

# Vliv neurčitosti popisu difúze kationtů v kompaktovaném bentonitu na modelový tok kritických radionuklidů v inženýrských bariérách

Dušan Vopálka, Aleš Vetešník, Lucie Baborová

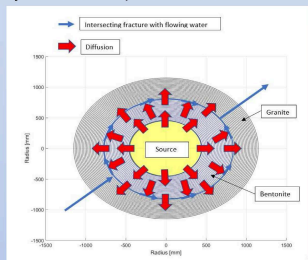
Katedra jaderné chemie, FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7, Praha 1

## Záměr studie

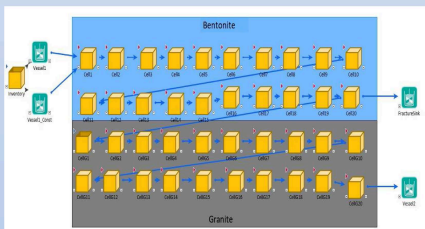
- Při studiu sorpce stroncia a cesia na bentonitu a jejich difúze ve vzorcích kompaktovaného bentonitu v rámci projektu SÚRAO „Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště“ se prokázalo, že popis difúzního transportu kationtů v kompaktovaném bentonitu, dosud založený na jednoduché aplikaci Fickových zákonů, neodpovídá experimentálním poznatkům [1].
- Pro transport  $Sr^{2+}$  se ukázal vhodnější tzv. model duálního transportu (DTM), který bere v úvahu difúzi v prostředích dvojího typu (póry a povrch pevné fáze), pro transport Cs<sup>+</sup> byl významný nelineární tvar interakční izotermu.
- Byl připraven postup, kterým v případě difúzního experimentu v laboratoři je možno pro ideální okrajové podmínky převést složitější popis interakčního děje na jednoduchý fickovský postup.
- Cílem studie je ověřit, zda tento postup bude vyhovovat pro popis difúzního transportu v kompaktovaném bentonitu v modelu reálného UOS.

## Modifikace modelu transportu radionuklidů z reálného UOS

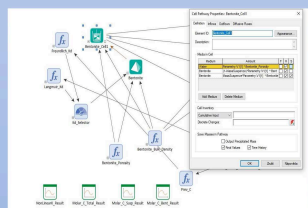
Model byl v programovém prostředí GoldSim vytvořen ze sítě elementů *Cell pathway*. Při jeho vytváření jsme vyšli z modelu difúzního experimentu, který pro kompaktovaný bentonit umožňuje respektovat urychlení difúzního transportu modelem DTM [1]. Tento model umožňuje modelovat difúzní transport v pórech a také v pevné fázi (obdobu modelu povrchové difúze), dále model respektuje nelineární sorpci popsanou langmuírovou nebo freundlichovou izotermou. Geometrie sítě nového modelu odpovídá geometrii českého konceptu ukládacího místa, síť cel byla adoptována z 1D planární sítě na 1D cylindrickou, s výškou 5370 mm, s vnitřním a vnějším poloměrem bentonitové vrstvy postupně 450 mm a 800 mm. Model umožňuje zapojovat jednu či dvě porézní vrstvy (kompaktovaný bentonit a hominu), každou reprezentovanou dvaceti elementy *Cell pathway*, jejichž rozměr se mění podle pozice v cylindrickém uspořádání sítě.



Obr. 1. Cylindrická geometrie modelu transportu z reálného UOS zohledňujícího difúzní tok do vody proudící v puklině.



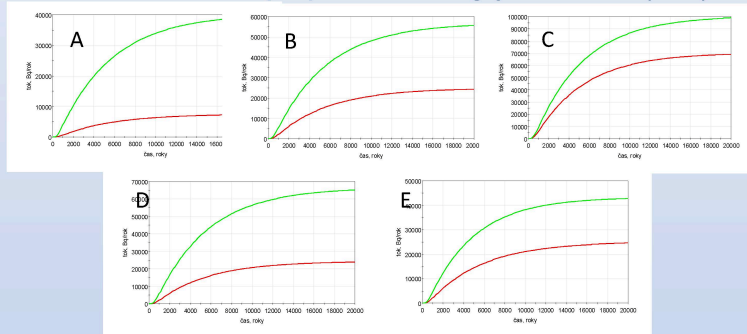
Obr. 2. Schéma sítě modelující transport bentonitovou a granitovou vrstvou v GoldSim. Geometrie sítě je zobrazena na Obr. 1. Každá složka (žlutý kvádr) obsahuje jeden element *Cell pathway*, element *Solid* a zpětnou vazbu, která umožňuje modelovat nelineární sorpci (Obr. 3).



Obr. 3. Obsah složky *Bentonite\_Cell1* z Obr. 1. zohledňuje cylindrickou geometrii a obsahuje kapalnou fázi a dvě fáze pevné. Element *Solid* umožňuje lokálně nastavit  $K_d$  podle nelineárních funkcí (Freundlich,  $K_d$  a Langmuir,  $K_d$ ).

Vrstvě hominy byla ponechána proměnná tloušťka zadávaná ve vstupním souboru. Na vnější stěně modelu hominové vrstvy je nastavena nulová koncentrace. Postupné rozpouštění uranové matrice není uvažováno. Na rozhraní bentonit-granit byl modelován difúzní tok do proudící vody v puklině protínající úložný vrt s pomocí ekvivalentní rychlosti průtoku, která byla volena z intervalu  $3 \cdot 10^{-11}$  -  $3 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$ , což odpovídá stacionárnímu difúznímu toku do pukliny s rozevřením v intervalu  $5 \cdot 10^{-2}$  -  $5 \cdot 10^{-1}$  m a transmisivitou z intervalu  $5 \cdot 10^{-9}$  -  $2 \cdot 10^{-8}$   $m^2/s$  při hydraulickém gradientu 0,04 m/m.

