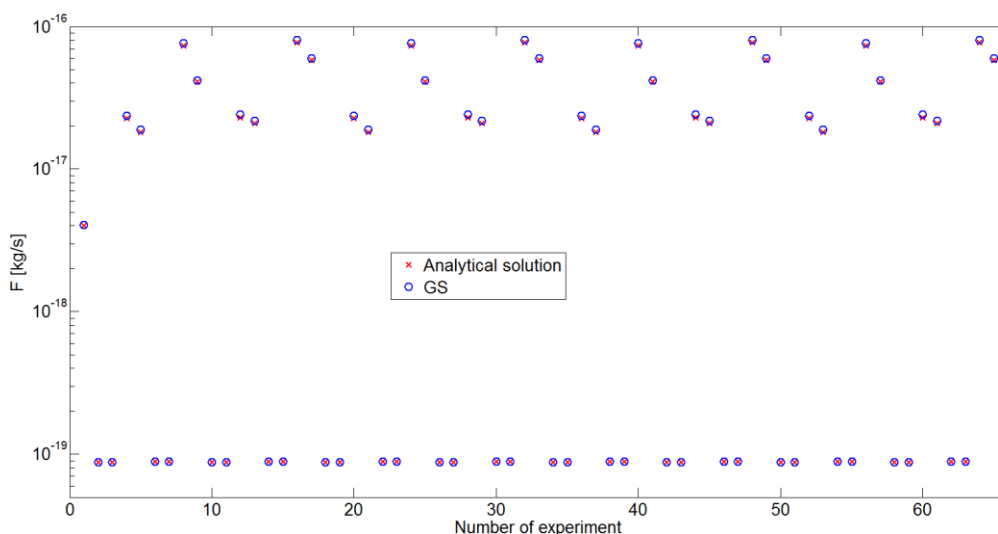
V druhém případě jsme analyzovali stacionární difúzi dvěma vrstvami, přičemž na začátku první vrstvy byla také udržovaná konstantní koncentrace a na konci druhé vrstvy byl definovaný ekvivalentní tok do proudící pukliny. Analytické řešení této transportní úlohy vede na konstantní tok ve tvaru (5.1.5)

$$F = AC_0 \frac{\varepsilon_1 D_1 \varepsilon_2 D_2 Q_{eq}}{(\varepsilon_1 D_1 L_2 + \varepsilon_2 D_2 L_1) Q_{eq} + A \varepsilon_1 D_1 \varepsilon_2 D_2} \quad (3.2.2)$$

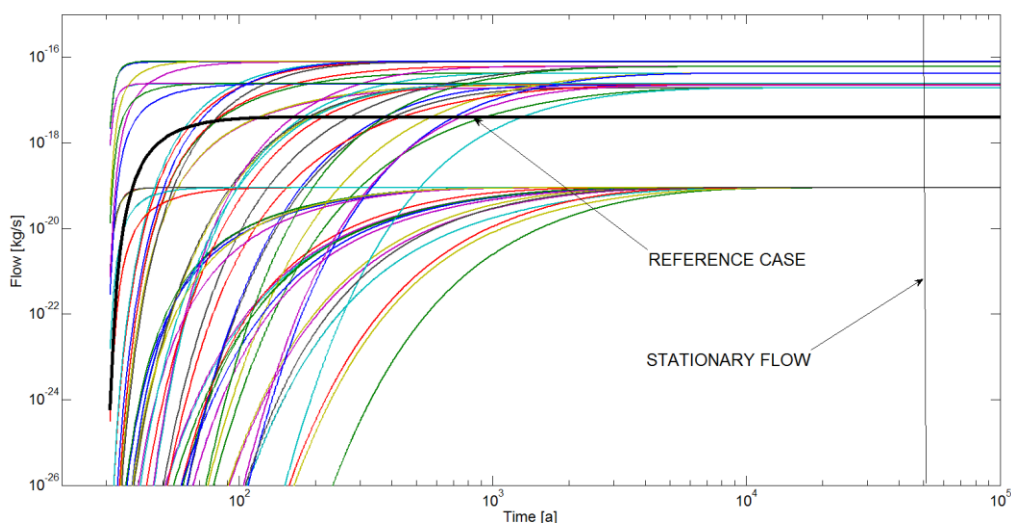
Pro $Q_{eq} \gg (A \varepsilon_1 D_1 \varepsilon_2 D_2) / (\varepsilon_1 D_1 L_2 + \varepsilon_2 D_2 L_1)$ přechází (3.2.2) v (3.2.1), Q_{eq} nemá vliv na hodnotu konstantního toku. V opačném případě, Q_{eq} dominuje, je tok možné aproximovat jako, $F \approx C_0 Q_{eq}$, Q_{eq} má rozhodující vliv na hodnotu konstantního toku.

Na Obr. 22 jsou porovnány konstantní hodnoty toků vypočítané pro všech 65 kombinací parametrů pomocí rovnice (3.2.2) (červené křížky) a pomocí modelu v GoldSim (modré kolečka) upraveného pro druhý případ. Hodnoty konstantních toků nabývají pro všech 65 kombinací parametrů pouze šesti hodnot, přičemž hodnota pro první experiment odpovídá

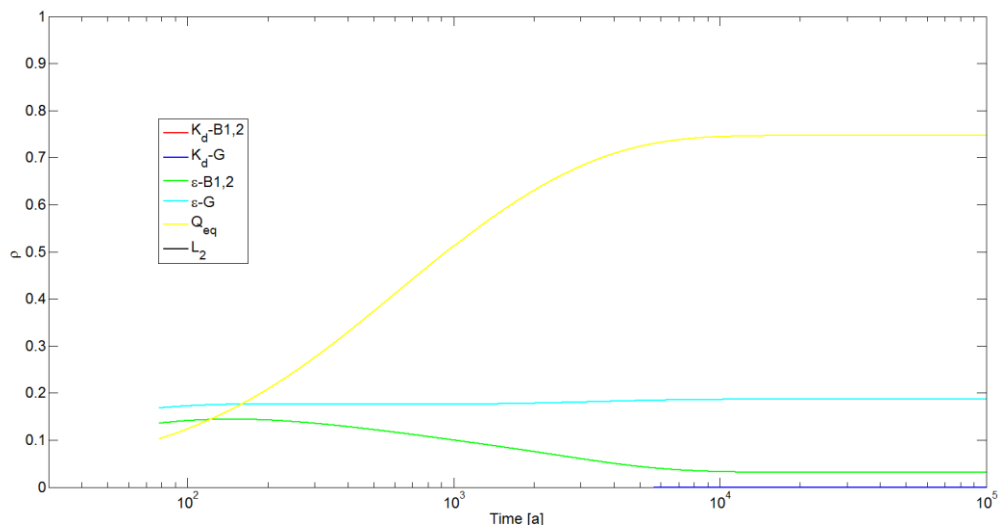
nejpravděpodobnějšímu scénáři s Q_{eq} (0,1 [l/a]). Rozdělení hodnot lze vysvětlit tak, že minimální tok Q_{eq} (2E-3 [l/a]) zcela determinuje hodnotu konstantního toku a pro maximální hodnoty Q_{eq} (10 [l/a]) se naopak projevuje vliv ε_1 a ε_2 . Na Obr. 23 jsou porovnány časové závislosti toků na rozhraní poslední cely **Granit** a cely modelující vodu v puklině pro všechny kombinace parametrů. Tok označený tlustou černou barvou odpovídá časovému průběhu referenčního případu. Vertikální čára označuje čas, ve kterém byly získány hodnoty stacionárních toků. Na Obr. 24 jsou nakonec uvedeny normalizované citlivostní míry ρ_i , jejich konstantní hodnoty potvrzují závěry analýzy. Největší vliv na rozptyl konstantních hodnot toku má Q_{eq} (přes 70 % pro konstantní tok), ε_2 (okolo 20 % pro konstantní tok) a ε_1 (méně jak 10% pro konstantní tok).



