

---

# KBS TEKNISK RAPPORT

---

10

TRANSLATION AND DEVELOPMENT OF THE BNWL-  
GEOSPHERE MODEL

Bertil Grundfelt

Kemakta Konsult AB 77-02-05

Objekt 11.10

TRANSLATION AND DEVELOPMENT OF THE BNWL-  
GEOSPHERE MODEL

Bertil Grundfelt

Kemakta Konsult AB 77-02-05

Objekt 11.10

I slutet av rapporten har bifogats en förteckning över KBS hittills publicerade tekniska rapporter i denna serie.

Translation and development of the BNWL - Geosphere Model.

by Bertil Grundfelt

English summary of two Swedish reports:

Appendix 1: "Geosphere Model - beskrivning, synpunkter och  
indatabehov." 77-02-05

Appendix 2: "Förslag till metod att beräkna medelvärden på hydrodynamiska  
och geokemiska parametrar i GETOUT."

## 1. Introduction.

The rate of radioactivity discharge from a repository for radioactive waste in a geologic formation to the biosphere is a very important variable in the evaluation of the safety of the ultimate disposal. A mathematical model of the migration of radioactive species becomes rather complicated if effects as chain decay, chemical sorption and dispersion are taken into account. This necessitates a proper tool for the calculations. Such a tool has been developed by Batelle Pacific Northwest Laboratories, USA, in the form of a BASIC language computer program called GETOUT (1). This program was obtained by the Swedish utilities' project "Nuclear Fuel Safety" in December 1976 and has thereafter been translated into FORTRAN.

The program calculates the discharge rate of radioactive nuclides at the top of a unidimensional column filled with an ionexchanging material assuming that the waste is situated at one end of the column and that the groundwater flows at a constant rate through the column.

The main extension of the code, that was made during the translation, is a model for averaging the hydrodynamic and geochemical parameters for the case of non uniform packing of the column (e.g. considering a repository in cracked rock with crack width, crack spacing etc. in different zones).

## 2. Description of the mathematical model.

### 2.1 The Transport Equation.

The model is based on a differential mass-balance with a dispersion term which in dimensionless form can be written as follows for the  $i$ :th nuclide in a decay chain:

$$K_i \frac{\partial N_i}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 N_i}{\partial \eta^2} - \frac{\partial N_i}{\partial \eta} - K_i R_i N_i + K_{i-1} R_{i-1} N_{i-1} \quad (1)$$

where:  $N_i$  = number of atoms of nuclide  $i$   
 $\theta$  = dimensionless time =  $t \cdot u/L$   
 $t$  = time (s)  
 $u$  = ground water velocity (m/s)  
 $L$  = column length (m)  
 $\eta$  = dimensionless length coordinate =  $Z/L$   
 $Z$  = length coordinate (m)  
 $Pe$  = Peclet's number =  $u \cdot L/D$   
 $D$  = dispersion coefficient ( $m^2/s$ )  
 $K_i$  = nuclide retentivity =  $u/u_i$   
 $u_i$  = nuclide velocity for nuclide  $i$  (m/s)  
 $R_i$  = decay number for nuclide  $i$  =  $\lambda_i \cdot L/u$   
 $\lambda_i$  = decay constant for nuclide  $i$  ( $s^{-1}$ )

Eq. 1 has been solved analytically for two sets of boundary conditions (2) namely instant dissolution of the waste (impulse release) and constant dissolution rate (band release). The solutions of eq. 1 are based on the following assumptions:

- 1) Constant ground water velocity along the whole migration path.
- 2) Constant axial dispersion coefficient along the whole migration path.
- 3) As the model is unidimensional the radial dispersion is neglected.
- 4) Low enough ground water velocity to allow the migrating species to be in equilibrium with the surrounding geologic medium.

The assumptions 1 and 2 deviate significantly from the flow pattern in Swedish cracked rock. A model for averaging the hydrodynamic and geochemical parameters has therefore been included in the code in order to make it useful in the safety evaluation of a rock repository.

## 2.2 Averaging hydrodynamic and geochemical parameters.

The migration is governed by three parameters i.e. the ground water velocity,

the dispersion coefficient and the nuclide retentivities. These are the parameters that are averaged in this model.

The model is based on the properties of the residence time distribution (RTD) in the dispersion model. The RTD can be looked upon as a statistical frequency function expressing the probability of a volume element of the fluid having a specific residence time. For small amounts of dispersion the RTD becomes Gaussian while for greater amounts of dispersion the RTD becomes increasingly skewed. The RTD can be written as eq. 2 with a mean and a variance according to eq:s 3 and 4.

$$C_{\theta} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\theta/Pe}} \cdot \exp \left[ -\frac{(1-\theta)^2}{4\theta/Pe} \right] \quad (2)$$

$$\bar{t}_C = \left(1 + \frac{2}{Pe}\right) \frac{L}{u} \quad (3)$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{2}{Pe} + \frac{8}{Pe^2} \quad (4)$$

where:  $\bar{t}_C$  = mean residence time (s)

$\sigma_{\theta}^2$  = variance (dimensionless)

The mean residence time is more useful in solving the equations and has therefore been presented above instead of the dimensionless mean of the RTD ( $= \bar{t}_C \cdot u/L$ ).

The migration path can be described as a number of zones with different ground water velocities, dispersion coefficients and nuclide retentivities. For each of these zones the mean residence time and the variance are calculated from eq:s 3 and 4. The mean residence times are added up to a total mean residence time and the variances are added up to a total variance. The totals are thereafter inserted into eq:s 3 and 4 together with the total migration path length and the equations are solved for the ground water velocity and the dispersion coefficient.

The nuclide retentivity is calculated by first calculating the nuclide velocity following the procedure described above. According to the definition

the retentivity is calculated by dividing the ground water velocity by the nuclide velocity.

The computer code can accept up to 10 zones.

### 3. Input description.

The input requirements for a sample run with the FORTRAN version of GETOUT is listed below.

#### 1) Source strengths.

At least one file with the nuclide inventory in curies of the waste is needed. The inventory should be listed in the file for times corresponding to the time of leach incident used in the calculations. The file also contains the half-life in years for the nuclides.

#### 2) Time of leach incident.

The lifetime of the waste cladding is expressed as the time of leach incident and measured in years after reactor discharge.

#### 3) Leach rate.

The rate of the waste dissolution is expressed as the leach duration in years.

#### 4) Migration path length.

The total migration path length is expressed in meters.

#### 5) The nuclides to be calculated.

To obtain maximum flexibility of the code the nuclides to be calculated are read in from cards.

6) Data for the hydrodynamic zones.

For each of the zones mentioned in chapter 2.2 the following data are read in:

- a) permeability (m/s)
- b) crack spacing (m) alternative porosity
- c) hydrostatic gradient (m/m)
- d) zone length
- e) a logical variabel that is true if the porosity is to be used in the velocity calculation and false if the crack spacing is to be used
- f) nuclide retentivities.

7) Diffusion coefficient.

A diffusion coefficient that is considered as representative for most of the nuclides is read in expressed in sq.meters per second.

4. Computer implementation.

The FORTRAN version is written in IBM FORTRAN IV and has been outtested on an IBM model 360/75 computer. The execution time needed is about 30 seconds, compilation excluded. The storage request of the intire code is about 208 K bytes. If a linkage program with an overlay feature is available the storage request can be reduced to about 104 K bytes.



References.

1. Incentives for partitioning High-Level Waste, BNWL - 1927.
2. Lester - Jansen - Burkholder, Migration of Radionuclide Chains Through an Adsorbing Medium, AIChE symposium.

Geosphere Model - beskrivning, synpunkter och indatabehov.

Inledning

I denna rapport beskrivs ett av de dataprogram som erhöles vid under-  
tecknads och Nils Kjellberts besök vid BNWL den 16 - 23/12 1976,  
nämligen Geosphere Model. Det andra programmet "Biosphere Model", finns  
hos AB Atomenergi.

I rapporten beskrivs vad programmet beräknar, den matematiska modellen,  
de inputdata som behövs, den datateknik som har använts vid körningar  
i USA och de möjligheter som finns för anpassning av programmet till  
bekvämt tillgängliga datorer.