## Studium závislosti poměrů toků aktivity dvěma cestami na charakteristikách bariér pro příklad neinteragujícího nuklidu (I-129)



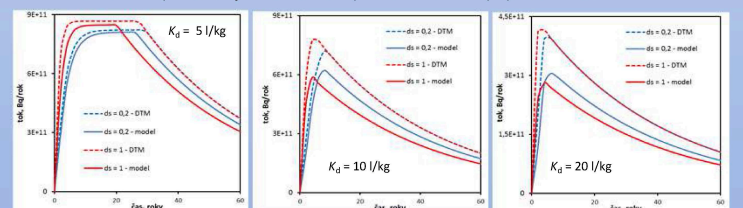
Obr. 4. Porovnání celkového modelového toku (puklina + homina, zeleně) a toku do pukliny (červeně) pro různé kombinace ekvivalentní rychlosti průtoku a tloušťky horninové vrstvy. A:  $3 \cdot 10^{-10}$   $m^2/s$  - 10 m, B:  $1 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$  - 10 m, C:  $3 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$  - 10 m, D:  $1 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$  - 5 m, E:  $1 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$  - 50 m.

## Studium vlivu popisu difúze kationtu na tok do pukliny

Tab. 1. Převod parametrů DTM modelu (relativní povrchová rychlost  $ds$  a distribuční koeficient  $K_d$ ) na parametry standardního fickovského modelu vyhodnocením ideálního difúzního experimentu metodou time-lag ( $G(F)$  a  $K_d(F)$ ) pro  $\rho_s = 1300$   $kg/m^3$ ,  $D_w = 1,58 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$  a  $G = 0,1$ .

$K_{sp}$ , l/kg	DTM			standardní model			$K_{sp}$ , l/kg	DTM			standardní model		
	$ds$	$K_d(F)$ , l/kg	$G(F)$	$ds$	$K_d(F)$ , l/kg	$G(F)$		$ds$	$K_d(F)$ , l/kg	$G(F)$	$ds$	$K_d(F)$ , l/kg	$G(F)$
5	0,2	5,54	0,297	10	0,2	11,76	0,457	20	0,2	25,36	0,701	1,422	
	1	6,26	0,590		1	14,04	1,11		1	29,50	1,422		

Numerické experimenty pro porovnání dvou popisů difúze v bentonitu byly provedeny pro podmínky, které zvýrazňují tok do pukliny ( $3 \cdot 10^{-9}$   $m^2/s$  - 50 m), přičemž parametry horninového prostředí a interakce Sr-90 s ním odpovídaly datům shrnutým ve zprávě [2]. Pro popis interakce s bentonitem byly použity parametry z Tab. 1, které vycházejí z experimentálního studia difúze Sr kompaktovaným bentonitem při alternativních popisech difúze.



Obr. 5. Porovnání průběhů celkového modelového toku Sr-90 z bentonitové vrstvy (do pukliny protínající UOS a do hominy) pro dva typy popisu difúze v kompaktovaném bentonitu pro různou míru sorpce na bentonitu.

## Závěry

- Na základě modelu difúzního experimentu v planárním uspořádání byl připraven zjednodušený model zdrojového členu ve válcových souřadnicích pro studium vlivu neurčitosti vybraných charakteristik bariérových materiálů na neurčitost toku aktivity z modelu jednoho UOS do životního prostředí.
- S modelem bylo testováno rozdělení toku aktivity z bentonitové vrstvy mezi tok do pukliny a do matrice horninového materiálu. Byla potvrzena lineární závislost toku aktivity do pukliny na hodnotě ekvivalentní rychlosti průtoku puklinou.
- Model byl dále využit k posouzení vlivu neurčitosti popisu difúze v bentonitu (DTM nebo standardní fickovský popis). Na výsledcích úvodních numerických experimentů bylo ukázáno, že neurčitost ve formě popisu difúze může generovat významnou neurčitost, jejíž míra závisí na dalších charakteristikách popisujících celý systém. Pro rozhodnutí, zda bude potřebné v komplexním modelu transportu v okolí úložiště implementovat přesnější model sorpce kationtů, bude třeba provést další numerické studie se zjednodušeným modelem.

[1] HOFMANOVÁ E., ČERVINKA R., VOPÁLKA D., BABOROVÁ L., BRÁZDA L., PECKOVÁ A., VETEŠNÍK A., VIGLAŠOVÁ E., VAŠIČEK R. (2019): Transport radionuklidů z úložiště / vstupní parametry a procesní modely pro hodnocení transportu radionuklidů přes inženýrské bariéry: Závěrečná zpráva. – MS SÚRAO, ZZ 420/2019, Praha.

[2] TRPKOŠOVÁ D., HAYLOVÁ V., DOBREV D., HUŠŤÁKOVÁ H., GONDOLLI J., KLAJMON M., MIRANDA A. N. M., VEČERNÍK P., BUKOVSKÁ Z., RATAJ J., FRÝBORT J., FEJT F., ŠTAMBERG K., VETEŠNÍK A., VOPÁLKA D., UHLÍK J., GVOZDIK L., KRALOVCOVÁ J., ŘIHA J., MARYŠKA J., STEJNOVÁ J., STAŠ L. (2018): Bezpečnostní rozbor dlouhodobé bezpečnosti hlubinného úložiště na lokalitě Kraví hora. Závěrečná zpráva. – MS SÚRAO ZZ 334/2018, Praha.