Obr. 22 Srovnání hodnot konstantních toků vypočítaných pomocí rovnice (3.2.2) a pomocí modelu v GoldSim.

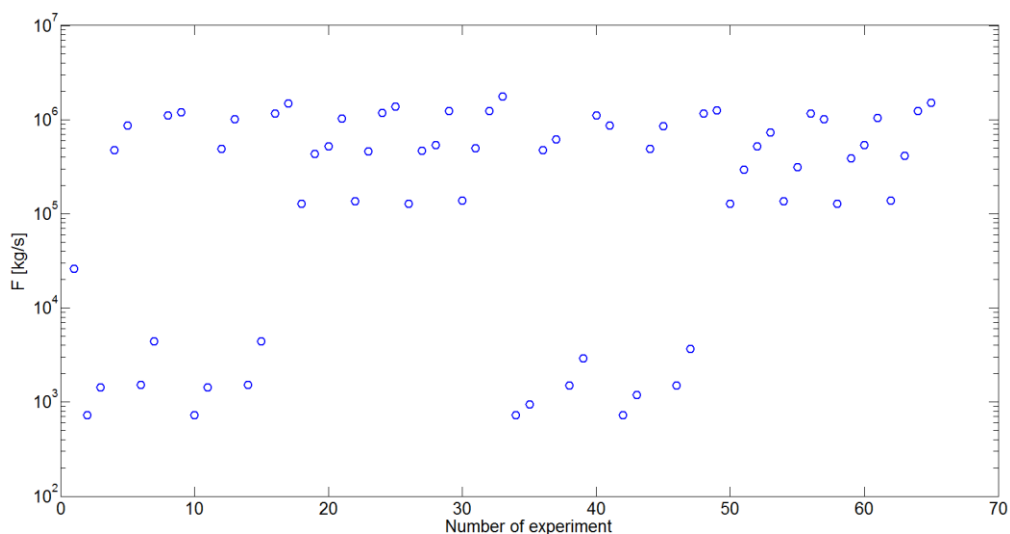


Obr. 23 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely Granit a cely modelující vodu v puklině pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 3.

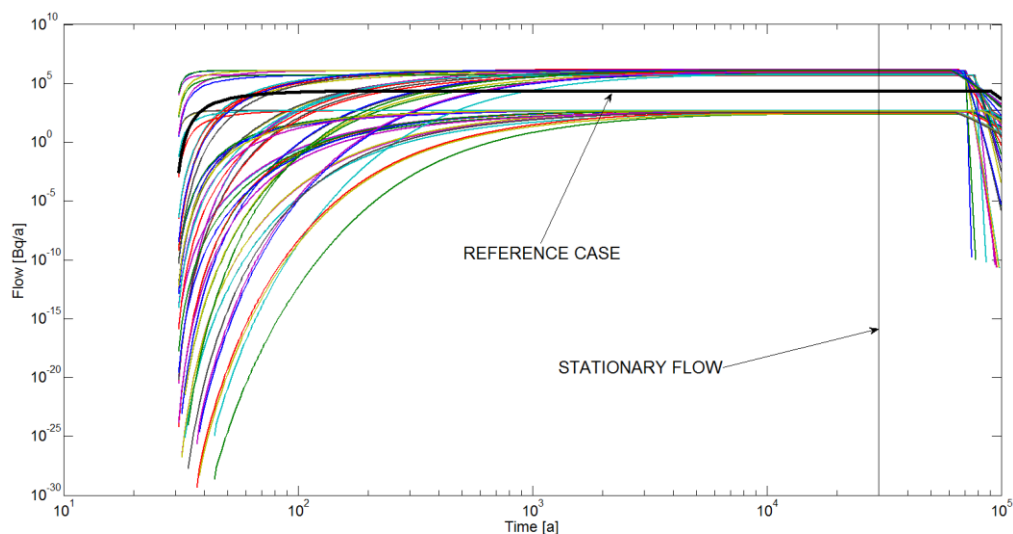


Obr. 24 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř.

Nakonec jsme provedli numerickou studii pro válcovou geometrii a radioaktivní rozpad. V této studii jsme uvažovali proměnnou difúzní plochu, radioaktivní rozpad a hraniční podmínku na konci vrstvy *Granit* pomocí elementů *Pipe*. Na Obr. 25 jsou porovnány konstantní hodnoty toků vypočítané pro všech 65 kombinací parametrů. Hodnoty konstantních toků nabývají stejně jako v předchozím případě pouze šesti hodnot, přičemž lze rozlišit dva pásy hodnot lišících se téměř o dva řády. Rozdělení hodnot lze vysvětlit tak, že pozice hlavních pásů jsou dány rozptylem hodnot Q_{eq} , a rozptyl hodnot v okolí každého z hlavních pásů pak rozptylem ε_2 a ε_1 . Na Obr. 26 jsou porovnány časové závislosti toků na rozhraní poslední cely **Granit** a první element *Pipe*. Tok označený tlustou černou barvou odpovídá časovému průběhu referenčního případu. Vertikální čára označuje čas, ve kterém byly získány hodnoty stacionárních toků.

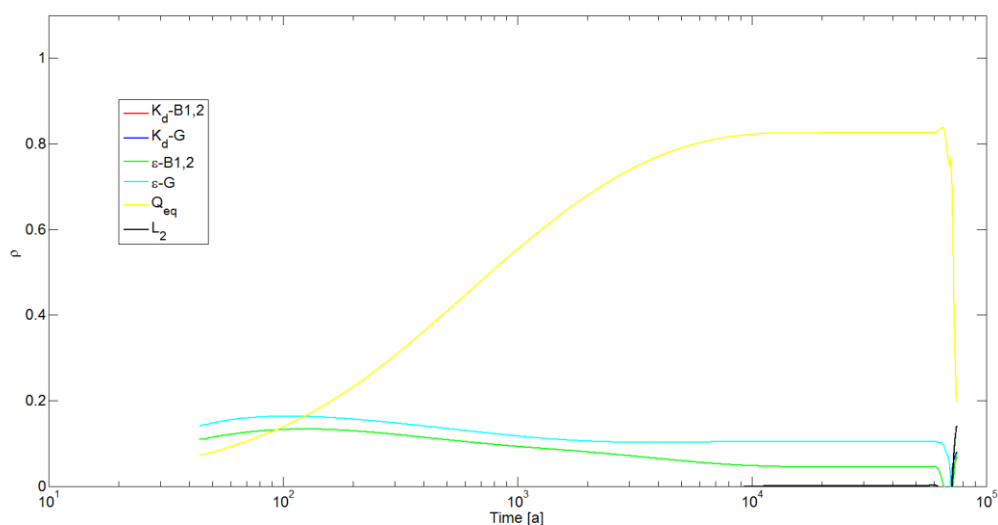


Obr. 25 Hodnoty konstantních toků vypočítaných v numerické studii s válcovou geometrií a radioaktivním rozpadem.



Obr. 26 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely **Granit** a první **Pipe** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 3.

Na Obr. 27 jsou uvedeny časové vývoje normalizovaných citlivostních měř ρ_i . Ve stacionárním stavu má největší vliv na rozptyl konstantních hodnot toku rozptyl hodnot Q_{eq} (přes 80% pro konstantní tok), dále ε_2 (okolo 10% pro konstantní tok) a ε_1 (méně jak 10% pro konstantní tok).



