

# Kompletterande beräkningar för gasavgång

## 1 Inledning

I den biosfärsmodell som använts i SR-PSU (Saetre et al. 2013) beskriver SKB flöden av radionuklider med utgångspunkt från fysikaliska och biologiska processer. Molekylär gasdiffusion anses vara en mycket viktig mekanism för gastransport i omättade marklager (De Jong and Schappert 1972, Simunek and Suarez 1993, Smith et al. 2003), och följaktligen har SKB valt att beskriva transport av C-14 från jordbruksmark med utgångspunkt från denna process.

I SKB:s beräkningar är gasflödet proportionellt mot koncentrationsgradienten i marken och den effektiva diffusionskoefficienten (appendix D i Saetre et al. 2013). Beskrivningen är en generalisering av Ficks lag, och SKB har använt Millington-Quirk (MQ) modellen (Millington and Quirk 1961) för att ta hänsyn till markens porositet och vattenmättnadsgrad (Grolander 2013). SSMs externa experter har påpekat att omsättningshastigheten av C-14 i jordbruksmark, till följd av gasutbytet, är högre i SKB:s beräkningar än vad som har rekommenderats för denna typ av modeller (Sheppard et al. 1994)<sup>1</sup>.

För att undersöka i vilken utsträckning hastigheten på gastransport påverkar SKB:s konsekvensberäkningar, har SKB utfört en kompletterande (och begränsad) känslighetsanalys för den dikade jordbruksmarken. Då vissa markvariabler (dvs porositet och vattenmättnadsgrad) har en direkt koppling till den effektiva diffusiviteten, och då beskrivningen av DIC-koncentrationer i marken av C-12 och C-14 inte var helt kopplade i den ursprungliga biosfärsmodellen, har några av de tidigare variablerna (d v s diffusiviteten och markens DIC-koncentration) nu uttryckts som funktioner i beräkningarna. Detta innebär också att en ny variabel för markrespiration (*SoilResp*) har införts i modellen.

---

<sup>1</sup> Sid 41 i Walke et al. 2017

## 2 Beräkningsmetodik

För simuleringen av jordbruksmark hämtades initialvärden för aktivitetskoncentration i mark ( $AC_{RegoUp}$ ,  $AC_{RegoUp,org}$ ), och i grundvatten ( $AC_{D,SoilSat}$ ), från den deterministiska beräkningen med enhetsutsläpp av C-14 till objekt 157\_2 (Kapitel 10 i SKB 2014a). Tidpunkten 5000 AD valdes för känslighetsanalysen, eftersom tillväxten (i höjddled) av myren då nått jämvikt. Simuleringen av den dränerade jordbruksmarken representerar (som i Saetre et al. 2013) de första 50-åren efter dikning, och responsvariablerna (dvs växtkoncentration, och dess bidrag från rot- respektive atmosfärsupptag) motsvarar medelvärdet över denna period.

För att uttryckligen fånga hur markegenskaper påverkar gasutflödet, beräknades diffusiviteten ( $D_{CO2,regoUp}$ ) från porositet och vattenmättnadsgrad (som en del av Ecolego modellen) med Millington och Quirk's uttryck (1961):

$$D_{CO2,regoUp} = D_{CO2,air} \frac{\theta_{air}^{10/3}}{\theta_{regoUp}^2}$$

Där:

$$\theta_{air} = \theta_{regoUp}(1 - Sw_{regoUp})$$

I beräkningarna utgör torven mindre än 15% av ursprungsmaterialet i den odlade jorden ( $w_4$  i ekvation 7-35 i Saetre et al. 2013), och därför användes egenskaper på densitet ( $\rho$ ), porositet ( $\theta$ ) och grad av vattenmättnad ( $Sw_{regoUp}$ ) från en odlad lergyttja (Tabell 2-1). Porositet, grad av vattenmättnad och markrespiration representerades med fördelningsfunktioner (s.k. PDFer), medan centralvärden användes för övriga parametrar.

