

### **Příloha 3 – Popis a specifikace předmětu plnění**

Níže uvedený text definuje předmět plnění celé Dílčí zakázky „Metodika modelování THMC procesů“ mezi TUL a SÚRAO. Rozsah činnosti dodavatele dle této smlouvy (subdodavatele uvedené zakázky) v jednotlivých etapách a jejich částech je určen počty hodin dle Přílohy č.5.

Zapojení do benchmarků BM3-BM5 nebylo dosud určeno, jejich výběr bude proveden a schválen SÚRAO na základě výsledků Etapy 1 a zapojení subdodavatelů bude určeno následně a specifikováno v případném dodatku této smlouvy.

#### **(Popis a specifikace předmětu plnění – Příloha č. 1 Prováděcí smlouvy SO2021-053-02)**

V souladu s výzvou bude řešení organizováno do tří etap – Etap 1 a 3 zaměřených obecně na řešerše, formulace a hodnocení metodik modelování a Etapy 2 obsahující výpočty konkrétních benchmarkových úloh pro potřeby otestování a validace metodik modelování.

Všechny výstupy (technické zprávy) specifikované níže budou předány v tištěné (2 paré) a elektronické verzi v šabloně SÚRAO v aktuálním znění dostupné na interním úložišti (speciální podmínky pro zprávy z benchmarkových úloh jsou uvedeny dále). V rámci odevzdání výstupů proběhne také odevzdání modelů a podkladových dat dle interního metodického pokynu SÚRAO MP.23. Poskytovatel v rámci nejpozději třetího kontrolního dne uskuteční jednání k datovému modelu předávaných dat se SÚRAO.

#### **Etapa 1**

*Cíle etapy dle výzvy:* Budou shrnuty všechny současné znalosti z doposud provedeného modelování sdružených procesů a jejich implikace pro vývoj českého konceptu ukládání VJP. Budou analyzovány výsledky předchozích THMC modelovacích aktivit, které proběhly v minulých letech (např. DECOVALEX, Task Force EBS). V rámci řešení zakázky budou navrženy dílčí metodické postupy pro modelování komponent úložiště v různých vývojových stavech (nesaturovaný bentonit oxidická fáze, saturovaný bentonit anoxická fáze, vysokoteplotní fáze a nízkoteplotní fáze). Budou definovány koncepční matematické modely a výpočetní postupy a doporučení pro získání potřebných znalostí studovaných procesů. Dále budou navrženy vhodné experimenty v PVP Bukov pro ověření a validaci metodiky modelování THMC procesů. Počítá se i se zapojením při přípravě návrhu (podmínek) těchto experimentů. Vlastní experimenty nepatří do řešení žádné Dílčí zakázky části 2. THMC procesy budou zahrnovat i fázi působení ionizujícího záření a mikrobiální koroze.

#### *Navržený postup řešení Poskytovatelem:*

Na řešení se budou účastnit pracovníci všech partnerských (subdodavatelských) organizací. Budou zapojeni všichni klíčoví pracovníci dle smlouvy a další osoby tak, aby byly pokryty odborné tematické oblasti odpovídající širě problematice THMC procesů a jejich modelování (s omezením v případě jmenovaných vlivů ionizujícího záření a mikrobiologie na literární reference nebo externí týmy). Po zahájení řešení bude definováno členění dílčích problémů tak, aby jednak respektovalo odbornost týmu, jednak směřovalo k požadovanému vztahu k vlastnostem, událostem a procesům (FEP). Následovat bude shromáždění nebo rekapitulace existujících znalostí a zkušeností v problematice – z aktuální obecné literární řešerše, s důrazem na výsledky organizací s programem úložiště v krystalických horninách (SKB, Posiva, NAGRA) a dosavadní práce řešitelů i dalších českých pracovišť pro SÚRAO. Z těchto vstupů budou formulovány závěry v těchto směrech:

- Existující koncepční modely a numerické simulační kódy a jejich úspěšnost a omezení při vysvětlení jevů a pro predikci.

- Dostupnost dat pro jednotlivé materiály, míra závislosti parametrů na typu materiálu (např. složení bentonitu).
- Potřebnost ověření modelů a kódů řešitelů (ev. dalších dostupných v ČR) na benchmarkových úlohách nebo proti experimentům.
- Potřebnost dalších laboratorních měření a terénních experimentů orientovaných na české podmínky a materiály.
- Nástin hodnocení efektu jevů či parametrů na bezpečnost úložiště (podrobnější specifikace bude předmětem Etapy 3, zároveň předpokládá interakci s dalšími projekty a podíl pracovníků SÚRAO na samotném hodnocení a formulaci).
- Nástin hodnocení výše uvedených bodů ve vztahu k FEPs: v této etapě na úrovni konzultací s řešitelským týmem Části 1 projektu „Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení technického řešení hlubinného úložiště“, z důvodu časového souběhu řešení, tedy v době před zpracováním zprávy a s použitím oboustranně neuzavřených výsledků.
- V této etapě, resp. celé této DZ, budou případné nové experimenty navrženy jen na koncepční úrovni, nikoli v podobě podrobných projektů určených pro bezprostřední zahájení realizace.