Obr. 27 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř.

Závěrem lze říct, že pro uvažované hodnoty zdrojového členu: rychlost loužení $0,1 [a^{-1}]$; rozpustnost $1 \cdot 10^{-7} [mol/l]$, inventář $5 \cdot 10^{13} [Bq]$ a volný objem $150 [l]$ mají na hodnotu konstantního toku z blízkého pole největší vliv tyto tři parametry: Q_{eq} , ε_2 a ε_1 .

3.3 Studie s neomezenou rozpustností

Třetí studie se zaměřila na vliv čtyř parametrů: K_d **Backfill1,2**, porosita **Backfill1,2**, Q_{eq} a rychlost loužení, jejich minimální, maximální a střední hodnoty jsou uvedeny v Tab. 4. Tyto hodnoty stejně jako v předchozích případech byly zadány od SÚRAO (Tab. 1). Dále byla ve studii uvažována neomezená rozpustnost (v GoldSim nastavena rozpustnost na hodnotu -1

 SÚRAO	Popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště	Evidenční označení:
		185/2017

mol/l), byla použita válcová geometrie s úhlem válcové výseče $\pi/2$ [rad], poloměrem kontejneru 0,78 [m], tloušťka první vrstvy **Backfill1** byla 0.2 [m], tloušťka druhé vrstvy **Backfill2** 1,58 [m], tloušťka vrstvy **Granit** 0,4 [m]. Studie zahrnovala celkem $2^4+1 = 17$ simulací, včetně referenčního případu.

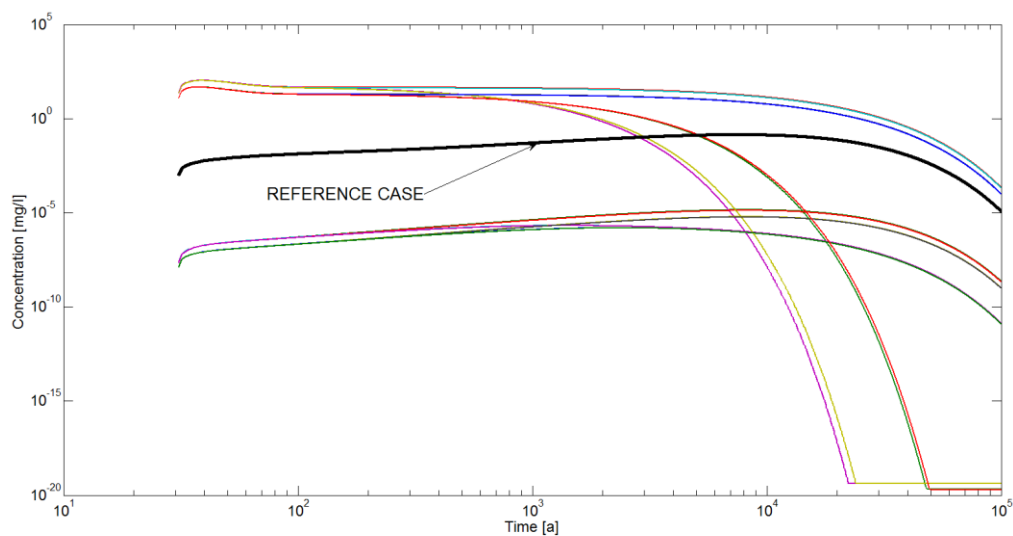
Tab. 4 Parametry uvažované ve studii 3.3

	K_d [m ³ /kg] <i>Backfill</i> _{1,2}	porosita <i>Backfill</i> _{1,2}	Q_{eq} [l/a]	Rychlost loužení [a ⁻¹]
Mean	$1 \cdot 10^{-5}$	0,35	0,1	$1 \cdot 10^{-5}$
Min	$1 \cdot 10^{-9}$	0,20	0,002	$1 \cdot 10^{-10}$
Max	0,001	0,50	10	0,1

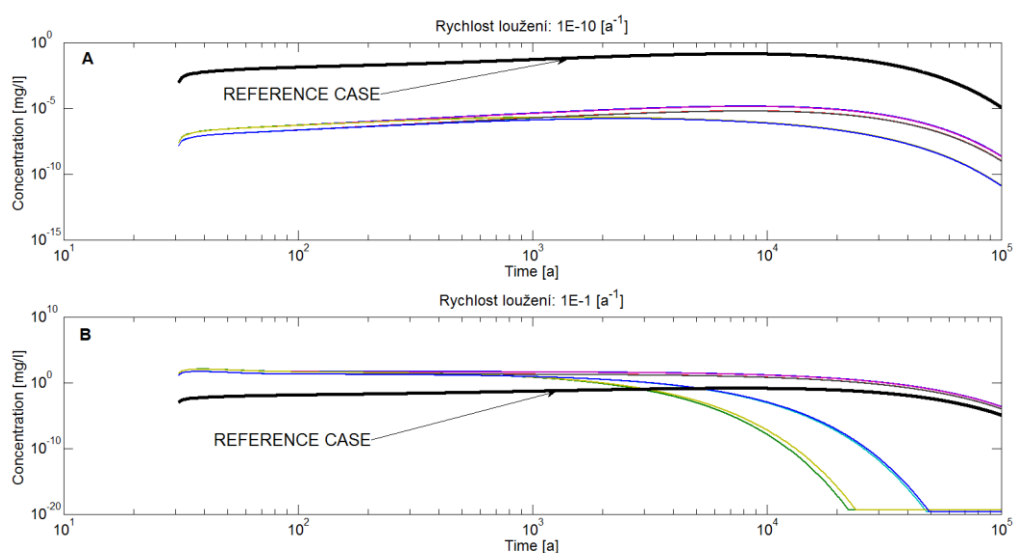
Na Obr. 28 jsou zobrazeny časové vývoje koncentrace C-14 ve volné vodě zdrojového členu. Hodnota koncentrace zůstává na časovém intervalu (30, 40 000) [a] ve všech případech téměř konstantní, přičemž tyto konstantní hodnoty se liší až o sedm řádů. To je způsobeno velkým rozptylem hodnot rychlosti loužení, což je potvrzeno na Obr. 29, kde jsou rozděleny koncentrace do dvou grafů podle rychlosti loužení. V obou dvou případech je zakreslen časový průběh koncentrace pro referenční případ. Na Obr. 30 jsou uvedeny časové vývoje normalizovaných citlivostních měř ρ_i . Výsledky analýzy ukazují, že největší vliv na rozptyl hodnot koncentrací ve volné vodě kontejneru má na časovém intervalu (30, 10 000) [a] rychlost loužení a na časovém intervalu (10 000, 100 000) [a] porosita

Na Obr. 31 jsou porovnány časové vývoje toků na rozhraní jednotlivých částí modelu pro referenční hodnoty parametrů. Na Obr. 32 jsou zobrazeny časové vývoje toků na rozhraní poslední cely **Backfill2** a první cely **Granit** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 4. Tok označený černou barvou odpovídá časovému průběhu referenčního případu. Hodnoty konstantních toků lze rozdělit do tří základních skupin, které se dále dělí na podskupiny. Na Obr. 33 jsou uvedeny časové vývoje normalizovaných citlivostních měř ρ_i . Největší vliv na rozptyl konstantních hodnot toku má rychlost loužení, potom Q_{eq} a porosita $\varepsilon_{1,2}$.