## INNEHALLSFÖRTECKNING

	Sid
1. Vad beräknar Geosphere Model?	1
2. Beskrivning av den matematiska modellen.	1
3. Datateknisk beskrivning av programmet.	2
4. Beskrivning av indata till Geosphere Model.	3
4.1 Sammanfattning.	3
4.2 Källstyrkor.	4
4.3 Hydrodynamiska data.	5
4.4 Geometriska data.	6
4.5 Data för beräkning av sorptionseffekter.	7
4.6 Kapslingens livslängd.	8
4.7 Utlakningshastigheten från glaset.	8
5. Möjligheter till applicering av programmet på svenska datorer.	9
Referenser	11
Bilaga 1	Nuklidurval vid BNWLs körningar.
Bilaga 2	Logiskt schema för "Geosphere Model".
Bilaga 3	Fördelningskoefficienter för "Western US dessert subsoil".
Bilaga 4	Schematiskt räkneexempel för avståndet depå - recipient.
Bilaga 5	Tiden för fullständig upplösning av glaskroppar (år).

## 1. Vad beräknar Geosphere Model?

Programmet beräknar utsläppt aktivitet per år (utsläppsrat) till en recipient från en depå i en grundvattenförande geologisk formation. Utsläppsraten beräknas som funktion av tiden så att ett "kromatografispektrum" erhålles

Programmet tar i sin nuvarande utformning hänsyn till 56 nuklider (se bil 1).

Den output, i form av kromatografispektrum, som erhålles från Geosphere Model läggs upp i en datafil med ett sådant format att filen kan användas direkt som input till Biosphere Model.

## 2. Beskrivning av den matematiska modellen.

Modellen är en analytisk lösning av materialbalanserna för transporten från depån till recipienten (1).

Transporten antages ske genom en endimensionell kolonn av aktuellt geologiskt medium. Grundvattenströmningen antages vara så långsam att nukliderna står i sorptionsjämvikt i varje punkt i kolonnen (ordet sorption användes här för summan av alla kemiska eller fysikaliska förlopp som bromsar nukliderna dvs adsorption, jonbyte, utfällning, mineralisering och partikelfiltrering). Vidare antages att koncentrationerna av de olika nukliderna är så låga att jämviktskonstanterna för sorptionsjämvikterna är oberoende av koncentrationerna. Eftersom jämviktskonstanterna är bruttokonstanter och således beroende av koncentrationen av komplexbildare, måste den kemiska miljön vara densamma utefter hela transportsträckan för att jämviktskonstanterna skall vara konstanta.

Följande antaganden har gjorts beträffande de hydrodynamiska betingelserna längs transportvägen:

- a) Grundvattenhastigheten är konstant.
- b) Den radiella dispersionen (omblandningen) är försumbar i förhållande till den axiella.
- c) Den axiella dispersionskoefficienten är konstant efter hela transportvägen.

Två varianter av förlopp för utlösningen av aktivitet ur avfallet finns inbyggda i programmet nämligen momentan upplösning och konstant upplösningshastighet. Momentan upplösning kan användas för att beräkna det värsta fallet (momentan upplösning och ingen fördröjning pga sorptionseffekter). Under förutsättning att grundvattnet inte är mättat med avseende på glasmatrixens beståndsdelar är det troligt att en konstant upplösningshastighet är en god approximation av verkligheten (2,3). Om däremot grundvattnet är mättat kommer diffusionen av nuklider genom glasmatrixen att bli hastighetsbestämmande och utlakningshastigheten således att sjunka med tiden. Det senare problemet är matematiskt lösbart men det är troligen mycket magert med data att sätta in i modellen.

Innan man tror på de resultat som kommer ut ur dataprogrammet bör rimligheten av de sex antaganden och av randvillkoren grundligt diskuteras och eventuellt verifieras med experiment.

Genom att besvara nedanstående frågor kan man få fram ett mått på hur mycket beräkningsresultaten som erhålles ur programmet avviker från verkligheten:

- 1) Finns det någon som helst möjlighet att grundvattenflödet t ex pga hög permeabilitet och låg porositet blir så snabbt att jämvikt inte hinner ställa in sig? Svaret på frågan är givetvis avhängigt den hastighet varvid sorptionsjämvikt inställer sig vilket i sin tur beror på vilken/vilka mekanismer som är hastighetsbestämmande.
- 2) Kan koncentrationen av avfallsnuklider bli så stor att jämviktskonstanterna blir koncentrationsberoende? För att ett koncentrationsberoende skall uppstå måste koncentrationen av nukliderna bli så pass stor att grundvattnets jonstyrka påverkas nämnvärt. OBS att jonstyrkan påverkar jämviktskonstanterna för alla nukliderna och inte enbart konstanten för den nuklid vars koncentration eventuellt är hög. Om adsorption är den dominerande mekanismen blir "jämviktskonstanten" koncentrationsberoende även vid lägre koncentrationer.
- 3) Hur varierar komplexmiljön (grundvattensammansättningen) längs transportvägen? Denna fråga är speciellt väsentlig i det fall då jonbyte är den övervägande mekanismen för sorptionen. Väsentliga faktorer är pH, redoxpotential och halten av typiska komplexligander som halogener, karbonat och sulfat.
- 4) Hur stora variationer i grundvattenhastighet behöver man befara längs transportvägen? Frågan är väsentlig t ex för att man skall kunna avgöra hur pass känsligt ett medelvärde för grundvattenhastigheten är för variationer i sprickzonernas tjocklek.
- 5) Är den radiella dispersionen försumbar i förhållande till den axiella? Denna fråga är kanske inte den väsentligaste eftersom ett konservativt mått på utsläppsraten kan erhållas genom att dispersionen försummas helt. Enligt amerikanska uppgifter kan den radiella dispersionen försummas bredvid den axiella i lera (1).
- 6) Hur stora variationer i dispersionskoefficienten behöver man befara längs transportvägen? Denna fråga kan också vara av mindre betydelse (se fråga 5). Faktorer som inverkar på dispersionskoefficienten är t ex sprickornas geometri, strömningshastigheten, nuklidernas diffusivitet i grundvattnet och termisk konvektion.

### 3. Datateknisk beskrivning av programmet.

Geosphere Model är, liksom Biosphere Model, skrivet i programspråket BASIC. Programmet har körts på en UNIVAC 1108 uppställd i Chicago och med terminaler på BNWL.

Logiken för Geosphere Model framgår av bilaga 2. De benämningar på olika filer som har använts i bilaga 2 kan behöva förklaras, men först några ord om programspråket BASIC.

BASIC är ett s k dialogspråk. Det normala är att BASIC-program körs efter principen "time-sharing" dvs flera program kan köras samtidigt på samma dator (motsatsen till time-sharing är "batch"-körning som innebär att datorn behandlar endast ett program i taget och att därvid kompilering, länkning och exekvering sker i ett svep).

BASIC består av satser och kommandon. Satserna sköter om beräkningarna, input och output medan kommandona talar om för datorn vad den skall göra med programmet.

Programfilerna (se bil 2) innehåller beräkningssatserna för nuklidtransporten från depån till recipienten. Geosphere Model innehåller som synes fyra programfiler. Programmet SINGLE sköter beräkning av transporten för sönderfallskedjor med endast en radioaktiv nuklid (t ex de flesta fissionsprodukterna, DOUBLE gör samma sak för kedjor med två radioaktiva nuklider och TRIPLE för kedjor med tre nuklider. Programmet RPEAK2 beräknar transporten för sönderfallskedjor med fler radioaktiva nuklider än tre, genom att sammanställa kortare kedjor, och summerar utsläppsbidragen från olika nuklidens källstyrkor.

Nyckelfilerna (eng keyfiles) används för att styra exekveringen av de olika programfilerna. Nyckelfilerna består av kommandon för att ladda programmen i kärnminnet och köra programmen samt av satser för editering av programfilerna dvs för att åstadkomma förändringar i programmets beräkningssatser. Den nyckelfil som benämnes KCHØ21 i bilaga 2 kallas "Master Keyfile" och sköter laddning och start av i tur och ordning KEYONE, KEYTWO, KEYTHREE och RPEAK2.

Genom att nyckelfilstrukturen har använts har man kunnat skriva beräkningsprogrammen SINGLE, DOUBLE och TRIPLE för beräkning av en sönderfallskedja i taget. Vilka sönderfallskedjor som skall beräknas styrs istället av innehållet i nyckelfilerna och hela modellen blir därvid allmännare än om valet av sönderfallskedjor skulle byggas in i själva beräkningsprogrammen.

Datafilerna innehåller i huvudsak sifferdata och tabellrubriker. Ett undantag utgöres av filen EQUAL2 som innehåller kompletterande beräkningssatser till SINGLE för beräkning av de två nuklidkedjor där föräldra- och dotternuklid har samma jämviktskonstant för sorptionsjämvikterna.