Výstupem Etapy 1 bude zpráva v češtině.

Řešení předpokládá průběžnou interakci řešitelů a SÚRAO na kontrolních dnech. Pravidelné kontrolní dny v termínech dle rámcové smlouvy (do 20. dne nového čtvrtletí) budou využity takto: KD 1/2022 ke strukturování tematiky (přiblíženému potřebám FEPs a zároveň vycházející z odborných zaměření týmů) a koordinaci s potřebami SÚRAO. KD 4/2022 k draftové podobě závěrů z rešerše a výběru doporučených směrů k dalšímu výzkumu (v rámci projektu Výzkumná podpora ... a části 2 Hodnocení bariér) a volbě benchmarků. Na KD 1/2022 také bude prodiskutována vhodnost termínu druhého KD s ohledem na následnou práci při sestavování dílčí zprávy s termínem odevzdání signální verze v krátkém čase poté a případně by mohl být určen termín v druhé polovině března 2022. Na dalším KD 7/2022 po schválení finální verze zprávy předpokládáme určení zbylých tří řešených benchmarků.

## **Etapa 2**

Předmětem plnění je řešení benchmarkových úloh, což může mít různou podobu, práci v mezinárodním týmu s externím definovaným zadáním a koordinátorem (např. Task Force EBS, zaštitěný SKB a konsorciem institucí odpovědných za plánování hlubinných úložišť v různých zemích), řešení úlohy s dříve uzavřenými výsledky jednoho či více řešitelů s dostatečnou relevancí pro potřeby validace (např. z minulých etap TF EBS nebo DECOVALEX, z odborné vědecké literatury), nebo formulaci vlastní úlohy ve vazbě na konkrétní existující experimentální data s potřebným rozsahem měřených dějů.

Kalkulace kapacit je této Dílčí zakázce je pro 5 benchmarků odpovídající náročnosti – tj. úlohy na spíše jednodušší geometrii (1D nebo 2D), typicky tedy se syntetickou konfigurací nebo dle laboratorního experimentu, orientované na určitý vybraný proces, s možným strukturováním do etap nebo variant řešených pomocí podobného modelu (např. odpovídající přidávání dalších dějů do modelu, varianty heterogenity, fáze experimentu s rozdílnými daty apod.). V čase zadání (podpisu smlouvy) jsou pouze dvě z úloh specifikovány ze strany SÚRAO (dále odkazujeme jako BM1 a BM2). Další vyplnou z výstupů Etapy 1 nebo z jednání kontrolních dnů, přičemž výše uvedená charakteristika podmiňuje řešitelnost v rámci plánovaných kapacit. Pro řešení složitější nebo rozsáhlejší benchmarkové úlohy předpokládáme nutnost dodatečné dohody o potřebných kapacitách a nákladech.

Zahájení řešení BM1 a BM2 bude bezprostředně po podpisu smlouvy, paralelně s řešením Etapy 1 (úlohy už v TF EBS běží a je plánováno postupné zredukování zpoždění za dalšími

řešiteli). Ukončení řešení je podmíněným předpokladem a harmonogram může být ovlivněn postupem koordinátorů Tasků v rámci TF EBS. Zahájení řešení BM3-BM5 je plánováno na druhou polovinu 2022 nebo začátek 2023, dle výstupů Etapy 1 a vyjádření SÚRAO (plán KD 7/2021). Termíny ukončení Task 13 pro BM1 a Task 12 pro BM2 v rámci TF EBS nebyly v zadání ani při osobní konzultaci s koordinátory uvedeny. Návrh harmonogramu vychází z předpokladu tří- až čtyř-letých period v projektu a termínu vyhlášení tasků na konci roku 2019.

Kontrolní dny k řešení BM1 a BM2 budou společně s KD k Etapě 1. Na další období budou termíny určeny tak, aby se dva ročně konaly v krátkém čase před mezinárodními schůzkami projektu TF EBS a zbylé dva cca v polovině intervalu. Na rok 2022 byl oznámen termín schůzky TF EBS na 15-17.2. v prezenční formě, jinak se obvykle jedná o termíny v květnu a listopadu.