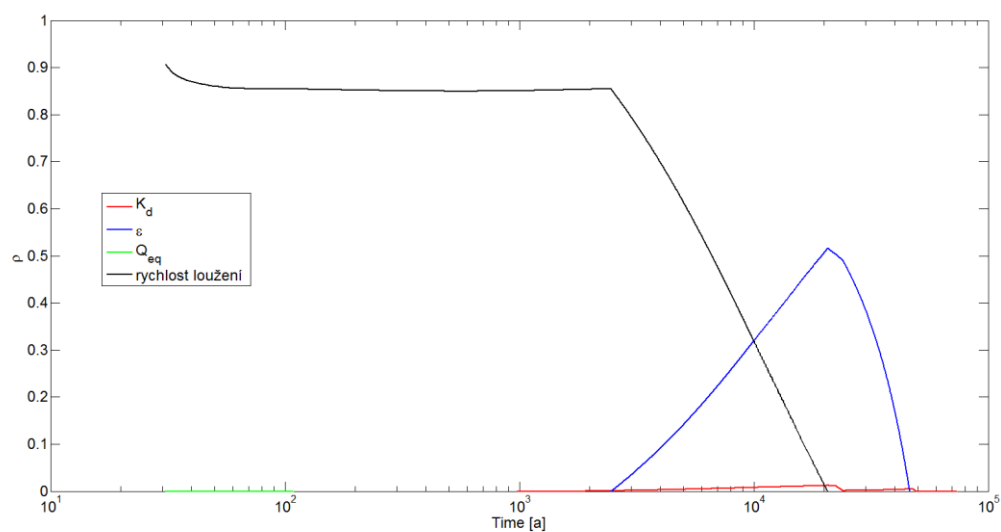
Závěrem lze říct, že největší vliv na konstantní tok z blízkého pole má rychlost loužení a potom Q_{eq} , a porosita. Studie taktéž ukázala, že díky obrovskému rozptýlu hodnot rychlosti loužení se koncentrace ve volné vodě obsažené ve zdrojovém členu může měnit v rozmezí až o sedm řádů.



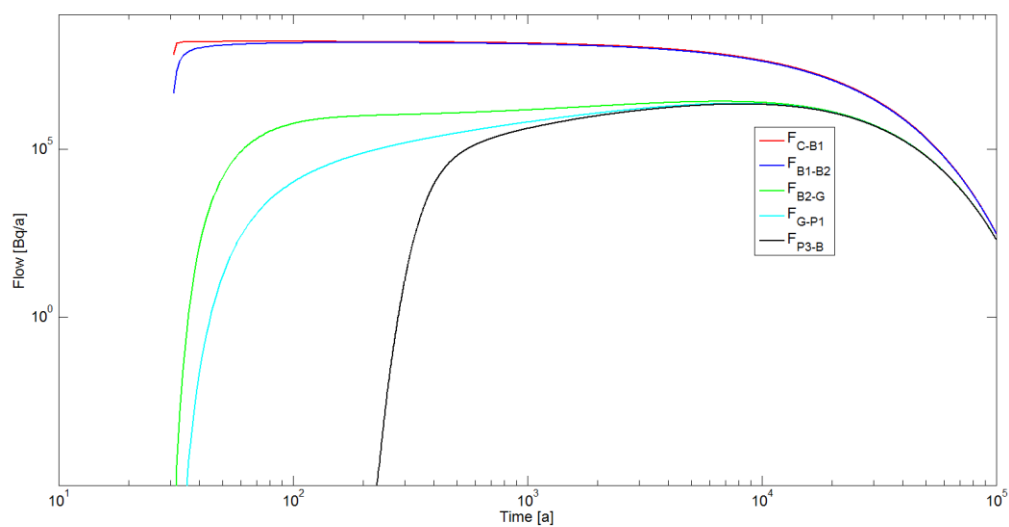
Obr. 28 Časový vývoj koncentrací ve volné vodě zdrojového členu pro všechny kombinace minimálních a maximálních hodnot parametrů blízkého pole z Tab. 4.



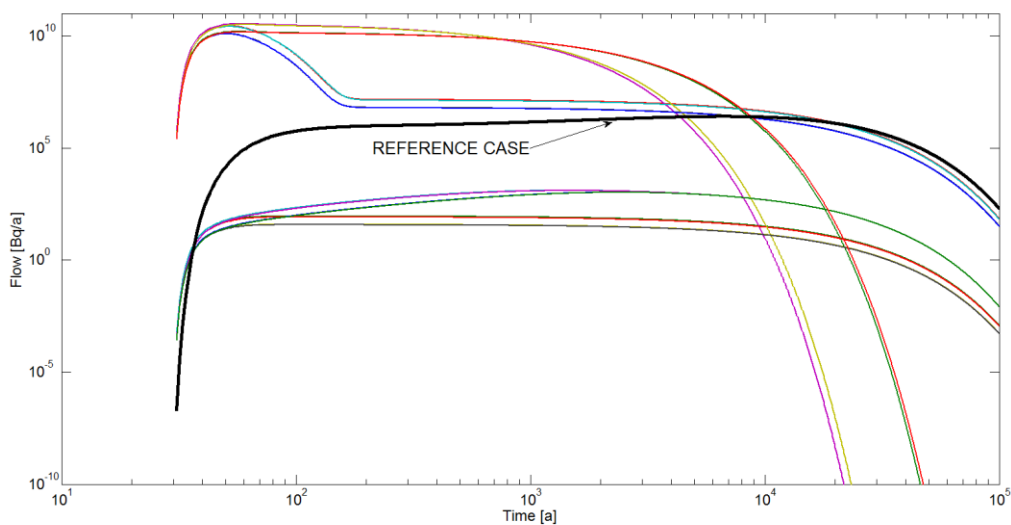
Obr. 29 Časový vývoj koncentrací ve volné vodě kontejneru **A**: rychlost loužení $1 \cdot 10^{-10} [a^{-1}]$ a **B**: rychlost loužení $0,1 [a^{-1}]$.



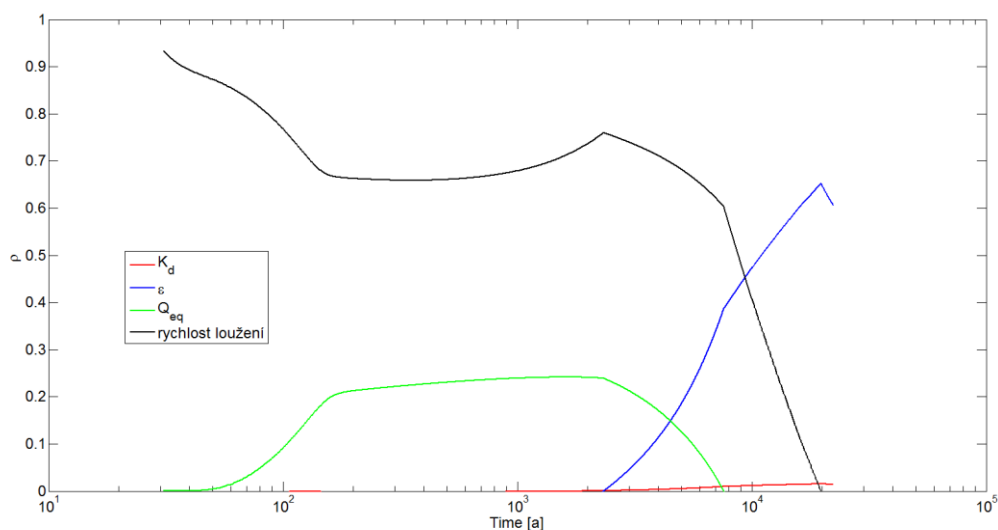
Obr. 30 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř časového vývoje koncentrací ve volné vodě kontejneru.



Obr. 31 Časový vývoj toků na rozhraní jednotlivých částí modelu pro referenční hodnoty parametrů.