#### 4. Beskrivning av indata till Geosphere Model.

##### 4.1 Sammanfattning

De indata som krävs i Geosphere Model kan indelas i 6 grupper:

- 1) Källstyrkor (de nuklider som har använts vid BNWLs beräkningar framgår av bilaga 1).
- 2) Hydrodynamiska data
  - a) vattenströmningshastigheten i berget och i lerlagret
  - b) axiell dispersionskoefficient i berget och i leran
- 3) Geometriska data
  - a) transportsträcka från depån till recipienten
  - b) depåns utbredning i rymden

4) Data för beräkning av sorptionseffekterna:

- a) För sorption tillgänglig bergyta per volymenhet sprickor.
- b) Fördelningskoefficienter för sorptionsjämvikterna. Fördelningskoefficienter behövs både för leran kring glaskropparna och för berget. I bilaga 3 har de värden som använts vid BNWLs beräkningar listats. Denna lista omfattar fler grundämnen än de som använts vid BNWLs beräkningar.
- c) Kapslingens livslängd.
- d) Utlakningshastigheten från glaset.

Nedan följer en mer ingående diskussion av dessa olika datagrupper.

#### 4.2 Källstyrkor.

De källstyrkor som använts vid BNWLs beräkningar motsvarar det totala aktivitetsinnehållet i "U S economy waste" år 2000 och har tagits fram med hjälp av dataprogrammet ORIGEN, som utvecklats vid Oak Ridge National Laboratories. Nuklidurvalet (se bilaga 1) består, förutom av fissionsprodukter och aktinider, även av nuklider som torde härröra från aktiverat konstruktionsmaterial, bränslekapsling etc. En hel del av nukliderna i bilaga 1 saknas i AEs program BEGAFIP. Dessa nuklider, som markerats med "Ja" i bilaga 1, kan indelas i följande grupper:

- a) H - 3 och C - 14
- b) aktiveringsprodukter från konstruktionsmaterial
- c) aktinider med högre masstal än 244
- d) dotterprodukter i aktinidernas sönderfallskedjor med lägre masstal än 232.

Eftersom spridningsberäkningarna skall omfatta både inglasat avfall och "direktdeponerat" bränsle kommer två uppsättningar källstyrkor att behövas.

Vid glasalternativet, alt 1, behöver inte aktiveringsprodukterna, grupp b, vara med eftersom dessa nuklider då kommer att finnas huvudsakligen i kapslingsskrotet och bland utbrända hårdkomponenter. Det är också tveksamt om nukliderna H - 3, C - 14 och I - 129 kommer att finnas i glaset då dessa i hög utsträckning avgår i gasform under upparbetnings- och förglasningsprocesserna. Grupp d), dotterprodukter, kan visa sig vara väsentliga och bör därför tas med. Detta gäller följande nuklider: Ra - 226, Th - 229, Th - 230, Pa - 231 och U - 232.

De nuklider i grupp c), aktinider med högre masstal än 244, som enligt de amerikanska beräkningarna har så pass höga källstyrkor att de kan ge signifikanta bidrag till utsläppet från depån är Cm - 245 och Cm - 246.

Vid direktdeponeringsalternativet, alt 2, kommer, om kapslingen är obruten, H - 3, C - 14 och I - 129 att vara kvar i det utbrända bränslet. Likaså måste aktiveringsprodukterna i bränslets konstruktionsdetaljer att finnas med i depån, dvs grupp b). De aktiveringsprodukter som medtagits vid BNWLs beräkningar är Be - 10, Ca - 41, Ni - 59, Ni - 63, Co - 60, Zr - 93, Mo - 93 och Sn - 126. Av dessa härrör Be - 10 troligen från aktiverade neutronreflektorer och eventuellt andra hårdkomponenter, dvs inte från bränslet

och kan därför utelämnas. Co - 60 har en alltför kort halveringstid (5,26 år) för att den skall kunna ge något signifikant utsläpp till biosfären.

Sammanfattas nuklidurvalet för de båda källstyrkeuppsättningarna erhålles:

Alt 1: Bränslet upparbetas och det högaktiva avfallet förglasas.

BEGAFIPs nuklidurval med tillägg av Ra - 226, Th - 229, Th - 230, Pa - 231 och U - 232 och eventuellt med tillägg av Cm - 245 och Cm - 246. Frågan om hur mycket H - 3, C - 14 och I - 129 som finns kvar i glaset kan bara besvaras med mätningar på aktuellt glas. Uran och plutoniummängderna i glaset kan sättas till 1% av mängderna i motsvarande mängd bränsle (motsvarar förhållandevis höga förluster vid upparbetningen). Upparbetningstidpunkten sätts förslagsvis till två år efter uttaget ur reaktorn (uppgiften väsentlig för mängden Am - 241 i glaset).

Alt 2: Bränslet direktdeponeras utan annan konditionering än extra inkapsling.

BEGAFIPs nuklidurval med tillägg av H - 3, C - 14, Ra - 226, Th - 229, Pa - 231, U - 232 samt aktiveringsprodukterna i kapslingen och andra konstruktionsdetaljer i bränslet (främst Ni - 59, Ni - 63, Zr - 93, Mo - 93 och Sn - 126 samt eventuellt Ca - 41). Eventuellt bör även Cm - 245 och Cm - 246 läggas till BEGAFIPs nuklidurval.

Beräkningarna kan ske antingen med en specifik räknebas (t ex per MW och år) eller med en integral räknebas (t ex det utbrända bränsle som kommer<sup>e</sup> att skapas av de 10 reaktorer som nu är i drift eller under uppförande). Valet av räknebas kan bero av om det finns behov av en gemensam räknebas för hela KBS och om i så fall andra program eller objekt kräver en speciell utformning av räknebasen. Resultaten av beräkningarna med "Geosphere Model" blir mer lättoljade om räknebasen är integral. Därför föreslås här att räknebasen sätts till det utbrända bränslet som uppstår i de 10 reaktorer som nu är i drift eller under byggnad under deras livslängd.

Nollpunkten för studien bör, om den föreslagna räknebasen är OK, sättas till år 2020 eftersom detta är den tidigaste tidpunkt då allt högaktivt avfall från de ovannämnda 10 reaktorerna skulle kunna vara nedstoppat i berget (reaktordrifttid 30 år och deponering tidigast 10 år efter bränsleuttaget ur reaktorn). Det torde vara rimligt att anta att fullskaledrift av depån inte kan komma igång förrän i mitten av 1990-talet. Det först deponerade avfallet har alltså legat i berget i ca 25 år vid den föreslagna nollpunkten för studien. Denna tid är kort i förhållande till de långa utlakningstider som det troligen blir frågan om. Man bör därför kunna göra beräkningarna som om allt avfall hade deponerats vid en tidpunkt.

#### 4.3 Hydrodynamiska data.

Avgörande för vattenströmningshastigheten är permeabiliteten, porositeten och den hydrauliska gradienten:



$$v = \frac{k \cdot i}{\varepsilon} \quad (1)$$

$v$  = vattenströmningshastighet (m/s)

$k$  = permeabiliteten (m/s)

$i$  = hydrauliska gradienten (m vp/m)

$\varepsilon$  = porositeten ( $m^3/m^3$ )

Genom att beräkningsmodellen bygger på analytiska lösningar av materialbalanserna kan inte beräkningarna delas upp i flera intervall med t ex olika vattenströmningshastigheter. Man får istället arbeta med viktade medelvärden för hela transportsträckan. Detta ger ett fel i beräkningsresultatet som inte kan uppskattas förrän parametrarnas variationer är kända men som troligen inte är speciellt stort eftersom dispersionen är låg (se nedan).

Eftersom programmet räknar med axiell dispersion krävs input i form av den axiella dispersionskoefficienten. Vattenströmningen i lerlagret och berget är laminär och bidraget från den molekylära diffusionen till dispersionskoefficienten dominerar därför helt över omblandningsbidraget. Dispersionskoefficienten kan således approximeras med diffusiviteten.

För att viktade medelvärden av de ovannämnda storheterna skall kunna beräknas, måste även tjockleken på de skikt som värdena gäller för anges.

#### 4.4 Geometriska data.

De geometriska data som behövs är transportsträckan från depån till recipienten och depåns utbredning i rymden.