Benchmarky, pro něž je součástí řešení účast na mezinárodních schůzkách, představuje účast na těchto schůzkách (zahraniční cestovné) dodatečné náklady, které jsou definované jako Vstupy podle čl. III odst. 2 (ii) této Prováděcí smlouvy. Náklady na cesty budou po předchozím jednotlivém schválení ze strany SÚRAO fakturovány nad rámec maximální Smluvní ceny za poskytování Služeb (čl. I, odst. 2) vycházející z rozsahu služeb (počtu hodin) a hodinových sazeb. Účast zástupců řešitelského týmu na mezinárodních schůzkách je opodstatněná z důvodu efektivní konfrontace výsledků oproti výsledkům dalších řešitelů, pro posouzení kvality numerického modelu, obecně jeho validaci nebo případná vylepšení. Osobní účast je obvyklou podmínkou práce v TF EBS konsorciu.

Za každou benchmarkovou úlohu bude zpracována samostatná zpráva. V případě mezinárodních projektů budou zprávy v angličtině. Pokud koordinátor takové úlohy (např. Tasku v rámci TF EBS) specifikuje vlastní požadavky na zprávu z řešení (formátování apod.) nebo bude z příspěvků řešitelů zpracovávat souhrnnou zprávu za všechny týmy, nebude taková zpráva považována jako výstup v rámci řešení této DZ. Zpráva bude převedena do šablony SÚRAO a bude doplněna českým abstraktem.

Podrobný plán řešení je určen pro BM1 a BM2 takto:

### **BM1 – řešení Task 13 v rámci projektu TF EBS vedeného SKB „Unsaturated homogenization“**

Úloha je zaměřena na hydro-mechanické procesy při bobtnání bentonitu v cele s volným prostorem nad bentonitovým vzorkem (Campos et al., 2019). Je rozdělena do tří etap odpovídajících třem sadám zkoušek. V první etapě probíhá sycení bentonitu za pomoci vodní páry ze strany volného prostoru. V druhé etapě je bentonit sycen kapalnou vodou skrze spodní stěnu. V poslední etapě je bentonit sycen kapalnou vodou ze strany volného prostoru. Etapy 1 a 2 jsou v průběhu a jedná se o zapojení do běžícího projektu. Zadání etap 1 a 2 je popsáno koordinátorem A.Gensem a doplněno výstupem z měření ve formě excelovské tabulky. Přesné zadání třetí modelové úlohy není ještě zpracováno a představuje určitou nejistotu v zadání, protože se čeká na výsledky laboratorních měření.

Na základě poznatků z experimentálních měření bude vytvořen hydro-mechanický (HM) model schopný predikovat danou problematiku. Model bude validován oproti výsledkům laboratorního měření a výsledkům dalších týmů zapojených v EBS Task Force. Numerický model bude zahrnovat transport vody popsáný pomocí Richardsovy rovnice s difúzí vodní páry. Mechanický model bude rozdělen do dvou etap vývoje. V první etapě bude pracováno

s modelem nelineární elasticity a druhé etapě vývoje bude pracováno s „Barcelona Basic modelem“. Numerická simulace vývoje objemových změn bentonitu bude prováděna v programu COMSOL – multifyzikální simulátor s grafickým uživatelským rozhraním. Předpokládá se, že expanze v desítkách procent objemu bentonitu může představovat překážku pro stabilitu iteračního řešiče.

V časovém harmonogramu je řešení rozděleno do těchto etap:

1. Navázání kontaktů v EBS Task Force komunitě pro získání zadání modelové úlohy. Analýza problematiky, zadání modelových úloh a vstupních dat.
2. Vytvoření numerického HM modelu
3. Etapa 1 Task 13 – predikce chování bentonitu, validace výsledků modelu, příprava výsledků a reportu pro srovnání s jinými týmy, případně úprava modelu.
4. Etapa 2 Task 13 – predikce chování bentonitu, validace výsledků modelu, příprava výsledků a reportu pro srovnání s jinými týmy, případně úprava modelu.
5. Etapa 3 Task 13 – predikce chování bentonitu, validace výsledků modelu, příprava výsledků a reportu pro srovnání s jinými týmy.
6. Zpracování výzkumné zprávy anglickým jazyce.

Zpráva bude obsahovat: popis modelových úloh, analýzu vstupních parametrů, popis numerického modelu, metodiku řešení, postup prací, srovnání výsledků modelu oproti naměřeným datům, diskuzi nad provedenými výpočty, včetně podkladů pro Etapu 3. Dalšími výstupy budou prezentace řešitelského týmu na TF EBS projektových setkáních.