Obr. 32 Časový vývoj toků na rozhraní poslední cely **Backfill2** a první cely **Granit** pro všechny kombinace uvažovaných parametrů z Tab. 4.



Obr. 33 Časová závislost normalizovaných citlivostních měř toků na rozhraní poslední cely **Backfill2** a první cely **Granit**.

4 Souhrn a diskuze

Hlavním úkolem tohoto projektu je provedení neurčitostní analýzy (UA), citlivostní analýzy (SA) a zhodnocení vlivu neurčitosti parametrů ovlivňujících transport C-14 a případně dalších mobilních radionuklidů z hlubinného úložiště ostatních radioaktivních odpadů (RAO) nepřijatelných do přípovrchových úložišť. Tato výzkumná zpráva obsahuje popis vývoje modelu transportu C-14 z hlubinného úložiště a úvodní screeningové UA & SA.

Navrhli jsme a implementovali model transportu C-14. Tento model soustřeďuje RAO do jednoho elementu *Source*, který reprezentuje jeden sud. Tím se liší od jiného možného přístupu, který předpokládá, že na začátku simulace dojde k uvolnění veškerého RAO do celého vnitřního objemu ukládacích komor, obsah ukládací komory je modelován jako soustava homogenních vrstev směsi RAO-výplňový materiál. Difúzní transport výplňovým materiálem a horninovým prostředím jsme reprezentovali pomocí 1D sítě elementů *Cell Pathway*, advektivní transport v bezprostředním okolí sudu jsme neuvažovali. Abychom zohlednili heterogenní povahu transportní cesty, cesta je složena ze tří částí, každá část reprezentuje různý materiál, přičemž difúzní cesta v každé části je reprezentována vlastní podsítí elementů *Cell pathway* s volně nastavitelnými difúzními délkami a plochami. Tím vznikl flexibilní model umožňující studovat širokou škálu transportních úloh.

Implementovaný model jsme použili ve třech UA & SA studiích. První studie byla věnována vlivu čtyř vybraných parametrů zdrojového členu: rychlost loužení, rozpustnost, inventář, volný objem. Druhá studie se zaměřila na šest parametrů blízkého pole: K_d **Backfill**, K_d **Granite**, porosita **Backfill**, porosita **Granite**, Q_{eq} , difúzní délka vrstvy **Backfill**. Třetí studie se zabývala vlivem těchto čtyř parametrů: K_d **Backfill**, porosita **Backfill**, Q_{eq} a rychlost loužení. Ve všech případech byly úspěšně identifikovány parametry, které nejvíce přispívají k neurčitostem sledovaných výstupních hodnot.

Aby se snížil rozptyl hodnot vstupních parametrů, budou do modelu zavedeny explicitně dvě formy C-14: anorganická a organická. Dále bude v modelu explicitně uvažována možnost difúze v částečně saturovaném prostředí, tedy difúze v kapalně a plynné formě. Tato možnost je v zadávací tabulce objednavatele (Tab. 1) reprezentována zvýšením hodnoty relativní difuzivity. Způsob implementace bude na základě (Catlett a Tauxe 2014), viz. 5.1.3.

Studie ukázala, že poměrně rychle dojde k difúzi z poškozeného sudu do okolního výplňového materiálu. Tento stav odpovídá počátečnímu předpokladu modelu, který modeluje obsah ukládací komory jako soustavu homogenních vrstev směsi RAO-výplňový materiál. Proto bude vytvořen alternativní 2D model ukládací komory a jejího okolí, který bude obsahovat jako zdrojový člen směs RAO-výplňový model.

5 Citace a seznam literatury

- Catlett, K., a Tauxe J. (2014): Implementation of Diffusion in GoldSim. Neptune document system. – JT, 3 Oct 2014.
- GoldSim (2014): GoldSim Contaminant Transport Module User's Guide. - GoldSim Technology Group, version 6.4.
- Hanss M. (2002): The transformation method for the simulation and analysis of systems with uncertain parameters. – Fuzzy Sets and Systems 130, 277–289.
- Haverkamp B., Biurrun E. and Kucerka M. (2005): Update of the Safety Assessment of the Underground Richard Repository, Litoměřice. WM'05 Conference, February 27 – March 3, 2005, Tucson, AZ.
- Heikola T. (2014): Leaching of ¹⁴C in repository conditions. Transport and speciation. JULKAISIJA – UTGIVARE – PUBLISHER, VTT Technical Research Centre of Finland. Finland
- Landa L. (2012): Modelování vlivu vybraných parametrů migrace radionuklidů z úložišť radioaktivních odpadů na jejich přenos do biosféry. – Disertační práce, FJFI ČVUT v Praze, 87 s.
- Landa J., Trpkošová D., Havlová V., Gondolli J. (2015): Analýza stávajícího modelu hlubinného úložiště. SÚRAO Technická zpráva číslo TZ 8/2015. Praha, 2015.
- Neretnieks I., Liu L., Moreno L. (2010): Mass transfer between waste canister and water seeping in rock fractures. Revisiting the Q-equivalent model. - SKB Technical Report TR-10-42.
- Press W.H. *et al.*: The Art of Scientific Computing, Third Edition (2007), 1256 s. - Cambridge University Press, Cambridge, USA.

Přílohy

Příloha A: Implementace difúze a advekce v GoldSim pomocí konečně objemového přístupu

GoldSim umožňuje použít k řešení úloh migrace radionuklidů konečně objemový přístup, ve kterém je sledovaná oblast rozdělena na elementární objemy, které jsou v GoldSim modelovány pomocí elementů *Cell pathway*. Celá oblast je tímto rozdělena na síť elementů *Cell pathway* vzájemně propojených difúzním a advekčním transportem.

5.1.1 Bilanční rovnice elementu *Cell pathway*

Látkové množství radionuklidu v jednom elementu *Cell pathway* se může změnit jak difúzním a/nebo advekčním transportem mezi sousedními celami, tak radioaktivním rozpadem samotného radionuklidu, popřípadě i mateřského radionuklidu obsaženého uvnitř cely. Základní hmotnostní bilanční rovnici *i*-té cely lze zapsat ve tvaru (GoldSim 2014):

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

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

$$f_{i \rightarrow j}^A = q_{i \rightarrow j} c_k^i, \quad (\text{A.2})$$

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

$$f_{i \rightarrow j}^D = D_k^{i,j} (c_k^i - c_k^j), \quad (\text{A.3})$$

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

$$D_k^{i,j} = \frac{A^{i,j}}{\frac{\Delta x_i}{D_e^i} + \frac{\Delta x_j}{D_e^j}}, \quad (\text{A.4})$$

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

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

$$C_k^i = \frac{m_k^i}{K_{d,k}^i M^i + V^i}, \quad (\text{A.5})$$

kde $K_{d,k}^i$ [L^3/M] je distribuční koeficient k -tého radionuklidu pevné fáze v i -té cele, jejichž hmotnost je M^i [M], V^i [L^3] označuje objem kapalné fáze v i -té cele.