De tio reaktorer som nu är i drift eller under byggnad kommer under sin livstid att producera högaktivt avfall motsvarande 2000 - 3000 glaskroppar med en halt av 15 - 20 vikt-% avfall i glaskropparna och 200 l glas per glaskropp. Avståndet mellan glaskropp och recipient kan skilja sig rätt mycket mellan olika glaskroppar. Om t ex glaskropparna deponeras med 10 m mellanrum i ett kvadratisk gitter blir avståndet mellan de yttersta glaskroppsraderna 450 - 550 m. Vid en förläggning av depån nära recipienten kommer skillnaden att bli signifikant. I bilaga 4 redovisas ett starkt förenklat räkneexempel som visar skillnaden i transportsträcka för glaskroppen närmast resp längst bort från recipienten. Vid alternativet direktdeponering av bränsle kan problemet med att definiera transportsträckan bli ännu svårare eftersom "avfallsvolymer" är avsevärt större vid direktdeponering och depån därför kanske blir mer vidsträckt.

Ett sätt att lösa problemet är att dela upp depån i flera zoner och att beräkna utsläppsraten från varje zon för sig. Den totala utsläppsraten från depån erhålles sedan genom superposition av resultaten från zonberäkningarna. Som en första approximation av depåns geometri kan de idéskisser som presenteras i "pristävlingen" som skall vara klar den 17 februari användas. Bättre underlag erhålles senare när man fått klarare grepp

på hur tätt avfallet kan deponeras (beroende av frågor som maximalt tillåten temperaturstörning i berget och avklingningstiden före deponeringen).

#### 4.5 Data för beräkning av sorptionseffekter.

Vid strömningen genom leran och berget kommer nukliderna, eller en del av dessa, att röra sig långsammare än grundvattnet pga följande kemiska och fysikaliska mekanismer:

- adsorption
- jonbyte
- reversibel utfällning
- irreversibel mineralisering
- filtrering av kolloider och större partiklar

Förhållandet mellan nuklidhastigheten och grundvattenhastigheten kan beräknas ur följande samband:

$$R = \frac{1}{1 + K_a \cdot a_f} \quad (2)$$

där:

R = nuklidhastighet/grundvattenhastighet

$K_a$  = fördelningskoefficient  $\left(\frac{Ci/m^2}{Ci/m^3}\right)$

a = specifik yta  $\left(\frac{m^2 \text{ berg}}{m^3 \text{ porvolym}}\right)$

Genom en enkel sortomvandling kan ovanstående ekvation (2) skrivas enl nedan:

$$R = \frac{1}{1 + K_d \cdot \frac{\rho}{\epsilon}} \quad (3)$$

där:

$K_d$  = fördelningskoefficient  $\left(\frac{Ci/kg}{Ci/m^3}\right)$

$\rho$  = mediets bulkdensitet  $(kg/m^3)$

$\epsilon$  = mediets porositet  $(m^3/m^3)$

Som input till Geosphere Model används R och det är därför ur programmets synvinkel egalit om  $K_a$  eller  $K_d$  blir den storhet som mäts på laboratoriet. Om  $K_d$  mäts är det väsentligt att mätningarna görs på prover av leran och berget som har samma specifika yta som den lera respektive det berg som kommer att finnas vid depån. Om däremot  $K_a$  mäts kan den specifika ytan  $a_f = a/\epsilon$  (a = specifik yta i  $m^2$  per kubikmeter berg/lera) bestämmas separat för den lera och det berg som kommer att finnas vid depån. I båda fallen måste proverna på både berg/lera och grundvatten vara kemiskt representativa för de verkliga förhållandena vid depån av skäl som framgår nedan.

Den konstant som ovan kallats fördelningskoefficient är en bruttostorhet med bidrag från alla ovannämnda mekanismer. Fördelningskoefficienten är således inte entydigt definierad förrän den kemiska och fysikaliska miljön är definierad.

Följande storheter är väsentliga vid utvärderingen av fördelningskoefficienterna:

- koncentration
- oxidationstillstånd
- halt av komplexbildare i grundvattnet (ibland pH-beroende)
- den fasta fasens sammansättning
- jonstyrka
- temperatur

Det är uppenbart att en fullständig bestämning av fördelningskoefficientens alla haltberoenden och temperaturberoenden är omöjlig att hinna med inom ramen för KBS eftersom antalet grundämnen är stort och systemet är kemiskt komplicerat. Helt klart är emellertid att en noggrann försöksplanering krävs och att inverkan av koncentration, temperatur etc studeras teoretiskt, så att man kan skaffa sig en uppfattning om på vilket sätt fördelningskoefficienterna kan avvika från de uppmätta värdena.

De grundämnen som i avsnitt 4.2 har föreslagits ingå i inputfilerna har markerats med "Ja" i bilaga 3.

#### 4.6 Kapslingens livslängd.

Geosphere Model räknar med en storhet som kallas "Time of Leach Incident" som motsvarar tidpunkten för kapslingsgenombrott.

Tidpunkten för ett kapslingsgenombrott av sådan omfattning att större delen av avfallet friläggs kan troligen uppskattas ganska väl ur hastigheten för kapslingens allmänkorrosion i grundvatten. Punktangrepp av olika slag kan emellertid leda till snabbare genombrott.

Genom att kapslingen är varm kan inkruster bildas och inverka korrosionspassiviserande (eller aktiverande).

Det är inte troligt att helt tillförlitliga värden på tidpunkten för kapslingsgenombrott kan erhållas inom ramen för KBS. Men får istället tänka sig att göra flera beräkningar med olika värden på kapslingens livslängd. Ett ambitiöst försök att bestämma ett rimligt variationsintervall bör dock göras.

#### 4.7 Utlakningshastigheten från glaset.

Som nämndes i kap 2 finns två varianter av utlakningsförloppet inbyggt i programmet nämligen momentan upplösning och konstant upplösningshastighet. Båda dessa varianter är konservativa men eftersom de är inbyggda i de analytiska lösningarna av materialbalanserna är det förenat med en avsevärd arbetsinsats att ändra dessa randvillkor.

Den konstanta utlakningshastigheten kan vara en god approximation av verkligheten om upplösningen av själva avfallets grundmaterial är hastighetsbestämmande. Detta är fallet om grundvattnet inte är mättat med avseende på avfallets beståndsdelar (3). I detta fall kan den tid som krävs för att lösa upp avfallet lätt beräknas ur:

$$T = \frac{R \cdot \rho}{L} \quad (4)$$

R = avfallskroppens radie (m)

$\rho$  = avfallets densitet (kg/m<sup>3</sup>)

L = avfallets lakbarhet (kg/m<sup>2</sup>·s)

T = tiden för fullständig upplösning av avfallet

I bilaga 5 har T beräknats för två glasgeometrier (4) och några rimliga värden på lakbarheten för borosilikatglas. Eftersom värdena på lakbarheten varierar kraftigt mellan olika mätningar, beroende t ex på skillnader i mätteknik, bör en kritisk granskning av tillgängliga data ske i väntan på resultat av de experimentella mätningarna.

När det gäller utlakning ur bränslekutsar kommer en del datainsamling att ske inom P 11.01. Vissa mätningar har ägt rum i USA (BNWL).

När det gäller bränsle kan utlakningshastighetens tidsberoende vara väsentligt eftersom vissa nuklider (t ex jod) till en icke försumbar del befinner sig i kapslingsspalten och kan lösas upp "momentant" då grundvattnet kommer i kontakt med bränslet. Beräkningstekniskt kan detta lösas genom att man kombinerar resultat för momentan upplösning och konstant upplösningshastighet. För att beräkningsresultaten skall kunna utvärderas ordentligt bör en utredning göras med målsättningen att klargöra om upplösningen av grundmaterialet är hastighetsbestämmande även för keramiska UO<sub>2</sub> - kutsar (jfr glas (3)). Det är också väsentligt att fastställa hur stor fraktion av olika nuklider som finns tillgänglig i kapslingsspalten för momentan upplösning.

##### 5. Möjligheter till applicering av programmet på svenska datorer.

Den BASIC-dialekt, kallad INFONET BASIC, som har använts i USA är en stor och tämligen flexibel dialekt. Följande möjligheter för applicering av BASIC-programmet på svenska datorer har undersökts:

- DEC system 10 på Stockholms datamaskincentral (QZ)
- Vattenfalls UNIVAC

QZs maskin accepterar inte att kommandon läggs upp i programfilen (se kap 3) utan exekveringen måste ske i dialog mellan maskinen och användaren. Detta innebär att man för varje nuklid skulle vara tvungen att starta exekveringen genom att skriva RUN på terminalen. Varje körning av programmet blir på detta sätt ett heldagsjobb vid terminalen. Eftersom dessutom BASIC-dialekten på DEC 10 skiljer sig rätt avsevärt från INFONET BASIC rekommenderas inte körningar på QZ.