Hastigheten på gasavgången bör påverka koncentrationen av C-12 och C-14 på ett likartat sätt (Appendix A), och vid jämvikt kan koncentrationen av stabilt kol i markvattnet uttryckas som:

$$Conc_{DIC,RegoUp} = \frac{SoilResp + DGW_{dis}}{3 f_{gas} Sw_{regoUp} D_{CO2,regoUp} + percolation} \frac{1}{z(1 - Sw_{regoUp})}$$

Då det förväntade tillskottet av DIC-12 från underliggande marklager ( $DGW_{dis}$ ,  $kgC m^{-2} \text{år}^{-1}$ ) är mer än två storleksordning mindre än markrespirationen<sup>2</sup>, kan koncentrationen av C-12 approximeras med ett förenklat uttryck:

$$Conc_{DIC,RegoUp} \approx \frac{SoilResp}{3 f_{gas} Sw_{regoUp} D_{CO2,regoUp} + percolation} \frac{1}{z(1 - Sw_{regoUp})}$$

Där  $SoilResp$  är markrespirationen ( $kgC m^{-2} \text{år}^{-1}$ ),  $z$  är tjockleken på den dikade jordbruksmarken (0.5 m), och  $f_{gas}$  är fraktionen av DIC förrådet i mark som är i gasfas (enl. Henrys lag).

I känslighetsanalysen ersatte detta förenklade uttryck den tidigare parametern  $conc_{DIC,regoUp}$ . Den nya parametern  $SoilResp$  representerades av en likformig fördelning mellan 0.68 och 2.2  $kgC m^{-2} \text{år}^{-1}$ , vilket representerar det uppmätta spannet för markrespiration på organisk jordbruksmark i Finland (Tabell 2-1). I denna känslighetsanalys anses detta spann representera en slumpmässig variation som är oberoende av vattenmättnaden mellan fältkapacitet och vissningsgränsen.

<sup>2</sup> Med en DIC koncentrationen i djupt grundvatten på 0.06  $kgC m^{-3}$  (SKB 2014b) och ett vattenflöde under vegetationsperioden på 0.04  $m \text{år}^{-1}$  (Grolander 2013) blir tillskottet av löst oorganiskt kol från markvattnet två storleksordningar mindre än den undre gränsen för markrespirationen (0.0024 vs. 0.68  $kgC m^{-2} \text{år}^{-1}$ ).

Kompletterande beräkningar för gasavgång

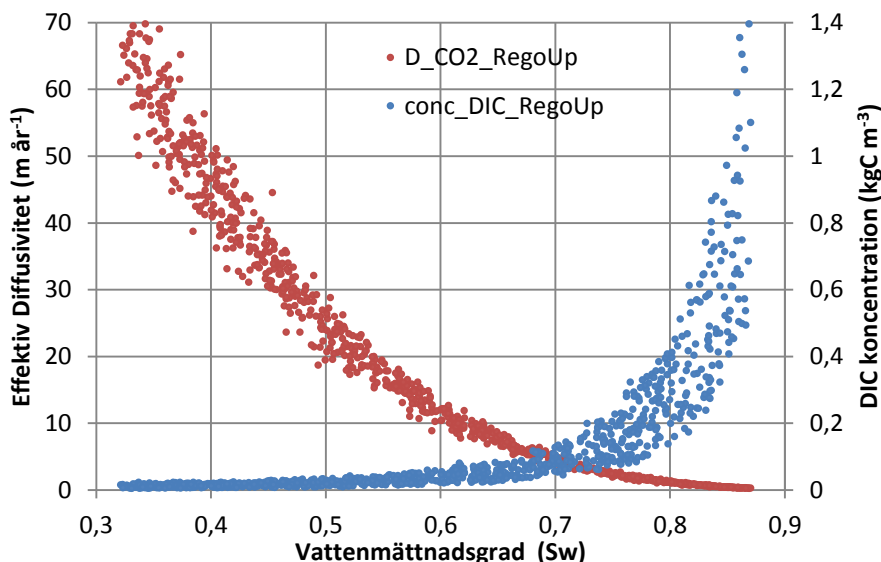
**Tabell 2-1. Indata till känslighetsanalysen. Randvillkor och initialkoncentrationer är hämtade från myr-sjö modellen för objekt 157\_2 vid år 5000 AD. Jordegenskaperna ( $\rho$ ,  $\theta$  och  $S_w$ ) är hämtade från en organisk jord som domineras av leryttja. Markrespirationen är hämtad från organisk åkermark i Finland med råg eller potatis. N = normalfördelning (medelvärde, standardavvikelse). U = likformig fördelning (min, max). Original referenser: 1 = Lerman (1979), 2 = Sheppard et al. 2013, 3 = Berglund 1996, 4 = Lohila et al. 2003.**