5.1.2 Numerické řešení bilančních rovnic sítě *Cell pathway*

Aby GoldSim řešil rovnice (A.1) pro celou síť cel, nejdříve identifikuje podsítě cel vzájemně propojených transportem a evoluci těchto podsítí řeší samostatně. Radionuklidy, které jsou součástí rozpadové řady, jsou taktéž vzájemně vázány. Proto GoldSim sestaví z rovnic (A.1) pro každou rozpadovou řadu podsítě cel samostatnou soustavu diferenciálních rovnic, která může být v maticovém tvaru zapsána jako

$$\mathbf{m}' = [\mathbf{D} + \mathbf{T}]\mathbf{m}, \quad (\text{A.6})$$

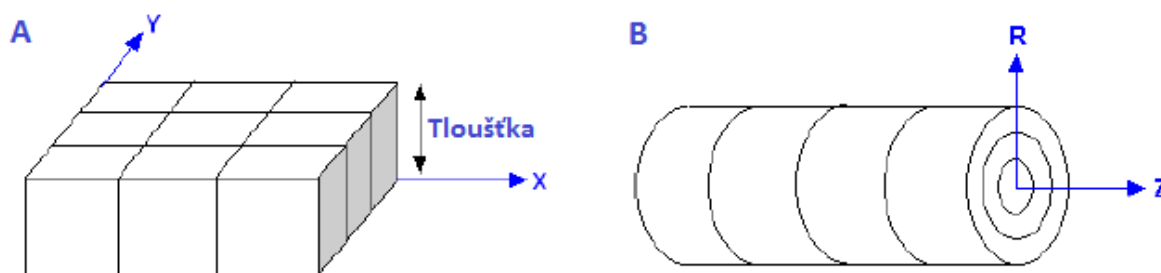
kde \mathbf{m} [M] označuje vektor hmotností radionuklidů rozpadové řady, \mathbf{m}' [M/T] je vektor rychlosti změn hmotností radionuklidů rozpadové řady, \mathbf{D} [1/T] je matice obsahující rozpadové a přírůstkové koeficienty, \mathbf{T} [1/T] je matice obsahující transportní koeficienty. GoldSim používá pro soustavu diferenciálních rovnic (A.6) Eulerovu implicitní metodu (Press et. al. 2007), která pro časový krok Δt řeší (A.6) jako

$$\mathbf{m}(t + \Delta t) = [\mathbf{I} - \mathbf{D}\Delta t - \mathbf{T}\Delta t]^{-1} \mathbf{m}(t), \quad (\text{A.7})$$

kde \mathbf{I} označuje jednotkovou matici a $^{-1}$ maticovou inverzi.

Pro zvýšení přesnosti implicitní Eulerovi metody GoldSim automaticky dělí časový krok v závislosti na uživatelem zvolené přesnosti výpočtu. Přesnost výpočtu (vysoká, střední, nízká) je možné nastavit v záložce *Contaminant Transport* dialogového okna *Model / Options*.

GoldSim poskytuje nástroj, tzv. *CellNet Generator*, pro automatizaci vytváření sítě cel. Tento nástroj umožňuje vytvořit dvourozměrnou řadu cel reprezentující pravoúhloú nebo válcovou oblast včetně advektivních nebo difúzních transportních spojení (Obr. 34).



Obr. 34 Schématické znázornění pravoúhlé (A) a válcové (B) geometrie sítě cel. Objem cel v pravoúhlé síti cel je definován pomocí souřadnic X, Y a tloušťky. Souřadnice X a Y mohou buď ekvidistantně dělit celkovou délku a šířku oblasti nebo mohou být zadány uživatelem. Objem cel ve válcové síti cel je definován pomocí axiálních Z a radiálních R souřadnic, a úhlu, který může být z intervalu (0° , 360°), přičemž úhel 360° náleží celému válci. Stejně jako v případě pravoúhlé sítě Z a R souřadnice mohou buď ekvidistantně dělit celkovou délku a poloměr válcové oblasti nebo mohou být uživatelem zadány. Převzato a upraveno z (GoldSim 2014).

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

5.1.3 Implementace difúze v GoldSim v částečně saturovaném prostředí

Tato část Příloha A: Implementace difúze a advekce v GoldSim pomocí konečně objemového přístupuse zabývá implementací difúze v plynném a kapalném prostředí v případě difúze v částečně saturovaném porézním prostředí. GoldSim umožňuje modelovat difúzi v nesaturovaném prostředí pomocí tzv. *Diffusivity Reduction Formula*, která je jednou z vlastností elementu *Fluid* (GoldSim 2014). Pomocí této rovnice je možné definovat, jak se změní difúze v kapalném a plynném prostředí se změnou saturace porézního prostředí. Tuto možnost GoldSim nabídl od verze 10. Pro starší verze GoldSimu a pro složitější úlohy s více porézními materiály byl navržen postup uvedený v (Catlett a Tauxe 2014). Pro pochopení obou implementací uvažujme pro jednoduchost, že v i -té a j -té cele je stejný porézní materiál a stejná difúzní délka. V případě přímé implementace v GoldSim přepíšeme rovnice (A.3,4) ve tvaru

$$f_{i \rightarrow j}^D = \frac{A^{i,j} D_w \tau \varepsilon r}{L} (c_k^i - c_k^j), \quad (\text{A.8})$$

kde D_w je difuzivita ve vodě, τ je geometrický faktor, ε je porozita, L je difúzní délka, a r redukce difúze, která je právě vypočítaná pomocí rovnice zadané v *Diffusivity Reduction Formula*. V návodu je doporučeno, aby tato rovnice měla tvar mocniny saturace (SAT_i)

$$r = SAT_i^E, \quad (\text{A.9})$$

přičemž je doporučeno, aby pro difúzi v kapalně fázi byla zvolena hodnota $E = 3,33$ a pro difúzi v plynné fázi $E = 2 \div 2,34$. GoldSim interně vypočítá pro první tekutinu v každé cele SAT_1 jako

$$SAT_1 = \min(V_F, V_P) / V_P, \quad (\text{A.10})$$

kde V_F je objem tekutiny, $V_P = \sum_i M_i \varepsilon_i / \rho_i$ je celkový objem pórů pro všechny pevné materiály v cele s hmotností M_i , porozitou ε_i a hustotou ρ_i . Pro další tekutinu v cele se SAT_2 vypočítá jako

$$SAT_2 = \min(V_F, V_R) / V_P, \quad (\text{A.11})$$

kde V_R je zbývající objem pórů.

Pro pochopení implementace navržené v (Catlett a Tauxe 2014) přepíšeme rovnice (A.3,4) ve tvaru

$$f_{i \rightarrow j}^D = \frac{A^{i,j} S_{a,w} D_{a,w} \tau_{a,w} \varepsilon}{L} (c_k^i - c_k^j), \quad (\text{A.12})$$

kde $S_{a,w}$ je, $D_{a,w}$ a $\tau_{a,w}$ je difuzivita a geometrický faktor v plynné, respektive kapalně fázi. Abychom implementovali $S_{a,w}$ je nutné vynásobit difúzní plochu $A^{i,j}$ tímto parametrem. V případě geometrického faktoru je implementace složitější, protože geometrický faktor τ je vlastností porézního materiálu a tím pádem nelze přímo zadat rozdílné hodnoty pro kapalně

a plynné prostředí. V (Catlett a Tauxe 2014) je navrženo zvolit $\tau = 1$ v definici porézního prostředí a dělit difúzní délky hodnotami τ_a popřípadě τ_w vzhledem ke zvolenému prostředí.

Příloha B: Analytické řešení stacionární difúze dvěma vrstvami

5.1.4 Hraniční podmínky: na začátku první vrstvy je udržovaná konstantní koncentrace a na konci druhé vrstvy nulová koncentrace

Uvažujme případ stacionární difúze dvěma vrstvami, ve které jsou jako hraniční podmínky udržovány na začátku první vrstvy konstantní koncentrace C_0 a na konci druhé vrstvy nulová koncentrace. Ve stacionárním případě můžeme difúzi matematicky popsat pomocí homogenních diferenciálních rovnic druhého řádu s konstantními koeficienty. Pokud označíme jako $C_1(x)$ koncentraci v první vrstvě a $C_2(x)$ koncentraci v druhé vrstvě, tak potom můžeme migraci ve stacionárním stavu popsat pomocí soustavy dvou homogenních diferenciálních rovnic

$$D_1 \frac{d^2 C_1}{dx^2} = 0, \quad x \in (0, L_1), \quad D_1 = G_1 D_w, \quad (\text{B.1})$$

$$D_2 \frac{d^2 C_2}{dx^2} = 0, \quad x \in (L_1, L_1 + L_2), \quad D_2 = G_2 D_w, \quad (\text{B.2})$$

kde L_1 a L_2 jsou délky první a druhé vrstvy, G_1 a G_2 jsou geometrické faktory první a druhé vrstvy a D_w je difuzivita ve vodě.