Vattenfalls UNIVAC-system är betydligt flexiblare och tycks acceptera även kommandon på filerna. Den BASIC-dialekt som finns implementerad på Vattenfall, ASCII-BASIC, skiljer sig i vissa avseenden från INFONET BASIC men de felutskriften som har erhållits vid kompileringen av programmet tyder på att arbetet med att överföra programmet till ASCII-BASIC inte är orimligt

stort. Som ett första steg bör därför programmet göras iordning för körningar på Vattenfall.

Flera skäl talar för att en överföring till FORTRAN är lämplig:

- 1) BASIC har inga möjligheter till datalagring med dubbel precision (Vattenfalls BASIC-version utgör ett undantag). Detta har gett cancellationsproblem som har fått lösas genom numeriska konstgrepp.
- 2) Talområdet i BASIC är ca  $10^{-38} - 10^{+38}$  medan FORTRAN klarar  $10^{-75} - 10^{+75}$  i de flesta versionerna. En del underflow-problem har förekommit i USA.
- 3) BASIC har många dialekter medan FORTRAN är mycket portabelt.
- 4) För dokumentation av programmet lämpar sig FORTRAN mycket bättre än BASIC.

En överföring till FORTRAN skulle kosta ca 30 000 kronor inklusive dokumentationsbefrämjande åtgärder såsom införande av nya variabelnamn, kommentarer o dyl. Om BASIC-programmet i framtiden skall användas på andra maskiner än Vattenfalls UNIVAC kan kostnaderna pga problem enligt punkt 1) - 3) ganska snabbt komma upp till 30 000 kronor vilket innebär att en överföring i så fall är ekonomiskt lönsam.

Referenser

- 1) Lester-Jansen-Burkholder, Migration of Radionuclide Chains Through an Adsorbing Medium, BNWL-SA-5079.
- 2) Cloninger, Clarification of Source-Related Assumptions in Leach Incident Modeling, BNWL 1975-02-03.
- 3) Cloninger, Clarification of Source-Related Assumptions in Leach Incident Modeling, BNWL 1975-02-24.
- 4) Lindholm, Provning av franskt högaktivt glas, SKBF 1976-10-13.

## Nuklidurval vid BNWLs körningar.

Nuklid	T 1/2 (år) <sup>1)</sup>		Saknas i BEGAFIP ?
H - 3	12.26		Ja
Tc - 99	2.12 E + 5		
I - 129	1.7 E + 7		
C - 14	5730		Ja
Mo - 93	> 100	3000 <sup>2)</sup>	Ja
Ca - 41	8.0 E + 4		Ja
Se - 79	6.5 E + 4		
Sr - 90	28.1		
Be - 10	2.5 E + 6		Ja
Co - 60	5.26		Ja
Ni - 59	8.0 E + 4		Ja
Ni - 63	92		Ja
Rb - 87	5.0 E + 11		
Cs - 135	3.0 E + 6		
Cs - 137	30.23		
Pd - 107	ung. 7.0 E + 6	6.5 E + 6 <sup>2)</sup>	
Sn - 126	ung. 1.0 E + 5	1.0 E + 5	
Sm - 151	93		
Ho - 166 M	1.2 E + 3		
Eu - 152	13		
Eu - 154	16		
Zr - 93	1.5 E + 6		
Cd - 113 M	14		
Cm - 248	4.7 E + 5		Ja
Pu - 244	8.0 E + 7		Ja
Cm - 244	17.6		
Pu - 240	6580		
U - 236	2.39 E + 7		
Th - 232	1.41 E + 10		
U - 232	73.6		Ja
Cm - 245	9.3 E + 3		Ja
Pu - 241	13.2		
Am - 241	458		
Np - 237	2.14 E + 6		
U - 233	1.62 E + 5		
Th - 229	7340		Ja
Cm - 246	5.5 E + 3		Ja
Pu - 242	3.79 E + 5		
U - 238	4.51 E + 9		
Cm - 242	0.447		
Am - 242 M	152		
Pu - 238	86		
U - 234	2.47 E + 5		
Th - 230	8.0 E + 4		Ja
Ra - 226	1600		Ja
Cm - 247	1.6 E + 7		Ja
Am - 243	7.37 E + 3		
Cm - 243	32		
Pu - 239	2.44 E + 4		
U - 235	7.1 E + 8		
Pa - 231	3.25 E + 4		Ja

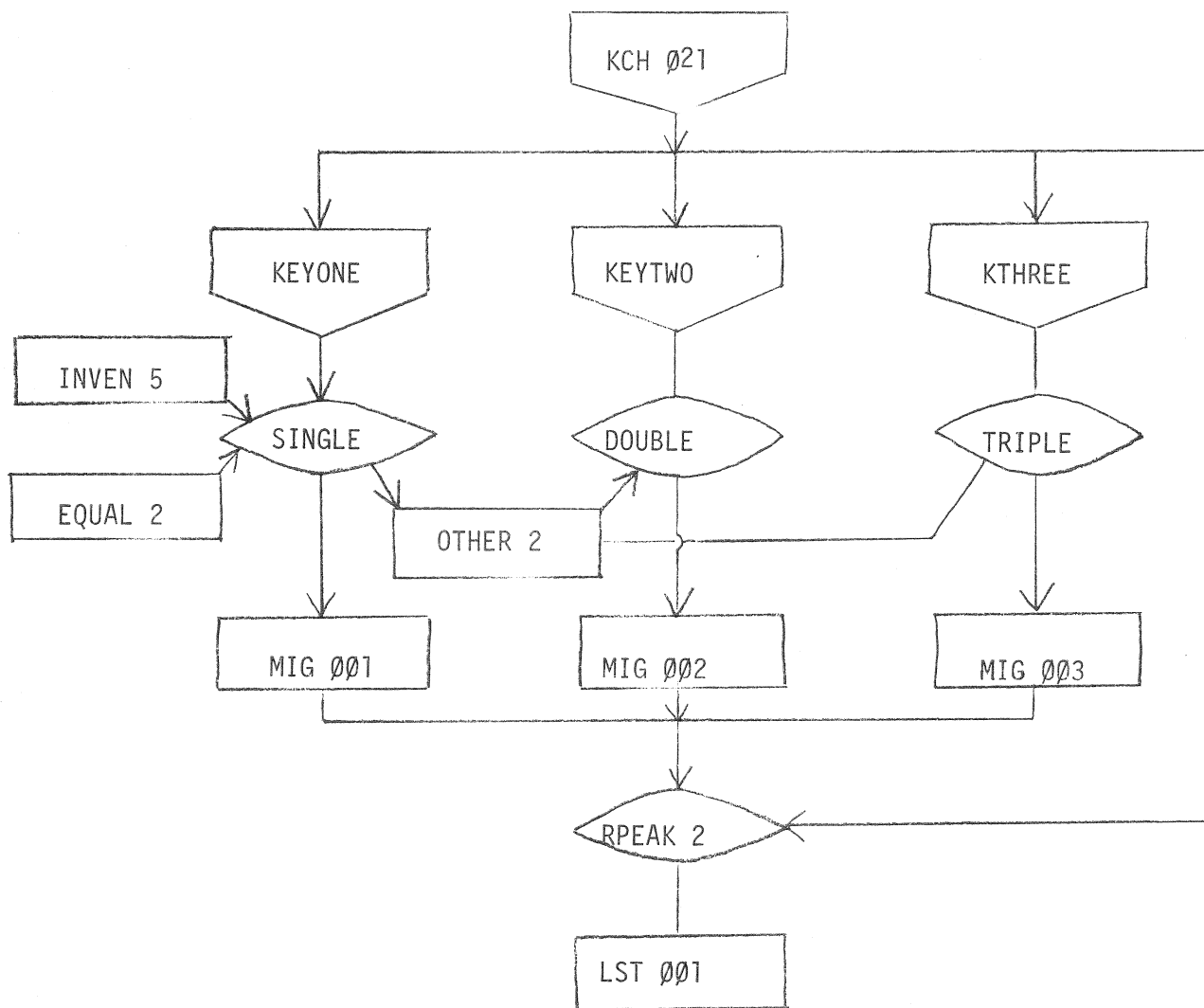
Cm - 250		1.7 E + 4		Ja
Cf - 250		13		Ja
Cf - 249		360		Ja
Cf - 251	ung.	800	900 <sup>2)</sup>	Ja
Cf - 252		2.65		Ja

1) Källa: Handbook of Chemistry and Physics 57<sup>th</sup> ed, CRC-Press, Cleveland Ohio 1976.