Indata	Symbol	Värde	Enhet	Referens
Randvillkor C-14				
Grundvatten konc.	$AC_{D,SoilSat}$	$3.61 \cdot 10^{-5}$	Bq m <sup>-3</sup>	
Initial konc. C-14				
Organiskt	$AC_{RegoUp}$	$3.15 \cdot 10^{-8}$	Bq kg <sub>DW</sub> <sup>-1</sup>	
Organiskt	$AC_{RegoUp,org}$	$2.65 \cdot 10^{-8}$	Bq kg <sub>DW</sub> <sup>-1</sup>	
Parametrar				
Diffusivitet i luft	$D_{CO_2,air}$	460	m <sup>2</sup> år <sup>-1</sup>	Grolander 2013 <sup>1</sup>
Densitet	$\rho$	771	kg <sub>DW</sub> m <sup>-3</sup>	Grolander 2013 <sup>2</sup>
Porositet	$\theta$	N[0.63,0.04]	m <sup>3</sup> m <sup>-3</sup>	Grolander 2013 <sup>2</sup>
Vattenmättnadsgrad	$S_w$	U[0.32,0.87]	m <sup>3</sup> m <sup>-3</sup>	Grolander 2013 <sup>3</sup>
Markrespiration	$SoilResp$	U[0.68, 2.2]	KgC m <sup>-2</sup> y <sup>-1</sup>	Oertel et al. 2016 <sup>4</sup>

Totalt utfördes 1000 simuleringar i Ecolego där porositet, vattenmättnadsgrad och markrespiration varierades slumpmässigt och övriga parameter hade samma värden som i tidigare utförda deterministiska simuleringarna (SKB 2014a).

### 3 Resultat

Känslighetsanalysen illustrerar att det framförallt är vattenmättnadsgraden som styr den effektiva diffusiviteten i den dikade jordbruksmarken. Av MQ-modellen följer det att diffusiviteten, och därmed hastigheten för gasavgång, minskar med en ökad grad av vattenmättnad. Då källan av stabilt CO<sub>2</sub>/DIC från markrespirationen antas vara oberoende av graden av vattenmättnad (mellan vissningspunkten och fältkapacitet) betyder detta även att DIC-koncentrationen är omvänt proportionell mot den effektiva diffusiviteten (Figur 3-1). Trots att den beräknade DIC-koncentration uppvisar en hög grad av både systematisk (p.g.a. vattenmättnadsgrad) och slumpmässig (p.g.a. markrespiration) variation noterar SKB att medianvärdet från känslighetsanalysen är jämförbart med centralvärdet för motsvarande SR-PSU parameter (Tabell 9.4 i Grolander 2013), det vill säga 0.035 jämfört med 0.032 kgC m<sup>-3</sup>.