Tyto rovnice je nezbytné doplnit o čtyři hraniční podmínky, které mají v našem případě tvar:

$$C_1 = C_0, \quad x = 0; \quad (\text{B.3})$$

$$C_1 = C_2, \quad x = L_1; \quad (\text{B.4})$$

$$C_2 = 0, \quad x = L_1 + L_2; \quad (\text{B.5})$$

$$A \varepsilon_1 D_1 \frac{dC_1}{dx} = A \varepsilon_2 D_2 \frac{dC_2}{dx}, \quad x \in (0, L_1 + L_2). \quad (\text{B.6})$$

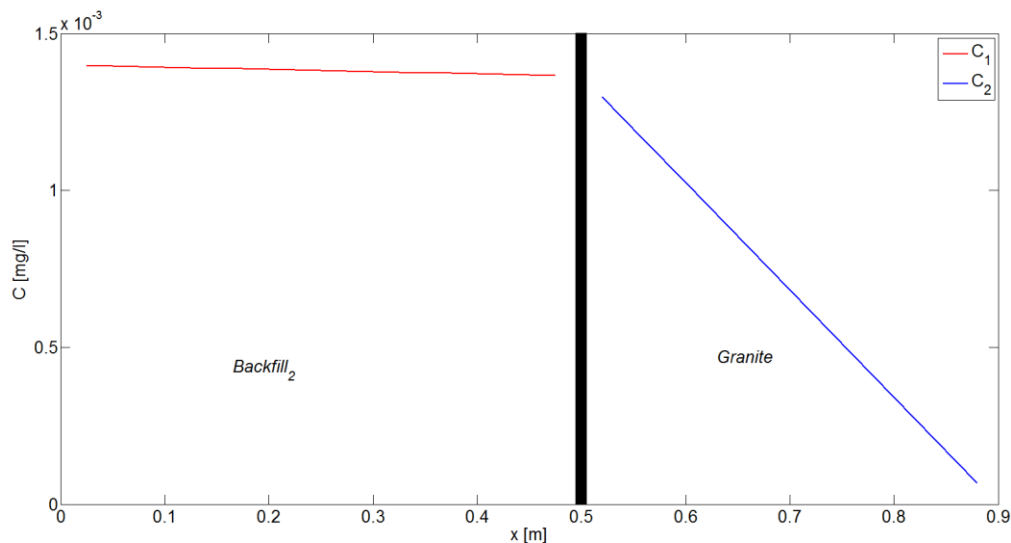
Obecné řešení rovnic (B.1, 2) můžeme zapsat ve tvaru:

$$C_1(x) = A_{11}x + A_{12}, \quad C_2(x) = A_{21}x + A_{22}. \quad (\text{B.7})$$

Konstanty $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}$ určíme z hraničních podmínek (B.3-B.6). To vede na hledané analytické vyjádření konstantního toku ve tvaru

$$F = AC_0 \frac{\varepsilon_1 D_1 \varepsilon_2 D_2}{\varepsilon_1 D_1 L_2 + \varepsilon_2 D_2 L_1}. \quad (\text{B.8})$$

Na Obr. 35 je znázorněn konstantní profil koncentrací ve dvou vrstvách. Protože pro použité hodnoty parametrů platí $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ (viz. popis k Obr. 35), je sklon C_1 daleko menší než C_2 (podmínka konstantního toku (B.6)).



Obr. 35 Profily konstantních $C_1(x)$ (Backfill₂) a $C_2(x)$ (Granite) vypočítané pro $L_1=0,5$ a $L_2=0,4$ [m], $\varepsilon_1=0,35$ a $\varepsilon_2=0,01$, $D_w=1 \cdot 10^{-9}$ [m² s⁻¹], $G_1=0,7$, $G_2=0,8$, $A=1$ [m²], $C_0=1,4 \cdot 10^{-6}$ [kg m⁻³].

5.1.5 Hraniční podmínka: na začátku první vrstvy je udržovaná konstantní koncentrace a na konci druhé vrstvy je definován ekvivalentní tok do proudící pukliny

Uvažujme případ stacionární difúze dvěma vrstvami, přičemž na začátku první vrstvy je udržována konstantní koncentrace C_0 a na konci druhé vrstvy je definován ekvivalentní tok do proudící pukliny Q_{eq} . Ve stacionárním případě můžeme opět difúzi popsat pomocí homogenních diferenciálních rovnic (B1,2), které tentokrát doplníme o následující hraniční podmínky

$$C_1 = C_0, \quad x = 0; \quad (\text{B.9})$$

$$C_1 = C_2, \quad x = L_1; \quad (\text{B.10})$$

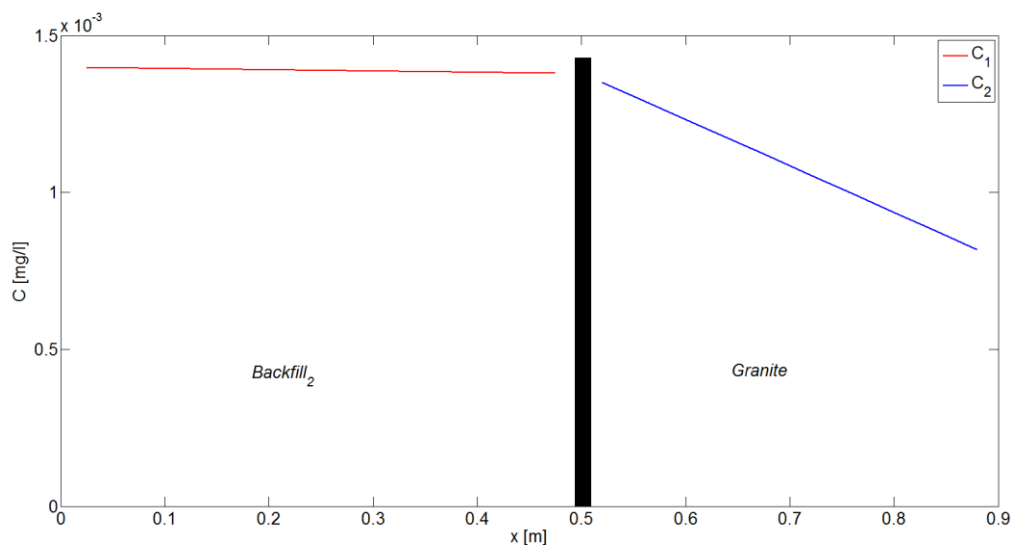
$$A\varepsilon_2 D_2 \frac{dC_2}{dx} = -Q_{eq} C_2, \quad x = L_1 + L_2; \quad (\text{B.11})$$

$$A\varepsilon_1 D_1 \frac{dC_1}{dx} = A\varepsilon_2 D_2 \frac{dC_2}{dx}, \quad x \in (0, L_1 + L_2). \quad (\text{B.12})$$

Opět použijeme hraniční podmínky B.9-12 pro výpočet konstant obecného řešení (B.7). To vede na konstantní tok v uvažované soustavě ve tvaru

$$F = AC_0 \frac{\varepsilon_1 D_1 \varepsilon_2 D_2 Q_{eq}}{(\varepsilon_1 D_1 L_2 + \varepsilon_2 D_2 L_1) Q_{eq} + A \varepsilon_1 D_1 \varepsilon_2 D_2}. \quad (\text{B.13})$$

Na Obr. 36 je zobrazený konstantní profil koncentrace pro malé Q_{eq} (viz. popis k Obr. 36), které způsobí koncentrační skok na konci uvažované soustavy ($x = L_1 + L_2$).