2) I de fall där källan anger att halveringstiden är osäker har även de av BNWL använda värdena angivits.



Logiskt schema för "Geosphere Model".



= Nyckelfil



= Datafil



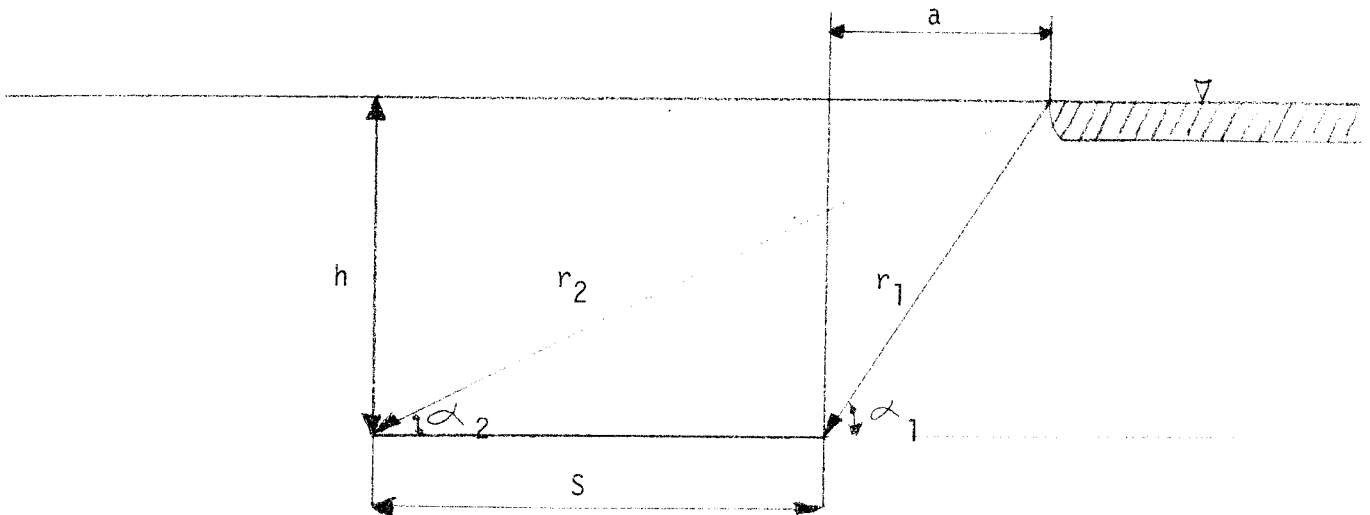
= Programfil

Fördelningskoefficienter för "Western US dessert subsoil".<sup>1)</sup>

Grundämne	$K^{-1}$	Ingår i föreslagen input ?
H	1	Ja
Be	3 E - 3	
C	1 E - 1	Ja
Na	2 E - 2	
K	6 E - 3	
Ca	1 E - 2	
Fe	3 E - 4	
Co	3 E - 3	
Ni	3 E - 3	Ja
Se	1 E - 2	Ja
Rb	2 E - 3	Ja
Sr	1 E - 2	Ja
Y	1 E - 4	
Zr	1 E - 4	Ja
Nb	1 E - 4	
Mo	4 E - 2	Ja
Tc	1	Ja
Pd	9 E - 4	Ja
Cd	1 E - 4	Ja
Sn	9 E - 4	Ja
Sb	1 E - 2	
I	1	Ja
Cs	1 E - 3	Ja
Pm	4 E - 4	
Sm	4 E - 4	Ja
Eu	4 E - 4	Ja
Ho	4 E - 4	Ja
Tl	1 E - 1	
Pb	6 E - 5	
Bi	2 E - 2	
Po	9 E - 3	
Fr	1 E - 3	
Ra	2 E - 3	Ja
Ac	2 E - 4	
Th	2 E - 5	Ja
Pa	6 E - 5	Ja
U	7 E - 5	Ja
Np	1 E - 2	Ja
Pu	1 E - 4	Ja
Am	1 E - 4	Ja
Cm	3 E - 4	Ja
Bk	3 E - 4	

<sup>1)</sup> Källa: Schneider - Platt, Editors, BNWL-1900, High-Level Waste Management Alternatives.

Schematiskt räkneexempel för avståndet depå - recipient.



$$r_1 = \frac{h}{\sin(\arctan(\frac{h}{a}))}$$

$$r_2 = \frac{h}{\sin(\arctan(\frac{h}{a+s}))}$$

$$\Delta = \frac{r_2 - r_1}{r_1} \times 100 (\%)$$

Sätt  $h = 800$  m och  $S = 600$  m

a =	0	100	200	500	1000	2000	5000
$r_1$ (m)	800	806	825	943	1280	2154	5063
$r_2$ (m)	1000	1063	1131	1360	1789	2720	5657
$\Delta$ (%)	25	32	37	44	40	26	12

$h$  = deponeringsdjup (m)

$a$  = horisontellt avstånd recipient - depå

$s$  = depåns horisontella utsträckning

$r_1$  = avståndet mellan närmaste avfallskroppen och recipienten

$r_2$  = " " fjärmaste " " "

$\Delta$  = relativa skillnaden mellan  $r_1$  och  $r_2$

Tiden för fullständig upplösning av glaskroppar (år).

Glas	Lakbarhet (g/cm <sup>2</sup> ·d)	10 <sup>-5</sup>	10 <sup>-7</sup>	10 <sup>-9</sup>
	PIVER <sup>1)</sup>		12000	1.2 milj
AVM <sup>1)</sup>		16000	1.6 milj	160 milj

1) Glaskroppar från den gamla Marcoule-fabriken  
h = 560 mm, d = 350 mm

2) Glaskroppar från den nya Marcoule-fabriken  
h = 1200 mm, d = 450 mm

$$\rho = 2570 \text{ kg/m}^3$$

Förslag till metod att beräkna "medelvärden" på hydrodynamiska  
och geokemiska parametrar i GETOUT.

## Innehållsförteckning

	Sid.
1. Problemställning.	1
2. Dispersion och uppehållstidsfördelning.	1
3. Modell för "medelvärdesberäkningen".	3
4. Demonstration av "medelvärdesberäkningen".	3
A) Beräkning av grundvattenhastighet och dispersionskoefficient.	5
B) Beräkning av nuklidhastigheten.	5
C) Beräkning av nuklidfördröjningen.	5
5. Hur inverkar antagandet om en endimensionell kolonn?	6
Referenser	9

Förslag till metod att beräkna "medelvärden" på hydrodynamiska och geokemiska parametrar i GETOUT.

1. Problemställning.

GETOUT beräknar migrationen av radionuklider genom en homogen, endimensionell kolonn. För att programmet skall kunna utnyttjas för en urbergsdepå måste man dels visa att den endimensionella strömningen inte är alltför långt från verkligheten och dels finna ett sätt att beräkna "medelvärden" på de hydrodynamiska och geokemiska parametrarna som styr migrationen nämligen grundvattenhastigheten  $u$ , dispersionskoefficienten  $D$  och fördröjningsfaktorn  $K_i$  (= grundvattenhastighet/nuklidhastighet).

2. Dispersion och uppehållstidsfördelning.

När ett fluidum rör sig mellan två punkter kommer olika volymselement av fluidet att ta olika lång tid på sig för transporten dels p g a diffusion och dels p g a omblandning. Summan av dessa effekter brukar kallas dispersion. Man kan definiera en statistisk uppehållstidsfördelning, vars matematiska utseende bestäms av transportekvationen som i en dimension lyder:

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \frac{D}{uL} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} - \frac{\partial C}{\partial \eta} \quad (1)$$

där  $C$  = koncentration av ett ämne

$\theta$  = dimensionslös tid =  $t \cdot u/L$

$t$  = tid (s)

$\eta$  = dimensionslös sträcka =  $Z/L$

$Z$  = längdkoordinat

$D$  = dispersionskoefficienten ( $m^2/s$ )

$u$  = fluidets hastighet (m/s)

$L$  = transportsträckan (m)

Om man har en ostörd strömning vid transportsträckans start- och slutpunkt (öppen transportsträcka) kan (1) lösas analytiskt och ger för en ideal pulsstörning följande lösning i slutpunkten för transporten ( $n=1$ ):

$$C_{\theta} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\theta(D/uL)}} \exp \left[ -\frac{(1-\theta)^2}{4\theta(D/uL)} \right] \quad (2)$$

där  $C_{\theta}$  = uppehållstidsfördelningen normerad så

$$\text{att } \int_0^{\infty} C_{\theta} \cdot d\theta = 1$$

Ekvation (2) kan karaktäriseras med två parametrar (ref. 1) nämligen medelvärde (fördelningens tyngdpunkt)  $\bar{\theta}_C$  och variansen  $\sigma_{\theta}^2$ :

$$\bar{\theta}_C = \frac{\bar{t}_C \cdot u}{L} = 1 + 2 \frac{D}{u \cdot L} \Rightarrow \bar{t}_C = \left( 1 + 2 \frac{D}{uL} \right) \frac{L}{u} \quad (3)$$

där:  $\bar{t}_C$  = medeluppehållstiden för volymselementen (s)

$$\sigma_{\theta}^2 = 2 \frac{D}{uL} + 8 \left( \frac{D}{uL} \right)^2 \quad (4)$$

Denna typ av uppehållstidsfördelning finns inbakad i GETOUT som emellertid även tar hänsyn till geokemisk fördröjning av nuklidtransporten och radioaktivt sönderfall.