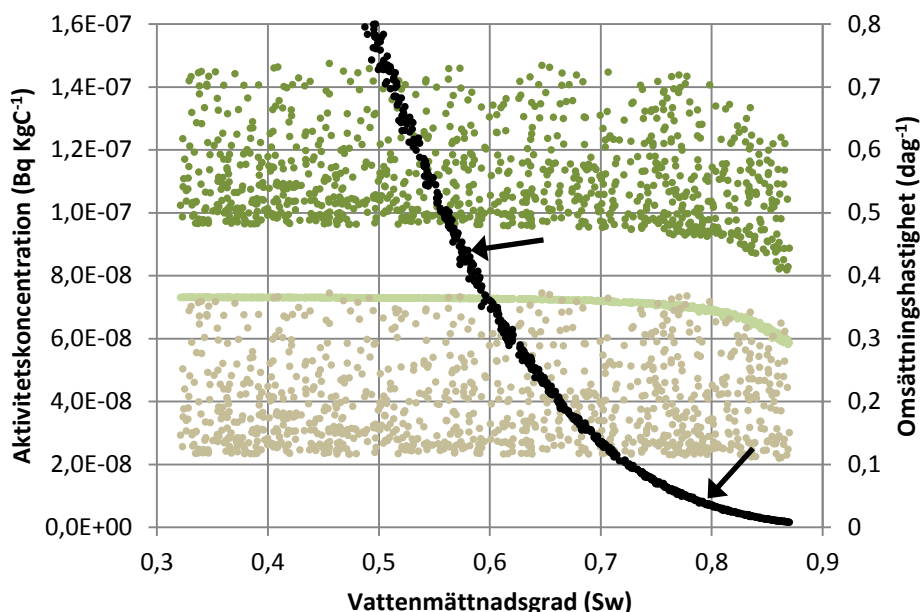


**Figur 3-1.** Effektiv diffusivitet och DIC-koncentration som funktion av vattenmättnadsgrad i organisk jordbruksmark. Resultaten bygger på 1000 simuleringar där porositet, vattenmättnad och markrespiration varierats enligt fördelningsfunktionerna i tabell 2-1. Röda punkter representerar den effektiva diffusiviteten, medan blå punkter representerar koncentrationen av oorganiskt stabilt kol i porvattnet (DIC-12).

## Kompletterande beräkningar för gasavgång

Diffusiviteten påverkar naturligtvis också koncentrationen av C-14 i porvattnet på samma sätt som koncentrationen av stabilt kol. Detta betyder att den specifika aktiviteten i porvattnet, och aktivitetskoncentrationen i grödan som beror på rotupptag, i praktiken inte kommer att påverkas av gasutbyteshastigheten (Figur 3-2). Variationen i den specifika aktiviteten av det kol som växten tar upp via rötterna avspeglar istället variationen i markrespirationen. I simuleringen har atmosfärsknutna parametrar hållits konstanta, och variationen i aktivitetskoncentrationen från bladupptag speglar därför enbart andel av utsläppet som hamnar i atmosfären. Eftersom hastigheten för avgasning är mycket högre än hastigheten för urlakning, hamnar i stort sett all C-14 i atmosfären. Det är enbart när vattenmättnadsgraden närmar sig fältkapacitet ( $Sw_{RegoUp} > 0.8$ ) som avgasningen blir så ineffektiv att koncentrationen av C-14 i atmosfären sjunker märkbart, vilket i sin tur leder till en något lägre total aktivitetskoncentration i växten.

Omsättningshastigheten av oorganiskt C-14 i marken (per dag) styrs helt av markens vattenmättnadsgrad, och varierar med två storleksordningar inom 95 procent av de 1000 utförda simuleringarna (dvs mellan 2.5:e och 97.5:e percentilen). Omsättningshastigheten vid 57% vattenmättnadsgrad (median) är ungefär en storleksordning större än den som uppmätts i en studie av Sheppard et al. 1991, men koncentrationen i växten är inte kopplad till omsättningshastigheten för större delen (~80%) av intervallet för vattenmättnadsgraden. Vid fältkapacitet ( $Sw_{RegoUp} = 0.87$ ) är omsättningshastigheten mycket låg (<0.01 per dag). Trots detta påverkas inte växtens totala koncentration med mer än 14%, och koncentrationen minskar med en långsam omsättningshastighet.



**Figur 3-2.** Aktivitetskoncentration i spannmål och omsättningshastighet av C-14 i markvatten (med avseende på gasavgång) som funktion av vattenmättnadsgrad i organisk jordbruksmark. Resultaten bygger på 1000 simuleringar där porositet, vattenmättad och markrespiration varierats. Ljusa punkter representerar C-14 koncentrationen i ny syntetiserad biomassa från rotupptag (ljusbrun) respektive bladupptag (ljusgrön). Mörkgröna prickar anger totalkoncentrationen av C-14 i växten. Svarta prickar representerar omsättningshastigheten av DIC-14 förrådet i porvattnet med avseende på gasavgång. Den övre pilen anger omsättningshastigheten för typiska markförhållanden ( $Sw_{RegoUp} = 0.57$ ), medan den nedre pilen indikerar en omsättningshastighet på 0.04 per dag.

## 4 Diskussion och slutsats

I SR-PSU baseras SKB:s beräkningar av gasavgång från omättade marklager på gasdiffusion. Den utförda känslighetsanalysen visar att graden av vattenmättnad är den jordegenskap som har störst betydelse för hastigheten på gasavgången från mark, men att denna hastighet inte har någon väsentlig påverkan på konsekvensberäkningarna när omsättningshastigheten är högre än 0.04 per dag. Detta beror främst på att C-12 och C-14 molekyler påverkas av samma transportprocesser, och till viss del på att både upptaget från rotzonen och atmosfären bidrar till växtens aktivitetsskoncentration.