## **BM2 – řešení Task 12 v rámci projektu TF EBS vedeného SKB „Concrete–Clay Interaction“**

Task 12 se zaměřuje se na transportní a chemické jevy na rozhraní bentonitu a betonu. (Mäder a Jenni, 2019). Úloha je definována jako syntetická, s realistickými geometrickými proporcemi, s odkazem na podmínky experimentu CI v Mont Terri. Podúlohy (subtask) A,B jsou za plně saturovaných podmínek, bez toku vody, liší se typem betonu. Podúloha C uvažuje nesaturovaný počáteční stav a transport vody přes okrajovou podmínku.

Vzhledem k nesouladu harmonogramů zakázky a EBS TF budou v rámci zakázky během řešení Task 12 jako benchmarku řešeny zejména dílčí úlohy Subtask A a Subtask B a jejich výsledky budou srovnány s výsledky ostatních řešitelských skupin zapojených v řešení Task 12 v rámci EBS TF. V rámci zakázky bude také navrženo řešení Subtask C. Dále bude nad rámec zadání Task 12 v EBS realizován návrh testovací 3D úlohy s geochemickou úlohou odvozenou z Task 12 a proveden její testovací výpočet jako sdružené transportně reakční úlohy na superpočítači. Součástí řešení projektu bude účast zástupců řešitelského týmu na setkáních EBS TF dvakrát ročně.

Pro řešení úlohy se předpokládá využití softwaru PhreeqC, případně GWB na běžných osobních počítačích. Řešení 3D testovací úlohy plánujeme s využitím softwaru FEFLOW s připojením komponenty piChem odvozené od PhreeqC na počítačovém klastru. V případě vzniku potřeby využití dalších softwarových nástrojů (např. GoldSim) a hardwaru budou do řešení zahrnuty i jiné prostředky.

Benchmark bude řešen ve spolupráci 4 institucí:

- TUL (zodpovědná za organizaci řešení, komunikaci s EBS TF, vytvoření sdružených modelů a 3D modelu)

- FJFI (volba termodynamické databáze, návrh geochemických modelů pro řešení úloh Subtask A a Subtask B, provedení porovnávacích výpočtů testovacích úloh v 1D konfiguraci)
- ÚJV (konzultace v oblasti transportu a geochemických interakcí s ohledem na vodu v mezivrstvích)
- VŠB (spolupráce na formulaci 3D úlohy a provedení výpočtu 3D testovací úlohy)

Výstupem bude zpráva dle výše uvedené specifikace.

### **Etapa 3**

*Cíle etapy dle výzvy:* Na základě výsledků z dalších dílčích zakázek, které budou modelovat procesy popsané ve FEP analýze (část 1 zakázky Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení technického řešení hlubinného úložiště) a na základě znalostí získaných v jiných tuzemských a mezinárodních projektech (EURAD, DECOVALEX) a využitím výsledků modelování benchmarkových úloh bude vypracována aktualizovaná metodika (z první etapy) modelování THMC procesů. Aktualizovaná metodika bude sloužit k ověření funkčnosti a spolehlivosti inženýrských bariér českého konceptu v rámci finálního hodnocení konceptu. V rámci aktualizace metodiky (a při přípravě modelů v dalších dílčích zakázkách) se počítá se zapojením do hodnocení (případně doplnění) FEPů zpracovaných v části 1 tohoto projektu.

*Postup řešení dle Poskytovatele:*

Organizace řešení bude obdobou Etapy 1. Plánovaný časový úsek je vázán na termín ukončení – zpracování metodiky v období 2Q a 3Q/2025, přičemž poslední kvartál je určen k oponentuře a překladu zprávy.

Zadání nelze chápat tak, že Poskytovatel předloží metodiku (zprávu) jako praktický návod pro modelování vycházející z vlastní zkušenosti a účasti na ověření modelů ve všech teoreticky uvažovaných jevech a vlivech v rámci široké oblasti THMC jevů v bariérách HÚ. Šíře jevů nebo situací, kde lze k takovému výstupu směřovat, bude silně podmíněná jednak volbou dalších benchmarků BM3-BM5, zejména však realizací dalších dílčích zakázek v návaznosti na rámcovou smlouvu. Metodika tedy bude mít, stejně jako v Etapě 1, charakter obecných hodnocení, závěrů a doporučení vycházejících v plné šíři THMC procesů z aktualizované rešerše, se zvláštním důrazem pak na ty případy, kde vzniknou během období řešení projektu specifitější výsledky (typicky formou shrnutí a odkazu).

### **Reference**

Campos G., Gutiérrez-Álvarez C., Villar M.V. (2019) Laboratory Tests on Bentonite Homogenisation Performed by CIEMAT: Gap Filling, Project BEACON, Technical Report CIEMAT/DMA/2G220/1/19

Mäder U., Jenni A., (2019) EBS TF C Task 12: Concrete Clay Modelling Task Proposed task description to be discussed, prezentace TF EBS, Univ. Bern, SKB.