Om en signal utsätts för flera konsekutiva störningar (om t ex pulsstörningen passerar genom flera zoner med olika hydrodynamiska betingelser) blir totaleffekten en fördelning av samma typ som ekvation (2) där medelvärdet är summan av medelvärdena för de konsekutiva störningarna och variansen summan av de konsekutiva störningarnas varianser:

$$\bar{\theta}_{C_{\text{tot}}} = \sum_{i=1}^n \theta_C^i \quad (5)$$

$$\sigma_{\theta_{\text{tot}}}^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_{\theta}^i \quad (6)$$

där:  $n$  = antalet konsekutiva störningar (antalet hydrodynamiska zoner)



### 3. Modell för "medelvärdesberäkningen".

För varje hydrodynamisk zon beräknas  $\bar{\theta}_C$  och  $\sigma_\theta^2$  ur (3) och (4) varefter (5) och (6) används för beräkningen av  $\bar{\theta}_C$  och  $\sigma_\theta^2$  för hela transportsträckan. Grundvattenhastigheten  $u_w$  och dispersionskoefficienten  $D$  beräknas sedan ur (3) och (4) med  $\sigma_{\theta}^2_{\text{tot}}$  och  $\bar{\theta}_{C\text{tot}}$  insatta. För en viss nuklid beräknas sedan  $u_n$  på samma sätt med  $u = u_w/K_i$  i det första beräkningssteget (beräkningen av  $\bar{\theta}_C$  och  $\sigma_\theta^2$  för zonerna). "Medelvärdet" på  $K_i$  beräknas sedan som  $\bar{K}_i = u_w/u_n$ . Denna modell demonstreras nedan med ett räkneexempel.

### 4. Demonstration av "medelvärdesberäkningen".

Vi tänker oss en momentan injicering av Sr i strömmande grundvatten. Strontiumet passerar sedan genom tre hydrodynamiska zoner nämligen:

ZON I: Lerbarriären i depån

$$L = 10 \text{ m}$$

$$K_p = \text{permeabiliteten} = 10^{-7} \text{ m/s}$$

$$\epsilon = \text{porositeten} = 0.35$$

$$i = \text{hydrauliska gradienten} = 0.003$$

$$K_i = 100 \text{ (för Western US Dessert Subsoil)}$$

ZON II: Tätt berg

$$L = 1000 \text{ m}$$

$$K_p = 10^{-8} \text{ m/s}$$

$$s = \text{genomsnittligt sprickavstånd} = 5 \text{ m}$$

$$i = 0.003$$

$$K_i = 6 \text{ (enl. Ove Lundströms mätningar i Studsvik)}$$

ZON III: Sprickzon

$$L = 5000 \text{ m}$$

$$K_p = 10^{-5} \text{ m/s}$$

$$s = 0.1 \text{ m}$$

$$i = 0.003$$

$$K_p = 6$$

Grundvattenhastigheten kan beräknas ur följande samband (ref. 2):

$$u = 47 \cdot i (s \cdot K_p)^{2/3} \quad \text{för sprickigt berg med plan-} \\ \text{parallella spricksidor} \quad (7)$$

$$u = K_p \cdot i/\varepsilon \quad \text{för leran} \quad (8)$$

Dispersionskoefficienten vid ren kanalströmning kan beräknas ur (ref. 1):

$$D = D + \frac{u^2 \cdot d_h^2}{192 \cdot D} \quad (9)$$

där:  $D$  = diffusiviteten ( $\text{m}^2/\text{s}$ )

$$d_h = \text{den hydrauliska diametern} = \frac{4A}{P} \text{ (m)}$$

$A$  = strömningskanalens tvärsnittsarea ( $\text{m}^2$ )

$P$  = den våtta perimetern (m)

För en helt fylld, rektangulär kanal med höjden  $h$  och vidden  $b$  gäller:

$$d_h = \frac{4 \cdot b \cdot h}{2b + 2h}$$

$$\text{Eller om } b \ll h : d_h \approx 2b \quad (10)$$

Sprickvidden kan beräknas ur (ref. 2):

$$b = 1.05 \cdot 10^{-2} \cdot (K \cdot s)^{1/3} \quad (11)$$

(11), (10) och (7) ger insatta i (9):

$$D = D + 5.04 \cdot 10^{-3} \cdot (s \cdot K_p \cdot i)^2 / D \quad (12)$$

A) Beräkning av grundvattenhastighet och dispersionskoefficient.

ZON	$u(m/s)$	$D(m^2/s)$	L (m)	$\bar{t}_C$ (s)	$\sigma_\theta^2$
I	$8.57 \cdot 10^{-10}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	10	$1.711 \cdot 10^{10}$	0.9022
II	$1.91 \cdot 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	1000	$5.226 \cdot 10^8$	$2.090 \cdot 10^{-6}$
III	$1.41 \cdot 10^{-5}$	$2.02 \cdot 10^{-9}$	5000	$5.000 \cdot 10^7$	$5.738 \cdot 10^{-8}$
Totalt			6010	$1.768 \cdot 10^{10}$	0.9022

Ekvation (3) och (4) ger:

$$u_w = 15.7 \text{ m/år}$$

$$\bar{D} = 22044 \text{ m}^2/\text{år}$$

B) Beräkning av nuklidhastigheten.

ZON	$u(m/s)$	$D(m^2/s)$	L (m)	$\bar{t}_C$ (s)	$\sigma_\theta^2$
I	$8.57 \cdot 10^{-12}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	10	$5.561 \cdot 10^{13}$	4402
II	$3.19 \cdot 10^{-7}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	1000	$3.135 \cdot 10^9$	$1.254 \cdot 10^{-5}$
III	$2.35 \cdot 10^{-6}$	$2.02 \cdot 10^{-9}$	5000	$2.127 \cdot 10^9$	$3.438 \cdot 10^{-7}$
Totalt			6010	$5.561 \cdot 10^{13}$	4402

Ekvation (3) och (4) ger:

$$u_n = 0.162 \text{ m/år}$$

$$\bar{D} = 22780 \text{ m}^2/\text{år}$$

C) Beräkning av nuklidfördröjningen.

$$\bar{K}_i = u_w/u_n = 96.8$$

Migrationen genom de tre zonerna med olika hydrodynamiska och geokemiska betingelser kan alltså approximativt beskrivas som en migration genom en kolonn med samma betingelser genom hela kolonnen.

Sammanfattning av medelvärdesberäkningen för Sr

Variabel \ ZON	I	II	III	Medelvärde
u(m/år)	0.0270	60.2	44.5	15.7
D(m <sup>2</sup> /år)	0.0631	0.0631	0.0637	22040
K <sub>i</sub>	100	6	6	96.8

Den avvikelse på 3.34% som finns mellan  $\bar{D}$  i steg A och  $\bar{D}$  i steg B beror på att beräkningsmodellen är approximativ. För de hypotetiska beräkningsfallen att  $K_i = 50000$  i zon I och =6 i övriga zoner samt att  $K_i = 6$  i alla zoner blir avvikelsen 3.36% resp. 1.34%. Denna avvikelse kan listas för varje beräkningsfall som en indikator på modellens noggrannhet.