Simuleringarna har gjorts över ett brett intervall av markfuktighet och markrespiration, och det är enbart för en vattenmättnadsgrad nära fältkapacitet som effekterna av gasavgångshastigheten blir märkbara. Effekten på växtkoncentration är emellertid begränsad (till en 14 % nedgång) och överskuggas i analysen helt av den naturliga variation som orsakas av markrespirationen.

I denna analys har SKB modifierat beräkningsmetodiken från SR-PSU genom att ersätta parametrarna för diffusivitet och DIC koncentration med funktioner som drivs av underliggande parametrar eller processer. För probabilistisk beräkning innebär detta en klar förbättring eftersom samvariationen av kopplade egenskaper bibehålls över alla simuleringar (t.ex. mellan vattenmättnadsgrad, diffusivitet och DIC-koncentration, Figur 3-1). I känslighetsanalysen varierar den beräknade omsättningshastigheten med två storleksordningar, detta motsvarar det förväntade spannet på den 95 procentiga utfallsrymden för den parameterrekommendation som SSM's externa experter citerar (dvs ett GSD på 3.2). Skillnaden är emellertid att i SKB:s beräkningar är denna variation inte slumpmässig utan i stort sett helt systematisk, och om realistiska parametervärden för medelvärdet av vattenmättnaden över en tillväxtsång ansätts, så kan denna variation (eller osäkerhet) reduceras väsentligt.

Att beräkna DIC-12 koncentrationen enligt samma principer som används för C-12 är i linje med granskningskommentarer från SSMs externa experter, som efterfrågat en ökad grad av konsekvens mellan beräkningar för stabilt kol och C-14<sup>3</sup>. Denna förbättring kan också förväntas ge en väsentlig reduktion av osäkerheten i den beräknade dosen för C-14, då växtkoncentrationen i de uppdaterade beräkningarna i stort sett är oberoende av diffusiviteten (Figur 2-1 och 2-2), och variation i just diffusivitet var den största källan till osäkerhet i dosen från C-14 i SR-PSU beräkningarna (se t.ex. avsnitt 10.9.2 i SKB 2014a)<sup>4</sup>.

---

<sup>3</sup> Sid 23 i Walke et al. 2017

<sup>4</sup> Se även Figur 2 på s.7 av SKB:s "Svar till SSM på begäran om komplettering av ansökan om utökad verksamhet vid SFR – säkerhetsanalysmetodik SR-PSU" (SKBdoc 1564154).

## Referenser

**Berglund K, 1996.** Cultivated organic soils in Sweden: properties and amelioration. PhD thesis. Swedish University of Agricultural Sciences, Department of Soil Sciences.

**De Jong, E., and Schappert, H.J.V. 1972.** Calculation of soil respiration and activity from CO<sub>2</sub> profiles in soil. *Soil Sci.* 113, 328–333.

**Grolander S, 2013.** Biosphere parameters used in radionuclide transport modelling and dose calculations in SR-PSU. SKB R-13-18, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Lerman A, 1979.** Geochemical processes: Water and sediment environments. New York: Wiley.

**Lohila, A., Aurela, M., Regina, K., Laurila, T., 2003.** Soil and total ecosystem respiration in agricultural fields: effect of soil and crop type. *Plant Soil* 251,303–317.

**Millington R J, Quirk J P, 1961.** Permeability of porous solids. *Transactions of the Faraday Society* 57, 1200–1207.

**Oertel C., Matschullat J., Zurba K., Zimmermann F., Erasmi S., 2016.** Greenhouse gas emissions from soils – A review. *Chemie der Erde*, 76, 327-352.

**Oh, Neung-Hwan & Kim, Hyun-Seok & Richter, Daniel. 2005.** What Regulates Soil CO<sub>2</sub> Concentrations? A Modeling Approach to CO<sub>2</sub> Diffusion in Deep Soil Profiles. *Environmental Engineering Science - ENVIRON ENG SCI.* 22. 38-45. 10.1089/ees.2005.22.38.