Obr. 36. Profily konstantních $C_1(x)$ (Backfill₂) a $C_2(x)$ (Granite) vypočítané pro $L_1 = 0,5$ a $L_2 = 0,4$ [m], $\varepsilon_1 = 0,35$ a $\varepsilon_2 = 0,01$, $D_w = 1 \cdot 10^{-9}$ [m² s⁻¹], $G_1 = 0,7$, $G_2 = 0,8$, $A = 1$ [m²], $C_0 = 1,4 \cdot 10^{-6}$ [kg m⁻³] a $Q_{eq} = 0,8$ [l a⁻¹].

Příloha C: Metody neurčitostní a citlivostní analýzy

Neurčitostní analýza v kontextu modelování se snaží odhadnout a kvantifikovat neurčitosti hodnot sledovaného výstupu modelu ($y(\Sigma)$), které vznikají v důsledku nejistot v hodnotách některých vstupních parametrů modelu (Σ). S neurčitostní analýzou je úzce spjata citlivostní analýza, která hledá odpověď na otázku jak jednotlivé neurčité parametry (s , $s \in \Sigma$) přispívají k neurčitosti hodnot výstupu modelu $y(\Sigma)$.

Pro obě analýzy je důležitá volba matematického popisu neurčitostí vstupních parametrů. V této příloze bude v krátkosti uvedena použitá metoda neurčitostní a citlivostní analýzy založená na teorii fuzzy množin.

Fuzzy reálné číslo si lze představit jako sadu parametrizovaných intervalů, které jsou uspořádány hierarchicky tak, že $S^\beta \subset S^\alpha$ pokud $\alpha < \beta$. Hodnotu indexu $0 \leq \alpha \leq 1$ lze interpretovat jako stupeň pravděpodobnosti, že hodnota s bude z intervalu S^α . Hodnota $\alpha = 1$ reprezentuje nejvyšší stupeň pravděpodobnosti a odpovídající interval S^1 obsahuje pouze jedinou hodnotu. Na druhé straně, minimální hodnotě $\alpha = 0$ odpovídá nejmenší stupeň pravděpodobnosti a odpovídající interval S^0 zahrnuje všechny přípustné hodnoty s , tj. $[\min(S), \max(S)]$.

Transformační metoda (Hanss 2002) umožňuje analýzu numerických modelů s neurčitými parametry, jejichž hodnoty jsou vyjádřeny pomocí fuzzy reálných čísel. Transformační metoda nejdříve rozdělí interval možných hodnot na podintervaly $S_i^j \equiv (\alpha_i^j, \beta_i^j)$, tzv. α -řez. Každý neurčitý parametr je tak reprezentován množinou $(M + 1)$

intervalů $\tilde{s}_i = \{S_i^0, S_i^1, \dots, S_i^M\}$. V následujícím kroku metoda transformuje každý interval S_i^j do řady \hat{S}_i^j . V případě použité redukované transformační metody \hat{S}_i^j má tvar

$$\hat{S}_i^j = \overbrace{\left((\alpha_i^j, \beta_i^j), (\alpha_i^j, \beta_i^j), \dots, (\alpha_i^j, \beta_i^j) \right)}^{2^{i-1} \text{ dvojic}}$$

$$\alpha_i^j = \underbrace{(a_i^j, \dots, a_i^j)}_{2^{K-i} \text{ členů}}, \quad \beta_i^j = \underbrace{(b_i^{(j)}, \dots, b_i^{(j)})}_{2^{K-i} \text{ členů}}. \quad (\text{C.1})$$

Redukovaná transformační metoda je vhodná pro monotónní matematické modely, protože uvažuje pouze hraniční body a_i^j a b_i^j intervalů S_i^j . V případě třech neurčitých parametrů, tj. $K = 3$, \hat{S}_i^j pro každý α^j -řez definuje souřadnice vrcholů kvádrů vymezeného třemi intervaly S_i^j . Např. pro α^0 -řez

$$\hat{S}_1^0 = (a_1^0, a_1^0, a_1^0, a_1^0, b_1^0, b_1^0, b_1^0, b_1^0),$$

$$\hat{S}_2^0 = (a_2^0, a_2^0, b_2^0, b_2^0, a_2^0, a_2^0, b_2^0, b_2^0),$$

$$\hat{S}_3^0 = (a_3^0, b_3^0, a_3^0, b_3^0, a_3^0, b_3^0, a_3^0, b_3^0). \quad (\text{C.2})$$

Pokud jsou tyto řady uspořádány do sloupců matice, potom každý řádek této matice odpovídá jedné z možných kombinací hodnot K fuzzy parametrů. Simulace modelu proběhne pro každou z těchto kombinací a získaná řešení modelu, $\hat{y}^{\alpha_j} = F(\hat{S}_1^{\alpha_j}, \hat{S}_2^{\alpha_j}, \dots, \hat{S}_K^{\alpha_j})$, jsou uspořádány do řad \hat{Y}^{α_j} , které jsou nakonec zpětně transformovány do intervalů Y^{α_j} . Dolní hranice j -tého intervalu je vypočtena jako společné minimum řady \hat{Y}^{α_j} a dolní hranice intervalu $Y^{\alpha_{j+1}}$, horní hranice pak jako společné maximum stejné řady a horní hranice $Y^{\alpha_{j+1}}$. Řešení modelu je tedy reprezentováno pomocí $M+1$ intervalů Y^{α_j} , které charakterizují neurčitosti řešení modelu.

Kromě toho transformační metoda umožňuje kvantifikovat podíl jednotlivých vstupních neurčitých parametrů na této neurčitosti, tedy umožňuje SA. Za tímto účelem byl zaveden koeficient $\eta_i^{(j)}$, který je v případě redukované transformační metody

$$\eta_i^{(j)} = \frac{1}{2^{K-1} (b_i^{(j)} - a_i^{(j)})} \sum_{k=1}^{2^{K-i}} \sum_{l=1}^{2^{i-1}} (k_2 \hat{y}^{(j)} - k_1 \hat{y}^{(j)}), \quad (\text{C.3})$$

$$k_1(k, l) = k + (l-1)2^{K-i+1}, \quad k_2(k, l) = k + (2l-1)2^{K-i}.$$

Koeficient $\eta_i^{(j)}$ vyjadřuje vliv neurčitosti i -tého parametru \tilde{s}_i na neurčitost výstupu \hat{y}^{α_j} pro α_j -řez. Standardizovaný koeficient ρ_i charakterizující souhrnný vliv \tilde{s}_i ve všech α_j -řezech je definovaný jako (Hanss 2002)

$$\rho_i = \frac{\sum_{j=1}^{M-1} m_j \left| \eta_i^{(j)} (a_i^{(j)} + b_i^{(j)}) \right|}{\sum_{q=1}^n \sum_{j=1}^{M-1} m_j \left| \eta_q^{(j)} (a_q^{(j)} + b_q^{(j)}) \right|}. \quad (\text{C.4})$$

NAŠE BEZPEČNÁ BUDOUCNOST



SÚRAO

Správa úložišť radioaktivních odpadů

Dlážděná 6, 110 00 Praha 1

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

www.surao.cz