Medelvärdet på dispersionskoefficienten ligger drygt fem tiopotenser högre än det värde på  $2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$  som användes som indata till räkneexemplet. Detta beror på att utseendet av  $C_0$  i ekvation (1) styrs av den dimensionslösa parametern  $D/u \cdot L$  och att  $u \cdot L$  är mycket större för hela kolonnen än för den zon som ger det dominerande bidraget till dispersionen nämligen Ierzonen. Rimligheten av  $\bar{D}$  kan lätt kontrolleras med en enkel proportionering:

$$\frac{(u \cdot L)_{\text{ZON I}}}{(u \cdot L)_{\text{tot}}} \cdot \bar{D} = 2.0 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

##### 5. Hur inverkar antagandet om en endimensionell kolonn?

När nu en metod att ta hänsyn till varierande hydrodynamiska och geokemiska betingelser längs transportvägen har skisserats återstår att visa att spridningsbilden inte avviker alltför mycket från den endimensionella kolonnen i GETOUT och vad avvikelsen innebär ur radiologisk synvinkel.

Följande resonemang bygger på Otto Brotzens redogörelse vid ett seminarium 77-04-14 på KBS för grundvattenrörelserna kring en potentiell depå.

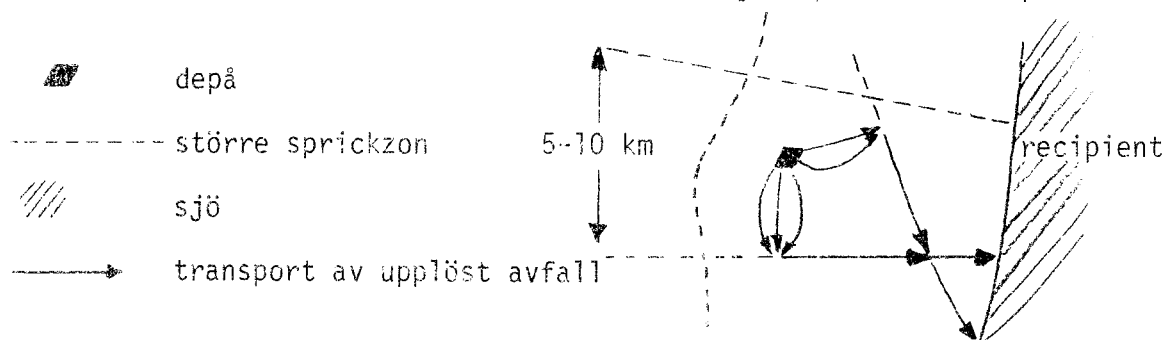


Fig. 1 a Horisontell vy av en potentiell depåort vid kusten.

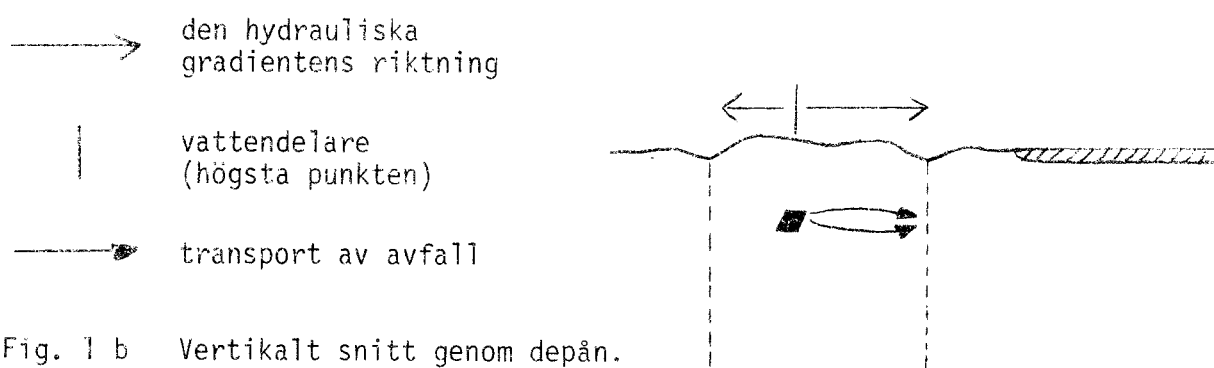


Fig. 1 b Vertikalt snitt genom depån.

Fig. 1 a och 1 b beskriver det migrationsscenario som OB skisserade under seminariet. Scenariot kan sammanfattas i följande punkter:

- 1) Urbergsskölden genomkorsas av förhållandevis breda (1-10 m) sprickzoner med ett inbördes avstånd på 5-10 km. Mellan dessa sprickzoner finns områden med tätare berg.
- 2) I de massivare bergpartierna mellan sprickzonerna är den hydrauliska gradienten riktad så att grundvattenflödet går ut mot sprickzonerna.
- 3) I sprickzonerna går grundvattnet mot någon recipient (i fig. havet).
- 4) Erfarenheterna från malmetning säger att utsläppet till sprickzonen är punktformigt. I de fall malmkroppen är utbredd på båda sidor om toppen av kullen mellan två sprickzoner kan flera utsläppspunkter observeras i sprickzonerna.

- 5) Utsläppet till recipienten blir punktformigt och lokaliserat till den plats där sprickzonen löper ut till recipienten. I de fall utsläpp har skett till flera sprickzoner kan utsläppet till recipienten ske på flera punkter (alternativt till flera recipienter).
- 6) Permeabiliteten i sprickzonerna är 3-4 tiopotenser högre än i mellanliggande bergblock.
- 7) I de tätare bergpartierna förekommer ett oregelbundet mönster av mindre sprickor där huvuddelen av vattenströmningen i dessa bergpartier äger rum.

Slutsatsen av punkterna 4) och 5) måste bli att en endimensionell kolonn inte ligger allt för långt ifrån verkligheten. Detta måste emellertid ytterligare konfirmeras för att hyfsad uppskattning av hur beräkningsresultaten ligger i förhållande till verkligheten skall kunna göras. En god hjälp kan därvidlag fås från spårämnesinjiceringarna i borrhålen i Studsvik (Ove Lundström) samt från Otto Brotzen och Yngve Gustafsson. Dessutom bör en utredning om de radiologiska skillnaderna mellan ett punktformigt utsläpp och ett utbrett utsläpp göras (förslagsvis av Ronnie Bergman, AE). Denna utredning bör omfatta individdoser och kollektivdoser vid utsläpp till två olika recipienttyper nämligen en sjö respektive ytvattnet.

Referenser

1. O Levenspiel, Chemical Reactor Engineering, 2nd ed., John Wiley & Sons Inc., New York.
2. Acres Consulting Services Ltd., Radioactive Waste Repository Study, Geochemistry, AECL 1976.

## Förteckning över tekniska rapporter

01. Källstyrkor i utbränt bränsle och högaktivt avfall från en PWR beräknade med ORIGEN  
Nils Kjellbert  
AB Atomenergi 77-04-05
02. PM angående värmeledningstal hos jordmaterial  
Sven Knutsson och Roland Pusch  
Högskolan i Luleå 77-04-15
03. Deponering av högaktivt avfall i borrhål med buffertsubstans  
A Jacobsson och R Pusch  
Högskolan i Luleå 77-05-27
04. Deponering av högaktivt avfall i tunnlar med buffertsubstans  
A Jacobsson, R Pusch  
Högskolan i Luleå 77-06-01
05. Orienterande temperaturberäkningar för slutförvaring i berg av radioaktivt avfall  
Roland Blomqvist  
AB Atomenergi 77-03-17
06. Groundwater movements around a repository, Phase 1, State of the art and detailed study plan  
Ulf Lindblom  
Hagconsult AB 77-02-28
07. Resteffekt för KBS del 1  
Litteraturgenomgång Del 2 Beräkningar  
K Ekberg, N Kjellbert, G Olsson  
AB Atomenergi 77-04-19



08. Utlakning av franskt, engelskt och kanadensiskt glas med högaktivt avfall  
Göran Blomqvist  
AB Atomenergi 77-05-20
09. Diffusion of soluble materials in a fluid filling a porous medium  
Hans Häggblom  
AB Atomenergi 77-03-24
10. Translation and development of the BNWL-Geosphere Model  
Bertil Grundfelt  
Kemakta Konsult AB 77-02-05
11. Utredning rörande titans lämplighet som korrosionshärdig kapsling för kärnbränsleavfall  
Sture Henriksson  
AB Atomenergi 77-04-18
12. Bedömning av egenskaper och funktion hos betong i samband med slutlig förvaring av kärnbränsleavfall i berg  
Sven G. Bergström  
Göran Fagerlund  
Lars Rombén  
Cement och Betonginstitutet 77-06-22
13. Utlakning av använt kärnbränsle (bestrålad uranoxid) vid direktdeponering  
Ragnar Gelin  
AB Atomenergi 77-06-08
14. Influence of cementation on the deformation properties of bentonite/quartz buffer substance  
R. Pusch  
Högskolan i Luleå 77-06-20