**Saetre P, Nordén S, Keesmann S, Ekström P-A, 2013.** The biosphere model for radionuclide transport and dose assessment in SR-PSU. SKB R-13-46, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Sheppard S C, Sohlenius G, Omberg L-G, Borgiel M, Grolander S, Nordén S, 2011.** Solid/liquid partition coefficients (K<sub>d</sub>) and plant/soil concentration ratios (CR) for selected soils, tills and sediments at Forsmark. SKB R-11-24, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Smith K. A., Ball T. Conen F., Dobbie K. E., Massheder J., Rey, A. 2003.** Exchange of greenhouse gases between soil and atmosphere: interactions of soil physical factors and biological processes. *European Journal of Soil Science* 54 (4): 1365-2389.

**SKB, 2014a.** Biosphere synthesis report for the safety assessment SR-PSU. SKB TR-14-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**SKB, 2014b.** Handling of biosphere FEPs and recommendations for model development in SR-PSU. SKB R-14-02, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Walke, R., Limer, L., Shaw, G. 2017.** In-depth review of key issues for the main review phase regarding biosphere models for specific radionuclides in SR-PSU. SSM Dnr. SSM2016-3262-3.

## APPENDIX A. Molekylär diffusion av CO<sub>2</sub> i omättade jordlager.

Om vi använder Ficks andra lag för att beskriva koncentration av CO<sub>2</sub> i en markprofil, och antar att jämvikt har uppnåtts, gäller:

$$-\partial_z(D_{CO_2,soil}\partial_z c) = -D_{CO_2,soil}c''$$

Där:

$D_{CO_2,soil}$  är den effektiva diffusions coefficienten i omättad jord [ $m^2 \text{ år}^{-1}$ ],  
 $z$  är avståndet (uppåt) från den undre randen av det omättade jordlagret (m), och  
 $c$  är porkoncentrationen av CO<sub>2</sub> i gasfas [ $kgC \text{ m}^{-3}$ ].

Om markrespirationen,  $SoilResp$  [ $kgC \text{ m}^{-2} \text{ år}^{-1}$ ], sker i den undre randen av det omättade jordlagret, och vi bortser från förluster av CO<sub>2</sub> till det mättade jordlagret under randen (diffusiviteten i gas är fyra storleksordningar större än i vatten), ger massbalans ett konstant flöde av CO<sub>2</sub> genom marklagret:

$$SoilResp = -D_{CO_2,soil}c'$$

Med randvillkoret att koncentrationen i ytan ( $z=Z$ ) är den i atmosfären ( $C_{atm}$ ), kan vi lösa ekvationen och beskriva koncentrationen som (Figur A1):

$$c(z) = \frac{SoilResp}{D_{CO_2,soil}}(Z - z) + C_{atm}$$

Förrådet av CO<sub>2</sub> i gasform,  $RegoUp_{gas}$  [ $kgC$ ], i det omättade lagret kan därefter beräknas genom att multiplicera koncentrationen med den luftfyllda porvolymen, och integrera över markdjupet ( $z$ ), från 0 till  $Z$ . Detta ger:

$$RegoUp_{gas} = \theta(1 - S_w) \left( \frac{SoilResp Z^2}{2D_{CO_2,soil}} + C_{atm}Z \right)$$

Med en typisk markrespiration för organisk jordbruksmark ( $0.68\text{-}2.2 \text{ kg C m}^{-2} \text{ år}^{-1}$ ) ger den sista termen ( $C_{atm}Z$ ) ett försumbart bidrag till markförrådet, och uttrycket ovan blir i praktiken identiskt med det som använts för transport av C-14 i SR-PSU (Saetre et al. 2013).

Markrespirationen är kopplad till rotrespiration och nedbrytning av organiskt material (t.ex. rotexudat och växtdelar i olika nedbrytningsstadier), och den vertikala fördelningen styrs av faktorer som vegetationstyp, rotfördelning, vattenhalt och temperatur (Oh et al. 2015). Det är alltså inte troligt att all markrespiration skulle vara allokerad till den nedre randen av det omättade lagret. Ett rimligare antagande är att respirationen är utspridd i markprofilen.

Om markrespirationen t.ex. är jämnt fördelad över djupet, och att förluster av CO<sub>2</sub> till det mättade lagret är försumbara, kommer CO<sub>2</sub> flödet i marken att öka kontinuerligt när vi går från den undre randen av det omättade lagret till ytan. Koncentrationen av CO<sub>2</sub> i gasfas kan då beskrivas med differentialekvationen:

$$SoilResp \cdot z = -D_{CO_2,soil}c'$$

Med samma randvillkor som ovan blir lösningen på differentialekvationen:

Kompletterande beräkningar för gasavgång

$$c(z) = \frac{SoilResp}{2D_{CO_2,soil}} \left( \frac{Z^2 - z^2}{Z} \right) + C_{atm}$$

Förrådet i marken, beräknat som ovan, blir:

$$RegoUp_{gas} = \theta(1 - Sw) \left( \frac{SoilResp Z^2}{3D_{CO_2,soil}} + C_{atm}Z \right)$$

Då bidraget från den sista termen är försumbart (se ovan) blir förrådet av CO<sub>2</sub> alltså 2/3 av det som beräknats under antagandet att markrespiration sker i botten av den omättade zonen. Om vi vidare antar att CO<sub>2</sub> i gas- och vattenfas är i jämvikt kan vi beräkna omsättningshastigheten för hela markförrådet genom att dividera markrespirationen med det totala markförrådet:

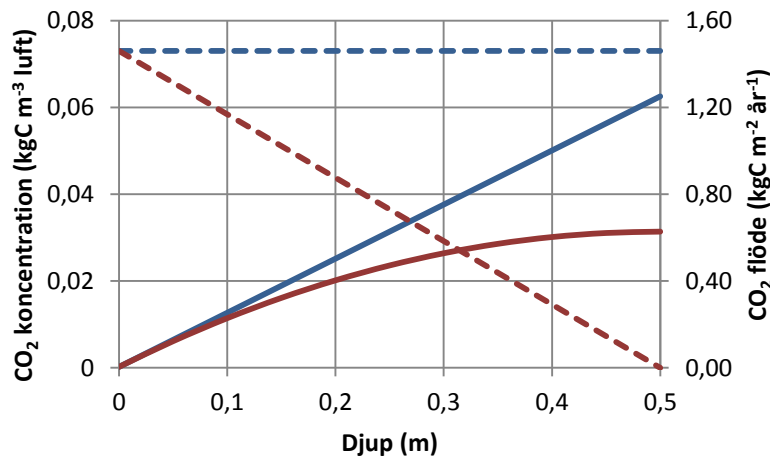
$$k_{degass}^{12C} \sim \left( \frac{f_{gas} 3D_{CO_2,soil}}{\theta(1 - Sw) Z^2} \right)$$

Där  $f_{gas}$  är andelen av markens totala DIC-12 förråd som är i gasfas (enligt Henrys lag) [kgC kgC<sup>-1</sup>].

Gasavgången (dvs Soilresp) kan även uttryckas som en funktion av medelkoncentrationen i det omättade lagret:

$$SoilResp = \frac{Degassing^{12C}}{Area} = Conc_{DIC}^{12C} 3 \frac{f_{gas} D_{CO_2,soil}}{(1 - Sw) Z}$$

Där  $Conc_{DIC}^{12C}$  är medelkoncentrationen av oorganiskt C-12 (dvs i både vatten- och gasfas) i det omättade lagret [kgC m<sup>-3</sup>].



**Figur A1.** Koncentration och flöde av CO<sub>2</sub> i det omättade marklagret som funktion av jorddjupet. De heldragna linjerna representerar gaskoncentrationen, medan de streckade linjerna representerar flöden av CO<sub>2</sub>. Blå linjer motsvarar en markrespiration i botten av det omättade lagret, medan röda linje motsvarar en homogen markrespiration. Parametrar som använts: SoilResp = 1.46 kgC m<sup>-2</sup> år<sup>-1</sup>, Z = 0.5 m, D<sub>CO<sub>2</sub>,air</sub> = 460 m<sup>2</sup> år<sup>-1</sup>, θ = 0.63 m<sup>3</sup> m<sup>-3</sup>, Sw = 0.6 m<sup>3</sup> m<sup>-3</sup>, D<sub>CO<sub>2</sub>,soil</sub> = 11.7 m<sup>2</sup> år<sup>-1</sup>, C<sub>atm</sub> = 2.2 · 10<sup>-4</sup> kgC m<sup>-3</sup>.